



**HAL**  
open science

# Numerical analysis of dislocations dynamics and applications to homogenization

Mohamed-Amin Ghorbel

► **To cite this version:**

Mohamed-Amin Ghorbel. Numerical analysis of dislocations dynamics and applications to homogenization. Mathematics [math]. Ecole des Ponts ParisTech, 2007. English. NNT: . pastel-00002190

**HAL Id: pastel-00002190**

**<https://pastel.hal.science/pastel-00002190>**

Submitted on 19 Feb 2007

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

# THÈSE

présentée pour l'obtention du titre de

## DOCTEUR DE L'ÉCOLE NATIONALE DES PONTS ET CHAUSSÉES

Spécialité : Mathématiques et Informatique

par

**Mohamed-Amin GHORBEL**

**Sujet :** *Analyse numérique de la dynamique des dislocations  
et applications à l'homogénéisation*

Soutenue le 12 janvier 2007 devant le jury composé de :

Président :	Alexandre ERN
Rapporteurs :	Maurizio FALCONE Elisabeth MIRONESCU
Examineurs :	Olivier ALVAREZ Cyril IMBERT
Directeur de thèse :	Régis MONNEAU



# Remerciements

Je remercie tout d'abord mon directeur, Régis Monneau, qui m'a encadré pendant cette thèse. Il m'a beaucoup apporté par son exigence de clarté et de rigueur ainsi que par son expérience et ses conseils très précieux.

Cette thèse n'aurait pu aboutir sans la présence de plusieurs personnes, que je tiens à remercier ici :

Maurizio Falcone et Elisabeth Mironescu, qui ont accepté de rapporter le présent mémoire et pour l'intérêt qu'ils lui ont porté.

Olivier Alvarez et Cyril Imbert, qui tout au long de ces années m'ont encouragé et conseillé. J'ai beaucoup appris de leurs ouvertures scientifiques et de leurs conseils judicieux.

Alexandre Ern, qui a accepté de participer à mon jury de thèse et pour tous ses conseils.

Ma collaboration avec Philippe Hoch a été à la fois agréable et enrichissante grâce à son enthousiasme et à son ouverture scientifique.

Je remercie aussi Alphonse Finel, Yann Le Bouar et tous les membres de l'ACI JC1025 "dynamique des dislocations" pour les discussions fructueuses et enrichissantes que nous avons eues.

Je remercie également Ahmad El Hajj et Nicolas Forcadel pour leur soutien, leurs commentaires et pour avoir toujours pris le temps de m'écouter.

J'adresse mes sincères remerciements aux directeurs du CERMICS, Bernard Lapeyre et Serge Piperno, pour leurs conseils durant cette période. Je tiens à remercier également tous les membres du laboratoire CERMICS que j'ai connus et côtoyés durant ces années de thèse.

---

Je remercie aussi infiniment Jean-Philippe Chancelier et le support Linux, Jacques Daniel, Roland Jarry, Ariel Vives, pour leur soutien informatique. Je ne manquerai pas de remercier Sylvie Berte, Khadija Elouali et Martine Ouahanna pour leur travail formidable au secrétariat et pour leur bonne humeur.

Un grand merci à mes collègues de bureau et mes voisins de bureau qui ont su créer une bonne ambiance. Merci à Mohammed El Rhabi, Hervé Galicher, Hassan Ibrahim, Sébastien Meunier, Annette Stephanson, Pierre Sochala et Pierre Tardif d'Hamonville.

Et bien sûr une mention particulière va à ma famille et en particulier à mes parents. Je veux leur témoigner toute ma gratitude et ma reconnaissance pour leur amour, leurs encouragements et leur soutien constant.

---

**Résumé :** Ce travail porte, pour l'essentiel, sur l'analyse numérique de la dynamique des dislocations. Les dislocations sont des défauts qui se déplacent dans les cristaux, lorsque ceux-ci sont soumis à des contraintes extérieures. Notre travail se focalise principalement sur deux études. La première concerne l'étude théorique et numérique d'une équation de transport non-locale; la seconde est une étude numérique proposant un calcul de l'hamiltonien effectif pour un problème d'homogénéisation de la dynamique des dislocations. D'une façon générale, la dynamique des dislocations est décrite par une équation eikonal dont la vitesse est non-locale. Ici, nous nous limitons à un modèle en dimension 1 d'espace. Dans une première partie nous démontrons des résultats d'existence et d'unicité de la solution en temps long ainsi qu'une estimation d'erreur théorique/numérique pour un schéma aux différences finies. Dans une deuxième partie un schéma monotone est utilisé pour calculer l'hamiltonien effectif qui décrit le comportement collectif de densités de dislocations comme limite d'un modèle où les dislocations sont décrites individuellement. Les résultats numériques présentés ici viennent en soutien à une étude théorique d'homogénéisation.

**Abstract :** The most important part of this work concerns the numerical analysis of the dislocations dynamics. Dislocations are some defects moving in a crystal when exterior stress are applied. Our work focussed essentially on two studies. The first one concerns the numerical and theoretical study of a non-local transport equation; the second one is a numerical study which proposes a computation of the effective hamiltonian for a homogenization problem of the dislocations dynamics. In general, the dynamics of dislocations is described by an eikonal equation with a non-local velocity. Here, we limit our work to a model in one-dimensional space. In the first study we proved some results of existence and uniqueness of solution for long time and an error estimate between the theoretical solution and the discrete solution of a finite difference scheme. In the second study, a monotone scheme is used to compute the homogenized hamiltonian which describe the effective behaviour of densities of dislocations as a limit of model where dislocations are described individually. Numerical results provided here support the theoretical study of the homogenization.

---

# Sommaire

<b>Introduction générale</b>	<b>1</b>
<b>1 Introduction à la dynamique des dislocations</b>	<b>15</b>
1 Élasticité linéaire . . . . .	15
1.1 Tenseurs des déformations . . . . .	15
1.2 Tenseurs des contraintes . . . . .	16
1.3 Loi de Hooke . . . . .	17
1.4 Équilibre élastique . . . . .	18
2 Origine des déformations plastiques . . . . .	19
2.1 Vecteur de Burgers . . . . .	20
2.2 Déplacement des dislocations . . . . .	21
3 Propriétés des dislocations . . . . .	22
3.1 Dislocation coin . . . . .	23
3.2 Dislocation vis . . . . .	23
3.3 Tenseur d'incompatibilité . . . . .	25
3.4 Énergie élastique et sa variation . . . . .	26
3.5 Calcul des forces exercées par une famille de dislocations sur une dislocation . . . . .	26
<b>I Analyse numérique</b>	<b>31</b>
<b>2 Annonce d'un résultat en temps court</b>	<b>33</b>
1 Modélisation . . . . .	34
2 Existence et unicité de la solution . . . . .	36
3 Simulations numériques . . . . .	37
4 Perspectives . . . . .	39
5 Remerciements . . . . .	39
<b>3 Problème de transport non-local</b>	<b>43</b>
1 Introduction . . . . .	44
1.1 Physical motivation . . . . .	44



## SOMMAIRE

---

1.2	Main results . . . . .	47
1.2.1	Existence and uniqueness of a continuous solution . .	47
1.2.2	Convergence of a numerical scheme . . . . .	48
1.3	Brief review of the literature . . . . .	50
1.3.1	Organization of the paper . . . . .	50
2	Preliminary results for the eikonal equation with prescribed velocity .	51
3	Properties of the non-local velocity . . . . .	55
4	Proof of Theorem 1.3 . . . . .	60
4.1	Short time existence and uniqueness of the solution . . . . .	61
4.2	Long time existence of the viscosity solution : proof of Theorem 1.3 . . . . .	65
5	Preliminary results for the discrete local problem . . . . .	68
6	Preliminary result for the discrete non-local problem . . . . .	71
7	Proof of Theorem 1.5 . . . . .	74
7.1	An abstract error estimate . . . . .	74
7.2	Application of the abstract error estimate : proof of Theorem 1.5 . . . . .	76
8	Example of a simulation . . . . .	79
<b>4</b>	<b>Construction d'une solution de viscosité discontinue - Annihilation des dislocations</b>	<b>83</b>
1	Introduction . . . . .	83
2	Construction d'une solution de viscosité discontinue . . . . .	83
3	Simuler l'annihilation des dislocations . . . . .	84
3.1	Schéma numérique . . . . .	84
3.2	Simulations . . . . .	85
<b>II</b>	<b>Homogénéisation</b>	<b>91</b>
<b>5</b>	<b>Annonce d'un résultat d'homogénéisation</b>	<b>93</b>
1	Introduction . . . . .	94
2	Description du modèle . . . . .	95
2.1	Le modèle . . . . .	96
2.2	Les conditions initiales et les hypothèses du modèle . . . . .	96
2.3	L'homogénéisation . . . . .	97
2.4	Calcul de la fonction $c_0$ . . . . .	97
3	Simulations Numériques . . . . .	98
4	Perspectives . . . . .	98
5	Remerciements . . . . .	99

---

<b>6</b>	<b>Homogénéisation numérique</b>	<b>103</b>
1	Introduction . . . . .	104
1.1	Physical modelling of dislocations dynamics . . . . .	105
1.2	Goal of the paper . . . . .	106
1.3	Brief presentation of our results . . . . .	106
1.4	Organization of the paper . . . . .	109
2	Qualitative properties of the effective hamiltonian . . . . .	109
3	Monotonicity of the scheme . . . . .	112
4	Computation of the effective hamiltonian for equation (6.1) . . . . .	116
4.1	The method to compute the effective hamiltonian . . . . .	116
4.2	Results of the numerical simulations . . . . .	117
5	Computation of the effective hamiltonian for other equations . . . . .	122
5.1	The monotone kernel with one type of dislocations . . . . .	123
5.2	The Peierls-Nabarro kernel with one type of edge dislocations . . . . .	124
6	Computation of the effective hamiltonian for systems of equations . . . . .	125
6.1	Monotone kernel . . . . .	126
6.2	Peierls-Nabarro kernel for edge dislocations . . . . .	127
6.3	Kernel for walls of dislocations . . . . .	127
7	Appendix . . . . .	129
7.1	Proof of Lemma 2.1 . . . . .	129
7.2	Computation of the kernel for walls of dislocations . . . . .	129
<b>7</b>	<b>Simulations complémentaires</b>	<b>133</b>
<b>III</b>	<b>Code DISLO++</b>	<b>137</b>
	<b>Appendice 1 : Preuve du Lemme 3.1 du Chapitre 1</b>	<b>143</b>
	<b>Appendice 2 : Calcul du noyau <math>c^0</math></b>	<b>149</b>
	<b>Conclusion et Perspectives</b>	<b>151</b>
	<b>Bibliographie générale</b>	<b>153</b>

---

## SOMMAIRE

---

# Introduction générale

Cette thèse de mathématiques appliquées porte sur la modélisation, l'analyse théorique et numérique ainsi que la simulation de la dynamique des dislocations. Les dislocations constituent l'une des classes d'imperfections ou de défauts cristallins. Elles sont présentes dans les matériaux industriels en quantité importante et elles influencent de manière décisive plusieurs propriétés macroscopiques, dont, au premier rang, les propriétés mécaniques. La déformation plastique des métaux et alliages à la température ambiante s'effectue le plus souvent par le glissement des dislocations.

Les autres mécanismes communs de la déformation plastique, comme les transformations de phases (cf. [8, 10, 11, 23]), sont aussi liés au mouvement de dislocations. Volterra, en 1907, a été le premier à étudier théoriquement des défauts linéaires qu'il a appelés "distorsions". Un grand progrès dans la compréhension du rôle des dislocations en physique du solide a été apporté dans les années 1930, entre autres par Orowan [21], Polanyi [22] et Taylor [24], toujours sans aucune preuve directe de l'existence de tels défauts. Le développement de la microscopie électronique par transmission dans les années 1950 a finalement permis l'observation de dislocations, par Bollman [6], Hirsch, Horne et Whelan [16]. Ces observations ont permis de tester un certain nombre de prédictions théoriques. La taille de ces défauts microscopiques n'exède pas la plupart du temps le micromètre. Les dislocations sont naturellement présentes dans les matériaux cristallins du fait même de leur condition de croissance qui laisse une structure imparfaite quelque soit les moyens d'élaborations. On peut les faire disparaître par des traitements thermiques appropriés (recuits) mais on estime que la longueur cumulée des dislocations est de l'ordre de 10km par centimètre cube dans les meilleures conditions ! Le rôle joué par les dislocations est fondamental dans les propriétés mécaniques des matériaux cristallisés. On trouve une description de la statique des dislocations dans les traités classiques, achevés dès la fin des années 1960 (cf. Hirth et Lothe [17], Nabarro [20]).

Grâce aux progrès prodigieux pendant ces dernières décennies, la mécanique des matériaux a connu un développement spectaculaire des méthodes de simulations (Bulatov *et al.* [7]), en particulier grâce à l'augmentation de la puissance de calcul des ordinateurs. La théorie des dislocations [17] a permis aux mécaniciens de mieux comprendre le comportement mécanique issu de la déformation plastique des

matériaux cristallins.

Le premier chapitre porte sur une introduction physique à la dynamique des dislocations. Nous commençons ce chapitre par un rappel sur la théorie de l'élasticité linéaire, puis nous présentons les dislocations et le mécanisme de la déformation plastique.

L'architecture du présent document qui fait la synthèse de mes travaux de recherche durant la période de thèse, s'articule sur trois parties.

**La première partie** (chapitres 2,3 et 4) est dédiée à la modélisation, l'analyse mathématique et l'analyse numérique de la dynamique de dislocations. Cette partie contient trois chapitres. Le chapitre 2 est une annonce de résultat, un proceedings [14] au 2ème Colloque sur les Tendances dans les Applications Mathématiques en Tunisie, Algérie, Maroc (TAM-TAM'05). Le chapitre 3 est un papier soumis à la revue *Journal of Scientific Computing*. Le chapitre 4 porte sur une construction de solution de viscosité discontinue d'un problème de Hamilton-Jacobi non-local qui modélise l'annihilation des dislocations. Le chapitre 3 de cette partie est une partie essentielle de ce mémoire. Dans ce chapitre, nous présentons un modèle simple où les dislocations sont des lignes droites se déplaçant dans un même plan  $(xy)$  et parallèles à l'axe des  $y$ . Ce plan est contenu dans un cristal élastique tridimensionnel. La géométrie particulière de ce modèle permet de se ramener à l'étude d'un problème unidimensionnel donné par l'équation de transport non-locale suivante qui modélise la plasticité à l'échelle des dislocations

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = c[u](x, t) \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) \quad \text{dans } \mathbb{R} \times (0, +\infty) \\ c[u](x, t) = c^{\text{ext}}(x) + \int_{\mathbb{R}} c^0(x') E((u(x - x', t))) dx' \\ u(x, 0) = u^0(x) \quad \text{dans } \mathbb{R} \end{array} \right. \quad (1)$$

où  $E$  est la fonction partie entière. Les dislocations se déplacent avec une vitesse non-locale  $c[u]$ . Elle est la somme de deux termes. Le premier terme  $c^{\text{ext}}$  représente les contraintes externes créées par les obstacles à l'avancée des dislocations (tels que les précipités dans le matériau, d'autres dislocations fixes ou bien encore d'autres défauts, ...). Le second terme  $c^{\text{int}}$  est non-local, donné par une convolution, et représente les contraintes internes élastiques créées par toutes les dislocations en mouvement. Ce dernier terme est obtenu par résolution des équations de l'élasticité linéaire et fait apparaître un noyau  $c^0$  qui tient compte des effets élastiques (longue distance) des dislocations. Nous considérons une situation physique où les obstacles à l'avancée des dislocations, modélisés par la vitesse  $c^{\text{ext}}$ , sont répartis de façon périodique dans l'espace, avec une période 1.

Pour simplifier la présentation ici de cette introduction nous supposons que les contraintes extérieures  $c^{\text{ext}}$  et le noyau  $c^0$  vérifient les propriétés suivantes

$$\begin{cases} c^{\text{ext}} \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}) & \text{tel que } c^{\text{ext}}(x+1) = c^{\text{ext}}(x) \text{ dans } \mathbb{R}, \\ c^0 \in C_0^\infty(\mathbb{R}) & \text{tel que } c^0(x) = c^0(-x) \text{ et } \int_{\mathbb{R}} c^0(x) dx = 0. \end{cases} \quad (2)$$

Nous considérons une condition initiale  $u^0 \in \text{Lip}(\mathbb{R})$  telle que pour  $x \in \mathbb{R}$

$$u^0(x+1) = u^0(x) + P \quad \text{et} \quad 0 < b_0 \leq \frac{\partial u^0}{\partial x} \leq B_0 < +\infty \quad \text{p.p.} \quad (3)$$

avec  $b_0$  et  $B_0$  deux constantes et  $P \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$ . C'est-à-dire qu'initialement la distribution des dislocations (c'est-à-dire les sauts de  $E(u)$ ) est elle aussi spatialement périodique de période 1, chaque période contenant  $P \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$  dislocations. Un cadre naturel pour étudier les solutions de (1) est celui des solutions de viscosité continues (cf. Barles [4]). Nous avons le résultat suivant

**Théorème 1 (Existence et unicité de solution pour tout temps)**

*Sous les hypothèses (2) et (3), il existe une unique solution de viscosité continue  $u \in W_{\text{loc}}^{1,\infty}(\mathbb{R} \times (0, +\infty))$  de (1) telle que*

$$u(x+1, t) = u(x, t) + P \quad \forall (x, t) \in \mathbb{R} \times (0, +\infty). \quad (4)$$

Nous prouvons ce théorème en deux étapes. Tout d'abord, nous montrons le résultat en temps court en utilisant un argument de type point fixe inspiré de (Alvarez *et al.* [2, 3]), pour des solutions de viscosité continues de (1). De façon précise, étant donné  $T > 0$  et une fonction  $v$  vérifiant (3) et (4), on considère la fonction  $w = S(v)$  vérifiant (3) et (4), solution de

$$\frac{\partial w}{\partial t} = (c^{\text{ext}} + c^0 \star E(v)) \left| \frac{\partial w}{\partial x} \right| \quad \text{dans } \mathbb{R} \times (0, T)$$

Pour  $T$  choisi suffisamment petit, on montre que l'application  $S$  est une contraction dans un espace bien choisi, ce qui prouve l'existence d'un unique point fixe  $u = S(u)$  qui est donc solution de (1) sur  $\mathbb{R} \times (0, T)$ .

Ensuite, nous répétons le résultat en temps court sur une suite d'intervalles de temps de longueurs  $T_n$  qui décroît vers zéro, mais telle que  $\sum_{n \in \mathbb{N}} T_n = +\infty$ .

Le deuxième résultat dans ce chapitre porte sur une estimation d'erreur entre la solution continue et la solution discrète. Étant donné  $\Delta x$  le pas d'espace et  $\Delta t$  le pas de temps, on considère un maillage cartésien  $I_d = \{(i\Delta x, n\Delta t); i \in \mathbb{Z}, n \in \mathbb{N}\}$ . On note  $(x_i, t^n)$  le noeud du maillage  $(i\Delta x, n\Delta t)$  et  $v^n = (v_i^n)_{i \in \mathbb{Z}}$  les valeurs de

l'approximation numérique de  $u(x_i, t^n)$  où  $u$  est la solution continue du problème (1). Le schéma numérique s'écrit :

$$v_i^0 = u^0(x_i), \quad v_i^{n+1} = v_i^n + \Delta t c_i(v^n) \times \begin{cases} \frac{v_{i+1}^n - v_i^n}{\Delta x} & \text{si } c_i(v^n) \geq 0 \\ \frac{v_i^n - v_{i-1}^n}{\Delta x} & \text{si } c_i(v^n) < 0 \end{cases} \quad (5)$$

avec

$$c_i(v^n) = c^{\text{ext}}(x_i) + c_i^{\text{int}}(v^n); \quad c_i^{\text{int}}(v^n) = \sum_{l \in \mathbb{Z}} c_l^0 E(v_{i-l}^n) \Delta x \quad (6)$$

et

$$c_i^0 = \frac{1}{\Delta x} \int_{I_i} c^0(x) dx \quad \text{and} \quad I_i = \left[ x_i - \frac{\Delta x}{2}, x_i + \frac{\Delta x}{2} \right]. \quad (7)$$

On suppose la condition CFL (Courant, Friedrichs, Levy)

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x}{\sup_{i \in \mathbb{Z}, n \in \mathbb{N}} |c_i(v^n)|}.$$

Alors

**Théorème 2 (estimation d'erreur)**

*Il existe deux constantes  $T, C > 0$  telles que*

$$\sup_{i \in \mathbb{Z}} |u(i\Delta x, n\Delta t) - v_i^n| \leq C\sqrt{\Delta x} \quad \text{pour tout } n \leq \frac{T}{\Delta t}.$$

On utilise les idées de Crandall, Lions [9] qui ont été utilisées aussi dans Alvarez *et al.* [1].

**La deuxième partie** (chapitre 5, 6 et 7) est une contribution pour la description de la loi de comportement mécanique de plusieurs dislocations qui se déplacent dans un cristal. Autrement dit, nous nous intéressons au mouvement collectif des dislocations dans un cristal. Mathématiquement on étudie l'homogénéisation d'une équation de Hamilton-Jacobi non-locale. On prouve des propriétés qualitatives de l'hamiltonien effectif. Un schéma numérique est proposé. On démontre qu'il est monotone sous certaines conditions CFL. En utilisant ce schéma, on calcule numériquement l'hamiltonien effectif. De plus nous donnons des simulations de l'hamiltonien effectif pour d'autres modèles de dynamique de dislocations pour lequel aucune analyse théorique n'est faite. Le chapitre 5 est une annonce de résultat, un proceedings [12] du colloque MECAMAT à Aussois (France). Le chapitre 6 est aussi une partie essentielle de ce mémoire. Il s'agit d'un papier [13] soumis à la revue Int. J. of Computing

Science and Mathematics. Le chapitre 7 est un complément du chapitre 6 pour un modèle particulier. Dans le chapitre 6, nous regardons d'abord l'homogénéisation des équations non-locales de Hamilton-Jacobi qui modélisent la dynamique des dislocations. Ensuite, nous proposons un schéma numérique monotone. Nous terminons ce chapitre par des simulations exhaustives pour plusieurs modèles. Maintenant, nous présentons brièvement nos résultats. Les simulations numériques sont à regarder dans les chapitres de cette partie. Nous considérons une géométrie particulière de lignes de dislocations parallèles qui se déplacent dans un même plan. Les positions des dislocations sont données par les points  $x \in \mathbb{R}$  tels qu'une fonction  $u(x, t)$  soit à valeurs entières. Dans le cas le plus simple, on suppose que  $u$  satisfait l'équation non-locale de Hamilton-Jacobi suivante (cf. [15] et [18] pour l'étude de modèle similaire)

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = c[u](x, t) \left| \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) \right| & \text{dans } \mathbb{R} \times (0, +\infty) \\ c[u](x, t) = A + c^1(x) + c^{\text{int}}[u](x, t) \\ c^{\text{int}}[u](x, t) = \int_{\mathbb{R}} c^0(x') u(x - x', t) dx' \end{cases} \quad (8)$$

avec une condition initiale

$$u(x, 0) = u^0(x) \quad \text{dans } \mathbb{R} \quad (9)$$

Ici  $c[u]$  est la vitesse non-locale des dislocations. Elle est la somme de trois termes :  $c^{\text{int}}$  est la contribution créée par les interactions entre toutes les dislocations, et elle est décrite par une convolution,  $c^1$  est un champ microscopique créé par d'autres défauts dans le cristal et  $A \in \mathbb{R}$  est la contrainte extérieure appliquée.

On suppose que le noyau  $c^0$  vérifie

$$c^0(x) = c^0(-x) \text{ et } \int_{\mathbb{R}} c^0(x) dx = 0. \quad (10)$$

On suppose aussi la périodicité et la régularité du champ  $c^1$

$$c^1(x + 1) = c^1(x) \text{ sur } \mathbb{R}, \quad \text{et } c^1 \text{ est continue Lipschitz} \quad (11)$$

Nous voulons comprendre les propriétés des solutions de (8) pour  $A = 0$  à grande échelle et qui sont définies par

$$u_\varepsilon(x, t) = \varepsilon u\left(\frac{x}{\varepsilon}, \frac{t}{\varepsilon}\right)$$

où  $\varepsilon$  est le coefficient entre l'échelle mésoscopique et l'échelle microscopique



L'homogénéisation des équations de Hamilton-Jacobi ont été étudié par Lions *et al.* dans [19].

Pour cette équation (cf. [18]) et pour une certaine catégorie de noyaux  $c^0$ , il a été démontré que  $u_\varepsilon$  converge vers  $u_0$ , solution de

$$\frac{\partial u_0}{\partial t} = \bar{H} \left( I_1 u_0, \frac{\partial u_0}{\partial x} \right)$$

où  $I_1$  est un opérateur de Levy non-local, et  $\bar{H}$  est l'hamiltonien effectif donné dans la définition suivante.

**Définition 3 (Hamiltonien effectif)**

Sous l'hypothèse (11) et pour  $(A, p) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}$ , l'hamiltonien effectif  $\bar{H}(A, p)$  est défini par

$$\bar{H}(A, p) = \lim_{t \rightarrow +\infty} \frac{w(x, t)}{t} \quad (\text{indépendant de } x) \quad (12)$$

où  $w$  est solution du problème de la cellule ;  $w$  est solution de (8) avec  $w(x, 0) = px$ .

Le théorème suivant présente les propriétés qualitatives de l'hamiltonien effectif.

**Théorème 4 (Monotonie de l'hamiltonien effectif)**

On suppose que  $c^0 = -\delta_0 + J$  où  $\delta_0$  est une masse de Dirac et  $J \in C^\infty(\mathbb{R})$  est tel que

$$\left\{ \begin{array}{l} J(-x) = J(x) \geq 0 \quad ; \quad \int_{\mathbb{R}} J(x) dx = 1 \quad \text{and} \quad \int_{\mathbb{R}} |x| J(x) dx < +\infty \end{array} \right. \quad (13)$$

Alors l'hamiltonien effectif donné dans la Définition 3 vérifie

1.  $\bar{H}(A, p)$  est croissant en  $A$ .
2. Si  $\int_{\mathbb{R}} c^1(x) dx = 0$  alors  $\bar{H}(0, p) = 0$  et  $A\bar{H}(A, p)$  est croissant en  $|p|$ .

On construit le schéma numérique (5) avec une vitesse discrète

$$c_i(v^n) = A + c^1(x_i) + c_i^{\text{int}}(v^n) \quad (14)$$

Le terme non-local  $c^0 \star u$  est approximé par

$$\left\{ \begin{array}{l} c_i^{\text{int}}(v^n) = -v_i^n + \sum_{l \in \mathbb{Z}} J_l v_{i-l}^n \Delta x \\ J_i = \frac{1}{\Delta x} \int_{I_i} J(x) dx \quad \text{et} \quad I_i = \left[ x_i - \frac{\Delta x}{2}, x_i + \frac{\Delta x}{2} \right]. \end{array} \right. \quad (15)$$

Sachant que le schéma numérique (5) préserve la monotonie de la solution pour un noyau particulier  $c^0 = -\delta_0 + J$ , c'est-à-dire

$$\text{si } v_{i+1}^0 \geq v_i^0 \quad \forall i \in \mathbb{Z} \quad \text{alors } v_{i+1}^n \geq v_i^n \quad \forall i \in \mathbb{Z}, \forall n \in \mathbb{N} \quad (16)$$

et sous certaines conditions CFL qui sont supposées vérifiées jusqu'au temps  $t_n$ , on a le résultat suivant

**Théorème 5 (Monotonie du schéma)**

*Pour deux solutions numériques  $v_i^0 \geq w_i^0$  pour tout  $i \in \mathbb{Z}$ , on a*

$$v_i^k \geq w_i^k, \quad \forall i \in \mathbb{Z} \quad \text{pour } 0 \leq k \leq n + 1. \quad (17)$$

**La troisième partie** décrit le code DISLO++ avec lequel on a calculé et simulé l'hamiltonien effectif numérique. Ce code est écrit en langage C++ et dans lequel il y a des routines qui permettent la visualisation avec PLOTMTV. Ces routines sont celles du code GO++ (cf. [5], <http://www-rocq.inria.fr/~benamou/gopp/gopp.html>).

Finalement, nous donnons dans l'appendice une preuve du Lemme 3.1 du chapitre 1 et une méthode pour le calcul du noyau de convolution  $c^0$ . Nous terminons ce mémoire par une conclusion, des perspectives et une bibliographie générale qui rassemble tous les thèmes abordés dans ce mémoire, à savoir la théorie des dislocations, les solutions de viscosité et les méthodes numériques.



# Bibliographie

- [1] O. Alvarez, E. Carlini, R. Monneau et E. Rouy, *Convergence of a first order scheme for a non local eikonal equation*, Numerical Mathematics 56, 1136-1146, 2006.
- [2] O. Alvarez, P. Hoch, Y. Le Bouar et R. Monneau, *Résolution en temps court d'une équation de Hamilton-Jacobi non locale décrivant la dynamique d'une dislocation*, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I, 338, 679-684, 2004.
- [3] O. Alvarez, P. Hoch, Y. Le Bouar et R. Monneau, *Dislocation dynamics : short time existence and uniqueness of the solution*, Arch. Ration. Mech. Anal. 181 (3), 449-504, 2006.
- [4] G. Barles, *Solutions de Viscosité des Equations de Hamilton-Jacobi*, Springer-Verlag, Berlin, 1994.
- [5] J.D. Benamou, P. Hoch, *A modular Lagrangian/Eulerian software for Hamilton Jacobi equations of Geometric Optics type*, Math. Model. Numer. Anal. 36 (5), 883-905, 2002.
- [6] W. Bollmann, *Interference effects in the electron microscopy of thin crystal foils*, Phys. Rev., 103, 1588-1589, 1956.
- [7] V. Bulatov, T. Diaz de la Rubia, R. Phillips, E. Kaxiras et N. M. Ghoniem, Co-editors, *Multi-scale Modeling of Materials*, Proceedings of the 1998 MRS Society Symposium 538, 591 pages, 1999.
- [8] L.-T. Cheng, D.J. Srolovitz, E. Weinan and Y. Xiang, *A level set method for dislocation dynamics*, Acta Mater. 51, 5499-5518, 2003.
- [9] M.G. Crandall et P.-L. Lions, *Two Approximations of Solutions of Hamilton-Jacobi Equations*, Math. Comp., 167, 1-19, 1984.
- [10] A.M. Cuitiño, M. Koslowski and M. Ortiz, *A phase-field theory of dislocation dynamics, strain hardening and hysteresis in ductile single crystals*, J. Mech. Phys. Solids 50 (12), 2597-2635, 2002.
- [11] A. Garroni and S. Müller,  *$\Gamma$ -limit of a phase-field model of dislocations*, SIAM J. Math. Anal. 36, 1943-1964, 2005.

## BIBLIOGRAPHIE

---

- [12] A. Ghorbel, M. El Rhabi et R. Monneau, *Comportement mécanique par homogénéisation de la dynamique des dislocations*, Proceedings du Colloque National MECAMAT - Aussois, 2006.
- [13] A. Ghorbel, P. Hoch and R. Monneau, *A numerical study for the homogenization of one-dimensional models describing the motion of dislocations*, preprint Cermics-ENPC 327, 2006.
- [14] A. Ghorbel et R. Monneau, *Equation d'Hamilton-Jacobi non-locale modélisant la dynamique des dislocations*, Proceedings of the 2nd TAM-TAM (Trends in Applied Mathematics in Tunisia, Algeria, Morocco), ARIMA, 322-328, 2005.
- [15] A. Ghorbel and R. Monneau, *Well-posedness of a non-local transport equation modelling dislocations dynamics*, preprint Cermics-ENPC 304, 2006.
- [16] P.B. Hirsch, R.W. Horne, M.S. Whelan, *Direct observations of the arrangement and motion of dislocations in aluminium*, Phil. Mag. 1, 677-684, 1956.
- [17] J.R. Hirth et L. Lothe, *Theory of dislocations*, Second Edition. Malabar, Florida : Krieger, 1992.
- [18] C. Imbert, R. Monneau and E. Rouy, *Homogenization of first order equations with  $(u/\varepsilon)$ -periodic Hamiltonians. Part II*, preprint on HAL server of CNRS [ccsd-00080397 - version 1] (28/06/2006).
- [19] P.-L. Lions, G. Papanicolaou and S.R.S. Varadhan, *Homogenization of Hamilton-Jacobi equations*, unpublished preprint, 1986.
- [20] F.R.N. Nabarro, *Theory of crystal dislocations*, Oxford, Clarendon Press, 1969.
- [21] E. Orowan, *Zür Kristallplastizität I-III*, Z. Phys. 89, 605-634, 1934.
- [22] M. Polanyi, *Über eine Art Gitterstörung, die einem Kristall plastisch machen könnte*, Z. Phys. 89, 660-., 1934.
- [23] D. Rodney, Y. Le Bouar et A. Finel, *Phase field methods and dislocations*, Acta Materialia 51, 17-30, 2003.
- [24] G.I. Taylor, *The Mechanism of Plastic Deformation of Crystals. Part I. Theoretical*, Royal Society of London Proceedings Series A 145, 362-387, 1934.

# Liste des publications

- avec R. Monneau, *Equation d'Hamilton-Jacobi non-locale modélisant la dynamique des dislocations*, Proceedings du 2ème TAM-TAM (Tendances dans les Applications Mathématiques en Tunisie, Algérie, Maroc), 322-328, 2005.
- avec M. El Rhabi et R. Monneau, *Comportement mécanique par homogénéisation de la dynamique des dislocations*, Proceedings du Colloque National MECAMAT - Aussois, 2006.
- avec R. Monneau, *Well-posedness of a non-local transport equation modelling dislocations dynamics*, preprint Cermics-ENPC 304, 2006.
- avec P. Hoch et R. Monneau, *A numerical study for the homogenization of one-dimensional models describing the motion of dislocations*, preprint Cermics-ENPC 327, 2006.



# Liste des communications dans des conférences

- *Équation d'Hamilton-Jacobi non-locale modélisant la dynamique des dislocations (Poster)*, 2ème Colloque sur les Tendances dans les Applications Mathématiques en Tunisie, Algérie, Maroc (TAM-TAM'05), Tunis 26-28 avril 2005.
- *Équation de transport non-locale modélisant la dynamique des dislocations*, CANUM 2006, 29 mai-2 juin 2006 (Guidel, France).
- *Analyse de modèles 1D de dynamique de dislocations & Homogénéisation numérique*, Journées "Analyse non-linéaire", 17-18 novembre 2006, Faculté des Sciences de Sfax, Tunisie.





# Chapitre 1

## Introduction à la dynamique des dislocations

Ce chapitre est une introduction physique inspirée d'une présentation orale de Y. Le Bouar. Il y a trois sections dans ce chapitre. La première section fait l'objet d'un rappel heuristique sur la théorie d'élasticité linéaire et plus précisément la loi de Hooke. La deuxième section est dédiée à introduire la plasticité et le mécanisme des déformations plastiques. La troisième section rappelle ce que sont les dislocations ainsi que leurs propriétés.

### 1 Élasticité linéaire

Cette section a pour but de rappeler la loi de Hooke, relation entre les tenseurs de déformations et les tenseurs de contraintes.

#### 1.1 Tenseurs des déformations

Sous l'action de forces, un corps non rigide se déforme d'une certaine manière. On peut définir la position de chaque point à l'intérieur de ce corps par son vecteur position  $x = (x_1, x_2, x_3)$  dans  $\mathbb{R}^3$ . Lorsque le corps est déformé, chacun de ses points se retrouve à une position différente. Le point préalablement défini par  $x$  se retrouve à une nouvelle position définie par le vecteur  $x' = (x'_1, x'_2, x'_3)$ . On appelle **déplacement** de ce point le vecteur  $u$  défini par

$$u = x' - x. \tag{1.1}$$

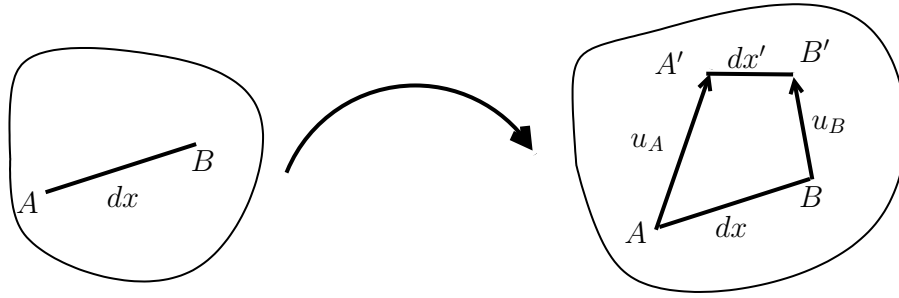


FIG. 1.1 – Déplacement de deux points dans un corps déformable

Si l'on considère deux points  $A$  et  $B$  très proches, séparés avant déformation par un vecteur  $dx$ , le vecteur joignant ces deux points après déformation est devenu  $dx' = dx + du$  (cf. Figure 1.1). Notons  $dl$  et  $dl'$  les normes respectives des vecteurs  $dx$  et  $dx'$ . Nous pouvons écrire alors

$$dl'^2 = \sum_{i=1}^3 dx_i'^2 = \sum_{i=1}^3 (dx_i + du_i)^2 = dl^2 + 2 \sum_{i=1}^3 dx_i du_i + \sum_{i=1}^3 du_i^2 \quad (1.2)$$

Puis en substituant  $du_i$  par son expression en différentielle totale

$$dl'^2 = dl^2 + \sum_{i,j=1}^3 \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) dx_i dx_j + \sum_{i,j,k=1}^3 \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} dx_j dx_k \quad (1.3)$$

Dans la théorie d'élasticité linéaire, on choisit de ne considérer que de faibles déformations et par conséquent les termes du second ordre sont négligés. L'équation (1.3) s'écrit alors sous la forme

$$dl'^2 = dl^2 + 2\varepsilon_{ij} dx_i dx_j \quad (1.4)$$

où  $\varepsilon_{ij}$  est le tenseur des déformations, défini par

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (1.5)$$

Notons que le tenseur des déformations est symétrique, c'est-à-dire  $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$ .

## 1.2 Tenseurs des contraintes

Le tenseur des contraintes est utilisée en mécanique des milieux continus pour représenter l'état de contrainte, c'est-à-dire les forces surfaciques mises en jeu au sein d'une portion déformée du milieu. Le tenseur est défini localement, c'est-à-dire en chaque point du solide. On considère un élément de volume (cube) infinitésimal

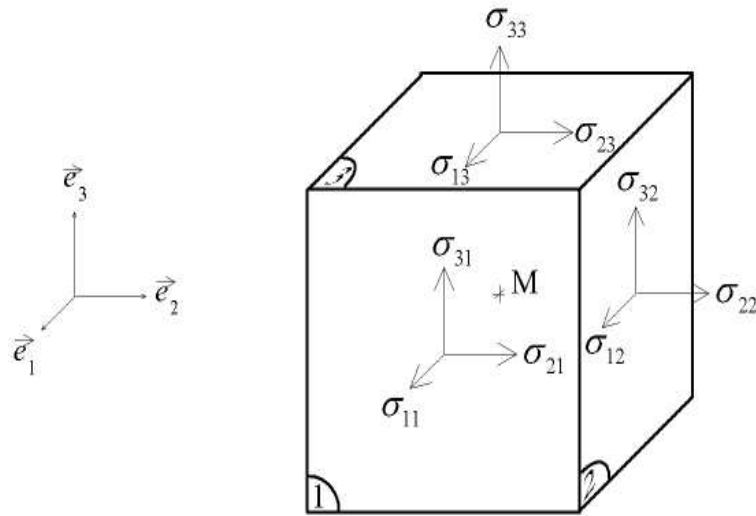


FIG. 1.2 – Tenseur des contraintes

autour d'un point  $M$ . On note  $(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$  une base orthonormée de  $\mathbb{R}^3$  et  $dS$  la surface de chaque facette de ce cube (cf. Figure 1.2). Sur chaque face  $j$  du cube s'exerce une force  $\vec{f}_j = (f_{ij})$ ,  $i = 1, 2, 3$ . L'état de contrainte au point  $M$  est défini par un tenseur d'ordre 2

$$T(M) = (\sigma_{ij})_{1 \leq i, j \leq 3} \quad \text{avec} \quad \sigma_{ij} = \frac{f_j}{dS}.$$

En utilisant le calcul du moment des forces, il est possible de démontrer que le tenseur des contraintes est lui aussi symétrique, c'est-à-dire  $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ .

### 1.3 Loi de Hooke

Dans un matériau déformable, l'action d'un certain nombre de forces conduit à un certain nombre de déformations. Si l'on connaît la relation entre les deux, à savoir la relation entre les tenseurs des contraintes  $\sigma_{ij}$  et le tenseur des déformations  $\varepsilon_{ij}$ , on est capable de caractériser et de prévoir le comportement mécanique du matériau. Cette relation est appelée loi constitutive du matériau.

Le cas le plus simple, correspondant à un grand nombre de matériaux réels pour de faibles déformations, consiste à faire l'hypothèse que cette relation est élastique et linéaire. Élastique indique que l'état des déformations ne dépend que de l'état présent des contraintes, ce qui revient à supposer que les forces internes au matériau n'agissent que par contact immédiat et que leur rayon d'action est proche de zéro. Un matériau élastique qui a été déformé sous l'action de certaines forces regagne son état initial une fois que ces forces ont disparu, et il peut restituer toute l'énergie

qu'il a absorbé, sa forme ne dépend pas de l'historique de ses déformations. Linéaire indique que la relation entre contraintes et déformations est du premier ordre.

