



HAL
open science

Formulation thermodynamique de lois de comportement hors-équilibre

Vincent Magnenet

► **To cite this version:**

Vincent Magnenet. Formulation thermodynamique de lois de comportement hors-équilibre. Autre [cond-mat.other]. Institut National Polytechnique de Lorraine, 2004. Français. NNT : 2004INPL107N . tel-01749694

HAL Id: tel-01749694

<https://hal.univ-lorraine.fr/tel-01749694>

Submitted on 29 Mar 2018

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.



AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10

http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php

<http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm>



Institut National Polytechnique de Lorraine

Ecole Doctorale E.M.M.A.

THESE

présentée par

Vincent MAGNET
(Ingénieur E.N.S.E.M.)

pour l'obtention du grade de
Docteur de l'Institut National Polytechnique de Lorraine
Spécialité : Mécanique et Energétique

**FORMULATION THERMODYNAMIQUE DE LOIS
DE COMPORTEMENT HORS-ÉQUILIBRE :
GROUPES DE SYMÉTRIES CONTINUES ISSUS
D'UNE APPROCHE LAGRANGIENNE IRRÉVERSIBLE.**

soutenue publiquement le 13 Décembre 2004 devant le jury constitué de :

F. Pastrone	Président du jury	Professeur, Université de Turin
A. Brillard	Rapporteur	Professeur, Université de Haute-Alsace
P. Bourgin	Rapporteur	Professeur, E.S.P. d'Oyonnax
J.F. Ganghoffer	Examinateur	Professeur, E.N.S.E.M., I.N.P.L. (Directeur de thèse)
R. Rahouadj	Examinateur	Maitre de Conférences (H.D.R.), E.N.S.E.M., I.N.P.L., (Codirecteur de thèse)
C. Cunat	Examinateur	Professeur, E.N.S.E.M., I.N.P.L., (Codirecteur de thèse)
W. Bertram	Invité	Professeur à l'Université Henri Poincaré (Nancy I)

Service Commun de la Documentation
INPL
Nancy-Brabois

Remerciements

Cette thèse a été réalisée au laboratoire L.E.M.T.A. (le Laboratoire d'Energétique et de Mécanique Théorique et Appliquée de Vandoeuvre) sous la responsabilité du Professeur Jean-François Ganghoffer. Je le remercie très sincèrement pour la formation que j'ai acquise sous sa direction, pour toute l'aide qu'il m'a apportée, et pour tous les services qu'il m'a rendu.

Je suis sensible à l'honneur que m'ont fait Monsieur Patrick Bourgin, Professeur à l'E.S.P. d'Oyonnax, et Monsieur Alain Brillard, Professeur à l'Université de Haute-Alsace, d'avoir examiné ce mémoire en qualité de rapporteurs. J'adresse également une très vive sympathie à Monsieur Franco Pastrone, Professeur à l'Université de Turin, car il a présidé le jury de soutenance. Je remercie enfin Monsieur Wolfgang Bertram, Professeur à l'université Henri Poincaré, d'avoir assisté à la soutenance en tant qu'invité.

Monsieur Rachid Rahouadj, Professeur H.D.R. à l'E.N.S.E.M., par son soutien, sa patience, sa sympathie, et sa disponibilité (en dépit de son emploi du temps "chargé"), a considérablement contribué à l'élaboration de mon travail. Je lui témoigne, dans ces remerciements, ma profonde et sincère gratitude.

Pendant mes années de classe préparatoire, j'ai toujours vu la thermodynamique comme une discipline "barbare" et incompréhensible. Il revient au Professeur Christian Cunat (E.N.S.E.M.), chef de notre équipe, d'avoir déclenché en moi un vif intérêt pour cette discipline maîtresse, et d'avoir ainsi orienté mon travail vers des horizons salvateurs... Qu'il me soit permis de lui adresser dans ces quelques mots tous mes remerciements, ainsi qu'une très vive reconnaissance.

Je ne peux oublier d'associer à mes remerciements notre secrétaire d'équipe, Marie-Hélène Zoberman : nous ne la remercierons jamais assez car elle sait faire preuve en toutes circonstances d'une disponibilité et d'une sympathie exemplaires.

Au travail scientifique de la thèse s'ajoute des connaissances "pratiques" telles que la programmation sous LaTeX ou la constitution d'un dossier ATER par exemple. Je salue ainsi mes aînés pour leurs "coups de pouce" très utiles : merci à Kaïs, Lamine, et aux autres collègues de travail : Nadim, Hanane et tous les autres. Je remercie plus particulièrement Yves pour tous les services qu'il m'a rendu. Je souhaite aussi souhaiter la bienvenue aux "générations futures" : bon courage à Norbert et Rida dans ce long et difficile exercice qu'est la thèse !

Je pense enfin à ma famille et à Amélie, qui ont su me soutenir et me réconforter dans les moments difficiles. Je remercie mes parents qui ont relu ce rapport sous un angle plus "littéraire", dans le seul but de corriger mes fautes de français...

De manière générale, merci à tous ceux qui ont, directement ou indirectement, participé à l'élaboration de cette thèse, qui s'est déroulée dans un climat de sympathie et de convivialité.

Vandoeuvre, le 16 Décembre 2004

Table des Matières

Notations	xi
Introduction	xv
1 Recherche d'une fonction lagrangienne en TPI	1
I Position du problème	3
I.1 Cadre de calcul et problématique	4
I.1.1 Forme variationnelle des équations de la dynamique	4
I.1.2 Théorème d'Emmy Noether (1882-1935)	6
I.1.3 Formulation du problème	7
I.2 Théorème d'existence et construction d'un lagrangien	9
I.2.1 Ensemble des fonctions à support compact	9
I.2.2 Produit scalaire sur A^q et opérateurs auto-adjoints	10
I.2.3 Dérivée de Fréchet d'un élément de A^q	12
I.2.4 Théorème d'existence	13
I.2.5 Lagrangiens équivalents	15
I.3 Généralisation de l'approche lagrangienne	17
I.3.1 Présentation du formalisme	17
I.3.2 Application du formalisme à l'élasticité statique	18
I.3.3 Lien avec les théorèmes classiques	21
I.3.4 Conclusion	22
II Principales approches lagrangiennes de la TPI rencontrées dans la littérature	23

II.1 Formulations lagrangiennes équivalentes	24
II.1.1 La stratégie des facteurs intégrants	25
II.1.2 L'ajout de variables	26
II.1.3 Approche par produit scalaire de convolution	30
II.1.4 Autres approches	31
II.2 Formulations lagrangiennes irréversibles par potentiels de dissipations	32
II.2.1 Retour à la dynamique des masses ponctuelles	32
II.2.2 Potentiels de dissipation	35
II.2.3 Bilan des différentes stratégies et lien avec la thermodynamique	37
II.2.4 Conclusion	43
III Présentation d'une thermodynamique des processus irréversibles (formalisme DNLR) et construction d'une fonction lagrangienne associée	45
III.1 Généralisation de la relation d'Euler et construction d'un premier lagrangien	46
III.1.1 Hypothèses et équations de bases	46
III.1.2 Introduction de variables internes liées à la microstructure	47
III.1.3 Equations d'évolution thermodynamique du système	49
III.1.4 Construction d'un lagrangien pour les équations thermodynamiques	50
III.1.5 Généralisation à tout potentiel thermodynamique	51
III.2 Relations cinétiques et spectre des relaxations dans le formalisme DNLR	53
III.2.1 Etat relaxé	53
III.2.2 Loi cinétique de Onsager	53
III.2.3 Intégration de la loi cinétique dans le lagrangien	54
III.3 Modélisation du spectre des temps de relaxation DNLR	55
III.3.1 Première écriture	55
III.3.2 Introduction de non linéarités	56
III.3.3 Spectre des relaxations	57
III.3.4 Conclusion	61

2 Applications des groupes de Lie à des lois de comporte-

ments visqueux issues de l'approche DNLR **63**

IV Méthode générale de calcul des symétries variationnelles et première application expérimentale **65**

- IV.1 Procédure de calcul des groupes de symétries 67
 - IV.1.1 Cas des symétries variationnelles 67
 - IV.1.2 Cas des symétries contenues dans les équations 68
 - IV.1.3 Retour à l'approche DNLR 69
 - IV.1.4 Simplification de la condition de symétrie 71
- IV.2 Première mise en oeuvre pour un comportement visqueux 73
 - IV.2.1 Formulation du problème 73
 - IV.2.2 Mise en évidence d'une symétrie particulière 75
 - IV.2.3 Validation expérimentale sur un polymère 77
 - IV.2.4 Comparaison avec la formule empirique de Williams, Landel et Ferry . 80
 - IV.2.5 Discussion 81
 - IV.2.6 Conclusion 83

V Contribution à la modélisation du comportement d'une colle acrylique par le biais de groupes de symétries **85**

- V.1 Présentation de la problématique industrielle 86
 - V.1.1 Contexte industriel et objectifs 86
 - V.1.2 Résultats expérimentaux en compression 87
- V.2 Contribution à la modélisation 90
 - V.2.1 Choix *a priori* d'une forme de loi de comportement 90
 - V.2.2 Construction de courbes maîtresses expérimentales 92
 - V.2.3 Position du problème sur le plan mathématique 100
 - V.2.4 Simplification du problème 100
 - V.2.5 Conclusion 102

Conclusion et perspectives **105**

Annexe A : Bref historique sur le principe de la moindre action **109**

Annexe B : Calcul des variations	113
B.1 Cadre de calcul et notations	113
B.2 Définition d'une fonctionnelle intégrale	113
B.3 Variation δS induite par le groupe de transformation	116
B.4 Application du calcul des variations en Physique	117
B.5 Les problèmes à extrémités fixes	118
B.6 Les problèmes à extrémités inconnues	119
Annexe C : Synthèse de Mécanique Analytique	121
C.1 L'intégrale d'action en dynamique du point	121
C.2 Remarques sur la nature de l'extremum et les conditions initiales	122
Annexe D : Méthode des éléments finis	125
Annexe E : Analyse de Noether	127
E.1 Générateur associé à un groupe	127
E.2 Prolongement d'un champ de vecteur	128
E.3 Notion de groupes de symétrie	130
E.4 Cas des symétries variationnelles	132
E.5 Symétries et conditions initiales	133
Annexe F : Application du théorème de Noether	135
F.1 Conservation de l'impulsion	135
F.2 Conservation du moment cinétique	136
F.3 Conservation de l'énergie pour un système continu	136
Annexe G : Confrontation de l'irréversibilité et du déterminisme	139
Annexe H : Géométrie différentielle	143
H.1 Produit extérieur de p 1-formes	143
H.2 Différentiation extérieure et verticale	144
H.3 Produit intérieur	145

Notations

Notations associées à une grandeur x

x	Grandeur scalaire
\mathbf{x}	Grandeur tensorielle d'ordre supérieur ou égal à 1
x_i	Terme d'indice i d'une grandeur vectorielle \mathbf{x}
x_{ij}	Terme d'indice (i, j) d'une grandeur matricielle \mathbf{x}
\bar{x}	Transformée de x par un groupe de symétrie
x^r	Grandeur x à l'état relaxé

Grandeurs physiques et objets mathématiques

a	Diffusivité thermique
\mathbf{a}^u	Matrice de Tisza
\mathbf{A}	Forces de non équilibre
\mathbf{A}	Ensemble des fonctions $X(x, u^{(n)})$
\mathbf{A}^s	Ensemble des vecteurs de dimension s à composantes dans \mathbf{A}
$a_{\bar{T}, T}$	Facteur de glissement en température
α_u	Coefficient de dilatation
α	Variables internes
\mathbf{b}	Matrice de couplage
C_u	Chaleur latente
C_1, C_2	Coefficients WLF
\mathbf{C}	Tenseur des constantes élastiques (ordre 4)
$C^\infty[\Omega]$	Ensemble des fonctions de classe C^∞ définies sur l'ensemble Ω
$\partial\Omega$	Bord du domaine Ω
D	Nombre de décades
dx	Elément de volume du domaine Ω , soit $dx = dx_1 dx_2 dx_3 dx_4$
δS	Variation première d'une intégrale fonctionnelle S
$\delta^2 S$	Variation seconde d'une intégrale fonctionnelle S
Δ	Système d'EDP

ΔF_j	Energie libre d'activation du mode j
ΔH_j	Enthalpie d'activation du mode j
ΔS_j	Entropie d'activation du mode j
Δs_i	Création d'entropie
D_i ou $\frac{d}{dx_i}$	Opérateur de dérivation totale par rapport à la variable x_i
$Div \mathbf{P}$	Divergence totale d'un quadruplet \mathbf{P}
ε	Tenseur des déformations linéarisées (ordre 2)
e	Densité volumique d'énergie interne
E	Module de Young ou énergie interne
$\mathbf{E}()$	Opérateur d'Euler-Lagrange
\mathcal{E}	Energie mécanique totale
f	Champ de forces s'exerçant à distance
g	Matrice de dissipation
h	Constante de Planck
Γ	Moment cinétique
I	Intervalle de temps
Id	Application identique (communément appelée "identité")
J	Fonctionnelle intégrale (en dynamique ou en statique), ou multientier
\mathbf{J}	Flux d'énergie
k	Coefficient de raideur ou constante de Boltzmann
\mathcal{K}	Energie cinétique ou densité d'énergie cinétique
L	Lagrangien
\mathbf{L}	Coefficients cinétiques
λ	Multiplicateurs de Lagrange
\mathbf{M}	Variété de configuration d'un système mécanique
\mathbf{M}_{con}	Variété engendrée par les variables contrôlables
\mathbf{M}_{obs}	Variété engendrée par les variables observables
m_i	Masse de la particule i
μ	Paramètre d'un groupe de symétrie
μ	Potentiels chimiques
N	Nombres de mûles des espèces en présence
\mathbf{n}'	Vecteur unitaire normal au domaine Ω
\mathbf{n}	Vecteur unitaire normal au volume V
ν	Fréquence de saut
ν_{ij}	Coefficient stoechiométrique de l'espèce i dans la réaction j
Ω	Volume généralisé de \mathbb{R}^4
$p_j^{\hat{0}}$	Poids du mode j
π	Champ de force d'un système mécanique
ϕ	Composantes verticales d'un générateur \mathbf{v}
$pr^{(n)}\mathbf{v}$	Prolongement à l'ordre n d'un champ de vecteur \mathbf{v}
q	Nombre de variables dépendantes
\mathbf{q}_i	Vecteur position de la particule i

q	Vecteur obtenu par concaténation de tous les vecteurs positions q_i
R	Constante des gaz parfaits
ρ	Masse volumique
r	Vecteur des variables d'espace x_1, x_2, x_3
\mathbb{R}	Ensemble des réels
s	Densité volumique d'entropie
S	Fonctionnelle intégrale ou surface (bord du volume V) ou entropie
S_u	Partie de la surface S où le déplacement est connu
S_f	Partie de la surface S où le vecteur contrainte est connu
σ	Tenseur des contraintes de Cauchy
t	Temps
T	Température
\mathbf{T}	Vecteur contrainte
$T(\mathbb{M})$	Espace tangent à la variété \mathbb{M}
T	Opérateur de transposition
τ	Temps de relaxation
u	Densité volumique d'énergie interne
\mathbf{u}	Variables dépendantes ou champ de déplacement
$u_{i,j}$	Dérivée partielle de u_i par rapport à x_j
$\mathbf{u}^{(n)}$	Ensemble des dérivées partielles d'ordre $k \leq n$ des u_i par rapport aux x_j
U^{ad}	Ensemble de fonctions admissibles
v	Générateur associé à un groupe
\mathcal{V}	Energie potentielle ou densité d'énergie potentielle
$W(\varepsilon)$	Energie élastique de déformation
x	Variables indépendantes
ξ	Composantes horizontales d'un générateur v
ξ_j	Degré d'avancement de la réaction chimique j
y	Variables extensives
Y	Variables intensives
z	Variables internes

Abréviations

DNLR	Distribution of Non Linear Relaxations
EDP	Equation(s) au(x) Dérivées Partielles
EDO	Equation(s) Différentielle(s) Ordinaire(s)
PMA	Principe de la Moindre Action
TPI	Thermodynamique des Processus Irréversibles
VER	Volume Élémentaire Représentatif
WLF	Williams, Landel, Ferry

Symboles

- Indique la fin d'un théorème ou d'une définition

\circ	Opérateur de composition
\cdot	Produit scalaire euclidien sur \mathbf{R}^n , ou produit contracté
\emptyset	Ensemble vide
∇	Opérateur gradient
$\nabla \cdot$	Opérateur divergence
\sum_J	Somme sur tous les multientiers jusqu'à un ordre n donné
\times	Produit cartésien de deux ensembles
$\langle \rangle, ()$	Produits scalaires
D^*	Adjoint d'un opérateur différentiel D
\wedge	Produit extérieur de deux formes
d	Différentiation extérieure

Introduction

La notion de courbe maîtresse en science des matériaux permet de synthétiser un jeu de courbes expérimentales lorsqu'un paramètre contrôlé (comme la température ou la vitesse de déformation) varie. Par exemple, le principe d'équivalence temps-température rencontré en viscoélasticité linéaire ([Fer-1980]) suggère que des variations temporelles isothermes du module sécant E_s peuvent se superposer lorsqu'on applique une translation sur l'échelle logarithmique des temps (voir figure 1).

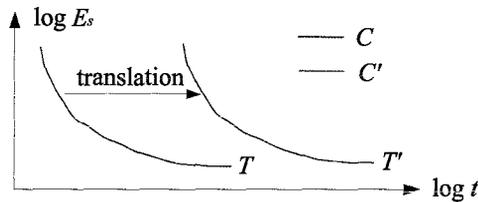


Fig. 1: Représentation schématique du principe d'équivalence temps-température. Une réponse isotherme à T du module sécant E_s (courbe C) peut être déduite d'une réponse à T' (courbe C') par une translation le long de l'axe des temps dans le plan $(\log t, \log E_s)$.

La connaissance du facteur de glissement qui amène une courbe sur une autre obtenue en changeant les conditions de contrôle permet la construction d'autres réponses dans des domaines de paramètres qui ne sont pas toujours explorables par l'expérience. La notion même de superposition est de façon intuitive associée à celle de symétrie, au sens d'une équivalence entre des variables de contrôle et les grandeurs physiques rendant compte du comportement du matériau (temps, déformation, vitesse de déformation, contrainte, entropie, variables de microstructure,...). De manière générale, définissons par le terme "déduit" le fait qu'une courbe expérimentale C' peut être obtenue par une opération géométrique et/ou analytique à partir d'une autre courbe C . Remarquons qu'en dépit du caractère général de la transformation, nous pouvons formuler les propriétés suivantes :

- si C'' est déduit de C' et C' est déduit de C , alors il semble naturel de dire que C'' est déduit de C .

-
- C est toujours déduite d'elle même.
 - si C' est déduite de C , alors C peut être déduite de C' par l'opération inverse.

Ces trois propriétés suggèrent un lien étroit avec la structure de groupe, qui repose sur les axiomes d'associativité, d'existence d'un élément neutre, et d'existence d'un inverse. Ce rapprochement intuitif nous pousse à croire que la théorie des groupes pourrait être un cadre formel bien adapté à la description (ou l'obtention) de courbes maîtresses en thermomécanique des milieux continus.

Un des objectifs de ce mémoire est de mettre en oeuvre une méthodologie systématique d'exploitation de données expérimentales décrivant le comportement d'un matériau. Cette méthodologie s'appuie sur la mise en exergue et l'utilisation de symétries continues qui leur sont associées. On abordera cette thématique sous deux aspects complémentaires, de difficulté croissante : le premier volet concerne le calcul des symétries continues associées à une loi de comportement supposée connue, dont la formulation s'inscrit dans un cadre thermomécanique lui même inspiré d'un contexte thermodynamique. Le second volet consiste à utiliser l'information de nature expérimentale pour "guider" l'élaboration d'une loi de comportement, en modélisant l'effet d'une variation des paramètres par un groupe de symétrie continue.

Le formalisme lagrangien nous semble particulièrement bien adapté à la mise en exergue des symétries d'un système ou d'un milieu dont la dynamique est décrite par la connaissance d'une fonction à valeur scalaire (le lagrangien). Tel est l'angle d'attaque de la mécanique analytique de Lagrange, qui s'appuie sur la représentation de l'état d'un système dans un espace de variables adéquat (appelé espace des phases), et sur la construction d'une fonction lagrangienne. La nature objective de l'information liée à la dynamique du système est intimement liée à l'invariance du lagrangien (reproductibilité des expériences) par changement des conditions d'observation (translation temporelle et spatiale, rotation de l'observateur), conduisant à des symétries¹ qui restreignent la forme du lagrangien. L'existence de lagrangiens associés à un principe de moindre action est une voie féconde de formulation globale (variationnelle) d'équations de champ locales en mécanique des milieux continus élastiques. La nature dissipative des matériaux que nous proposons d'aborder nécessite une extension de la mécanique de Lagrange à la prise en compte d'une irréversibilité de comportement, pour laquelle la thermodynamique des processus irréversibles (TPI) semble un cadre nécessaire et adéquat.

Le deuxième objectif de ce mémoire est alors d'analyser les stratégies envisageables permettant une telle extension, voire une alliance entre la TPI et la mécanique lagrangienne. Cette problématique renvoie au débat philosophique fort ancien et parfois houleux - soulevé par Helmholtz, Poincaré à la fin du XIX^{ème} siècle, suivis de De Donder, Gyarmati, Prigogine parmi la communauté des thermodynamiciens de la fin du siècle passé, voir [Rah-2000] pour quelques éléments historiques - qui oppose les notions de déterminisme et d'irréversibilité. Il s'y ajoute une compréhension insuffisante sur le plan physique des conditions mathématiques d'existence d'un lagrangien.

¹ Ainsi, l'invariance par rotation de l'observateur conduit à une énergie cinétique seulement dépendante de la norme du vecteur vitesse

En supposant alors construite une telle forme lagrangienne en thermomécanique des milieux dissipatifs, on se propose d'en étudier les symétries variationnelles (les symétries de l'intégrale d'action.) On essaiera alors de dégager de ces symétries des moyens prédictifs d'obtention de réponses d'un matériau, synthétisées dans des courbes maîtresses.

L'ensemble de notre exposé se divisera en cinq chapitres regroupés en deux parties.

Le premier chapitre a pour but de présenter les principaux résultats concernant l'existence d'une intégrale fonctionnelle dont la stationnarité conduit à un système d'EDP donné. Nous définissons à cet effet la notion cruciale de système auto-adjoint, qui assure l'existence d'un lagrangien. Nous amenons également la problématique posée par l'intégration de l'irréversibilité au sein du formalisme lagrangien. Cette problématique est liée au caractère non auto-adjoint des systèmes à évolution irréversible. Enfin, nous proposons une méthode systématique de construction de lagrangiens.

Dans le deuxième chapitre, nous comparons les différentes approches lagrangiennes relatives à des phénomènes irréversibles évoquées dans la littérature. Une synthèse globale de ces travaux nous permet d'apporter quelques éclaircissements à la notion de système auto-adjoint, qui semble mal comprise sur le plan physique. Nous montrons ainsi que la structure auto-adjointe d'un système d'EDP semble directement liée au fait qu'un choix possible de lagrangien est la dérivée par rapport au temps d'un potentiel thermodynamique.

Nous mettons cette hypothèse à l'épreuve dans un troisième chapitre, en présentant les fondements de l'approche thermodynamique choisie (DNLR), qui s'appuie sur une généralisation de la relation d'Euler. Nous aboutissons au fait que cette généralisation assure justement le caractère auto-adjoint des équations thermodynamiques, et par suite, l'écriture d'un lagrangien pour ces dernières.

Cette forme variationnelle établie, une stratégie générale de calcul de symétries de l'intégrale fonctionnelle est mise en place dans le quatrième chapitre. Cette stratégie est ensuite appliquée dans un cas particulier et simplifié de l'approche DNLR. Cela nous permet de souligner formellement l'existence d'un principe de superposition en temps-température que nous vérifions à l'aide de données expérimentales obtenues sur un polymère.

Dans le dernier chapitre, nous élaborons une stratégie générale de recherche et d'écriture du comportement fondée sur la construction de groupes de symétries "expérimentaux". Ces groupes agissent ici sur la forme forte de la loi de comportement, et sont susceptibles de préciser la structure mathématique de cette loi. Une tentative de mise en oeuvre de cette démarche d'aide à la construction de la loi de comportement à partir de données expérimentales est faite pour un matériau de type colle fortement non linéaire.

Ce mémoire se veut concis vis à vis de l'écriture mathématique. Par conséquent, la plupart des théorèmes seront reportés en annexe, afin de limiter le niveau d'abstraction et de garder une certaine lisibilité de la forme. On illustrera d'exemples les principaux théorèmes et outils mathématiques (dans le corps du texte) mis en oeuvre dans ce travail.

Première partie

**Recherche d'une fonction
lagrangienne en TPI**



I

Position du problème

Sommaire

I.1	Cadre de calcul et problématique	4
I.1.1	Forme variationnelle des équations de la dynamique	4
I.1.2	Théorème d'Emmy Noether (1882-1935)	6
I.1.3	Formulation du problème	7
I.2	Théorème d'existence et construction d'un lagrangien	9
I.2.1	Ensemble des fonctions à support compact	9
I.2.2	Produit scalaire sur \mathbf{A}^q et opérateurs auto-adjoints	10
I.2.3	Dérivée de Fréchet d'un élément de \mathbf{A}^q	12
I.2.4	Théorème d'existence	13
I.2.5	Lagrangiens équivalents	15
I.3	Généralisation de l'approche lagrangienne	17
I.3.1	Présentation du formalisme	17
I.3.2	Application du formalisme à l'élasticité statique	18
I.3.3	Lien avec les théorèmes classiques	21
I.3.4	Conclusion	22

Le “principe de la moindre action” (PMA) est un principe métaphysique qui est dû à Maupertuis (1698-1759), et que nous présentons de manière plus détaillée en annexe A. Ce principe est un principe d’optimum qui stipule que *“lorsqu’il arrive quelque changement dans la Nature, la quantité d’action nécessaire pour ce changement est la plus petite qu’il soit possible.”* Il faut attendre les travaux du mathématicien Leonhard Euler (1707-1783) pour qu’une véritable formulation mathématique de ce principe soit proposée : *“soit M la masse du corps lancé, pendant qu’il parcourt l’élément ds , soit v sa vitesse due à la hauteur, [...]. Je dis que la ligne décrite par le corps sera d’une forme telle que parmi toutes les lignes ayant mêmes extrémités, l’expression $\int Mvds$ soit un minimum.”* Plus tard, Joseph Louis de Lagrange (1736-1813) approfondit les résultats d’Euler. Contrairement à Maupertuis, il voit le principe de la moindre action comme une simple formulation des lois de la mécanique : *“tel est, [...], le principe auquel je donne ici, quoique improprement, le nom de moindre action, et que je regarde non comme un principe métaphysique, mais comme un résultat simple et général des lois de la Mécanique.”* Pour amener nos motivations et notre problématique, présentons brièvement le PMA en dynamique des solides déformables.

