

**Convention DRAST-CNRS No. 01 70041**

---

**MODELISATION MOLECULAIRE  
DANS LE DOMAINE DU GENIE CIVIL**

**Bilan et perspectives**

---

**RAPPORT RECAPITULATIF (Décembre 2002)**

**par**

**Paul Jouanna\***

\*Dynamique et Thermodynamique des Milieux Complexes (DTMC)  
Hydrosciences UMR 5569, MSE-ISTEEM, Université Montpellier II  
Adresse: DTMC, Case 13, Place Eugène Bataillon, 34095 MONTPELLIER CEDEX 5  
Tél: 33 4 67 14 35 02 Fax: 33 4 67 52 01 54  
E.mail: [jouanna@msem.univ-montp2.fr](mailto:jouanna@msem.univ-montp2.fr)  
<http://www.isteen.univ-montp2.fr/hydrosciences/dtmc>

## **MODELISATION MOLECULAIRE DANS LE DOMAINE DU GENIE CIVIL. BILAN ET PERSPECTIVES.**

### ***A Objectifs***

La conception et la réalisation de tout projet de génie civil repose sur deux bases complémentaires, d'une part l'observation et l'expérimentation qui donnent accès à la connaissance des matériaux, d'autre part le calcul qui permet d'intégrer ces propriétés dans la conception de structures.

Traditionnellement, la connaissance des matériaux est obtenue à l'échelle macroscopique, avec l'aide éventuelle de techniques d'homogénéisation, mais toujours en restant dans une démarche phénoménologique, où la matière est considérée comme une boîte noire, sans se soucier de la structure intime de la matière.

L'observation et l'expérimentation, à des échelles de plus en plus fines, descendent aujourd'hui jusqu'à l'atome et apportent de jour en jour des informations très précieuses pour compléter l'expérimentation à l'échelle macroscopique. Mais il manque actuellement, du moins en génie civil, le chaînon calcul, qui permettrait d'intégrer ces expérimentations fines dans une démarche de prévision de propriétés, en particulier le comportement de matériaux complexes.

L'objectif du présent projet vise à compenser cette lacune en proposant d'appliquer les techniques de modélisation moléculaire à l'étude de matériaux de Génie Civil, à l'instar d'autres domaines scientifiques qui relèvent de la chimie, de la physique ou de la biologie sous les labels de "nanotechnologie", "nanomatériaux", etc. où ces techniques se développent à une vitesse foudroyante.

### ***B État de la question, difficultés et insuffisances***

Les modélisations utiles à l'ingénieur, à l'échelle macroscopique qui est celle de la conception et de la réalisation des ouvrages de Bâtiments et Travaux Publics, sont réalisées classiquement en assimilant le milieu hétérogène soit à un milieu continu où interagissent divers constituants élémentaires, soit à un milieu granulaire continu par morceaux. Ces démarches sont bien admises et bien établies au plan conceptuel.

Cependant ces modélisations classiques nécessitent la connaissance des comportements individuels des divers constituants du milieu hétérogène, connaissance dont l'obtention par des voies expérimentales est d'autant plus difficile que la complexité des matériaux s'accroît, ce qui constitue une forme d'impasse du fait de la multiplicité et de la diversité des propriétés macroscopiques recherchées. Cette diversité est amplifiée par la complexité des sollicitations sur les structures (charges dynamiques, séismes, agressions chimiques, gel, feu, ...). Au plan pratique, ces difficultés apparaissent à trois niveaux :

- difficulté de la réalisation d'appareillages susceptibles de reproduire des conditions hydro-mécaniques et physico-chimiques complexes;
- nombre considérable de manipulations pour suivre une multitude de cheminements thermodynamiques dans un espace de configuration aussi complexe;
- et enfin difficulté de synthèse de ces expériences, en vue de produire une loi de comportement que l'on puisse transporter dans les modélisations.

