

## **Application de la dynamique moléculaire classique à la physique des chocs.**

Laurent SOULARD, CEA Bruyères-le-Châtel

Dans le domaine de la physique des chocs, la construction de modèles adaptés aux codes de type éléments finis se heurte au manque d'informations sur la nature et les caractéristiques des processus élémentaires pilotant le phénomène à modéliser. Une solution consiste alors à déduire les paramètres d'un modèle sur des expériences mesurant la réponse globale du matériau, la grandeur mesurée n'étant souvent que très indirectement liée aux mécanismes de base décrits par le modèle. Par exemple, l'endommagement d'un métal sous traction dynamique (ou écaillage) peut être représenté par un processus de nucléation et de croissance de pores dont les propriétés (viscosité, taux de nucléation, etc.) sont déduites de la vitesse de surface libre de l'échantillon : cette distance entre le processus à caractériser et la mesure expérimentale se traduit alors par un manque de transférabilité du modèle vers des conditions éloignées du domaine de calage. Malheureusement, il n'existe pas, dans la plupart des cas, de technique expérimentale permettant une caractérisation in situ des ces mécanismes élémentaires. Une alternative est alors de se tourner vers la simulation numérique avec des méthodes travaillant à l'échelle de ces mécanismes élémentaires. La dynamique moléculaire (DM) est une voie possible que nous nous proposons de décrire dans cet exposé.

Nous présenterons d'abord les concepts de base de la méthode, en insistant particulièrement sur la fonction d'énergie potentielle, ingrédient clé de la DM. Nous aborderons ensuite les avantages de la DM, comme son adéquation avec l'échelle spatio-temporelle recherchée pour certains processus, et sa capacité à tirer parti de l'architecture des moyens de calcul actuels et futurs, mais aussi sur ses inconvénients : elle nécessite parfois des transferts d'échelle délicats, et ses propres données de base peuvent être difficiles à déterminer. Nous terminerons par quelques exemples d'applications.