I.1 Cadre de calcul et problématique

I.1.1 Forme variationnelle des équations de la dynamique

Considérons dans un premier temps l’ensemble des 4 variables indépendantes :

$$\mathbf{x} = \{x_1 = t, x_2 = x, x_3 = y, x_4 = z\} \tag{I.1}$$

qui sont respectivement le temps t et les trois variables d’espace $\mathbf{r} = \{x_2 = x, x_3 = y, x_4 = z\}$, variant dans un domaine Ω dont le bord $\partial\Omega$ est supposé C^∞ , et l’ensemble des q variables dépendantes $\mathbf{u} = \{u_i(\mathbf{x})\}$ pour $i = 1\dots q$, supposées de classe C^∞ par rapport aux x_j . On désigne par $\mathbf{u}^{(n)}$ la réunion de toutes les dérivées partielles d’ordre inférieur ou égal à n des u_i . On suppose que le volume généralisé Ω de \mathbb{R}^4 s’écrit comme le produit cartésien d’un volume V de l’espace géométrique par un intervalle $I = [t_0, t_1]$ de temps :

$$\Omega = I \times V \tag{I.2}$$

menant ainsi à l’incrément :

$$d\Omega = dt dV = dx_1 dx_2 dx_3 dx_4 = dt dx dy dz \tag{I.3}$$

Le bord de V sera noté $S = \partial V^1$. Considérons maintenant une fonctionnelle intégrale S ne dépendant que des dérivées premières $\mathbf{u}^{(1)}$ de \mathbf{u} , dont le domaine d’intégration est Ω :

$$S(\mathbf{u}) = \int_{\Omega} L(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(1)}) d\Omega \tag{I.4}$$

Le calcul des extrémales de S consiste à annuler la variation δS induite par les variations $\delta \mathbf{u}$ des variables dépendantes. Les développements mathématiques nécessaires sont données en annexe B. Le théorème (B.4.1) nous permet ainsi d’écrire :

$$\delta S = \int_{\Omega} \left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{u}} - \frac{d}{dx_i} \frac{\partial L}{\partial u_{,i}} \right) \cdot \delta \mathbf{u} d\Omega + \int_{\partial\Omega} \left(\frac{\partial L}{\partial u_{,i}} \cdot \delta \mathbf{u} \right) n_i d(\partial\Omega) \tag{I.5}$$

¹Le texte est tel que la confusion avec une fonctionnelle S n’est pas possible.

dans laquelle nous adoptons la convention de sommation sur l'indice répété i afin de synthétiser la notation, et où le vecteur \mathbf{n} de \mathbb{R}^4 est la normale sortante au domaine Ω . Par suite, la condition de stationnarité $\delta S = 0$ nécessite (i) la nullité de l'intégrande de (I.5) menant ainsi à la formulation des équations générales d'Euler-Lagrange $\mathbf{E}(L)$:

$$\mathbf{E}(L) = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{u}} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \mathbf{u}_{,t}} - \frac{d}{dx} \frac{\partial L}{\partial \mathbf{u}_{,x}} - \frac{d}{dy} \frac{\partial L}{\partial \mathbf{u}_{,y}} - \frac{d}{dz} \frac{\partial L}{\partial \mathbf{u}_{,z}} = 0 \quad (\text{I.6})$$

et (ii) la nullité du terme de bord de (I.5), qui compte tenu de la décomposition du bord de Ω en fonction de V et I :

$$\partial \Omega = \partial(V \times I) = \partial V \times I + V \times \partial I = S \times I + V \times \{t_0, t_1\} \quad (\text{I.7})$$

peut se réécrire sous la forme :

$$\int_{\partial \Omega} \left(\frac{\partial L}{\partial \mathbf{u}_{,i}} \cdot \delta \mathbf{u} \right) \mathbf{n}_i d(\partial \Omega) = \int_{t_0}^{t_1} \left(\int_S \frac{\partial L}{\partial \mathbf{u}_{,i}} \cdot \delta \mathbf{u} \mathbf{n}'_i \right) dS dt + \int_V \left[\frac{\partial L}{\partial \mathbf{u}_{,t}} \cdot \delta \mathbf{u} \right]_{t_0}^{t_1} dV = 0 \quad (\text{I.8})$$

où cette fois le vecteur \mathbf{n}' de \mathbb{R}^3 est la normale sortante à la surface S . La relation (I.8) est automatiquement satisfaite si on recherche les extrémales de S sur un ensemble U^{ad} de fonctions admissibles dont les conditions initiales, finales et limites sont fixées :

$$U^{ad} = \left\{ \mathbf{u} \text{ tels que } \begin{cases} \mathbf{u}(t_0, \mathbf{r}) = \mathbf{u}^0(\mathbf{r}) \text{ pour } t = t_0, \mathbf{r} \in V \\ \mathbf{u}(t_1, \mathbf{r}) = \mathbf{u}^1(\mathbf{r}) \text{ pour } t = t_1, \mathbf{r} \in V \\ \mathbf{u}(t, \mathbf{r}) = \mathbf{u}^S(t, \mathbf{r}) \text{ pour } t \in I \text{ et } \mathbf{r} \in S \end{cases} \right\} \quad (\text{I.9})$$

menant ainsi à la nullité des variations sur le bord de Ω :

$$\begin{aligned} \delta \mathbf{u} &= 0 \text{ en } t_0, \forall \mathbf{r} \in V \\ \delta \mathbf{u} &= 0 \text{ en } t_1, \forall \mathbf{r} \in V \\ \delta \mathbf{u} &= 0 \text{ pour } \mathbf{r} \in S, \forall t \in I \end{aligned} \quad (\text{I.10})$$

La notion d'extrémales présentée ici permet d'écrire les équations de la Dynamique des masses ponctuelles sous forme variationnelle, telle que Lagrange l'a proposée, [Lag-1788]. On parle alors de "Mécanique Analytique" (nous en rappelons brièvement les principaux résultats en annexe C). Intéressons nous ici à la formulation variationnelle des équations de la Dynamique dans un solide. Pour ce faire, introduisons un volume V d'un milieu continu homogène de masse volumique ρ dans lequel on considère comme variable dépendante un champ de déplacement $\mathbf{u}(t, \mathbf{r})$. L'énergie cinétique \mathcal{K} par unité de volume est donnée par :

$$\mathcal{K} = \frac{1}{2} \rho \mathbf{u}_{,t}^2 \quad (\text{I.11})$$

Introduisons maintenant un terme de type énergie potentielle volumique $\mathcal{V}(\mathbf{u})$ que l'on supposera scindé en deux contributions :

– une première contribution \mathcal{V}_1 correspondant à l'énergie volumique stockée par déformation purement élastique :

$$\mathcal{V}_1 = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon} \quad (\text{I.12})$$

où \mathbf{C} est le tenseur d'ordre 4 des constantes d'élasticité et $\boldsymbol{\varepsilon}$ le tenseur des déformations linéarisées défini par :

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{\nabla \mathbf{u} + \nabla^T \mathbf{u}}{2} \quad (\text{I.13})$$

(où l'exposant "T" signifie "transposé").

– une seconde contribution \mathcal{V}_2 correspondant au potentiel des forces conservatives \mathbf{f} s'exerçant à distance sur le volume V :

$$\mathcal{V}_2 = -\mathbf{f} \cdot \mathbf{u} \quad (\text{I.14})$$

Considérons les extrémales de la fonctionnelle J dont le lagrangien est donné par la différence des énergies cinétique et potentielle du système :

$$J(\mathbf{u}) = \int_{t_0}^{t_1} \left(\int_V (\mathcal{K} - \mathcal{V}_1 - \mathcal{V}_2) dV \right) dt = \int_{t_0}^{t_1} \left(\int_V \left[\frac{1}{2} \rho \mathbf{u}_{,t}^2 - \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{f} \cdot \mathbf{u} \right] dV \right) dt \quad (\text{I.15})$$

En introduisant un jeu de variations $\delta \mathbf{u}$, la réécriture de l'équation (I.5) compte tenu de (I.8) mène à l'expression de δJ :

$$\begin{aligned} \delta J &= \int_{t_0}^{t_1} \left(\int_V \left[-\rho \mathbf{u}_{,tt} + \nabla \cdot (\mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}) + \mathbf{f} \right] \delta \mathbf{u} dV \right) dt \\ &+ \int_{t_0}^{t_1} \left(\int_S ((\mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}) \cdot \boldsymbol{n}) \cdot \boldsymbol{n}' dS \right) dt + \int_V \left[\rho \mathbf{u}_{,t} \cdot \delta \mathbf{u} \right]_{t_0}^{t_1} dV \end{aligned} \quad (\text{I.16})$$

Si on admet des conditions limites données par l'ensemble admissible (I.9), les variations $\delta \mathbf{u}$ sont nulles sur le bord de $V \times [t_0, t_1]$ conformément aux équations (I.10), ce qui implique que les deux derniers termes de (I.16) sont nuls. La condition de stationnarité $\delta J = 0$ se réduit ainsi à l'annulation du premier terme de la relation (I.16), qui compte tenu du caractère arbitraire des variations $\delta \mathbf{u}$, mène à :

$$\rho \mathbf{u}_{,tt} = \nabla \cdot (\mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}) + \mathbf{f} \quad (\text{I.17})$$

Cette dernière égalité coïncide avec la relation fondamentale de la dynamique au sein du volume V . La formulation variationnelle exposée ici prend une importance primordiale dans la mise en œuvre de méthodes numériques. Pour les éléments finis, on discrétise par exemple le volume V en plusieurs sous volumes v^e appelés éléments tels que $\bigcup v^e = V$. L'écriture d'un déplacement approché $\mathbf{u}^e(t, \mathbf{r})$ sur chacun de ces éléments permet d'aboutir à un système numérique via la condition $\delta J = 0$ (voir l'annexe D).

I.1.2 Théorème d'Emmy Noether (1882-1935)

Outre son efficacité sur le plan numérique, l'écriture d'un jeu d'EDP $\mathbf{P} = 0$ (où \mathbf{P} est un vecteur d'expressions dépendant de $\mathbf{u}^{(n)}$) sous forme variationnelle illustre toute sa richesse par le calcul de symétries continues, qui permet d'aboutir à des lois de conservations. Justifions cette affirmation en énonçant le :

THÉORÈME I.1.1 : *(dit de Noether) Si v est un groupe de symétrie² pour la*

²La notion de groupe de transformation est rappelée dans l'annexe B. Une présentation plus complète de l'analyse de Noether (incluant la notion de groupe de symétrie) est également proposée en annexe E.

fonctionnelle $S(u) = \int_{\Omega} L(x, u^{(1)}) d\Omega$, alors la relation de conservation :

$$\text{Div} P = D_1 P_1 + \dots D_4 P_4 \quad (\text{I.18})$$

où le quadruplet $P = \{P_i, i = 1..4\}$ est donné par :

$$P_i = \sum_{k=1}^q \sum_{j=1}^4 \xi_j u_{k,j} \frac{\partial L}{\partial u_{k,i}} - \sum_{j=1}^q \phi_j \frac{\partial L}{\partial u_{j,i}} - \xi_i L \quad (\text{I.19})$$

est vérifiée dans tout le volume généralisé Ω . ■

En l'absence de forces extérieures ($f = 0$), l'application de ce théorème à la fonctionnelle (I.15) pour le générateur du groupe de translation sur l'échelle des temps :

$$v = \frac{\partial}{\partial t} \quad (\text{I.20})$$

permet de mettre en évidence l'écriture en puissance de la relation (I.17), soit :

$$u_{,i} \cdot (\rho u_{,tt} - \nabla \cdot \sigma) = 0 \quad (\text{I.21})$$

où σ est le tenseur des contraintes. Cette dernière équation correspond à la conservation de l'énergie dans le volume V . Le détail des calculs ainsi que d'autres exemples est donné en annexe F.

I.1.3 Formulation du problème

Nous voyons que l'intérêt d'une forme variationnelle est a priori double : à la mise en oeuvre d'approches numériques s'ajoute la richesse du calcul des symétries qui permet entre autre d'obtenir certaines lois de conservation du système. Nous verrons que ces groupes de symétrie peuvent en outre devenir un outil bien adapté à la description (ou l'obtention) de courbes maîtresses.

Un des objectifs de notre travail, motivé par ces remarques, est de trouver une forme variationnelle pour les équations constitutives d'une thermodynamique des processus irréversibles baptisée DNLR (Distribution of Non Linear Relaxations), et développée au sein du groupe de Mécanique du solide par Cunat. Cet objectif se heurte d'emblée à une polémique relativement ancienne, qui énonce l'impossibilité apparente de concilier irréversibilité et principe de moindre action. Cette opposition s'inscrit dans un profond bouleversement philosophique qui oppose déterminisme et irréversibilité, et que nous développons sommairement en annexe G.

Pour comprendre les raisons plus "pratiques" de cette opposition, il nous est apparu nécessaire d'examiner de plus près les conditions mathématiques qui assurent l'existence d'une fonction lagrangienne L pour un système d'EDP donné sous la forme :

$$P = \{P_i(x, u^{(n)}), i = 1..n\} = 0 \quad (\text{I.22})$$

en ce sens que :

$$\delta \int_{\Omega} L dx = 0 \Rightarrow P = 0 \quad (\text{I.23})$$

Nous allons voir que cette existence est assurée par l'auto-adjonction³ de sa dérivée de Fréchet $D_{\mathbf{P}}$:

$$D_{\mathbf{P}} = D_{\mathbf{P}}^* \quad (\text{I.24})$$

où $D_{\mathbf{P}}^*$ est l'adjointe de $D_{\mathbf{P}}$ ⁴. On observe justement, mais sans pouvoir le démontrer formellement, que la plupart des opérateurs associés à l'évolution irréversible d'un système physique n'est pas auto-adjointe⁵. Pour illustrer ce propos, citons les quelques exemples suivants empruntés à divers domaines de la Physique :

– Opérateur de type "oscillateur amorti" :

$$D_{\mathbf{P}} = a_1 \frac{d^2}{dt^2} + a_2 \frac{d}{dt} + a_3 \neq D_{\mathbf{P}}^* = a_1 \frac{d^2}{dt^2} - a_2 \frac{d}{dt} + a_3 \quad (\text{I.25})$$

Le coefficient a_1 peut ainsi être homogène à une masse (ou une inductance), a_2 à une viscosité (respectivement une résistance électrique), et a_3 à une raideur (respectivement une capacité).

– Opérateur de type "diffusion" :

$$D_{\mathbf{P}} = \frac{\partial}{\partial t} + b_1 \Delta \neq D_{\mathbf{P}}^* = -\frac{\partial}{\partial t} + b_1 \Delta \quad (\text{I.26})$$

où Δ est l'opérateur laplacien et b_1 un coefficient de diffusivité thermique par exemple.

– Opérateur de type "propagation amortie" :

$$D_{\mathbf{P}} = \frac{\partial^2}{\partial t^2} + c_1 \frac{\partial}{\partial t} + c_2^2 \Delta \neq D_{\mathbf{P}}^* = \frac{\partial^2}{\partial t^2} - c_1 \frac{\partial}{\partial t} + c_2^2 \Delta \quad (\text{I.27})$$

qui peut régir un problème de thermique (équation de Cattaneo-Vernotte) ou d'acoustique (problème de la corde vibrante amortie).

Pour un système physique décrit par un jeu d'équations non auto-adjoint, nous allons voir que les approches abordées dans la littérature s'appuient sur une formulation lagrangienne dite équivalente, qui a pour but de rendre "artificiellement" le système considéré auto-adjoint. A priori, tout le problème consiste à intégrer les manipulations apportées dans un cadre physique cohérent, qui ne doit en outre pas changer la nature du système d'équations. Dans la majeure partie des cas, on se rend compte que la notion d'auto-adjonction mène à des résultats dont le sens physique est parfois difficile à comprendre.

Pour parvenir à une fonction lagrangienne de l'approche DNLR, il nous a donc semblé nécessaire (dans un premier temps) d'éclairer l'interprétation physique de l'auto-adjonction. Pour ce faire, nous allons d'abord examiner les différentes techniques mathématiques qui permettent (i) de caractériser l'existence d'un lagrangien pour un système d'EDP donné et (ii) de le calculer s'il existe. En d'autre termes, étant donné un système d'EDP :

$$\mathbf{P} = \{P_i(x, u^{(n)}), i = 1..n\} = 0 \quad (\text{I.28})$$

³Traduction explicite de "selfadjointness", qui apparemment n'a pas d'équivalent français. Nous choisirons désormais ce terme tout au long de ce rapport, et nous lui associerons l'adjectif bien connu "auto-adjoint".

⁴Nous reviendrons plus loin et en détail sur la notion d'opérateur adjoint.

⁵Il n'existe pas, en tout cas, de contre exemple "simple" permettant de contredire cette affirmation.

existe-t-il une intégrale fonctionnelle S telle que ses extrémales soient les solutions de P ?

I.2 Théorème d'existence et construction d'un lagrangien

I.2.1 Ensemble des fonctions à support compact

On se limite, dans un premier temps, à un cas particulier de problème inverse consistant à trouver une fonctionnelle intégrale S dont la condition de stationnarité $\delta S = 0$ conduit à un jeu d'EDP donné sur Ω . On suppose en effet que les conditions limites sur $\partial\Omega$ nécessaires à la résolution de P sont données en dehors de tout principe variationnel. Jusqu'à présent, nous avons supposé la valeur de u connue sur $\partial\Omega$ comme le montre par exemple l'ensemble admissible (I.9). La structure de cet ensemble implique justement la nullité des variations δu sur $\partial\Omega$, et par suite, la nullité du terme de bord (I.8). Nous allons ainsi voir qu'un cadre naturel pour résoudre le problème inverse posé ici est l'étude des opérateurs adjoints sur un ensemble de fonctions à support⁶ compact⁷ dans Ω ([Olv-1989]). Dans ce cas, les variables dépendantes "test" u sont définies par :

$$u(x) = H(x)v(x) \tag{I.29}$$

où $v(x)$ est un élément quelconque de $C^\infty[\Omega]$ et où $H(x)$ est la fonction caractéristique de Ω donnée par :

$$H(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in \{\Omega - \partial\Omega\} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \tag{I.30}$$

Les fonctions $u(x)$ construites par (I.29) vérifient donc :

$$u^{(n)}(\partial\Omega) = 0 \text{ pour tout ordre de dérivation } n \geq 0 \tag{I.31}$$

La figure (I.1) montre schématiquement un exemple de fonctions $u = \{u_i(x), i = 1..q\}$ à support compact dans Ω .

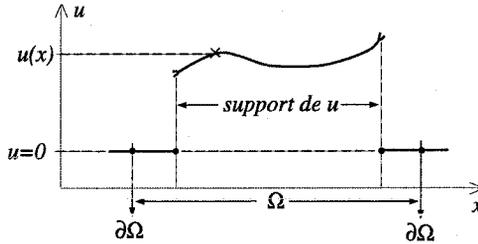


Fig. I.1: Représentation schématique d'un vecteur de fonctions $u(x)$ à support compact dans Ω . Le symbole "•" signifie que la fonction est définie au point alors que le symbole "◁" indique que la valeur au point n'existe pas.

L'intérêt de l'ensemble fonctionnel retenu ici réside dans la nullité de tous les termes de bord linéaires en u qui apparaîtront dans nos calculs.

⁶Rappelons que le support d'une fonction est le plus petit ensemble fermé en dehors duquel cette fonction est nulle.

⁷Rappelons également qu'un compact est un fermé borné.

Nous allons voir que la condition nécessaire et suffisante d'existence d'un lagrangien pour un système d'EDP est donnée par l'auto-adjonction (ou "caractère auto-adjoint") de sa dérivée de Fréchet. Il nous est donc nécessaire dans un premier temps, de (i) préciser la notion d'opérateur différentiel auto-adjoint au sens d'un produit scalaire intégral particulier, et (ii) de définir la dérivée de Fréchet d'un tel opérateur et d'en donner une méthode de calcul pratique.

1.2.2 Produit scalaire sur \mathbf{A}^q et opérateurs auto-adjoints

Soit \mathbf{A} l'ensemble des fonctions dépendant de \mathbf{x} et des dérivées de \mathbf{u} jusqu'à un ordre n donné : $\mathbf{A} = \{X = X(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(n)})\}$, et soit \mathbf{A}^s l'ensemble des vecteurs de taille s et à composantes contenues dans \mathbf{A} . Soit $\mathbf{P} = \{P_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(n)})\}$ et $\mathbf{Q} = \{Q_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(n)})\}$ deux éléments de \mathbf{A}^q . On définit le produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle$ sur Ω par :

$$\langle \mathbf{P}, \mathbf{Q} \rangle = \int_{\Omega} \mathbf{P} \cdot \mathbf{Q} dx = \int_{\Omega} \sum_{i=1}^q P_i Q_i dx \quad (\text{I.32})$$

Ce produit scalaire munit l'espace \mathbf{A}^q d'une structure préhilbertienne. Avant de poursuivre, il convient de préciser quelques notations. On appellera multientier (noté J) de dimension k , la donnée de k entiers inférieurs ou égaux à 4 :

$$J = (j_1, \dots, j_k) \quad 1 \leq j_k \leq 4 \quad (\text{I.33})$$

L'ensemble vide, noté \emptyset , est un multientier à 0 élément. Nous noterons $u_{i,J}$ la dérivée partielle de u_i par rapport au multientier J , définie par :

$$u_{i,J} = \frac{\partial^k u_i}{\partial x_{j_1} \dots \partial x_{j_k}} \quad (\text{I.34})$$

La dérivée totale par rapport au multientier J , notée D_J , est définie comme la composition des dérivées totales⁸ $\frac{d}{dx_{j_k}}$ de tous les éléments de J :

$$D_J = D_{j_1} \circ \dots \circ D_{j_k} = \frac{d}{dx_{j_1}} \circ \dots \circ \frac{d}{dx_{j_k}} \quad (\text{I.35})$$

On pose également :

$$(-D)_J = (-1)^k \frac{d}{dx_{j_1}} \circ \dots \circ \frac{d}{dx_{j_k}} \quad (\text{I.36})$$

Par convention, la dérivée d'une fonction par rapport au multientier vide est égale à elle-même soit : $D_{\emptyset} u = u$, $\forall u \in C^\infty[\Omega]$. Dans le but d'introduire la notion de système adjoint, considérons un opérateur différentiel écrit sous la forme :

$$D = \sum_J A_J D_J \quad (\text{I.37})$$

où les A_J sont des éléments de \mathbf{A} , et où la somme sur J suggère que l'on somme sur tous les multientiers. Voyons ceci sur un exemple :

⁸On désignera la dérivée totale par rapport à x_j à l'aide de la notation D_{x_j} ou $\frac{d}{dx_j}$.

EXEMPLE I.2.1 : Si $n = 2$, et en se limitant à une fonction $u_1(t, x)$ des deux variables $x_1 = t$ et $x_2 = x$, alors on peut former des multientiers :

- d'ordre 0 : $J = \emptyset$ associé à $D_J = Id.$
- d'ordre 1 : $J = (1)$ associé à $D_J = \frac{d}{dx_1} = \frac{d}{dt}$, $J = (2)$ associé à $D_J = \frac{d}{dx_2} = \frac{d}{dx}$.
- d'ordre 2 : $J = (1, 1)$ associé à $D_J = \frac{d^2}{dt^2}$, $J = (1, 2)$ associé à $D_J = \frac{d^2}{dt dx}$, $J = (2, 1)$ associé à $D_J = \frac{d^2}{dx dt}$, $J = (2, 2)$ associé à $D_J = \frac{d^2}{dx^2}$. ■

L'opérateur différentiel :

$$D = \sum_J A_J D_J = 1 + u_{,x} D_t + u_{,t}^2 D_x + D_{,tt} + 2D_{,tx} = 1 + u_{,x} \frac{d}{dt} + u_{,t}^2 \frac{d}{dx} + \frac{d^2}{dt^2} + 2 \frac{d^2}{dt dx} \quad (I.38)$$

est un exemple d'opérateur d'ordre 2 pour lequel :

$$A_\emptyset = 1 ; A_{(1)} = u_{,x} ; A_{(2)} = u_{,t}^2 ; A_{(1,1)} = 1 ; A_{(1,2)} = 2 ; A_J = 0 \text{ sinon} \quad (I.39)$$

L'opérateur adjoint à D est alors introduit à l'aide de la :

DÉFINITION I.2.1 : *L'opérateur adjoint de l'opérateur différentiel $D = \sum_J A_J D_J$ au sens du produit scalaire (I.32) est l'opérateur différentiel D^* vérifiant la condition :*

$$\langle P, DQ \rangle = \langle Q, D^*P \rangle \quad (I.40)$$

pour tout couple de fonctions P et Q appartenant à \mathbf{A} et s'annulant en $u = 0$, et pour tout $u = f(x)$ à support compact dans Ω . ■

Nous pouvons illustrer cette définition en considérant l'exemple :

EXEMPLE I.2.2 : Soit $u(t)$ et $v(t)$ deux fonctions à support compact dans $\Omega =]0, 1[$, donc vérifiant $u(0) = v(0) = u(1) = v(1) = 0$. Soit l'opérateur différentiel : $D = \frac{d}{dt}$. Alors :

$$\langle u, Dv \rangle = \int_0^1 u \frac{dv}{dt} dt = \int_0^1 -\frac{du}{dt} v dt + [uv]_0^1 = \int_0^1 -\frac{du}{dt} v dt = \langle v, D^*u \rangle \quad (I.41)$$

L'adjoint de $D = \frac{d}{dt}$ est donc $D^* = -\frac{d}{dt}$. ■

Nous voyons sur l'exemple (I.2.2) que l'expression explicite de D^* s'obtient en intégrant $\langle P, DQ \rangle$ par parties pour deux éléments P et Q de \mathbf{A} . Rappelons que les termes de bord provenant de cette intégration sont automatiquement annulés par le fait que le support des u_i est inclus dans Ω . Il est possible, sans préciser la forme de l'opérateur D , d'opérer formellement cette intégration par partie, si bien qu'une généralisation immédiate de l'exemple (I.2.2) est donnée par le :

THÉORÈME I.2.1 : *L'opérateur adjoint de l'opérateur différentiel $D = \sum_J A_J D_J$ au sens du produit scalaire (I.32) est l'opérateur différentiel D^* donné par :*

$$D^* = \sum_J (-D)_J A_J \quad (I.42)$$

L'exemple (I.2.2) et la relation (I.36) permet d'illustrer ce théorème. Nous sommes désormais en mesure de définir la notion d'opérateur auto-adjoint, qui sera cruciale pour caractériser l'existence d'un lagrangien. Concluons ainsi ce paragraphe en introduisant la :

DÉFINITION I.2.2 : *Un opérateur D est qualifié d'auto-adjoint au sens du produit scalaire (I.32) s'il est égal à son adjoint :*

$$D = D^* \tag{I.43}$$

Comme nous l'avons dit dans l'introduction de cette section, il est maintenant nécessaire de présenter la notion de dérivée de Fréchet.