On doit ajouter que cette approche directe ne permet pas d'aborder systématiquement le problème inverse, à savoir l'élaboration de matériaux en fonction des propriétés souhaitées. D'où la recherche de méthodes rationnelles pour obtenir le comportement.

### ***C Propositions et espérances***

Pour sortir de cette impasse, plusieurs équipes dans le monde ont entrepris des recherches sur le comportement et la caractérisation des milieux hétérogènes, comme le sont la plupart des matériaux de construction, à partir des techniques de modélisation moléculaire.

Le retour à la physique au niveau atomique offre en effet la possibilité d'aborder le comportement des matériaux par voie de synthèse numérique. Cette voie longtemps considérée comme utopique est aujourd'hui envisageable, voire incontournable, grâce à trois percées fondamentales:

- développements des moyens d'observation de la structure de la matière qui descendent maintenant jusqu'à l'échelle atomique;
- développement des vitesses de calculs autorisées par le matériel ou hardware (Figure 1), qui permettent d'envisager des "expériences numériques", beaucoup plus souples et rapides que les expériences physiques;
- développement, en lieu et place de la boîte noire considérée dans des expériences physiques, de modèles théoriques de la matière et de programmes de calcul correspondants, en particulier dans les modélisations les plus précises *ab initio* en développement exponentiel (Figure 2).

On peut ainsi espérer atteindre des propriétés jusqu'ici inexplorées ou peu élucidées (fluage, plasticité...), mais on peut surtout espérer concevoir des matériaux nouveaux adaptés à des contextes de plus en plus variés ou trouver des matériaux de substitution dans le cas d'épuisement de ressources naturelles.

La présente étude, à caractère prospectif et d'une durée d'une année, débouche sur des propositions pour associer la modélisation moléculaire à des actions R&D de Génie Civil, sous la forme du projet:

*"GCMol : La Modélisation Moléculaire, un nouvel outil au service du Génie Civil".*

### ***D Challenge***

Le talon d'Achille de cette approche moléculaire tient au nombre considérable d'atomes à prendre en compte si l'on désire un retour brutal à l'échelle phénoménologique. Pour franchir le fossé qui existe entre échelles tant d'espace que de temps entre ces deux points de vue extrêmes, deux tendances sont complémentaires:

- d'une part on compte sur l'augmentation de la puissance et la rapidité du calcul et/ou la multiplication du nombre de nœuds de machines parallèles;
- mais surtout on assiste d'autre part au développement de techniques de raccordement entre modélisations à diverses échelles, les modélisations étant soit imbriquées à l'instar des techniques de l'homogénéisation classique, soit raccordées à la frontière de domaines spatialement disjoints, etc.. Une attention toute particulière sera réservée aux développements très récents et remarquables dans ce challenge fondamental, pour établir un pont entre échelles spatio-temporelles moléculaires et phénoménologiques.

## ***E Contenu de l'étude***

- ***Partie 1 Etude de matériaux via la modélisation moléculaire***

Dans le *chapitre 1.1, Diverses approches spatio-temporelles*, on rappelle tout d'abord le classement des propriétés des matériaux dans le contexte d'une approche phénoménologique de matériaux hétérogènes, schéma qui englobe la totalité des propriétés thermo-hydro-mécaniques et physico-chimiques des matériaux, au-delà des clivages traditionnels entre mécanique des solides, des fluides, physique et chimie. Ce schéma sert de cadre pour juger des potentialités des diverses méthodes de modélisation envisagées.

Puis on donne un aperçu général des méthodes d'approche des propriétés des matériaux, depuis l'échelle de l'atome jusqu'à l'échelle phénoménologique classique de l'ingénieur. Cette étude porte sur l'ensemble des méthodes disponibles, qu'elles soient actuellement utilisées ou seulement susceptibles d'être utilisées en vue de l'étude de matériaux de Génie Civil. En fait la difficulté essentielle n'est pas tant dans la description de chaque approche que dans les raccordements entre ces approches qui souvent s'ignorent mutuellement. Pour chaque approche, on définit le principe, les outils de modélisation, les potentialités pour l'étude de matériaux ainsi que les liens avec les échelles connexes.