Dans le cas d'un matériau anisotrope, on définit la contrainte et la déformation localement par un tenseur d'ordre 2, le tenseur des contraintes  $\sigma_{ij}$  et le tenseur des déformations  $\varepsilon_{ij}$ . Le comportement élastique du matériau est alors modélisé par un tenseur  $\Lambda_{ijkl}$  d'ordre 4 contenant 81 coefficients élastiques. Le nombre de coefficients indépendants est 21 du fait de la symétrie des tenseurs de contraintes et de déformations, et de la stabilité énergétique du tenseur. La loi de Hooke s'écrit

$$\sigma_{ij} = \Lambda_{ijkl}\varepsilon_{kl}. \quad (1.6)$$

Dans le cas d'un matériau isotrope (ses propriétés sont les mêmes dans toutes les directions), le nombre de coefficients d'élasticité est réduit à 2 paramètres seulement (cf. [7]). Ces deux paramètres sont appelés **coefficients de Lamé** et sont notés  $\lambda$  et  $\mu$ . La relation obtenue prend la forme

$$\sigma_{ij} = \lambda \text{tr}(\varepsilon)\delta_{ij} + 2\mu\varepsilon_{ij} \quad (1.7)$$

où  $\text{tr}(\varepsilon)$  désigne la trace de  $\varepsilon = (\varepsilon_{ij})$ ,  $\delta_{ij}$  désigne le symbole de Kronecker

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Cette relation (1.7) est une des écritures possibles de la loi de Hooke dans le cas isotrope. Une écriture différente peut être obtenue en inversant la relation de sorte à exprimer  $\varepsilon_{ij}$  en fonction de  $\sigma_{ij}$

$$\varepsilon_{ij} = \frac{\nu}{E}\text{tr}(\sigma)\delta_{ij} + \frac{1+\nu}{E}\sigma_{ij} \quad (1.8)$$

où  $E$  est le module de Young et  $\nu$  est son coefficient de Poisson. Il sont définis respectivement par

$$E = \frac{\mu(3\lambda + 2\mu)}{\mu + \lambda} \quad \text{et} \quad \nu = \frac{\lambda}{2(\lambda + \mu)}. \quad (1.9)$$

Il est tout à fait équivalent de caractériser un matériau élastique linéaire isotrope par ses deux coefficients de Lamé ou par son module de Young et son coefficient de Poisson.

### 1.4 Équilibre élastique

L'équation d'équilibre élastique s'écrit

$$\iiint_V \rho \vec{g} dV + \oint_{\partial V} \vec{n} \vec{\sigma} dS = \vec{0} \quad (1.10)$$

où  $\rho$  est une densité volumique de la matière,  $\vec{g}$  le vecteur de pesanteur. Comme la masse est conservée au cours d'une déformation plastique, la masse à l'état final  $\rho dV$  est égale à celle à l'état de référence  $\rho_0 dV_0$ . Comme

$$\oint_{\partial V} n_j \sigma_{ji} dS = \iiint_V \frac{\partial \sigma_{ji}}{\partial x_j} dV$$

alors

$$\rho_0 g_i + \sum_j \frac{\partial \sigma_{ji}}{\partial x_j} = 0. \quad (1.11)$$

L'équation d'élasticité (1.11) est équivalente à

$$\text{div } \sigma = -\rho_0 g.$$

## 2 Origine des déformations plastiques

La déformation plastique résulte du déplacement des défauts du réseau : les dislocations. Les dislocations sont des défauts linéaires mésoscopiques dont le déplacement et l'interaction sont à l'origine de la déformation plastique macroscopique des matériaux cristallins. Les interactions sont essentiellement de nature élastique. Pour une description physique des dislocations, on réfère aux ouvrages de physique classique de Bacon, Hull [2], Cottrell [4], Friedel [6], Nabarro [9], Read [10] et à l'ouvrage récent de Hirth et Lothe [7]. On réfère aussi à Chaboche, Lemaitre [3] et François, Pineau, Zaoui [5] pour une présentation mécanique.

Tout objet soumis à un effort se déforme au niveau atomique, ce qui entraîne un déplacement des atomes hors de leur position d'équilibre. Quand on analyse la réponse mécanique du matériau, on distingue le domaine d'élasticité et le domaine de plasticité. La transition entre ces deux domaines s'appelle "limite d'élasticité". Si l'on effectue une décharge dans le domaine élastique, le comportement est réversible et recouvre sa forme initiale. À l'inverse, au-delà de la limite d'élasticité, la déformation plastique est irréversible.

Les déformations plastiques ont pour origine des mécanismes de glissement. Dans les cubiques à face centrée (CFC), il existe 12 plans de glissement équivalents. Chaque système est caractérisé par un plan de glissement et une direction de glissement dans ce plan. Un autre exemple est celui d'un échantillon d'aluminium préparé de manière à avoir une surface polie. Lorsqu'on le déforme avec un certain effort, des lignes parallèles apparaissent sur la surface et qui sont espacées de quelques dizaines de nanomètres (cf. Figure 1.3). Ces lignes de défauts linéaires sont dues au déplacement des dislocations sous l'effet des contraintes appliquées. Leur mobilité est la cause essentielle des déformations permanentes. Deux types de déplacements de dislocations peuvent être rencontrés, le glissement et la montée.

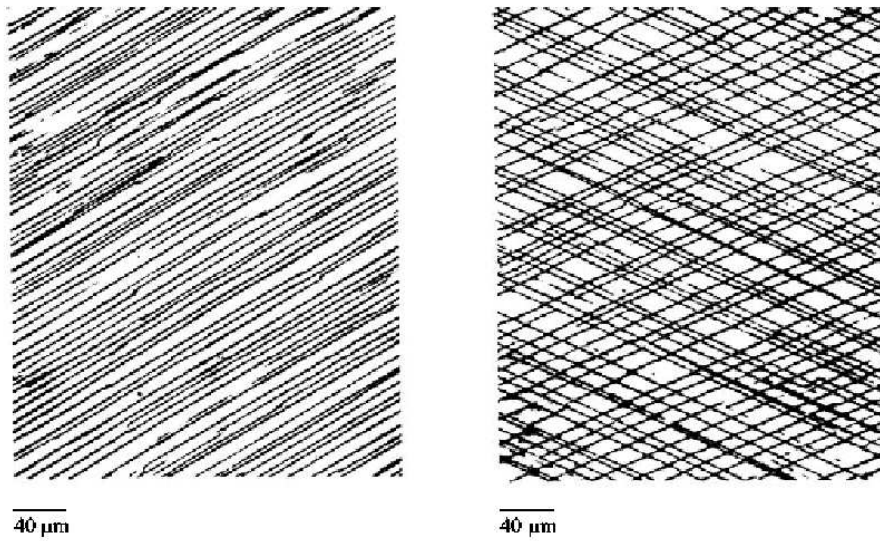


FIG. 1.3 – Lignes de glissement apparaissant à la surface d'un échantillon d'aluminium

## 2.1 Vecteur de Burgers

Dans un solide continu on réalise une coupure selon une surface  $S$  s'appuyant sur une ligne  $l$ . On translate ensuite les lèvres ainsi formées l'une par rapport à l'autre selon un vecteur  $\vec{b}$  appelé vecteur de Burgers de la dislocation. Cette ligne de dislocation  $l$  est caractérisée par son vecteur de Burgers  $\vec{b}$  et son vecteur tangent  $\vec{t}$  définissant le sens de parcours de la ligne. On parle d'une

- dislocation coin si  $\vec{b}$  et  $\vec{t}$  sont perpendiculaires (cf. Figure 1.4 à gauche). Elle correspond à l'insertion d'un demi-plan supplémentaire d'atomes,
- dislocation vis si  $\vec{b}$  et  $\vec{t}$  sont parallèles (cf. Figure 1.4 à droite),
- dislocation mixte dans les autres cas.

La façon la plus utilisée pour déterminer le vecteur de Burgers est la convention FS/RH (Finish Start, Right Hand) (cf. Figure 1.5) :

1. On choisit arbitrairement le sens de la ligne  $\vec{t}$  (cf. Figure 1.5)
2. On réalise un circuit fermé (appelé circuit de Burgers) en tournant positivement autour de la dislocation (le pouce de la main droite orienté dans le sens de  $\vec{t}$ , les doigts montrent le sens positif du circuit, d'où "right hand").
3. On reconstruit dans le cristal parfait, à partir d'un point S (= "start") le même circuit qu'en 2. Ce circuit présente un défaut de fermeture, le point F (= "finish") est différent de S. Le vecteur  $\vec{FS}$  est le vecteur de Burgers  $\vec{b}$  (cf. Figure 1.5). Le sens de  $\vec{b}$  dépend du choix de  $\vec{t}$ .

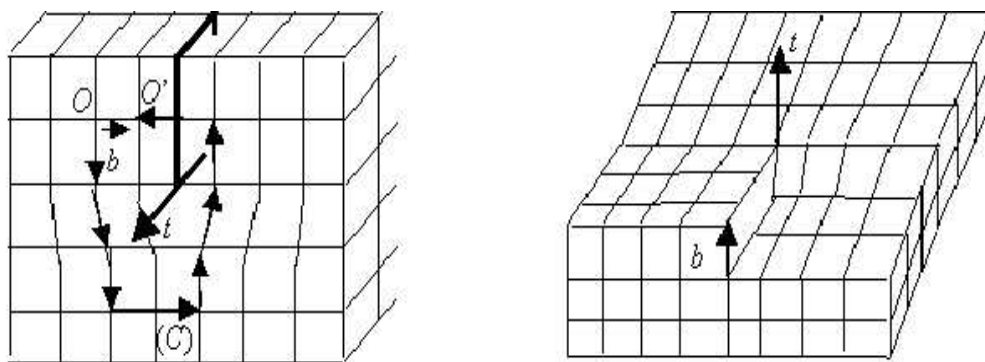


FIG. 1.4 – Dislocation coin, dislocation vis

## 2.2 Déplacement des dislocations

Le glissement sous l'action d'une sollicitation extérieure  $\tau = \sigma_{12}$  est schématisé dans la Figure 1.6 pour le cas d'une dislocation dans un cristal cubique. Lorsqu'une dislocation coin traverse un cristal, elle engendre un déplacement irréversible de vecteur de translation égale au vecteur de Burgers  $\vec{b}$ . Ce mécanisme de déplacement n'exige la rupture de liaisons qu'au voisinage de la ligne de dislocation et successivement d'un atome à un autre.

Un glissement qui commence dans un plan et se termine dans un autre s'appelle un glissement dévié.

La montée (cf. Figure 1.7) correspond au déplacement d'une dislocation en dehors de son plan de glissement et se produit par diffusion de la matière (sous l'effet de la température, les atomes diffusent dans le cristal). Le mouvement d'une dislocation coin est perpendiculaire à son plan de glissement. Il nécessite, par une sollicitation extérieure, le saut d'un atome du demi-plan supplémentaire sur le réseau cristallin inoccupé et la permutation de toute la rangée d'atomes. La Figure 1.8 montre que la dislocation a monté d'un espace interatomique. Le déplacement par montée est principalement actif lors de sollicitations à haute température.



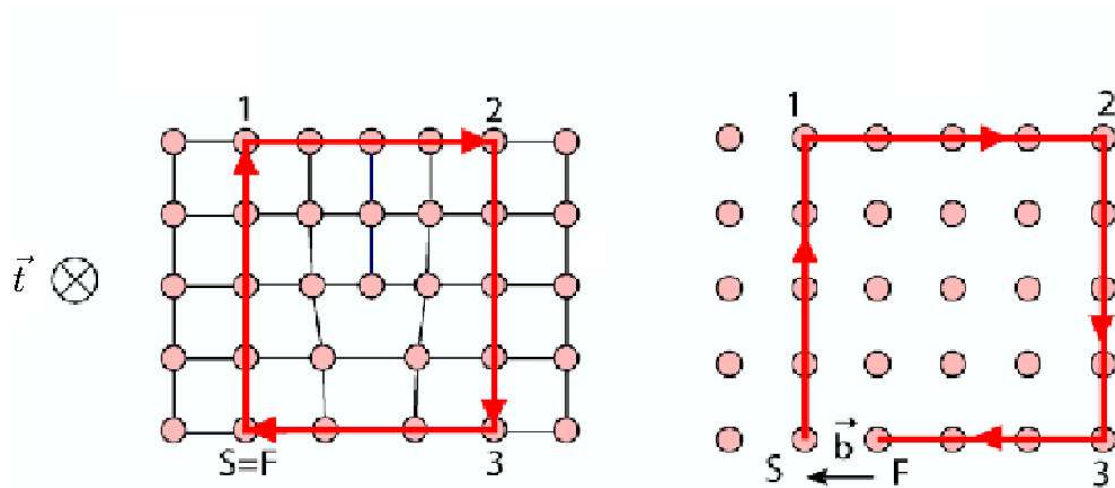


FIG. 1.5 – a) circuit de Burgers autour de la dislocation, b) circuit reproduit dans le cristal parfait

### 3 Propriétés des dislocations

En désignant par  $d\vec{u}$  le déplacement de chaque atome par rapport à sa position dans le réseau idéal sans dislocation (cf. Figure 1.4, a)), le vecteur  $\int_C d\vec{u}$  sur un contour fermé ( $C$ ) arbitraire passant par les noeuds du réseau atomique entourant la ligne de dislocation  $l$  n'est pas nul. On oriente ce contour ( $C$ ) dans le sens direct (règle du tire bouchon, cf. Figure 1.9) à partir du sens défini par l'orientation choisie pour le vecteur tangent  $\vec{t}$  pour parcourir  $l$ . Le vecteur de Burgers de la dislocation

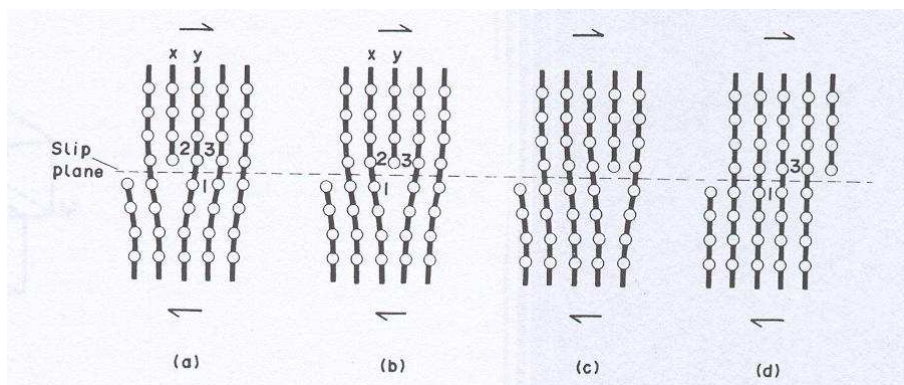


FIG. 1.6 – Déplacement d'une dislocation coin dans un cristal

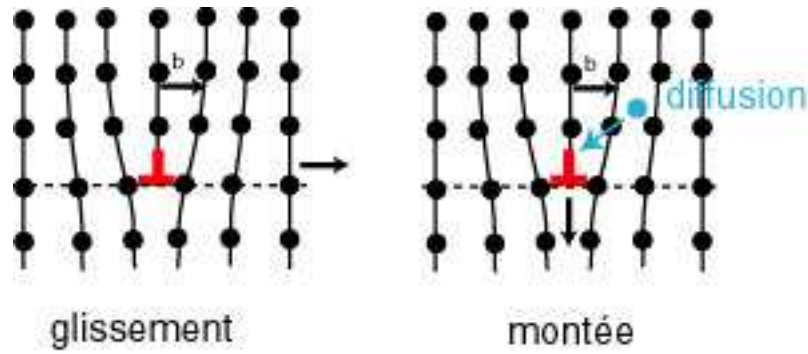


FIG. 1.7 – Glissement et montée de dislocation

est donné par

$$\oint_C d\vec{u} = \oint_C \text{grad } \vec{u} d\vec{x} = -\vec{b} \quad (1.12)$$

La ligne de dislocation est analogue à un conducteur parcouru par un courant électrique (circulation du champ magnétique). Il en résulte que la ligne de dislocation  $l$  est

- soit une boucle fermée
- soit une ligne débouchant à la surface du corps
- soit une ligne rencontrant une autre dislocation et formant un noeud qui vérifie l'équation d'équilibre (la loi des noeuds)  $\vec{b}_1 + \vec{b}_2 + \vec{b}_3 = 0$ .

En présence de dislocations le réseau n'est pas au repos mais soumis à un système de contraintes responsables de la distortion par rapport au réseau idéal.

### 3.1 Dislocation coin

On considère une dislocation coin de vecteur de Burgers  $\vec{b} = (b, 0, 0)$ . Par invariance par translation le long de l'axe  $z$  de la dislocation, le champ de déplacement  $\vec{u}$  appartient au plan  $(xy)$ . Il a pour composantes cartésiennes (cf. [7])

$$u_x = \frac{b}{2\pi} \left( \tan^{-1} \frac{y}{x} + \frac{xy}{2(1-\nu)(x^2 + y^2)} \right)$$

et

$$u_y = -\frac{b}{2\pi} \left( \frac{1-2\nu}{4(1-\nu)} \ln(x^2 + y^2) + \frac{x^2 - y^2}{4(1-\nu)(x^2 + y^2)} \right).$$

### 3.2 Dislocation vis

Dans le cas d'une dislocation vis, le vecteur de Burgers et le vecteur tangent  $\vec{t}$  sont colinéaires. Par invariance par translation et par raison de symétrie le champ

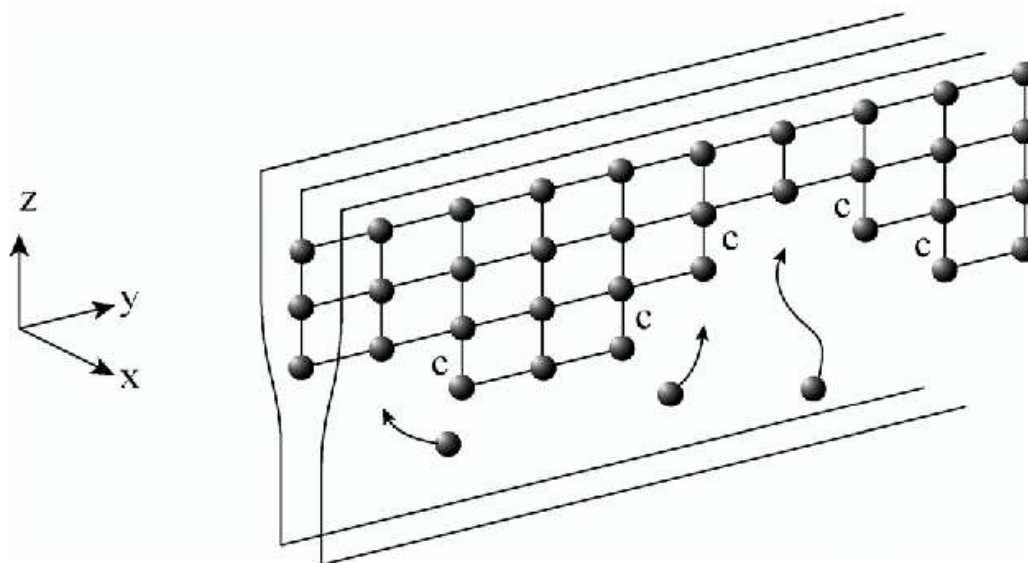


FIG. 1.8 – Montée d’une dislocation coin,  $c = \text{cran}$



FIG. 1.9 – circulation de grad  $\vec{u}$  et loi des noeuds

de déplacement  $\vec{u}$  est à divergence nulle

$$\text{div } \vec{u} = 0 \quad \text{dans } \mathbb{R}^3 \setminus \{x = y = 0\} \quad (1.13)$$

La composante de  $\vec{u}$  suivant  $z$  s’écrit

$$u_z = \frac{b}{2\pi} \tan^{-1} \frac{y}{x}$$

### 3.3 Tenseur d'incompatibilité

On définit l'opérateur d'incompatibilité "inc" comme étant le rotationnel des lignes du rotationnel des colonnes du champ de déformation symétrique  $\varepsilon = (\varepsilon_{ij})_{1 \leq i, j \leq 3}$  :

$$\text{inc}(\bar{\varepsilon}) := \vec{\text{rot}}_{\text{ligne}} \vec{\text{rot}}_{\text{colonne}} \bar{\varepsilon} = \sum_{i_1, j_1=1}^3 \alpha_{ii_1 i_2} \alpha_{jj_1 j_2} \partial_{i_1} \partial_{j_1} \varepsilon_{i_2 j_2}, \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (1.14)$$

où

$$\alpha_{ijk} = \begin{cases} 1 & \text{si } (ijk) \text{ est une permutation positive de } (123) \\ -1 & \text{si } (ijk) \text{ est une permutation négative de } (123) \\ 0 & \text{si deux indices sont égaux} \end{cases}$$

En absence de dislocation, il est connu (dans [8], Lemme 5, page 277) que

$$\text{inc}(\bar{\varepsilon}) = 0 \quad \text{si et seulement si} \quad \varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} (\partial_i u_j + \partial_j u_i). \quad (1.15)$$

On suppose maintenant qu'il existe une ligne de dislocation  $l$  fermée et contenue dans le plan  $\{x_3 = 0\}$  de l'espace  $\mathbb{R}^3$ . En présence de dislocation le tenseur d'incompatibilité (1.14) est non nul. Il est donné par (cf. [1])

$$\text{inc}(\bar{\varepsilon}) = -\text{inc}(\rho \delta_0(x_3) \varepsilon^0) \quad (1.16)$$

où  $\rho$  est une fonction de forme qui vaut 1 à l'intérieur de la ligne et 0 à l'extérieur ;  $\varepsilon^0 = \frac{b \otimes n + b \otimes n}{2}$ ,  $\delta_0(x_3)$  est la masse de Dirac suivant la composante  $x_3$  et  $n$  le vecteur normal au plan qui contient la dislocation.

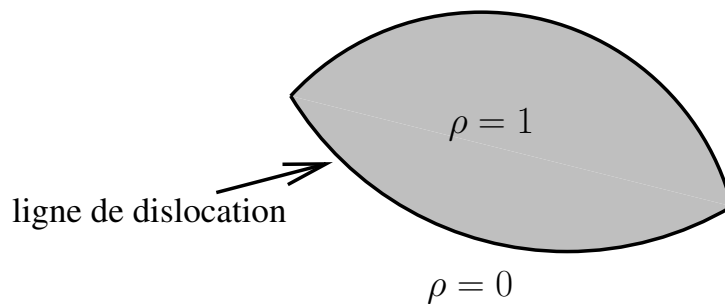


FIG. 1.10 –  $\rho$  est une fonction de forme

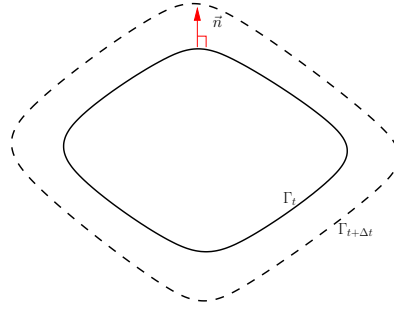


FIG. 1.11 – Dislocation  $\Gamma_s$  aux temps  $s = t$  et  $s = t + \Delta t$

### 3.4 Énergie élastique et sa variation

Dans cette sous-section, nous montrons de manière formelle que la variation de l'énergie élastique par rapport à une ligne de dislocation  $\Gamma_\delta$  est un produit de convolution. La variation de l'énergie élastique s'écrit

$$\delta E^{\text{el}} = \iiint_V \frac{\partial \sigma_{ik}}{\partial x_k} \delta u_i dv = \iint_S \sigma_{ik} \delta u_i dS_k - \iiint_V \sigma_{ik} \frac{\partial \delta u_i}{\partial x_k} dv = - \iiint_V \sigma_{ik} \varepsilon_{ik} dv$$

où les contraintes sont supposées nulles à l'infini,  $\iint_S \sigma_{ik} \delta u_i dS_k = 0$ . Comme  $\sigma_{ik} = \Lambda_{ikjl} \varepsilon_{jl}$ , l'énergie aura pour expression

$$E^{\text{el}} = - \iiint_V \Lambda_{ikjl} \varepsilon_{jl} \varepsilon_{ik} dv.$$

La variation de l'énergie élastique par rapport à une dislocation  $\delta$  est donnée par (cf. [1, 11] pour plus de détails)

$$\frac{d}{d\delta} E^{\text{el}}(\Gamma_\delta)|_{\delta=0} = \int_\Gamma -(c^0 \star \rho) h \quad (1.17)$$

où  $c^0$  vérifie  $c^0(-x) = c^0(x)$  et  $\int_{\mathbb{R}^2} c^0(x) dx = 0$ . La fonction  $\rho$  désigne la densité de dislocation et  $h$  est une fonction donnée. Notons que dans (1.17) la convolution est prise sur  $\mathbb{R}^2$ .

### 3.5 Calcul des forces exercées par une famille de dislocations sur une dislocation

On considère un cristal tridimensionnel dans un repère fixe  $R = (Ox_1x_2z)$ . On considère un repère  $R_1 = (OX_1X_2z)$  tel que les angles  $(Ox_1, OX_1) = (Ox_2, OX_2) = \alpha \in (0, \pi/2)$ . L'objet de cette sous-section est de calculer les forces qui s'exercent par une famille de dislocations sur une dislocation. Nous avons le lemme suivant

**Lemma 3.1 (calcul de la contrainte  $\sigma_{X_1 X_2}$ )**

Étant donnée une famille de dislocations parallèles, de vecteur de Burgers  $\pm \vec{b}$  et de densité  $\rho$ . Alors la contrainte  $\sigma_{X_1 X_2}$  s'écrit

$$\sigma_{X_1 X_2} = 4\mu \rho + 2\mu \left( -2 + \frac{\lambda + \mu}{\lambda + 2\mu} 8 \cos^2 \alpha \sin^2 \alpha \right) \left( \rho - \int \rho \right) \quad (1.18)$$

La preuve de ce lemme se trouve dans l'appendice 1 de ce mémoire.



# Bibliographie

- [1] O. Alvarez, P. Hoch, Y. Le Bouar and R. Monneau, *Dislocation dynamics : short time existence and uniqueness of the solution*, Arch. Ration. Mech. Anal. 181 (3), 449-504, 2006.
- [2] D.J. Bacon, D. Hull, *Introduction to Dislocations*, 3rd Edition, Pergamon Press, Oxford, 1984.
- [3] J.-L. Chaboche, J. Lemaitre, *Mécanique des Matériaux Solides*, 2nd Edition, Dunod, Paris, 2001.
- [4] A.H. Cottrell, A.H., *Dislocations and plastic flow in crystals*, Clarendon Press, Oxford, 1953.
- [5] D. François, A. Pineau, A. Zaoui, *Comportement Mécanique des Matériaux*, Hermès, Paris, 1995.
- [6] J. Friedel, *Dislocations*, Pergamon Press, Oxford, 1964.
- [7] J.R. Hirth and L. Lothe, *Theory of dislocations*, Second Edition. Malabar, Florida : Krieger, 1992.
- [8] R.W. Lardner, *Mathematical theory of dislocations and fracture*, Mathematical Expositions 17, University of Toronto Press, 1974.
- [9] F.R.N. Nabarro, *Theory of crystal dislocations*, Oxford, Clarendon Press, (1969).
- [10] W.T. Read, *Dislocations in crystals*, Graw-Hill, 1953.
- [11] D. Rodney, Y. Le Bouar and A. Finel, *Phase field methods and dislocations*, Acta Materialia 51, 17-30, 2003.



## BIBLIOGRAPHIE

---

Première partie  
Analyse numérique



## Chapitre 2

# Annonce d'un résultat en temps court

Ce chapitre est un proceedings au 2ème Colloque sur les Tendances dans les Applications Mathématiques en Tunisie, Algérie, Maroc (TAM-TAM'05). On présente un résultat préliminaire du prochain chapitre. Il s'agit d'un résultat d'existence en temps court de solution de viscosité continue d'une équation d'Hamilton-Jacobi non-locale qui modélise la dynamique des dislocations.

# Équation d'Hamilton-Jacobi non-locale modélisant la dynamique des dislocations

A. Ghorbel, R. Monneau

*CERMICS, École Nationale des Ponts et Chaussées  
6 & 8, avenue Blaise Pascal, Cité Descartes,  
Champs sur Marne, 77455 Marne-La-Vallée Cedex 2, FRANCE  
ghorbel@cermics.enpc.fr, monneau@cermics.enpc.fr*

**RÉSUMÉ** On présente ici une très brève introduction aux dislocations et à leur dynamique. On décrit la dynamique de ces dislocations à l'aide d'un modèle simple. Il s'agit d'une équation d'Hamilton-Jacobi avec terme non local. Nous présentons un résultat d'existence et d'unicité de solution de viscosité continue pour cette équation et des simulations numériques montrant le phénomène d'empilement lorsqu'on considère plusieurs dislocations et obstacles.

**MOTS-CLEFS** Dynamique des dislocations, équation de Hamilton-Jacobi, équation non-locale, solution de viscosité continue

**ABSTRACT** We present here a brief introduction to the dislocations and their dynamics. We model the dislocations dynamics by a non-local Hamilton-Jacobi equation. We give a result of existence and uniqueness of a continuous viscosity solution for this equation. We provide some numerical simulations showing essentially the pile-up's phenomenon when we consider several dislocations and obstacles.

**KEYWORDS** Dislocations dynamics, Hamilton-Jacobi equation, non-local equation, continuous viscosity solution

## 1 Modélisation

Dans ce travail on s'intéresse à la dynamique de dislocations dans un matériau cristallin (cf. [5] et [6] pour une description physique). Un cristal parfait en petite déformation est bien décrit par les équations de l'élasticité linéaire. Les cristaux réels comportent en fait certains défauts appelés dislocations. Sous l'effet de contraintes extérieures, ces dislocations peuvent se déplacer. La dynamique de ces dislocations

est à l'origine du comportement plastique des métaux cristallins (cf. [2] pour une modélisation de la dynamique des dislocations).

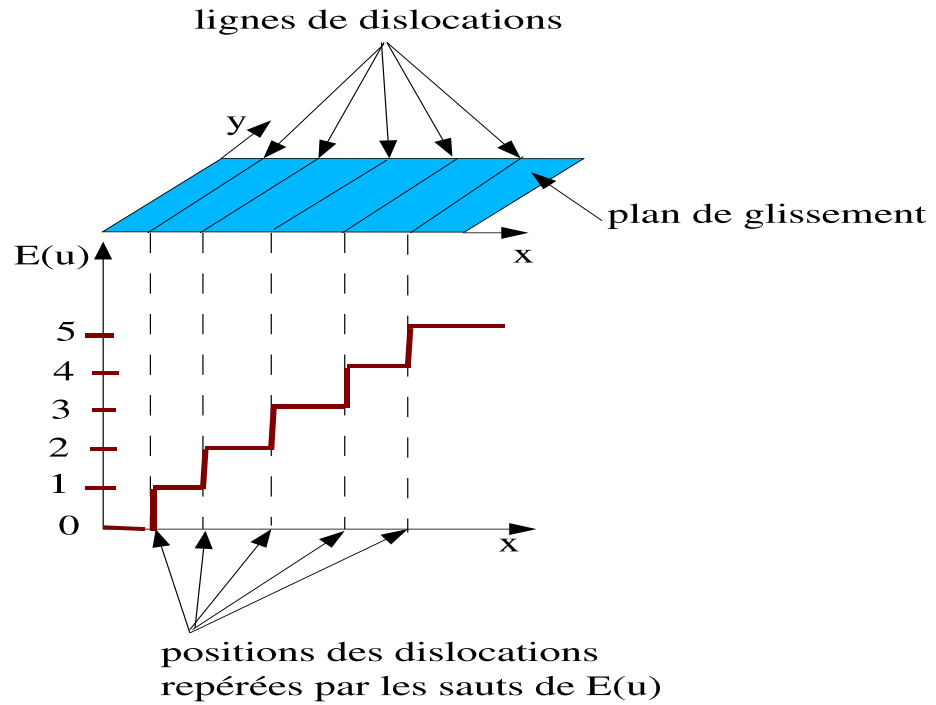


FIG. 2.1 – Représentation de plusieurs dislocations par la fonction  $E(u)$

On considère ici un modèle simple où les dislocations sont des lignes droites se déplaçant dans un même plan  $(xy)$  et parallèles à l'axe des  $y$  (voir Fig.2.1). Ce plan est contenu dans un cristal élastique tridimensionnel. La géométrie très particulière de ce problème permet de se ramener à l'étude d'un problème unidimensionnel donné par l'équation d'Hamilton-Jacobi non-locale suivante qui modélise la plasticité à l'échelle des dislocations (pour  $T > 0$ )

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) + c(x, t) \left| \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) \right| = 0 & \text{dans } \mathbb{R} \times (0, T) \\ c(x, t) = c^{\text{ext}}(x) + c^{\text{int}}(x, t) \\ c^{\text{int}}(x, t) = \int_{\mathbb{R}} c^0(x - x') E(u(x', t)) dx' \end{cases} \quad (2.1)$$

où la fonction  $E$  est la partie entière définie par

$$E(v) = k \quad \text{si } k \leq v < k + 1, \quad k \in \mathbb{Z}.$$

Ici, la fonction scalaire  $u$  est non-physique mais est choisie telle que les sauts de  $E(u)$  repèrent les positions des dislocations (cf. Fig.2.1). L'introduction de la valeur

absolue  $\left| \frac{\partial u}{\partial x} \right|$  dans l'équation permet de tenir compte de l'annihilation possible de deux dislocations associées à des sauts de  $E(u)$  opposés. Ces dislocations se déplacent à une vitesse  $c$  (appelée en physique force de Peach-Kohler résolue, cf. [6]) qui est la somme de deux termes. Le premier terme  $c^{\text{ext}}$  représente les contraintes externes créés par les obstacles à l'avancement des dislocations (tels que les précipités dans le matériau, d'autres dislocations fixes ou bien d'autres défauts, ...). Le second terme  $c^{\text{int}}$  est non-local, donné par une convolution, et représente les contraintes internes élastiques créés par toutes les dislocations en mouvement. Ce dernier terme est obtenu par résolution des équations de l'élasticité linéaire et fait apparaître un noyau  $c^0$  qui tient compte des effets élastiques (longue distance) des dislocations. Nous considérons une situation physique où les obstacles à l'avancement des dislocations, modélisés par la vitesse  $c^{\text{ext}}$ , sont répartis de façon périodique dans l'espace, de période 1. Cela revient à supposer que

$$c^{\text{ext}}(x + 1) = c^{\text{ext}}(x) \quad \text{dans } \mathbb{R} \quad (2.2)$$

On s'intéresse à une classe particulière de solutions de (2.1) où la distribution des dislocations (c'est-à-dire des sauts de  $E(u)$ ) est elle aussi spatialement périodique de période 1, chaque période contenant  $P \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$  dislocations. C'est en particulier le cas si on se restreint à l'étude des solutions  $u$  vérifiant

$$u(x + 1, t) = u(x, t) + P \quad \text{dans } \mathbb{R} \times (0, T) \quad (2.3)$$

## 2 Existence et unicité de la solution

Nous formulons les hypothèses suivantes sur la fonction  $c^{\text{ext}}$  et le noyau  $c^0$  :

$$\begin{cases} c^{\text{ext}} \in C^\infty(\mathbb{R}) \\ c^0 \in C_0^\infty(\mathbb{R}) \\ c^0(x) = c^0(-x), \int_{\mathbb{R}} c^0(x) dx = 0 \end{cases} \quad (2.4)$$

où  $C_0^\infty(\mathbb{R})$  désigne l'espace des fonctions  $C^\infty$  à support compact. On considère la condition initiale

$$u(x, 0) = Px \quad \text{sur } \mathbb{R} \quad (2.5)$$

qui signifie qu'initialement les dislocations sont équidistantes les unes des autres. Un cadre naturel pour étudier les solutions de (2.1) est celui des solutions de viscosité continues. Nous renvoyons à [4] pour cette notion. On a alors le

**Théorème 6** *Sous les hypothèses (2.2),(2.4), Il existe  $T > 0$ , tel qu'il existe une unique solution  $u$  de viscosité continue de (2.1),(2.3),(2.5).*

QUELQUES INDICATIONS POUR LA PREUVE DU THÉORÈME 6 Nous prouvons le théorème en temps court en utilisant un argument de type point fixe inspiré de ([1, 2]), pour des solutions de viscosité continues de (2.1). De façon précise, étant donné  $T > 0$  et une fonction  $v$  vérifiant (2.3),(2.5), on considère la fonction  $w = S(v)$  vérifiant (2.3),(2.5), solution de

$$w_t + (c^{\text{ext}} + c^0 \star E(v)) |w_x| = 0 \quad \text{dans } \mathbb{R} \times (0, T)$$

Pour  $T$  choisi suffisamment petit, on montre que l'application  $S$  est une contraction dans un espace bien choisi, ce qui prouve l'existence d'un unique point fixe  $u = S(u)$  qui est donc solution de (2.1) sur  $\mathbb{R} \times (0, T)$ . Notons que le cadre des solutions de viscosité continues se prête bien au calcul numérique contrairement aux solutions de viscosité discontinues par exemple considérées dans [1, 2].

□

### 3 Simulations numériques

On construit un schéma de type différences-finies d'ordre 1 en espace et en temps, caractérisé par :

- un hamiltonien numérique (on utilisera le schéma de Rouy-Tourin [7]).
- une convolution discrète pour la vitesse non-locale  $c^{\text{int}}$ .
- un schéma d'Euler explicite en temps.

On note  $\Delta x$  le pas d'espace et  $\Delta t$  le pas de temps. On considère un maillage cartésien  $I_d = \{(i\Delta x, n\Delta t); i \in \mathbb{Z}, n \in \mathbb{N}\}$ . On note  $(x_i, t^n)$  le noeud du maillage  $(i\Delta x, n\Delta t)$  et  $v^n = (v_i^n)_{i \in \mathbb{Z}}$  les valeurs de l'approximation numérique de  $u(x_i, t^n)$  où  $u$  est la solution continue du problème. Le schéma numérique s'écrit :

$$v_i^{n+1} = v_i^n - \Delta t c_i(v^n) \begin{cases} \max(\max(D_x^- v_i^n, 0), \max(-D_x^+ v_i^n, 0)) & \text{si } c_i(v^n) \geq 0 \\ \max(\max(-D_x^- v_i^n, 0), \max(D_x^+ v_i^n, 0)) & \text{si } c_i(v^n) < 0 \end{cases} \quad (2.6)$$

avec  $D_x^- v_i^n = \frac{v_i^n - v_{i-1}^n}{\Delta x}$  et  $D_x^+ v_i^n = \frac{v_{i+1}^n - v_i^n}{\Delta x}$ .

On choisit  $\Delta x = \frac{1}{k}$  où  $k \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$ . On note  $c_i^{\text{ext}} = c^{\text{ext}}(x_i)$  qui vérifie alors  $c_{i+k}^{\text{ext}} = c_i^{\text{ext}}$ .

On s'intéresse à des solutions  $v_i^n$  vérifiant  $v_{i+k}^n = v_i^n + P$ . Ainsi, la vitesse discrète s'écrit :

$$c_i(v^n) = c_i^{\text{ext}} + \sum_{l \in \mathbb{Z}} c_{i-l}^0 E(v_l^n) \Delta x$$



où  $c_i^0 = \frac{1}{\Delta x} \int_{I_i} c^0(x) dx$ , et  $I_i = \left[ x_i - \frac{\Delta x}{2}, x_i + \frac{\Delta x}{2} \right]$ , et vérifie  $c_{i+k}(v^n) = c_i(v^n)$ .

**Remarque 7** Pour obtenir des solutions numériques raisonnables on suppose la condition CFL (Courant-Friedrichs-Levy) satisfaite :  $\frac{\Delta t}{\Delta x} < \frac{1}{\sup |c_i^n|}$ . Notons néanmoins que le schéma global n'est pas monotone car la vitesse  $c_i(v^n)$  dépend de façon non monotone de la solution  $v^n$  elle-même, (car certains  $c_i^0$  peuvent être négatifs).

**Remarque 8** Une façon de calculer la convolution (qui devient intéressante lorsque le nombre de points de discrétisation  $k = \frac{1}{\Delta x}$  est grand) consiste simplement, en utilisant la FFT, à prendre la transformée de Fourier inverse du produit des transformées de Fourier.

Dans les figures 2.2 à 2.5 l'axe des abscisses représente la position  $x_i$  dans l'intervalle  $\left[ -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right]$  et l'axe des ordonnées, le temps  $t^n$ . Sont ici représentées les trajectoires des dislocations repérées par le lieu du saut de  $E(v_i^n)$ , dans différentes situations. Si  $k = 2K + 1$ , où  $K \in \mathbb{N}$ , on a pris,

$$c^0(x) = \begin{cases} -1 & \text{si } i = 0 \\ \frac{1}{2K} & \text{si } |i| \leq K \text{ et } i \neq 0 \\ 0 & \text{si } |i| \geq K + 1 \end{cases} \quad (2.7)$$

**Remarque 9** Pour le choix de  $c_i^0$  donné par (2.7), le schéma global est monotone car seul le coefficient  $c_0^0$  est strictement négatif.

La figure 2.2 montre que quand il n'y a pas d'obstacles, c'est-à-dire  $(c^{\text{ext}})'(x) = 0$ , les trajectoires des  $P = 6$  dislocations sont des droites. Lorsqu'on rajoute des obstacles suffisamment importants (cf. figure 2.3), les dislocations sont stoppées par les obstacles (ici  $c^{\text{ext}}(x) = 1 + 2 \sin(4\pi x)$ ). La figure 2.4 montre que si on augmente  $c^{\text{ext}}$  d'une constante suffisante en conservant les obstacles inchangés (en  $x \sim -0.1$  et  $x \sim 0.4$ ), on observe un mouvement des dislocations. On constate numériquement qu'ici ce mouvement se périodise au cours du temps. On observe un effet d'empilement des dislocations juste avant chaque obstacle. Si on change légèrement le nombre de dislocations qui passent à  $P = 5$ , figure 2.5, on observe ici le même phénomène. On a pris ici  $k = 101$ ,  $\Delta x = 9.90 \cdot 10^{-3}$  et  $\Delta t = 4.71 \cdot 10^{-3}$  (fig.2.2),  $\Delta t = 1.63 \cdot 10^{-3}$  (fig.2.3),  $\Delta t = 9.84 \cdot 10^{-4}$  (fig.2.4),  $\Delta t = 9.87 \cdot 10^{-4}$  (fig.2.5).