I.2.3 Dérivée de Fréchet d'un élément de A^q

La dérivée de Fréchet mesure l'accroissement d'une expression dépendant du vecteur u (et éventuellement des dérivées de u) lorsque u varie sous l'action d'un groupe. Ainsi, pour tout élément P de A^r , on énonce la :

DÉFINITION I.2.3 : *La dérivée de Fréchet de P est l'opérateur différentiel noté D_P , tel que pour tout $Q \in A^q$:*

$$D_P(Q) = \left. \frac{d}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} P(u + \varepsilon Q(u)) \tag{I.44}$$

Nous voyons que la méthode de calcul de D_P s'appuie sur un élément "test" Q , comme le montre l'exemple :

EXEMPLE I.2.3 : Soit $P = u + u_x^2 \in A^1$. Alors nous avons, pour $Q \in A^1$:

$$P(u + \varepsilon Q) = u + \varepsilon Q + (u_x + \varepsilon D_x Q)^2 \tag{I.45}$$

$$= u + \varepsilon Q + u_x^2 + 2\varepsilon u_x D_x Q + \varepsilon^2 (D_x Q)^2 \tag{I.46}$$

D'où :

$$D_P(Q) = \left. \frac{d}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} (u + \varepsilon Q + u_x^2 + 2\varepsilon u_x D_x Q + \varepsilon^2 (D_x Q)^2) = Q + 2u_x D_x Q \tag{I.47}$$

Et, par identification :

$$D_P = 1 + 2u_x D_x \tag{I.48}$$

Bien entendu, le terme 1 doit être vu comme un opérateur de multiplication, pour lequel on aura $1(Q) = Q$. ■

Il est possible, par calcul formel de D_P sur un élément Q de A^q quelconque, d'aboutir à une formulation qui ne nécessite pas de fonction test. Nous pouvons ainsi introduire une formule très pratique de calcul d'une dérivée de Fréchet (que nous utiliserons désormais) via le :

THÉORÈME I.2.2 : *La dérivée de Fréchet du vecteur de fonctions $P_i(x, u^{(n)})$ est une matrice d'opérateurs différentiels donnés par :*

$$(D_P)_{ij} = \sum_J \frac{\partial P_i}{\partial u_{j,J}} D_J \tag{I.49}$$

pour $i = 1..r$ et $j = 1..q$ ■

Le gain en terme de calculs par rapport à la définition (I.2.3) peut être illustré en reprenant le calcul de l'exemple (I.2.3) :

EXEMPLE I.2.4 : Soit $P = u + u_x^2 \in \mathbf{A}^1$. Alors :

$$D_P = \frac{\partial P}{\partial u} + \frac{\partial P}{\partial u_x} D_x = 1 + 2u_x D_x \quad (I.50)$$

Ajoutons maintenant qu'une dérivée de Fréchet est un opérateur différentiel comme un autre : son adjoint s'obtient donc par l'intégration par partie du produit scalaire $\langle \mathbf{R}, D_P \mathbf{Q} \rangle$, où \mathbf{R} et \mathbf{Q} sont deux éléments quelconques de \mathbf{A}^q . En appliquant la relation (I.42) du théorème (I.2.1) à l'opérateur D_P , on aboutit à une caractérisation analogue au théorème (I.2.2) pour l'adjoint de D_P . Ainsi, écrivons le :

THÉORÈME I.2.3 : *L'adjoint de la dérivée de Fréchet du vecteur de fonctions $P_i(x, u^{(n)})$ est une matrice d'opérateurs différentiels donnée par :*

$$(D_P^*)_{ij} = \sum_J (-D)_J \frac{\partial P_j}{\partial u_{i,J}} \quad (I.51)$$

pour $i = 1..q$ et $j = 1..r$ ■

Comme précédemment, la puissance de la relation (I.51) peut être soulignée en considérant l'exemple :

EXEMPLE I.2.5 : Soit $P = u + u_x^2 \in \mathbf{A}^1$. Alors :

$$D_P^* = \frac{\partial P}{\partial u} - D_x \frac{\partial P}{\partial u_x} = 1 - D_x(2u_x) = 1 - 2u_{,xx} - 2u_{,x} D_x \quad (I.52)$$

Notons là encore qu'il faut interpréter la dérivée totale $D_x(2u_x)$ comme un opérateur, si bien que $D_x(2u_x) = 2u_{,xx} + 2u_{,x} D_x$ et non $2u_{,xx}$. ■

1.2.4 Théorème d'existence

Les outils mathématiques nécessaires à notre étude étant présentés, nous sommes en mesure de nous intéresser au théorème d'existence d'un lagrangien. Soit donc :

$$P(\mathbf{u}) = \{P_i(x, u^{(n)}), i = 1..q\} = 0 \quad (I.53)$$

un système d'EDP⁹ portant sur les variables dépendantes \mathbf{u} . Les conditions nécessaires pour que P dérive d'un certain problème variationnel ont initialement été examinées par Helmholtz dans le cas des équations différentielles ordinaires (EDO) d'ordre 2, et ont été ensuite complétées par des conditions suffisantes (voir le résumé de Engels [Eng-1975] et les références incluses). Peu après, en 1977, une généralisation de ces conditions nécessaires et suffisantes appliquées aux systèmes d'EDP quasilineaires est proposée par Santilli ([San1-1977], [San2-1977], [San3-1977]). Les progrès effectués depuis en géométrie différentielle, notamment sur l'étude de formes fonctionnelles, ont permis une écriture très synthétique de ces conditions d'existence (voir par exemple Olver [Olv-1989], Anderson et Thompson [And-1992]). Nous retiendrons cette dernière écriture, qui s'appuie justement sur les outils présentés dans le paragraphe précédent. Entrons ainsi dans le vif du sujet en énonçant le :

⁹Nous supposons que ce système possède autant d'inconnues que d'équations.

THÉORÈME I.2.4 : *Le système d'EDP $P(u) = 0$ est l'extrémum d'une certaine intégrale fonctionnelle $S = \int_{\Omega} L d\Omega$, soit $P_i = E_i(L)$, si et seulement si sa dérivée de Fréchet est auto-adjointe :*

$$(D_P)_{ij} = (D_P^*)_{ij} \quad i, j = 1..q \quad (I.54)$$

Dans ce cas, un lagrangien possible est donné par :

$$L = \int_0^1 \mathbf{u} \cdot P(\lambda \mathbf{u}) d\lambda = \int_0^1 \sum_{i=1}^q u_i P_i(\lambda u) d\lambda \quad (I.55)$$

Il est intéressant d'illustrer immédiatement la puissance de ce théorème en considérant deux exemples simples.

❶ **Equation de propagation des ondes :** Soit $u(t, x)$ l'amplitude d'une onde vérifiant une équation de propagation unidirectionnelle de célérité c :

$$P(t, x, u^{(2)}) = P(t, x, u, u_t, u_x, u_{tt}, u_{xx}, u_{tx}) = u_{tt} - c^2 u_{xx} = 0 \quad (I.56)$$

La dérivée de Fréchet de P est donnée par :

$$\begin{aligned} D_P &= \frac{\partial P}{\partial u} + \frac{\partial P}{\partial u_t} D_t + \frac{\partial P}{\partial u_x} D_x + \frac{\partial P}{\partial u_{tt}} D_{tt} + \frac{\partial P}{\partial u_{xx}} D_{xx} + \frac{\partial P}{\partial u_{tx}} D_{tx} \\ &= D_{tt} - c^2 D_{xx} \end{aligned} \quad (I.57)$$

Son adjointe s'écrit quant à elle :

$$\begin{aligned} D_P^* &= \frac{\partial P}{\partial u} - D_t \frac{\partial P}{\partial u_t} - D_x \frac{\partial P}{\partial u_x} + D_{tt} \frac{\partial P}{\partial u_{tt}} + D_{xx} \frac{\partial P}{\partial u_{xx}} + D_{tx} \frac{\partial P}{\partial u_{tx}} \\ &= D_{tt} - c^2 D_{xx} = D_P \end{aligned} \quad (I.58)$$

et nous pouvons conclure que l'équation (I.56) est auto-adjointe¹⁰. Par suite, l'application du théorème (I.2.4) mène au lagrangien :

$$L = \int_0^1 u \lambda (u_{tt} - c^2 u_{xx}) d\lambda = \frac{1}{2} u (u_{tt} - c^2 u_{xx}) \quad (I.59)$$

❷ **Oscillateur couplé :** Nous considérons ici les positions $q_1(t)$ et $q_2(t)$ de deux masses m_1 et m_2 vérifiant le système couplé :

$$\begin{cases} P_1 = m_1 q_{1,tt} + k_1 q_1 - k_2 (q_2 - q_1) = 0 \\ P_2 = m_2 q_{2,tt} + k_2 (q_2 - q_1) = 0 \end{cases} \quad (I.60)$$

¹⁰Par abus de langage, on dira qu'un système d'EDP est auto-adjoint si sa dérivée de Fréchet l'est.

où k_1 et k_2 sont des constantes de rappel élastique. La dérivée de Fréchet de ce système et son adjointe sont données par :

$$\begin{aligned}
 D_{\mathbf{P}} &= \begin{pmatrix} \frac{\partial P_1}{\partial q_1} + \frac{\partial P_1}{\partial q_{1,t}} D_t + \frac{\partial P_1}{\partial q_{1,tt}} D_{tt} & \frac{\partial P_1}{\partial q_2} + \frac{\partial P_1}{\partial q_{2,t}} D_t + \frac{\partial P_1}{\partial q_{2,tt}} D_{tt} \\ \frac{\partial P_2}{\partial q_1} + \frac{\partial P_2}{\partial q_{1,t}} D_t + \frac{\partial P_2}{\partial q_{1,tt}} D_{tt} & \frac{\partial P_2}{\partial q_2} + \frac{\partial P_2}{\partial q_{2,t}} D_t + \frac{\partial P_2}{\partial q_{2,tt}} D_{tt} \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} m_1 D_{tt} + k_1 + k_2 & -k_2 \\ -k_2 & m_2 D_{tt} + k_2 \end{pmatrix} \quad (I.61)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 D_{\mathbf{P}}^* &= \begin{pmatrix} \frac{\partial P_1}{\partial q_1} - D_t \frac{\partial P_1}{\partial q_{1,t}} + D_{tt} \frac{\partial P_1}{\partial q_{1,tt}} & \frac{\partial P_2}{\partial q_1} - D_t \frac{\partial P_2}{\partial q_{1,t}} + D_{tt} \frac{\partial P_2}{\partial q_{1,tt}} \\ \frac{\partial P_1}{\partial q_2} - D_t \frac{\partial P_1}{\partial q_{2,t}} + D_{tt} \frac{\partial P_1}{\partial q_{2,tt}} & \frac{\partial P_2}{\partial q_2} - D_t \frac{\partial P_2}{\partial q_{2,t}} + D_{tt} \frac{\partial P_2}{\partial q_{2,tt}} \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} m_1 D_{tt} + k_1 + k_2 & -k_2 \\ -k_2 & m_2 D_{tt} + k_2 \end{pmatrix} = D_{\mathbf{P}} \quad (I.62)
 \end{aligned}$$

Là encore, la dérivée de Fréchet du système est auto-adjointe et assure donc l'existence d'un lagrangien, donné par :

$$\begin{aligned}
 L &= \int_0^1 q_1 \lambda (m_1 q_{1,tt} + k_1 q_1 - k_2 (q_2 - q_1)) + q_2 \lambda (m_2 q_{2,tt} + k_2 (q_2 - q_1)) d\lambda \\
 &= \frac{1}{2} (q_1 (m_1 q_{1,tt} + k_1 q_1 - k_2 (q_2 - q_1)) + q_2 (m_2 q_{2,tt} + k_2 (q_2 - q_1))) \quad (I.63)
 \end{aligned}$$

Sur le plan mathématique, le théorème (I.2.4) fournit un outil efficace pour parvenir à une formulation variationnelle d'un système d'EDP auto-adjoint $\mathbf{P} = 0$. Nous verrons en revanche dans le deuxième chapitre que le sens physique de ce caractère auto-adjoint n'est pas immédiat à comprendre. Ajoutons pour conclure ce paragraphe qu'un lagrangien pour un système n'est jamais unique. Nous allons voir qu'il est possible de le "modifier" sans changer les équations d'Euler-Lagrange associées. Cette propriété nous sera particulièrement utile pour la suite de notre travail.

1.2.5 Lagrangiens équivalents

Certaines formes de lagrangiens assurent la nullité des équations d'Euler-Lagrange qui en découlent, comme le montre le :

THÉORÈME I.2.5 : *Soit U un élément de \mathbf{A} . Alors, les équations de Lagrange sont nulles, $E_i(U) = 0 \quad \forall i = 1..q$, si et seulement si U est la divergence généralisée d'un certain vecteur $\mathbf{P} = \{P_i\}$ de \mathbf{A}^4 :*

$$U = \text{Div} \mathbf{P} = \sum_{i=1}^4 \frac{dP_i}{dx_i} = \frac{dP_t}{dt} + \frac{dP_x}{dx} + \frac{dP_y}{dy} + \frac{dP_z}{dz} \quad (I.64)$$

Une conséquence directe de ce théorème est la possibilité, étant donné le lagrangien d'un système d'EDP connu, de calculer une infinité d'autres lagrangiens pour ce système. Introduisons donc le :

THÉORÈME I.2.6 : *Soit $Q \in A^q$. Si L est un lagrangien pour le système d'équation $Q_i(x, u^{(n)}) = 0$, alors il en est de même pour $\alpha L + Div P$, où α désigne une constante de \mathbb{R} non nulle, et où P est un élément quelconque de A^4 .* ■

L'utilité principale de ce théorème est qu'il permet en général de remplacer les dérivées d'ordre 2 apparaissant dans un lagrangien pour y faire apparaître l'expression des énergies intervenant dans l'évolution du système. Pour illustrer ce propos, considérons l'exemple de la corde vibrante (proposé par Weinstock, [Wei-1974]) de longueur ℓ_0 , de masse linéique λ , et soumise à une tension T . L'évolution du déplacement transversal $u(t, x)$, pour $x \in [0, \ell_0]$ et $t \in [0; \tau]$, est donnée par l'équation de propagation¹¹ :

$$\lambda u_{,tt} - T u_{,xx} = 0 \tag{I.65}$$

L'application du théorème (I.2.4) montre que (I.65) est auto-adjointe et conduit ainsi à l'écriture d'un lagrangien analogue à (I.59) :

$$L = \frac{1}{2} u (\lambda u_{,tt} - T u_{,xx}) \tag{I.66}$$

sans lien apparent avec des grandeurs physiques. Ce lagrangien peut se réécrire :

$$L = -\frac{1}{2} \lambda u_{,t}^2 + \frac{1}{2} T u_{,x}^2 + \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} \lambda u u_{,t} \right) - \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{2} T u u_{,x} \right) \tag{I.67}$$

Conformément au théorème (I.2.6), un lagrangien équivalent peut être déduit de (I.67), soit :

$$L = \frac{1}{2} \lambda u_{,t}^2 - \frac{1}{2} T u_{,x}^2 \tag{I.68}$$

et il définit l'intégrale fonctionnelle :

$$S = \int_0^\tau \left(\int_0^{\ell_0} \frac{1}{2} \lambda u_{,t}^2 - \frac{1}{2} T u_{,x}^2 dx \right) dt = \int_0^\tau (\mathcal{K} - \mathcal{V}) dt \tag{I.69}$$

dans laquelle on fait apparaître l'énergie cinétique \mathcal{K} de la corde :

$$\mathcal{K} = \int_0^{\ell_0} \frac{1}{2} \lambda u_{,t}^2 dx \tag{I.70}$$

tandis que le terme :

$$\mathcal{V} = \int_0^{\ell_0} \frac{1}{2} T u_{,x}^2 dx \tag{I.71}$$

est l'expression linéarisée¹² de la quantité :

$$\mathcal{V} = T \left(\int_0^{\ell_0} \sqrt{1 + u_{,x}^2} dx - \ell_0 \right) = T(\ell - \ell_0) \tag{I.72}$$

¹¹Cette équation correspond à l'équation de propagation (I.56) avec $c^2 = T/\lambda$

¹²Sous l'hypothèse $u_{,x} \ll 1$.

(où ℓ est la longueur à l'instant t de la corde) qui est une première approximation du travail des forces de déformation ([Wei-1974]). La manipulation ainsi effectuée sur le lagrangien permet d'exprimer l'action S comme l'intégrale de la différence entre énergies cinétique et potentielle du système. Elle permet ainsi de retomber sur une forme d'action "usuelle".

Nous avons ainsi exposé dans cette section les conditions nécessaires et suffisantes d'existence d'un lagrangien, la méthode pour le construire et en déduire des équivalents. L'objet de la section suivante est de généraliser les approches variationnelles présentées jusqu'ici.

I.3 Généralisation de l'approche lagrangienne

La considération de problèmes inverses plus "généraux" est possible, en ce sens que la stationnarité de S doit désormais intégrer les conditions limites du problème. Mentionnons les travaux de Sewell ([Sew-1987]), qui donne un cadre général pour la construction de fonctionnelles selles, dont la condition de stationnarité conduit à un système auto-adjoint. Nous allons exposer ici les éléments clés de cette approche qui consiste (i) à généraliser la structure de système auto-adjoint en englobant les conditions limites sur $\partial\Omega$, et (ii) à trouver la formulation d'une fonctionnelle intégrale associée à ce nouveau système. Nous commencerons par décrire la méthode générale, puis nous l'appliquerons au cas de l'élasticité statique.

I.3.1 Présentation du formalisme

Soit E et F deux ensembles fonctionnels¹³ de vecteurs de fonctions définies sur un volume V . Munissons ces espaces des produits scalaires (\cdot) (pour E) et $\langle \cdot \rangle$ (pour F), et soit u, a deux éléments de E , et v, b deux éléments de F . Si \mathcal{D} est un opérateur linéaire de E dans F , on peut définir son adjoint de F dans E par une généralisation de la définition (I.2.1) :

$$(u, \mathcal{D}^*v) = \langle v, \mathcal{D}u \rangle \quad (\text{I.73})$$

La figure I.2 donne une représentation schématique de la dualité entre les opérateurs \mathcal{D} et \mathcal{D}^* .

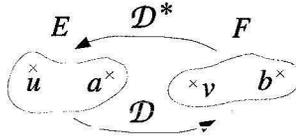


Fig. I.2: Représentation schématique de la dualité entre les opérateurs \mathcal{D} et \mathcal{D}^* .

La notion de système auto-adjoint au sens du produit scalaire (I.32) peut ainsi être réintroduite de manière générale en considérant le système :

$$\begin{cases} \mathcal{D}^*v + a = 0 \\ \mathcal{D}u + b = 0 \end{cases} \quad (\text{I.74})$$

¹³La présentation donnée ici reste très succincte. Tous les objets abstraits seront précisés lors de la mise en oeuvre en élasticité statique.

Par une extension du théorème (I.2.4), l'existence d'une fonctionnelle intégrale \mathcal{L} dont la stationnarité $\delta\mathcal{L} = 0$ conduit au système auto-adjoint (I.74) est assurée. Cette fonctionnelle peut être formulée simplement par la relation ([Sew-1987]) :

$$\mathcal{L} = (u, \mathcal{D}^*v) + (a, u) + \langle b, v \rangle = \langle v, \mathcal{D}u \rangle + (a, u) + \langle b, v \rangle \quad (\text{I.75})$$

et sera qualifiée de fonctionnelle "selle" car elle présente des propriétés de concavité et de convexité vis à vis de ses arguments. Ajoutons enfin que cette formule générale peut être prolongée dans le cas où un jeu de composantes u' de u sont reliées à un ensemble de composantes a' de a par le biais d'un opérateur linéaire $u' = La'$. Dans ce cas, une fonctionnelle selle pour le système complet :

$$\begin{cases} \mathcal{D}^*v + a = 0 \\ \mathcal{D}u + b = 0 \\ u' = La' \end{cases} \quad (\text{I.76})$$

est donnée par :

$$\mathcal{L} = (u, \mathcal{D}^*v) + (a, u) + \langle b, v \rangle + \int_V U(a')dV \quad (\text{I.77})$$

où $U(a')$ est la fonction quadratique :

$$U(a') = \frac{1}{2}a'La' \quad (\text{I.78})$$

Cette formulation a été mise en oeuvre dans le cas de l'électrostatique ([Sew-1987]), mais également dans le cas de l'élasticité statique que nous allons maintenant présenter plus en détail.

I.3.2 Application du formalisme à l'élasticité statique

Intéressons nous ici au volume généralisé Ω qui se réduit au volume géométrique¹⁴ V de \mathbb{R}^3 , et soit comme précédemment $S = \partial V$ la surface qui délimite V . On suppose que le champ de déplacement $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ est connu sur une partition de S notée S_u , soit $\mathbf{u} = \mathbf{u}^d$ et que le vecteur contrainte $\mathbf{T} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{T}^d$, où $\boldsymbol{\sigma}$ est le tenseur des contraintes et \mathbf{n} la normale sortante à V , est connu sur une partition S_f de S telle que $S_u \cup S_f = S$ et $S_u \cap S_f = \emptyset$. En s'appuyant sur l'espace des tenseurs $\mathbf{a} = \{a_{ij}\}$ d'ordre 2 et de dimension (3×3) , on peut introduire l'ensemble E des "vecteurs" dont les composantes sont les valeurs des a_{ij} sur V , S_f , et S_u :

$$E = \{\mathbf{a} = [a_{ij}(V), a_{ij}(S_f), a_{ij}(S_u)]^T\} \quad (\text{I.79})$$

Définissons le produit scalaire (\cdot) sur cet ensemble, en considérant deux éléments \mathbf{a} et \mathbf{b} de E , sous la forme :

$$(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \int_V a_{ij}b_{ji}dV + \int_{S_f} a_{ij}b_{ji}dS_f + \int_{S_u} a_{ij}b_{ji}dS_u \quad (\text{I.80})$$

(on adopte la convention de somme sur les indices répétés). De la même manière, on introduit l'ensemble F des vecteurs de vecteurs c_i de taille (3×1) dont les composantes sont les valeurs des c_i sur V , S_f , et S_u :

$$F = \{\mathbf{c} = [c_i(V), c_i(S_f), c_i(S_u)]^T\} \quad (\text{I.81})$$

¹⁴Le jeu des variables indépendantes se réduit ici aux variables d'espace \mathbf{r} .

De manière analogue à (I.80), F peut être muni du produit scalaire $\langle \rangle$ défini par :

$$\langle \mathbf{c}, \mathbf{d} \rangle = \int_V c_i d_i dV + \int_{S_f} c_i d_i dS_f + \int_{S_u} c_i d_i dS_u \quad (\text{I.82})$$

En reprenant les notations de la section (I.1.1) (où \mathbf{f} est la densité volumique des forces à distance, et $\boldsymbol{\varepsilon}$ le tenseur des déformations linéarisées), introduisons l'énergie élastique de déformation $W(\boldsymbol{\varepsilon})$ donnée par¹⁵ :

$$W(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{1}{2} C_{ijkl} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} \quad (\text{I.83})$$

Considérons maintenant les équations de l'élasticité statique écrites sous forme indicelle :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}) &= \varepsilon_{ij} & \text{dans } V \\ -\sigma_{ij,j} &= f_i & \text{dans } V \\ \sigma_{ij} n_j &= T_i^d & \text{sur } S_f \\ u_i &= u_i^d & \text{sur } S_u \\ \sigma_{ij} &= \frac{\partial W}{\partial \varepsilon_{ij}} & \text{dans } V \end{aligned} \quad (\text{I.84})$$

Ces équations peuvent se réécrire sous la forme synthétique :

$$\begin{cases} \mathcal{D}^* U + a = 0 \\ \mathcal{D} \Sigma + b = 0 \\ \Sigma' = L a' \end{cases} \quad (\text{I.85})$$

où (i) les vecteurs U de F et Σ de E contiennent les valeurs du déplacement \mathbf{u} et des contraintes $\boldsymbol{\sigma}$ sur V et S :

$$U = \begin{bmatrix} u_i(V) \\ u_i(S_f) \\ u_i(S_u) \end{bmatrix} ; \quad \Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{ij}(V) \\ \sigma_{ij}(S_f) \\ \sigma_{ij}(S_u) \end{bmatrix} \quad (\text{I.86})$$

(ii) les opérateurs \mathcal{D}^* et \mathcal{D} sont définis par :

$$\mathcal{D}^* U = \begin{bmatrix} \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}) \\ 0 \\ -\frac{1}{2}(n_i u_j + n_j u_i) \end{bmatrix} ; \quad \mathcal{D} \Sigma = \begin{bmatrix} -\sigma_{ij,j} \\ \sigma_{ij} n_j \\ 0 \end{bmatrix} \quad (\text{I.87})$$

(iii) les termes sources a et b sont donnés par :

$$a = \begin{bmatrix} -\varepsilon_{ij} \\ 0 \\ \frac{1}{2}(n_i u_j^d + n_j u_i^d) \end{bmatrix} ; \quad b = \begin{bmatrix} -f_i \\ -T_i^d \\ 0 \end{bmatrix} \quad (\text{I.88})$$

et (iv) l'opérateur linéaire L , reliant $\Sigma' = \sigma_{ij}$ à $a' = \varepsilon_{ij}$ s'écrit :

$$\Sigma' = \sigma_{ij} = L a' = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (\text{I.89})$$

¹⁵Rappelons que C est le tenseur des constantes d'élasticité.

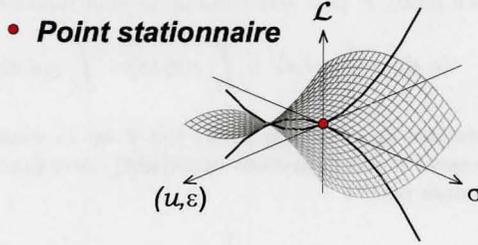


Fig. I.3: Représentation schématique de la fonctionnelle \mathcal{L} . Le point stationnaire correspond à la solution des équations (I.84)

La condition d'auto-adjonction (I.73) se réécrit ici $\langle U, \mathcal{D}\Sigma \rangle = \langle \Sigma, \mathcal{D}^*U \rangle$ et correspond à l'égalité :

$$\int_V -u_i \sigma_{ij,j} dV + \int_{S_f} \sigma_{ij} u_i n_j dS_f = \int_V \sigma_{ij} \frac{1}{2} (u_{i,j} + u_{j,i}) dV - \int_{S_u} \sigma_{ij} \frac{1}{2} (u_i n_j + u_j n_i) dS_u \quad (\text{I.90})$$

obtenue par une intégration par parties sur V . Une fonctionnelle selle pour le système est ainsi donnée par la réécriture de l'égalité (I.77), soit :

$$\mathcal{L} = \langle U, \mathcal{D}\Sigma \rangle + \langle a, \Sigma \rangle + \langle b, U \rangle + \int_V \frac{1}{2} a' La' \quad (\text{I.91})$$

qui compte tenu des relations (I.86-I.89) et (I.83) prend la forme :

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\sigma, \mathbf{u}, \varepsilon) = & \int_V -u_i \sigma_{ij,j} - \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} - f_i u_i + W(\varepsilon_{ij}) dV + \\ & \int_{S_f} (\sigma_{ij} n_j - T_i^d) u_i dS_f + \int_{S_u} \sigma_{ij} \frac{1}{2} (u_i^d n_j + u_j^d n_i) dS_u \end{aligned} \quad (\text{I.92})$$

Une autre forme de cette fonctionnelle selle (provenant également de la réécriture de (I.77)) est donnée par :

$$\mathcal{L} = \langle \Sigma, \mathcal{D}^*U \rangle + \langle a, \Sigma \rangle + \langle b, U \rangle + \int_V \frac{1}{2} a' La' \quad (\text{I.93})$$

menant à une nouvelle fonctionnelle équivalente à (I.92) :

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\sigma, \mathbf{u}, \varepsilon) = & \int_V \sigma_{ij} \frac{1}{2} (u_{i,j} + u_{j,i}) - \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} - f_i u_i + W(\varepsilon_{ij}) dV - \\ & \int_{S_f} T_i^d u_i dS_f + \int_{S_u} \sigma_{ij} \frac{1}{2} (n_j (u_i^d - u_i) + n_i (u_j^d - u_j)) dS_u \end{aligned} \quad (\text{I.94})$$

La stationnarité de cette fonctionnelle obtenue par l'annulation de $\delta\mathcal{L}$ sous l'action de variations $\delta\sigma$, $\delta\mathbf{u}$, et $\delta\varepsilon$, conduit au jeu d'équations (I.84). La figure (I.3) donne une représentation schématisée de \mathcal{L} . La construction de cette fonctionnelle \mathcal{L} permet de retrouver l'expression des énergies potentielles et complémentaires qui sont très utilisées en calcul numérique. Voyons comment.