Le *chapitre 1.2, Diverses approches de la validation*, traite des diverses validations de la modélisation, qu'elles soient purement numériques, ou qu'elles fassent appel à la comparaison avec des données expérimentales, à l'échelle moléculaire ou à des échelles supérieures.

- ***Partie 2 Modélisation moléculaire et matériaux de Génie Civil***

Les différents chapitres de la *partie 2* sont dévolus à des illustrations de modélisation moléculaire et à leur validation dans le domaine des matériaux de Génie Civil. La division de l'exposé est calquée sur les trois grands classes de propriétés des matériaux, à savoir à l'équilibre (*structure*), en non-équilibre intra constituant (*viscosité*) et en non-équilibre inter constituants (*dissolution, croissance cristalline, ségrégation*). Les études de cas portent essentiellement sur le plâtre et les ciments, en présence de molécules d'adjuvants.

- ***Partie 3 Perspectives de la modélisation moléculaire en Génie Civil***

Le *chapitre 3.0*, introductif à la partie 3, propose une réponse à trois questions préalables à l'élaboration d'un projet de développement de la Modélisation Moléculaire en Génie Civil.

Le *chapitre 3.1* fait tout d'abord un bilan des actions de développement et de leurs perspectives, de façon générale en Modélisation Moléculaire, au plan incitatif, formation et/ou R&D.

Enfin le *chapitre 3.2*, au cœur de la question posée par la présente convention, expose les conditions qui devraient présider au succès d'un projet de développement de la Modélisation Moléculaire en Génie Civil, que ce soit au plan incitatif, formation et/ou R&D. Sur ces bases est fondé le *projet guide* baptisé :

"GCMol : La modélisation moléculaire, un nouvel outil au service du Génie Civil".