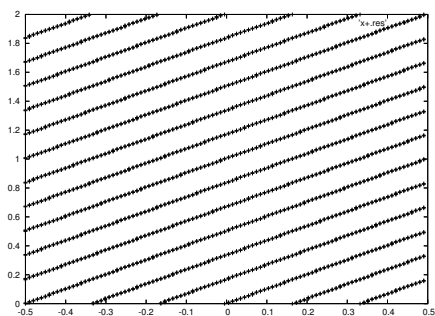


FIG. 2.2 – Absence d'obstacles

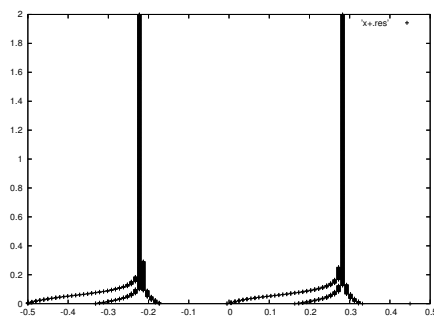


FIG. 2.3 – Les dislocations sont piégées par deux obstacles

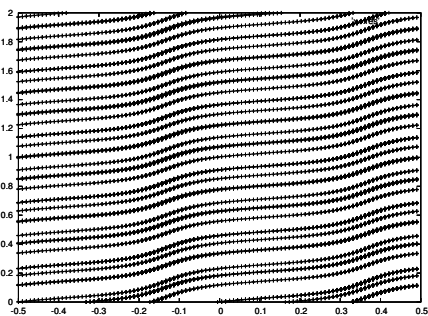


FIG. 2.4 – Empilement de dislocations sur deux obstacles

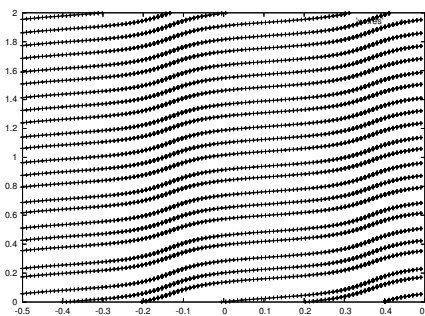


FIG. 2.5 – Empilement de dislocations sur deux obstacles

## 4 Perspectives

Nous envisageons d'examiner s'il est possible, sous certaines hypothèses, d'étendre en temps long le résultat d'existence et d'unicité du théorème 6. Nous nous intéresserons à la convergence du schéma numérique présenté ici en s'inspirant de [3] et aussi à l'étude de l'homogénéisation.

## 5 Remerciements

Nous remercions O. Alvarez, E. Carlini, A. Finel, P. Hoch, Y. Le Bouar et E. Rouy pour de nombreuses discussions enrichissantes.



# Bibliographie

- [1] O. ALVAREZ, P. HOCH, Y. LE BOUAR, R. MONNEAU, Résolution en temps court d'une équation de Hamilton-Jacobi non locale décrivant la dynamique d'une dislocation , *C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I* 338 (2004) 679-684,
- [2] O. ALVAREZ, P. HOCH, Y. LE BOUAR, R. MONNEAU, Dislocation dynamics driven by the self-force : short time existence and uniqueness of the solution , Preprint,
- [3] O. ALVAREZ, E. CARLINI, P. HOCH, Y. LE BOUAR, R. MONNEAU, Dislocation dynamics described by non-local Hamilton-Jacobi equations , Preprint,
- [4] G. BARLES, Solutions de viscosité des équations de Hamilton-Jacobi , *Springer-Verlag, Berlin* (1994),
- [5] J.R. HIRTH, L. LOTHE, Theory of dislocations , *Second Edition, Malabar, Florida : Krieger* (1992),
- [6] D. RODNEY, Y. LE BOUAR, A. FINEL, Phase field methods and dislocations , *Acta Materialia* 51 (1) (2003) pp. 17-30,
- [7] E. ROUY, A. TOURIN, A viscosity solutions approach to shape-from-shading , *SIAM J. Numer. Anal.* 29 (3) (1992) pp. 867-884,



## Chapitre 3

# Problème de transport non-local modélisant la dynamique des dislocations

Ce chapitre est un article soumis à la revue *Journal of Scientific Computing*. On montre un résultat d'existence et d'unicité de solution de viscosité continue d'une équation de transport non-locale qui modélise la dynamique des dislocations. On montre aussi une estimation d'erreur entre la solution continue et la solution discrète d'un schéma numérique différences-finies associé à cette équation.

# Well-posedness and numerical analysis of a one-dimensional non-local transport equation modeling dislocations dynamics

A. Ghorbel, R. Monneau

*CERMICS, École Nationale des Ponts et Chaussées  
6 & 8, avenue Blaise Pascal, Cité Descartes,  
Champs sur Marne, 77455 Marne-La-Vallée Cedex 2, FRANCE*

Abstract: We consider a situation where dislocations are parallel lines moving in a single plane. For this simple geometry, dislocations dynamics is modeled by a one-dimensional non-local transport equation. We prove a result of existence and uniqueness for all time of the continuous viscosity solution for this equation. A finite difference scheme is proposed to approximate the continuous viscosity solution. We also prove an error estimate result between the continuous solution and the discrete solution and we provide some simulations.

**AMS Classification :** 35F20, 35F25, 35K55, 49L25, 65N06, 65N12, 74N05.

**Keywords :** Dislocations dynamics, Peach-Koehler force, transport equation, eikonal equation, Hamilton-Jacobi equation, non-local equation, continuous viscosity solutions, convergence of numerical scheme.

## 1 Introduction

### 1.1 Physical motivation

In this work, we are interested in the dislocations dynamics in a crystal material (see [18] for a physical description of dislocations). A perfect crystal, for small deformations, is well described by the equations of linear elasticity. The real crystals contain in particular some line defects called dislocations. The dislocations dynamics is one of the main explanation of the plastic deformation of metals. When we apply

an exterior stress, these dislocations lines can move in a slip plane of the crystal. We consider here a simple geometry where the dislocations are parallel lines moving in a same plane  $(xy)$ . This plane is embedded in a three-dimensional elastic crystal. The particular geometry of this problem leads to study a one-dimensional model given by the following non-local transport equation modelling dislocations dynamics :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = c[u](x, t) \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) & \text{in } \mathbb{R} \times (0, +\infty) \\ u(x, 0) = u^0(x) & \text{in } \mathbb{R} \end{cases} \quad (3.1)$$

where the solution  $u$  is a scalar function,  $\frac{\partial u}{\partial t}$  and  $\frac{\partial u}{\partial x}$  are respectively its time and space derivatives. Here the dislocations move with a non-local velocity  $c[u]$  known as the resolved Peach-Koehler force, see [20]. It is given by

$$\begin{cases} c[u](x, t) = c^{\text{ext}}(x) + c^{\text{int}}[u](x, t) \\ c^{\text{int}}[u](x, t) = \int_{\mathbb{R}} c^0(x - x') (E(u(x', t)) - Px') \, dx' \end{cases} \quad (3.2)$$

where the function  $E$  is the floor function defined by  $E(v) = k$  if  $k \leq v < k + 1$ ,  $k \in \mathbb{Z}$ . The scalar function  $u$  has no physical meaning but it is chosen such that the jumps of  $E(u)$  correspond to the positions of dislocations (see Figure 3.1). The velocity  $c[u]$  is the sum of two terms. We first assume the existence in the material of obstacles to the motion of dislocations. The term  $c^{\text{ext}}$  represents the exterior stress created by these obstacles (such as precipitates in the material, other fixed dislocations, other defects, ...). We consider obstacles that are independent on time and periodic in space. Namely we assume that the velocity satisfies

$$c^{\text{ext}} \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}) \quad \text{such that} \quad c^{\text{ext}}(x + 1) = c^{\text{ext}}(x) \quad \text{in } \mathbb{R}. \quad (3.3)$$

The second term  $c^{\text{int}}[u]$  is a non-local term, given by a convolution with respect to the space variable, and represents the elastic interior stress created by all the dislocations in the material. This term  $c^{\text{int}}[u]$  is obtained by the resolution of the equations of linear elasticity. For instance, in the model of Peierls-Nabarro (see [5]), we have in the case of edge dislocation (see [18])

$$c^0(x) = \frac{-\mu b^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{x^2 - \zeta^2}{(x^2 + \zeta^2)^2} \quad \text{on } \mathbb{R}, \quad (3.4)$$

where  $\nu = \frac{\lambda}{2(\lambda + \mu)}$  is the Poisson ratio and  $\lambda$  and  $\mu > 0$  are the Lamé coefficients for isotropic elasticity. The Burgers vector  $\vec{b}$  is equal to  $b\vec{e}_x$ , with  $b > 0$  and  $\vec{e}_x$  the unit vector in the direction of  $x$  of Figure 3.1. There is a physical parameter  $\zeta \neq 0$  (depending on the material) which represents the size of the core of the dislocation.



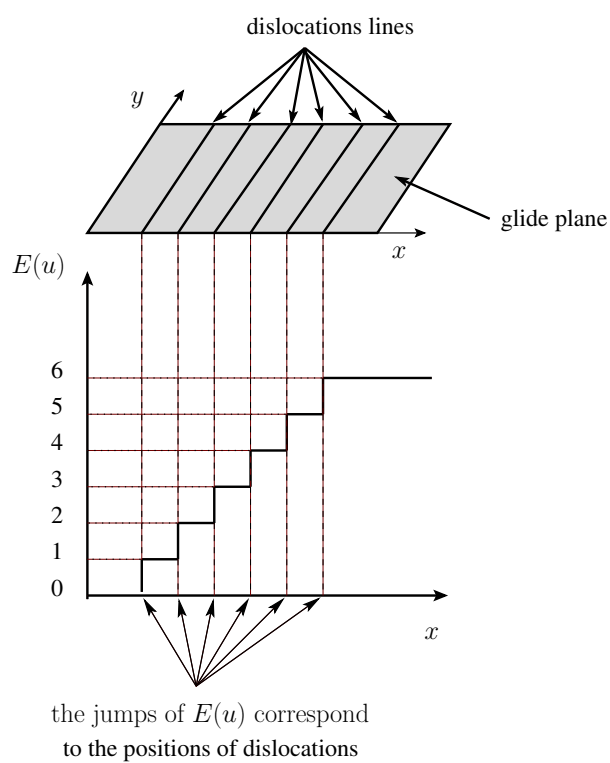


FIG. 3.1 – Representation of dislocations with the function  $E(u)$

## 1.2 Main results

In the sequel of this paper, we use some adapted norms introduced in the following definition.

### Definition 1.1 (Adapted norms)

Let two functions  $f \in L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R})$  and  $g \in L^\infty_{\text{loc}}(\mathbb{R})$ . We define the quantities

$$|f|_{L^1_{\text{unif}}(\mathbb{R})} = \sup_{x \in \mathbb{R}} \int_{I(x)} |f(y)| dy \quad \text{and} \quad |g|_{L^\infty_{\text{int}}(\mathbb{R})} = \int_{\mathbb{R}} |g|_{L^\infty(I(x))} dx$$

where  $I(x) = (x - \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2})$ . We denote respectively  $L^1_{\text{unif}}(\mathbb{R})$  and  $L^\infty_{\text{int}}(\mathbb{R})$  spaces that consist of functions for which these quantities are finite.

**Remark 1.2** These spaces are motivated by the following fact. For  $c^0 \in L^\infty_{\text{int}}(\mathbb{R})$  and  $f \in L^1_{\text{unif}}(\mathbb{R})$ , we will show later that the convolution product  $c^0 \star f$  is well defined. This will be applied to define  $c^{\text{int}}[u]$  with  $f(x) = E(u(x, t)) - Px$ .

We denote  $\text{Lip}(\mathbb{R})$  the space of Lipschitz continuous functions on  $\mathbb{R}$ .

### 1.2.1 Existence and uniqueness of a continuous solution

We consider the following assumptions for the kernel  $c^0$  :

$$\begin{cases} c^0 \in W^{1,1}(\mathbb{R}) \cap L^\infty_{\text{int}}(\mathbb{R}) \\ c^0(x) = c^0(-x) \text{ and } \int_{\mathbb{R}} c^0(x) dx = 0. \end{cases} \quad (3.5)$$

One can check easily that the kernel given in (3.4) satisfies (3.5). We consider the initial condition  $u^0 \in \text{Lip}(\mathbb{R})$  such that for  $x \in \mathbb{R}$

$$u^0(x+1) = u^0(x) + P \quad \text{and} \quad 0 < b_0 \leq u^0_x \leq B_0 < +\infty \quad a.e. \quad (3.6)$$

with  $b_0$  and  $B_0$  some constants and  $P \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$ . This condition means in particular that dislocations are periodically distributed. As mentioned above, in order to study the solutions of (3.1), we use the theory of continuous viscosity solutions (see [7,10]). Our first main result is :

### Theorem 1.3 (Long time existence and uniqueness of the solution)

Under Assumptions (3.3), (3.5), (3.6), there exists a unique continuous viscosity solution  $u \in W^{1,\infty}_{\text{loc}}(\mathbb{R} \times [0, +\infty))$  of (3.1), (3.2) satisfying  $u(x+1, t) = u(x, t) + P$ .

In [5], a short time existence and uniqueness result is given for a 2D problem for a single dislocation line. Because in the present work our problem is one-dimensional, we are able to get a refined result for the dynamics of several dislocations in interaction, namely the existence and uniqueness of a solution for all time.

Let us mention that under the more restrictive assumptions that the velocity  $c[u]$  is nonnegative it is proved in [1, 9] the existence and uniqueness of a solution for all time.

In the special case where the kernel  $c^0$  is assumed nonnegative some existence and uniqueness results for all time in any dimension, are available in a "Slepčev formulation" (see [8, 14]). The previous theorem will be proved in two steps. First, we will prove the result for short time (see for instance [17]) using a fixed point theorem. Secondly, we will repeat this short time result on a sequence of time intervals of lengths  $T_n$  decreasing to zero, such that  $\sum_{n \in \mathbb{N}} T_n = +\infty$ .

**Remark 1.4** *Let us mention three remaining open problems.*

- *When the initial data  $u^0$  is not monotone, the existence and uniqueness of the solution for all time is an open question.*
- *We do not know the behavior of the solution as  $t \rightarrow +\infty$ .*
- *If we replace  $\frac{\partial u}{\partial x}$  in Equation (3.1) by its absolute value, then we have a non-local Hamilton-Jacobi equation. Physically, the absolute value would allow to consider the possible annihilation of two dislocations associated to opposed jumps of  $E(u)$ . The existence and uniqueness of a solution for all time is an open question in the general case. Nevertheless, in the whole paper we will only consider the case of solutions  $u$  monotone in space which allows to forget the absolute value.*

### 1.2.2 Convergence of a numerical scheme

We build a finite difference scheme of order one in space and time

- by assuming that it is upwind,
- by approximating the non-local term  $c^0 \star E(u(\cdot, t))$  by a discrete convolution,
- using an explicit Euler scheme in time.

Given a mesh size  $\Delta x$ ,  $\Delta t$  and a lattice  $I_d = \{(i\Delta x, n\Delta t); i \in \mathbb{Z}, n \in \mathbb{N}\}$ ,  $(x_i, t_n)$  denotes the node  $(i\Delta x, n\Delta t)$  and  $v^n = (v_i^n)_i$  the values of the numerical approximation of the continuous solution  $u(x_i, t_n)$ . We then consider the following numerical scheme :

$$v_i^0 = u^0(x_i), \quad v_i^{n+1} = v_i^n + \Delta t c_i(v^n) \times \begin{cases} D_x^+ v_i^n & \text{if } c_i(v^n) \geq 0 \\ D_x^- v_i^n & \text{if } c_i(v^n) < 0 \end{cases} \quad (3.7)$$

with

$$D_x^+ v_i^n = \frac{v_{i+1}^n - v_i^n}{\Delta x}, \quad D_x^- v_i^n = \frac{v_i^n - v_{i-1}^n}{\Delta x} \quad (3.8)$$

and  $c_i(v^n)$  is defined below.

We choose  $\Delta x = \frac{1}{K}$ ,  $K \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$  because of the 1-periodicity in space. We denote  $c_i^{\text{ext}} = c^{\text{ext}}(x_i)$  which satisfies  $c_{i+K}^{\text{ext}} = c_i^{\text{ext}}$ . The discrete velocity is

$$c_i(v^n) = c_i^{\text{ext}} + c_i^{\text{int},n} \quad \text{with} \quad c_i^{\text{int},n} = \sum_{l \in \mathbb{Z}} c_l^0 E(v_{i-l}^n) \Delta x \quad (3.9)$$

where

$$c_i^0 = \frac{1}{\Delta x} \int_{I_i} c^0(x) dx \quad \text{and} \quad I_i = \left[ x_i - \frac{\Delta x}{2}, x_i + \frac{\Delta x}{2} \right]. \quad (3.10)$$

We are interested in solutions  $v^n$  satisfying  $v_{i+K}^n = v_i^n + P$  for all  $i \in \mathbb{Z}$ . Then we can check that the discrete velocity satisfies  $c_{i+K}(v^n) = c_i(v^n)$ .

Note that the global scheme  $v^{n+1} = S(v^n)$  given by (3.7) is not monotone in general because the velocity  $c_i(v^n)$  depends non-monotonically on the solution  $v^n$  itself (here some  $c_i^0$  are nonpositive because we assumed that  $\int_{\mathbb{R}} c^0(x) dx = 0$ ).

We assume that the mesh satisfies the following CFL (Courant, Friedrichs, Lévy) condition

$$\Delta t < \frac{\Delta x}{4 \left( |c^{\text{ext}}|_{L^\infty(\mathbb{R})} + P |c^0|_{L^1(\mathbb{R})} \right)}. \quad (3.11)$$

Our second main result is

**Theorem 1.5 (Error estimate)**

*Let  $u$  be the continuous viscosity solution of Problem (3.1), (3.2) under Assumptions (3.3), (3.5), (3.6). Let  $v$  be the discrete solution of the associated finite difference scheme (3.7)-(3.10). Assume that the time step  $\Delta t$  satisfies*

$$\Delta t = \alpha \Delta x \quad \text{with} \quad 0 < \alpha < \frac{1}{4 \left( |c^{\text{ext}}|_{L^\infty(\mathbb{R})} + P |c^0|_{L^1(\mathbb{R})} \right)}. \quad (3.12)$$

*Then, there exists two constants  $T_1, C > 0$ , depending on  $\alpha, |c^{\text{ext}}|_{W^{1,\infty}(\mathbb{R})}, P, |c^0|_{W^{1,1}(\mathbb{R})}, |c^0|_{L^\infty_{\text{int}}(\mathbb{R})}, B^0$  and  $b^0$  in (3.6), such that :*

$$\sup_{i \in \mathbb{Z}} |u(i\Delta x, n\Delta t) - v_i^n| \leq C |\Delta x|^{1/2} \quad \text{for all } n \leq \frac{T_1}{\Delta t} \quad \text{if } \Delta x \leq \frac{T_1}{C}.$$

The proof of this theorem is based on the ideas of Crandall and Lions [13] adapted to the case of non-local equations (see [2]).

Extensive simulations of dislocations dynamics will be provided in [16].

### 1.3 Brief review of the literature

Let us recall that, in the 1980's, the notion of viscosity solution was first introduced by Crandall and Lions in [11] for first order Hamilton-Jacobi equations. For an introduction to this notion, see in particular the books of Barles [7], and of Bardi and Capuzzo-Dolcetta [6].

Recently, Alvarez, Hoch, Le Bouar and Monneau [4, 5] used this theory for the resolution of a non-local Hamilton-Jacobi equation modelling dislocation dynamics. They proved results of short time existence and uniqueness of a discontinuous viscosity solution. Their results are mainly valid for dislocations with the shape of graphs and loops and they used the level set approach, which was introduced by Osher and Sethian [19]. As already mentioned, in the situation where the non-local velocity is nonnegative, Barles and Ley [9] proved that the existence and uniqueness is valid for any time interval for a level set formulation. Still in the case of nonnegative velocity an approach for discontinuous viscosity solution was developed by Alvarez, Cardaliaguet and Monneau [1]. Let us mention, for dislocations dynamics with mean curvature terms, Forcadel in [15] proved a short time existence and uniqueness result.

A numerical analysis was done by Crandall and Lions [13], for approximations of solutions of Hamilton-Jacobi equations. Convergence of a first order scheme for an abstract non-local eikonal equation was proved by Alvarez, Carlini, Monneau and Rouy [2]. They also applied this convergence result for the numerical analysis of a non-local Hamilton-Jacobi equation in [3] describing the dynamics of a single dislocation in 2D.

#### 1.3.1 Organization of the paper

In Section 2, we give some properties of the solution of an auxiliary local equation, *i.e.* an eikonal equation where the velocity is assumed to be a given function independent on the solution. In Section 3, we give some properties of the non-local velocity. The existence and uniqueness result of a continuous solution, *i.e.* Theorem 1.3, is then proved in Section 4. We give preliminary results for the discrete local problem in Section 5 and for the discrete non-local velocity in Section 6. Theorem 1.5 about the error estimate is proved in Section 7. Finally in Section 8 we give some simulations.

## 2 Preliminary results for the eikonal equation with prescribed velocity

In this section, we start by recalling the notion of viscosity solution of an eikonal equation. We then give some properties of the solution of a such equation.

Let  $T > 0$ . Consider the following problem

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = c(x, t) \left| \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) \right| & \text{in } \mathbb{R} \times (0, T), \\ u(x, 0) = u_0(x) & \text{on } \mathbb{R}. \end{cases} \quad (3.13)$$

We make the following assumptions :

- a) the velocity  $c : \mathbb{R} \times (0, T) \longrightarrow \mathbb{R}$  is bounded, Lipschitz continuous in space and in time,
- b) the initial data  $u_0 \in \text{Lip}(\mathbb{R})$ .

We recall the notions of viscosity subsolutions, supersolutions and solutions for (3.13) (see [10]). We denote

$$\begin{aligned} \text{USC}(\mathbb{R} \times [0, T)) &= \{u : \mathbb{R} \times [0, T) \longrightarrow \mathbb{R}, \text{ locally bounded, upper semicontinuous}\} \\ &\text{and} \\ \text{LSC}(\mathbb{R} \times [0, T)) &= \{u : \mathbb{R} \times [0, T) \longrightarrow \mathbb{R}, \text{ locally bounded, lower semicontinuous}\}. \end{aligned}$$

We then define

### Definition 2.1 (Viscosity subsolution, supersolution and solution)

1) A function  $u \in \text{USC}(\mathbb{R} \times [0, T))$  is a viscosity subsolution of (3.13) if the following properties hold :

- i)  $u(x, 0) \leq u_0(x)$  in  $\mathbb{R}$ ,
- ii) for every  $(x_0, t_0) \in \mathbb{R} \times (0, T)$  and for every test function  $\varphi \in C^1(\mathbb{R} \times (0, T))$  such that  $u - \varphi$  has a local maximum at  $(x_0, t_0)$ , we have

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t}(x_0, t_0) \leq c(x_0, t_0) \left| \frac{\partial \varphi}{\partial x}(x_0, t_0) \right|.$$

2) A function  $u \in \text{LSC}(\mathbb{R} \times [0, T))$  is a viscosity supersolution of (3.13) if the following properties hold :

- i)  $u(x, 0) \geq u_0(x)$  in  $\mathbb{R}$ ,
- ii) for every  $(x_0, t_0) \in \mathbb{R} \times (0, T)$  and for every test function  $\phi \in C^1(\mathbb{R} \times (0, T))$  such that  $u - \phi$  has a local minimum at  $(x_0, t_0)$ , we have

$$\frac{\partial \phi}{\partial t}(x_0, t_0) \geq c(x_0, t_0) \left| \frac{\partial \phi}{\partial x}(x_0, t_0) \right|.$$

3) A function  $u \in C(\mathbb{R} \times [0, T])$  is a continuous viscosity solution of (3.13) if it is both a viscosity subsolution and a viscosity supersolution of (3.13).

We have the following *a priori* estimates for the solution of the eikonal equation. These estimates are may be quite classical, and part of them is already proved in [5], but we give a proof for sake of completeness.

**Proposition 2.2 (a priori estimates for the solution of the eikonal equation)**

Assume that  $c \in W^{1,\infty}(\mathbb{R} \times [0, T])$  and  $u_0 \in \text{Lip}(\mathbb{R})$  such that  $|(u_0)_x| \leq B_0$  a.e. and  $(u_0)_x \geq b_0$  a.e. for some  $B_0 > b_0 > 0$ . Then, there exists a unique continuous viscosity solution  $u$  on  $\mathbb{R} \times [0, T]$  of problem (3.13). Moreover,  $u \in \text{Lip}(\mathbb{R} \times [0, T])$ . With  $L_c := L_c(t) = |c_x(\cdot, t)|_{L^\infty(\mathbb{R})}$ ,  $B(t) = B_0 e^{L_c t}$  and  $b(t) = b_0 e^{-L_c t}$ , we have the following estimates

i) for every  $0 \leq t < T$ ,

$$|u_x(x, t)| \leq B(t) \quad \text{a.e.}$$

and

$$u_x(x, t) \geq b(t) \quad \text{a.e.}$$

ii) Moreover

$$|u_t(x, t)| \leq |c|_{L^\infty(\mathbb{R} \times (0, T))} B(t) \quad \text{a.e.}$$

PROOF OF PROPOSITION 2.2

We refer to [7, Theorem 2.8, page 38] for the proof of existence and uniqueness of a solution  $u$ . We introduce the double variables  $(x, y) \in \mathbb{R}^2$  and set the half-plane  $\Omega = \{x \geq y\}$ . Consider the following problem

$$\begin{cases} w_t(x, y, t) = c(x, t) |w_x(x, y, t)| - c(y, t) |w_y(x, y, t)| & \text{in } \Omega \times (0, T), \\ w(x, y, 0) = u(x, 0) - u(y, 0) & \text{in } \Omega, \\ w(x, x, t) = 0 & \text{on } \partial\Omega \times (0, T). \end{cases} \quad (3.14)$$

Then,  $w(x, y, t) = u(x, t) - u(y, t)$  is a continuous viscosity solution of Problem (3.14) (we refer to [12, Lemma 2, page 357] for a proof).

Let  $\Phi(x, y, t) = B(t)(x - y)$ . Then, we have

**Claim 1 :**  $\Phi$  is a (viscosity) supersolution of Problem (3.14).

As a matter of fact, since  $\Phi$  is smooth,  $\Phi$  is a classical supersolution of Problem (3.14). Indeed, on the one hand, we have

$$w(x, y, 0) = u(x, 0) - u(y, 0) \leq B_0(x - y) = \Phi(x, y, 0)$$

and

$$w(x, x, t) = 0 = \Phi(x, x, t).$$

## 2. Preliminary results for the eikonal equation with prescribed velocity

---

On the other hand, we have

$$\begin{aligned}\Phi_t - c(x, t) |\Phi_x| + c(y, t) |\Phi_y| &= L_c B_0 e^{L_c t} (x - y) - c(x, t) B_0 e^{L_c t} + c(y, t) B_0 e^{L_c t} \\ &= B_0 e^{L_c t} (-c(x, t) + c(y, t) + L_c (x - y)) .\end{aligned}$$

Moreover,

$$|c(x, t) - c(y, t)| \leq L_c |x - y| \quad \text{and} \quad x \geq y$$

implies

$$c(x, t) - c(y, t) \leq L_c (x - y).$$

We then obtain

$$\Phi_t - c(x, t) |\Phi_x| + c(y, t) |\Phi_y| \geq 0 .$$

This proves claim 1.

Let  $\varphi(x, y, t) = b_0 e^{-L_c t} (x - y)$ . Then we have

**Claim 2 :**  $\varphi$  is a (viscosity) subsolution of the Problem (3.14).

The proof is similar to the proof of claim 1 and we skip it.

By the comparison principle (see [7, Theorem 2.10, page 47]) :

a)

$$w(x, y, t) \leq \Phi(x, y, t)$$

*i.e.*

$$u(x, t) - u(y, t) \leq B(t)(x - y) \quad \text{for } (x, y, t) \in \Omega \times (0, T) \quad (3.15)$$

b) and

$$\varphi(x, y, t) \leq w(x, y, t)$$

*i.e.*

$$b(t)(x - y) \leq u(x, t) - u(y, t) \quad \text{for } (x, y, t) \in \Omega \times (0, T) \quad (3.16)$$

We deduce that

$$0 \leq b(t)(x - y) \leq u(x, t) - u(y, t) \leq B(t)(x - y) \leq B(t) |x - y| \quad \text{for all } (x, y, t) \in \Omega \times (0, T) . \quad (3.17)$$

Passing to the limit in (3.17), by Rademacher's Theorem [7], we get

$$0 \leq b(t) \leq u_x(x, t) \leq B(t) \quad \text{for a.e. } (x, t) \in \Omega \times [0, T) .$$

We now prove the Lipschitz in time estimate. Let  $(x_0, t_0) \in \mathbb{R} \times (0, T)$  and  $\varphi \in C^1(\mathbb{R} \times (0, T))$  such that  $u - \varphi$  has a local maximum at  $(x_0, t_0)$ . We show that

$$\varphi_t \leq |c|_{L^\infty(\mathbb{R} \times (0, T))} B(t_0) . \quad \text{From } \frac{\varphi(x_0, t_0) - \varphi(x, t_0)}{|x - x_0|} \leq \frac{u(x_0, t_0) - u(x, t_0)}{|x - x_0|} \quad \text{and } (3.17)$$

we obtain

$$\varphi_x(x_0, t_0) \leq B(t_0)$$



and then

$$\varphi_t(x_0, t_0) \leq c(x_0, t_0) |\varphi_x(x_0, t_0)| \leq |c|_{L^\infty(\mathbb{R} \times (0, T))} |\varphi_x(x_0, t_0)| \leq |c|_{L^\infty(\mathbb{R} \times (0, T))} B(t_0).$$

Let  $\Phi \in C^1(\mathbb{R} \times (0, T))$  such that  $u - \varphi$  has a local maximum at  $(x_0, t_0) \in \mathbb{R} \times (0, T)$ . Similarly, we check easily that  $\Phi_t \geq -|c|_{L^\infty(\mathbb{R} \times (0, T))} B(t_0)$ . Therefore, we have

$$\varphi_t \leq |c|_{L^\infty(\mathbb{R} \times (0, T))} B(t_0) \quad \text{and} \quad \Phi_t \geq -|c|_{L^\infty(\mathbb{R} \times (0, T))} B(t_0).$$

We conclude that

$$|u_t| \leq |c|_{L^\infty(\mathbb{R} \times (0, T))} B(t_0) \quad \text{in the viscosity sense.}$$

□

We now give a stability result.

**Proposition 2.3 (Stability of the solution by perturbation of the velocity)**

Let  $v^i$ ,  $i = 1, 2$ , be a viscosity solution of the problem

$$\begin{cases} v_t^i(x, t) = c^i(x, t) |v_x^i(x, t)| & \text{in } \mathbb{R} \times [0, T], \\ v^i(x, 0) = u_0(x) & \text{on } \mathbb{R}, \end{cases} \quad (3.18)$$

where  $c^i \in W^{1, \infty}(\mathbb{R} \times [0, T])$  and  $u_0 \in \text{Lip}(\mathbb{R})$ . Then,

$$|v^1 - v^2|_{L^\infty(\mathbb{R} \times [0, T])} \leq \int_0^T ds |c^2(\cdot, s) - c^1(\cdot, s)|_{L^\infty(\mathbb{R})} \max \left( |v_x^1(\cdot, s)|_{L^\infty(\mathbb{R})}, |v_x^2(\cdot, s)|_{L^\infty(\mathbb{R})} \right). \quad (3.19)$$

This result has been proved in [5]. For sake of completeness we give it here.

**PROOF OF PROPOSITION 2.3**

We denote  $\bar{v}^2(x, t) = v^2(x, t) - \int_0^t |c^2(\cdot, s) - c^1(\cdot, s)|_{L^\infty(\mathbb{R})} |v_x^2(\cdot, s)|_{L^\infty(\mathbb{R})} ds$ . We want

to prove that  $\bar{v}^2$  is a viscosity subsolution of the equation satisfied by  $v^1$ . We denote  $I(v) = v_t - c^1(x, t) |v_x|$ . Formally,  $I(v^1) = 0$  and  $I(v^2) = v_t^2 - c^1(x, t) |v_x^2| = (c^2(x, t) - c^1(x, t)) |v_x^2|$ . We show that  $I(v^2) \leq |c^2(\cdot, t) - c^1(\cdot, t)|_{L^\infty(\mathbb{R})} |v_x^2(\cdot, t)|_{L^\infty(\mathbb{R})}$  in the viscosity sense. Indeed, let  $\varphi \in C^1(\mathbb{R} \times (0, T))$  such that  $v^2 - \varphi$  has a local maximum at  $(x_0, t_0) \in \mathbb{R} \times (0, T)$ . Then,

$$I(\varphi) = \varphi_t - c^1(x, t) |\varphi_x| \leq (c^2(x, t) - c^1(x, t)) |\varphi_x| \leq |c^2(\cdot, t) - c^1(\cdot, t)|_{L^\infty(\mathbb{R})} |\varphi_x|.$$

Similarly, setting  $\Phi \in C^1(\mathbb{R} \times (0, T))$  such that  $v^2 - \Phi$  has a local minimum at  $(x_0, t_0) \in \mathbb{R} \times (0, T)$ , we have

$$I(\Phi) \geq -|c^2(\cdot, t) - c^1(\cdot, t)|_{L^\infty(\mathbb{R})} |\Phi_x|.$$

Moreover, at  $t = 0$ , we have  $\bar{v}^2 = v^2 = u_0 = v^1$ . Hence, we deduce that  $\bar{v}^2$  is a subsolution of the equation satisfied by  $v^1$ . Then, by the comparison principle [7], for all  $t \in [0, T]$ , we have  $\bar{v}^2 \leq v^1$  *i.e.*

$$v^2(x, t) - v^1(x, t) \leq \int_0^t |c^2(\cdot, s) - c^1(\cdot, s)|_{L^\infty(\mathbb{R})} |v_x^2(\cdot, s)|_{L^\infty(\mathbb{R})} ds.$$

Similarly we prove the inequality  $\bar{v}^1 \geq v^2$  which leads to

$$v^2(x, t) - v^1(x, t) \geq - \int_0^t |c^2(\cdot, s) - c^1(\cdot, s)|_{L^\infty(\mathbb{R})} |v_x^1(\cdot, s)|_{L^\infty(\mathbb{R})} ds.$$

We conclude that

$$|v^2 - v^1|_{L^\infty(\mathbb{R} \times [0, T])} \leq \int_0^T |c^2(\cdot, s) - c^1(\cdot, s)|_{L^\infty(\mathbb{R})} \max \left( |v_x^1(\cdot, s)|_{L^\infty(\mathbb{R})}, |v_x^2(\cdot, s)|_{L^\infty(\mathbb{R})} \right) ds.$$

□

## 3 Properties of the non-local velocity

The goal of this section is to prove the following estimate, which will be used in Section 4.

**Proposition 3.1 (Estimate on the difference of integer parts in the continuous case)**

Let  $\rho^1 \in C(\mathbb{R})$  such that

i)

$$\rho^1(x+1) = \rho^1(x) + P \quad \text{where } P \in \mathbb{N} \setminus \{0\}, \quad (3.20)$$

ii) there exists constants  $B \geq b > 0$  such that  $b \leq \rho_x^1 \leq B$  in the distribution sense.

Let  $\rho^2 \in L_{\text{loc}}^\infty(\mathbb{R})$  satisfying (3.20). Then,

$$|E(\rho^2) - E(\rho^1)|_{L_{\text{unif}}^1(\mathbb{R})} \leq \frac{2}{b} \left( P + |\rho^2 - \rho^1|_{L^\infty(\mathbb{R})} \right) |\rho^2 - \rho^1|_{L^\infty(\mathbb{R})}. \quad (3.21)$$

**Remark 3.2** Note that if  $|\rho^2 - \rho^1|_{L^\infty(\mathbb{R})} \leq 1 \leq P$  then the previous estimate (3.21) becomes

$$|E(\rho^2) - E(\rho^1)|_{L_{\text{unif}}^1(\mathbb{R})} \leq \frac{4P}{b} |\rho^2 - \rho^1|_{L^\infty(\mathbb{R})}.$$

We will use this estimate later.

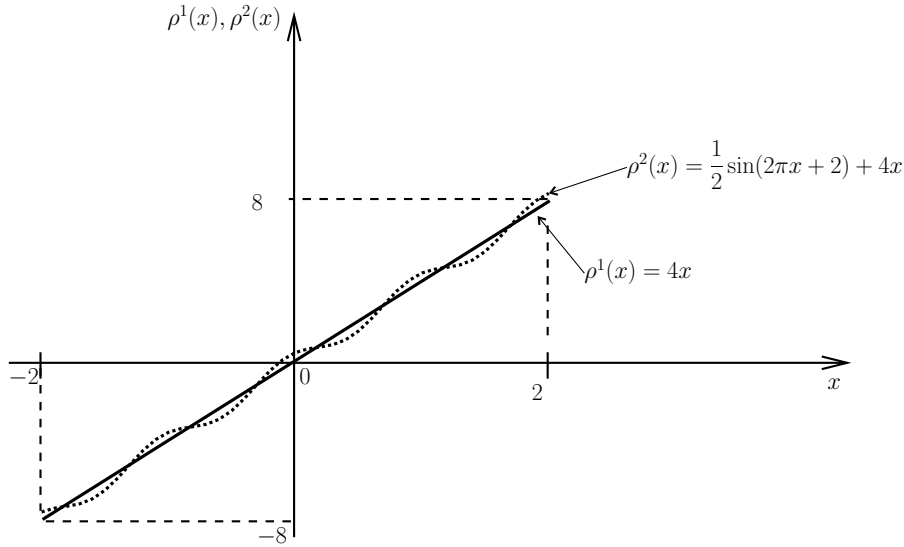


FIG. 3.2 – example of functions  $\rho^1$  and  $\rho^2$  satisfying (3.20)

This result is the generalization of Lemma 4.2 in [3] to the case of several dislocations where the characteristic function  $\rho^i > 0$  is replaced with the floor part  $E(\rho^i)$ . To do the proof of Proposition 3.1 we need to introduce the following notations.

We denote  $\Lambda = |\rho^2 - \rho^1|_{L^\infty(\mathbb{R})}$  and we assume that  $\Lambda \in (0, +\infty)$  (other cases are trivial). For  $k \in \mathbb{Z}$ , we denote, for  $i = 1, 2$ ,

$$E_k^i = \{x \in \mathbb{R}, \rho^i(x) < k + 1\}.$$

First, we remark that since  $\rho_x^1 \geq b > 0$  and  $\rho^1$  is continuous, there exists a unique  $a_k \in \mathbb{R}$  such that  $\rho^1(a_k) = k + 1$  and we have  $E_k^1 = (-\infty, a_k)$ . We will use the following lemma for the proof of Proposition 3.1.

**Lemma 3.3 (Estimate of the distance between the sets  $E_k^1$  and  $E_k^2$ )**

*With the notations introduced above and the assumptions of Proposition 3.1, we have*

$$E_k^1 - \frac{\Lambda}{b} \subset E_k^2 \subset E_k^1 + \frac{\Lambda}{b}.$$

**PROOF OF LEMMA 3.3**

The main idea in this proof is to use the minoration of the gradient of the function  $\rho^1$ , i.e.  $\rho_x^1 \geq b > 0$ .

Let us first check that  $E_k^1 - \frac{\Lambda}{b} \subset E_k^2$ . Let  $x \in E_k^1 - \frac{\Lambda}{b}$ . Then,  $x < a_k - \frac{\Lambda}{b}$  i.e.

$\Lambda < b(a_k - x)$ . Since  $\rho_x^1 \geq b > 0$  and  $a_k - x > 0$ , we have

$$\rho^1(a_k) - \rho^1(x) \geq b(a_k - x)$$

### 3. Properties of the non-local velocity

---

which implies (by definition of  $\Lambda$ )

$$k + 1 = \rho^1(a_k) > \rho^1(x) + \Lambda \geq \rho^2(x)$$

and therefore

$$k + 1 > \rho^2(x).$$

Thus,  $x \in E_k^2$  for every  $x \in E_k^1 - \frac{\Lambda}{b}$  and therefore  $E_k^1 - \frac{\Lambda}{b} \subset E_k^2$  (see Figure 3.2). The second inclusion can be proved similarly.  $\square$

#### PROOF OF PROPOSITION 3.1

The main idea in this proof is to bound the function  $|E(\rho^2(x)) - E(\rho^1(x))|$  by the characteristic functions of the sets  $E_k^2 \Delta E_k^1$ . We then bound its  $L^1_{\text{unif}}$ -norm.

From the definition of  $E_k^i$ , for  $i = 1, 2$ , we remark that  $E_{k-1}^i \subset E_k^i$  then  $E(\rho^i(x)) = k$  if  $x \in E_k^i \setminus E_{k-1}^i$ , for  $i = 1, 2$ . We can write

$$E(\rho^i(x)) = \sum_{k \in \mathbb{N}} 1_{(E_k^i)^c}(x) - \sum_{k \in \mathbb{Z} \setminus \mathbb{N}} 1_{E_k^i}(x).$$

Then,

$$E(\rho^2(x)) - E(\rho^1(x)) = \sum_{k \in \mathbb{N}} \left( 1_{(E_k^2)^c}(x) - 1_{(E_k^1)^c}(x) \right) - \sum_{k \in \mathbb{Z} \setminus \mathbb{N}} \left( 1_{E_k^2}(x) - 1_{E_k^1}(x) \right).$$

Therefore,

$$|E(\rho^2(x)) - E(\rho^1(x))| \leq \sum_{k \in \mathbb{N}} 1_{(E_k^2)^c \Delta (E_k^1)^c}(x) + \sum_{k \in \mathbb{Z} \setminus \mathbb{N}} 1_{E_k^2 \Delta E_k^1}(x) \quad \text{a.e.}$$

$$|E(\rho^2(x)) - E(\rho^1(x))| \leq \sum_{k \in \mathbb{Z}} 1_{E_k^2 \Delta E_k^1}(x) \quad \text{a.e.} \quad (3.22)$$

where  $E_k^2 \Delta E_k^1 = (E_k^2 \setminus E_k^1) \cup (E_k^1 \setminus E_k^2) = (E_k^2)^c \Delta (E_k^1)^c$ . By Lemma 3.3,  $|E_k^2 \Delta E_k^1| \leq \frac{2\Lambda}{b}$ . Then, we estimate for every  $x \in \mathbb{R}$  with  $I(x) = (x - \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2})$ .

$$\begin{aligned} |E(\rho^2) - E(\rho^1)|_{L^1(I(x))} &\leq \sum_{k \in \mathbb{Z}} |I(x) \cap (E_k^2 \Delta E_k^1)| \\ &\leq N' \frac{2\Lambda}{b} \end{aligned} \quad (3.23)$$

where

$$N' = \text{Card} \{k \in \mathbb{Z}, |I(x) \cap (E_k^2 \Delta E_k^1)| \neq 0\}.$$

Let us assume that there exists  $k \in \mathbb{Z}$  such that  $|I(x) \cap (E_k^2 \Delta E_k^1)| \neq 0$ . Then there exists  $x^1 \in I(x)$  such either  $x^1 \in (E_k^1 \setminus E_k^2)$  or  $x^1 \in (E_k^2 \setminus E_k^1)$ . In the second case ( $x^1 \in (E_k^2 \setminus E_k^1)$ ), one can check easily on Figure 3.2 that the number of  $k$  is less than  $P + |\rho^2 - \rho^1|_{L^\infty(\mathbb{R})}$ . Therefore

$$N' \leq P + |\rho^2 - \rho^1|_{L^\infty(\mathbb{R})} . \quad (3.24)$$

Taking the supremum on  $x \in \mathbb{R}$ , we get

$$|E(\rho^2) - E(\rho^1)|_{L^1_{\text{unif}}(\mathbb{R})} \leq \frac{2}{b} \left( P + |\rho^2 - \rho^1|_{L^\infty(\mathbb{R})} \right) |\rho^2 - \rho^1|_{L^\infty(\mathbb{R})} .$$

□

We recall the following result (we refer to [5] for a proof).