I.3.3 Lien avec les théorèmes classiques

❶ **Energie potentielle** Intéressons-nous à une résolution de type Navier, qui consiste à rechercher le champ de déplacement solution \mathbf{u} dans l'ensemble admissible U_{cine}^{ad} défini par :

$$U_{cine}^{ad} = \{\mathbf{u} \text{ tels que } u_i = u_i^d \text{ sur } S_u\} \quad (I.95)$$

La connaissance d'un champ de déplacements admissible \mathbf{u} permet le calcul d'un champ de déformations ε :

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i}) \quad (I.96)$$

et par suite, le calcul d'un champ de contraintes donnés par :

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\varepsilon_{kl} \quad (I.97)$$

Dans ces conditions, et en tenant compte de l'énergie (I.83), la fonctionnelle (I.94) peut se réécrire comme une fonctionnelle $J(\mathbf{u})$ donnée par :

$$J(\mathbf{u}) = \int_V \frac{1}{2} C_{ijkl} \varepsilon_{ij} \varepsilon_{kl} - f_i u_i dV - \int_{S_f} T_i^d u_i dS_f \quad (I.98)$$

On retrouve l'expression de la fonctionnelle "énergie potentielle", qui atteint un minimum¹⁶ pour le champ de déplacement réel. Ce minimum est donné par la condition $\delta J = 0$.

❷ **Energie complémentaire** Si on s'intéresse maintenant à une résolution par la méthode de Beltrami, le champ des contraintes admissibles U_{stat}^{ad} est donné par :

$$U_{stat}^{ad} = \{\sigma \text{ tels que } \sigma_{ij} = \sigma_{ji}, \sigma_{ij,j} + f_i = 0, \sigma_{ij} n_j = T_i^d \text{ sur } S_f\} \quad (I.99)$$

Ajoutons que la connaissance d'un champ de contraintes admissible σ permet le calcul d'un champ de déformations ε :

$$\varepsilon_{ij} = S_{ijkl} \sigma_{kl} \quad (I.100)$$

où S_{ijkl} est le tenseur des souplesses. Si l'énergie de déformation élastique $W(\varepsilon)$ est ainsi réécrite comme une fonction de σ :

$$W(\sigma) = \frac{1}{2} S_{ijkl} \sigma_{ij} \sigma_{kl} \quad (I.101)$$

l'expression (I.92) peut se simplifier pour donner :

$$J^*(\sigma) = \int_V -\frac{1}{2} S_{ijkl} \sigma_{ij} \sigma_{kl} dV + \int_{S_u} \sigma_{ij} u_i^d n_j dS_u \quad (I.102)$$

On retrouve cette fois l'expression de la fonctionnelle "énergie complémentaire" $J^*(\sigma)$, qui est maximale¹⁷ pour le champ de contraintes réel. Ce maximum est donné par la condition $\delta J^* = 0$.

Il est important de noter que J et J^* sont le point de départ de nombreux schémas numériques (voir par exemple Imbert, [Imb-1984]).

¹⁶Rappelons que le tenseur C est défini positif.

¹⁷Le tenseur S est lui aussi défini positif.

I.3.4 Conclusion

Ce chapitre a mis en évidence les avantages d'une forme variationnelle relative aux équations d'évolution d'un système. Retenons donc que :

- le calcul variationnel permet la mise en oeuvre de méthodes numériques.
- les symétries variationnelles permettent entre autre l'application du théorème de Noether qui fournit des lois de conservation sur le système.

Dans ce travail, on se limite à l'écriture d'une forme variationnelle pour une approche thermodynamique des processus irréversibles. On essaie ensuite d'en calculer les symétries dans le but de révéler des propriétés d'invariance caractéristiques du matériau.

Nos motivations étant justifiées, le deuxième volet du chapitre a consisté en une présentation des conditions nécessaires et suffisantes d'existence d'un principe variationnel associé à un système d'EDP $\mathbf{P} = 0$. Dans le cas où les conditions limites sur le volume généralisé $\Omega = V \times I$ sont supposées connues, ces conditions sont équivalentes à l'auto-adjonction de la dérivée de Fréchet de \mathbf{P} :

$$\sum_J \frac{\partial P_i}{\partial u_{j,J}} D_J = \sum_J (-D)_J \frac{\partial P_j}{\partial u_{i,J}} \quad (\text{I.103})$$

Enfin, le dernier point abordé a été une généralisation de la construction variationnelle précédente de manière à y intégrer les conditions limites, qui deviennent alors une conséquence de la condition de stationnarité.

II

Principales approches lagrangiennes de la TPI rencontrées dans la littérature

Sommaire

II.1 Formulations lagrangiennes équivalentes	24
II.1.1 La stratégie des facteurs intégrants	25
II.1.2 L'ajout de variables	26
II.1.3 Approche par produit scalaire de convolution	30
II.1.4 Autres approches	31
II.2 Formulations lagrangiennes irréversibles par potentiels de dissipation	32
II.2.1 Retour à la dynamique des masses ponctuelles	32
II.2.2 Potentiels de dissipation	35
II.2.3 Bilan des différentes stratégies et lien avec la thermodynamique	37
II.2.4 Conclusion	43

Rappelons ici que le fil conducteur de ce travail est l'établissement d'une fonction lagrangienne en TPI. On se propose alors, dans ce chapitre, d'évoquer quelques formulations lagrangiennes (rencontrées dans la littérature) relatives à des phénomènes irréversibles. L'examen des références bibliographiques montre qu'il se dégage 4 grandes stratégies. Nous allons passer en revue ces stratégies, dans le but de mieux cerner la notion d'auto-adjonction. Enfin, nous tenterons d'apporter un sens physique à cette propriété mathématique en synthétisant toutes les approches.

II.1 Formulations lagrangiennes équivalentes

Pour un système physique dont l'évolution est régie par un système d'EDP non auto-adjoint :

$$P = \{P_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(n)}) = 0, i = 1..q\} \quad (\text{II.1})$$

on désigne par équivalente¹ toute formulation lagrangienne qui conduit à des extrémales incluant ou égalant les solutions de P . On se propose dans cette section, de manière analogue à la classification proposée par Van et Nyiri ([Van-1999]), de passer en revue trois premières méthodes de construction d'une formulation lagrangienne pour un système à évolution irréversible (donc régi par des équations non auto-adjointes). L'exemple retenu ici² est l'équation de la chaleur dans un volume V de bord S , entre les instants $[0, \tau]$:

$$P = T_{,t} - a\Delta T = 0 \quad \text{pour } t \in [0, \tau] \text{ et } \mathbf{r} \in V \quad (\text{II.2})$$

où $T(t, \mathbf{r})$ est la température à l'instant t au point \mathbf{r} , a le coefficient de diffusivité thermique, et Δ l'opérateur laplacien donné par :

$$\Delta T = T_{,xx} + T_{,yy} + T_{,zz} \quad (\text{II.3})$$

L'équation (II.2) peut se réécrire :

$$P = \Gamma T = \left(\frac{\partial}{\partial t} - a\Delta \right) T = 0 \quad (\text{II.4})$$

où Γ est l'opérateur de diffusion, non auto-adjoint comme le montre le calcul de la dérivée de Fréchet de P :

$$D_P = D_t - a\Delta \quad (\text{II.5})$$

$$D_P^* = -D_t - a\Delta \neq D_P \quad (\text{II.6})$$

L'équation (II.2) n'admet donc pas de lagrangien. Voyons à présent, en s'appuyant sur la littérature à ce sujet, comment obtenir une formulation lagrangienne équivalente pour cette équation.

¹On reprend ici l'expression de Santilli ([San1-1977]).

²Il nous a semblé intéressant d'appliquer les trois premières différentes stratégies à un même exemple, afin que le lien entre ces approches soit plus "visible".

II.1.1 La stratégie des facteurs intégrants

De manière générale, la première approche que l'on pourra qualifier "d'approche par facteurs intégrants", consiste à multiplier un système d'équations P non auto-adjoint par une matrice non dégénérée bien choisie. Cette stratégie nécessite a priori que le système d'équations soit régulier (Santilli, [San1-1977]), ce qui nous oblige à énoncer la :

DÉFINITION II.1.1 : *Nous dirons que $P = \{P_i(x, u^{(n)}) = 0, i = 1..q\}$ est régulier si et seulement si la matrice de matrices :*

$$F = \begin{pmatrix} \left(\frac{\partial P_1}{\partial u_{1,ij}} \right) & \cdots & \left(\frac{\partial P_1}{\partial u_{q,ij}} \right) \\ \vdots & & \vdots \\ \left(\frac{\partial P_q}{\partial u_{1,ij}} \right) & \cdots & \left(\frac{\partial P_q}{\partial u_{q,ij}} \right) \end{pmatrix} \quad i, j = 1..q \quad (\text{II.7})$$

est régulière, i.e., $\det(F) \neq 0$, sur l'ensemble de définition des P_i . ■

Si $P = \{P_j(x, u^{(n)}), j = 1..q\}$ est un système régulier non auto-adjoint, on peut a priori le rendre auto-adjoint et trouver ainsi une formulation lagrangienne équivalente. Il suffit pour ce faire de construire le nouveau système d'équations :

$$Q_i = A_{ij}(x, u^{(n)})P_j(x, u^{(n)}) = 0 \quad (\text{II.8})$$

où la matrice des termes A_{ij} n'est pas connue a priori, et d'imposer au nouveau système Q d'être auto-adjoint³ :

$$\sum_J \frac{\partial Q_i}{\partial u_{j,J}} D_J = \sum_J (-D)_J \frac{\partial Q_j}{\partial u_{i,J}} \quad (\text{II.9})$$

Pour la plupart des systèmes "simples", le système (II.9) admet une solution en A_{ij} non dégénérée⁴ et on peut trouver une formulation lagrangienne équivalente pour le système initial P . Illustrons cette démarche en revenant à l'équation de la chaleur (II.2). Cette équation est non régulière comme le montre l'application de la définition (II.1.1) :

$$\det \begin{pmatrix} \frac{\partial P}{\partial T_{tt}} & \frac{\partial P}{\partial T_{tx}} & \frac{\partial P}{\partial T_{ty}} & \frac{\partial P}{\partial T_{tz}} \\ \frac{\partial P}{\partial T_{xt}} & \frac{\partial P}{\partial T_{xx}} & \frac{\partial P}{\partial T_{xy}} & \frac{\partial P}{\partial T_{xz}} \\ \frac{\partial P}{\partial T_{yt}} & \frac{\partial P}{\partial T_{yx}} & \frac{\partial P}{\partial T_{yy}} & \frac{\partial P}{\partial T_{yz}} \\ \frac{\partial P}{\partial T_{zt}} & \frac{\partial P}{\partial T_{zx}} & \frac{\partial P}{\partial T_{zy}} & \frac{\partial P}{\partial T_{zz}} \end{pmatrix} = \det \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a \end{pmatrix} = 0 \quad (\text{II.10})$$

Pour pouvoir construire un lagrangien à l'équation (II.2), il apparaît nécessaire de considérer l'équation de diffusion sous sa forme hyperbolique, appelée équation de Cattaneo-Vernotte ([Cat-1958]) :

$$P' = \tau T_{,tt} + T_{,t} - a \Delta T = 0 \quad \text{pour } t \in [0, \tau] \text{ et } r \in V \quad (\text{II.11})$$

³On suppose que les conditions limites ne découlent pas du principe variationnel. On impose ainsi une condition d'auto-adjonction "classique" c'est à dire au sens de la dérivée de Fréchet sur A^q .

⁴Il est crucial de vérifier que $\det(A_{ij}) \neq 0$ afin que les solutions du système Q soient les mêmes que celles de P .

où τ est le temps caractéristique de relaxation du flux de chaleur. En effet, la condition de régularité de (II.11) s'écrit désormais :

$$\det \begin{pmatrix} \frac{\partial P'}{\partial T_{,tt}} & \frac{\partial P'}{\partial T_{,tx}} & \frac{\partial P'}{\partial T_{,ty}} & \frac{\partial P'}{\partial T_{,tz}} \\ \frac{\partial P'}{\partial T_{,xt}} & \frac{\partial P'}{\partial T_{,xx}} & \frac{\partial P'}{\partial T_{,xy}} & \frac{\partial P'}{\partial T_{,xz}} \\ \frac{\partial P'}{\partial T_{,yt}} & \frac{\partial P'}{\partial T_{,yx}} & \frac{\partial P'}{\partial T_{,yy}} & \frac{\partial P'}{\partial T_{,yz}} \\ \frac{\partial P'}{\partial T_{,zt}} & \frac{\partial P'}{\partial T_{,zx}} & \frac{\partial P'}{\partial T_{,zy}} & \frac{\partial P'}{\partial T_{,zz}} \end{pmatrix} = \det \begin{pmatrix} \tau & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a \end{pmatrix} = \tau a^3 \neq 0 \quad (\text{II.12})$$

L'équation (II.11) est régulière mais non auto-adjointe. La recherche d'un facteur intégrant A par résolution de (II.9) compte tenu de (II.8) permet d'aboutir à une solution particulière sous la forme $A = e^{\frac{t}{\tau}}$, ce qui mène à l'expression d'un lagrangien⁵ analogue à celui de Van ([Van-1999]) :

$$L(t, \mathbf{r}, T^{(1)}) = e^{\frac{t}{\tau}} \frac{1}{2} (\tau T_{,t}^2 - a(\nabla T)^2) \quad (\text{II.13})$$

dont l'équation de Lagrange :

$$\frac{\partial L}{\partial T} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial T_{,t}} - \frac{d}{dx} \frac{\partial L}{\partial T_{,x}} - \frac{d}{dy} \frac{\partial L}{\partial T_{,y}} - \frac{d}{dz} \frac{\partial L}{\partial T_{,z}} = -e^{\frac{t}{\tau}} (\tau T_{,tt} + T_{,t} - a\Delta T) = 0 \quad (\text{II.14})$$

est équivalente à (II.11). Cette stratégie a été généralisée dans le cas où le milieu est non isotrope. Le facteur intégrant de l'équation de Cattaneo-Vernotte a ainsi été proposé sous forme d'une exponentielle de matrice par Sieniutycz ([Sie-1984]). Evoquons également le champ d'application de cette méthode dans le cas de la dynamique d'une masse ponctuelle avec frottement (Bérest [Ber-1997], Kobe [Kob-1986], Pedrosa [Ped-1983]), et d'un circuit électrique comportant des résistances (Sieniutycz [Sie-1984]). Voyons à présent le second volet de notre inventaire.

II.1.2 L'ajout de variables

On se propose, dans cette section, de construire une formulation lagrangienne pour l'équation de la chaleur en utilisant la deuxième méthode d'auto-adjonction qui s'appuie sur un complément du jeu de variables dépendantes. Cette approche est d'abord présentée en détails dans un cas particulier (aspect original à notre sens), puis une relecture des travaux d'Anthony sur la thermique de Fourier est proposée.

● **Présentation de la méthode :** Nous choisissons ici de présenter la méthode particulière qui consiste à doubler le jeu de variables dépendantes $\mathbf{u} = \{u_i(x), i = 1..q\}$, conformément à l'approche d'Anthony. Soit un système de la forme :

$$P_i = A_{ijkl} u_{j,kl} + B_{ijk} u_{j,k} + C_{ij} u_j + D_i(x) = 0 \quad (\text{II.15})$$

où tous les coefficients $A_{ijkl}, B_{ijk}, C_{ij}$ sont supposés constants, et soient q nouvelles variables $\mathbf{v} = \{v_i(x), i = 1..q\}$, a priori inconnues. Il est possible de chercher q nouvelles équations

⁵Insistons sur le fait que la présente stratégie n'est applicable qu'aux systèmes réguliers. On peut en effet remarquer que si $\tau = 0$, l'équation de Cattaneo-Vernotte n'est plus régulière et le lagrangien (II.13) n'existe plus.

$Q_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(2)}, \mathbf{v}^{(2)}) = 0$ telles que le nouveau système :

$$\begin{aligned} P_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(2)}) &= 0 & i = 1..q \\ Q_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(2)}, \mathbf{v}^{(2)}) &= 0 & i = q + 1..2q \end{aligned} \quad (\text{II.16})$$

soit auto-adjoint. En affectant les indices $i = 1..q$ pour les P_i et $i = q + 1..2q$ pour les Q_i , la condition d'autoajournement de la dérivée de Fréchet du système (II.16) s'écrit :

$$\begin{pmatrix} \sum_J \frac{\partial P_i}{\partial u_{j,J}} D_J & 0 \\ \sum_J \frac{\partial Q_i}{\partial u_{j,J}} D_J & \sum_J \frac{\partial Q_i}{\partial v_{j,J}} D_J \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_J (-D_J) \frac{\partial P_i}{\partial u_{j,J}} & \sum_J (-D_J) \frac{\partial Q_i}{\partial u_{j,J}} \\ 0 & \sum_J (-D_J) \frac{\partial Q_i}{\partial v_{j,J}} D_J \end{pmatrix} \quad (\text{II.17})$$

et n'est en générale pas vérifiée. Il faut utiliser une permutation des indices :

$$\begin{aligned} Q_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(2)}, \mathbf{v}^{(2)}) &= 0 & i = 1..q \\ P_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(2)}) &= 0 & i = q + 1..2q \end{aligned} \quad (\text{II.18})$$

de sorte que la condition d'auto-adjonction (II.17) devienne :

$$\begin{pmatrix} \sum_J \frac{\partial Q_i}{\partial u_{j,J}} D_J & \sum_J \frac{\partial Q_i}{\partial v_{j,J}} D_J \\ \sum_J \frac{\partial P_i}{\partial u_{j,J}} D_J & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_J (-D_J) \frac{\partial Q_j}{\partial u_{i,J}} & \sum_J (-D_J) \frac{\partial P_j}{\partial u_{i,J}} \\ \sum_J (-D_J) \frac{\partial Q_j}{\partial v_{i,J}} D_J & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{II.19})$$

L'identification des trois opérateurs différentiels contenus dans l'égalité matricielle (II.19) et situés en position (1, 1), (1, 2), et (2, 1) mène à un système d'EDP en Q_i , qui, après résolution, permet d'écrire la forme des Q_i :

$$Q_i = A_{jikl} v_{j,kl} - B_{jik} v_{j,k} + C_{ji} v_j + V_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(2)}) = 0 \quad (\text{II.20})$$

le vecteur $V_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(2)})$ devant satisfaire les 3 conditions :

$$\begin{aligned} \frac{\partial V_i}{\partial u_j} &= \frac{\partial V_j}{\partial u_i} - \frac{d}{dx^k} \left(\frac{\partial V_j}{\partial u_{i,k}} \right) + \frac{d^2}{dx^k dx^l} \left(\frac{\partial V_j}{\partial u_{i,kl}} \right) \\ \frac{\partial V_i}{\partial u_{j,k}} &= -\frac{\partial V_j}{\partial u_{i,k}} + \frac{d}{dx^l} \left(\frac{\partial V_j}{\partial u_{i,kl}} + \frac{\partial V_j}{\partial u_{i,lk}} \right) \\ \frac{\partial V_i}{\partial u_{j,lk}} &= \frac{\partial V_j}{\partial u_{i,kl}} \end{aligned} \quad (\text{II.21})$$

Ainsi, le système :

$$\begin{cases} P_i &= A_{ijkl} u_{j,kl} + B_{ijk} u_{j,k} + C_{ij} u_j + D_i(\mathbf{x}) = 0 \\ Q_i &= A_{jikl} v_{j,kl} - B_{jik} v_{j,k} + C_{ji} v_j + V_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(2)}) = 0 \end{cases} \quad (\text{II.22})$$

est auto-adjoint et admet comme lagrangien⁶ :

$$L = -\frac{A_{ijkl}}{2} (v_{i,k} u_{j,l} + v_{i,l} u_{j,k}) + \frac{B_{ijk}}{2} (v_i u_{j,k} - v_{i,k} u_j) + C_{ij} v_i u_j + D_i(\mathbf{x}) v_i + \int_0^1 V_i(\mathbf{x}, \alpha \mathbf{u}^{(2)}) u_i d\alpha \quad (\text{II.23})$$

⁶Cette expression a été obtenue par application du théorème (I.2.4) et par ajout d'une dérivée totale (voir le théorème I.2.6) qui permet de faire disparaître les dérivées secondes.

Cette formulation doit parfois être étendue lorsque le dernier terme intégral diverge. Dans ce cas, l'équation (II.23) peut se réécrire sous la forme générale :

$$L = -\frac{A_{ijkl}}{2}(v_{i,k}u_{j,l} + v_{i,l}u_{j,k}) + \frac{B_{ijk}}{2}(v_i u_{j,k} - v_{i,k}u_j) + C_{ij}v_i u_j + D_i(x)v_i + U_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(2)}) \quad (\text{II.24})$$

avec⁷ :

$$E_i(U_i) = V_i \quad (\text{II.25})$$

Il n'y a alors pas de méthode absolue pour construire le vecteur $U_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(2)})$.

② Retour au transport de la chaleur : La formulation lagrangienne la plus complète qui permet d'intégrer la TPI est sans doute celle d'Anthony ([Ant-2001],[Ant-1990]). Dans le cas du transport de la chaleur, les motivations de l'auteur sont fondées sur les arguments suivants :

1. si un lagrangien $L(t, \mathbf{r}, T^{(1)})$ existait pour l'équation de la chaleur, alors le théorème de Noether (I.1.1) pour le groupe de changement d'origine des temps $\bar{t} = t + \mu$ (associé au générateur $\frac{\partial}{\partial t}$) mènerait à la définition d'une densité volumique d'énergie interne :

$$u = \frac{\partial L}{\partial T_t} T_t - L \quad (\text{II.26})$$

et à la définition d'une densité de flux d'énergie :

$$\mathbf{J} = \frac{\partial L}{\partial \nabla T} T_t \quad (\text{II.27})$$

En régime stationnaire ($T_t = 0$), l'expression (II.27) du flux d'énergie se réduirait à zéro, ce qui est incohérent avec l'expression classique de la loi de Fick :

$$\mathbf{J} = -\lambda \nabla T \quad (\text{II.28})$$

où λ est la conductivité du matériau.

2. l'équation de la chaleur n'est pas auto-adjointe, donc il est nécessaire de lui associer une autre équation d'évolution, afin que le nouveau jeu d'équations soit auto-adjoint.

Pour remédier à l'incohérence portant sur le flux d'énergie et trouver par la même occasion une formulation lagrangienne pour l'équation de la chaleur, Anthony propose de compléter le jeu de variables thermodynamiques "usuel" par un jeu de variables plus fondamental, conformément à la méthode que nous avons exposée. L'auteur introduit ainsi, dans le cas du transport de la chaleur, un champ à valeur complexe $\chi(t, \mathbf{r})$ qu'il nomme "champ d'excitation thermique". Ce champ χ peut être comparé à la fonction d'onde en mécanique quantique : il n'a véritablement pas d'interprétation physique, mais le carré de son module (défini

⁷Rappelons que E_i désigne l'opérateur d'Euler Lagrange donné par :

$$E_i = \frac{\partial}{\partial u_i} - \frac{d}{dx_k} \frac{\partial}{\partial u_{i,k}}$$

comme la probabilité de présence pour la fonction d'onde) est ici défini comme étant égal à la température :

$$T = \chi\bar{\chi} \quad (\text{II.29})$$

(ou le symbole $\bar{\chi}$ désigne le complexe conjugué à χ). Le jeu de variables indépendantes initialement réduit à T devient ainsi $(\chi, \bar{\chi})$, qui de manière équivalente, peut s'écrire (T, ϕ) où $\phi(t, \mathbf{r})$ est une variable interne de phase définie via la relation :

$$\chi = \sqrt{T(t, \mathbf{r})} e^{i\phi(t, \mathbf{r})} \quad (\text{II.30})$$

En s'appuyant sur les notations :

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &= \{x_1 = t, x_2 = x, x_3 = y, x_4 = z\} = \{t, \mathbf{r}\} \\ u_i &= u_1 = T(t, \mathbf{r}), v_i = v_1 = \phi(t, \mathbf{r}) \\ A_{11kl} &= -\lambda \text{ si } (k, l) = (2, 2), (3, 3), (4, 4), A_{11kl} = 0 \text{ sinon} \\ B_{11k} &= c \text{ si } k=1, B_{11k} = 0 \text{ sinon} \\ V(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(2)}) &= V(t, \mathbf{r}, T^{(2)}) \\ U(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(2)}) &= U(t, \mathbf{r}, T^{(2)}) \end{aligned} \quad (\text{II.31})$$

l'équation de la chaleur (II.2) peut être auto-adjointe par ajout d'une nouvelle équation portant sur la phase $\phi(t, \mathbf{r})$, conformément au système (II.22) :

$$\begin{aligned} cT_{,t} - \lambda\Delta T &= 0 \\ -c\phi_{,t} - \lambda\Delta\phi + V(t, \mathbf{r}, T^{(2)}) &= 0 \end{aligned} \quad (\text{II.32})$$

(nous avons introduit la capacité thermique c du milieu reliée à la diffusivité a par $a = \lambda/c$). Un lagrangien possible pour le système (II.32) est donné par une réécriture de (II.24) :

$$L_1(T^{(1)}, \phi^{(1)}) = \lambda(\nabla\phi \cdot \nabla T) + \frac{c}{2}(\phi T_{,t} - T\phi_{,t}) + U(t, \mathbf{r}, T^{(1)}) \quad (\text{II.33})$$

En introduisant une pulsation ω et une température T_0 de référence, Anthony ([Ant-2001]) propose un lagrangien équivalent à (II.33) pour le système (II.32), noté $L_2(T^{(1)}, \phi^{(1)})$, sous la forme⁸ :

$$L_2(T^{(1)}, \phi^{(1)}) = \frac{L_1(T^{(1)}, \phi^{(1)})}{\omega} + \frac{dF(t, \mathbf{r}, T, \phi)}{dt} \quad (\text{II.34})$$

avec :

$$U(t, \mathbf{r}, T^{(1)}) = -cT\omega + \lambda \frac{T_0}{2T^2} (\nabla T)^2 \quad (\text{II.35})$$

$$F(t, \mathbf{r}, T, \phi) = -\frac{c}{2\omega} \left(T\phi + \frac{T_0}{2} \left[\ln \frac{T}{T_0} \right]^2 \right) \quad (\text{II.36})$$

soit :

$$L_2(T^{(1)}, \phi^{(1)}) = -cT - \frac{c}{\omega} \left(T\phi_{,t} + \frac{1}{2} \ln \frac{T}{T_0} T_{,t} \right) + \frac{\lambda}{\omega} (\nabla T \cdot \nabla\phi + \frac{T_0}{2T^2} (\nabla T)^2) \quad (\text{II.37})$$

⁸Cette forme est compatible avec le théorème (I.2.6).