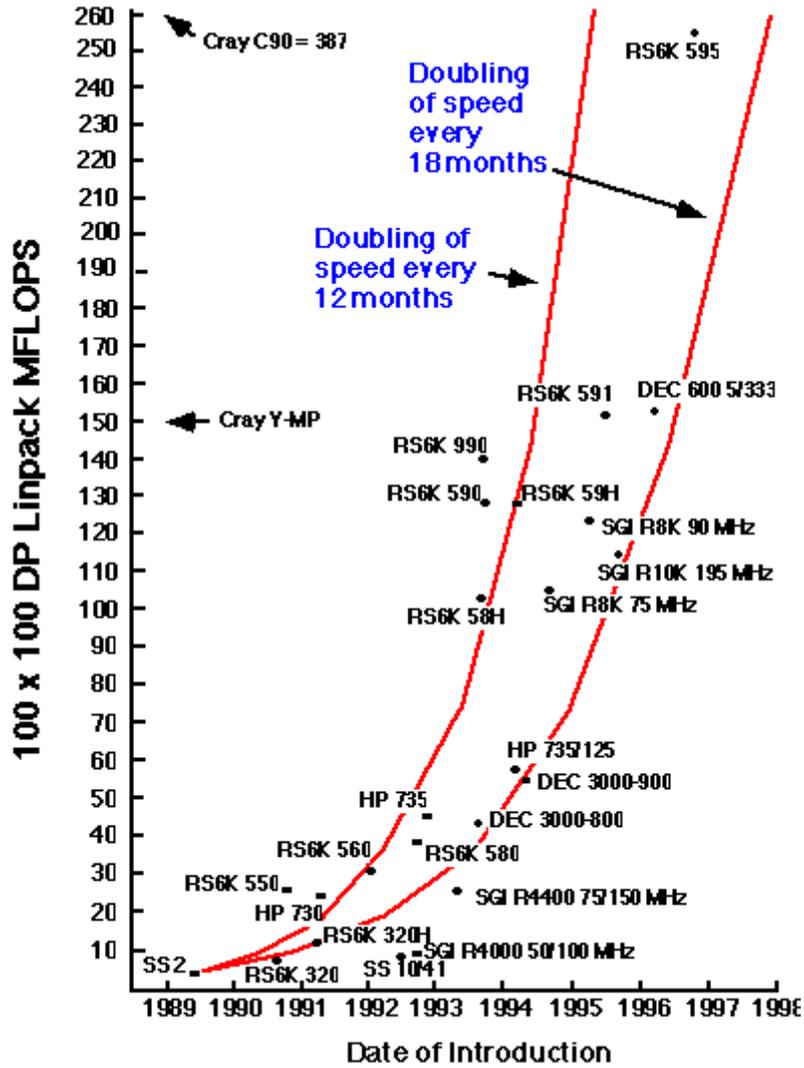
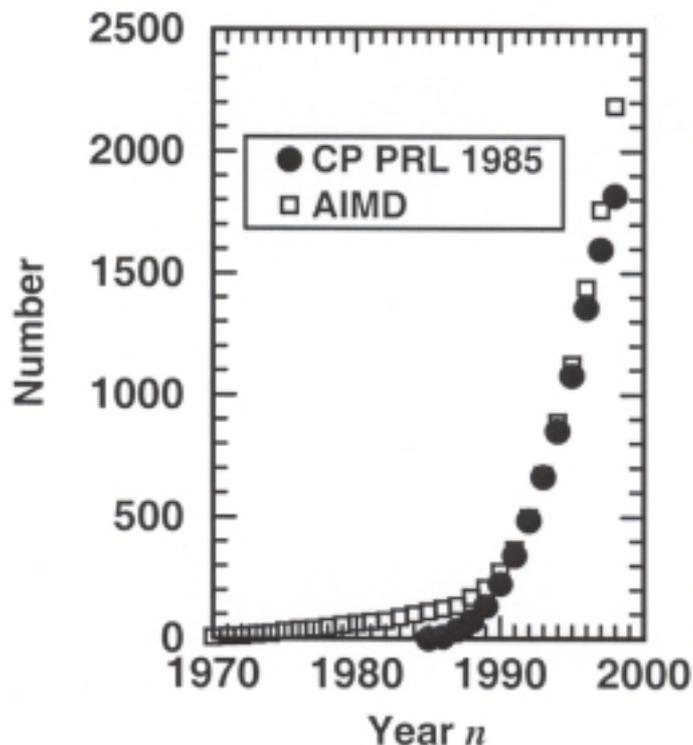


Figure 1 Accroissement des vitesses de calcul entre 1989 et 1998 [after Feller, 1997 #544]



**Figure 2** Analyse de citations *ab initio*

Nombre cumulé de publications en fonction des années [after Marx & Hutter, 2000 #189]:

(i) Carrés blancs : publications contenant dans le titre le résumé ou les mots clés l'expression "ab initio molecular dynamics" ou synonymes.

(ii) Points noirs : publications citant l'article de base sur la DFT [Car & Parinello, 1985 #127]

Cette statistique est issue de CAPLUS ("Chemical Abstracts Plus"), INSPEC ("Physics Abstracts") et SCI ("Science Citation Index").

## Références:

Car, R., Parinello, M. (1985). "Unified Approach for Molecular Dynamics and Density-Functional Theory." Physical Review Letters **55**(22): 2471-2474.

Feller, D. (1997). "The EMSL Ab Initio Methods Benchmark Report: A Measure of Hardware and Software Performance in the Area of Electronic Structure Methods, PNNL-10481 (Version 3.0)." Molecular Science Computing Facility, William R. Wiley Environmental Molecular Sciences Laboratory, Pacific Northwest National Laboratory, Richland, Washington 99352 (Figure 1).

Marx, D., Hutter, J. (2000). "Ab initio molecular dynamics: Theory and implementation." Modern methods and algorithms of quantum chemistry, J. Gortendorst (Ed.), Forschungszentrum Jülich, NIC Series **1**: 310-449 (Figure 1).