**Lemma 3.4 (Norm of the product of convolution)**

For every  $f \in L^1_{\text{unif}}(\mathbb{R})$  and  $g \in L^\infty_{\text{int}}(\mathbb{R})$ , the convolution product  $f \star g$  is bounded and satisfies

$$|f \star g|_{L^\infty(\mathbb{R})} \leq |f|_{L^1_{\text{unif}}(\mathbb{R})} |g|_{L^\infty_{\text{int}}(\mathbb{R})} . \quad (3.25)$$

We now present some properties of the non-local velocity.

**Lemma 3.5 (Properties of the non-local velocity)**

Recall that  $c^{\text{int}}[u](x, t) = c^0 \star (E(u(\cdot, t)) - P \cdot)(x)$  is a convolution on  $\mathbb{R}$ . We assume that  $c^0$  is a kernel in  $W^{1,1}(\mathbb{R}) \cap L^\infty_{\text{int}}(\mathbb{R})$  satisfying  $\int_{\mathbb{R}} c^0(x) dx = 0$ . Then we have the following properties :

1. the convolution  $c^{\text{int}}$  is well defined if  $u_x \geq 0$  a.e. and if  $u(x+1, t) = u(x, t) + P$  with  $P \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$  ;
2. Moreover, the function  $c^{\text{int}}$  is 1-periodic in space, i.e.  $c^{\text{int}}[u](x+1, t) = c^{\text{int}}[u](x, t)$ . We also have  $c^{\text{int}} \in L^\infty((0, T), W^{1,\infty}(\mathbb{R}))$ , i.e. more precisely

$$|c^{\text{int}}[u](\cdot, t)|_{L^\infty(\mathbb{R})} \leq P |c^0|_{L^1(\mathbb{R})} \quad \text{and} \quad |c^{\text{int}}_x[u](\cdot, t)|_{L^\infty(\mathbb{R})} \leq P |(c^0)_x|_{L^1(\mathbb{R})} ;$$

3. if there exists  $A > 0$  such that  $|u(x, t) - u(x, s)| \leq A |t - s|$  for a.e.  $t, s \in (0, T)$  and  $u_x \geq b$  a.e. then  $c^{\text{int}}$  is Lipschitz continuous in time with Lipschitz constant  $\frac{4AP}{b} |c^0|_{L^\infty_{\text{int}}(\mathbb{R})}$  i.e.

$$|c^{\text{int}}(x, t) - c^{\text{int}}(x, s)| \leq \frac{4AP}{b} |c^0|_{L^\infty_{\text{int}}(\mathbb{R})} |t - s| .$$

PROOF OF LEMMA 3.5

### 3. Properties of the non-local velocity

---

1. From  $u(x+1, t) = u(x, t) + P$  we deduce that  $E(u(x+1, t)) = E(u(x, t)) + P$  and  $E(u(x+1, t)) - P(x+1) = E(u(x, t)) - Px$ . Since  $\int_{\mathbb{R}} c^0(x) dx = 0$ ,  $(c^0 \star P)(x) = 0$  and then  $c^0 \star (E(u(\cdot, t)) - P \cdot)(x+1) = c^0 \star (E(u(\cdot, t)) - P \cdot)(x)$ . Point 1 is therefore proved.
2. Since  $u(x+1, t) = u(x, t) + P$  and  $u_x \geq 0$  for a.e.  $(x, t) \in \mathbb{R} \times [0, +\infty)$ , we have

$$u(0, t) \leq u(x, t) \leq u(1, t) = u(0, t) + P \quad \text{for all } (x, t) \in [0, 1[ \times [0, +\infty).$$

Passing to the floor part, for  $x \in [0, 1[$  we obtain

$$E(u(0, t)) \leq E(u(x, t)) \leq E(u(0, t)) + P.$$

Then

$$-P \leq 0 \leq E(u(x, t)) - E(u(0, t)) \leq P$$

and then  $|E(u(x, t)) - E(u(0, t))| \leq P$  for every  $x \in [0, 1[$  and every  $t \geq 0$ . Remark first that  $c^0 \star E(u(\cdot, t))(x) = c^0 \star (E(u(\cdot, t)) - E(u(0, t)))(x)$  because  $\int_{\mathbb{R}} c^0(x) dx = 0$ . Then

$$\begin{aligned} c^0 \star (E(u(\cdot, t)) - P \cdot)(x) &= \int_{\mathbb{R}} dy c^0(x-y) (E(u(y, t)) - Py - E(u(0, t))) \\ &= \sum_{k \in \mathbb{Z}} \int_k^{k+1} dy c^0(x-y) (E(u(y, t)) - Py - E(u(0, t))) \\ &= \sum_{k \in \mathbb{Z}} \int_0^1 dy c^0(x-y-k) (E(u(y+k, t)) - P(y+k) - E(u(0, t))) \\ &= \sum_{k \in \mathbb{Z}} \int_0^1 dy c^0(x-y-k) (E(u(y, t)) - Py - E(u(0, t))). \end{aligned}$$

Since  $E(u(y, t)) - E(u(0, t)) \leq P$  for  $y \in [0, 1[$ , we deduce

$$\begin{aligned} c^0 \star (E(u(\cdot, t)) - P \cdot)(x) &\leq \sum_{k \in \mathbb{Z}} \int_0^1 dy P(1-y) c^0(x-y-k) \\ &\leq P \int_{\mathbb{R}} dy c^0(x-y) = P \int_{\mathbb{R}} dy' c^0(y') \\ &\leq P |c^0|_{L^1(\mathbb{R})}. \end{aligned}$$

where for the last inequality we have used that  $c^0(-x) = c^0(x)$  for all  $x \in \mathbb{R}$  and  $\int_{\mathbb{R}} c^0(x) dx = 0$ . We now show that  $c_x^{\text{int}}$  is bounded on  $\mathbb{R} \times (0, T)$ . Indeed,  $c_x^{\text{int}} = (c^0)_x \star E(u)$ . Similarly, we get

$$|c_x^{\text{int}}|_{L^\infty(\mathbb{R})} \leq P |(c^0)_x|_{L^1(\mathbb{R})} .$$

3. We now prove the Lipschitz continuity in time of  $c^{\text{int}}$ . Let  $x \in \mathbb{R}$ ,  $0 < t, s < T$ . Then we have

$$\begin{aligned} |c^{\text{int}}[u](x, t) - c^{\text{int}}[u](x, s)| &= |c^0 \star (E(u(\cdot, t)) - E(u(\cdot, s)))(x)| \\ &\leq |c^0|_{L_{\text{int}}^\infty(\mathbb{R})} |E(u(\cdot, t)) - E(u(\cdot, s))|_{L_{\text{unif}}^1(\mathbb{R})} \\ &\leq \frac{4P}{b} |c^0|_{L_{\text{int}}^\infty(\mathbb{R})} |u(\cdot, t) - u(\cdot, s)|_{L^\infty(\mathbb{R})} \\ &\leq \frac{4AP}{b} |c^0|_{L_{\text{int}}^\infty(\mathbb{R})} |t - s| , \end{aligned}$$

where we have used successively Lemma 3.4, Proposition 3.1 (see Remark 3.2) and the Lipschitz continuity of  $u$  we assumed to hold. □

## 4 Proof of Theorem 1.3

We prove Theorem 1.3 in two main steps. In a first step (see subsection 4.1), we prove existence and uniqueness for short time, using a fixed point theorem. In a second step (see subsection 4.2), we extend the result for all time, by repeating the argument on successive time intervals. We need to recall Lemma 2.8 of Barles [7].

**Lemma 4.1** *Let  $H$  be a continuous Hamiltonian. If  $u \in C(\bar{\Omega} \times [0, T])$  is a subsolution (respectively supersolution) of the problem*

$$\frac{\partial u}{\partial t} + H(x, t, Du) = 0 \quad \text{in } \Omega \times (0, T) \tag{3.26}$$

*then  $u$  is a subsolution (respectively supersolution) of the problem*

$$\frac{\partial u}{\partial t} + H(x, t, \frac{\partial u}{\partial x}) = 0 \quad \text{in } \Omega \times (0, T]. \tag{3.27}$$

This lemma will be applied for  $H(x, t, \frac{\partial u}{\partial x}) = c[u](x, t) \left| \frac{\partial u}{\partial x} \right|$  where  $u$  is a solution on  $(0, T)$ ,  $u \in W_{\text{loc}}^{1, \infty}(\mathbb{R} \times [0, T])$  and  $c[u] \in C(\mathbb{R} \times [0, T])$ .

### 4.1 Short time existence and uniqueness of the solution

For  $c^{\text{ext}}$  satisfying (3.3) and  $c^0$  satisfying (3.5), we denote

$$K = |c^{\text{ext}}|_{L^\infty(\mathbb{R})} + P |c^0|_{L^1(\mathbb{R})}. \quad (3.28)$$

Consider four constants satisfying  $0 < b_1 < b_0 < B_0 < B_1$  and for  $T > 0$ , we set

$$X_T = \left\{ u \in W_{\text{loc}}^{1,\infty}(\mathbb{R} \times [0, T]) \left| \begin{array}{l} u(x+1, t) = u(x, t) + P \quad \text{for } (x, t) \in \mathbb{R} \times [0, T), \\ 0 < b_1 \leq u_x \leq B_1 \quad \text{a.e. on } \mathbb{R} \times [0, T), \\ |u_t| \leq KB_1 \quad \text{a.e. on } \mathbb{R} \times [0, T) \end{array} \right. \right\}.$$

Clearly,  $X_T - Px$  is a closed set of the Banach space  $W^{1,\infty}(\mathbb{R} \times [0, T])$ . We want to establish that there exists a unique solution  $u \in X_T$  of the following problem

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = (c^{\text{ext}}(x) + c^0 \star (E(u(\cdot, t)) - P \cdot)(x)) \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) & \text{in } \mathbb{R} \times (0, T) \\ u(x, 0) = u^0(x) & \text{on } \mathbb{R}, \end{cases} \quad (3.29)$$

where  $u^0$  satisfies Assumptions (3.6). For any  $u \in X_T$  such that  $u(x, 0) = u^0(x)$ , we consider the continuous viscosity solution  $v$  of the following problem

$$\begin{cases} \frac{\partial v}{\partial t}(x, t) = (c^{\text{ext}}(x) + c^0 \star (E(u(\cdot, t)) - P \cdot)(x)) \frac{\partial v}{\partial x}(x, t) & \text{on } \mathbb{R} \times (0, T), \\ v(x, 0) = u^0(x) & \text{on } \mathbb{R}. \end{cases} \quad (3.30)$$

The main idea, in this section, is to show that the map

$$\begin{aligned} \varphi : X_T &\longrightarrow X_T \\ u &\longmapsto \varphi(u) = v \quad \text{viscosity solution of (3.30)} \end{aligned}$$

is well defined and has a unique fixed point.

We will first show that  $\varphi$  is well defined for  $T$  small enough, and then show that  $\varphi$  is a contraction. Let us define

$$L = |c_x^{\text{ext}}|_{L^\infty(\mathbb{R})} + P |c_x^0|_{L^1(\mathbb{R})} \quad \text{and} \quad T^* = \frac{1}{L} \min \left( \ln \left( \frac{B_1}{B_0} \right), \ln \left( \frac{b_0}{b_1} \right) \right). \quad (3.31)$$

- 1)  $\varphi(X_T) \subset X_T$  for  $0 < T \leq T^*$ . We first remark that the solution  $v$  of (3.30) is given by Proposition 2.2. Indeed this proposition applies because our initial condition satisfies its assumptions and the velocity  $c(x, t) = c^{\text{ext}}(x) + c^0 \star E(u(\cdot, t))(x)$  is in  $W^{1,\infty}(\mathbb{R} \times [0, T])$  by Lemma 3.5 and the definition of  $X_T$ .



We will now check that  $v \in X_T$  for  $T$  small enough. By Lemma 3.5, assertion 2), we know that  $|c^{\text{int}}|_{L^\infty(\mathbb{R})} \leq P |c^0|_{L^1(\mathbb{R})}$  and  $|c_x^{\text{int}}|_{L^\infty(\mathbb{R})} \leq P |(c^0)_x|_{L^1(\mathbb{R})}$ . Therefore

$$|c| \leq K = |c^{\text{ext}}|_{L^\infty(\mathbb{R})} + P |c^0|_{L^1(\mathbb{R})}$$

and

$$|c_x| \leq L = |c_x^{\text{ext}}|_{L^\infty(\mathbb{R})} + P |c_x^0|_{L^1(\mathbb{R})}.$$

By the *a priori* estimates for the eikonal equation (Proposition 2.2), we see that the function  $v$  satisfies for a.e.  $(x, t) \in \mathbb{R} \times [0, T]$

$$\begin{cases} |v_x(x, t)| \leq B_0 e^{Lt} = B(t), \\ v_x(x, t) \geq b_0 e^{-Lt} = b(t), \\ |v_t(x, t)| \leq |c|_{L^\infty(\mathbb{R} \times [0, T])} B(t) \end{cases}$$

and we have  $B(T^*) \leq B_1$  and  $b(T^*) \geq b_1$  with the definition of  $T^*$  in (3.31).

By Lemma 3.5, assertion 2), we know that  $c(x+1, t) = c(x, t)$ . Let  $w(x, t) = v(x+1, t) - P$ . Then  $w(x, 0) = u^0(x+1) - P = u^0(x) = v(x, 0)$ . Then by the space periodicity of the velocity  $c$  and the fact that the eikonal equation "does not see the constants", we deduce that  $w$  is still a viscosity solution of (3.30). By the uniqueness of the solution we get that  $w(x, t) = v(x, t)$ , and therefore  $v(x+1, t) = v(x, t) + P$ . We deduce that  $v \in X_T$  if  $T \leq T^*$ .

2)  $\varphi$  has a unique fixed point. Let us define  $T_0$  by

$$T_0 = \min \left( \frac{1}{|c_x^{\text{ext}}|_{L^\infty(\mathbb{R})} + P |(c^0)_x|_{L^1(\mathbb{R})}}, \frac{1}{8P |c^0|_{L^\infty_{\text{int}}(\mathbb{R})}} \right) \min \left( \ln \frac{b_0}{b_1}, \frac{b_1}{B_1} \right). \quad (3.32)$$

Indeed, the following proposition shows that  $\varphi$  is a contraction.

**Proposition 4.2 (Contraction)**

Let  $v^i = \varphi(u^i)$  for  $i = 1, 2$ . If  $u^i \in X_T$  for  $i = 1, 2$ , and if  $|u^2 - u^1|_{L^\infty(\mathbb{R} \times [0, T])} \leq P$ , then

$$|v^2 - v^1|_{L^\infty(\mathbb{R} \times [0, T])} \leq \frac{1}{2} |u^2 - u^1|_{L^\infty(\mathbb{R} \times [0, T])} \quad \text{for all } T \in [0, T_0].$$

A corollary of this contraction property is

**Proposition 4.3 (Short time existence and uniqueness of the solution)**

We assume that  $c^{\text{ext}}$  and  $c^0$  satisfy (3.3) and (3.5) and that  $u^0$  satisfies (3.6). There then exists a unique continuous viscosity solution  $u \in X_{T_0}$  of (3.29).

To finish this subsection, we will first prove Proposition 4.3 and then prove Proposition 4.2.

**PROOF OF PROPOSITION 4.3**

Note that we can write

$$[0, T_0] = \bigcup_{k=0, \dots, N-1} \left[ \frac{kT_0}{N}, \frac{(k+1)T_0}{N} \right]$$

where  $N$  will be large enough and fixed later. Let us denote  $\tau_k = \left[ \frac{kT_0}{N}, \frac{(k+1)T_0}{N} \right]$

for  $k \in \{0, \dots, N-1\}$ .

**Step 1 :** Let  $u^1, u^2 \in X_{T_0}$  such that  $u^1(x, 0) = u^2(x, 0) = u^0(x)$ . For all  $t \in \tau_0$ , and for all  $x \in \mathbb{R}$ , we compute

$$\begin{aligned} |u^2(x, t) - u^1(x, t)| &\leq |u^2(x, t) - u^2(x, 0)| + |u^1(x, 0) - u^1(x, t)| \\ &\leq 2KB_1 |t| \\ &\leq 2KB_1 \frac{T_0}{N} \\ &\leq 1 \leq P \end{aligned} \tag{3.33}$$

if we choose  $N \geq 2KB_1T_0$ . Then Proposition 4.2 holds, *i.e.*  $\varphi$  is a contraction on  $X_{\frac{T_0}{N}}$ . Since  $X_{T_0} - Px$  is a closed subset of a Banach space then by the Banach-Picard fixed point theorem, there exists a unique solution  $u \in X_{\frac{T_0}{N}}$  such that  $u = \varphi(u)$ , *i.e.*  $u$  is a solution of (3.29) on  $\tau_0 = [0, \frac{T_0}{N}]$ .

**Step 2 :** First we remark that the solution  $u \in X_{\frac{T_0}{N}}$  belongs to  $W_{\text{loc}}^{1, \infty}(\mathbb{R} \times [0, \frac{T_0}{N}])$  by the *a priori* bounds on  $u_x$  and  $u_t$  defining  $X_{\frac{T_0}{N}}$ .

Second, we then apply again Step 1 with the new initial condition  $u^0(\cdot) := u(\cdot, \frac{T_0}{N})$  and get a solution  $v \in X_{T_0}$ . We then define

$$u(\cdot, t) = v\left(\cdot, t - \frac{T_0}{N}\right) \quad \text{for } t \in \tau_1.$$

Third by construction,  $u$  is a viscosity solution on  $\left(0, \frac{T_0}{N}\right) \cup \left(\frac{T_0}{N}, \frac{2T_0}{N}\right)$  and by Lemma 4.1, we see that it also satisfies the viscosity inequalities at time  $\frac{T_0}{N}$ , and therefore  $u$  is a viscosity solution of (3.29) on  $\left(0, \frac{2T_0}{N}\right)$ .

**Step 3 :** We repeat the previous argument on the time intervals  $\tau_k$ ,  $k = 2, \dots, N$ , and get the existence of a viscosity solution  $u$  of (3.29) on the time interval  $(0, T_0)$ .

**Step 4 : Uniqueness.** Let us assume that we have two solutions  $u^1$  and  $u^2$  of (3.29) on  $(0, T_0)$ , with  $u^1 \neq u^2$  and let us define  $T_0^* < T_0$  such that  $u^1 = u^2$  on  $[0, T_0^*]$  and

$$\forall \delta > 0, \exists t_\delta \in [T_0^*, T_0^* + \delta] \cap [T_0^*, T_0] \quad \text{such that} \quad u^2(\cdot, t_\delta) \neq u^1(\cdot, t_\delta).$$

Applying again Step 1 with initial condition  $u^0(\cdot) := u^1(\cdot, T_0^*) = u^2(\cdot, T_0^*)$  we get by the contraction property that  $(u^i = \varphi(u^i), i = 1, 2)$

$$|u^2 - u^1|_{L^\infty(\mathbb{R} \times [0, T_0^* + \delta])} \leq \frac{1}{2} |u^2 - u^1|_{L^\infty(\mathbb{R} \times [0, T_0^* + \delta])}$$

for  $\delta \leq \frac{T_0}{N}$  and  $T_0^* + \delta \leq T_0$  (using (3.33)). Contradiction. □

#### PROOF OF PROPOSITION 4.2

Let  $v^i = \varphi(u^i)$  for  $i = 1, 2$ . By the stability result (Proposition 2.3), we have

$$|v^1 - v^2|_{L^\infty(\mathbb{R} \times [0, T])} \leq \int_0^T |c^2(\cdot, s) - c^1(\cdot, s)|_{L^\infty(\mathbb{R})} \max\left(|v_x^1(\cdot, s)|_{L^\infty(\mathbb{R})}, |v_x^2(\cdot, s)|_{L^\infty(\mathbb{R})}\right) ds$$

where  $c^i(x, t) = c^{\text{ext}}(x) + (c^0 \star E(u^i(\cdot, t)))(x)$ . By Lemma 3.4, we have

$$|c^2 - c^1|_{L^\infty(\mathbb{R} \times [0, T])} \leq |c^0|_{L_{\text{int}}^\infty(\mathbb{R})} |E(u^2) - E(u^1)|_{L^\infty([0, T], L_{\text{unif}}^1(\mathbb{R}))}.$$

By Proposition 3.1 and Remark 3.2, we know that

$$|E(u^2) - E(u^1)|_{L^\infty([0, T], L_{\text{unif}}^1(\mathbb{R}))} \leq \frac{4P}{b} |u^2 - u^1|_{L^\infty(\mathbb{R} \times [0, T])}$$

then combining Proposition 4.2 and Lemma 3.4, we obtain :

$$|v^1 - v^2|_{L^\infty(\mathbb{R} \times [0, T])} \leq 4PT \frac{B}{b} |c^0|_{L_{\text{int}}^\infty(\mathbb{R})} |u^2 - u^1|_{L^\infty(\mathbb{R} \times [0, T])}.$$

We set  $T^{**} = \frac{1}{8P |c^0|_{L_{\text{int}}^\infty(\mathbb{R})}} \frac{b}{B}$ . For  $T_0 = \inf(T^*, T^{**})$ , the following holds for  $T \leq T_0$

$$|v^2 - v^1|_{L^\infty(\mathbb{R} \times [0, T])} \leq \frac{1}{2} |u^2 - u^1|_{L^\infty(\mathbb{R} \times [0, T])}.$$

□

## 4.2 Long time existence of the viscosity solution : proof of Theorem 1.3

PROOF OF THEOREM 1.3

We will repeat this short time result on a sequence of time intervals of lengths  $T_n$  decreasing to zero, such that  $\sum_{n \in \mathbb{N}} T_n = +\infty$ . We will do the proof in 3 steps.

**Step 1 :** We rephrase the result of Proposition 4.3. We proved in the previous subsection that given an initial data  $u^0$  such that

$$0 < b_0 \leq u_x^0 \leq B_0$$

and  $b_1, B_1$  (which will be specified later) such that

$$0 < b_1 < b_0 < B_0 < B_1 \quad \text{and} \quad \frac{b_0}{b_1} = \frac{B_1}{B_0},$$

there exists a unique viscosity solution  $u$  of Problem (3.29) up to time  $T_0$  satisfying

$$0 < b_1 \leq u_x \leq B_1 \quad \text{on} \quad \mathbb{R} \times [0, T_0),$$

where  $T_0$  is defined by

$$T_0 = A \min \left\{ \ln \mu_0, \frac{1}{\mu_0^2} \bar{b}_0 \right\} \tag{3.34}$$

where

$$\left\{ \begin{array}{l} A = \min \left\{ \frac{1}{|c_x^{\text{ext}}|_{L^\infty(\mathbb{R})} + P |c_x^0|_{L^1(\mathbb{R})}}, \frac{1}{8 P |c^0|_{L^\infty_{\text{int}}(\mathbb{R})}} \right\}, \\ \mu_0 = \frac{b_0}{b_1} = \frac{B_1}{B_0} > 1 \quad \text{and} \\ \bar{b}_0 = \frac{b_0}{B_0} < 1 \end{array} \right.$$

For given  $b_0$  and  $B_0$ , in order to equalize the two terms in the infimum of (3.34), we choose  $\mu_0$  such that  $\ln \mu_0 = \frac{1}{\mu_0^2} \bar{b}_0$ , in other words,  $\mu_0$  is fixed by the relation

$$\bar{b}_0 = \mu_0^2 \ln \mu_0$$

and it determinates  $b_1$  and  $B_1$  as a function of  $b_0, B_0$ . Therefore we have

$$T_0 = A \ln \mu_0, \tag{3.35}$$

**Step 2 : Definition of the recurrence.** We apply successively this reasoning on time intervals of length  $T_n$  which will be specified below. So, for  $n \geq 1$ , for  $b_{n+1}, B_{n+1}$

(which will be specified later) there exists a unique solution of the problem (3.29) up to time  $T_0 + T_1 + \dots + T_n$ , where

$$\mu_n = \frac{b_n}{b_{n+1}} = \frac{B_{n+1}}{B_n} > 1 \quad \text{for } 0 < b_{n+1} < b_n < B_n < B_{n+1}, \quad (3.36)$$

$$\bar{b}_n = \frac{b_n}{B_n} < 1 \quad \text{and} \quad \mu_n \quad \text{is fixed by} \quad \bar{b}_n = \mu_n^2 \ln \mu_n. \quad (3.37)$$

$$T_n = A \ln \mu_n \quad (3.38)$$

**Step 3 : Divergence of the series**  $\sum_{n \in \mathbb{N}} T_n$ .

**Proposition 4.4** *With previous notations and the choice of the sequence  $(\mu_n)_n$ , the series  $\sum_{n \in \mathbb{N}} T_n$  diverges.*

This ends the proof of Theorem 1.3. □

In the rest of this subsection, we will prove Proposition 4.4. Before proving this proposition we need preliminary results. First, we remark by (3.36) that

$$\bar{b}_{n+1} = \frac{b_{n+1}}{B_{n+1}} = \frac{1}{\mu_n^2} \bar{b}_n$$

and then by (3.37) and (3.38) we get

$$\ln \mu_n = \mu_{n+1}^2 \ln \mu_{n+1} \quad \text{and} \quad T_n = A \ln \mu_n. \quad (3.39)$$

The recurrence relation defining the sequence  $(\mu_n)_n$  can be inverted as  $\mu_{n+1} = G(\mu_n)$  with  $\mu_n > 1$ . Introducing

$$\varepsilon_n = \mu_n - 1 > 0,$$

we can rewrite  $\mu_{n+1} = G(\mu_n)$  as

$$\varepsilon_{n+1} = F(\varepsilon_n) \quad (3.40)$$

where by the implicit function theorem  $F \in C^2 \left( \left( -\frac{1}{2e}, +\infty \right); \mathbb{R} \right)$  and satisfies

$$F(0) = 0, \quad F'(0) = 1, \quad F''(0) = -4, \quad \text{and} \quad F' > 0. \quad (3.41)$$

We have the following lemma

**Lemma 4.5 (Subsolution for the sequence)**

Let  $F \in C^2([0, +\infty); \mathbb{R})$  satisfying (3.41). For  $a \geq 0$ , let

$\sigma(a) = \int_0^1 dt (F''(ta) - F''(0))(1-t)$  and  $a_0 = \sup \left\{ a \geq 0 : \inf_{[0,a]} \sigma \geq -2 \right\}$ . Then  $a_0 > 0$ . Let  $\rho_a(t)$  be the solution of

$$\begin{cases} \rho'_a(t) = -4\rho_a^2(t), \\ \rho_a(0) = a. \end{cases} \quad (3.42)$$

If  $a \in [0, a_0]$  then for all  $t \geq 0$ , we have

$$\rho_a(t+1) \leq F(\rho_a(t)). \quad (3.43)$$

**Corollary 4.6 (A lower bound on the sequence  $(\varepsilon_n)_n$ )**

Under the assumptions of Lemma 4.5, we consider a sequence  $(\varepsilon_n)_n > 0$  satisfying  $\varepsilon_{n+1} = F(\varepsilon_n)$ . If for an integer  $k$ , we have  $0 < \varepsilon_k \leq a_0$ , then for all  $n \geq 0$  we have

$$\varepsilon_{k+n} \geq \rho(n)$$

where  $\rho = \rho_{\varepsilon_k}$ .

**PROOF OF COROLLARY 4.6**

Since  $\rho$  is decreasing in  $t$  ( $\rho'(t) < 0$ ),  $\rho(n) \leq \rho(0) = \varepsilon_k$ . Applying (3.43) and using the fact that  $F$  is increasing, we get

$$\rho(n) \leq F(\rho(n-1)) \leq \dots \leq F^n(\rho(0)) = F^n(\varepsilon_k) = \varepsilon_{k+n}.$$

□

**PROOF OF LEMMA 4.5**

We set  $\phi(t) = F(ta)$ . Using the Taylor formula with integral remainder, we have

$$\begin{aligned} \phi(1) &= \phi(0) + \phi'(0) + \int_0^1 dt \phi''(t)(1-t) \\ &= \phi(0) + \phi'(0) + \frac{\phi''(0)}{2} + \int_0^1 dt (\phi''(t) - \phi''(0))(1-t) \end{aligned}$$

with  $\phi''(t) = F''(ta)a^2$ . Then setting  $\sigma(a) = \int_0^1 (F''(ta) - F''(0))(1-t) dt$ , we get  $\sigma \in C^0([0, +\infty), \mathbb{R})$  and  $F(a) = a - 2a^2 + a^2\sigma(a)$ . Thus,

$$\begin{aligned} F(\rho(t)) - \rho(t+1) &= \rho(t) - 2\rho^2(t) + \rho^2(t)\sigma(\rho(t)) - \rho(t+1) \\ &\geq \rho(t) - \rho(t+1) - 4\rho^2(t) \end{aligned}$$

because  $\rho(t) \in [0, a_0]$  from the assumption of the lemma (and the fact that  $\rho$  is decreasing in  $t$ ), which guaranties  $\sigma(\rho(t)) \geq -2$ . We now estimate

$$\begin{aligned} \rho(t) - \rho(t+1) &= \int_t^{t+1} -\rho'(s) ds \\ &= \int_t^{t+1} 4\rho^2(s) ds \geq 4\rho^2(t). \end{aligned}$$

We deduce that  $F(\rho(t)) - \rho(t+1) \geq 0$ . □

**PROOF OF PROPOSITION 4.4**

Let us first remark that  $\sum_{n \geq 0} T_n = \sum_{n \geq 0} \ln \mu_n = \ln \prod_{n \geq 0} (1 + \varepsilon_n) \geq \ln \left( 1 + \sum_{n \geq 0} \varepsilon_n \right)$ . We

will now show that  $\sum_{n \geq 0} \varepsilon_n$  diverges. If it is not the case, then  $\varepsilon_k \rightarrow 0$  when  $k \rightarrow \infty$  and so for  $k$  large enough we have  $\varepsilon_k \leq a_0$ . Therefore by Corollary 4.6, we know that  $\varepsilon_{k+n} \geq \rho(n-1)$  for all  $n \in \mathbb{N}$  and  $\rho(t) = \frac{1}{\frac{1}{a} + 4t}$ . We deduce that

$$\sum_{n \geq 0} \varepsilon_n \geq \sum_{n \geq 1} \rho(n) \geq \int_1^{+\infty} \rho(t) dt = \int_1^{+\infty} \frac{1}{\frac{1}{a} + 4t} dt = +\infty.$$

Then the series  $\sum_{n \geq 0} \varepsilon_n$  diverges and  $\sum_{n \geq 0} T_n$  also diverges. □

## 5 Preliminary results for the discrete local problem

As explained in Subsection 1.2, we construct a numerical scheme for the non-local equation by discretising explicitly the time variable by an Euler scheme and the space variable by an upwind scheme. We first study the case of a local equation whose gradient satisfies  $\frac{\partial u}{\partial x} \geq 0$ . This leads to study the following local transport equation :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = c(x, t) \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) & \text{in } \mathbb{R} \times (0, T), \\ u(x, 0) = u_0(x) & \text{on } \mathbb{R}. \end{cases} \quad (3.44)$$

## 5. Preliminary results for the discrete local problem

---

Given a mesh size  $\Delta x$ ,  $\Delta t$  and a lattice  $I_d = \left\{ (i\Delta x, n\Delta t); i \in \mathbb{Z}, n \leq \frac{T}{\Delta t} \right\}$ ,  $(x_i, t_n)$  denotes the node  $(i\Delta x, n\Delta t)$  and  $v^n = (v_i^n)_i$  the values of the numerical approximation of the continuous solution  $u(x_i, t_n)$ . We consider an explicit Euler scheme in time, *i.e.*

$$v_i^{n+1} = v_i^n + \Delta t H_d(v^n, i) \quad (3.45)$$

where the discrete Hamiltonian is chosen so that the scheme is upwind; precisely we choose

$$H_d(v^n, i) = \begin{cases} c_i^n D_x^+ v_i^n & \text{if } c_i^n \geq 0 \\ c_i^n D_x^- v_i^n & \text{if } c_i^n < 0 \end{cases}$$

with

$$D_x^+ v_i^n = \frac{v_{i+1}^n - v_i^n}{\Delta x}, \quad D_x^- v_i^n = \frac{v_i^n - v_{i-1}^n}{\Delta x}$$

and  $c_i^n$  is the discrete velocity.

We assume the following CFL condition for the local problem

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x}{\sup_{i,n} |c_i^n|} \quad (3.46)$$

For the reader's convenience, we recall some useful results proved in [2, 3]. We first recall a discrete gradient estimate from above whose proof is given in [2].

**Lemma 5.1 (Discrete gradient estimate from above)**

If for some  $B^0 > 0$  we have  $\left| \frac{v_{i+1}^0 - v_i^0}{\Delta x} \right| \leq B^0$ ,  $\forall i \in \mathbb{Z}$  and

$B^{n+1} = B^n \left( 1 + 2\Delta t \sup_{j \in \mathbb{Z}} \left| \frac{c_{j+1}^n - c_j^n}{\Delta x} \right| \right)$  then

$$\left| \frac{v_{i+1}^n - v_i^n}{\Delta x} \right| \leq B^n \quad \forall i \in \mathbb{Z}, \forall n \in \mathbb{N}.$$

In the following, we also need a discrete gradient estimate from below.

**Lemma 5.2 (Discrete gradient estimate from below)**

If for some  $b^0 > 0$  we have  $\frac{v_{i+1}^0 - v_i^0}{\Delta x} \geq b^0$ ,  $\forall i \in \mathbb{Z}$ , and

$b^{n+1} = b^n \left( 1 - 2\Delta t \sup_{j \in \mathbb{Z}} \left| \frac{c_{j+1}^n - c_j^n}{\Delta x} \right| \right)$  with

$$\Delta t < \frac{1}{2 \sup_{j \in \mathbb{Z}} \left| \frac{c_{j+1}^n - c_j^n}{\Delta x} \right|} \quad (3.47)$$



then

$$\frac{v_{i+1}^n - v_i^n}{\Delta x} \geq b^n, \quad \forall i \in \mathbb{Z}, \forall n \in \mathbb{N}.$$

PROOF OF LEMMA 5.2

First, let us remark that  $b^n \geq 0$  because of the condition  $\Delta t < \frac{1}{2 \sup_{j \in \mathbb{Z}} \left| \frac{c_{j+1}^n - c_j^n}{\Delta x} \right|}$ .

Let  $w_i^n = v_{i-1}^n + b^n \Delta x$ . By assumption, we have  $w_i^n \leq v_i^n, \forall i \in \mathbb{Z}$ . In order to show that  $w_i^{n+1} \leq v_i^{n+1}$  for all  $i \in \mathbb{Z}$ , we check that  $w^n$  is a discrete subsolution *i.e.*  $w_i^{n+1} - (w_i^n + \Delta t H_d(w^n, i)) \leq 0$ . Indeed,

$$\begin{aligned} & w_i^{n+1} - (w_i^n + \Delta t H_d(w^n, i)) \\ &= v_{i-1}^{n+1} + b^{n+1} \Delta x - (v_{i-1}^n + b^n \Delta x + \Delta t H_d(w^n, i)) \\ &= (b^{n+1} - b^n) \Delta x + \Delta t (H_d(v^n, i-1) - H_d(w^n, i)) \\ &= (b^{n+1} - b^n) \Delta x + \Delta t (H_d(v^n, i-1) - H_d(v_{-1}^n, i)) \end{aligned}$$

If  $c_i^n$  and  $c_{i-1}^n$  have the same sign, we assume that they are nonnegative (the proof is similar when they are nonpositive), then

$$\begin{aligned} & w_i^{n+1} - (w_i^n + \Delta t H_d(v^n, i)) \\ &= -2b^n \Delta t \Delta x \sup_{j \in \mathbb{Z}} \left| \frac{c_j^n - c_{j-1}^n}{\Delta x} \right| + \Delta t (c_{i-1}^n - c_i^n) D_x^+ v_i^n \\ &= -2b^n \Delta t \sup_{j \in \mathbb{Z}} |c_j^n - c_{j-1}^n| - (c_i^n - c_{i-1}^n) \Delta t D_x^+ v_{i-1}^n \\ &\leq -b^n \Delta t \left( 2 \sup_{j \in \mathbb{Z}} |c_j^n - c_{j-1}^n| + c_i^n - c_{i-1}^n \right) \\ &\leq 0. \end{aligned}$$

Therefore,  $w^n$  is a discrete subsolution and then  $w_i^{n+1} \leq v_i^{n+1}$  for all  $i \in \mathbb{Z}$ . If  $c_i^n$  and  $c_{i-1}^n$  do not have the same sign (we refer the reader to the end of the proof of Lemma 5.1 in [3]) the conclusion prevails because of the following estimate for  $a, b \geq 0$  :

$$\begin{aligned} |c_i^n a - c_{i-1}^n b| &\leq \max(a, b) \max(|c_i^n|, |c_{i-1}^n|) \\ &\leq \max(a, b) |c_i^n - c_{i-1}^n| \\ &\leq \max(a, b) \left| \frac{c_i^n - c_{i-1}^n}{\Delta x} \right| \Delta x. \end{aligned}$$

This achieves the proof of Lemma 5.2.  $\square$

We introduce the grid  $I_d^T = \left\{ (i\Delta x, n\Delta t); i \in \mathbb{Z}, n \leq N_T = \frac{T}{\Delta t} \right\}$ . We recall the following numerical stability result whose proof is given in [2, 3].

**Proposition 5.3 (Numerical stability)**

We consider  $v^{1,n}$  and  $v^{2,n}$  two numerical solutions of the following monotone scheme (with the same initial condition)

$$v_i^{l,n+1} = v_i^{l,n} + \Delta t H_d(v^{l,n}, i) \quad (3.48)$$

where

$$H_d(v^{l,n}, i) = \begin{cases} c_i^{l,n} D_x^+ v_i^{l,n} & \text{if } c_i^{l,n} \geq 0 \\ c_i^{l,n} D_x^- v_i^{l,n} & \text{if } c_i^{l,n} < 0 \end{cases}, \quad \text{for } l = 1, 2, \forall i \in \mathbb{Z}, \forall n \in \mathbb{N}.$$

Then there exists a constant  $C > 0$ , depending on the discrete gradient estimates on  $v^1$  and  $v^2$ , such that

$$\sup_{I_d^T} |v_i^{1,n+1} - v_i^{2,n+1}| \leq CT \sup_{I_d^T} |c_i^{1,n} - c_i^{2,n}|. \quad (3.49)$$

## 6 Preliminary result for the discrete non-local problem

We will prove the analogue of Proposition 3.1 in the framework of discrete solutions. We will use this result in Section 7.

**Proposition 6.1 (Estimate of the difference of integer parts in the discrete case)**

Consider a discrete function  $v^1$  such that

$$v_{i+K}^1 = v_i^1 + P \text{ where } P \in \mathbb{N} \setminus \{0\} \quad \text{and} \quad K = \frac{1}{\Delta x} \in \mathbb{N} \setminus \{0\}. \quad (3.50)$$

Assume that there exists two constants  $B \geq b > 0$  such that for every  $i \in \mathbb{Z}$  we have

$$b \leq \frac{v_{i+1}^1 - v_i^1}{\Delta x} \leq B.$$

Then for all discrete function  $v^2$  satisfying (3.50), we get

$$\sup_{i \in \mathbb{Z}} \sum_{j \in J_i = [i, i+K[} |E(v_j^2) - E(v_j^1)| \Delta x \leq 2 \left( P + \sup_{i \in \mathbb{Z}} |v_i^2 - v_i^1| \right) \left( \frac{1}{b} \sup_{i \in \mathbb{Z}} |v_i^2 - v_i^1| + \Delta x \right).$$

**Remark 6.2** Note that if  $\sup_{i \in \mathbb{Z}} |v_i^2 - v_i^1| \leq 1$  then

$$\sup_{i \in \mathbb{Z}} \sum_{j \in J_i = [i, i+K[} |E(v_j^2) - E(v_j^1)| \Delta x \leq 4P \left( \frac{1}{b} \sup_{i \in \mathbb{Z}} |v_i^2 - v_i^1| + \Delta x \right).$$

This result is the discrete analogue of Proposition 3.1. This is also the generalization of Lemma 5.5 in [3] to the case of several dislocations where the characteristic function  $v^l > 0$  is replaced with the floor part  $E(v^l)$ . For the proof of Proposition 6.1 we need to introduce the following notations.

We denote  $\Lambda' = \sup_{j \in \mathbb{Z}} |v_j^2 - v_j^1|$  and we assume that  $\Lambda' \in (0, +\infty)$  (other cases are trivial). For  $m \in \mathbb{Z}$  and for  $l = 1, 2$ , we denote  $E_m^l = \{j \in \mathbb{Z} : v_j^l < m + 1\}$ . First, we remark that since  $\frac{v_{i+1}^1 - v_i^1}{\Delta x} \geq b > 0$ , there exists the greatest integer  $j_0 \in \mathbb{Z}$  such that  $v_{j_0}^1 < m + 1$  and we have  $E_m^1 = \{j \in \mathbb{Z} : j \leq j_0\}$ . We will use the following lemma for the proof of Proposition 6.1.

**Lemma 6.3 (Estimate for the distance between the sets  $E_m^1$  and  $E_m^2$ )**

*Under the notations above and the assumptions of Proposition 6.1, we have*

$$E_m^1 - E\left(\frac{\Lambda'}{b\Delta x}\right) - 1 \subset E_m^2 \subset E_m^1 + E\left(\frac{\Lambda'}{b\Delta x}\right) + 1.$$

**PROOF OF LEMMA 6.3**

The main idea in this proof is to use the discrete gradient estimate from below. We will estimate in two steps the distance between  $E_m^1$  and  $E_m^2$ .

**Step 1** We have  $\mathbf{E}_m^1 - \mathbf{E}\left(\frac{\Lambda'}{b\Delta \mathbf{x}}\right) - 1 \subset \mathbf{E}_m^2$ .