Les équations de Lagrange qui découlent de ce lagrangien sont :

$$\begin{aligned} cT_{,t} - \lambda \Delta T &= 0 \\ -c\phi_{,t} - \lambda \Delta \phi &= c\omega + \lambda \left(\frac{T_0}{T^2} \Delta T - \frac{T_0}{T^3} (\nabla T)^2 \right) \end{aligned} \quad (\text{II.38})$$

La première équation de (II.38) correspond exactement à l'équation (II.2), tandis que la seconde équation donne l'évolution de la variable interne de phase $\phi_{,t}$, dont une solution particulière est donnée par ([Ant-2001]) :

$$\phi(t, \mathbf{r}) = -\omega t + \frac{T_0}{2T(t, \mathbf{r})} \quad (\text{II.39})$$

Un des intérêts de la formulation lagrangienne proposée est que l'application du théorème de Noether conduit aux nouvelles définitions de l'énergie (II.26) :

$$u = \frac{\partial L}{\partial T_{,t}} T_{,t} + \frac{\partial L}{\partial \phi_{,t}} \phi_{,t} - L = cT - \frac{\lambda}{\omega} (\nabla T \cdot \nabla \phi + \frac{T_0}{2T^2} (\nabla T)^2) \quad (\text{II.40})$$

et du flux d'énergie (II.27) :

$$\mathbf{J} = \frac{\partial L}{\partial \nabla T} T_{,t} + \frac{\partial L}{\partial \nabla \phi} \phi_{,t} = \frac{1}{\omega} \lambda \left((\nabla \phi + \frac{T_0}{2T^2} \nabla T) T_{,t} + \nabla T \phi_{,t} \right) \quad (\text{II.41})$$

qui en régime stationnaire, n'est plus égal à zéro grâce au terme résiduel en $\phi_{,t}$. Compte tenu de la solution particulière (II.39), les expressions (II.40) et (II.41) peuvent en effet se simplifier sous la forme :

$$u = cT \quad (\text{II.42})$$

$$\mathbf{J} = -\lambda \nabla T \quad (\text{II.43})$$

où apparaissent les expressions "usuelles" de la densité d'énergie interne et de la densité de flux d'énergie. La richesse de cette approche lagrangienne est qu'elle permet de retrouver également l'équation de conservation de l'entropie ([Ant-1990]). On peut toutefois s'interroger sur les véritables statuts de la variable interne de phase ϕ et de la pulsation ω . De manière générale et sur le plan physique, il semble difficile de comprendre la nécessité d'introduire des variables supplémentaires pour autoadjointer l'équation de la chaleur. Nous reviendrons plus en détail sur cette discussion dans la section (II.2.3). Ajoutons avant de passer à la suivante, que la méthode exposée ici a été mise en œuvre en dynamique par Fatic ([Fat-1991]).

II.1.3 Approche par produit scalaire de convolution

La troisième et dernière approche générale que nous aborderons dans cette section peut être déduite de la précédente, et s'appuie sur un produit scalaire de convolution. Ainsi, reprenons l'expression du système auto-adjoint (II.32) dans lequel on suppose un terme source $V(t, \mathbf{r}, T^{(2)})$ nul :

$$\left. \begin{aligned} cT_{,t} - \lambda \Delta T &= 0 \\ -c\phi_{,t} - \lambda \Delta \phi &= 0 \end{aligned} \right\} \text{ pour } t \in [0; \tau] \text{ et } \mathbf{r} \in V \quad (\text{II.44})$$

L'application de la relation (II.23) permet de définir un lagrangien pour ce système, donc une intégrale fonctionnelle S dont la stationnarité engendre les équations (II.44). Cette fonctionnelle est donnée par :

$$S = \int_0^\tau \int_V \left(c\phi_{T,t} - \phi_{,t}T \right) + \lambda \nabla\phi \cdot \nabla T \, dV dt \quad (\text{II.45})$$

Vu l'équation (II.44), il est immédiat de remarquer que variables adjointe (ici ϕ) et primale (T) peuvent être liées par la relation $T(t, \mathbf{r}) = \phi(\tau - t, \mathbf{r})$. Il est ainsi possible, compte tenu de l'équation (II.45) et du fait que :

$$\phi_{,t}(t, \mathbf{r}) = T_{,t}(\tau - t, \mathbf{r}) = -T_{,t}(t, \mathbf{r})$$

de considérer l'équation de la chaleur comme la conséquence de la stationnarité de la fonctionnelle S définie par :

$$S = \int_0^\tau \int_V \left(2cT(\tau - t, \mathbf{r})T_{,t}(t, \mathbf{r}) + \lambda \nabla T(\tau - t, \mathbf{r}) \cdot \nabla T(t, \mathbf{r}) \right) dV dt \quad (\text{II.46})$$

On retrouve ici une forme variationnelle de convolution proposée par Sievers ([Siev-1996]). La mise en oeuvre de produits scalaires de ce type a également été réalisée par Huet ([Hue-1992]) en viscoélasticité linéaire, de manière à généraliser les théorèmes portant sur les énergies potentielle et complémentaire rencontrées à la section (I.3.3). Sur le plan physique, cette approche est très voisine de l'approche de type Anthony puisqu'elle fait intervenir l'évolution rétrograde ($T(\tau - t, \mathbf{r})$ par exemple) du système primal. Nous reviendrons sur ce point dans la section II.2.3.

II.1.4 Autres approches

Avant de s'intéresser au quatrième volet de notre inventaire, évoquons pour terminer cette section une approche formulée par Gyarmati ([Gya-1970]), qui propose une intégrale fonctionnelle sous la forme :

$$S = \int_V \left(cTT_{,t} + \frac{\lambda}{2}(\nabla T)^2 \right) dV \quad (\text{II.47})$$

L'hypothèse principale formulée par l'auteur est que la variation δS de l'intégrale fonctionnelle (II.47) sous l'action d'une variation δT doit se faire à flux d'énergie \mathbf{J} constant. La conservation de l'énergie interne u reliée à la température par $u = cT$ s'écrit :

$$u_{,t} + \text{div}\mathbf{J} = cT_{,t} + \text{div}\mathbf{J} = 0 \quad (\text{II.48})$$

et implique que si $\delta\mathbf{J} = 0$, alors $\delta(cT_{,t}) = 0$. Selon l'auteur, l'équation de Lagrange associée au lagrangien :

$$L = cTT_{,t} + \frac{\lambda}{2}\nabla T \cdot \nabla T \quad (\text{II.49})$$

est ainsi tronquée de son terme relatif à la variable t si bien qu'elle doit prendre la forme :

$$\frac{\partial L}{\partial T} - \frac{d}{dx} \frac{\partial L}{\partial T_{,x}} - \frac{d}{dy} \frac{\partial L}{\partial T_{,y}} - \frac{d}{dz} \frac{\partial L}{\partial T_{,z}} = cT_{,t} - \lambda\Delta T = 0 \quad (\text{II.50})$$

qui est équivalente à l'équation de la chaleur. Sur le plan mathématique, cette approche est en désaccord avec le calcul des variations, puisqu'une variation δT non nulle impliquerait (selon

l'auteur) une variation $\delta(T_t)$ nulle. Pour se convaincre que cette affirmation n'est pas toujours vraie, considérons un groupe de transformation vertical⁹ à un paramètre μ qui transforme la température, et son développement de Taylor à l'ordre 1 en $\mu = 0$:

$$\bar{T} = \bar{T}(T, \mu) = T + \mu \left. \frac{\partial \bar{T}}{\partial \mu} \right|_{\mu=0} = T + \mu \phi^T = T + \delta T \quad (\text{II.51})$$

La composante relative à T_t , donnée par $\phi^{T,t} = \delta(T_t)/\mu$, peut être calculée à partir de la formule du prolongement (voir la définition (E.2.1)), qui montre que :

$$\phi^{T,t} = \phi_{,t}^T \quad (\text{II.52})$$

La multiplication de cette dernière équation par μ implique clairement qu'une variation non nulle δT entraîne une variation $\delta(T_t) = (\delta T)_{,t}$.

Ajoutons enfin qu'une tentative pour intégrer les équations de la dynamique avec frottement dans le cadre d'une formulation lagrangienne a été menée par Riewe ([Rie-1997],[Rie-1996]). Elle repose sur un lagrangien défini à l'aide des dérivées non entières des variables dépendantes. Cette écriture mène à un jeu d'équations de Lagrange généralisées au sens de ces dérivées non entières. Nous avons choisi de ne pas explorer plus en détail cette voie en raison de son caractère marginal.

II.2 Formulations lagrangiennes irréversibles par potentiels de dissipations

II.2.1 Retour à la dynamique des masses ponctuelles

Le point de départ de la quatrième grande approche qui permet une généralisation du formalisme lagrangien aux cas dissipatifs peut être la géométrie différentielle des variétés¹⁰. L'intérêt de cette formulation lagrangienne généralisée est qu'elle découle de la structure même de la variété de configuration choisie, et laisse apparaître de manière naturelle la notion de potentiel de Rayleigh. Pour illustrer la méthode, présentons une brève synthèse de ces résultats pour un système de n masses ponctuelles m_i de degrés de liberté¹¹ $\mathbf{q} = \{q_i(t), i = 1..3n\}$. Pour Godbillon ([God-1969]), un système mécanique est caractérisé par 3 éléments qui sont :

- une variété différentiable \mathbb{M} engendrée par les degrés de liberté $\mathbf{q} = \{q_i(t), i = 1..3n\}$, dite variété de configuration. L'entier $m - 3n$ est le nombre de degrés de liberté.
- une fonction différentiable \mathcal{K} sur l'espace tangent à \mathbb{M} noté $T(\mathbb{M})$, appelée énergie cinétique.
- un "pfaffien" π (ou forme différentielle d'ordre 1) sur $T(\mathbb{M})$ s'écrivant sous la forme :

$$\pi = F_i(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) dq_i \quad (\text{II.53})$$

(somme sur l'indice i) et appelé champ de force, qui correspond au travail des forces s'exerçant sur les masses.

⁹Qui ne transforme donc pas le temps ni les variables d'espace.

¹⁰Nous présentons les outils de géométrie différentielle utilisés dans cette section dans l'annexe H.

¹¹Nous prenons comme degrés de liberté toutes les composantes des positions de chaque particule.

La forme fondamentale du système mécanique est définie ([God-1969]) comme la différentielle extérieure de la différentielle verticale de \mathcal{K} , ce qui mène à l'expression :

$$\omega = \frac{\partial^2 \mathcal{K}}{\partial q_k \partial \dot{q}_i} dq_k \wedge dq_i + \frac{\partial^2 \mathcal{K}}{\partial \dot{q}_k \partial \dot{q}_i} d\dot{q}_k \wedge d\dot{q}_i \quad (\text{II.54})$$

En supposant que cette forme est de degré 2, fermée, et régulière¹², et en introduisant le champ vectoriel de Liouville sous la forme :

$$v = \dot{q}_i \frac{\partial}{\partial \dot{q}_i} \quad (\text{II.55})$$

la structure de variété implique directement le :

THÉORÈME II.2.1 : *Il existe un et un seul champ de vecteur X de la forme :*

$$X = a_i \frac{\partial}{\partial q_i} + b_i \frac{\partial}{\partial \dot{q}_i} \quad (\text{II.56})$$

sur $T(\mathbb{M})$ tel que :

$$i_X \omega = \frac{\partial^2 \mathcal{K}}{\partial q_k \partial \dot{q}_i} a_k dq_i - \frac{\partial^2 \mathcal{K}}{\partial q_k \partial \dot{q}_i} a_i dq_k + \frac{\partial^2 \mathcal{K}}{\partial \dot{q}_k \partial \dot{q}_i} b_k dq_i - \frac{\partial^2 \mathcal{K}}{\partial \dot{q}_k \partial \dot{q}_i} a_i d\dot{q}_k = d(\mathcal{K} - v\mathcal{K}) + \pi \quad (\text{II.57})$$

(la notation i_X désigne le produit intérieur par X , voir l'annexe H). On dit que X est le système dynamique du système mécanique. Les courbes intégrales de X sont solutions des "équations de Lagrange" :

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{K}}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial \mathcal{K}}{\partial q_i} = F_i(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) \quad (\text{II.58})$$

En scindant le champ de force π en une contribution correspondant à des forces F_i^c conservatives, reliées à une énergie potentielle \mathcal{V} par :

$$-d\mathcal{V} = F_i^c dq_i \quad \Rightarrow \quad F_i^c = -\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial q_i} \quad (\text{II.59})$$

et une contribution non conservative $F_i^{nc} dq_i$, soit :

$$\pi = -d\mathcal{V} + F_i^{nc} dq_i \quad (\text{II.60})$$

l'équation (II.58) peut se réécrire sous la forme :

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = F_i^{nc}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) \quad (\text{II.61})$$

où L est le lagrangien du système donné par :

$$L = \mathcal{K} - \mathcal{V} \quad (\text{II.62})$$

Envisageons l'application du théorème (II.2.1) dans un cas simplifié en considérant l'exemple :

¹²On parle alors de système mécanique régulier. Il est intéressant de noter que cette définition est équivalente à la définition (II.1.1) dans le cas des systèmes d'EDO d'ordre 2.

EXEMPLE II.2.1 : Soit un seul point de masse m évoluant sur une droite, repéré par sa position q , et soumis (i) à une force de frottement visqueux $F^{mc} = -\lambda\dot{q}$ (λ est une constante) et (ii) une force de rappel élastique donnée par :

$$F^c = -kq = -\frac{\partial \mathcal{V}}{\partial q} \text{ avec } \mathcal{V} = \frac{1}{2} kq^2 \quad (\text{II.63})$$

où k est une constante positive. L'énergie cinétique \mathcal{K} de ce point est donnée par :

$$\mathcal{K} = \frac{1}{2} m\dot{q}^2 \quad (\text{II.64})$$

Le champ de force π associé aux forces F^{mc} et F^c se calcule à l'aide de la relation (II.53), ce qui mène à :

$$\pi = -\lambda\dot{q}dq - kq dq \quad (\text{II.65})$$

et la forme fondamentale ω ainsi que le vecteur de Liouville v sont donnés respectivement par les équations (II.54) et (II.55), soit :

$$\omega = m\dot{q} \wedge dq \text{ et } v = \dot{q} \frac{\partial}{\partial \dot{q}} \quad (\text{II.66})$$

L'application du théorème (II.2.1) consiste à rechercher un champ de vecteur X sous la forme :

$$X = a(q, \dot{q}) \frac{\partial}{\partial q} + b(q, \dot{q}) \frac{\partial}{\partial \dot{q}} \quad (\text{II.67})$$

et vérifiant l'équation (II.57). Compte tenu de la définition (H.3.1) du produit intérieur, l'équation (II.57) implique :

$$i_X \omega = -ma(q, \dot{q})d\dot{q} + mb(q, \dot{q})dq = d(\mathcal{K} - v\mathcal{K}) + \pi = d \left[\frac{1}{2} m\dot{q}^2 - \dot{q} \frac{\partial}{\partial \dot{q}} \left(\frac{1}{2} m\dot{q}^2 \right) \right] - \lambda\dot{q}dq - kq dq \quad (\text{II.68})$$

et peut se réécrire après simplification :

$$-ma(q, \dot{q})d\dot{q} + mb(q, \dot{q})dq = -m\dot{q}d\dot{q} + (-\lambda\dot{q} - kq)dq \quad (\text{II.69})$$

L'identification des termes en dq et $d\dot{q}$ permet d'aboutir à l'expression des composantes $a(q, \dot{q})$ et $b(q, \dot{q})$ de X , qui prend finalement la forme :

$$X = \dot{q} \frac{\partial}{\partial q} + \left(-\frac{\lambda}{m} \dot{q} - \frac{k}{m} q \right) \frac{\partial}{\partial \dot{q}} \quad (\text{II.70})$$

Les courbes intégrales de X se calculent en résolvant le système différentiel¹³ :

$$\frac{dq}{dt} = \dot{q} \quad ; \quad \frac{d\dot{q}}{dt} = -\frac{\lambda}{m} \dot{q} - \frac{k}{m} q \quad (\text{II.71})$$

qui après simplification, devient équivalent à l'équation différentielle :

$$m\ddot{q} + \lambda\dot{q} + kq = 0 \quad (\text{II.72})$$

En définissant le lagrangien L du système sous la forme (voir la relation II.62) :

$$L = \mathcal{K} - \mathcal{V} = \frac{1}{2} m\dot{q}^2 - \frac{1}{2} kq^2 \quad (\text{II.73})$$

on peut vérifier l'équivalence entre l'équation de Lagrange (II.61) et l'équation (II.72) des courbes intégrales de X :

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial L}{\partial q} = F^{mc} \Leftrightarrow m\ddot{q} + kq = -\lambda\dot{q} \Leftrightarrow m\ddot{q} + \lambda\dot{q} + kq = 0 \quad (\text{II.74})$$

¹³On calcule en fait l'"exponentielle" du champ de vecteur X , donnée par l'application du théorème (E.1.1) dans lequel le paramètre d'intégration ne serait plus μ mais le temps t .

Le théorème (II.2.1) peut ainsi être considéré comme une généralisation naturelle du formalisme lagrangien (Godbillon, [God-1969]) présenté dans la section (C.1), puisque l'équation (II.61) correspond en fait à l'écriture du principe de Lagrange-d'Alembert (Bloch, [Blo-1996]) :

$$\delta \int_{t_0}^{t_1} L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) dt + \int_{t_0}^{t_1} F_i^{nc}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) \delta q_i dt = 0 \Rightarrow \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = F_i^{nc}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) \quad (\text{II.75})$$

Bien entendu, si le travail des forces est conservatif ($\pi = -d\mathcal{V}$), les forces F_i^{nc} sont nulles et l'équation (II.75) devient équivalente à la stationnarité de l'intégrale d'action (C.2). Ajoutons qu'il est courant de supposer que les forces non-conservatives F_i^{nc} dérivent d'un pseudo-potentiel de dissipation (appelé potentiel de Rayleigh) R sous la forme :

$$F_i^{nc} = \frac{\partial R}{\partial \dot{q}_i} \quad (\text{II.76})$$

En guise d'illustration, remarquons que dans l'exemple (II.2.1), ce pseudo-potentiel aurait pu être défini comme la demi puissance dissipée par frottement visqueux :

$$R = -\frac{1}{2} \lambda \dot{q}^2 \Rightarrow F^{nc} = \frac{\partial}{\partial \dot{q}} \left(-\frac{1}{2} \lambda \dot{q}^2 \right) = -\lambda \dot{q} \quad (\text{II.77})$$

Cette notion de pseudo-potentiel de dissipation a été généralisée au cas de la thermomécanique des milieux continus, ce que nous verrons à la section (II.2.2). Une autre approche liée à la géométrie différentielle a été développée par Kiehn ([Kie-1974],[Kie-1975],[Kie-2002]), qui étend la définition de l'action usuelle de la mécanique analytique¹⁴. Pour l'auteur, l'irréversibilité est traduite par la torsion topologique de la variété de configuration, qui implique un défaut de fermeture pour la forme différentielle $L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})dt$ le long de ses extrémales. Par suite, la variation de l'intégrale $\int_{t_0}^{t_1} L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})dt$ entre deux instants t_0 et t_1 n'est pas égale à zéro, comme le montre l'équation (II.75).

De prime abord, on peut penser que la mise en oeuvre de toutes les techniques de la géométrie différentielle fait appel à des outils mathématiques qui, sur le plan physique, semblent ne rien apporter de nouveau. En effet, ces méthodes de calcul sont une traduction à l'échelle incrémentale des résultats classiques sur les intégrales fonctionnelles. Par souci de simplicité, nous avons choisi de ne plus argumenter sur ces approches¹⁵.

II.2.2 Potentiels de dissipation

La notion de potentiel de Rayleigh introduite en dynamique soulève la notion voisine de potentiel de dissipation qui intervient entre autre en thermomécanique des milieux continus. Certaines tentatives pour formuler les équations d'état d'un système viscoélastique (et/ou viscoplastique) sous forme lagrangienne ont vu le jour ; citons entre autre les travaux de Germain, [Ger-1998], Stolz, [Sto-1988], et Maugin, [Mau-1990].

Ces approches s'appuient sur l'énergie libre de Helmholtz que nous noterons ici Ψ , et qui dépend de deux types de variables :

¹⁴Dans le même ordre d'idée, on peut aussi considérer les travaux de Lucey ([Luc-1988]).

¹⁵Il est toutefois possible de se reporter au travaux de Krupkova ([Kru-2001]) et Echeverria-Enriquez *et al* ([Ech-1996]).

- des variables observables, que l'on peut mesurer, et qui sont en général la température T et la déformation ε .
- des variables cachées, qui décrivent l'état interne de la matière. Ces variables, appelées variables internes, sont notées ici α .

Le potentiel Ψ peut ainsi s'écrire a priori :

$$\Psi = \Psi(\varepsilon, \alpha, T) \quad (\text{II.78})$$

Les équations d'état qui se déduisent de ce potentiel sont obtenues à partir de l'inégalité de Clausius Duhem qui permet d'écrire :

$$\sigma_r = \rho_0 \frac{\partial \Psi}{\partial \varepsilon} \quad ; \quad \mathbf{A} = -\rho_0 \frac{\partial \Psi}{\partial \alpha} \quad ; \quad s = -\rho_0 \frac{\partial \Psi}{\partial T} \quad (\text{II.79})$$

où ρ_0 est la masse volumique du milieu, σ_r la partie réversible de la contrainte, \mathbf{A} les forces thermodynamiques associées aux variables internes α , et s l'entropie. Dans le cas de comportements dissipatifs (viscoélastiques et/ou viscoplastiques), ces équations d'état doivent être complétées par une information irréversible contenue dans un pseudo-potential de dissipation. Pour un comportement de type visqueux, on introduit la partie irréversible σ_{ir} de la contrainte à l'aide de l'égalité :

$$\sigma = \sigma_r + \sigma_{ir} \quad (\text{II.80})$$

et on la relie à un pseudo-potential de dissipation Ω par la relation :

$$\sigma_{ir} = \frac{\partial \Omega(\dot{\varepsilon})}{\partial \dot{\varepsilon}} \quad (\text{II.81})$$

Pour un comportement de type viscoplastique, la force \mathbf{A} peut, quant à elle, dériver d'un pseudo-potential Φ :

$$\mathbf{A} = \frac{\partial \Phi(\dot{\alpha})}{\partial \dot{\alpha}} \quad (\text{II.82})$$

Le formalisme lagrangien exposé par Stolz ([Sto-1988]) repose en partie sur la définition d'un pseudo-potential D défini par :

$$D = \Omega(\dot{\varepsilon}) + \Phi(\dot{\alpha}) \quad (\text{II.83})$$

Introduisons une fonctionnelle S dont les arguments sont le déplacement (noté \mathbf{u}) et sa vitesse ainsi que l'état thermodynamique du système traduit par α et T ([Ger-1998], [Sto-1988]) :

$$S = \int_{t_0}^{t_1} \left(\int_V \left(\rho_0 \frac{1}{2} \left(\frac{d\mathbf{u}}{dt} \right)^2 - \rho_0 \Psi(\varepsilon(\mathbf{u}), \alpha, T) \right) dV \right) dt + \int_{t_0}^{t_1} \left(\lambda \int_{S_f} \mathbf{T}^d \cdot \mathbf{u} dS \right) dt \quad (\text{II.84})$$

où \mathbf{T}^d est le vecteur contrainte donné sur S_f , et λ un paramètre de chargement qui dépend explicitement du temps. Le principe variationnel associé à (II.84) peut être vu comme une généralisation du principe de Lagrange-d'Alembert (II.75) au cas des milieux continus. Sa formulation pour la variable de déplacement \mathbf{u} s'écrit :

$$\delta S + \int_{t_0}^{t_1} \left[\int_V \left(\frac{\partial D}{\partial \dot{\varepsilon}} \varepsilon \delta \mathbf{u} \right) dV \right] dt = 0 \quad (\text{II.85})$$

et mène à une relation analogue à (II.61) :

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{u}} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{u}}} = \frac{\partial D}{\partial \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}} \boldsymbol{\varepsilon} \quad (\text{II.86})$$

Cette dernière relation conduit en partie aux équations dynamiques qui régissent le système :

$$\text{div}(\boldsymbol{\sigma}_r + \boldsymbol{\sigma}_{ir}) = \rho_0 \frac{d^2 \mathbf{u}}{dt^2} ; \quad (\boldsymbol{\sigma}_r + \boldsymbol{\sigma}_{ir}) \cdot \mathbf{n} = \lambda \mathbf{T}^d \quad (\text{II.87})$$

où \mathbf{n} est la normale à S_f . Cette équation mécanique se doit d'être complétée par l'évolution des forces thermodynamiques \mathbf{A} qui traduisent l'évolution interne du milieu. Cette information est donnée par l'écriture de l'équation de Lagrange relative aux variables internes $\boldsymbol{\alpha}$, qui prend la forme simplifiée :

$$\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{\alpha}} = \frac{\partial D}{\partial \dot{\boldsymbol{\alpha}}} \Leftrightarrow \mathbf{A} = -\rho_0 \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\alpha}} = \frac{\partial \Phi}{\partial \dot{\boldsymbol{\alpha}}} \quad (\text{II.88})$$

On peut remarquer que l'équation d'état relative à l'entropie ne découle pas des équations de Lagrange (II.86), quand bien même la variable T (la température) apparaît explicitement en tant que variable dépendante dans l'équation (II.84). Retenons de cette présentation succincte que, par analogie avec la dynamique des masses ponctuelles où l'écriture des équations de Lagrange en présence de forces non conservatives F^{nc} nécessite l'introduction d'un potentiel de Rayleigh R (égalité (II.76)), l'intégrale fonctionnelle S (relation (II.84)) nécessite d'être suppléée par le pseudo-potentiel de dissipation D (équation (II.83)). On remarque ainsi une forte analogie entre les équations (II.85) et (II.75). Essayons à présent de synthétiser l'ensemble des approches lagrangiennes évoquées dans ce chapitre.

II.2.3 Bilan des différentes stratégies et lien avec la thermodynamique

❶ **Premiers commentaires sur les approches évoquées :** Nous pouvons constater que dans la plupart des cas, l'établissement d'une formulation lagrangienne relative à un phénomène irréversible repose sur l'auto-adjonction "artificielle" d'un système d'équations non auto-adjoint ou sur la considération d'une information supplémentaire contenue dans un pseudo-potentiel de dissipation.

La notion d'auto-adjonction, bien établie sur le plan mathématique, reste délicate à comprendre sur le plan physique. En effet, reprenons l'exemple de l'équation de la chaleur unidirectionnelle dans une barre de longueur L (problème primal, associé à la température $T(t, x)$) complétée de son adjointe (problème dual, associé à une variable a priori inconnue $u(t, x)$) :

$$c\bar{T}_{,t} - \lambda \bar{T}_{,xx} = 0 \text{ pour } t \in [0; \tau] \text{ et } x \in [0; L] \quad (\text{II.89})$$

$$-cu_{,t} - \lambda u_{,xx} = 0 \quad (\text{II.90})$$

et supposons des conditions limites de la forme $T(t, 0) = T_0$, $T(t, L) = T_1$ et un profil de température initial parabolique. Nous avons vu que variables primales et duales peuvent être liées par la relation $T(t, x) = u(\tau - t, x)$, ce qui peut conférer à u la dimension d'une température. Si τ désigne le temps au delà duquel on ne peut pas différencier le profil de température linéaire¹⁶ du profil actuel (à t), on peut représenter l'évolution du profil de température et de son adjoint comme le montre la figure II.1.

¹⁶C'est à dire le profil de température obtenu en régime stationnaire, soit $T_{,t} = 0$.

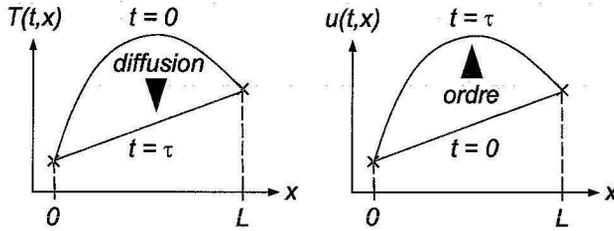


Fig. II.1: (a) représentation de l'évolution du système primal associé à la température $T(t, x)$. (b) représentation de l'évolution du système adjoint associé à la température $u(t, x) = T(\tau - t, x)$.

On peut remarquer que l'évolution associée à u correspondrait à une création d'ordre interne puisque le système adjoint tend à créer un gradient non uniforme de température au lieu de l'homogénéiser. Dans cet exemple, ce système adjoint peut ainsi paraître en totale contradiction avec le deuxième principe de la thermodynamique, car il traduit une création d'ordre interne. L'approche d'Anthony, qui s'appuie justement sur un système adjoint (mais complété cette fois d'un second membre, [Ant-2001],[Ant-1990], voir l'équation (II.38)), montre bien la volonté de comprendre et d'intégrer cette variable duale dans un cadre physique cohérent. On peut toutefois se demander si cette approche ne repose pas sur l'algorithme mathématique de la section II.1.2 complété *a posteriori* d'une interprétation physique.

En appliquant le même raisonnement que précédemment à un oscillateur amorti unidirectionnel de position $q(t)$ relié à son adjoint par $u(\tau - t)$ (voir figure II.2),

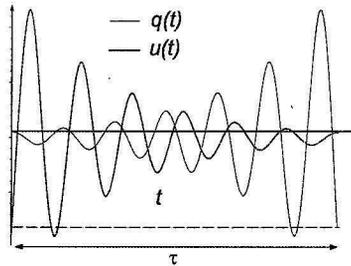


Fig. II.2: Représentation schématique des positions $q(t)$ (courbe rouge) et position adjointe $u(t)$ (courbe noire) d'un oscillateur unidirectionnel amorti.

on peut remarquer par une vue de l'esprit que le système adjoint joue le rôle d'un "réservoir d'énergie" qui emmagasine au cours du temps l'énergie dissipée par le système primal. Cette remarque soulève un commentaire intéressant : le système adjoint traduit la croissance d'une grandeur physique, qui pourrait être associée à la création d'entropie. On peut ainsi se demander si le système complémentaire nécessaire pour vérifier la condition d'auto-adjonction ne traduit pas une lacune dans le jeu des variables thermodynamiques intervenant dans toutes les approches évoquées dans ce chapitre. Cette remarque semble justifiée par la possibilité d'introduire un pseudo-potential de dissipation qui contient l'information irréversible.

② **Point commun des différentes approches :** Pour argumenter ce propos, remarquons que toute tentative d'aboutir à une formulation lagrangienne traduisant un phénomène irréversible (donc associé à un système d'EDP $P = 0$ non auto-adjoint) sous la forme $\delta S = 0$, avec :

$$S = \int_{\Omega} L(x, u^{(1)}) dx \tag{II.91}$$

revient en fait à rendre "artificiellement" la forme différentielle $L(x, u^{(1)})dx$ localement exacte le long des trajectoires solutions de P ¹⁷. Pour se convaincre de cette affirmation et synthétiser les approches évoquées dans ce chapitre, envisageons de manière très schématique l'intégrale d'une telle forme sur un circuit fermé qui correspondrait aux solutions d'un système d'EDP non auto-adjoint donné, conformément à la figure II.3.

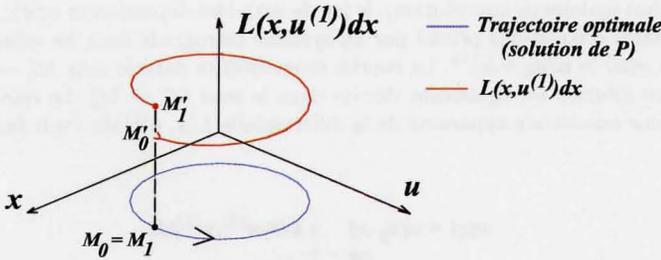


Fig. II.3: Représentation schématique d'une forme différentielle non exacte. Les extrémités M_0 et M_1 du chemin d'intégration fermé coïncident.

Pour trouver une formulation lagrangienne au système P , il est nécessaire de rendre la forme $L(x, u^{(1)})dx$ exacte, ce qui se traduit géométriquement par le fait que la courbe rouge (celle qui joint les points M'_0 et M'_1) de la figure II.3 doit être fermée. Pour y parvenir, l'ensemble des approches évoquées dans ce chapitre montre qu'il est possible :

1. de multiplier l'élément différentiel dx par une fonction poids $F(x, u^{(n)})$ "bien choisie". Le point M'_0 vient coïncider avec le point M'_1 par une déformation de la courbe rouge qui devient ainsi la courbe verte fermée (voir figure II.4). Cette démarche est celle des facteurs intégrants, qui ont pour but de "déformer" l'espace de configuration (x, u) .

¹⁷Rappelons en effet que l'intégrale entre deux extrémités M_0 et M_1 d'une forme différentielle exacte ω ne dépend pas du chemin choisi pour joindre ces deux extrémités. Cette propriété se traduit par l'invariance de l'intégrale $S = \int_{M_0}^{M_1} \omega$ suivant le chemin choisi soit $\delta S = 0$.

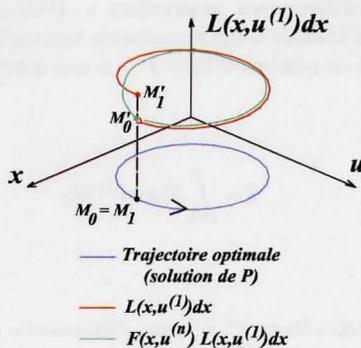


Fig. II.4: Représentation schématique de l'exactitude de la forme $L(x, u^{(1)})dx$ par multiplication par un facteur intégrant.

2. d'augmenter, conformément aux approches à système adjoint (ou de manière équivalente, à produit scalaire de convolution), le jeu de variables dépendantes $u(x)$, ce qui complète le système d'équations primal par un système rétrograde dont les solutions sont de la forme $v(x) = u(x_0 - x)$ ¹⁸. La courbe décrite dans le sens $M'_0 \rightarrow M'_1$ sur la trajectoire solution est également décrite dans le sens $M'_1 \rightarrow M'_0$. Le retour à M'_0 assure ainsi une exactitude apparente de la différentielle $L(x, u^{(1)})dx$ (voir figure II.5).

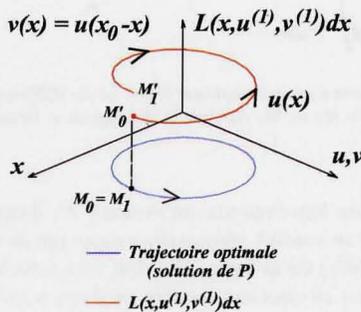


Fig. II.5: Représentation schématique de l'exactitude de la forme $L(x, u^{(1)})dx$ par ajout d'un système adjoint.

3. de compléter la courbe rouge par une autre courbe (verte sur la figure II.6) joignant M'_1 à M'_0 et ne pouvant pas être exacte. On sous-entend ici toutes les approches par potentiel de dissipation.

¹⁸Si le système adjoint a un second membre non nul, la solution adjointe peut s'écrire sous la forme $v(x) = u(x_0 - x) + v_0(x)$, où $v_0(x)$ est une solution particulière du système adjoint.

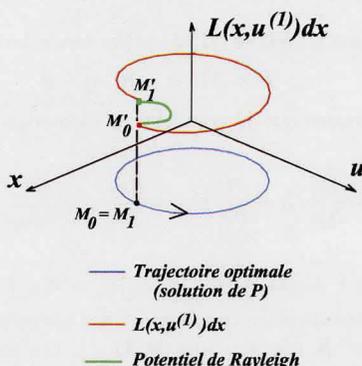


Fig. II.6: Représentation schématisée de l'exactitude de la forme $L(x, u^{(1)})dx$ par considération d'un potentiel de Rayleigh.

La nécessité de rendre $L(x, u^{(1)})dx$ exacte laisse à penser que la condition de stationnarité $\delta S = 0$ est intimement liée aux principes d'extrema qui portent sur les potentiels thermodynamiques (Callen, ([Cal-1960])). Voyons ceci sur un exemple.

❸ **Retour à la dynamique pour corroborer notre propos :** Dans le cas de la dynamique des masses, l'application de l'axiomatique de Callen a poussé Cunat (voir [Cun-2003]) à (i) considérer une énergie $E(p, q)$ extensive ne dépendant que (ii) des grandeurs extensives indépendantes qui sont ici l'impulsion p et la position q . La propriété fondamentale d'extensivité de l'énergie E , écrite sous la forme :

$$E(\lambda p, \lambda q) = \lambda E(p, q) \quad (\text{II.92})$$

conduit à la relation d'Euler :

$$E = \frac{\partial E}{\partial p} \cdot p + \frac{\partial E}{\partial q} \cdot q = v \cdot p - F \cdot q \quad (\text{II.93})$$

où on a introduit la vitesse $v = \frac{\partial E}{\partial p}$ et la force $F = -\frac{\partial E}{\partial q}$ comme forces thermodynamiques associées respectivement à l'impulsion et à la position. L'évolution de ces intensités peut être écrite sous la forme¹⁹ :

$$\begin{pmatrix} \dot{v} \\ -\dot{F} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M^{-1} & 0 \\ 0 & K \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \dot{p} \\ \dot{q} \end{pmatrix} \quad (\text{II.94})$$

où M et K sont respectivement les matrices des masses et des constantes d'élasticité définies par les dérivées secondes de E (supposées constantes) :

$$M_{ij}^{-1} = \frac{\partial^2 E}{\partial p_i \partial p_j} \quad ; \quad K_{ij} = \frac{\partial^2 E}{\partial q_i \partial q_j} \quad (\text{II.95})$$

Pour pouvoir conclure quant à la forme finale des équations, introduisons le couplage suivant :

$$\begin{pmatrix} \dot{p} \\ \dot{q} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} v \\ -F \end{pmatrix} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{pmatrix} \dot{p} \\ \dot{q} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F \\ v \end{pmatrix} \quad (\text{II.96})$$

¹⁹On ne tient pas compte ici d'un éventuel couplage position/impulsion, d'où les termes nuls dans la matrice intervenant dans l'équation (II.94).

La combinaison des relations (II.94) et (II.96) mène aux relations dynamiques :

$$\mathbf{P} = \mathbf{M} \cdot \dot{\mathbf{q}} + \mathbf{K} \cdot \mathbf{q} = 0 \quad (\text{II.97})$$

Il est intéressant de remarquer que la condition d'auto-adjonction du système (II.97), soit $D_P = D_P^*$, s'écrit :

$$\frac{\partial P_i}{\partial q_j} + \frac{\partial P_i}{\partial \dot{q}_j} D_t + \frac{\partial P_i}{\partial \ddot{q}_j} D_{tt} = \frac{\partial P_j}{\partial q_i} - D_t \frac{\partial P_j}{\partial \dot{q}_i} + D_{tt} \frac{\partial P_j}{\partial \ddot{q}_i} \quad (\text{II.98})$$

et conduit à :

$$K_{ij} + M_{ij} D_{tt} = K_{ji} + D_{tt} M_{ji} = K_{ji} + M_{ji} D_{tt} \quad (\text{II.99})$$

ce qui correspond, après identification des facteurs des opérateurs indépendants 1 et D_{tt} , à la symétrie des matrices \mathbf{M} et \mathbf{K} (donc à celle de \mathbf{M}^{-1}). Les relations (II.95) conduisent ainsi aux relations de Maxwell sur le potentiel E :

$$\frac{\partial^2 E}{\partial p_i \partial p_j} = \frac{\partial^2 E}{\partial p_j \partial p_i} ; \quad \frac{\partial^2 E}{\partial q_i \partial q_j} = \frac{\partial^2 E}{\partial q_j \partial q_i} \quad (\text{II.100})$$

qui sont équivalentes à l'exactitude de la différentielle dE . Cette première équivalence entre potentiel thermodynamique et condition d'auto-adjonction nous pousse à croire que de manière générale, l'intégrale d'action peut s'identifier à un potentiel thermodynamique que nous noterons provisoirement $\psi(\mathbf{u})$:

$$\int_{\Omega} L(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(1)}) d\mathbf{x} \equiv \psi(\mathbf{u}) \quad (\text{II.101})$$

Ce choix est conforté par les remarques suivantes :

1. la condition de stationnarité de l'intégrale d'action $\delta S = 0$ devient équivalente à une condition d'équilibre sur le potentiel ψ :

$$\delta S = 0 \Leftrightarrow \delta \psi = 0 \quad (\text{II.102})$$

ce qui inscrit naturellement le "principe de la moindre action" dans un cadre thermodynamique.

2. La généralisation du lemme de Poincaré²⁰ au cas des formes fonctionnelles ([Olv-1989]) fait que le caractère exact de la forme $\omega = \delta \psi$, soit $\omega = \delta S$, est équivalent au fait que ω est fermée, soit $\delta \omega = 0$. Par suite, on peut écrire :

$$\omega = \delta \psi = \delta \int_{\Omega} L(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(1)}) d\mathbf{x} \Leftrightarrow \delta \omega = \delta \delta \psi = 0 \quad (\text{II.103})$$

Si on admet que sur le plan physique, la variation $\delta \psi$ coïncide avec la différentielle $d\psi$, alors l'équation (II.103) conduit à :

$$dd\psi = \sum_{1 < i < j < q} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial u_i \partial u_j} - \frac{\partial^2 \psi}{\partial u_j \partial u_i} \right) du_i \wedge du_j = 0 \Leftrightarrow \frac{\partial^2 \psi}{\partial u_i \partial u_j} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial u_j \partial u_i} \quad (\text{II.104})$$

qui ne sont rien d'autre que les conditions de Maxwell sur le potentiel ψ . Le caractère auto-adjoint du système engendré par la condition $\delta S = 0$ prend donc ici un sens physique profond : il correspond au fait que la fonction ψ garde le statut de fonction potentielle au cours de l'évolution du système.

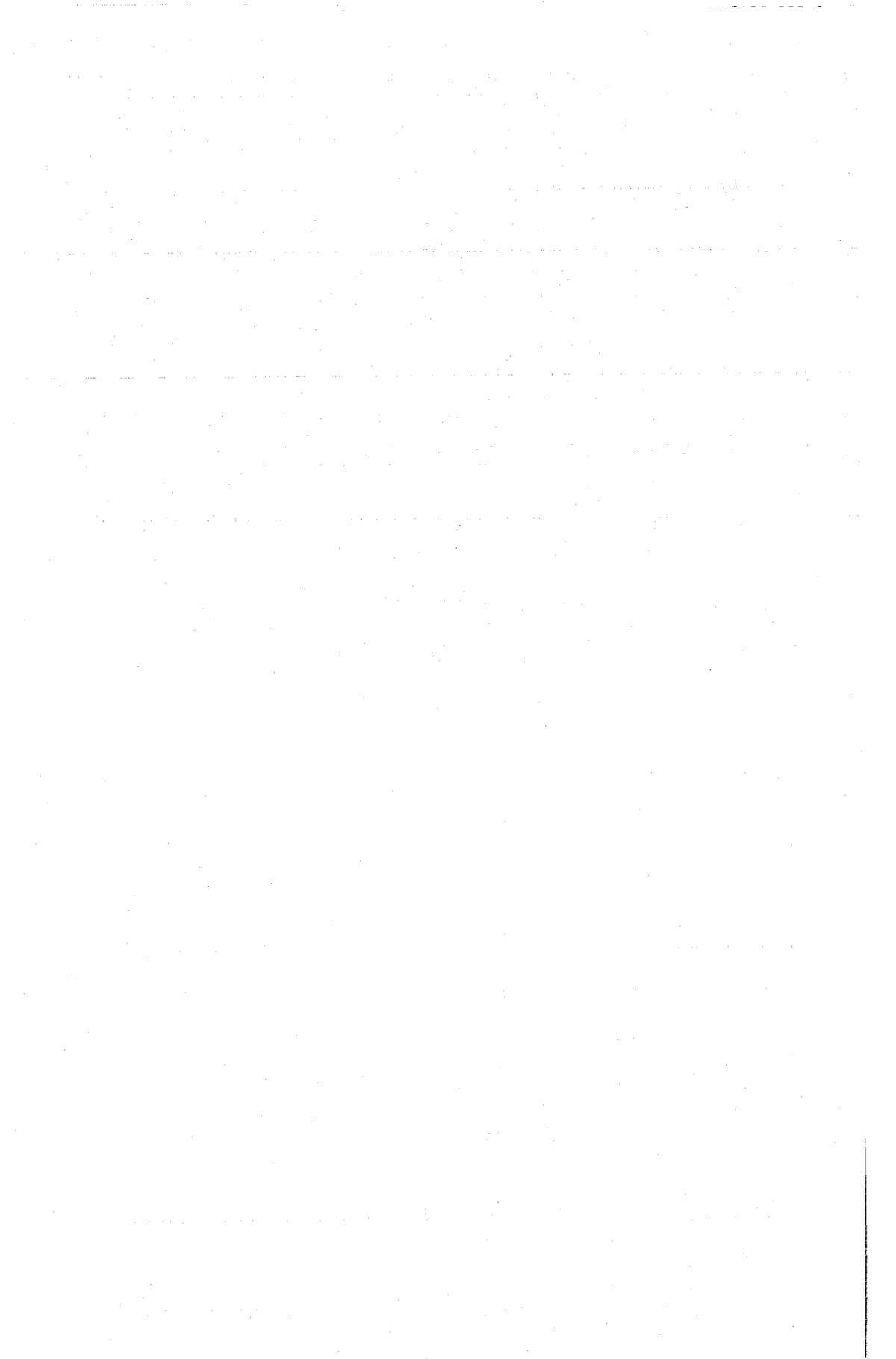
²⁰Rappelons que ce lemme énonce l'équivalence entre exactitude et fermeture d'une forme différentielle sur un ouvert homéomorphe à \mathbb{R}^n ([Tal-1993]).

II.2.4 Conclusion

Retenons en guise de synthèse qu'un système à évolution irréversible n'admet pas "directement" de lagrangien, car le système d'équations $P = 0$ qui le régit n'est pas auto-adjoint. Pour résoudre ce problème, nous avons remarqué quatre grandes stratégies dans la littérature, qui toutes rendent la différentielle $L(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(1)})d\mathbf{x}$ localement exacte sur la solution du système $P = 0$. Les méthodes adoptées reposent alternativement sur :

1. la multiplication de $L(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(1)})d\mathbf{x}$ par un facteur intégrant.
2. le complément du jeu de variables dépendantes \mathbf{u} sous la forme (\mathbf{u}, \mathbf{v}) .
3. l'expression d'un produit scalaire de convolution (approche intimement liée à la précédente).
4. la considération d'un pseudo-potentiel de dissipation.

Nous pensons à la lumière de ces références et de la généralisation du lemme de Poincaré au cas des formes fonctionnelles, que le fait de considérer l'intégrale d'action comme un potentiel thermodynamique ψ permet de donner une interprétation physique raisonnable à la condition d'auto-adjonction, que nous avons jugée mal définie jusqu'à présent. Cette condition est, selon la position adoptée par Cunat ([Cun-2003]) et développée mathématiquement dans ce mémoire, équivalente au fait que l'intégrale d'action garde les propriétés d'une fonction potentielle au cours de l'évolution du système. Pour corroborer notre propos, nous allons tenter de mettre en oeuvre cette nouvelle stratégie en l'appliquant à une thermodynamique de la relaxation, fondée précisément sur une généralisation du potentiel énergie interne.



III

Présentation d'une thermodynamique des processus irréversibles (formalisme DNLR) et construction d'une fonction lagrangienne associée

Sommaire

III.1 Généralisation de la relation d'Euler et construction d'un premier lagrangien	46
III.1.1 Hypothèses et équations de bases	46
III.1.2 Introduction de variables internes liées à la microstructure	47
III.1.3 Equations d'évolution thermodynamique du système	49
III.1.4 Construction d'un lagrangien pour les équations thermodynamiques	50
III.1.5 Généralisation à tout potentiel thermodynamique	51
III.2 Relations cinétiques et spectre des relaxations dans le formalisme DNLR	53
III.2.1 Etat relaxé	53
III.2.2 Loi cinétique de Onsager	53
III.2.3 Intégration de la loi cinétique dans le lagrangien	54
III.3 Modélisation du spectre des temps de relaxation DNLR	55
III.3.1 Première écriture	55
III.3.2 Introduction de non linéarités	56
III.3.3 Spectre des relaxations	57
III.3.4 Conclusion	61

L'objectif de ce chapitre est de construire une formulation lagrangienne en thermodynamique des processus irréversibles, qui permet l'écriture de lois de comportement pour des milieux qui sont le siège de phénomènes de relaxation. L'approche retenue ici est connue sous l'acronyme DNLR (Distribution of Non Linear Relaxations) et a été développée par Cunat (voir par exemple [Cun-1985], [Cun-2004], [Cun-2001], [Cun-2000]). Cette approche s'appuie sur une généralisation de la relation d'Euler aux situations hors-équilibre. Dans toute la suite de ce mémoire, le système thermodynamique considéré est un volume élémentaire représentatif (VER) d'un milieu continu homogène, dont la taille est "suffisamment petite" pour considérer que les gradients des variables intensives sont nuls, et "suffisamment grand" pour que l'on puisse parler de milieu continu.

III.1 Généralisation de la relation d'Euler et construction d'un premier lagrangien

III.1.1 Hypothèses et équations de bases

Reprenons les propriétés d'extensité de l'énergie interne que nous supposons scindée en trois contributions associées à trois types d'extensités :

- la déformation pondérée du volume $V\varepsilon$, associée à l'énergie mécanique. Nous nous plaçons dans l'hypothèse des petites perturbations, de sorte que la valeur du volume V reste sensiblement égale à sa valeur en configuration initiale V_0 ;
- l'entropie S , associée à l'énergie calorifique ;
- les nombres de moles $N = \{N_k, k = 1..n\}$ des différentes espèces en présence, associées à l'énergie chimique.

Conformément aux axiomes de la thermodynamique classique bien formalisés par Callen ([Cal-1960]), supposons l'existence d'une fonctionnelle E appelée énergie interne, fondamentalement extensive, qui doit dépendre de toutes les extensités indépendantes associées aux différentes formes d'énergie¹ :

$$E = E(V\varepsilon, S, N) \quad (\text{III.1})$$

La propriété d'extensité se traduit par la relation :

$$E(\lambda V\varepsilon, \lambda S, \lambda N) = \lambda E(V\varepsilon, S, N) \quad (\text{III.2})$$

pour toute valeur du réel λ . La dérivation par rapport à λ de l'équation (III.2), prise pour la valeur particulière $\lambda = 1$, mène à l'identité d'Euler² :

$$\frac{\partial E}{\partial (V\varepsilon)}(V\varepsilon, S, N) : (V\varepsilon) + \frac{\partial E}{\partial S}(V\varepsilon, S, N)S + \frac{\partial E}{\partial N}(V\varepsilon, S, N) \cdot N = E(V\varepsilon, S, N) \quad (\text{III.3})$$

soit :

$$E(V\varepsilon, S, N) = \sigma(V\varepsilon, S, N) : (V\varepsilon) + T(V\varepsilon, S, N)S + \mu(V\varepsilon, S, N) \cdot N \quad (\text{III.4})$$

¹On parle, pour qualifier cette "définition", de relation fondamentale énergétique, qui peut être mise en parallèle avec la relation fondamentale entropique $S = S(E, V\varepsilon, N)$ ([Cal-1960]).

²On introduit les produits contractés $\mathbf{a} : \mathbf{b} = a_{ij}b_{ji}$ et $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = u_i v_i$.

compte tenu de la définition des grandeurs intensives associées aux différentes extensités :

$$\sigma(V\varepsilon, S, N) = \frac{\partial E}{\partial(V\varepsilon)}(V\varepsilon, S, N) \quad \text{la contrainte} \quad (\text{III.5})$$

$$T(V\varepsilon, S, N) = \frac{\partial E}{\partial S}(V\varepsilon, S, N) \quad \text{la température} \quad (\text{III.6})$$

$$\mu(V\varepsilon, S, N) = \frac{\partial E}{\partial N}(V\varepsilon, S, N) \quad \text{les potentiels chimiques} \quad (\text{III.7})$$

Insistons sur le fait que ces variables intensives sont contrôlées par les variables $V\varepsilon$, S , et N . Pour simplifier les notations, on omettra toutefois de noter cette dépendance. La différentiation de l'énergie $E(V\varepsilon, S, N)$ compte tenu de (III.5), (III.6) et (III.7) conduit à la relation fondamentale de Gibbs :

$$dE = \sigma : d(V\varepsilon) + TdS + \mu \cdot dN \quad (\text{III.8})$$

La différentiation de l'équation (III.4) amène quant à elle la relation de Gibbs-Duhem :

$$(V\varepsilon) : d\sigma + SdT + N \cdot d\mu = 0 \quad (\text{III.9})$$

qui, couplée à la relation fondamentale de Gibbs, constitue une véritable fondation de la thermodynamique. Ces deux relations sont en fait "équivalentes" (en terme de quantité d'information) à l'équation d'Euler (équation (III.4)). Selon le point de vue de l'approche DNLR, la relation de Gibbs-Duhem est à l'articulation même des principes variationnels appliqués à la thermodynamique comme à la dynamique (Cunat, [Cun-2003]).