Indeed, let  $j \in E_m^1 - E\left(\frac{\Lambda'}{b\Delta x}\right) - 1$ . Then,  $j \leq j_0 - E\left(\frac{\Lambda'}{b\Delta x}\right) - 1$  i.e.

$j_0 - j \geq E\left(\frac{\Lambda'}{b\Delta x}\right) + 1 > \frac{\Lambda'}{b\Delta x}$  i.e.  $(j_0 - j)b\Delta x \geq \Lambda'$ . Since  $\frac{v_{j_0}^1 - v_j^1}{(j_0 - j)\Delta x} \geq b$

and  $j_0 - j > 0$ , we have

$$v_{j_0}^1 - v_j^1 \geq (j_0 - j)b\Delta x > \Lambda'$$

which implies (by definition of  $\Lambda'$ )

$$m + 1 > v_{j_0}^1 > v_j^1 + \Lambda' \geq v_j^2$$

and therefore  $v_j^2 < m + 1$ . Thus,  $j \in E_m^2$ .

**Step 2** We have  $\mathbf{E}_m^2 \subset \mathbf{E}_m^1 + \mathbf{E}\left(\frac{\Lambda'}{b\Delta \mathbf{x}}\right) + 1$ .

Similarly, considering  $j \in \left(E_m^1 + E\left(\frac{\Lambda'}{b\Delta x}\right) + 1\right)^c$  we prove that  $j \in (E_m^2)^c$ .

## 6. Preliminary result for the discrete non-local problem

---

Indeed,  $j > j_0 + E\left(\frac{\Lambda'}{b\Delta x}\right) + 1$  then  $j \geq j_0 + 1 + E\left(\frac{\Lambda'}{b\Delta x}\right) + 1$  implies  $j - (j_0 + 1) \geq E\left(\frac{\Lambda'}{b\Delta x}\right) + 1 > \frac{\Lambda'}{b\Delta x}$  i.e.  $(j - (j_0 + 1))b\Delta x > \Lambda'$ . Since  $\frac{v_j^1 - v_{j_0+1}^1}{(j - (j_0 + 1))\Delta x} \geq b$  and  $j - (j_0 + 1) > 0$ , we have

$$v_j^1 - v_{j_0+1}^1 \geq (j - (j_0 + 1))b\Delta x > \Lambda'$$

which implies (by definition of  $\Lambda'$ )

$$v_j^2 \geq v_j^1 - \Lambda' > v_{j_0+1}^1 \geq m + 1.$$

Then we have  $j \in (E_m^2)^c$  and therefore  $\left(E_m^1 + E\left(\frac{\Lambda'}{b\Delta x}\right) + 1\right)^c \subset (E_m^2)^c$ . □

### PROOF OF PROPOSITION 6.1

The main idea in this proof is to bound the quantity  $|E(v_j^2) - E(v_j^1)|$  by the characteristic functions the sets  $E_m^2 \Delta E_m^1$ . We then bound the discrete analogue of its  $L_{\text{unif}}^1$ -norm.

From the definition of  $E_m^l$ , for  $l = 1, 2$ , we remark that  $E_{m-1}^l \subset E_m^l$ . Then  $E(v_j^l) = m$  for any  $j \in E_m^l \setminus E_{m-1}^l$ , for  $l = 1, 2$ . We define

$$1_A(j) = \begin{cases} 1 & \text{if } j \in A \subset \mathbb{Z}, \\ 0 & \text{if not.} \end{cases}$$

Then we can write

$$E(v_j^l) = \sum_{m \in \mathbb{N}} 1_{(E_m^l)^c}(j) - \sum_{m \in \mathbb{Z} \setminus \mathbb{N}} 1_{E_m^l}(j).$$

Similarly to (3.22) in the proof of Proposition 3.1, we get

$$|E(v_j^2) - E(v_j^1)| \leq \sum_{m \in \mathbb{Z}} 1_{E_m^2 \Delta E_m^1}(j)$$

Let us fix  $i \in \mathbb{Z}$  and define  $J_i = [i, i + K[$ . Then the discrete analogue of  $L_{\text{unif}}^1$ -norm of  $E(v^2) - E(v^1)$  satisfies

$$\begin{aligned} \sum_{j \in J_i} |E(v_j^2) - E(v_j^1)| &\leq \sum_{j \in \mathbb{Z}} \sum_{m \in \mathbb{Z}} 1_{J_i}(j) 1_{(E_m^2 \Delta E_m^1)}(j) \\ &\leq \sum_{m \in \mathbb{Z}} |J_i \cap (E_m^2 \Delta E_m^1)| \\ &\leq 2N' \left( \frac{\Lambda'}{b\Delta x} + 1 \right) \end{aligned}$$

where  $N' = \text{Card} \{m \in \mathbb{Z}, |J_i \cap (E_m^2 \Delta E_m^1)| \neq 0\}$  and where we have used the fact that the measure  $|E_m^2 \Delta E_m^1| \leq 2 \left( E \left( \frac{\Lambda'}{b\Delta x} \right) + 1 \right) \leq 2 \left( \frac{\Lambda'}{b\Delta x} + 1 \right)$ . Similarly to (3.24) in the proof of Proposition 3.1, we get

$$N' \leq P + \sup_{i \in \mathbb{Z}} |v_i^2 - v_i^1| .$$

We then conclude that :

$$\sup_{i \in \mathbb{Z}} \sum_{j \in J_i} |E(v_j^2) - E(v_j^1)| \Delta x \leq 2 \left( P + \sup_{i \in \mathbb{Z}} |v_i^2 - v_i^1| \right) \left( \frac{1}{b} \sup_{i \in \mathbb{Z}} |v_i^2 - v_i^1| + \Delta x \right) .$$

□

## 7 Proof of Theorem 1.5

In this section, we first recall how to get an error estimate between the continuous solution and the discrete solution for a general non-local transport equation for some  $\bar{T} > 0$ . We are inspired by the work of [2].

### 7.1 An abstract error estimate

We consider the continuous viscosity solution  $u$  of a general non-local transport equation

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = c[u](x, t) \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) & \text{in } \mathbb{R} \times (0, \bar{T}) \\ u(x, 0) = u^0(x) & \text{on } \mathbb{R} \end{cases} \quad (3.51)$$

We recall that the non-local velocity  $c[u]$  belongs to  $L^\infty((0, \bar{T}), W^{1, \infty}(\mathbb{R}))$  and that the solution  $u$  is Lipschitz continuous. We will consider a discrete solution  $v$  satisfying

$$v = G^\Delta \circ c^\Delta(v) \quad (3.52)$$

where this abstract scheme will be precised below.

For  $0 < T \leq \bar{T}$ , and given a mesh  $\Delta = (\Delta x, \Delta t)$ , we denote  $E_T^\Delta = \mathbb{R}^{\mathbb{Z} \times \{0, \dots, N_T\}}$ ,  $N_T$  is the floor part of  $\frac{T}{\Delta t}$ , the space of discrete functions defined on  $I_d^T = \{(i\Delta x, n\Delta t), i \in \mathbb{Z}, n \leq N_T\}$ .

We consider two subsets of  $E_T^\Delta$

$$U_T^\Delta = \left\{ w \in E_T^\Delta \quad \text{such that} \quad \left| \frac{w_{i+1}^n - w_i^n}{\Delta x} \right| \leq B^0 e^{LT} \quad \text{and} \quad \frac{w_{i+1}^n - w_i^n}{\Delta x} \geq b^0 e^{-LT} \right\}$$

and

$$V_T^\Delta = \left\{ c \in E_T^\Delta \text{ such that } |c_i^n| \leq K \text{ and } \left| \frac{c_{i+1}^n - c_i^n}{\Delta x} \right| \leq L \ \forall i \in \mathbb{Z}, \forall n \leq N_T \right\}.$$

We also consider two operators :

$$\begin{aligned} G^\Delta : V_T^\Delta &\longrightarrow U_T^\Delta & \text{and} & & c^\Delta : U_T^\Delta &\longrightarrow V_T^\Delta \\ c &\longmapsto v & & & w &\longmapsto c^\Delta(w) \end{aligned}$$

where  $c^\Delta$  is an approximation of the non-local velocity. For  $c \in V_T^\Delta$ ,  $v = G^\Delta(c)$  is defined by

$$v_i^0 = u^0(x_i), \quad v_i^{n+1} = v_i^n + \Delta t c_i^n \times \begin{cases} D_x^+ v_i^n & \text{if } c_i^n \geq 0 \\ D_x^- v_i^n & \text{if } c_i^n < 0 \end{cases} \quad (3.53)$$

We are looking for a solution of (3.52). Our goal is to give an abstract error estimate between the continuous solution  $u$  and the discrete solution  $v$ . To this end, we need to introduce a long serie of assumptions. Our error estimate will be given in Theorem 7.1. We make the following assumptions.

(A1) **CFL condition**

$$\Delta t \leq \frac{\Delta x}{\sup_{i \in \mathbb{Z}} |c_i(v^n)|}$$

(A2)  $(u)^\Delta \in U_T^\Delta$  where  $(u)^\Delta$  is the restriction of the continuous solution  $u$  of (3.51) to  $I_d^T$ .

(A3)  $(c)^\Delta \in V_T^\Delta$  where  $(c)^\Delta$  is the restriction of the non-local velocity  $c[u]$  to  $I_d^T$ .

(A4)  $U_T^\Delta$  and  $V_T^\Delta$  are respectively equi-Lipschitz and equibounded in the sense that there is a constant  $K$  such that, for every mesh  $\Delta$ ,

$$|D_x^+ w| \leq K, \quad |c| \leq K, \text{ for every } w \in U_T^\Delta, \quad c \in V_T^\Delta. \quad (3.54)$$

(A5)

$$G^\Delta(V_T^\Delta) \subset U_T^\Delta \quad \text{for every } T. \quad (3.55)$$

(A6) **The discrete velocity  $c^\Delta$  is stationary** *i.e.* there is a map  $\bar{c}^\Delta$  such that

$$\bar{c}^\Delta(w(\cdot, t_n)) = c^\Delta(w)(\cdot, t_n). \quad (3.56)$$

(A7)

$$c^\Delta(U_T^\Delta) \subset V_T^\Delta \quad \text{for every } T. \quad (3.57)$$

(A8) **Stability of the operator  $G^\Delta$**  (see Proposition 5.3).

There is a constant  $K > 0$  such that for every mesh  $\Delta$  satisfying the CFL condition (A1), for every  $T$  and every  $c_1, c_2 \in V_T^\Delta$ ,

$$\sup_{I_d^T} |G^\Delta(c_2) - G^\Delta(c_1)| \leq KT \sup_{I_d^T} |c_2 - c_1|. \quad (3.58)$$

(A9) **Consistency of the discrete velocity  $c^\Delta$** .

There is a constant  $K > 0$  such that for every mesh  $\Delta$  and every  $T$ ,

$$\sup_{I_d^T} |c[u] - c^\Delta(u^\Delta)| \leq K\Delta x \quad (3.59)$$

where  $u$  is the solution of (3.51) and  $u^\Delta = (u)^\Delta$  is the restriction of  $u$  to  $I_d^T$ .

(A10) **Stability of the discrete velocity  $c^\Delta$** .

There is a constant  $K > 0$  such that for every mesh  $\Delta$ , for every  $T \leq \bar{T}$  and every  $w_1, w_2 \in U_T^\Delta$ ,

$$\sup_{I_d^T} |c^\Delta(w_1) - c^\Delta(w_2)| \leq K \left( \sup_{I_d^T} |w_2 - w_1| + \Delta x \right). \quad (3.60)$$

We have the following abstract error estimate (see [2,3]).

**Theorem 7.1 (An abstract error estimate for a short time)**

Let us consider  $\bar{T} > 0$  and  $\Delta x + \Delta t \leq 1$ . Let us assume that (A1)-(A10) hold for any  $T \leq \bar{T}$  and that there exists a unique continuous solution  $u$  of (3.51) on  $[0, \bar{T}]$ . There then exists a constant  $K' > 0$ , depending on  $|c^{\text{ext}}|_{L^\infty(\mathbb{R})}$ ,  $P$ ,  $|c^0|_{L^1(\mathbb{R})}$ , the bound constants of  $D_x^+ v_i^n$ ,  $D_x^- v_i^n$  and  $|(u^0)_x|_{L^\infty(\mathbb{R})}$ , and there exists a constant  $0 < \bar{T}^* \leq \bar{T}$  with  $\bar{T}^*$  only depending on  $\bar{T}$  and  $K'$ , such that for every  $T \leq \bar{T}^*$ , we have

$$\sup_{I_d^T} |u - v| \leq K' \sqrt{\Delta x} \quad \text{if} \quad \Delta x \leq \frac{\bar{T}^*}{K'}.$$

## 7.2 Application of the abstract error estimate : proof of Theorem 1.5

We check successively assumptions (A1) to (A10).

1. We assume the CFL condition (3.12) which implies (A1) and (3.47) because

$$\begin{aligned} \sup_{j \in \mathbb{Z}} |c_{j+1}^n - c_j^n| &\leq \sup_{j \in \mathbb{Z}} |c_{j+1}^n| + \sup_{j \in \mathbb{Z}} |c_j^n| \\ &\leq 2 \sup_{j \in \mathbb{Z}} |c_j^n| \\ &\leq 2 |c|_{L^\infty(\mathbb{R} \times (0, +\infty))} \\ &\leq 2 \left( |c^{\text{ext}}|_{L^\infty(\mathbb{R})} + P |c^0|_{L^1(\mathbb{R})} \right) \end{aligned}$$

which will allow us to apply Lemma 5.2.

Here we will apply Theorem 7.1 with  $\bar{T} = T_0$  given in (3.32) and with  $T_1 = \bar{T}^*$ ,  $C = K'$  given by Theorem 7.1. We recall the following notations (see (3.28) and (3.31)) :

$$K = |c^{\text{ext}}|_{L^\infty(\mathbb{R})} + P |c^0|_{L^1(\mathbb{R})} \quad \text{and} \quad L = |c_x^{\text{ext}}|_{L^\infty(\mathbb{R})} + P |c_x^0|_{L^1(\mathbb{R})} .$$

2. By Proposition 2.2, we have  $(u)^\Delta \in U_T^\Delta$  where  $u$  is the solution of (3.51).
3. It is clear that  $(c)^\Delta \in V_T^\Delta$  where  $c = c[u]$  given by (3.2) for the solution  $u$  of (3.51).
4. It is also clear that, by definition, the sets  $U_T^\Delta$  and  $V_T^\Delta$  are respectively equi-Lipschitz and equi-bounded.
5. We now check that  $G^\Delta(V_T^\Delta) \subset U_T^\Delta$ . Let  $c \in V_T^\Delta$ . By Lemma 5.1 we have

$$\left| \frac{G^\Delta(c)_{i+1}^n - G^\Delta(c)_i^n}{\Delta x} \right| = \left| \frac{v_{i+1}^n - v_i^n}{\Delta x} \right| \leq B^n .$$

Moreover,

$$B^n = B^{n-1} \left( 1 + \Delta t \sup_{i \in \mathbb{Z}} \left| \frac{c_{i+1}^{n-1} - c_i^{n-1}}{\Delta x} \right| \right) \leq B^{n-1} (1 + L \Delta t) \leq B^{n-1} e^{L \Delta t} .$$

We deduce that  $B^n \leq B^0 e^{L n \Delta t} \leq B^0 e^{L T}$ . Therefore,

$$\left| \frac{G^\Delta(c)_{i+1}^n - G^\Delta(c)_i^n}{\Delta x} \right| \leq B^0 e^{L T} .$$

Similarly, by Lemma 5.2, we have

$$\frac{G^\Delta(c)_{i+1}^n - G^\Delta(c)_i^n}{\Delta x} \geq b^0 e^{-L T} .$$

Thus,  $G^\Delta(c) \in U_T^\Delta$ , for all  $c \in V_T^\Delta$  and then  $G^\Delta(V_T^\Delta) \subset U_T^\Delta$  for all  $T$ .



6. We now consider the discrete non-local velocity given in (3.9), (3.10) :

$$c_i^{\text{int},\Delta} = c_i^{\text{int},n} = \sum_{l \in \mathbb{Z}} c_{i-l}^0 E(v_l^n) \Delta x, \quad c_i^0 = \frac{1}{\Delta x} \int_{I_i} c^0(x) dx$$

with  $I_i = (x_i - \frac{\Delta x}{2}, x_i + \frac{\Delta x}{2})$ . It is clearly stationary. We recall from [3], that  $c_i^{\text{int},n}$  can be written as the continuous convolution

$$c_i^{\text{int},n} = c^0 \star E(v_{\#})(x_i)$$

where  $v_{\#}$  is the piecewise constant lifting of  $v$

$$v_{\#} = \sum_i v_i 1_{I_i}. \quad (3.61)$$

Obviously  $c_i^{\text{ext}}$  is stationary. Therefore  $c^{\Delta}$  is stationary.

7. We now check that  $c^{\Delta}(U_T^{\Delta}) \subset V_T^{\Delta}$ . Indeed, for all  $v \in U_T^{\Delta}$ , we have

$$|c^{\Delta}(v)| \leq K, \quad |D^+ c^{\Delta}(v)| \leq \left| \frac{\partial}{\partial x} (c^0 \star E(v_{\#})) \right|_{L^{\infty}(\mathbb{R})} \leq L.$$

Therefore  $c^{\Delta}(U_T^{\Delta}) \subset V_T^{\Delta}$ .

8. The assumption (A7) holds by Proposition 5.3.

9. **Consistency of the discrete velocity  $c^{\text{int},\Delta}$ .** We estimate :

$$\begin{aligned} \sup_{i \in \mathbb{Z}} \left| c_i^{\text{int},\Delta}(u^{\Delta})(\cdot, t_n) - c[u](x_i, t_n) \right| &\leq \sup_{x \in \mathbb{R}} \left| c^0 \star E(u_{\#}^{\Delta})(\cdot, t_n) - c^0 \star E(u)(\cdot, t_n) \right| \\ &\leq |c^0|_{L_{\text{int}}^{\infty}(\mathbb{R})} |E(u_{\#})(\cdot, t_n) - E(u)(\cdot, t_n)|_{L_{\text{unif}}^1(\mathbb{R})} \\ &\leq \frac{4P}{b} |c^0|_{L_{\text{int}}^{\infty}(\mathbb{R})} |u_{\#}(\cdot, t_n) - u(\cdot, t_n)|_{L^{\infty}(\mathbb{R})}. \end{aligned}$$

Then  $c^{\text{int},\Delta}$  is consistent.

10. **Stability of the discrete velocity  $c^{\text{int},\Delta}$ .** We estimate

$$\begin{aligned} \left| c_i^{\text{int},\Delta}(w^1) - c_i^{\text{int},\Delta}(w^2) \right| &= \left| c^0 \star E(w_{\#}^1)(x_i) - c^0 \star E(w_{\#}^2)(x_i) \right| \\ &\leq |c^0|_{L_{\text{int}}^{\infty}(\mathbb{R})} |E(w_{\#}^1) - E(w_{\#}^2)|_{L_{\text{unif}}^1(\mathbb{R})} \\ &\leq 4P |c^0|_{L_{\text{int}}^{\infty}(\mathbb{R})} \left( \frac{1}{b} \sup_{i \in \mathbb{Z}} |w_i^1 - w_i^2| + \Delta x \right) \end{aligned}$$

where we have used in the last time Proposition 6.1.

Finally, we apply Theorem 7.1 and we obtain Theorem 1.5.

## 8 Example of a simulation

In this section, we provide some numerical simulations showing the behavior of the solution and the dislocations dynamics through obstacles.

We start by an initial data  $u^0(x) = 2x$ . The velocity is chosen as

$$c[u](x, t) = A + B \sin(2k\pi x) + c^0 \star E(u(\cdot, t))(x)$$

with  $A = 1.2$ ,  $B = 1$ , the number of obstacles is  $k = 2$ , the kernel  $c^0$  is the one of Peierls Nabarro given by (3.4) with  $\frac{\mu b^2}{2\pi(1-\nu)} = 1$  and  $\zeta = 0.1$ . We choose  $\Delta x =$

0.0099 and  $\Delta t = 0.00263$ . Numerically we work on the interval for  $x \in \left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$ .

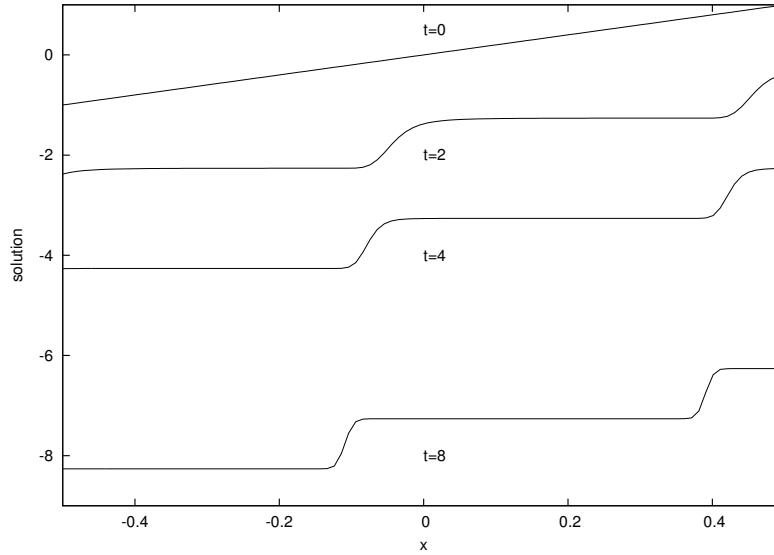


FIG. 3.3 – Behavior of the solution in time

In Figure 3.3, we represent the solution  $u(x, t)$  as a function of  $x \in \left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$  for different values of  $t = 0, 2, 4, 8$ . On this figure we see that the gradient of the solution remains numerically in time bounded from above and from below, even if the lower bound of the gradient is very small. In Figure 3.4, we represent the trajectories of the dislocations  $x(t)$  (here there are 2 dislocations) with the time on the vertical axis and the space on the horizontal one. We recall that the positions of dislocations correspond to the jumps of the floor part of the solution. On Figure 3.4, we see that the dislocations slow down on the obstacles. Finally, we remark numerically on Figure 3.3 that the gradient of the solution is far from zero in the regions where we take the floor part of the solution, which is a good behavior for this simulation. We

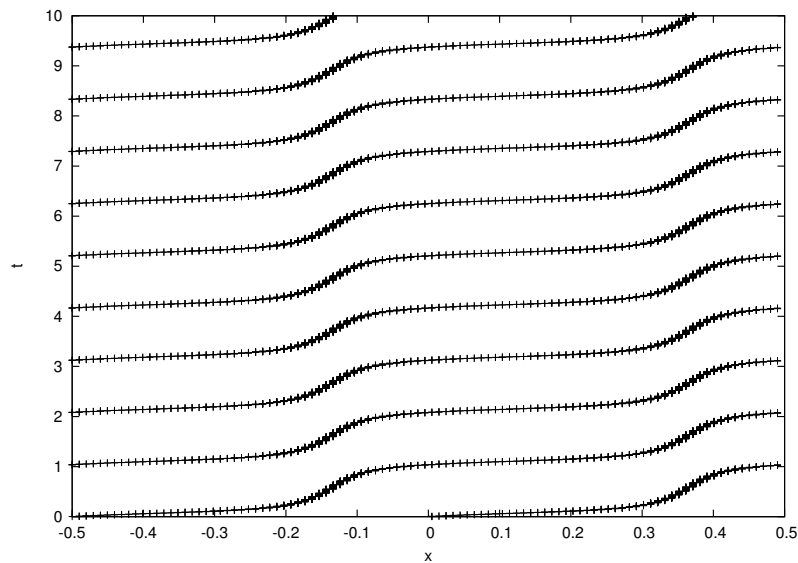


FIG. 3.4 – Dislocations dynamics through obstacles

can even say that we can localize the dislocations by the strong variations of the solution.

### Acknowledgements

The authors would like to thank O. Alvarez, E. Carlini, A. Finel, P. Hoch, C. Imbert and Y. Le Bouar for fruitful discussions. We also thank A. El-Hajj and N. Forcadel for their comments. This work was supported by the contract JC 1025 called “ACI jeunes chercheuses et jeunes chercheurs” of the French Ministry of Research (2003-2006).

# References

- [1] O. Alvarez, P. Cardaliaguet and R. Monneau, *Existence and uniqueness for dislocation dynamics with nonnegative velocity*, Interfaces and Free Boundaries, 7 (4), 415-434, (2005).
- [2] O. Alvarez, E. Carlini, R. Monneau and E. Rouy, *Convergence of a first order scheme for a non local eikonal equation*, preprint.
- [3] O. Alvarez, E. Carlini, R. Monneau and E. Rouy, *A convergent scheme for a non local Hamilton Jacobi equation modelling dislocation dynamics*, preprint.
- [4] O. Alvarez, P. Hoch, Y. Le Bouar and R. Monneau, *Résolution en temps court d'une équation de Hamilton-Jacobi non locale décrivant la dynamique d'une dislocation*, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I, 338, 679-684, (2004).
- [5] O. Alvarez, P. Hoch, Y. Le Bouar and R. Monneau, *Dislocation dynamics : short time existence and uniqueness of the solution*, to appear in Arch. Ration. Mech. Anal. .
- [6] M. Bardi and I. Capuzzo-Dolcetta, *Optimal Control and Viscosity Solutions of Hamilton-Jacobi-Bellman Equations*, Birkhäuser, Boston, (1997).
- [7] G. Barles, *Solutions de Viscosité des Equations de Hamilton-Jacobi*, Springer-Verlag, Berlin, (1994).
- [8] G. Barles, P. Cardaliaguet, O. Ley and R. Monneau, *General results for dislocation type equation*, in preparation.
- [9] G. Barles and O. Ley, *Nonlocal first-order Hamilton-Jacobi equations modelling dislocations dynamics*, to appear in Comm. Partial Differential Equations.
- [10] M.G. Crandall, H. Ishii and P.-L. Lions, *User's guide to viscosity solutions of second order partial differential equations*, Bull. Amer. Math. Soc. (N.S.), 27, 1-67, (1992).
- [11] M.G. Crandall and P.-L. Lions, *Conditions d'unicité pour les solutions généralisées des équations de Hamilton-Jacobi du premier ordre*, C. R. Acad. Sci. Paris Ser. I Math., 292, 183-186, (1981).
- [12] M.G. Crandall and P.-L. Lions, *On existence and uniqueness of solutions of Hamilton-Jacobi equations*, Nonlinear Anal. 10, 353-370, (1986).

## REFERENCES

---

- [13] M.G. Crandall and P.-L. Lions, *Two Approximations of Solutions of Hamilton-Jacobi Equations*, Math. Comp., 167, 1-19, (1984).
- [14] F. Da Lio, N. Forcadel and R. Monneau, *Convergence of a non-local eikonal equation to anisotropic mean curvature motion. Application to dislocations dynamics*, in preparation.
- [15] N. Forcadel, *Dislocations dynamics with a mean curvature term : short time existence and uniqueness*, preprint.
- [16] A. Ghorbel, P. Hoch and R. Monneau, *A One Dimensional Numerical Homogenization for Several Dislocations*, in preparation.
- [17] A. Ghorbel and R. Monneau, *Equation d'Hamilton-Jacobi non-locale modélisant la dynamique des dislocations*, Proceedings of the 2nd TAM-TAM (Trends in Applied Mathematics in Tunisia, Algeria, Morocco), 322-328, (2005).
- [18] J.R. Hirth and L. Lothe, *Theory of dislocations*, Second Edition. Malabar, Florida : Krieger, (1992).
- [19] S. Osher, J.A. Sethian , *Fronts Propagating with Curvature-Dependent Speed : Algorithms Based on Hamilton-Jacobi Formulations*, J. Comp. Physics, 79, 12-49, (1988).
- [20] D. Rodney, Y. Le Bouar and A. Finel, *Phase field methods and dislocations*, Acta Materialia 51, 17-30, (2003).

# Chapitre 4

## Construction d'une solution de viscosité discontinue - Annihilation des dislocations

### 1 Introduction

On s'intéresse dans ce chapitre à l'annihilation de dislocations. On la décrit par une équation de type Hamilton-Jacobi non-locale avec une condition initiale discontinue. Un cadre naturel pour étudier les solutions de cette équation est celui des solutions de viscosité discontinues (cf. Barles [1], Bardi et Capuzzo-Dolcetta [2]). On donne dans la section suivante une méthode de construction d'une solution de viscosité discontinue en temps long.

### 2 Construction d'une solution de viscosité discontinue

On regarde le problème suivant

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t}(x, t) + c(x, t) \left| \frac{\partial \rho}{\partial x}(x, t) \right| = 0 & \text{dans } \mathbb{R} \times (0, +\infty) \\ c(x, t) = c^1(x, t) + \int_{\mathbb{R}} c^0(y) \rho(x - y, t) dy \\ \rho(x, 0) = H(x - X^{+,0}) - H(x - X^{-,0}) & \text{dans } \mathbb{R} \end{cases} \quad (4.1)$$

où  $c^1 \in W^{1,\infty}(\mathbb{R})$  et  $c^0 \in C^\infty(\mathbb{R}) \cap W^{1,1}(\mathbb{R})$ . La condition initiale est une somme de fonctions de Heaviside  $H$ ,

$$H(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x > 0, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

On suppose qu'on a une dislocation de vecteur de Burgers  $\vec{b}$  et une dislocation de vecteur de Burgers  $-\vec{b}$  ayant comme positions initiales respectives  $X^{+,0}$  et  $X^{-,0}$  vérifiant  $X^{+,0} < X^{-,0}$ .

Alors on peut construire une solution de viscosité discontinue de la façon suivante

$$\rho(x, t) = \begin{cases} \sum_{i=1}^N (H(x - X_i^+(t)) - H(x - X_i^-(t))) & \text{tant que } X^+(t) < X^-(t) \\ 0 & \text{à partir du temps } T \text{ où } X^+(T) = X^-(T). \end{cases} \quad (4.2)$$

où les  $X^\pm(t)$  vérifient

$$\begin{cases} \dot{X}^\pm(t) = \pm c(X^\pm(t), t) & \text{pour } t \in (0, T] \\ X^\pm(0) = X^{\pm,0} \end{cases} \quad (4.3)$$

avec  $c$  donnée dans (4.1).

C'est la méthode des caractéristiques.

## 3 Simuler l'annihilation des dislocations

### 3.1 Schéma numérique

On note  $\Delta x$  le pas d'espace et  $\Delta t$  le pas de temps. On considère un maillage cartésien  $I_d = \{(i\Delta x, n\Delta t); i \in \mathbb{Z}, n \in \mathbb{N}\}$ . On note  $(x_i, t^n)$  le noeud du maillage  $(i\Delta x, n\Delta t)$  et  $v^n = (v_i^n)_{i \in \mathbb{Z}}$  les valeurs de l'approximation numérique de  $u(x_i, t^n)$  où  $u$  est la solution continue du problème. On construit un schéma de type différences-finies (cf. [3]) d'ordre 1 en espace et en temps. Le schéma numérique s'écrit :

$$v_i^{n+1} = v_i^n - \Delta t c_i(v^n) \begin{cases} \max(\max(D_x^- v_i^n, 0), \max(-D_x^+ v_i^n, 0)) & \text{si } c_i(v^n) \geq 0 \\ \max(\max(-D_x^- v_i^n, 0), \max(D_x^+ v_i^n, 0)) & \text{si } c_i(v^n) < 0 \end{cases} \quad (4.4)$$

avec  $D_x^- v_i^n = \frac{v_i^n - v_{i-1}^n}{\Delta x}$  et  $D_x^+ v_i^n = \frac{v_{i+1}^n - v_i^n}{\Delta x}$ .

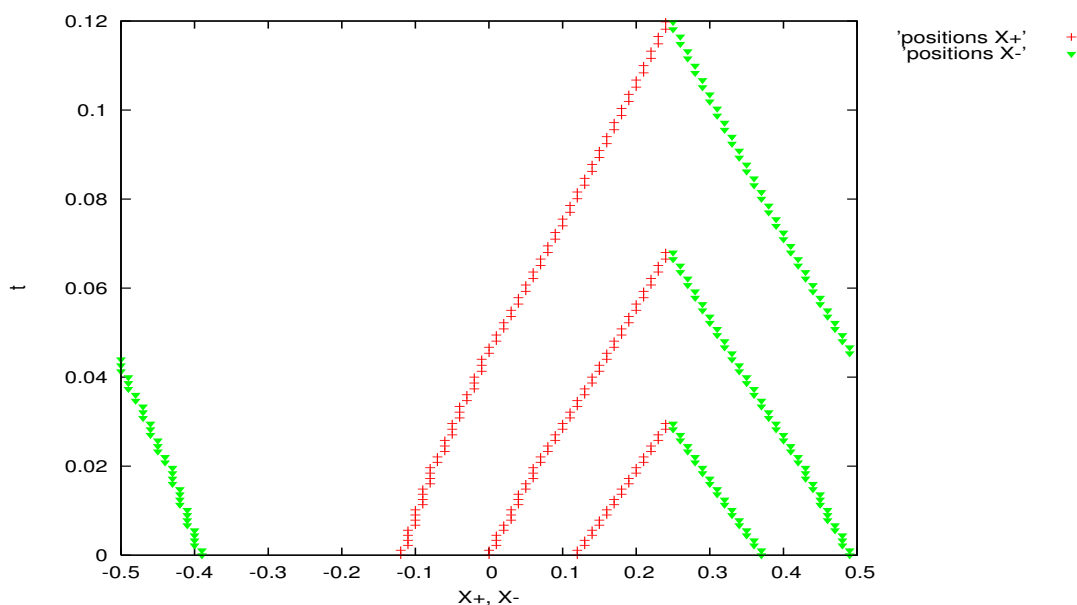


FIG. 4.1 – Annihilation des dislocations,  $A = 3, B = 0$

### 3.2 Simulations

On prend  $c^1(x) = A + B \sin(2\pi kx)$  où  $A, B \in \mathbb{R}$ ,  $k \in \mathbb{N}$ . Dans les figures suivantes, sont représentées les trajectoires des dislocations. L'axe des abscisses représente les positions des dislocations et l'axe des ordonnées représente le temps. La Fig. 4.1 montre qu'en absence d'obstacles, les trajectoires des dislocations sont linéaires. Les dislocations de vitesses opposées s'annihilent deux à deux. En présence d'un obstacle ( $k = 1$ ) les dislocations s'annihilent à après passage de l'obstacle (cf. Fig.4.2, Fig.4.3, Fig.4.4). Le même phénomène est observé si on augmente le nombre d'obstacles ( $k = 2$ ) (cf. Fig. 4.5). La Fig. 4.3 ( $A = 3, B = -3, k = 1$ ) montre les dislocations se collent deux à deux avant d'être annihilés. Mathématiquement, ceci veut dire que l'unicité d'une solution de viscosité discontinue n'est pas assurée.



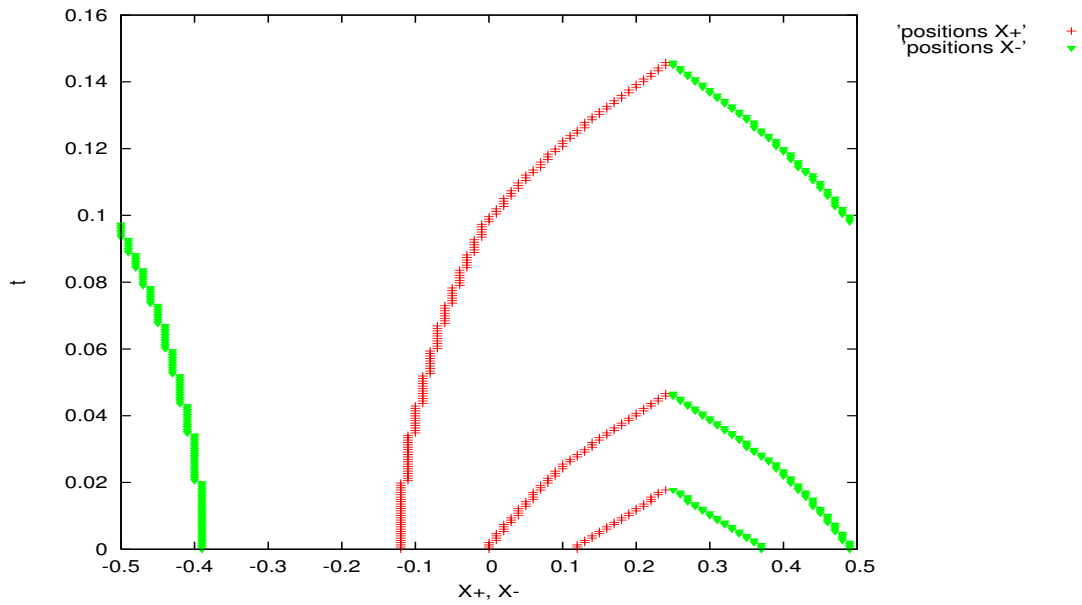


FIG. 4.2 – Annihilation des dislocations,  $A = 3, B = 3, k = 1$

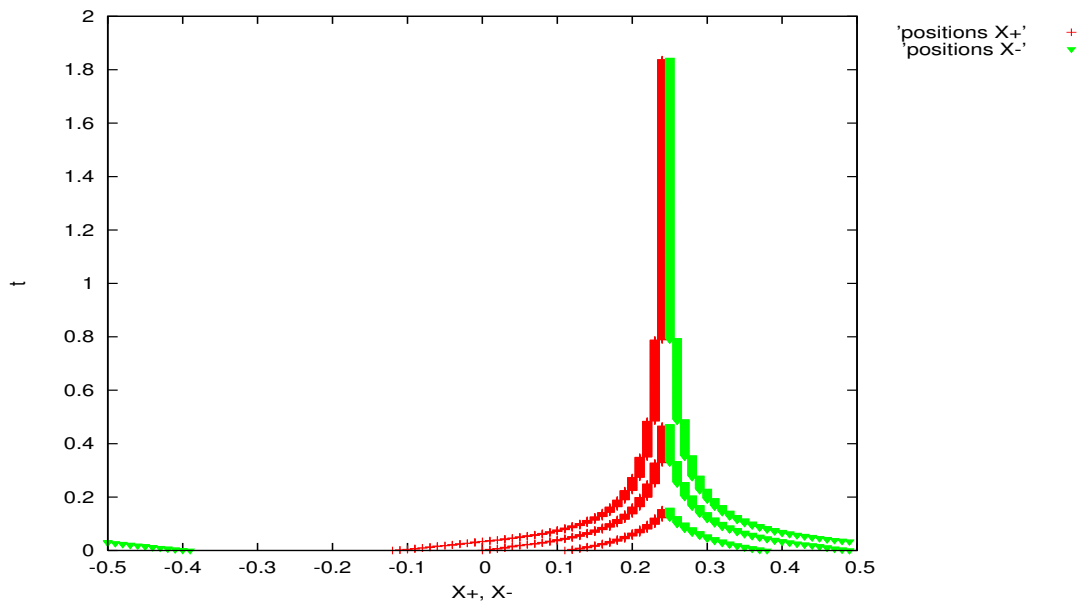


FIG. 4.3 – Annihilation des dislocations,  $A = 3, B = -3, k = 1$

### 3. Simuler l'annihilation des dislocations

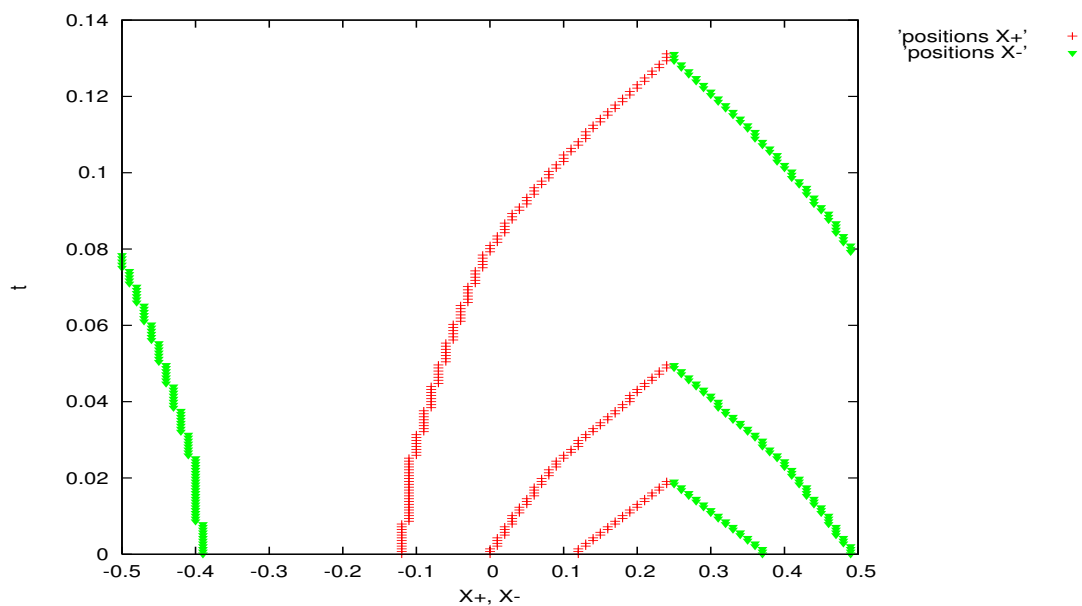


FIG. 4.4 – Annihilation des dislocations,  $A = 3, B = 2.5, k = 1$

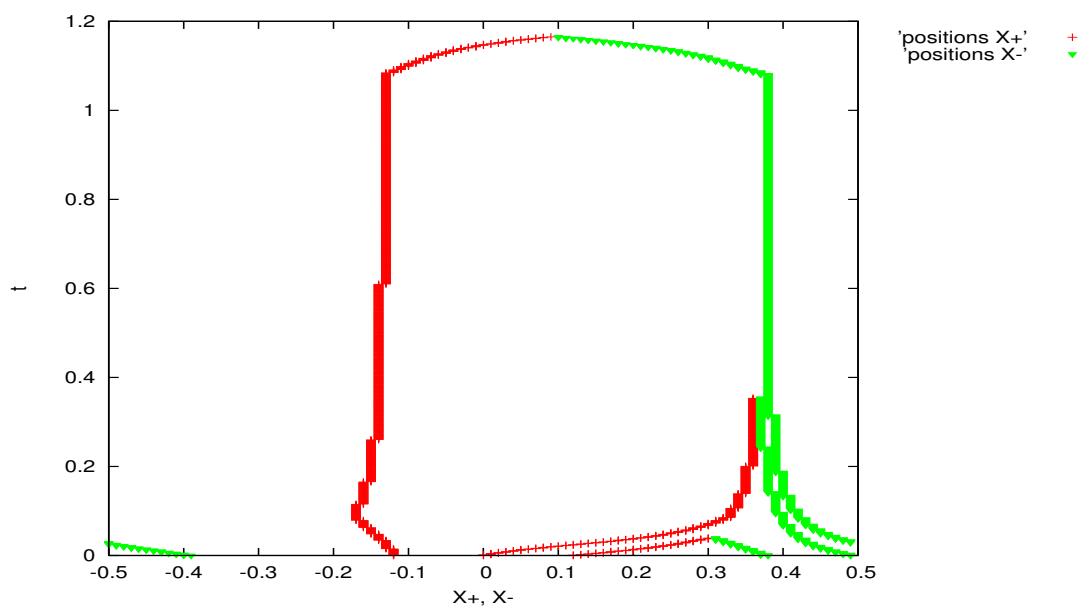


FIG. 4.5 – Annihilation des dislocations,  $A = 3, B = 2.5, k = 2$



# Bibliographie

- [1] G. Barles, *Solutions de Viscosité des Equations de Hamilton-Jacobi*, Springer-Verlag, Berlin, (1994).
- [2] M. Bardi and I. Capuzzo-Dolcetta, *Optimal control and viscosity solutions of Hamilton-Jacobi-Bellman equations*, Birkhäuser, Boston, (1997).
- [3] E. Rouy and A. Tourin, *A viscosity solutions approach to shape-from-shading*, SIAM J. Numer. Anal. 29 (3), 867-884, 1992.



Deuxième partie  
Homogénéisation



# Chapitre 5

## Annonce d'un résultat d'homogénéisation

Cet appendice est un proceedings du Colloque National MECAMAT, École de Mécanique des Matériaux (janvier 2006, Aussois, France).



# Comportement mécanique par homogénéisation de la dynamique des dislocations

A. Ghorbel, M. El Rhabi, R. Monneau

*CERMICS, École Nationale des Ponts et Chaussées  
6 & 8, avenue Blaise Pascal, Cité Descartes,  
Champs sur Marne, 77455 Marne-La-Vallée Cedex 2, FRANCE  
{ghorbel,elrhabi,monneau}@cermics.enpc.fr*

**Mots clés :** dislocations, mur de dislocations, homogénéisation numérique, équations d'Hamilton Jacobi.

## 1 Introduction

La plasticité des métaux est principalement due à la présence de lignes de défauts appelées dislocations. En ce qui concerne la déformation plastique des cristaux, elle résulte principalement du déplacement de ces dislocations, dont l'ordre de longueur typique dans les métaux est  $10^{-6}$  m et l'épaisseur  $10^{-9}$  m.

Dans cette étude, on considère la dynamique collective des dislocations en interactions. Dans ces conditions, les dislocations se regroupent en "murs" pour former des structures ordonnées à longue distance.

Dans cette note, on présente un modèle simple de dynamique de murs de dislocations coins de vecteurs de Burgers  $\pm \vec{b}$ . La dynamique des dislocations pour ce modèle est décrite par un système à deux inconnues (les dislocations + ou -) de deux équations de transport dont la vitesse est donnée par la force de Peach-Koehler contenant les contributions de toutes les dislocations, même à longue distance. Il s'agit ainsi d'un système d'équations Hamilton-Jacobi non locales. Nous calculons alors numériquement les vitesses moyennes des dislocations + ou - en fonction des contraintes imposées. Ceci nous permet de retrouver une loi de comportement du type  $\dot{\epsilon}^p = f(\sigma)$ , où  $\epsilon^p$  désigne le tenseur des déformations et  $\sigma$  le tenseur des contraintes.

Cette contribution s'articule comme suit. La section 2 rappelle le modèle et les équations le régissant. La section 3 présente les principaux résultats numériques. Enfin, nous en donnerons sommairement quelques perspectives dans la section 4.

## 2 Description du modèle

On considère un cristal tridimensionnel supposé soumis à une contrainte extérieure (lamination, température ...). Les plans de glissement de ce matériau sont supposés parallèles au plan  $(xz)$  dans un repère  $(Oxyz)$  de l'espace (voir figure 5.1). La distance entre deux plans de glissement est imposée constante et notée  $\varepsilon$ , telle que  $0 < \varepsilon < 1$  (voir figure 5.1). Dans chacun de ces plans de glissement, on considère des lignes de dislocations droites et parallèles à l'axe  $(Oz)$ , réparties uniformément. On suppose alors l'existence de dislocations de vecteur de burgers  $+\vec{\mathbf{b}}$  (notées dislocations  $+$ ) et des dislocations de vecteur de burgers  $-\vec{\mathbf{b}}$  (notées dislocations  $-$ ), avec  $\pm\vec{\mathbf{b}}$  parallèle à  $(Ox)$ .

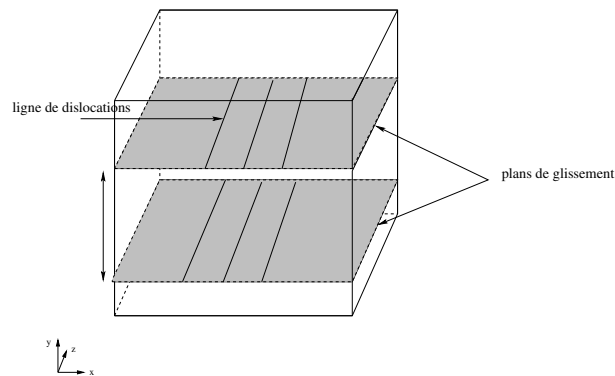


FIG. 5.1 – Le domaine 3D

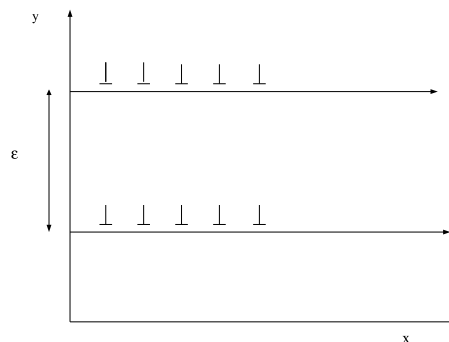


FIG. 5.2 – Coupe 2D correspondant aux dislocations suivant  $+\vec{\mathbf{b}}$ .

En considérant une coupe suivant le plan  $(xy)$ , ces lignes de dislocations se réduisent à des points. Sur l'axe parallèle à  $(Ox)$ , la dynamique de ces dislocations évolue en fonction d'une part, des sollicitations extérieures et d'autre part, en fonction des interactions entre dislocations du même type et des frottements entre dislocations de type opposé (voir figure 5.2).

## 2.1 Le modèle

En supposant que la distribution des dislocations est  $\varepsilon$ -périodique par rapport à l'axe  $(Oy)$  et que le nombre de dislocations de type  $+$  est égal au nombre de type  $-$ , on peut alors se ramener à l'étude du problème unidimensionnel donnée par les équations d'Hamilton-Jacobi non-locales suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u^+}{\partial t}(x, t) + c[u^+, u^-] \left| \frac{\partial u^+}{\partial x}(x, t) \right| = 0 \text{ dans } \mathbb{R} \times (0, +\infty), \\ \frac{\partial u^-}{\partial t}(x, t) - c[u^+, u^-] \left| \frac{\partial u^-}{\partial x}(x, t) \right| = 0 \text{ dans } \mathbb{R} \times (0, +\infty), \\ c[u^+, u^-] = (\sigma^{ext} + c_0 \star [E[u^+(\cdot, t)] - E[u^-(\cdot, t)]]) \end{array} \right. \quad (5.1)$$

où  $E[.]$  désigne la fonction partie entière,  $u^+$  (resp.  $u^-$ ) est une fonction scalaire (non physique) dont les sauts de partie entière repèrent les positions des dislocations de type  $+$  (resp.  $-$ ). Par exemple, si  $u^+(x, t) = Px$ ,  $P \in \mathbb{N}^*$ , les dislocations sont repérées par les positions  $x_i^+ = \frac{i}{P}$ ,  $i \in \mathbb{Z}$ .

$\sigma^{ext}$  représente la contrainte extérieure supposée constante et  $c_0$  est une fonction paire, à moyenne nulle, qui décrit les interactions entre dislocations.

## 2.2 Les conditions initiales et les hypothèses du modèle

Pour la position du problème 5.1, on suppose que les solutions vérifient :

$$(H1) \quad u^\pm(x, t) = u^{\pm, per}(x, t) + \rho x,$$

où  $u^{+, per}(x, t)$  (resp.  $u^{-, per}(x, t)$ ) est fonction 1-périodique.  $\rho$  étant la densité de dislocations de type  $+$  ou  $-$  par unité de longueur suivant l'axe  $(Ox)$ . On considère le système défini par (5.1) avec les conditions initiales :  $u^\pm(x, 0) = u_0^\pm(x)$  vérifiant (H1).

Dans le cas où  $u^- = 0$ , et avec des conditions initiales vérifiant (H1), l'existence et l'unicité de solution du problème (5.1) ont été établies en temps court dans (Ghorbel et Monneau, 2005) et pour tout temps dans (Ghorbel et Monneau, en cours).

Ici, on s'intéresse à la compréhension de la dynamique de murs formés par les dislocations de même type, ainsi qu'à son homogénéisation numérique (en temps) et plus particulièrement aux frottements entre dislocations de type opposé.

### 2.3 L'homogénéisation

Si on pose :

$$u_{\delta}^{\pm}(x, t) = \delta u^{\pm}\left(\frac{x}{\delta}, \frac{t}{\delta}\right) \quad (5.2)$$

avec  $u^+$  et  $u^-$  sont des solutions du problème (5.1). Formellement, on s'attend à ce que  $u_{\delta}^+$  (resp.  $u_{\delta}^-$ ) converge, quand  $\delta \rightarrow 0$ , vers  $\bar{u}^+(x, t)$  (resp.  $\bar{u}^-(x, t)$ ) vérifiant des équations homogénéisées du type :

$$\frac{\partial \bar{u}^{\pm}}{\partial t} = \bar{H}^{\pm}(\sigma^{ext}, \frac{\partial \bar{u}^+}{\partial x}, \frac{\partial \bar{u}^-}{\partial x}), \quad (5.3)$$

où  $\bar{H}^{\pm}$  sont des hamiltoniens effectifs et  $\frac{\partial \bar{u}^+}{\partial x}$ , ici, représentent les densités de dislocations. Lorsque  $\frac{\partial \bar{u}^+}{\partial x} = \frac{\partial \bar{u}^-}{\partial x} = \rho$ , l'équation (5.3) permet alors de déduire une loi de comportement dans un matériau macroscopique :

$$\dot{\epsilon}^p = \tilde{H}(\sigma^{ext}, \rho). \quad (5.4)$$

où  $\tilde{H} = 2\bar{H}(\sigma^{ext}, \rho, \rho)$ ,  $\bar{H} = \bar{H}^{\pm}$  et  $\epsilon^p$ , la déformation plastique représentée par  $\bar{u}^+ + \bar{u}^-$ .

### 2.4 Calcul de la fonction $c_0$

Dans le cas de dislocations coins et dans un matériau isotrope, la contrainte en cisaillement  $\sigma_{xy}$ , créée par une dislocation, est donnée par (voir (Hirth et Lothe, 1982) page 76) :

$$\sigma_{xy} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$

où  $\mu$  et  $\nu$  sont respectivement les constantes de Lamé et de Poisson.  $b$  est la norme du vecteur de Burgers.

Maintenant, si l'on considère les différentes interactions par sommation des contributions individuelles le long du mur de dislocations on obtient alors la contrainte (voir (Hirth et Lothe, 1982), page 732) :

$$\sigma_{xy}(x, y) = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \sum_{k \in \mathbb{Z}} \frac{x(x^2 - (y - k\varepsilon)^2)}{(x^2 + (y - k\varepsilon)^2)^2}$$

ou encore, si l'on pose  $X = \frac{x}{\varepsilon}$  et  $Y = \frac{y}{\varepsilon}$

$$\sigma_{xy} = \frac{\mu b \pi X (\cosh(2\pi X) \cos(2\pi Y) - 1)}{\varepsilon (1 - \nu) (\cosh(2\pi X) - \cos(2\pi Y))^2},$$

Le noyau  $c_0$  est alors donné par la relation :

$$c_0(x) = \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x}(x, 0).$$

### 3 Simulations Numériques

Dans cette section, nous présentons les résultats de simulations pour estimer la fonction  $\tilde{H}$  introduite par (5.3). Les équations du problème (5.1) sont résolues numériquement par un schéma aux différences finies de type “upwind” (voir par exemple (Rouy et Tourin, 1992)). L’hamiltonien numérique effectif  $\tilde{H}^{num}$  est alors calculé en regardant l’évolution en temps long des solutions de (5.1) ce qui est, en fait, équivalent au passage à la limite dans (5.2).

La figure 5.3 représente le graphe de l’hamiltonien effectif  $\tilde{H}$  en fonction de  $\sigma^{ext}$ , la contrainte extérieure, pour différentes données initiales  $u_0^\pm$ . Pour les simulations, la densité de dislocations type  $\pm$  est fixée à  $\rho = 4$ . On obtient alors des hamiltoniens numériques antisymétriques. De plus, il apparaît clairement deux valeurs seuils (opposées)  $\sigma_0 = 0.09$  et  $-\sigma_0$  au delà desquelles l’hamiltonien n’est pas nul. Pour des valeurs de  $\sigma^{ext}$  du même ordre de grandeur que celles du terme décrivant les interactions entre dislocations, l’hamiltonien passe par un régime “transitoire” (de l’état de “piégeage” au “mouvement”) pour atteindre lorsque  $|\sigma^{ext}| \gg \sigma_0$ , un état où l’hamiltonien devient alors proportionnel à  $\sigma^{ext}$ , ce qui correspond à un mouvement conservatif de dislocations (dans ce test on a supposé qu’il n’y a pas de sources de dislocations).

En outre, au vu de ces simulations, il semble que les résultats concernant l’hamiltonien effectif numérique  $\tilde{H}$  soient peu dépendants des conditions initiales choisies.

### 4 Perspectives

Nous envisageons d’approfondir ce modèle et de considérer les liens avec d’autres modèles à partir de la littérature de la physique des densités de dislocations (par exemple le modèle de Groma-Balogh) et celle de la mécanique.

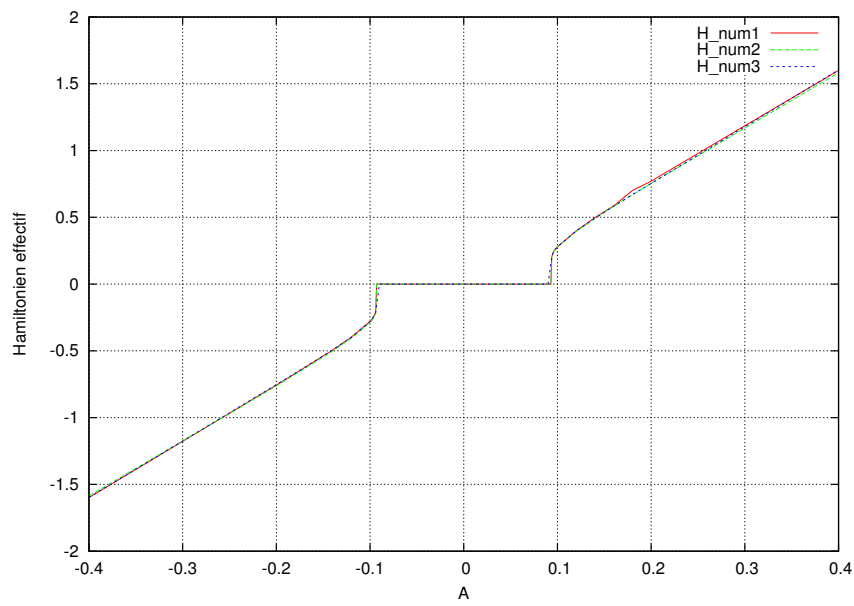


FIG. 5.3 – Le graphe de l’hamiltonien effectif en fonction de la contrainte  $\sigma^{ext}$ ;  $\dot{\epsilon} = \tilde{H}(\sigma^{ext}, \rho)$  pour  $\rho = 4$

## 5 Remerciements

Nous remercions Philippe Hoch, ingénieur de Recherche au CEA, pour nos nombreuses discussions enrichissantes.



# Bibliographie

- [1] Ghorbel A. & Monneau R., "Équation d'Hamilton-Jacobi non locale modélisant la dynamique des dislocations.", *Proceedings of the 2<sup>nd</sup> TAM-TAM, (Trends in Applied Mathematics in Tunisia, Algeria, Morocco)*,(2005), pp. 322-328.
- [2] Ghorbel A. & Monneau R., "Well-posedness of a non-local transport equation modelling dislocations dynamics.", *Paper in progress*.
- [3] Hirth J.P. & Lothe J., "Theory of dislocations", *Second Edition, Krieger Publishing company Malabar, Florida 32950*, (1982).
- [4] Rouy E. & Tourin A., "A viscosity solutions approach to shape-from-shading.", *SIAM J. Numer. Anal*, **23**, 3, (1992), pp. 867-884.





## Chapitre 6

# Homogénéisation numérique de la dynamique des dislocations

Ce chapitre est un article soumis à la revue *Int. J. of Computing Science and Mathematics*. Nous nous intéressons au mouvement collective des dislocations dans un cristal. Mathématiquement on étudie l'homogénéisation d'une équation de Hamilton-Jacobi non-locale. On prouve des propriétés qualitatives de l'hamiltonien effectif. Un schéma numérique est proposé pour lequel on démontre qu'il est monotone sous certaines conditions CFL. En utilisant ce schéma, on calcule numériquement l'hamiltonien effectif. De plus nous donnons des simulations de l'hamiltonien effectif pour d'autres modèles de dynamique de dislocations pour lequel aucune analyse théorique n'est faite.

## A Numerical Study for the Homogenization of One-Dimensional Models describing the Motion of Dislocations

A. Ghorbel<sup>1</sup>, P. Hoch<sup>2</sup>, R. Monneau<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*CERMICS, École Nationale des Ponts et Chaussées, 6 & 8, avenue Blaise Pascal,  
cité Descartes, Champs-sur-Marne, 77455 Marne-la-Vallée, France*

<sup>2</sup>*CEA/DAM Ile de France, Service DCSA/SSEL, BP 12, 91680 Bruyères Le  
Chatel.*

Abstract : In this paper we are interested in the collective motion of dislocations defects in crystals. Mathematically we study the homogenization of a non-local Hamilton-Jacobi equation. We prove some qualitative properties on the effective hamiltonian. We also provide a numerical scheme which is proved to be monotone under some suitable CFL conditions. Using this scheme, we compute numerically the effective hamiltonian. Furthermore we also provide numerical computations of the effective hamiltonian for several models corresponding to the dynamics of dislocations where no theoretical analysis is available.

**AMS Classification :** 35B27, 35F20, 35F25, 35K55, 49L25, 65N06, 65N12, 74N05.

**Keywords :** continuous viscosity solution, Dislocations dynamics, eikonal equation, effective hamiltonian, finite difference scheme, Hamilton-Jacobi equation, non-local equation, numerical homogenization, Peach-Koehler force, transport equation.

## 1 Introduction

In this paper we study the homogenization of non-local Hamilton-Jacobi equations modelling dislocations dynamics, we propose a scheme and provide numerical simulations for several models.

## 1.1 Physical modelling of dislocations dynamics

In this work, we are interested in the collective behaviour of several dislocations moving in a crystal. Dislocations are defects present in real crystals and are at the origin of the plastic behaviour of metals. We refer to [12] for a physical description of dislocations.

In our work and in the simplest case, we consider a particular geometry of parallel dislocations lines moving in the same plane. This particular geometry can be modeled by a 1D problem where the position of the dislocations is given by the point  $x \in \mathbb{R}$  where a function  $u(x, t)$  takes integer values. In the simplest case, we assume that  $u$  satisfies the following non-local Hamilton-Jacobi equation (see [10] and [13] for a study of a similar model)

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = c[u](x, t) \left| \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) \right| & \text{in } \mathbb{R} \times (0, +\infty) \\ c[u](x, t) = A + c^1(x) + c^{\text{int}}[u](x, t) \\ c^{\text{int}}[u](x, t) = \int_{\mathbb{R}} c^0(x') u(x - x', t) dx' \end{cases} \quad (6.1)$$

with initial condition

$$u(x, 0) = u_0(x) \quad \text{on } \mathbb{R} \quad (6.2)$$

Here  $c[u]$  denotes the velocity of the dislocations. It is the sum of three terms :  $c^{\text{int}}$  is the contribution created by the interactions with all the dislocations, and is given by a convolution,  $c^1$  is a microscopic field created by the other defects in the crystal and  $A \in \mathbb{R}$  is the exterior applied stress.

We will study problem (6.1) and similar equations in the framework of viscosity solutions. Let us recall that the notion of viscosity solution was first introduced by Crandall and Lions in [6] for first order Hamilton-Jacobi equations. For an introduction to this notion, see in particular the books of Barles [4], and of Bardini and Capuzzo-Dolcetta [3], and the User's guide of Crandall, Ishii and Lions [7].

We assume that the kernel  $c^0$  satisfies

$$c^0(x) = c^0(-x) \text{ and } \int_{\mathbb{R}} c^0(x) dx = 0. \quad (6.3)$$

We also assume the periodicity and the regularity of the micro-stress  $c^1$

$$c^1(x + 1) = c^1(x) \quad \text{on } \mathbb{R}, \quad \text{and } c^1 \text{ is Lipschitz-continuous} \quad (6.4)$$

## 1.2 Goal of the paper

We want to understand the properties of the solutions of (6.1) for  $A = 0$  at a large scale defining

$$u^\varepsilon(x, t) = \varepsilon u\left(\frac{x}{\varepsilon}, \frac{t}{\varepsilon}\right)$$

where  $\varepsilon$  is the ratio between the mesoscopic scale and the microscopic scale associated to dislocations (like distances between obstacles to the motion of dislocations).

Homogenization of Hamilton-Jacobi Equations was studied by Lions, Papanicolaou and Varadhan in [15] and this work was followed by a large literature on the subject, that would be difficult to cite here.

For this equation (see [13]) and for a certain class of kernels  $c^0$ , it is known that  $u^\varepsilon$  converges to  $u^0$ , solution of

$$\frac{\partial u^0}{\partial t} = \bar{H}\left(I_1 u^0, \frac{\partial u^0}{\partial x}\right)$$

where  $I_1$  is a non-local Levy operator, and  $\bar{H}$  is the effective hamiltonian given by the following definition.

### Definition 1.1 (Effective hamiltonian)

We assume (6.4). For  $(A, p) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}$ , the effective hamiltonian  $\bar{H}(A, p)$  is defined by

$$\bar{H}(A, p) = \lim_{t \rightarrow +\infty} \frac{w(x, t)}{t} \quad (\text{independent on } x) \quad (6.5)$$

where  $w$  solves the "cell problem", i.e.  $w$  solves (6.1) with  $w(x, 0) = px$ .

Then the goal of the present paper is to compute numerically  $\bar{H}(A, p)$  for equation (6.1) for specific kernels  $c^0$ . In particular, we numerically check that the ergodicity property (6.5) holds for general kernels  $c^0$  (like for instance for the Peierls-Nabarro model, see subsection 5.2), even in the case where the equation has no comparison principle and it is even not clear if (6.5) holds theoretically. We also do some simulations for some similar equations or systems of equations. To this end, we implemented several numerical schemes.

## 1.3 Brief presentation of our results

We present here properties of the effective hamiltonian and the scheme used to compute it numerically. We prove the following qualitative result on the effective hamiltonian.

**Theorem 1.2 (Monotonicity of the effective hamiltonian)**

For the choice  $c^0 = -\delta_0 + J$  with  $\delta_0$  is a Dirac mass and  $J \in C^\infty(\mathbb{R})$  is such that

$$\begin{cases} J(-x) = J(x) \geq 0 & ; \quad \int_{\mathbb{R}} J(x) dx = 1 \quad \text{and} \quad \int_{\mathbb{R}} |x| J(x) dx < +\infty \\ c_2 := \inf_{\delta \in [0,1]} \int_{\mathbb{R}} \min(J(z), J(z + \delta)) dz > 0 \end{cases} \quad (6.6)$$

Then the effective hamiltonian given in Definition 1.1 satisfies

1.  $\bar{H}(A, p)$  is non-decreasing in  $A$ .
2. If  $\int_{\mathbb{R}} c^1(x) dx = 0$  then  $\bar{H}(0, p) = 0$  and  $A\bar{H}(A, p)$  is non-decreasing in  $|p|$  and satisfies

$$\text{sgn}(A) \left( |A| + 1 + \frac{2}{c_2} \right) \geq \text{sgn}(A) \frac{\partial \bar{H}}{\partial |p|}(A, p) \geq 0.$$

We build a finite difference scheme of order one in space and time using an explicit Euler scheme in time and an upwind scheme in space. Given a mesh size  $\Delta x$ ,  $\Delta t$  and a lattice  $I_d = \{(i\Delta x, n\Delta t); i \in \mathbb{Z}, n \in \mathbb{N}\}$ ,  $(x_i, t_n)$  denotes the node  $(i\Delta x, n\Delta t)$  and  $v^n = (v_i^n)_i$  the values of the numerical approximation of the continuous solution  $u(x_i, t_n)$ . We then consider the following numerical scheme :

$$v_i^0 = u_0(x_i), \quad v_i^{n+1} = v_i^n + \Delta t c_i(v^n) \times \begin{cases} D_x^+ v_i^n & \text{if } c_i(v^n) \geq 0 \\ D_x^- v_i^n & \text{if } c_i(v^n) < 0 \end{cases} \quad (6.7)$$

with  $D_x^- v_i^n = \frac{v_i^n - v_{i-1}^n}{\Delta x}$  and  $D_x^+ v_i^n = \frac{v_{i+1}^n - v_i^n}{\Delta x}$ . The discrete velocity is

$$c_i(v^n) = A + c^1(x_i) + c_i^{\text{int}}(v^n) \quad (6.8)$$

We approximate the non-local term  $c^0 \star u$  by

$$\begin{cases} c_i^{\text{int}}(v^n) = -v_i^n + \sum_{l \in \mathbb{Z}} J_l v_{i-l}^n \Delta x \\ J_i = \frac{1}{\Delta x} \int_{I_i} J(x) dx \quad \text{and} \quad I_i = \left[ x_i - \frac{\Delta x}{2}, x_i + \frac{\Delta x}{2} \right]. \end{cases} \quad (6.9)$$

Several works have been done for the discretization of more general first order Hamilton-Jacobi equations (even with boundary conditions). We refer in particular to the work of Abgrall [1].

Then we have the following result about monotonicity of the scheme (6.7) for the special kernel  $c^0 = -\delta_0 + J$ .

**Theorem 1.3 (Monotonicity of the scheme)**

We assume that

$$v_{i+1}^0 \geq v_i^0, \quad \forall i \in \mathbb{Z} \quad (6.10)$$

$$\text{(respectively } w_{i+1}^0 \geq w_i^0, \quad \forall i \in \mathbb{Z}) \quad (6.11)$$

If the time step  $\Delta t$  satisfies

$$\Delta t \leq \left( \sup_{j \in \mathbb{Z}} \frac{|c_{j+1}(v^k) - c_j(v^k)|}{\Delta x} \right)^{-1}, \quad \text{for } 0 \leq k \leq n \quad (6.12)$$

$$\text{(respectively } \Delta t \leq \left( \sup_{j \in \mathbb{Z}} \frac{|c_{j+1}(w^k) - c_j(w^k)|}{\Delta x} \right)^{-1}, \quad \text{for } 0 \leq k \leq n) \quad (6.13)$$

Then we have the monotonicity preservation :

$$v_{i+1}^k \geq v_i^k, \quad \forall i \in \mathbb{Z}, \quad \forall 0 \leq k \leq n+1 \quad (6.14)$$

$$\text{(respectively } w_{i+1}^k \geq w_i^k, \quad \forall i \in \mathbb{Z}, \quad \forall 0 \leq k \leq n+1) \quad (6.15)$$

Assume moreover that

$$v_i^0 \geq w_i^0, \quad \forall i \in \mathbb{Z}. \quad (6.16)$$

If the time step  $\Delta t$  satisfies moreover

$$\Delta t \sup_{j \in \mathbb{Z}} \left\{ \max \left( \frac{v_{j+1}^k - v_j^k}{\Delta x}, \frac{w_{j+1}^k - w_j^k}{\Delta x} \right) \right\} \leq \frac{1}{2} \quad \text{for } 0 \leq k \leq n \quad (6.17)$$

and

$$\frac{\Delta t}{\Delta x} \leq \frac{1}{2} \left( \sup_{j \in \mathbb{Z}} \{ \max (|c_j(v^k)|, |c_j(w^k)|) \} \right)^{-1} \quad \text{for } 0 \leq k \leq n \quad (6.18)$$

Then

$$v_i^k \geq w_i^k, \quad \forall i \in \mathbb{Z} \quad \text{for } 0 \leq k \leq n+1. \quad (6.19)$$

**Remark 1.4** There would be no monotonicity of the scheme if  $J$  would be negative.

We use this scheme to compute numerically an approximation  $\bar{H}^{\text{num}}(A, p)$  of  $\bar{H}(A, p)$ . We numerically check that  $\bar{H}^{\text{num}}(A, p)$  satisfies the monotonicity properties given in Theorem 1.2. We also compute the effective hamiltonian for other similar equations (like for instance the case with Peierls-Nabarro kernel, see subsection 5.2), and for some systems of equations (see Section 6). We have used the software DISLO++(see

Part III), written in C++, and in which some routines are used to visualize with PLOTMTV graphs of the effective hamiltonian. These routines also exist in the software GO++ of Benamou and Hoch [5].

There are very few works on numerics for homogenization. Up to our knowledge, let us mention for convex first order hamiltonians the work of Gomes and Oberman [11] computing the effective hamiltonian using a variational approach and the work of Rorro [16] using semi-Lagrangian schemes.

### 1.4 Organization of the paper

In Section 2, we give the proof of Theorem 1.2. In Section 3, we study the numerical scheme and prove Theorem 1.3. In Section 4, we give numerical simulations corresponding to the scheme of Theorem 1.3. In Section 5, we present numerical simulations for similar equations with for instance the Peierls-Nabarro kernel. In Section 6, we present numerical simulations for systems of equations for two types of dislocations. Finally in the Appendix we provide the proof of a technical Lemma (Lemma 2.1) and give a brief derivation of the kernel for walls of dislocations.

## 2 Qualitative properties of the effective hamiltonian

Before to prove Theorem 1.2, we need the following lemma with the proof given in the Appendix.

### Lemma 2.1 (Coercivity of the convolution)

*Assume  $J$  satisfies (6.6) and  $c^0 = -\delta_0 + J$ . If  $u \in C_b^0(\mathbb{R})$  is maximal at  $Y \in \mathbb{R}$  and minimal at  $y \in \mathbb{R}$  and  $|Y - y| < 1$  then*

$$(c^0 \star u)(Y) - (c^0 \star u)(y) \leq -c_2 (u(Y) - u(y))$$

To keep light notation, we denote in this section by  $M$  the operator such that

$$(Mv)(x) = (c^0 \star v)(x) = -v(x) + \int_{\mathbb{R}} J(z)v(x-z) dz. \quad (6.20)$$

We will also need the following result.

### Lemma 2.2 (Existence of sub and supercorrectors)

*For any  $p \in \mathbb{R}$  and  $A \in \mathbb{R}$ , there exist  $\lambda \in \mathbb{R}$ , a subcorrector  $\underline{v}(x)$  and a supercorrector  $\bar{v}(x)$  which are 1-periodic in  $x$  and satisfy*

$$\lambda \leq |p + \partial_x \underline{v}| (c^1 + A + M\underline{v}), \quad \text{with } p(p + \partial_x \underline{v}) \geq 0 \quad \text{on } \mathbb{R}$$



$$\lambda \geq |p + \partial_x \bar{v}| (c^1 + A + M\bar{v}), \quad \text{with } p(p + \partial_x \bar{v}) \geq 0 \quad \text{on } \mathbb{R}$$

with

$$\max \underline{v} - \min \underline{v} \leq \frac{2}{c_2} |c^1|_{L^\infty(\mathbb{R})} \quad \text{and} \quad \max \bar{v} - \min \bar{v} \leq \frac{2}{c_2} |c^1|_{L^\infty(\mathbb{R})}$$

where  $c_2$  given in (6.6).

The proof of Lemma 2.2 is a slight adaptation of the work [13]. We give below a quick proof of this fact.

**SKECH OF THE PROOF OF LEMMA 2.2**

Let us work in the case  $p > 0$  (the case  $p < 0$  is similar, and for the case  $p = 0$ , we have  $\lambda = 0$  with a corrector equal to zero).

**Step 1**

Using the theory developed in [13], let us start to consider (using the fact that

$\int_{\mathbb{R}} |x| J(x) dx < +\infty$ ), for  $p > 0$ , the solution  $u$  of

$$\begin{cases} u_t = |\partial_x u| (c^1 + A + M(u - p \cdot)) \\ u(x, t = 0) = px \end{cases}$$

then  $\bar{\omega}(t) = \inf_x \partial_x u(t, x)$  formally satisfies

$$\bar{\omega}_t \geq |\bar{\omega}| (\partial_x c^1 + M\bar{\omega}) \geq |\bar{\omega}| (\partial_x c^1) \quad \text{with } \bar{\omega}(0) = p > 0$$

and therefore the bound from below on the possible exponential decay of  $\bar{\omega}$  implies that

$$\partial_x u \geq 0$$

This result can be justified rigorously using some classical viscosity arguments (as in [13]). We also know that  $u(t, x) - px$  is 1-periodic in  $x$ . We already know by [13] that there exists a unique  $\lambda \in \mathbb{R}$  such that  $v(t, x) = u(t, x) - px - \lambda t$  is bounded. Moreover  $\lambda = \bar{H}(A, p)$ . Let us now define  $Y_t$  and  $y_t$  such that  $M(t) := \max_x v(t, x) = v(t, Y_t)$  and  $m(t) := \min_x v(t, x) = v(t, y_t)$  and  $|Y_t - y_t| < 1$ , we get formally

$$\lambda + M'(t) \leq |p| (c^1(Y_t) + A + (Mv)(Y_t))$$

$$\lambda + m'(t) \geq |p| (c^1(y_t) + A + (Mv)(y_t))$$

which implies for  $p \neq 0$  that  $\omega(t) = M(t) - m(t)$  satisfies

$$\omega'(t)/|p| - ((Mv)(Y_t) - (Mv)(y_t)) \leq c^1(Y_t) - c^1(y_t)$$

## 2. Qualitative properties of the effective hamiltonian

---

And then by Lemma 2.1, we get that

$$\omega'(t)/|p| + c_2\omega(t) \leq c^1(Y_t) - c^1(y_t) \quad \text{with} \quad \omega(0) = 0.$$

This inequality can be justified rigorously by routine viscosity arguments. We deduce that for every  $t \geq 0$

$$\omega(t) = \max_x v(t, x) - \min_x v(t, x) \leq \frac{2}{c_2} |c^1|_{L^\infty(\mathbb{R})}$$

### Step 2

Considering the semi-relaxed limits of  $u(t, x) - px - \lambda t$  with the suppreum (resp. the infimum) in time, we build a subsolution  $\underline{v}$  (resp. a supersolution  $\bar{v}$ ) of the following equation

$$\lambda = |p + \partial_x v| (c^1 + A + Mv)$$

which satisfies the expected properties.

This ends the proof of the Lemma. □

### PROOF OF THEOREM 1.2

- 1) We first prove the monotonicity of  $\bar{H}(A, p)$  in  $A$ . Let us consider  $A_2 > A_1$ ,  $\lambda_i = \bar{H}(A_i, p)$ ,  $i = 1, 2$  and a subcorrector  $\underline{v}_1$  for  $(A, p)$  then we have

$$\begin{aligned} \lambda_1 &\leq |p + \partial_x \underline{v}_1| (c^1 + A_1 + M\underline{v}_1) \\ &\leq |p + \partial_x \underline{v}_1| (c^1 + A_2 + M\underline{v}_1) \end{aligned}$$

This shows  $\underline{v}_1(x) + px + \lambda_1 t$  is a subsolution to the cell problem which implies that  $\lambda_2 \geq \lambda_1$  *i.e.*  $\bar{H}(A_2, p) \geq \bar{H}(A_1, p)$ .

- 2) We now prove that  $\bar{H}(0, p) = 0$  in the case  $\int_{(0,1)} c^1 = 0$ . Let us define  $v_0$  as the periodic solution of

$$Mv_0 = -c^1 \quad \text{on } \mathbb{R} \tag{6.21}$$

such that  $\int_{(0,1)} v_0 = 0$ . We see that  $v_0$  is a corrector for the cell problem with  $\lambda = 0 = \bar{H}(0, p)$ .

- 3) Let us now show the monotonicity in  $|p|$  in the case  $\int_{(0,1)} c^1 = 0$ . For  $p_2 > p_1 > 0$  and  $A > 0$  such that  $\lambda_1 > 0$  with  $\lambda_i = \bar{H}(A, p_i)$ ,  $i = 1, 2$  (the other cases are similar), let us consider a subcorrector  $\underline{v}_1$  satisfying

$$0 < \lambda_1 \leq (p_1 + \partial_x \underline{v}_1) (c^1 + A + M\underline{v}_1) \quad \text{with} \quad p_1 + \partial_x \underline{v}_1 \geq 0$$

and a supercorrector  $\bar{v}_1$  satisfying

$$\lambda_1 \geq (p_1 + \partial_x \bar{v}_1) (c^1 + A + M\bar{v}_1) \quad \text{with} \quad p_1 + \partial_x \bar{v}_1 \geq 0$$

From Lemma 2.2, we also know that we can bound these sub/supercorrectors by  $\frac{2}{c_2} |c^1|_{L^\infty(\mathbb{R})}$ . Therefore

$$0 \leq c^1 + A + M\underline{v}_1 \quad \text{and} \quad \left(1 + \frac{2}{c_2}\right) |c^1|_{L^\infty(\mathbb{R})} \geq c^1 + M\underline{v}_1.$$

And then

$$\lambda_1 \leq \lambda_1 + (p_2 - p_1) (c^1 + A + M\underline{v}_1) \leq (p_2 + \partial_x \underline{v}_1) (c^1 + A + M\underline{v}_1)$$

which implies  $\lambda_2 \geq \lambda_1 > 0$ .

Similarly, we have

$$\begin{aligned} \lambda_1 + \left( \left(1 + \frac{2}{c_2}\right) |c^1|_{L^\infty(\mathbb{R})} + A \right) (p_2 - p_1) &\geq \lambda_1 + (p_2 - p_1) (c^1 + A + M\bar{v}_1) \\ &\geq (p_2 + \partial_x \bar{v}_1) (c^1 + A + M\bar{v}_1) \end{aligned}$$

which implies  $\lambda_2 \leq \lambda_1 + \left( \left(1 + \frac{2}{c_2}\right) |c^1|_{L^\infty(\mathbb{R})} + A \right) (p_2 - p_1)$  and gives the result. □

### 3 Monotonicity of the scheme

In this section we prove Theorem 1.3 . We will use the following result (consequence of Lemma 2.5.2 in [10])

**Lemma 3.1 (A monotonicity preserving scheme for prescribed velocity)**

*We assume that*

$$v_i^{n+1} = v_i^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} c_i^n \times \begin{cases} v_{i+1}^n - v_i^n & \text{if } c_i^n \geq 0 \\ v_i^n - v_{i-1}^n & \text{if } c_i^n < 0 \end{cases}$$

and

$$\Delta t \leq \frac{1}{2} \left( \sup_{j \in \mathbb{Z}} \frac{|c_{j+1}^k - c_j^k|}{\Delta x} \right)^{-1} \quad \text{for } 0 \leq k \leq n \quad (6.22)$$

If

$$v_{i+1}^0 \geq v_i^0, \quad \forall i \in \mathbb{Z}$$

then

$$v_{i+1}^k \geq v_i^k, \quad \forall i \in \mathbb{Z}, \quad \text{for } 0 \leq k \leq n+1.$$

**PROOF OF THEOREM 1.3**

Let  $(v_i^n)_{i \in \mathbb{Z}, n \in \mathbb{N}}$  and  $(w_i^n)_{i \in \mathbb{Z}, n \in \mathbb{N}}$  two discrete solutions, such that  $v_i^0$  and  $w_i^0$  are non-decreasing in  $i \in \mathbb{Z}$ . We set  $M^n(v) := \sup_{i \in \mathbb{Z}} \frac{v_{i+1}^n - v_i^n}{\Delta x}$  and  $M^n(w) := \sup_{i \in \mathbb{Z}} \frac{w_{i+1}^n - w_i^n}{\Delta x}$ .

One write the numerical scheme for  $v$  (and the same for  $w$ )

$$v_i^{n+1} = v_i^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} c_i(v^n) \times \begin{cases} v_{i+1}^n - v_i^n & \text{if } c_i(v^n) \geq 0 \\ v_i^n - v_{i-1}^n & \text{if } c_i(v^n) < 0 \end{cases} \quad (6.23)$$

with  $c_i(v^n)$  defined in (6.8)-(6.9). Let us assume that  $v_i^k \geq w_i^k$ ,  $\forall i \in \mathbb{Z}$ ,  $\forall 0 \leq k \leq n$ . Let us prove that it is still true for  $k = n+1$ .