III.1.2 Introduction de variables internes liées à la microstructure

L'hypothèse clé de l'approche DNLR consiste à admettre que la relation fondamentale (III.1) reste valable en dehors de l'équilibre, de sorte que l'énergie interne y conserve son statut de fonction potentielle (voir par exemple [Cun-2001]). La dissipation qui peut apparaître lors d'un stimulus des variables de contrôle (soit $V\varepsilon$ et S pour le moment) est induite par la dynamique de variables internes traduisant les réorganisations de la microstructure. Donnons une idée de ces variables internes. Considérons ainsi les nombres de moles N_k que nous pouvons scinder en trois contributions :

$$N_k = N_k^0 + N_k^e + N_k^i \quad \text{soit} \quad dN_k = dN_k^e + dN_k^i \quad (\text{III.10})$$

où N_k^0 est le nombre de moles de l'espèce k à l'instant initial, N_k^e (e comme "échange") est le nombre de mole échangé par le système avec le milieu extérieur, et N_k^i (i comme "interne") le nombre de mole produit par les réactions chimiques au sein même du système. On suppose dans toute la suite que le système n'échange pas de matière avec le milieu extérieur, soit $N_k^e = 0$. Si on se place dans le cadre de la réaction chimique décrite par De Donder ([DeD-1936]), les variables N_k^i sont données par :

$$N_k^i = \sum_j \nu_{jk} \xi_j \quad (\text{III.11})$$

où ν_{kj} est le coefficient stoechiométrique de l'espèce k dans la réaction j , et ξ_j le degré d'avancement de la réaction j .

Si on fournit suffisamment d'énergie à un système mécanique³, la configuration interne de la matière est susceptible de changer. En effet, le système n'étant plus à l'équilibre, les probabilités de tous les microétats accessibles ne sont a priori plus les mêmes⁴, et certains microétats vont être privilégiés par rapport aux autres (ce sont bien entendu les plus probables). Le passage des microétats d'équilibre initialement stables (puis devenus instables) vers des microétats stables correspond à une réorganisation interne de la matière, que l'approche DNLR décrit avec les outils de la réaction chimique. La description de l'ensemble de ces "réactions chimiques" est ainsi faite à partir d'un jeu d'extensités $\mathbf{Z} = \{Z_k, k = 1..n\}$ définies comme les degrés d'avancement dans une base modale de toutes les réactions, ce qui, sur le plan thermodynamique, réduit tous les couplages chimiques. Ces réorganisations internes seront qualifiées dans la suite de processus. Ainsi, toujours sous l'hypothèse $N_k^e = 0$, récrivons la relation fondamentale en énergie (généralisée aux états hors équilibre) sous la forme :

$$E = E(V\varepsilon, S, \mathbf{Z}) \quad (\text{III.12})$$

Cette dernière relation implique la définition de la force thermodynamique A_i associée à la variable interne Z_i qui est appelée, selon la définition de De Donder ([DeD-1936]), affinité généralisée :

$$A_i(V\varepsilon, S, \mathbf{Z}) = -\frac{\partial E}{\partial Z_i}(V\varepsilon, S, \mathbf{Z}) \quad (\text{III.13})$$

Pour terminer cette section, ajoutons qu'il est préférable (en pratique) de travailler avec des grandeurs volumiques (appelées densités). Considérons ainsi, pour toute la suite de notre exposé, les nouvelles grandeurs :

$$\varepsilon = \frac{V\varepsilon}{V} \quad s = \frac{S}{V} \quad \mathbf{z} = \frac{\mathbf{Z}}{V} \quad (\text{III.14})$$

La relation fondamentale d'Euler généralisée⁵ :

$$E(V\varepsilon, S, \mathbf{Z}) = \sigma(V\varepsilon, S, \mathbf{Z}) : (V\varepsilon) + T(V\varepsilon, S, \mathbf{Z})S - \mathbf{A}(V\varepsilon, S, \mathbf{Z}) \cdot \mathbf{Z} \quad (\text{III.15})$$

devient, après division par le volume V :

$$\frac{E(V\varepsilon, S, \mathbf{Z})}{V} = \sigma(V\varepsilon, S, \mathbf{Z}) : \varepsilon + T(V\varepsilon, S, \mathbf{Z})s - \mathbf{A}(V\varepsilon, S, \mathbf{Z}) \cdot \mathbf{z} \quad (\text{III.16})$$

Compte tenu de l'extensité d'ordre 0 des dérivées partielles de l'énergie interne E (voir les définitions (III.5), (III.6), (III.7)), définissons l'énergie interne volumique e par la relation :

$$e(\varepsilon, s, \mathbf{z}) = \frac{\bar{E}(\bar{V}\varepsilon, S, \bar{\mathbf{Z}})}{V} = \sigma(\varepsilon, s, \mathbf{z}) : \varepsilon + T(\varepsilon, s, \mathbf{z})s - \mathbf{A}(\varepsilon, s, \mathbf{z}) \cdot \mathbf{z} \quad (\text{III.17})$$

Nous retiendrons également qu'une différentiation de la relation (III.15) suivie d'une division par le volume V mène à la relation de Gibbs-Duhem généralisée :

$$\varepsilon : d\sigma + sdT - \mathbf{z} \cdot d\mathbf{A} = 0 \quad (\text{III.18})$$

³Sous forme mécanique et/ou thermique dans notre étude.

⁴Ceci peut être traduit de manière plus détaillée à l'aide des outils de la Mécanique Statistique (voir par exemple [Ngo-1995]).

⁵Obtenue par un calcul strictement analogue au passage de l'équation (III.2) à l'équation (III.3).

III.1.3 Equations d'évolution thermodynamique du système

Nous sommes désormais en mesure d'écrire les équations thermodynamiques qui gouvernent le milieu. Pour ce faire, dérivons l'équation :

$$e(\varepsilon, s, z) = \frac{E(V\varepsilon, S, Z)}{V} \quad (\text{III.19})$$

par rapport aux variables de contrôles⁶ ε, s, z , ce qui (compte tenu des équations (III.5), (III.6), (III.7)) mène aux équations d'états du milieu :

$$\sigma(\varepsilon, s, z) = \frac{\partial e}{\partial \varepsilon}(\varepsilon, s, z) = e_{,\varepsilon}(\varepsilon, s, z) \quad (\text{III.20})$$

$$T(\varepsilon, s, z) = \frac{\partial e}{\partial s}(\varepsilon, s, z) = e_{,s}(\varepsilon, s, z) \quad (\text{III.21})$$

$$-A(\varepsilon, s, z) = \frac{\partial e}{\partial z}(\varepsilon, s, z) = e_{,z}(\varepsilon, s, z) \quad (\text{III.22})$$

Une dérivation totale de ces égalités par rapport au temps mène au système d'équations sous forme matricielle⁷ :

$$\begin{pmatrix} \dot{\sigma} \\ \dot{T} \\ -\dot{A}_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e_{,\varepsilon\varepsilon} & e_{,\varepsilon s} & e_{,\varepsilon z_k} \\ e_{,s\varepsilon} & e_{,ss} & e_{,sz_k} \\ e_{,z_i\varepsilon} & e_{,z_i s} & e_{,z_i z_k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{\varepsilon} \\ \dot{s} \\ \dot{z}_k \end{pmatrix} \quad (\text{III.23})$$

(pour $i = 1..n$ et somme pour $k = 1..n$). Pour synthétiser les notations, on introduit le "vecteur" $\mathbf{y} = (\varepsilon, s)^T$ des densités de variables extensives contrôlées et $\mathbf{Y} = (\sigma, T)^T$ le vecteur des variables duales associées (qualifiées d'observables). Le système peut donc se réécrire sous une forme condensée :

$$\begin{pmatrix} \dot{\mathbf{Y}} \\ -\dot{\mathbf{A}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{a}^u & \mathbf{b} \\ \mathbf{b}^T & \mathbf{g} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{\mathbf{y}} \\ \dot{\mathbf{z}} \end{pmatrix} \quad (\text{III.24})$$

où l'on a fait apparaître $\mathbf{a}^u = e_{,yy}$ qui est la matrice dite de Tisza, $\mathbf{b} = e_{,yz}$ la matrice de couplage, et $\mathbf{g} = e_{,zz}$ la matrice de dissipation. Cette relation est à la base des lois d'évolution DNLR qui, selon Cunat, s'inscrit dans le cadre d'une thermodynamique à degrés de liberté internes (TIDLI) lorsque les évolutions microstructurales sont décrites directement par des dynamiques au niveau atomique. Au voisinage de l'équilibre, nous supposons que les trois matrices \mathbf{a}^u , \mathbf{b} et \mathbf{g} sont constantes pour simplifier la présentation. Comme toute l'information thermodynamique sur le milieu est contenue dans le système (III.24), nous pouvons dès à présent revenir à notre fil conducteur et construire un lagrangien pour ce jeu d'équations. Notons que la cinétique des variables internes, nécessaire à la description complète du système, sera incluse ultérieurement dans ce lagrangien.

⁶Précisons qu'on entend par "variables de contrôle" les variables qui sont les arguments du potentiel thermodynamique e , ou de manière générale, du potentiel thermodynamique considéré. Ces variables de contrôles ne sont a priori pas toutes mesurables expérimentalement. On désigne par "observables" les variables duales de ces variables de contrôle.

⁷Pour synthétiser les notations, on pourra noter \dot{x} la dérivée totale par rapport au temps d'une grandeur quelconque x .

III.1.4 Construction d'un lagrangien pour les équations thermodynamiques

Pour vérifier les hypothèses du théorème (I.2.4) et construire un lagrangien pour le système (III.24), vérifions tout d'abord la condition d'auto-adjonction. Nous noterons $P = 0$ ce système, et nous le réécrivons sous la forme :

$$P = \begin{cases} P_Y(\mathbf{y}, \mathbf{z}) &= \dot{Y} - e_{,yy} \cdot \dot{\mathbf{y}} - e_{,yz} \cdot \dot{\mathbf{z}} = 0 \\ P_A(\mathbf{y}, \mathbf{z}) &= -\dot{A} - e_{,zy} \cdot \dot{\mathbf{y}} - e_{,zz} \cdot \dot{\mathbf{z}} = 0 \end{cases} \quad (\text{III.25})$$

Les expressions $P_Y(\mathbf{y}, \mathbf{z})$ et $P_A(\mathbf{y}, \mathbf{z})$ sont vues comme des fonctions explicites des variables de contrôle. La condition d'auto-adjonction de la dérivée de Fréchet de P s'écrit :

$$D_P = D_P^* \quad (\text{III.26})$$

Pour mener à bien ce calcul, introduisons les notations :

$$x_i = y_i \text{ et } P_i = P_{Y_i} \text{ pour } i = 1..m \quad (\text{III.27})$$

$$x_i = z_{i-m} \text{ et } P_i = P_{A_{i-m}} \text{ pour } i = m + 1..m + n \quad (\text{III.28})$$

où m est le nombre de variables contrôlées et n le nombre de processus. Le calcul de (III.26) se réécrit sous la forme :

$$\frac{\partial P_i}{\partial x_j} + \frac{\partial P_i}{\partial \dot{x}_j} D_t = \frac{\partial P_j}{\partial x_i} - D_t \left(\frac{\partial P_j}{\partial \dot{x}_i} \right) \quad (\text{III.29})$$

ce qui conduit aux relations :

$$(e_{,x_i x_k x_j} - e_{,x_k x_i x_j} - e_{,x_j x_k x_i} + e_{,x_k x_j x_i} + e_{,x_j x_i x_k} - e_{,x_i x_j x_k}) x_k = 0 \quad (\text{III.30})$$

$$e_{,x_i x_j} = e_{,x_j x_i} \quad (\text{III.31})$$

valables pour tout i, j et k variant de 1 à $m+n$. Ces relations sont équivalentes aux conditions de Maxwell sur l'énergie interne e , et sont donc trivialement vérifiées tant que l'énergie interne garde son statut de fonction potentielle⁸. Le système (III.24) est donc auto-adjoint, et on peut en construire un lagrangien par une application directe du théorème (I.2.4), soit :

$$L = \int_0^1 [\mathbf{y} \cdot P_Y(\lambda \mathbf{y}, \lambda \mathbf{z}) + \mathbf{z} \cdot P_A(\lambda \mathbf{y}, \lambda \mathbf{z})] d\lambda \quad (\text{III.32})$$

Compte tenu du caractère extensif de degré -1 des dérivées secondes de l'énergie :

$$e_{,yy}(\lambda \mathbf{y}, \lambda \mathbf{z}) = \frac{e_{,yy}(\mathbf{y}, \mathbf{z})}{\lambda} ; e_{,zy}(\lambda \mathbf{y}, \lambda \mathbf{z}) = \frac{e_{,zy}(\mathbf{y}, \mathbf{z})}{\lambda} ; e_{,zz}(\lambda \mathbf{y}, \lambda \mathbf{z}) = \frac{e_{,zz}(\mathbf{y}, \mathbf{z})}{\lambda} \quad (\text{III.33})$$

et de l'extensité d'ordre 0 des variables intensives lorsqu'elles sont considérées comme des fonctions explicites des variables contrôlées :

$$Y(\lambda \mathbf{y}, \lambda \mathbf{z}) = Y(\mathbf{y}, \mathbf{z}) ; A(\lambda \mathbf{y}, \lambda \mathbf{z}) = A(\mathbf{y}, \mathbf{z}) \quad (\text{III.34})$$

⁸Ce qui, rappelons le, correspond à l'hypothèse de base de l'approche DNLR.

nous pouvons écrire (voir les relations (III.25)) :

$$P_Y(\lambda y, \lambda z) = P_Y(y, z) \quad (\text{III.35})$$

$$P_A(\lambda y, \lambda z) = P_Y(y, z) \quad (\text{III.36})$$

et le lagrangien (III.32) prend la forme :

$$L = y \cdot \dot{Y} - z \cdot \dot{A} + e_{,y} \cdot \dot{y} + e_{,z} \cdot \dot{z} - \frac{d}{dt} (e_{,y} \cdot y + e_{,z} \cdot z) \equiv 0 \quad (\text{III.37})$$

Ce lagrangien est a priori égal à zéro, ce qui n'est pas directement exploitable sur le plan physique, car les équations thermodynamiques (les équations de Lagrange) se réduiraient aux égalités triviales $E(0) = 0$. Le théorème (I.2.6) nous permet toutefois d'affirmer que L pourrait se réécrire comme la dérivée totale par rapport au temps d'une fonction quelconque de y et z . Voyons comment obtenir une forme raisonnable pour L . Les conditions de Maxwell pour e étant satisfaites, nous pouvons supprimer le dernier terme de dérivation totale⁹ apparaissant dans l'équation (III.37). La relation de Gibbs-Duhem (III.18) réécrite à l'aide de dérivées temporelles et des notations condensées $y = (\varepsilon, s)^T$ et $Y = (\sigma, T)^T$ conduit à la relation :

$$\varepsilon : \dot{\sigma} + s \dot{T} - z \cdot \dot{A} = y \cdot \dot{Y} - z \cdot \dot{A} = 0 \quad (\text{III.38})$$

qui permet quant à elle de faire disparaître le premier terme de (III.37). Le lagrangien calculé ici peut donc se réécrire sous la forme de la dérivée totale par rapport au temps du potentiel énergie interne :

$$L = e_{,y} \cdot \dot{y} + e_{,z} \cdot \dot{z} = \frac{de(y, z)}{dt} \quad (\text{III.39})$$

On retrouve ici de manière formelle le lagrangien proposé par Rahouadj et al. ([Rah1-2002], [Rah2-2002]), mis en évidence dans le but d'analyser le formalisme DNLR dans le cadre de méthodes variationnelles. La condition de stationnarité de la nouvelle intégrale d'action $S = e$, strictement équivalente aux conditions de Maxwell, est donnée par :

$$\delta S = \delta e = \delta \int_0^t \frac{de}{dt} dt = \delta \int_0^t de = 0 \quad (\text{III.40})$$

et affirme que l'énergie interne garde son statut de fonction potentielle au cours de l'évolution du système. Nous voyons que le postulat d'existence du potentiel thermodynamique E (qui implique celle de e) génère un principe de stationnarité qui correspond aux équations d'états du milieu.

III.1.5 Généralisation à tout potentiel thermodynamique

Jusqu'à présent, nous avons admis que les variables de contrôle étaient la déformation ε , l'entropie s , et les variables internes z . D'un point de vue expérimental, il peut être plus commode de contrôler d'autres variables. Si on contrôle par exemple la température au lieu de l'entropie, il faut considérer l'énergie libre de Helmholtz f définie par la transformée de Legendre :

$$f = e - Ts = \sigma : \varepsilon - A \cdot z \quad (\text{III.41})$$

⁹Voir le théorème (I.2.6).

En effet, la différentiation de f mène à :

$$df = \sigma : d\varepsilon + \varepsilon : d\sigma - \mathbf{A} \cdot dz - z \cdot d\mathbf{A} \quad (\text{III.42})$$

Compte tenu de la relation de Gibbs-Duhem (III.18), qui traduit une liaison entre les intensités, l'équation (III.42) peut se réécrire :

$$df = \sigma : d\varepsilon - s dT - \mathbf{A} \cdot dz \quad (\text{III.43})$$

et la fonction f prend le statut de fonction potentielle car elle est exprimée en fonction de toutes les variables indépendantes relatives aux différentes formes d'énergie :

$$f = f(\varepsilon, T, z) \quad (\text{III.44})$$

Cette transformée de Legendre, qui traduit en fait la conservation de la variance du système, "transfère" sur f le caractère potentiel initialement propre à e .

On pourra donc retenir de manière beaucoup plus générale que si γ est le vecteur des variables de contrôle qui pourront par exemple être d'ordre :

- mécanique : contrainte σ , déformation ε .
- thermique : température T , entropie s .
- électrique : courant i , tension U , champ électrique \mathbf{E} .
- magnétique : champ magnétique \mathbf{H} .
- etc...

il existe alors un potentiel thermodynamique $\Psi(\gamma, z)$ qui contient toute l'information sur le système. Les équations DNLR qui régissent l'évolution de ce système s'écrivent :

$$\begin{pmatrix} \dot{\beta} \\ -\dot{\mathbf{A}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{a}^u & \mathbf{b} \\ \mathbf{b}^T & \mathbf{g} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{\gamma} \\ \dot{z} \end{pmatrix} \quad (\text{III.45})$$

dans laquelle apparaît une formulation plus générale de la matrice de Tisza \mathbf{a}^u , de la matrice de couplage \mathbf{b} et de la matrice de dissipation \mathbf{g} :

$$\mathbf{a}^u = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \gamma \partial \gamma} ; \quad \mathbf{b} = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \gamma \partial z} ; \quad \mathbf{g} = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z \partial z} \quad (\text{III.46})$$

Précisons que β est le vecteur des variables duales associées à γ . Le potentiel Ψ vérifiant par définition les conditions de Maxwell, un lagrangien pour le système (III.45) est trivialement donné par :

$$L = \dot{\Psi} = \Psi_{,\gamma}(\gamma, z) \dot{\gamma} + \Psi_{,z}(\gamma, z) \dot{z} \quad (\text{III.47})$$

Nous pouvons tirer une première conclusion des deux précédentes sections : l'existence du potentiel thermodynamique E au sens de l'axiomatique de Callen généralisée implique *de fait* :

- l'auto-adjonction du système d'équations thermodynamiques associé à l'énergie interne volumique e , et donc l'existence d'un lagrangien pour ce système sous la forme $L = \dot{e}$. Cet auto-adjonction est équivalent aux relations de Maxwell portant sur e .

– l’extension de cet auto-adjonction, par le jeu des transformées de Legendre¹⁰, à tout système d’équations thermodynamiques associé à un jeu de variables de contrôle quelconque.

Voyons à présent comment intégrer la cinétique des variables internes (qui se placent en dehors du cadre thermodynamique) au sein du Lagrangien proposé.

III.2 Relations cinétiques et spectre des relaxations dans le formalisme DNLR

III.2.1 Etat relaxé

On définit l’état relaxé comme étant un état de réorganisation interne isoaffin (voir par exemple Cunat [Cun-2004]). Il correspond à une perte d’autonomie des réactions chimiques qui deviennent alors totalement contrôlées par l’histoire de la sollicitation. Pour s’en convaincre, écrivons la définition de cet état relaxé :

$$\dot{\mathbf{A}}^r = 0 \quad (\text{III.48})$$

et remarquons que la deuxième équation du système (III.45) implique la relation :

$$\dot{z}^r = -\mathbf{g}^{-1}\mathbf{b}^T\dot{\gamma} \quad (\text{III.49})$$

dans laquelle l’évolution des degrés d’avancement \dot{z}^r est totalement gouvernée par le contrôle $\dot{\gamma}$. On peut réinjecter l’équation (III.49) dans la deuxième équation de (III.45) pour obtenir l’égalité :

$$\dot{\mathbf{A}} = -\mathbf{g}(\dot{\mathbf{z}} - \dot{z}^r) \quad (\text{III.50})$$

La matrice \mathbf{g} intervenant dans l’équation (III.50) étant supposée constante, on peut intégrer cette équation entre 0 et t sous la forme :

$$\mathbf{A} - \mathbf{A}(0) = -\mathbf{g}(\mathbf{z} - \mathbf{z}^r) + \mathbf{g}(\mathbf{z} - \mathbf{z}^r)(0) \quad (\text{III.51})$$

et en supposant que :

$$\mathbf{A}(0) = -\mathbf{g}(\mathbf{z} - \mathbf{z}^r)(0) \quad (\text{III.52})$$

il vient :

$$\mathbf{A} = -\mathbf{g}(\mathbf{z} - \mathbf{z}^r) \quad (\text{III.53})$$

Cette relation nous sera utile pour la suite.

III.2.2 Loi cinétique de Onsager

Lors d’une expérience, les variables internes \mathbf{z} n’ont pas le statut de variables contrôlables car elles sont le fruit d’une réaction de la matière en réponse à la sollicitation. Il convient donc de compléter les équations d’état (III.45)¹¹ par une loi de cinétique des variables internes. Cunat

¹⁰Dont la clé est, rappelons le, la relation de Gibbs-Duhem, donc la relation d’Euler.

¹¹Qui par ailleurs, sur le plan calculatoire, nécessitent une relation de fermeture pour être résolues.

propose d'introduire, en première approximation, une cinétique linéaire de type Onsager généralisée ([Cun-2004],[Cun-2001]) :

$$\dot{z} = L \cdot A \quad (\text{III.54})$$

où les coefficients de la matrice L (constants, et symétriques conformément au théorème d'Onsager) sont les coefficients cinétiques. En combinant les équations (III.54) et (III.53), il vient :

$$\dot{z} = -\tau^{-1} \cdot (z - z^r) \quad \text{avec} \quad \tau^{-1} = L \cdot g \quad (\text{III.55})$$

où l'on a défini "thermodynamiquement" les temps de relaxation par la relation $\tau = (L \cdot g)^{-1}$. Si on admet qu'il est toujours possible de découpler l'ensemble des réactions décrites par les variables z_k , ce qui se traduit mathématiquement par une diagonalisation de la matrice τ , chaque réaction peut être régie par l'équation cinétique :

$$\dot{z}_k = -\frac{z_k - z_k^r}{\tau_k} \quad (\text{III.56})$$

où τ_k est la $k^{\text{ème}}$ valeur propre de τ . L'ensemble des temps de relaxation est susceptible de dépendre du chargement imposé au VER. Nous présenterons ainsi une modélisation de ces temps de relaxation dans la section (III.3).

Les équations cinétiques (III.56) étant présentées, il nous reste à les intégrer dans le lagrangien $L = \dot{\Psi}$. En effet, rappelons que notre objectif est d'étudier les symétries contenues dans les équations de l'approche DNLR. Cette étude de symétrie, qui repose justement sur le problème variationnel associé au lagrangien des équations constitutives, conduira à de véritables propriétés physiques d'invariance uniquement si le lagrangien contient toute l'information sur le milieu.

III.2.3 Intégration de la loi cinétique dans le lagrangien

Le lagrangien $L = \dot{\Psi}$ conduit aux équations thermodynamiques de l'approche DNLR, mais ne contient pas les relations cinétiques (III.56) qui décrivent l'évolution des variables internes. Nous avons ainsi reformulé ce lagrangien en utilisant la technique des multiplicateurs de Lagrange, qui permet d'optimiser une intégrale fonctionnelle lorsque l'ensemble de fonctions admissibles est assujéti à une liaison. Ainsi, nous considérerons de manière formelle qu'intégrer les équations cinétiques (III.56) dans notre lagrangien revient à considérer le problème variationnel :

$$\delta \int_{t_0}^t \dot{\Psi} dt = 0 \quad \text{sous les contraintes} \quad \dot{z}_k + \frac{z_k - z_k^r}{\tau_k} = 0 \quad k = 1..n \quad (\text{III.57})$$

Notons que l'on peut réécrire ce problème en introduisant une forme intégrale pour les contraintes :

$$\delta \int_{t_0}^t \dot{\Psi} dt = 0 \quad \text{sous les contraintes} \quad \int_{t_0}^t \left(\dot{z}_k + \frac{z_k - z_k^r}{\tau_k} \right) dt = 0 \quad k = 1..n \quad (\text{III.58})$$

Les résultats classiques du calcul des variations (Bérest, [Ber-1997]) affirment l'existence de n multiplicateurs de Lagrange notés λ_k , et tels que la stationnarité du nouveau problème sans contraintes :

$$\delta \int_{t_0}^t \left[\dot{\Psi} + \sum_{k=1}^n \lambda_k \left(\dot{z}_k + \frac{z_k - z_k^r}{\tau_k} \right) \right] dt = 0 \quad (\text{III.59})$$

est équivalente au problème variationnel (III.58). Les équations de Lagrange associées à γ , z pour le nouveau lagrangien :

$$L = \dot{\Psi} + \sum_{k=1}^n \lambda_k \left(\dot{z}_k + \frac{z_k - z_k^r}{\tau_k} \right) = \Psi_{,\gamma} \dot{\gamma} + \Psi_{,z} \dot{z} + \sum_{k=1}^n \lambda_k \left(\dot{z}_k + \frac{z_k - z_k^r}{\tau_k} \right) \quad (\text{III.60})$$

s'écrivent :

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \gamma} \right) - \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \gamma \partial \gamma} \cdot \dot{\gamma} - \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \gamma \partial z} \cdot \dot{z} - \sum_{k=1}^n \lambda_k \left(\frac{\partial}{\partial \gamma} - \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{\gamma}} \right) \left(\dot{z}_k + \frac{z_k - z_k^r}{\tau_k} \right) = 0 \quad (\text{III.61})$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial z} \right) - \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z \partial \gamma} \cdot \dot{\gamma} - \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z \partial z} \cdot \dot{z} - \sum_{k=1}^n \lambda_k \left(\frac{\partial}{\partial z} - \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{z}} \right) \left(\dot{z}_k + \frac{z_k - z_k^r}{\tau_k} \right) = 0 \quad (\text{III.62})$$

et les équations relatives aux λ_k :

$$\frac{\partial L}{\partial \lambda_k} = 0 \quad (\text{III.63})$$

conduisent aux relations cinétiques (III.56). Les relations de Maxwell sur Ψ devant être satisfaites, la somme des trois premiers termes des équations (III.61) et (III.62) s'annule, et les multiplicateurs de Lagrange peuvent ainsi être donnés par le système d'équations :

$$\sum_{k=1}^n \lambda_k \left(\frac{\partial}{\partial \gamma} - \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{\gamma}} \right) \left(\dot{z}_k + \frac{z_k - z_k^r}{\tau_k} \right) = 0 \quad (\text{III.64})$$

$$\sum_{k=1}^n \lambda_k \left(\frac{\partial}{\partial z} - \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial \dot{z}} \right) \left(\dot{z}_k + \frac{z_k - z_k^r}{\tau_k} \right) = 0 \quad (\text{III.65})$$

Nous voyons que le lagrangien (III.60) contient toute l'information nécessaire à la description du VER. Il permet l'étude des groupes de symétries variationnelles de l'approche DNLR. Nous pouvons noter la dissociation fondamentale entre une information thermodynamique contenue dans $\dot{\Psi}$ et une information cinétique a priori indépendante de la précédente.