**Case 1 : We assume that  $c_i(v^n) \geq 0$  and  $c_i(w^n) \geq 0$ .**

We have

$$v_i^{n+1} - w_i^{n+1} = v_i^n - w_i^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} (c_i(v^n) (v_{i+1}^n - v_i^n) - c_i(w^n) (w_{i+1}^n - w_i^n)).$$

One can add and subtract  $\frac{\Delta t}{\Delta x} c_i(w^n) (v_{i+1}^n - v_i^n)$ , and one obtains

$$\begin{aligned} v_i^{n+1} - w_i^{n+1} &= (v_i^n - w_i^n) \left( 1 - \frac{\Delta t}{\Delta x} c_i(w^n) \right) + \frac{\Delta t}{\Delta x} c_i(w^n) (v_{i+1}^n - w_{i+1}^n) \\ &\quad + \frac{\Delta t}{\Delta x} (c_i(v^n) - c_i(w^n)) (v_{i+1}^n - v_i^n) \\ &\geq (v_i^n - w_i^n) \left( 1 - \frac{\Delta t}{\Delta x} c_i(w^n) \right) + \frac{\Delta t}{\Delta x} (c_i(v^n) - c_i(w^n)) (v_{i+1}^n - v_i^n) \end{aligned}$$

where we have used the fact that  $v_{i+1}^n \geq w_{i+1}^n$ . Since

$$c_i(v^n) = A + c^1(x_i) - v_i^n + \sum_{j \in \mathbb{Z}} J_j v_{i-j}^n \Delta x \quad (6.24)$$

the difference between the discrete velocities can be written as

$$c_i(v^n) - c_i(w^n) = -(v_i^n - w_i^n) + \sum_{j \in \mathbb{Z}} J_j (v_{i-j}^n - w_{i-j}^n) \Delta x \quad (6.25)$$

and then we get (using  $J_j \geq 0$  and  $v_{i-j}^n - w_{i-j}^n \geq 0$ )

$$\begin{aligned} v_i^{n+1} - w_i^{n+1} &\geq (v_i^n - w_i^n) \left( 1 - \frac{\Delta t}{\Delta x} c_i(w^n) \right) - \frac{\Delta t}{\Delta x} (v_i^n - w_i^n) (v_{i+1}^n - v_i^n) \\ &\geq (v_i^n - w_i^n) \left( 1 - \frac{\Delta t}{\Delta x} c_i(w^n) - M^n(u) \Delta t \right) \end{aligned} \quad (6.26)$$

Therefore we have

$$v_i^{n+1} - w_i^{n+1} \geq (v_i^n - w_i^n) \left( 1 - \frac{\Delta t}{\Delta x} c_i(w^n) - M^n(u) \Delta t \right). \quad (6.27)$$

It is then sufficient to have the following two restrictions on the time step

$$\frac{\Delta t}{\Delta x} \leq \left( 2 \sup_{j \in \mathbb{Z}} |c_j(v^n)| \right)^{-1} \quad \text{and} \quad M^n(u) \Delta t \leq \frac{1}{2}$$

to deduce that the scheme is monotone in this case.

**Case 2 :** We assume that  $c_i(v^n) \leq 0$  and  $c_i(w^n) \leq 0$  .

We compute

$$v_i^{n+1} - w_i^{n+1} = v_i^n - w_i^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} c_i(v^n) (v_i^n - v_{i-1}^n) - \frac{\Delta t}{\Delta x} c_i(w^n) (w_i^n - w_{i-1}^n).$$

One can add and subtract  $\frac{\Delta t}{\Delta x} c_i(v^n) (w_i^n - w_{i-1}^n)$ , one obtains

$$\begin{aligned} v_i^{n+1} - w_i^{n+1} &= (v_i^n - w_i^n) \left( 1 + \frac{\Delta t}{\Delta x} c_i(v^n) \right) + \frac{\Delta t}{\Delta x} (c_i(v^n) - c_i(w^n)) (w_i^n - w_{i-1}^n) \\ &\quad - \frac{\Delta t}{\Delta x} c_i(v^n) (v_{i-1}^n - w_{i-1}^n) \end{aligned}$$

Since  $c_i(v^n) < 0$  and  $v_{i-1}^n \geq w_{i-1}^n$ , we get

$$\begin{aligned} v_i^{n+1} - w_i^{n+1} &\geq (v_i^n - w_i^n) \left( 1 + \frac{\Delta t}{\Delta x} c_i(v^n) \right) + \frac{\Delta t}{\Delta x} (c_i(v^n) - c_i(w^n)) (w_i^n - w_{i-1}^n) \\ &\geq (v_i^n - w_i^n) \left( 1 + \frac{\Delta t}{\Delta x} c_i(v^n) - M^n(w) \Delta t \right) \\ &\geq 0 \end{aligned}$$

$$\text{if } \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq \left( 2 \sup_{j \in \mathbb{Z}} |c_j(u^n)| \right)^{-1} \quad \text{and} \quad M^n(v) \Delta t \leq \frac{1}{2}.$$

**Case 3 :** We assume that  $c_i(v^n) \geq 0$  and  $c_i(w^n) < 0$  .

We compute

$$\begin{aligned} v_i^{n+1} - w_i^{n+1} &= v_i^n - w_i^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} c_i(v^n)(v_{i+1}^n - v_i^n) - \frac{\Delta t}{\Delta x} c_i(w^n)(w_i^n - w_{i-1}^n) \\ &\geq v_i^n - w_i^n \end{aligned}$$

because  $v_{i+1}^n - v_i^n \geq 0$  and  $w_i^n - w_{i-1}^n \geq 0$ . It is then sufficient to assume that

$$\Delta t \leq \left( \sup_{j \in \mathbb{Z}} \frac{|c_{j+1}(v^k) - c_j(v^k)|}{\Delta x} \right)^{-1} \quad \text{for } 0 \leq k \leq n \quad (6.28)$$

$$\text{and } \Delta t \leq \left( \sup_{j \in \mathbb{Z}} \frac{|c_{j+1}(w^k) - c_j(w^k)|}{\Delta x} \right)^{-1} \quad \text{for } 0 \leq k \leq n \quad (6.29)$$

to guarantee the monotonicity of  $v$  and the monotonicity of  $w$  using Lemma 3.1.

**Case 4 :** We assume that  $c_i(v^n) < 0$  and  $c_i(w^n) \geq 0$  .

We compute

$$v_i^{n+1} - w_i^{n+1} = v_i^n - w_i^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} c_i(v^n)(v_i^n - v_{i-1}^n) - \frac{\Delta t}{\Delta x} c_i(w^n)(w_i^n - w_{i-1}^n).$$

But

$$\begin{aligned} 0 &> c_i(v^n) - c_i(w^n) \\ &= -(v_i^n - w_i^n) + \sum_l J_l(v_{i-l}^n - w_{i-l}^n) \\ &\geq -(v_i^n - w_i^n) \end{aligned}$$

and for general  $c_+ \geq 0$ ,  $c_- \leq 0$  and  $a, b \geq 0$  we have

$$|c_- a - c_+ b| \leq \max(a, b) |c_+ - c_-|$$

and then

$$\begin{aligned} |c_i(v^n)(v_i^n - v_{i-1}^n) - c_i(w^n)(w_{i+1}^n - w_{i+1}^n)| &\leq \Delta x \max(M^n(v), M^n(w)) |c_i(v^n) - c_i(w^n)| \\ &\leq \Delta x \max(M^n(v), M^n(w))(v_i^n - w_i^n) \end{aligned}$$

Therefore

$$\begin{aligned} v_i^{n+1} - w_i^n &\geq (v_i^n - w_i^n)(1 - \Delta t \max(M^n(v), M^n(w))) \\ &\geq 0 \end{aligned}$$

if we assume  $\Delta t \max(M^n(v), M^n(w)) \leq 1$  and (6.28)-(6.29).

□

## 4 Computation of the effective hamiltonian for equation (6.1)

We recall here that the effective hamiltonian is given in Definition 1.1. Numerically we compute  $\bar{H}(A, p)$  for

$$p = \frac{P}{Q} \quad \text{for a fixed } Q \in \mathbb{N} \setminus \{0\} \quad \text{and } P \in \mathbb{Z} \quad (6.30)$$

Because  $p$  is given by (6.30), we know that the solution  $w$  to (6.1) with initial value given by  $w(x, 0) = px$  satisfies

$$w(x + Q, t) = w(x, t) + P.$$

For this reason, numerically we restrict the computation on the interval  $\left[-\frac{Q}{2}, \frac{Q}{2}\right]$  with periodic boundary conditions for  $\bar{w}(x, t) = w(x, t) - px$  and we write the equation for  $\bar{w}$ . In particular we also choose  $\Delta x$  such that  $\frac{Q}{\Delta x} \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$ .

We then use the numerical scheme of Theorem 1.3 with  $\Delta t$  satisfying the CFL conditions stated in Theorem 1.3, which guarantees the monotonicity of the scheme.

### 4.1 The method to compute the effective hamiltonian

Here we describe two possible strategies to compute numerically the effective hamiltonian  $\bar{H}^{\text{num}}(A, p)$ .

**Method 1 :** Using the numerical solution  $w^n$  of (6.7), we take its values at two discrete times  $t_1 > 0$  and  $t_2 > 0$  at a discrete point  $x_{\text{ref}}$  and we define  $\bar{H}^{\text{num}}(A, p) = \frac{v(x_{\text{ref}}, t_2) - v(x_{\text{ref}}, t_1)}{t_2 - t_1}$  for  $t_2 - t_1$  large enough, which is difficult to fix in practice.

**Method 2 :** We follow the position of a dislocation (as a marker) starting from a point  $x_{\text{ref}}$  at time  $t_1$  and waiting until it passes a second time (in the "periodic" interval  $[-Q/2, Q/2]$ ) at the same point at time  $t_2$ , and we define  $\bar{H}^{\text{num}}(A, p) = \frac{|P|}{t_2 - t_1}$  with  $p = \frac{P}{Q}$  (see Figure 6.1). Here  $\frac{\bar{H}^{\text{num}}(A, p)}{p}$  can be interpreted as an effective velocity.

In practice we prefer to use the Method 2 in general, because, given a time  $t_1$  large enough, it provides naturally a time  $t_2$ . On the contrary, the result given by the Method 1 can be more sensitive to the choice of  $t_2$  with respect to  $t_1$ .

---

#### 4. Computation of the effective hamiltonian for equation (6.1)

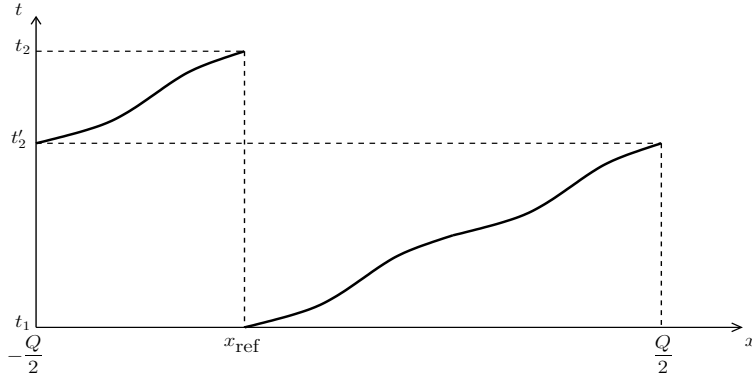


FIG. 6.1 – Tracking the trajectory of a dislocation until it comes back to the initial position

#### 4.2 Results of the numerical simulations

Let us recall that the convolution is written as

$$\begin{aligned}
 c_{\mathbb{R}}^0 \star w &= c_{\mathbb{R}}^0 \star (w - px) \\
 &= -\bar{w} + J_{\mathbb{R}} \star \bar{w} \\
 &= -\bar{w} + J^* \star_{[-\frac{Q}{2}, \frac{Q}{2})} \bar{w}
 \end{aligned} \tag{6.31}$$

with

$$J^*(x) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} J(x + kQ). \tag{6.32}$$

For the present simulations we choose

$$J^*(x) = \frac{1}{Q} \quad \text{for } x \in \left[-\frac{Q}{2}, \frac{Q}{2}\right). \tag{6.33}$$

We choose

$$c^1(x) = B \sin(2\pi kx) \quad \text{with } k \in \mathbb{N} \setminus \{0\}. \tag{6.34}$$

For the simulations we have the following particular choices.



Figure	6.2	6.3	6.4	6.5	6.6	6.7	6.8
$c^0$	$-\delta_0 + J$	$-\delta_0 + J$	$-\delta_0 + J$	$-\delta_0 + J$	$-\delta_0 + J$	$-\delta_0 + J$	$-\delta_0 + J$
$p$	0.3125	(0, 10)	$2.5/k, k = 1, 2, 3, 4$	(-10, 10)	(-10, 10)	3	3
$A$	(-10, 10)	$B/k, k = 1, 2, 3, 4$	(0, 10)	(-10, 10)	(-10, 10)	2	2
$B$	1	1	1	1	1	0	2
$k$	1	1	1	1	1	2	2
$Q$	10	10	10	10	10	1	1
$\Delta x$	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01
$\Delta t$	$< 10^{-3}$	$< 10^{-3}$	$< 10^{-3}$	$< 10^{-3}$	$< 10^{-3}$	$2.49 \cdot 10^{-3}$	$1.24 \cdot 10^{-3}$
$t_1$	10	10	10	10	10	-	-

Figure	6.9	6.10	6.11	6.13	6.14	6.16
$c^0$	$-\delta_0 + J$	$-\delta_0 + J$	(6.36)	$-\delta_0 + J$	(6.36)	(6.39)
$p$	3	$2.5/k, k = 1, 2, 3, 4$	1, 2, 5, 10	(0.1, 2)	1, 2, 3, 4	0.2, 0.4, 0.7
$A$	2.5	(0, 10)	(0, 10)	(0, 10)	(0, 10)	(0, 10)
$B$	2	1	1	-	-	-
$k$	1	1	1	-	-	-
$Q$	1	10	10	10	10	10
$\Delta x$	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01
$\Delta t$	$1.11 \cdot 10^{-3}$	$< 10^{-3}$	$< 10^{-3}$	$< 10^{-4}$	$< 10^{-4}$	$< 10^{-4}$
$t_1$	-	50	50	$1000\Delta t$	50	50

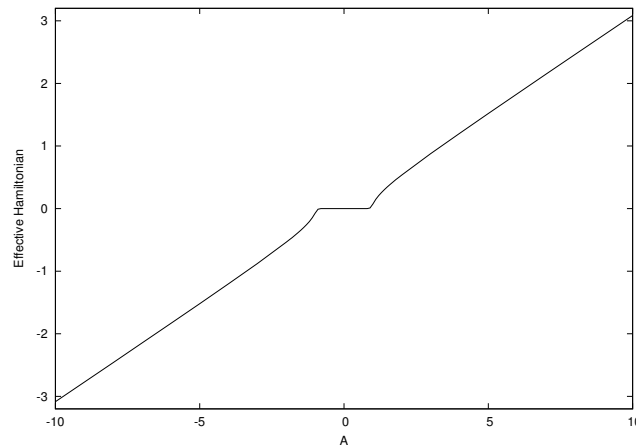


FIG. 6.2 –  $\bar{H}^{\text{num}}(A, p)$  for  $p = 0.3125$  and a monotone kernel  $c^0 = -\delta_0 + J$

---

#### 4. Computation of the effective hamiltonian for equation (6.1)

---

In Figure 6.2, we present the numerical effective hamiltonian  $\bar{H}^{\text{num}}(A, p)$  which is monotone in  $A$  as expected from the first property of Theorem 1.2. Moreover this reveals the existence of a threshold effect, *i.e.* the effective hamiltonian is zero on a whole interval of the parameter  $A$ . In addition  $\bar{H}^{\text{num}}(A, p)$  is antisymmetric in  $A$  because of the symmetries of  $c^1$ . For  $|A| \gg B = 1$ , the effective hamiltonian is linear and can be approximated here by  $Ap$  which is the classical Orowan law (see [14]). In addition, we note that  $\bar{H}^{\text{num}}(A, p)$  behaves like the square-root function of  $A$  in a neighborhood of the zero-plateau of  $\bar{H}^{\text{num}}$ .

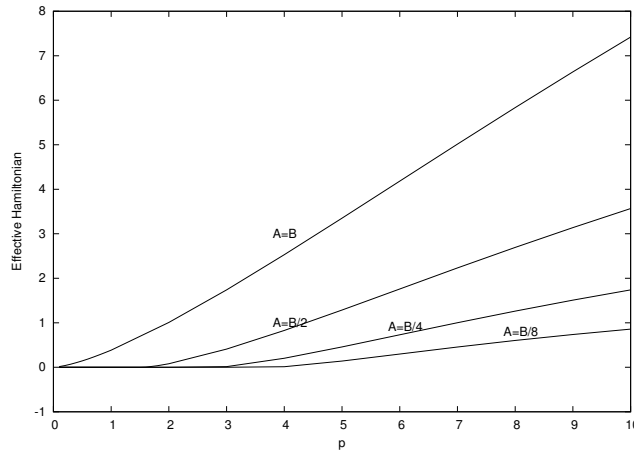


FIG. 6.3 –  $\bar{H}^{\text{num}}(A, p)$  as a function of the density  $p$  for a monotone kernel  $c^0 = -\delta_0 + J$

In Figure 6.3, the effective hamiltonian  $\bar{H}^{\text{num}}(A, p)$  is represented as a function of  $p$  for some values of  $A$ . We note here the monotonicity of  $\bar{H}^{\text{num}}$  with respect to  $p$ . For a large density of dislocations, the effective hamiltonian  $\bar{H}^{\text{num}}$  is linear and can again be approximated by  $Ap$ .

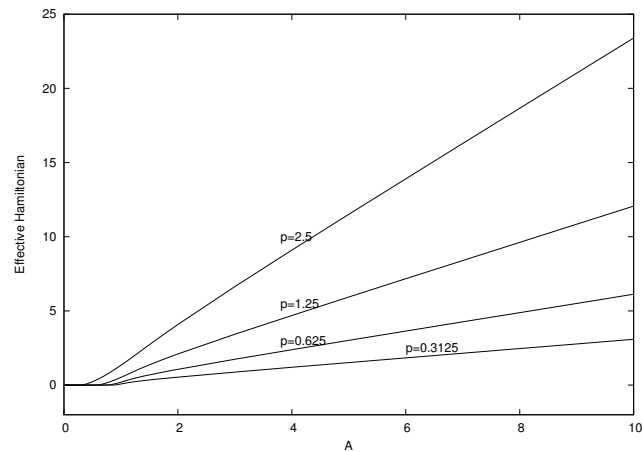


FIG. 6.4 –  $\bar{H}^{\text{num}}(A, p)$  as a function of  $A$  and a monotone kernel  $c^0 = -\delta_0 + J$

In Figure 6.4, we present the effective hamiltonian  $\bar{H}^{\text{num}}(A, p)$  as a function of  $A$  for several densities of dislocations  $p$ . Again we check numerically the qualitative properties of the effective hamiltonian.

In Figure 6.5, is represented the graph of the effective Hamiltonian  $\bar{H}^{\text{num}}$ . The X-axis (respectively Y-axis and Z-axis) corresponds to the density of dislocations  $p$  (respectively the parameter  $A$  and the effective Hamiltonian  $\bar{H}^{\text{num}}$ ). The projection of this graph on the plane  $(A, p)$  gives Figure 6.6 where are represented the level sets of  $\bar{H}^{\text{num}}$ .

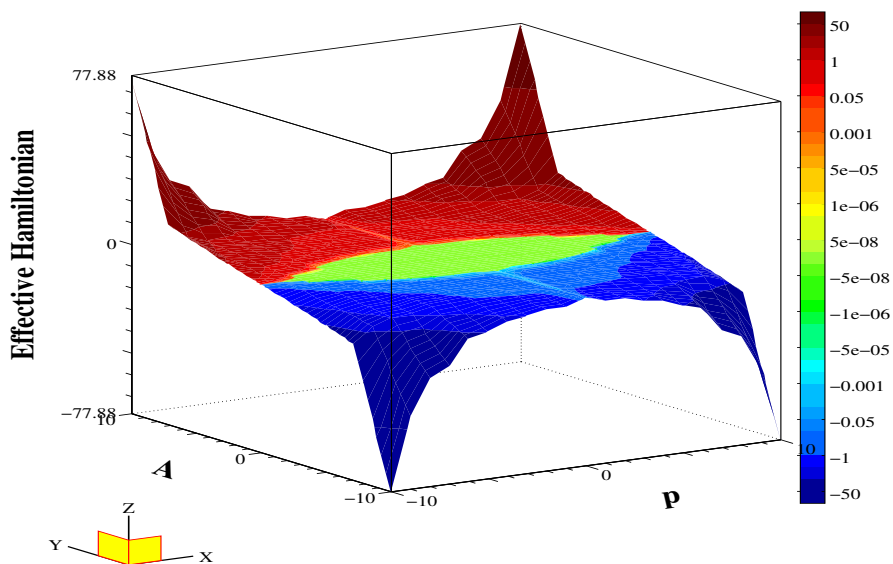


FIG. 6.5 – Graph of  $\bar{H}^{\text{num}}(A, p)$  for monotone kernel  $c^0 = -\delta_0 + J$

In Figure 6.6, the central region is the set where there is a pinning of the dislocations on the defects represented by the field  $c^1$ , *i.e.* where the effective hamiltonian vanishes. Moreover the monotonicity of  $\bar{H}^{\text{num}}$  in  $p$  reveals that in this model, the ability of the dislocations to pass the obstacles, is increased when we increase the density of dislocations. This is typically a collective behaviour.

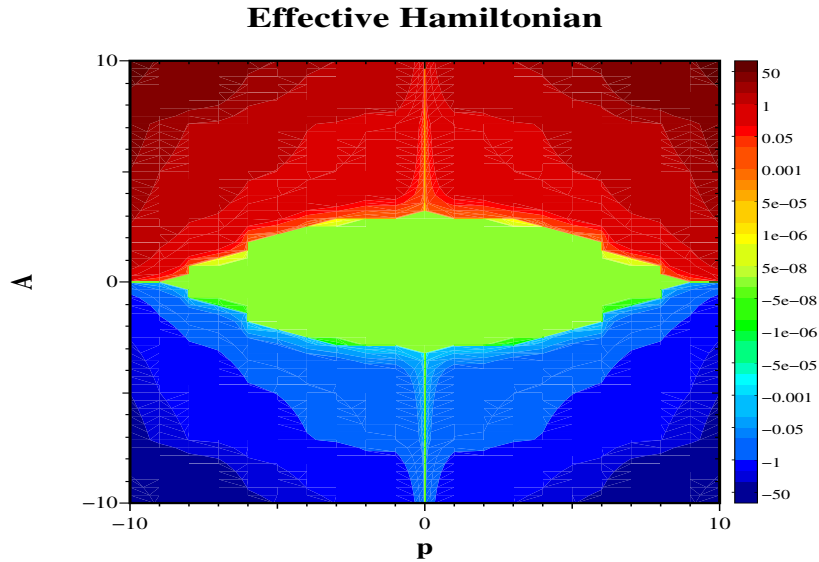


FIG. 6.6 – Level sets of the effective hamiltonian  $\bar{H}^{\text{num}}(A, p)$

## 5 Computation of the effective hamiltonian for other equations

In this section we study numerically the effective hamiltonian for models where in equation (6.1) the non-local velocity  $c^{\text{int}}[u]$  is replaced by

$$c^{\text{int}}[u] = c^0 \star [u] \quad (6.35)$$

where  $[\cdot]$  is the floor function.

Here the positions of dislocations are given by the jumps of  $[u]$  (see [10]). Let us mention that even for monotone kernel  $c^0$ , the theoretical existence of an effective hamiltonian is not known, we numerically check that this effective hamiltonian exists in two cases : the monotone kernel (Subsection 5.1) and the Peierls-Nabarro kernel (Subsection 5.2).

### 5.1 The monotone kernel with one type of dislocations

In this subsection we set  $c^0 = -\delta_0 + J$  with  $J^* = \frac{1}{Q}$  with the notation of Section 4. This case is strongly related to the homogenization of a Slepčev formulation (see [8]).

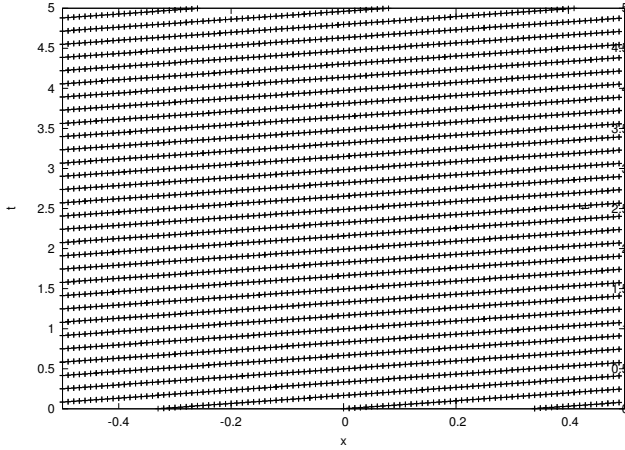


FIG. 6.7 – Linear trajectories

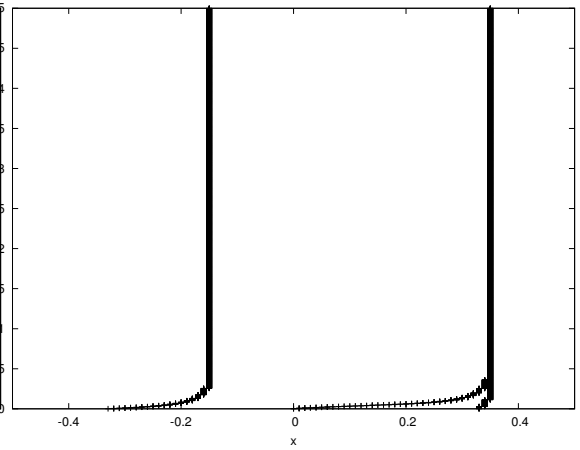


FIG. 6.8 – Pinning of dislocations

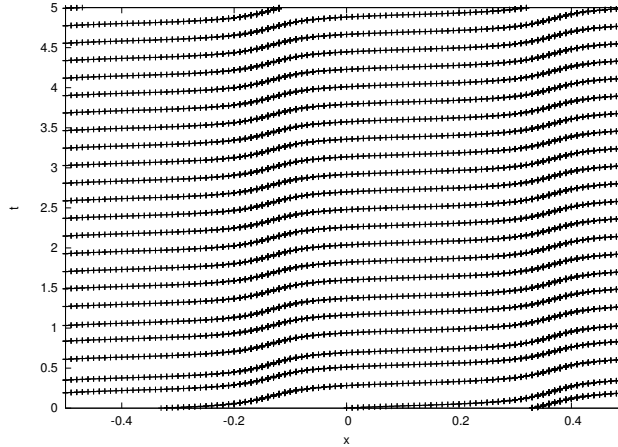


FIG. 6.9 – The motion of the dislocations becomes periodic in time

First, we represent in Figure 6.7 the trajectories of 3 dislocations (initially located at  $x = -1/3$ ,  $x = 0$ ,  $x = 1/3$ ) in the case where there are no obstacles (*i.e.*  $c^1 = 0$ ). In this case the trajectories of dislocations are straight lines. A different situation happens (see Figure 6.8), when we add sufficient obstacles in order to obtain the

pinning of dislocations (with  $B \geq A$ ). This case corresponds to the situation where  $\bar{H}^{\text{num}}$  is equal to zero.

Now, if we increase the parameter  $A$ , without changing the obstacles, *i.e.* with the same  $c^1$ , we observe a persistent motion of dislocations (see Figure 6.9). Numerically, this motion becomes periodic in time. Moreover, we also present in Figure 6.10 the effective hamiltonian whose behaviour is similar to the case of Section 4.

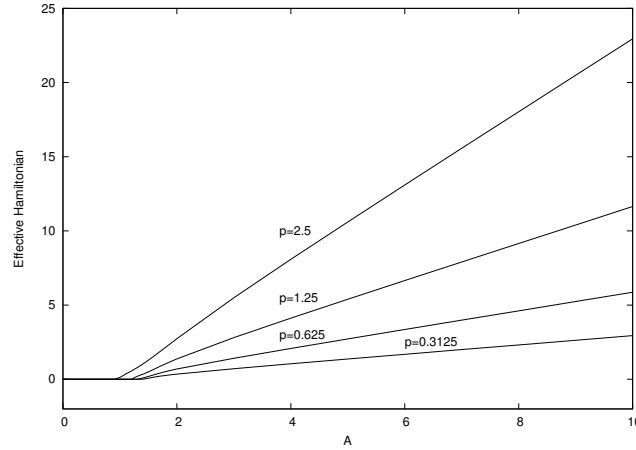


FIG. 6.10 – Effective hamiltonian  $\bar{H}^{\text{num}}(A, p)$  as a function of  $A$  for  $c^0 \star [u]$ ,  $c^0 = -\delta_0 + J$

## 5.2 The Peierls-Nabarro kernel with one type of edge dislocations

In this subsection, we consider the Peierls-Nabarro kernel (see [2, 12]) given by

$$c^0(x) = \frac{-\mu |\vec{b}|^2}{2\pi(1-\nu)} \frac{x^2 - \zeta^2}{(x^2 + \zeta^2)^2}. \quad (6.36)$$

where  $\nu = \frac{\lambda}{2(\lambda + \mu)}$  is the Poisson ratio and  $\lambda$  and  $\mu > 0$  are the Lamé coefficients

for isotropic elasticity and  $\vec{b}$  is the Burgers vector. We choose  $\frac{\mu |\vec{b}|^2}{2\pi(1-\nu)} = 1$  and  $\zeta = 0.01$  for our simulations.

Again we compute the effective hamiltonian in Figure 6.11 which turns out to provide a behaviour similar to the one of Section 4.

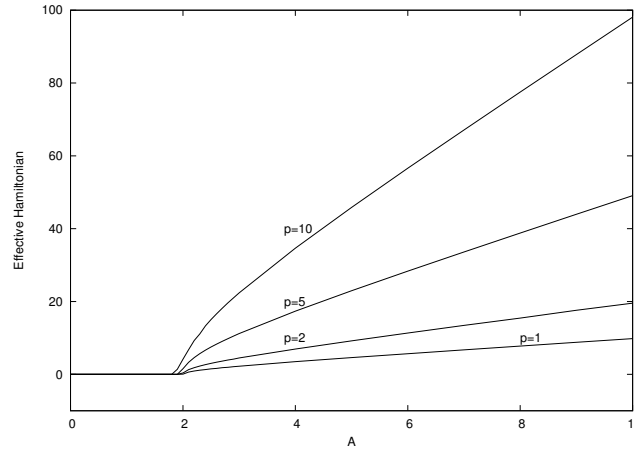


FIG. 6.11 – Graph of  $\bar{H}^{\text{num}}(A, p)$  for Peierls-Nabarro model with one type of edge dislocations

## 6 Computation of the effective hamiltonian for systems of equations

In this section, we consider systems of equations describing the motion of dislocations of opposite Burgers vector  $(+\vec{b})$  and  $(-\vec{b})$ . More precisely we study numerically the following system

$$\begin{cases} \frac{\partial u^+}{\partial t}(x, t) = -c[u^+, u^-](x, t) \left| \frac{\partial u^+}{\partial x}(x, t) \right| & \text{in } \mathbb{R} \times (0, +\infty) \\ \frac{\partial u^-}{\partial t}(x, t) = c[u^+, u^-](x, t) \left| \frac{\partial u^-}{\partial x}(x, t) \right| & \text{in } \mathbb{R} \times (0, +\infty) \\ u^+(x, 0) = p^+ x & \text{on } \mathbb{R} \\ u^-(x, 0) = p^- x & \text{on } \mathbb{R} \end{cases} \quad (6.37)$$

where

$$c[u^+, u^-](x, t) = A + c^0 \star ([u^+(\cdot, t)] - [u^-(\cdot, t)]) . \quad (6.38)$$

Here the positions of dislocations of Burgers vector  $(+\vec{b})$  (respectively  $(-\vec{b})$ ) are represented by the jumps of  $[u^+(\cdot, t)]$  (respectively  $[u^-(\cdot, t)]$ ). The motion is schematically represented on Figure 6.12.

In the following three subsections we will compute the numerical effective hamiltonian for the two types of dislocations  $\bar{H}^{\text{num}}(A, p)$  with the same densities  $p = p^+ = p^-$  (or the velocity  $\frac{\bar{H}^{\text{num}}(A, p)}{p}$ ) using a numerical method similar to the one used in



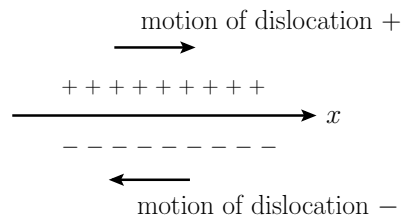


FIG. 6.12 – Opposite motion of dislocations + and –

Sections 4 and 5. We present successively our result in the case of monotone kernel, Peierls-Nabarro kernel for edge dislocations, and the kernel describing the motion of walls of dislocations.

### 6.1 Monotone kernel

Here we take  $c^0 = -\delta_0 + J$  with  $J^* = \frac{1}{Q}$  with the notation of Section 4. We present in Figure 6.13 the effective hamiltonian  $\bar{H}^{\text{num}}(A, p)$ . We observe a threshold phenomenon, similar to the one of Section 4. Here the dislocations of type – can be seen as obstacles to the motion of the dislocations of type + and vice-versa.

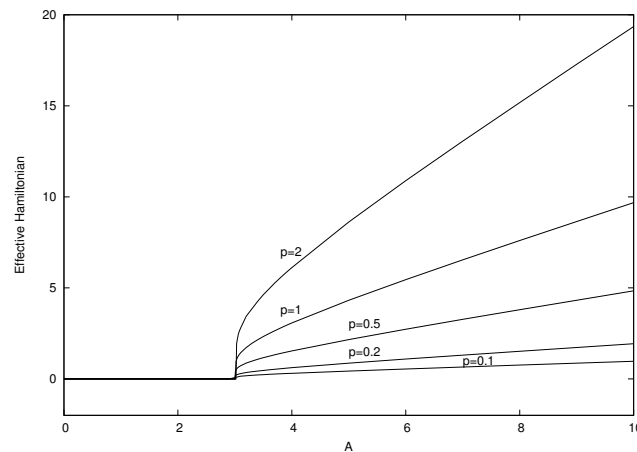


FIG. 6.13 – Graph of  $\bar{H}^{\text{num}}(A, p)$  as a function of  $A$  for  $p = p^+ = p^-$  with the monotone kernel

## 6.2 Peierls-Nabarro kernel for edge dislocations

In this case we take the kernel  $c^0$  given in (6.36) and the numerical values of Subsection 5.2. We observe in Figure 6.14 the mean velocity and a threshold effect which increases (apparently linearly) where we increase the density  $p = p^+ = p^-$  of dislocations, as physically expected.

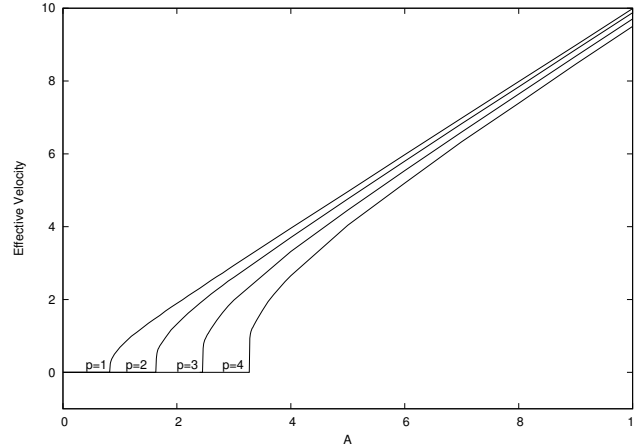


FIG. 6.14 – Effective velocity  $\frac{\bar{H}^{\text{num}}(A, p)}{p}$  as a function of  $A$  for  $p = p^+ = p^-$  in the case of Peierls-Nabarro kernel

## 6.3 Kernel for walls of dislocations

Here we take

$$c^0(x) = \frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial x}(x) \quad \text{with} \quad \bar{\sigma}(x) = \frac{\mu |\vec{b}|^2 \pi}{1 - \nu} \frac{\frac{x}{\varepsilon}}{\left( \cosh(2\pi \frac{x}{\varepsilon}) - 1 \right)} \quad (6.39)$$

with  $\mu$  is a Lamé coefficient,  $\nu$  is the Poisson ratio,  $\vec{b}$  is the Burgers vector and  $\varepsilon$  is the distance between dislocations along the  $y$  direction (see Figure 6.15 and the Appendix 7.2).

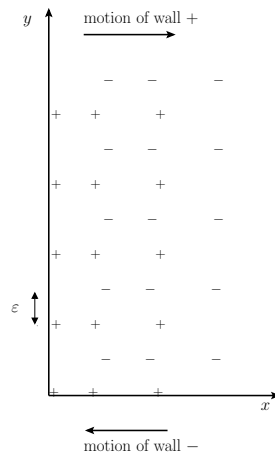


FIG. 6.15 – Walls of dislocations + and walls of dislocations –

Here we take  $\frac{\mu b^2 \pi}{1 - \nu} = 1$  and  $\varepsilon = 1$ . We present the effective velocity  $\frac{\bar{H}^{\text{num}}(A, p)}{p}$  in Figure 6.16, and get similar result as in Subsection 6.2 and in [9].

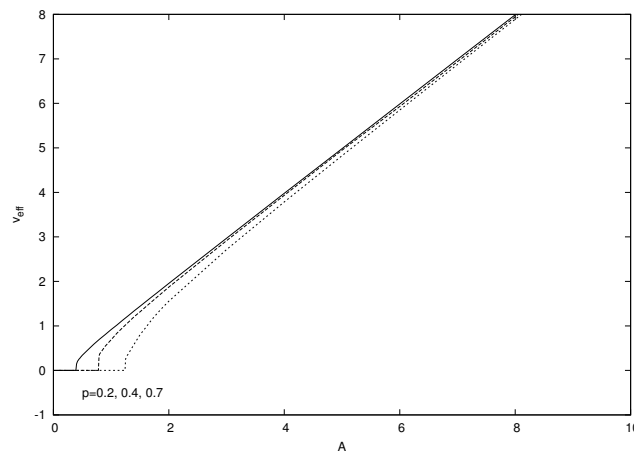


FIG. 6.16 – Effective velocity  $\frac{\bar{H}^{\text{num}}(A, p)}{p}$  as a function of  $A$  for  $p = p^+ = p^-$  with the kernel for walls of dislocations

## 7 Appendix

### 7.1 Proof of Lemma 2.1

With the notation of Lemma 2.1, we set  $c = \frac{Y+y}{2}$  and  $\delta = \frac{Y-y}{2} \in \left] -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right[$ . Then we compute

$$\begin{aligned} (c^0 \star u)(Y) - (c^0 \star u)(Y) &= \int dz J(z) (u(Y+z) - u(Y)) - \int dz J(z) (u(y+z) - u(y)) \\ &= \int d\bar{z} J(\bar{z} - \delta) (u(c + \bar{z}) - u(Y)) - \int d\tilde{z} J(\tilde{z} + \delta) (u(c + \tilde{z}) - u(y)) \\ &\leq - \int dz \inf (J(z - \delta), J(z + \delta)) (u(Y) - u(c+z) + u(c+z) - u(y)) \\ &\leq - (u(Y) - u(y)) c_2 \end{aligned}$$

where we have used the change of variables  $\bar{z} = z + \delta$ ,  $\tilde{z} = z - \delta$  in the second line and used the fact that  $u(c + \bar{z}) - u(Y) \leq 0$  and  $u(c + \tilde{z}) - u(y) \geq 0$  to get the third line.

### 7.2 Computation of the kernel for walls of dislocations

We recall (see [12]) the stress created by one dislocation at the origin

$$\sigma_{xy}^0(x, y) = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}. \quad (6.40)$$

Now the stress created by a wall of dislocations at the positions  $x = 0$ ,  $y = k\varepsilon$  for  $k \in \mathbb{Z}$  is given by

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}(x, y) &= \sum_{k \in \mathbb{Z}} \sigma_{xy}^0(x, y - k\varepsilon) \\ &= \frac{\mu b \pi}{1-\nu} \frac{\frac{x}{\varepsilon} (\cosh(2\pi \frac{x}{\varepsilon}) \cos(2\pi \frac{y}{\varepsilon}) - 1)}{\left( \cosh(2\pi \frac{x}{\varepsilon}) - \cos(2\pi \frac{y}{\varepsilon}) \right)^2}. \end{aligned} \quad (6.41)$$

(see [12] page 733, formula (19-73)). Then

$$c^0(x) = b \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x}(x, 0) = \frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial x}(x) \quad (6.42)$$

with  $\bar{\sigma}(x) = b \sigma_{xy}(x, 0)$ .

### Acknowledgements

The authors would like to thank O. Alvarez, M. El Rhabi, A. Finel and Y. Le Bouar for fruitful discussions. This work was supported by the contract JC 1025 called "ACI jeunes chercheuses et jeunes chercheurs" of the French Ministry of Research (2003-2007).

# References

- [1] R. Abgrall, *Numerical discretization of boundary conditions for first order Hamilton-Jacobi equations*, SIAM J. Numer. Anal. 41 (6), 2233-2261, 2003.
- [2] O. Alvarez, P. Hoch, Y. Le Bouar and R. Monneau, *Dislocation dynamics : short time existence and uniqueness of the solution*, Arch. Ration. Mech. Anal. 181 (3), 449-504, 2006.
- [3] M. Bardi and I. Capuzzo-Dolcetta, *Optimal Control and Viscosity Solutions of Hamilton-Jacobi-Bellman Equations*, Birkhäuser, Boston, 1997.
- [4] G. Barles, *Solutions de Viscosité des Equations de Hamilton-Jacobi*, Springer-Verlag, Berlin, 1994.
- [5] J.D. Benamou, P. Hoch, *A modular Lagrangian/Eulerian software for Hamilton Jacobi equations of Geometric Optics type*, Math. Model. Numer. Anal. 36 (5), 883-905, 2002.
- [6] M.G. Crandall and P.-L. Lions, *Conditions d'unicité pour les solutions généralisées des équations de Hamilton-Jacobi du premier ordre*, C. R. Acad. Sci. Paris Ser. I Math., 292, 183-186, 1981.
- [7] M.G. Crandall, H. Ishii and P.-L. Lions, *User's guide to viscosity solutions of second order partial differential equations*, Bull. Amer. Math. Soc. (N.S.), 27, 1-67, 1992.
- [8] N. Forcadel, C. Imbert and R. Monneau, work in progress.
- [9] A. Ghorbel, M. El Rhabi and R. Monneau, *Comportement mécanique par homogénéisation de la dynamique des dislocations*, Proceedings of Colloque National MECAMAT - Aussois 2006, Ecole de Mécanique des Matériaux - Aussois 2006 (january 2006, Aussois, France).
- [10] A. Ghorbel and R. Monneau, *Well-posedness of a non-local transport equation modelling dislocations dynamics*, preprint Cermics-ENPC 304, 2006.
- [11] D.A. Gomes and A.M. Oberman, *Computing the effective Hamiltonian using a variational approach*, SIAM J. Control Optim. 43 (3), 792-812, 2004.
- [12] J.R. Hirth and L. Lothe, *Theory of dislocations*, Second Edition. Malabar, Florida : Krieger, 1992.

## REFERENCES

---

- [13] C. Imbert, R. Monneau and E. Rouy, *Homogenization of first order equations with  $(u/\varepsilon)$ -periodic Hamiltonians. Part II*, preprint on HAL server of CNRS [ccsd-00080397 - version 1] (28/06/2006).
- [14] J. Kratochvíl, R. Selaček and E. Werner, *The importance of being curved : bowing dislocations in a continuum description*, Philos. Mag. 83 (31-34), 3735-3752, 2003.
- [15] P.-L. Lions, G. Papanicolaou and S.R.S. Varadhan, *Homogenization of Hamilton-Jacobi equations*, unpublished preprint, 1986.
- [16] M. Rorro, *An approximation scheme of the effective Hamiltonian and applications*, Appl. Numer. Math. 56 (9), 1238-1254, 2006.

# Chapitre 7

## Simulations complémentaires

Dans ce chapitre, nous présentons quelques simulations complémentaires à la section 5 du chapitre précédent. Nous rappelons ici que le terme non-local de la vitesse est

$$c^{\text{int}}[u] = c^0 \star [u] \quad (7.1)$$

avec  $[\cdot]$  est la fonction partie entière (la fonction floor). Le noyau  $c^0 = -\delta_0 + J$  où  $J^* = \frac{1}{Q}$  avec la notation de la Section 4 du chapitre précédent. Nous présentons dans ce qui suit le graphe de l'hamiltonien effectif  $\bar{H}^{\text{num}}(A, p)$  et sa projection sur le plan  $(A, p)$ .

On vérifie numériquement les propriétés qualitatives de l'hamiltonien effectif. Dans la Figure 7.1, on représente la nappe de l'hamiltonien effectif  $\bar{H}^{\text{num}}$ . L'axe des  $X$  (respectivement l'axe des  $Y$  et l'axe des  $Z$ ) correspond à la densité des dislocations  $p$  (respectivement le paramètre  $A$  et l'hamiltonien effectif  $\bar{H}^{\text{num}}$ ). La projection de cette nappe sur le plan  $(A, p)$  est donnée dans la Figure 7.2 où sont représentées les courbes de niveaux de  $\bar{H}^{\text{num}}$ . On remarque que l'hamiltonien effective  $\bar{H}^{\text{num}}(A, p)$  n'est pas monotone partout en  $p$ .



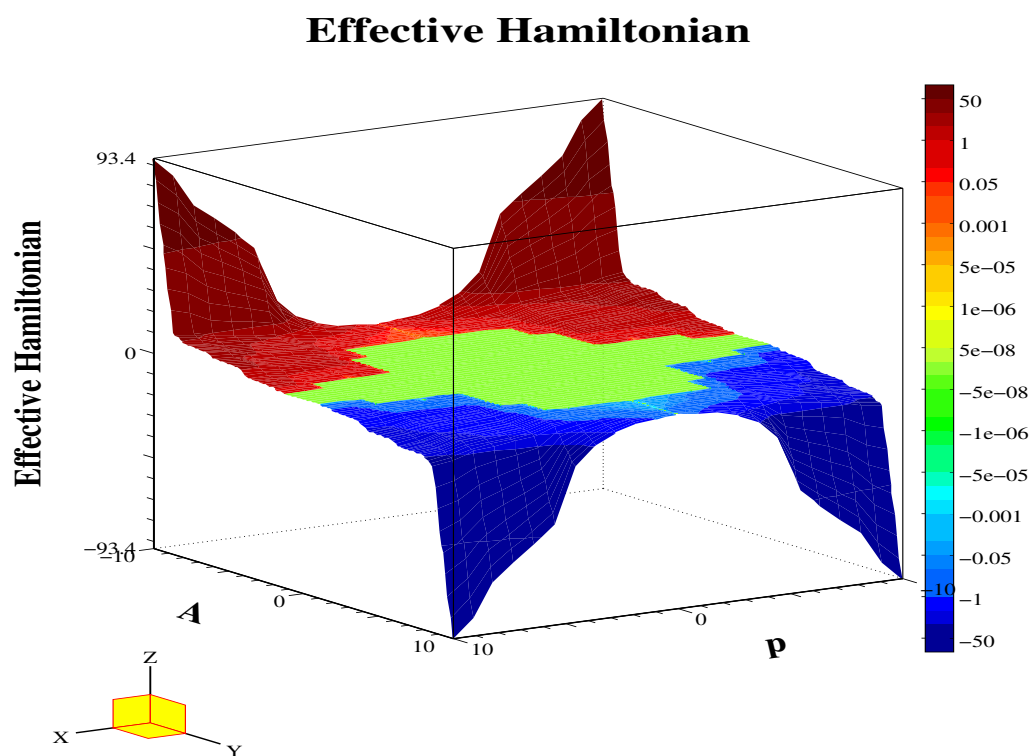


FIG. 7.1 – Nappe de  $\bar{H}^{\text{num}}(A, p)$  dans le cas noyau monotone  $c^0 = -\delta_0 + J$

---

## Effective Hamiltonian

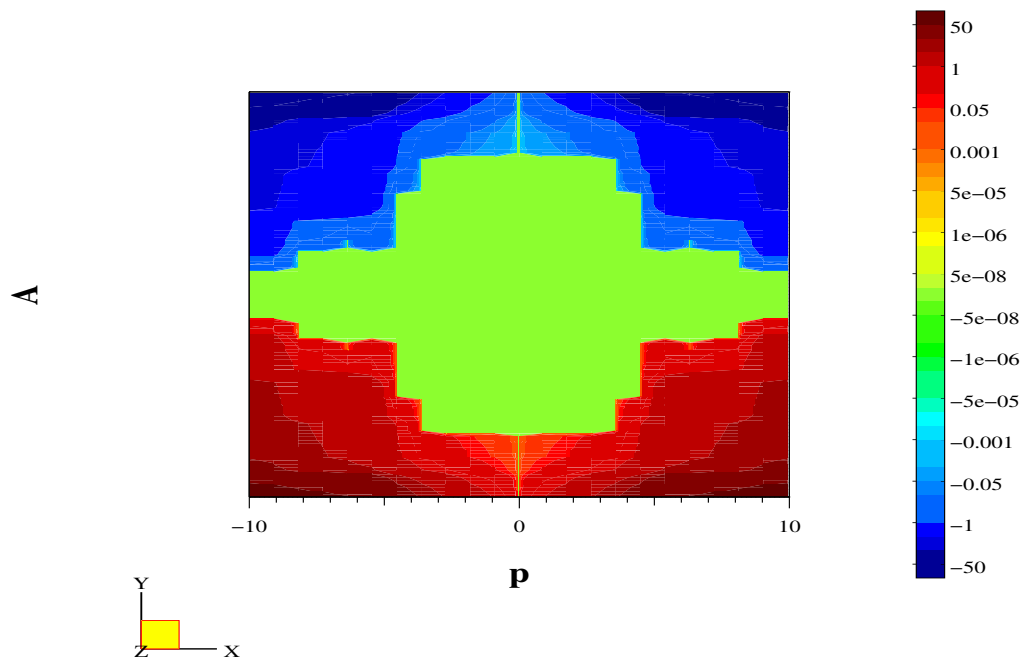


FIG. 7.2 – Courbes de niveaux de l'hamiltonien effectif  $\bar{H}^{\text{num}}(A, p)$



Troisième partie

Code DISLO++



## Code DISLO++

Avant de calculer l'hamiltonien effectif, on a besoin de discrétiser notre équation. Pour cela, il faut définir certains paramètres qui seront utilisés dans tout le code. Les constantes réelles, vecteurs réels à un et deux indices sont définis en utilisant la classe RNM de FreeFEM (cf. le site <http://www.freefem.org/>). Cette classe permet de gérer l'allocation dynamique et des manipulations entre tableaux de type addition, affectation (les opérations de base).

On rappelle l'EDP qu'on regarde :

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = c[u](x, t) \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) & \text{dans } \mathbb{R} \times (0, +\infty) \\ c[u](x, t) = c^{\text{ext}}(x) + \int_{\mathbb{R}} c^0(x') [u(x - x', t)] dx' \\ u(x, 0) = u^0(x) & \text{dans } \mathbb{R} \end{cases} \quad (7.2)$$

- **Etape 0** Définir dans un fichier (.cpp) tous les paramètres utilisés dans le code : la longueur  $Q$  de l'intervalle de discrétisation,  $jmax$  le nombre de points de discrétisation,  $h = Q/jmax$  le pas d'espace,  $t_{\text{fin}}$  le temps final,  $A, B, k$  des paramètres dans l'expression de  $c^{\text{ext}}(x) = A + B \sin(2k\pi x)$ , et  $p$  la densité de dislocations.
  
- **Etape 1** Dans le programme principal, on calcule le vecteur solution  $u_{\text{new}}$  de l'EDP à chaque itération en temps et l'hamiltonien effectif. On définit un vecteur  $x$  qui contient les points du maillage, deux vecteurs solutions ancien  $u_{\text{old}}$  et nouveau  $u_{\text{old}}$ , la vitesse des dislocations  $c$  et le pas de temps  $dt$ . On initialise les points du maillage et la condition initiale en faisant appel à la routine `ConditionInit(x, uold)`. On calcule la vitesse  $c$  en utilisant la routine `vitesse-totale(p, A, x, uold, c)`. On calcule ensuite le pas de temps  $dt$  par la routine `ConditionCFL(c, dt)`. Pour visualiser l'évolution de la solution, les trajectoires des dislocations, on a le choix entre `PLOTMTV` ou `Gnuplot`. On définit des fichiers résultats. On initialise  $t1 = 0$  et  $t0$  le temps à partir duquel on commence à suivre la première dislocation pour calculer l'hamiltonien effectif  $Ham$ . On définit les temps ( $T_{\text{avant}}, T_{\text{apres}}, T_{\text{cycle}}$ ), les positions ( $x_{\text{ref}}, X_{\text{old}}, X_{\text{lag}}$ ) et la vitesse  $c_{\text{lag}}$ . Ces variables servent au calcul Lagrangien (le fait de suivre la particule pour calculer l'hamiltonien effectif  $Ham$ ). On initialise  $T_{\text{avant}}$  et  $T_{\text{apres}}$  à l'infini.

- **Etape 2** l'évolution en temps. Définir une boucle d'itération en temps.
  - **Etape 2.1** Calculer la vitesse  $c$  par la routine `vitesse_totale( $p, A, x, u_{old}, c$ )` ;
  - **Etape 2.2** Déterminer le pas de temps  $dt$ . Définir  $T1$  et l'initialiser à zéro.  $T1$  est le maximum des gradients des vitesses. Faire appel à la routine `ConditionCFL( $c, dt$ )`.  $dt = .5 * \min(dt, dt1)$ .
  - **Etape 2.3** Calculer le nouveau vecteur solution  $u_{new}$  en utilisant le schéma numérique implémenté dans la routine `SCHEMA-NUMERIQUE-ET-CONDITIONS-AUX-LIMITES( $p, dt, c, u_{old}, u_{new}$ )` ;
  - **Etape 2.4** Mise à jour du vecteur solution :  $u_{old} = u_{new}$  ;
  - **Etape 2.5** Calculer l'hamiltonien effectif (ou encore la vitesse effective). Les détails de cette étape se trouvent au-dessous.

Détails de l'Etape 2.5 .

- **Etape 2.5.1** Repérer la première dislocation par les sauts de la fonction partie entière de la solution, en partant de gauche vers la droite du domaine à l'instant  $t1$ . Cet instant  $t1$  est tel que  $t0 \leq t1 < Tavant$ . Initialiser  $Tavant = t1$  et déterminer par la méthode d'interpolation la position  $x_{ref} = X_{old}$  de cette première dislocation et sa vitesse lagrangienne  $c_{lag}$ .
- **Etape 2.5.2** Pour  $t1 > Tavant$ , calculer  $X_{lag} = X_{old} - dt * c_{lag} * p / |p|$ . La vitesse  $c_{lag}$  est calculée par la méthode d'interpolation. Faire la mise à jour  $X_{old} = X_{lag}$ .
- **Etape 2.5.3** Sachant que les conditions aux limites sont périodiques, redéfinir  $X_{old}$ .  
Tant que  $(X_{old} > x(jmax))$  faire  $Tapres = t1$  et  $X_{old} += -x(jmax) + x(0)$ .  
Tant que  $(X_{old} < x(0))$  faire  $Tapres = t1$  et  $X_{old} += x(jmax) - x(0)$ .
- **Etape 2.5.4** Pour  $t1 > Tapres$ , déterminer  $Tcycle$  le temps de passage de la première dislocation à la position  $x_{ref}$ . Initialiser  $X_{old} = x_{ref}$ . Définir  $H1 = \text{signe}(A) * Q / (Tcycle - Tavant)$ . Pour s'assurer qu'on ait l'homogénéisation, initialiser  $\varepsilon = 0.01$ . Si  $(|H1 - H2| < \varepsilon)$  Alors  $Ham = H1 * p$   
Sinon  $(H2 = H1, H1 = 100, Ham = 0, Tavant = Tcycle, Tapres = Tcycle = t_{fin},$  revenir à l'Etape 2.5.2).

Que fait-on dans les routines citées ci-dessus ?

Dans la routine `conditioninit( $x, u_{old}$ )` on initialise le vecteur  $x$  qui contient les points de discrétisation en espace. Dans la routine `vitesse_totale( $p, A, x, u_{old}, c$ )`, on calcule la vitesse  $c = c^1(x) + c^0 * [u_{old}]$ . Le noyau  $c^0$  est initialisé dans une routine qui s'appelle `noyau( $x, c0$ )`. Le calcul de la convolution se fait en utilisant la FFTW (cf. le

site <http://www.fft.w.org>). Ce calcul consiste simplement à prendre la transformée de Fourier inverse du produit des transformées de Fourier. La vitesse  $c^1$  est initialisé dans la routine `vitesse1(A, x, c1)`. La routine `ConditionCFL(c, dt)` permet de calculer le pas de temps  $dt = 0.5 * h / \max(|c|)$ . Dans la routine `SCHEMA-NUMERIQUE-ET-CONDITIONS-AUX-LIMITES(p, dt, c, u_old, u_new)`, on implémente le schéma aux différences-finies UPWIND en respectant le signe de la vitesse  $c$ . Les schémas de Rouy-Tourin et de Lax-Friedrichs sont aussi implémentés dans ce code. Pour tracer le graphe de l'hamiltonien effectif en fonction de  $A$  et de  $p$ , on définit deux boucles sur  $p$  et sur  $A$  et on utilise une routine qui permet de visualiser en 3D avec PLOTMTV et qui existe dans GO++ (cf. le site <http://www-rocq.inria.fr/~benamou/gopp/gopp.html>).





# Appendice 1 : Preuve du Lemme 3.1 du Chapitre 1

Dans cet appendice, nous prouvons le Lemme 3.1 du Chapitre 1. On considère un cristal tridimensionnel dans un repère fixe  $R = (Ox_1x_2z)$ . On considère un repère mobile  $R_1 = (OX_1X_2z)$  tel que les angles  $(Ox_1, OX_1) = (Ox_2, OX_2) = \alpha \in (0, \pi/2)$ . L'objet de cette sous-section est de calculer les forces qui s'exercent par une famille de dislocations sur une dislocation. Les plans de glissement de ce matériau sont supposés parallèles au plan  $(OX_1z)$ . La distance entre deux plans de glissement est imposée constante et notée  $\varepsilon$ , telle que  $0 < \varepsilon < 1$  (cf. Figure 3). Dans chacun de ces plans de glissement, on considère des lignes de dislocations droites et parallèles à l'axe  $(Oz)$ , réparties uniformément. On suppose alors l'existence de dislocations de vecteur de burgers  $+\vec{b}$  (notées dislocations  $+$ ) et des dislocations de vecteur de burgers  $-\vec{b}$  (notées dislocations  $-$ ), avec  $\pm\vec{b}$  parallèle à l'axe  $(OX_1)$ .

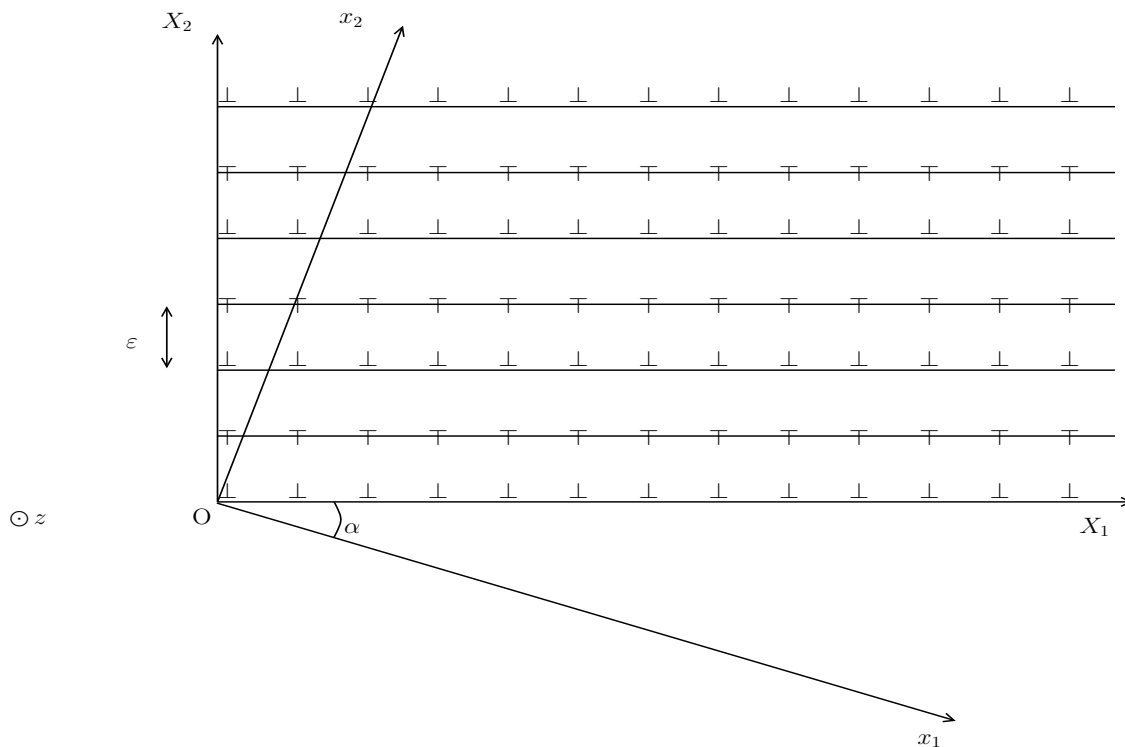


FIG. 3 – Le domaine 3D

On considère une coupe suivant le plan  $(OX_1X_2)$ , ces lignes de dislocations se réduisent à des points. La dynamique des dislocations qui sont parallèles à l'axe  $(OX_1)$ , évolue en fonction d'une part, des sollicitations extérieures et d'autre part, en fonction des interactions entre dislocations du même type et des frottements entre dislocations de type opposé (voir Figure 3). On suppose que la distribution des dislocations est  $\varepsilon$ -périodique par rapport à l'axe  $(OX_2)$  et que le nombre de dislocations de type + est égal au nombre de type -. On s'intéresse dans cette sous-section au calcul des forces  $\sigma_{X_1X_2}$  qui s'exercent sur une dislocation. On suppose que la distribution des dislocations est invariante par rapport à l'axe  $(OX_2)$  et est périodique par rapport à l'axe  $(OX_1)$ . La densité totale des dislocations dans le cristal est notée  $\rho = \rho^+ - \rho^-$ , qui est la somme des densités de dislocations  $\rho^+$ , ayant pour vecteur de Burgers  $+\vec{b}$ , et  $-\rho^-$ , ayant pour vecteur de Burgers  $-\vec{b}$ . On note  $\sigma_{12} := \sigma_{X_1X_2}$ .

On rappelle que  $\sigma = \Lambda : \varepsilon$  où  $\varepsilon = \varepsilon(u) + \rho \varepsilon^0$ ,  $u$  est le champ de déplacement,

$$\varepsilon^0 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \varepsilon(u) = \frac{1}{2} (\nabla u + {}^t(\nabla u)).$$

À l'équilibre élastique on a

$$\operatorname{div} \sigma = 0$$

c'est-à-dire

$$\operatorname{div} (2\mu\varepsilon(u) + \lambda \operatorname{tr}(\varepsilon(u))\operatorname{Id}) = -2\mu \operatorname{div} (\rho \varepsilon^0) \quad (3)$$

ou encore

$$\mu\Delta u + \mu\nabla(\operatorname{div} u) + \lambda\nabla\operatorname{div} u = -2\mu \operatorname{div} (\rho \varepsilon^0) \quad (4)$$

ou encore

$$\mu\Delta u + (\lambda + \mu)\nabla(\operatorname{div} u) = -2\mu \begin{pmatrix} \frac{\partial \rho}{\partial x_2} \\ \frac{\partial \rho}{\partial x_1} \end{pmatrix} \quad (5)$$

$$\text{où } \operatorname{div} (\rho \varepsilon^0) = \operatorname{div} \begin{pmatrix} 0 & \rho \\ \rho & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \rho}{\partial x_2} \\ \frac{\partial \rho}{\partial x_1} \end{pmatrix}.$$

On réécrit (5) dans le système de coordonnées  $(X_1, X_2)$ . Soit l'application  $\varphi : (x_1, x_2) \mapsto (X_1, X_2)$  et  $U = u \circ \varphi^{-1}$ . En tenant compte de l'invariance par rapport à l'axe  $(OX_2)$ , on a

$$\begin{aligned} \Delta u &= \frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} = \frac{\partial^2 U}{\partial X_1^2} \\ \operatorname{div} u &= \frac{\partial u}{\partial x_1} + \frac{\partial u}{\partial x_2} = \frac{\partial U_1}{\partial X_1} \cos \alpha + \frac{\partial U_2}{\partial X_1} \sin \alpha \\ \nabla(\operatorname{div} u) &= \begin{pmatrix} \cos \alpha \frac{\partial}{\partial X_1} \left( \frac{\partial U_1}{\partial X_1} \cos \alpha + \frac{\partial U_2}{\partial X_1} \sin \alpha \right) \\ \sin \alpha \frac{\partial}{\partial X_1} \left( \frac{\partial U_1}{\partial X_1} \cos \alpha + \frac{\partial U_2}{\partial X_1} \sin \alpha \right) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 U_1}{\partial X_1^2} \cos^2 \alpha + \frac{\partial^2 U_2}{\partial X_1^2} \cos \alpha \sin \alpha \\ \frac{\partial^2 U_1}{\partial X_1^2} \cos \alpha \sin \alpha + \frac{\partial^2 U_2}{\partial X_1^2} \sin^2 \alpha \end{pmatrix} \end{aligned}$$

D'autre part,

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \rho}{\partial x_2} \\ \frac{\partial \rho}{\partial x_1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \alpha \\ \cos \alpha \end{pmatrix} \frac{\partial \rho}{\partial X_1} =: \begin{pmatrix} \sin \alpha \\ \cos \alpha \end{pmatrix} \rho'$$

L'équation (5) devient

$$\mu \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 U_1}{\partial X_1^2} \\ \frac{\partial^2 U_2}{\partial X_1^2} \end{pmatrix} + (\lambda + \mu) \begin{pmatrix} \cos^2 \alpha \frac{\partial^2 U_1}{\partial X_1^2} + \cos \alpha \sin \alpha \frac{\partial^2 U_2}{\partial X_1^2} \\ \cos \alpha \sin \alpha \frac{\partial^2 U_1}{\partial X_1^2} + \sin^2 \alpha \frac{\partial^2 U_2}{\partial X_1^2} \end{pmatrix} = -2\mu \begin{pmatrix} \sin \alpha \\ \cos \alpha \end{pmatrix} \rho' \quad (6)$$

## Appendice 1

---

On intègre (6) par rapport à  $X_1$ , on obtient

$$\mu \begin{pmatrix} \frac{\partial U_1}{\partial X_1} \\ \frac{\partial U_2}{\partial X_1} \end{pmatrix} + (\lambda + \mu) \begin{pmatrix} \cos^2 \alpha \frac{\partial U_1}{\partial X_1} + \cos \alpha \sin \alpha \frac{\partial U_2}{\partial X_1} \\ \cos \alpha \sin \alpha \frac{\partial U_1}{\partial X_1} + \sin^2 \alpha \frac{\partial U_2}{\partial X_1} \end{pmatrix} = -2\mu \begin{pmatrix} \sin \alpha \\ \cos \alpha \end{pmatrix} \rho + \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \quad (7)$$

Multiplions la première ligne par  $\cos \alpha$ , la deuxième ligne par  $\sin \alpha$  et faisons la somme. Nous obtenons

$$(\lambda + 2\mu) \left( \cos \alpha \frac{\partial U_1}{\partial X_1} + \sin \alpha \frac{\partial U_2}{\partial X_1} \right) = -4\mu \cos \alpha \sin \alpha \rho + c_1 \cos \alpha + c_2 \sin \alpha. \quad (8)$$

Posons  $c = c_1 \cos \alpha + c_2 \sin \alpha$  et  $d = \cos \alpha \frac{\partial U_1}{\partial X_1} + \sin \alpha \frac{\partial U_2}{\partial X_1}$ . L'équation (8) devient

$$(\lambda + 2\mu)d = -4\mu \cos \alpha \sin \alpha \rho + c \quad (9)$$

ou encore

$$d = \frac{-4\mu \cos \alpha \sin \alpha \rho + c}{\lambda + 2\mu}. \quad (10)$$

Ainsi, l'équation (7) sera

$$\mu \begin{pmatrix} \frac{\partial U_1}{\partial X_1} \\ \frac{\partial U_2}{\partial X_1} \end{pmatrix} + (\lambda + \mu) \begin{pmatrix} \cos \alpha \\ \sin \alpha \end{pmatrix} d = -2\mu \begin{pmatrix} \sin \alpha \\ \cos \alpha \end{pmatrix} \rho + \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \quad (11)$$

Remplaçons  $d$  dans (11) par (10), nous obtenons

$$\mu \begin{pmatrix} \frac{\partial U_1}{\partial X_1} \\ \frac{\partial U_2}{\partial X_1} \end{pmatrix} + \frac{\lambda + \mu}{\lambda + 2\mu} \begin{pmatrix} \cos \alpha \\ \sin \alpha \end{pmatrix} (-4\mu \cos \alpha \sin \alpha \rho + c) = -2\mu \begin{pmatrix} \sin \alpha \\ \cos \alpha \end{pmatrix} \rho + \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \quad (12)$$

Comme  $d = \operatorname{div} u$  et  $u$  est périodique, on obtient de (10)

$$\begin{cases} c = 4\mu \sin \alpha \cos \alpha \int \rho \\ c_1 = 2\mu \sin \alpha \int \rho \\ c_2 = 2\mu \cos \alpha \int \rho \end{cases} \quad (13)$$

Alors l'équation (12) devient

$$\mu \begin{pmatrix} \frac{\partial U_1}{\partial X_1} \\ \frac{\partial U_2}{\partial X_1} \end{pmatrix} + \frac{\lambda + \mu}{\lambda + 2\mu} \begin{pmatrix} \cos \alpha \\ \sin \alpha \end{pmatrix} \times -4\mu \cos \alpha \sin \alpha (\rho - f \rho) = -2\mu \begin{pmatrix} \sin \alpha \\ \cos \alpha \end{pmatrix} (\rho - f \rho) \quad (14)$$

et par suite

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial U_1}{\partial X_1} \\ \frac{\partial U_2}{\partial X_1} \end{pmatrix} = \left[ \frac{\lambda + \mu}{\lambda + 2\mu} 4 \cos \alpha \sin \alpha \begin{pmatrix} \cos \alpha \\ \sin \alpha \end{pmatrix} - 2\mu \begin{pmatrix} \sin \alpha \\ \cos \alpha \end{pmatrix} \right] (\rho - f \rho) \quad (15)$$

La contrainte  $\sigma_{12} = 2\mu \varepsilon^0 : \varepsilon$

$$\begin{aligned} &= 2\mu \varepsilon^0 : (\rho \varepsilon^0 + \varepsilon(u)) \\ &= 2\mu \left( 2\rho + \frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) \\ &= 2\mu \left( 2\rho + \sin \alpha \frac{\partial U_1}{\partial X_1} + \cos \alpha \frac{\partial U_2}{\partial X_1} \right) \\ \sigma_{12} &= 4\mu \rho + 2\mu \left( -2 + \frac{\lambda + \mu}{\lambda + 2\mu} 8 \cos^2 \alpha \sin^2 \alpha \right) (\rho - f \rho) . \end{aligned}$$



## Appendice 2 : Calcul du noyau $c^0$

L'angle  $\alpha$  cité dans l'appendice 1 est ici pris égal à  $\pi/4$ . On considère une densité de dislocation  $\theta$  définie par une somme de masses de Dirac :

$$\theta(X = x + y) = \sum_i \delta_0 \left( X - \xi_i \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right) \quad (16)$$

Par changement de repère  $(x, y) \mapsto \left( \frac{x+y}{\sqrt{2}}, \frac{x-y}{\sqrt{2}} \right) = \left( \frac{\xi}{\sqrt{2}}, \frac{\xi^\perp}{\sqrt{2}} \right)$ ,  $\theta$  s'écrit

$$\begin{aligned} \theta(X) &= \sum_i \delta_0 \left( \begin{pmatrix} \frac{\xi}{\sqrt{2}} \\ \frac{\xi^\perp}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \frac{\xi_i}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{pmatrix} \right) \\ &= \sum_i \delta_0 \left( \frac{\xi}{\sqrt{2}} - \frac{\xi_i}{\sqrt{2}} \right) \delta_0 \left( \frac{\xi^\perp}{\sqrt{2}} \right) \\ &= \sum_i \sqrt{2} \delta_0(\xi - \xi_i) \delta_0 \left( \frac{\xi^\perp}{\sqrt{2}} \right) \\ &= \sqrt{2} \rho'_\xi(\xi) \delta_0 \left( \frac{\xi^\perp}{\sqrt{2}} \right) \end{aligned}$$

où  $\rho'_\xi(\xi) := \sum_i \delta_0(\xi - \xi_i)$ . On a utilisé ici le fait que  $\varepsilon \delta_0(\varepsilon x) = \delta_0(x)$ .

La densité totale  $\Theta$  de dislocation dans le domaine du plan s'écrit

$$\Theta = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \theta(X - k\varepsilon e_0) \quad \text{où} \quad e_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}_{(x,y)} \quad (17)$$

La vitesse à laquelle bouge les dislocations est  $c = \sigma_0 \star \Theta$  ou encore

$$c = \sqrt{2} \sum_{k \in \mathbb{Z}} \sigma_0 \star \rho'_\xi(\xi) \delta_0 \left( \frac{\xi^\perp - \sqrt{2}k\varepsilon}{\sqrt{2}} \right) (\xi_0, \xi_0^\perp).$$



## Appendice 2

---

Calculons d'abord le produit de convolution

$$\begin{aligned}
 \sigma_0 \star \rho'_\xi(\xi) \delta_0 \left( \frac{\xi^\perp - \sqrt{2}k\varepsilon}{\sqrt{2}} \right) (\xi_0, \xi_0^\perp) &= \int d\xi d\xi^\perp \sigma_0(\xi, \xi^\perp) \rho'_\xi(\xi_0 - \xi) \delta_0(\xi_0^\perp - \xi^\perp - k\varepsilon) \\
 &= \int d\xi \sigma_0(\xi, \xi_0^\perp - k\varepsilon) \rho'_\xi(\xi_0 - \xi) \\
 &= \int d\xi \rho(\xi_0 - \xi) \frac{\partial \sigma_0}{\partial \xi} (\xi, \xi_0^\perp - k\varepsilon)
 \end{aligned}$$

Alors la vitesse s'écrira

$$c = \sqrt{2} \int d\xi \rho(\xi_0 - \xi) \tilde{c}_0(\xi, \xi_0^\perp)$$

où  $\tilde{c}_0(\xi, \xi_0^\perp) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \frac{\partial \sigma_0}{\partial \xi} (\xi, \xi_0^\perp - k\varepsilon)$ . Notons que  $\sigma_0$  pour le modèle de Groma-Balogh s'écrit

$$\sigma_0(x, y) = \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} \quad (18)$$

ou encore après un changement de variables

$$\sigma_0(\xi, \xi^\perp) = 2\sqrt{2} \frac{(\xi + \xi^\perp)\xi\xi^\perp}{(\xi^2 + (\xi^\perp)^2)^2} \quad (19)$$

Notons  $\bar{\sigma}_0 := \frac{1}{2\sqrt{2}} \sigma_0(\xi, \xi^\perp)$ . La dérivée

$$\frac{\partial \bar{\sigma}_0}{\partial \xi} = \frac{\xi^\perp \left( (\xi^\perp)^3 + 2\xi(\xi^\perp)^2 - 3\xi^2\xi^\perp - 2\xi^3 \right)}{(\xi^2 + (\xi^\perp)^2)^3}$$

# Conclusion et Perspectives

Le travail de cette thèse a permis de répondre à plusieurs questions en analyse mathématique, à savoir existence et unicité en temps long de solution de viscosité, en analyse numérique, à savoir estimation d'erreur, et en homogénéisation numérique pour différents modèles décrivant la dynamique des dislocations.

Afin de compléter cette étude, il serait intéressant de démontrer une estimation d'erreur en temps long à la suite du Chapitre 3. Il serait aussi intéressant de prouver une estimation d'erreur entre l'hamiltonien effectif et l'hamiltonien numérique à la suite du Chapitre 6.

L'objet que j'aimerais étudier après la thèse consiste à étudier l'homogénéisation d'un problème  $2D$  de la dynamique des dislocations en utilisant la formulation Slepčev. Et aussi étudier d'autres modèles de dynamique de dislocations en utilisant d'autres méthodes numériques tels que la méthode Fast Marching. Cette méthode est le projet en cours de mon équipe de recherche en collaboration avec P. Hoch et ses collègues du CEA.



# Bibliographie Générale

- [A1] R. Abgrall, *Numerical discretization of boundary conditions for first order Hamilton-Jacobi equations*, SIAM J. Numer. Anal. 41 (6), 2233-2261, 2003.
- [A2] O. Alvarez, P. Cardaliaguet and R. Monneau, *Existence and uniqueness for dislocation dynamics with nonnegative velocity*, Interfaces and Free Boundaries, 7 (4), 415-434, (2005).
- [A3] O. Alvarez, E. Carlini, P. Hoch, Y. Le Bouar and R. Monneau, *Dislocation dynamics described by non-local Hamilton-Jacobi equations*, Proceedings in Materials Science & Engineering : A 400-401, 162-165, 2005.
- [A4] O. Alvarez, E. Carlini, R. Monneau and E. Rouy, *Convergence of a first order scheme for a non local eikonal equation*, Appl. Numer. Math. 56, 1136-1146, 2006.
- [A5] O. Alvarez, E. Carlini, R. Monneau and E. Rouy, *A convergent scheme for a non local Hamilton-Jacobi equation modelling dislocation dynamics*, Numer. Math. 104 (4), 413-444, 2006.
- [A6] O. Alvarez, P. Hoch, Y. Le Bouar and R. Monneau, *Résolution en temps court d'une équation de Hamilton-Jacobi non locale décrivant la dynamique d'une dislocation*, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I, 338, 679-684, (2004).
- [A7] O. Alvarez, P. Hoch, Y. Le Bouar and R. Monneau, *Dislocation dynamics : short-time existence and uniqueness of the solution*, Arch. Ration. Mech. Anal. 181 (3), 449-504, 2006.
- [B1] M. Bardi and I. Capuzzo-Dolcetta, *Optimal Control and Viscosity Solutions of Hamilton-Jacobi-Bellman Equations*, Birkhäuser, Boston, 1997.
- [B2] G. Barles, *Solutions de viscosité des équations de Hamilton-Jacobi*, Springer-Verlag, 1994.
- [B3] G. Barles, P. Cardaliaguet, O. Ley and R. Monneau, *General results for dislocation type equation*, in preparation.
- [B4] G. Barles and O. Ley, *Nonlocal first-order Hamilton-Jacobi equations modelling dislocations dynamics*, Comm. Partial Differential Equations 31 (8), 1191-1208, 2006.

## BIBLIOGRAPHIE GÉNÉRALE

---

- [B5] J.D. Benamou, P. Hoch, *A modular Lagrangian/Eulerian software for Hamilton Jacobi equations of Geometric Optics type*, Math. Model. Numer. Anal. 36 (5), 883-905, 2002.
- [B6] W. Bollmann, *Interference effects in the electron microscopy of thin crystal foils*, Phys. Rev., 103, 1588-1589, 1956.
- [B7] V. Bulatov, T. Diaz de la Rubia, R. Phillips, E. Kaxiras et N. M. Ghoniem, Co-editors, *Multi-scale Modeling of Materials*, Proceedings of the 1998 MRS Society Symposium 538, 591 pages, 1999.
- [C1] J.-L. Chaboche, J. Lemaitre, *Mécanique des Matériaux Solides*, 2nd Edition, Dunod, Paris, 2001.
- [C2] L.-T. Cheng, D.J. Srolovitz, E. Weinan and Y. Xiang, *A level set method for dislocation dynamics*, Acta Mater. 51, 5499-5518, 2003.
- [C3] A.H. Cottrell, *Dislocations and plastic flow in crystals.*, (Internat. Ser. of Monographs on Physics.) Oxford : Clarendon Press X, 223 p. ; 8 plates, 1953.
- [C4] M.G. Crandall and P.-L. Lions, *Conditions d'unicité pour les solutions généralisées des équations de Hamilton-Jacobi du premier ordre*, C. R. Acad. Sci. Paris Ser. I Math., 292, 183-186, 1981.
- [C5] M.G. Crandall and P.-L. Lions, *Two Approximations of Solutions of Hamilton-Jacobi Equations*, Math. Comp., 167, 1-19, 1984.
- [C6] M.G. Crandall and P.L. Lions, *On existence and uniqueness of solutions of Hamilton-Jacobi equations*, Nonlinear Anal. 10 (4), 353-370, 1986.
- [C7] M.G. Crandall, H. Ishii and P.L. Lions, *User's guide to viscosity solutions of second order partial differential equations*, Bull. Am. Math. Soc., New Ser. 27 (1), 1-67, 1992.
- [C8] A.M. Cuitiño, M. Koslowski and M. Ortiz, *A phase-field theory of dislocation dynamics, strain hardening and hysteresis in ductile single crystals*, J. Mech. Phys. Solids 50 (12), 2597-2635, 2002.
- [E1] C.M. Elliott, R. Schätzle and B.E.E. Stoth, *Viscosity solutions of a degenerate parabolic-elliptic system arising in the mean-field theory of superconductivity*, Arch. Ration. Mech. Anal. 145, 99-127, 1998.
- [F1] D. François, A. Pineau, A. Zaoui, *Comportement Mécanique des Matériaux*, Hermès, Paris, 1995.
- [G1] A. Garroni and S. Müller,  *$\Gamma$ -limit of a phase-field model of dislocations*, SIAM J. Math. Anal. 36, 1943-1964, 2005.
- [G2] A. Ghorbel, M. El Rhabi et R. Monneau, *Comportement mécanique par homogénéisation de la dynamique des dislocations*, Proceedings du Colloque National MECAMAT - Aussois, 2006.

- [G3] A. Ghorbel, P. Hoch and R. Monneau, *A numerical study for the homogenization of one-dimensional models describing the motion of dislocations*, preprint Cermics-ENPC 327, 2006.
- [G4] A. Ghorbel et R. Monneau, *Équation d'Hamilton-Jacobi non-locale modélisant la dynamique des dislocations*, Proceedings of the 2nd TAM-TAM (Trends in Applied Mathematics in Tunisia, Algeria, Morocco), ARIMA, 322-328, 2005.
- [G5] A. Ghorbel and R. Monneau, *Well-posedness of a non-local transport equation modelling dislocations dynamics*, preprint Cermics-ENPC 304, 2006.
- [G6] D.A. Gomes and A.M. Oberman, *Computing the effective Hamiltonian using a variational approach*, SIAM J. Control Optim. 43 (3), 792-812, 2004.
- [H1] P.B. Hirsch, R.W. Horne and M.J. Whelan, *Direct Observations of the Arrangement and Motion of Dislocations in Aluminium* Phil. Mag. 1, 677-684, 1956.
- [H2] J.R. Hirth and L. Lothe, *Theory of dislocations*, Second Edition. Malabar, Florida : Krieger, 1992.
- [I1] C. Imbert, R. Monneau and E. Rouy, *Homogenization of first order equations with  $(u/\varepsilon)$ -periodic Hamiltonians. Part II*, preprint on HAL server of CNRS [ccsd-00080397 - version 1] (28/06/2006).
- [I2] H. Ishii, *Existence and uniqueness of solutions of Hamilton-Jacobi equations*, Funkcial. Ekvac. 29, 167-188, 1986.
- [K1] J. Kratochvíl, R. Selaček and E. Werner, *The importance of being curved : bowing dislocations in a continuum description*, Philos. Mag. 83 (31-34), 3735-3752, 2003.
- [L1] R.W. Lardner, *Mathematical theory of dislocations and fracture*, Mathematical Expositions 17, University of Toronto Press, 1974.
- [L2] P.-L. Lions, G. Papanicolaou and S.R.S. Varadhan, *Homogenization of Hamilton-Jacobi equations*, unpublished preprint, 1986.
- [N1] F.R.N. Nabarro, *Theory of Crystal Dislocations*, Clarendon Press, Oxford, 1969.
- [O1] E. Orowan, *Zür Kristallplastizität I-III*, Z. Phys. 89, 605-634, 1934.
- [O2] S. Osher, J.A. Sethian, *Fronts Propagating with Curvature-Dependent Speed : Algorithms Based on Hamilton-Jacobi Formulations*, J. Comp. Physics, 79, 12-49, (1988).
- [P1] R. Peierls, *The size of a dislocation*, P. Phys. Soc. Lond. 52, 34-37, 1940.
- [P2] M. Polanyi, *Über eine Art Gitterstörung, die einem Kristall plastisch machen könnte*, Z. Phys. 89, 660-., 1934.

## BIBLIOGRAPHIE GÉNÉRALE

---

- [R1] W.T. Read, *Dislocations in crystals*, Graw-Hill, 1953.
- [R2] D. Rodney, Y. Le Bouar et A. Finel, *Phase field methods and dislocations*, Acta Materialia 51, 17-30, 2003.
- [R3] M. Rorro, *An approximation scheme for the effective Hamiltonian and applications*, Appl. Numer. Math. 56 (9), 1238-1254, 2006.
- [R4] E. Rouy and A. Tourin, *A viscosity solutions approach to shape-from-shading*, SIAM J. Numer. Anal. 29 (3), 867-884, 1992.
- [T1] G.I. Taylor, *The Mechanism of Plastic Deformation of Crystals. Part I. Theoretical*, Royal Society of London Proceedings Series A 145, 362-387, 1934.