Une formulation lagrangienne "complète" pour l'approche DNLR étant acquise, il convient à présent de préciser la forme des temps de relaxation.

III.3 Modélisation du spectre des temps de relaxation DNLR

III.3.1 Première écriture

Comme nous l'avons dit, lorsqu'on fournit de l'énergie à un système mécanique en équilibre, l'état d'équilibre est excité et il est possible (si on fournit suffisamment d'énergie) que la configuration microstructurale soit modifiée. Pour modéliser les temps de relaxation définis "de manière thermodynamique" par la relation (III.55), Cunat propose de faire appel à la Mécanique Statistique. Le temps de relaxation du mode j (noté τ_j) est ainsi défini comme correspondant au temps caractéristique de passage d'un microétat initialement métastable à un autre microétat métastable, lorsque la barrière d'énergie nécessaire pour y parvenir a été franchie. On postule que ces temps de relaxation sont définis par :

$$\tau_j = \frac{1}{\nu_j p_j} \quad (\text{III.66})$$

où ν_j est la fréquence de saut vers l'état final j et p_j la probabilité d'occurrence de ce saut. Pour estimer la fréquence de saut élémentaire, supposée identique pour tous les modes par souci de simplicité, soit $\nu_j = \nu$, Cunat propose de retenir l'approximation de Guggenheim pour un degré de liberté de translation ([Gug-1939]), définie par :

$$h\nu_j = kT \quad \Rightarrow \quad \nu_j = \nu = \frac{kT}{h} \quad (\text{III.67})$$

où h est la constante de Planck et k la constante de Boltzmann. Bien entendu, la fréquence de saut d'un groupement de molécules peut différer de celle de Guggenheim, et en particulier dépendre de la vitesse de sollicitation imposée aux limites du VER. Pour corriger cette fréquence, on pourra donc introduire un facteur de glissement a_ν dans la relation (III.67), et retenir :

$$\frac{1}{\nu_j} = \frac{1}{\nu} = a_\nu(\dot{\mathbf{y}}, \mathbf{z}) \frac{h}{kT} \quad (\text{III.68})$$

Calculons maintenant la probabilité p_j . L'écriture choisie par Cunat se rattache à la théorie de l'état transitoire activé d'Eyring, si bien que la probabilité que la $j^{\text{ième}}$ "réaction chimique" ait lieu est ainsi donnée par l'exponentielle d'une barrière d'activation $\frac{\Delta F_j^+}{kT}$:

$$p_j = \exp\left(-\frac{\Delta F_j^+}{kT}\right) \quad (\text{III.69})$$

où ΔF_j^+ correspond à l'énergie libre à fournir pour parvenir à l'état final de cette réaction (voir figure III.1).

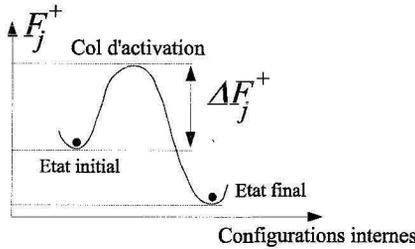


Fig. III.1: Représentation schématique de la barrière d'énergie libre ΔF_j^+ à fournir pour que la $j^{\text{ième}}$ réaction chimique ait lieu.

Retenons que le temps de relaxation (III.66) du mode j peut finalement se réécrire sous la forme :

$$\tau_j = a_\nu(\dot{\mathbf{y}}, \mathbf{z}) \frac{h}{kT} \exp\left(\frac{\Delta F_j^+}{kT}\right) \quad (\text{III.70})$$

III.3.2 Introduction de non linéarités

Si les sollicitations appliquées au système sont très importantes (cas de grandes déformations par exemple pour les polymères), alors la barrière que constitue l'énergie d'activation ΔF_j^+ est susceptible de dépendre du chargement, donc du temps. Pour affiner le modèle correspondant

à $\Delta F_j^+ = \text{constante}$, on peut procéder à un développement de cette énergie libre au premier ordre autour de l'équilibre :

$$\Delta F_j^+(t) = \Delta F_j^{+,r} + \Delta(\Delta F_j^+(t)) \quad (\text{III.71})$$

où $\Delta F_j^{+,r}$ est l'énergie libre d'activation de l'état relaxé (voir figure III.2).

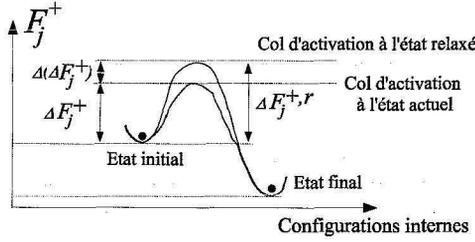


Fig. III.2: Représentation schématique de la variation de barrière d'énergie libre ΔF_j^+ au cours du chargement. Dans cet exemple, $\Delta(\Delta F_j^+)$ est négatif.

Pour le terme d'ordre 1, Cunat a retenu par exemple un terme linéaire par rapport aux observables β , supposé (toujours dans un souci de simplicité) identique pour tous les modes :

$$\Delta(\Delta F_j^+(t)) = \Delta(\Delta F^+(t)) = K_\beta \cdot (\beta - \beta^r) \quad (\text{III.72})$$

où β^r est le vecteur des observables à l'état relaxé. Ainsi, les temps de relaxation de l'équation (III.70) se réécrivent sous la forme (compte tenu de (III.71) et (III.72)) :

$$\tau_j = a_\nu(\dot{y}, z) \frac{h}{kT} \exp\left(\frac{\Delta F_j^{+,r}}{kT}\right) \exp\left(\frac{\Delta(\Delta F_j^+(t))}{kT}\right) = \tau_j^r a(t) \quad (\text{III.73})$$

où l'on a défini :

$$\begin{aligned} \tau_j^r &= \frac{h}{kT} \exp\left(\frac{\Delta F_j^{+,r}}{kT}\right) \quad \text{le temps de référence du mode } j \\ a(t) &= a_\nu(\dot{y}, z) \exp\left(\frac{K_\beta \cdot (\beta - \beta^r)}{kT}\right) \quad \text{le facteur de glissement} \end{aligned} \quad (\text{III.74})$$

Ce facteur de glissement $a(t)$ montre que l'ensemble du spectre $\{\tau_j\}$ est susceptible de dépendre du chargement appliqué. Dans la suite, on qualifiera de linéaire un comportement pour lequel $a(t) = 1$. Voyons à présent comment formuler le spectre de relaxation.

III.3.3 Spectre des relaxations

Tous les processus de réorganisation interne n'ont pas la même probabilité d'occurrence. La mesure de la contribution relative d'un mode à la réponse globale est donnée par un poids que Cunat définit à l'aide de l'écart type de la densité de probabilité associée à ce mode.

Examinons ceci sur un exemple¹², où l'on considère une éprouvette uniaxiale initialement en équilibre stable. A $t = 0$, on charge cette éprouvette à température constante (égale à la température ambiante) jusqu'à une déformation ε_0 .

On suppose que le temps t_0 mis pour atteindre la déformation ε_0 est très petit devant l'ordre de grandeur du plus petit temps de relaxation du système, soit $t_0 \ll \tau_{min}$, de sorte que l'on puisse supposer que la microstructure reste figée de 0 à t_0 . Si on admet dans un premier temps 1 seul processus de réorganisation interne associé au degré d'avancement z , nous avons :

$$z = z^0 = \text{constante} \quad \text{pour } t \in [0, t_0] \quad (\text{III.75})$$

Au delà de l'instant t_0 , la microstructure évolue à déformation imposée ($d\varepsilon = 0$) afin que la valeur de z minimise le potentiel énergie libre de Helmholtz (Meshaka [Mes-2002]). Les évolutions schématisées de $\varepsilon(t)$ et $z(t)$ sont représentées sur la figure III.3.

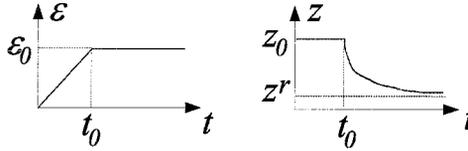


Fig. III.3: Allure des évolutions de $\varepsilon(t)$ et $z(t)$ pour notre exemple.

Ce retour à l'équilibre (état relaxé) peut être vu comme la régression spontanée d'une fluctuation d'entropie. Il se fait :

- sans échange d'énergie mécanique avec l'extérieur car $d\varepsilon = 0$.
- sans échange d'énergie thermique avec l'extérieur car on a supposé que la température restait égale à la température ambiante.

L'éprouvette peut ainsi être considérée comme un système isolé entre $t = t_0$ et $t = \infty$, et l'incrément d'entropie ds se réduit donc à l'incrément de production d'entropie interne ds_i . La relation fondamentale de Gibbs permet d'écrire :

$$de = \sigma : d\varepsilon + Tds - Adz = Tds_i - Adz = 0 \quad (\text{III.76})$$

On déduit facilement la production d'entropie :

$$\frac{ds_i}{dt} = \frac{A}{T} \frac{dz}{dt} \quad (\text{III.77})$$

Nous avons vu que dans le cas de sollicitations voisines de l'équilibre, la matrice de dissipation g pouvait être supposée constante. Conformément à l'équation (III.53), l'affinité peut donc s'écrire :

$$A(z) = -g(z - z^r) \quad (\text{III.78})$$

¹²L'exemple considéré ne limite pas la généralité des résultats exposés ici. Il permet une présentation simplifiée.

avec g scalaire et constant. L'entropie produite entre les instants t et $t = \infty$ correspondant aux deux états z et $z = z^r$ s'écrit donc :

$$\Delta s_i = \int_t^{\infty} \frac{ds_i}{dt} = \int_z^{z^r} -\frac{g}{T}(z - z^r)dz = \frac{g}{2T}(z - z^r)^2 \quad (\text{III.79})$$

La théorie des fluctuations d'Einstein montre, par inversion de la définition de l'entropie de Shannon, que la probabilité p_ε d'une fluctuation $\delta z = z - z^r$ de la variable interne z par rapport à l'état d'équilibre (ici l'état relaxé $z = z^r$, la déformation étant imposée) est donnée par :

$$p_\varepsilon = K \exp \frac{\Delta s_i}{k} \quad (\text{III.80})$$

où Δs_i est la production d'entropie de cette fluctuation. La constante K de l'équation (III.80) est une constante de normalisation donnée par :

$$\int p_\varepsilon = 1 \Rightarrow K = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(\frac{\Delta s_i}{k}\right) d(z - z^r) \quad (\text{III.81})$$

Compte tenu des relations (III.79), (III.80), et (III.81), nous déduisons que la densité de probabilité p_ε d'observer une fluctuation $\delta z = z - z^r$ est une gaussienne de moyenne z^r et d'écart type σ_z donnée par :

$$p_\varepsilon = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_z} \exp\left(-\frac{(z - z^r)^2}{2\sigma_z^2}\right) \quad (\text{III.82})$$

où σ_z vaut :

$$\sigma_z = \sqrt{\frac{kT}{g}} \quad (\text{III.83})$$

En multipliant numérateur et dénominateur par le coefficient cinétique L , on fait apparaître le temps de relaxation $\tau = (Lg)^{-1}$ défini dans l'équation (III.55) :

$$\sigma_z = \sqrt{\frac{kT}{g}} = \sqrt{\frac{kTL}{Lg}} = \text{constante} \times \sqrt{\tau} \quad (\text{III.84})$$

La généralisation de cette étude simplifiée à n processus (i.e. n modes, z et z^r deviennent des vecteurs z et z^r , et g devient une matrice g) conduit aux relations :

$$\Delta s_i = \frac{1}{2T} \sum_{j=1}^n g_{jj}(z_j - z_j^r)^2 \quad (\text{III.85})$$

$$p_\varepsilon = K \exp \frac{\Delta s_i}{k} \quad (\text{III.86})$$

$$K = \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(\frac{\Delta s_i}{k}\right) d(z_1 - z_1^r) d(z_2 - z_2^r) \dots d(z_n - z_n^r) \quad (\text{III.87})$$

On montre donc que chaque fluctuation du degré d'avancement z_j admet une distribution de probabilité gaussienne p_ε^j de moyenne z_j^r , et d'écart type σ_{z_j} (voir figure III.4) :

$$p_\varepsilon^j = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_{z_j}} \exp\left(-\frac{(z_j - z_j^r)^2}{2\sigma_{z_j}^2}\right) \quad (\text{III.88})$$

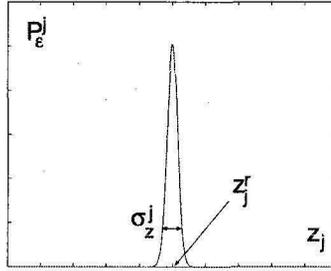


Fig. III.4: Représentation de la distribution de probabilité p_ϵ^j d'une fluctuation pour le mode j donnée par $\delta z_j = z_j - z_j^0$ à déformation imposée.

La probabilité que l'éprouvette soit le siège d'un jeu de fluctuations $\{\delta z_j, j = 1..n\}$ est donc donnée par :

$$p_\epsilon = \prod_{j=1}^n p_\epsilon^j \quad (\text{III.89})$$

Notons que, comme les processus ont été découplés par diagonalisation de la matrice des temps de relaxation τ , il est cohérent que la probabilité totale de fluctuation soit le produit des probabilités modales de fluctuation¹³.

La réponse dissipative engendrée par un stimulus des variables de contrôle (ici la déformation) et observée entre $t = t_0$ et $t = \infty$ (pour notre exemple) se fait donc par une superposition de n régressions spontanées de fluctuations d'entropie. La relation de proportionnalité entre écart type et racine du temps de relaxation est relativement conforme à l'intuition : il semble en effet cohérent que plus le processus est improbable, plus le temps de relaxation est grand et vice versa. Pour mesurer la contribution d'un mode à la réponse globale du système, Cunat propose de définir un poids p_j^0 à l'aide de l'écart type σ_{z_j} de la densité de probabilité p_ϵ^j :

$$p_j^0 = \frac{\sigma_{z_j}}{n \sum_{k=1}^n \sigma_{z_k}} \quad (\text{III.90})$$

qui, compte tenu de la proportionnalité évoquée dans l'équation (III.84), peut se réécrire :

$$p_j^0 = \frac{\sqrt{\tau_j}}{\sum_{k=1}^n \sqrt{\tau_k}} \quad (\text{III.91})$$

La donnée d'une suite de temps de relaxation τ_j associés à des poids p_j^0 constitue le spectre de relaxation de l'approche DNLR. Lors de la mise en oeuvre numérique, ce spectre est considéré comme un jeu de paramètres ajustables.

¹³En effet, la probabilité p de deux événements A et B indépendants est donnée par le produit des deux probabilités de A et B soit $p = p_A p_B$.

III.3.4 Conclusion

Retenons de ce chapitre que l'approche DNLN (utilisée pour décrire le comportement de milieux dissipatifs) s'appuie sur une généralisation de la relation d'Euler aux situations hors équilibre. Cette extension repose sur l'introduction d'un jeu de variables internes \mathbf{z} qui sont les degrés d'avancement de "réactions chimiques" modélisant les réorganisations internes de la matière.

De manière générale, si on désigne par γ les variables de contrôle et $\Psi(\gamma, \mathbf{z})$ le potentiel adéquat, les équations thermodynamiques de l'approche DNLN s'écrivent sous la forme :

$$\begin{pmatrix} \dot{\beta} \\ -\dot{\mathbf{A}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{a}^u & \mathbf{b} \\ \mathbf{b}^T & \mathbf{g} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{\gamma} \\ \dot{\mathbf{z}} \end{pmatrix} \quad (\text{III.92})$$

avec les sous-matrices :

$$\mathbf{a}^u = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \gamma \partial \gamma} ; \quad \mathbf{b} = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \gamma \partial \mathbf{z}} ; \quad \mathbf{g} = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \mathbf{z} \partial \mathbf{z}} \quad (\text{III.93})$$

Ces équations thermodynamiques sont complétées par des équations cinétiques qui prennent la forme suivante :

$$\dot{z}_j + \frac{z_j - z_j^r}{\tau_j} = 0 \quad k = 1..n \quad (\text{III.94})$$

La formulation du spectre des relaxations de l'approche DNLN provient du produit de (i) l'inverse d'une fréquence de saut d'un état métastable vers un autre état métastable par (ii) la probabilité de ce saut. Retenons ainsi la forme :

$$\tau_j = \tau_j^r a_{\nu}(\dot{\mathbf{y}}, \mathbf{z}) \exp \left(\frac{\mathbf{K}_{\beta} \cdot (\beta - \beta_r)}{kT} \right) \quad (\text{III.95})$$

La réponse dissipative observée lors d'un stimulus des variables de contrôle se fait par une compétition de n modes, qui sont chacun affectés d'un poids :

$$p_j^0 = \frac{\sqrt{\tau_j}}{\sum_{k=1}^n \sqrt{\tau_k}} \quad (\text{III.96})$$

Retenons enfin que nous avons construit un lagrangien conduisant à l'ensemble des relations constitutives (III.92) et (III.94). Ce lagrangien est donné par :

$$L = \dot{\Psi} + \sum_{k=1}^n \lambda_k \left(\dot{z}_k + \frac{z_k - z_k^r}{\tau_k} \right) \quad (\text{III.97})$$

Deuxième partie

Applications des groupes de Lie à des lois de comportements visqueux issues de l'approche DNLR



IV

Méthode générale de calcul des symétries variationnelles et première application expérimentale

Sommaire

IV.1 Procédure de calcul des groupes de symétries	67
IV.1.1 Cas des symétries variationnelles	67
IV.1.2 Cas des symétries contenues dans les équations	68
IV.1.3 Retour à l'approche DNLR	69
IV.1.4 Simplification de la condition de symétrie	71
IV.2 Première mise en oeuvre pour un comportement visqueux	73
IV.2.1 Formulation du problème	73
IV.2.2 Mise en évidence d'une symétrie particulière	75
IV.2.3 Validation expérimentale sur un polymère	77
IV.2.4 Comparaison avec la formule empirique de Williams, Landel et Ferry	80
IV.2.5 Discussion	81
IV.2.6 Conclusion	83

L'intérêt pratique des objets formels que sont les groupes de symétrie¹ est a priori double. Nous avons vu dans le premier chapitre que l'existence d'un groupe de symétrie pour une intégrale fonctionnelle permet d'aboutir à une loi de conservation via le théorème de Noether (voir par exemple Hill, [Hill-1951], Lévy-Leblond, [Lev-1970], Olver, [Olv-1989]).

Le deuxième intérêt des groupes de symétrie est qu'ils permettent d'obtenir des solutions analytiques à des EDP a priori quelconques (voir l'exemple (E.3.1) sur l'équation de la chaleur, et la synthèse en trois volumes proposée par Ibragimov [Ibr-1994], [Ibr-1995], [Ibr-1996], qui balaie un certain nombre de domaines de la physique). En ce qui concerne la Mécanique du solide, les groupes de Lie ont par exemple été utilisés par Özer, [Oze-2003], et Chirkunov, [Chir-1973] pour résoudre respectivement les équations de Navier et Lamé. Dans le même ordre d'idées, Senashov, [Sen-1980] et Annin, [Ann-1985], ont résolu l'équation de la plasticité parfaite.

Nous proposons dans la seconde partie de ce travail d'utiliser les groupes de symétries à des fins différentes. Nos travaux s'incrivent dans le prolongement de ceux menés par Rahouadj *et al*, [Rah2-2002], qui montrent la possibilité d'utiliser le formalisme des groupes de symétrie pour traduire formellement l'existence du principe d'équivalence temps-température. Notre ambition est analogue à celle des auteurs, quoique plus vaste, et nous allons aborder deux grandes "nouvelles" applications possibles des groupes de Lie :

- la première consiste à rechercher les symétries contenues dans une loi de comportement connue, de manière à dégager d'éventuelles propriétés d'invariance sur le milieu. L'existence d'une telle propriété peut mener à l'obtention d'une courbe maîtresse caractérisant la réponse du matériau.
- la seconde consiste à utiliser un principe de superposition expérimental comme un outil de modélisation, lorsque la loi de comportement n'est pas connue.

Dans ce chapitre, nous allons développer plus en détail le premier point qui vient d'être évoqué. Nous allons ainsi poser le problème du calcul des symétries d'une forme particulière d'approche DNLR, en ce sens que les variables internes à l'état relaxé et les temps de relaxation seront modélisés par des fonctionnelles connues des variables thermodynamiques. Pour mener effectivement le calcul, un choix reste à faire : faut-il rechercher les symétries contenues dans la fonctionnelle intégrale :

$$S = \int_{t_0}^{t_1} \left[\dot{\Psi} + \sum_{k=1}^n \lambda_k \left(\dot{z}_k + \frac{z_k - z_k^r}{\tau_k} \right) \right] dt \quad (\text{IV.1})$$

dont la stationnarité $\delta S = 0$ engendre les équations thermodynamiques et cinétiques de l'approche DNLR, ou faut-il chercher ces symétries directement à partir de ces dernières ? Pour répondre à cette question, présentons les méthodes générales de recherche de symétries et le lien qui les rapproche.

¹Inventés par le mathématicien Sophus Lie (1842-1899).

IV.1 Procédure de calcul des groupes de symétries

IV.1.1 Cas des symétries variationnelles

Rappelons très brièvement ici la méthode générale de calcul des symétries variationnelles d'une intégrale fonctionnelle² S donnée par :

$$S = \int_{\Omega} L(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(1)}) d\mathbf{x} \quad (IV.2)$$

Pour ce faire, considérons un groupe à un paramètre G donné par le jeu d'applications :

$$\bar{\mathbf{x}} = \bar{\mathbf{x}}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mu) \quad (IV.3)$$

$$\bar{\mathbf{u}} = \bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mu) \quad (IV.4)$$

où μ est le paramètre du groupe. On peut définir les variations $\delta\mathbf{x}$ et $\delta\mathbf{u}$ par un développement de Taylor à l'ordre 1 des relations (IV.3) et (IV.4) autour de la valeur $\mu = 0$ (voir la définition B.2.3), soit :

$$\bar{\mathbf{x}} = \mathbf{x} + \delta\mathbf{x} = \mathbf{x} + \mu \left. \frac{\partial \bar{\mathbf{x}}}{\partial \mu} \right|_{\mu=0} = \mathbf{x} + \mu \boldsymbol{\xi} \quad (IV.5)$$

$$\bar{\mathbf{u}} = \mathbf{u} + \delta\mathbf{u} = \mathbf{u} + \mu \left. \frac{\partial \bar{\mathbf{u}}}{\partial \mu} \right|_{\mu=0} = \mathbf{u} + \mu \boldsymbol{\phi} \quad (IV.6)$$

où l'on a fait apparaître les composantes dites horizontales $\boldsymbol{\xi} = \{\xi_j, j = 1..4\}$ et verticales $\boldsymbol{\phi} = \{\phi_j, j = 1..q\}$ du vecteur générateur \mathbf{v} associé à G :

$$\mathbf{v} = \sum_{j=1}^4 \xi_j(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \frac{\partial}{\partial x_j} + \sum_{j=1}^q \phi_j(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \frac{\partial}{\partial u_j} \quad (IV.7)$$

Le groupe G est (par définition) un groupe de symétrie pour la fonctionnelle intégrale S si la valeur de S est conservée par G :

$$S(\bar{\mathbf{u}}) = S(\mathbf{u} + \delta\mathbf{u}) = \int_{\Omega} L(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{u}}^{(1)}) d\bar{\mathbf{x}} = \int_{\Omega} L(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(1)}) d\mathbf{x} = S(\mathbf{u}) \quad (IV.8)$$

Le théorème (E.4.1) permet de reformuler la condition (IV.8) sous une forme plus "pratique", dans laquelle intervient le prolongement du générateur de G et le lagrangien de la fonctionnelle S :

$$pr^{(1)}\mathbf{v}L + LDiv\boldsymbol{\xi} = \hat{0} \quad (IV.9)$$

Rappelons ici que le prolongement à l'ordre 1 du champ de vecteur \mathbf{v} , noté $pr^{(1)}\mathbf{v}$, complète l'information contenue dans \mathbf{v} en ce sens qu'il contient des composantes ϕ_i^k pour chacune des dérivées $u_{i,k}$ ($k = 1..4$)³ :

$$\bar{u}_{i,k} = u_{i,k} + \mu \phi_i^k = u_{i,k} + \delta(u_{i,k}) \quad (IV.10)$$

Notons que les composantes ϕ_i^k sont calculées à partir des composantes ξ_k et ϕ_k (relation E.14).

²Ces résultats sont présentés plus en détail dans l'annexe E.

³Pour plus de précisions, voir la définition (E.2.1)

La méthode de calcul des groupes de symétries variationnelles de S consiste finalement à considérer un générateur v a priori inconnu sous la forme (IV.7) pour lequel on impose la condition (IV.9). Cette condition fournit une EDP portant sur les composantes ξ_k et ϕ_k , qui permettent ensuite d'aboutir à l'écriture explicite des groupes de symétrie⁴. Il n'est pas toujours possible de résoudre totalement cette EDP et d'aboutir à l'expression générale de ξ_k et ϕ_k .

IV.1.2 Cas des symétries contenues dans les équations

Pour remédier à ce problème, il est possible de calculer les symétries directement à partir des équations de Lagrange associées à S . Il a en effet été prouvé (voir par exemple Olver, [Olv-1989]) que si G est un groupe de symétrie pour la fonctionnelle S , alors c'est un groupe de symétrie pour les équations de Lagrange⁵ de S . Par suite, l'ensemble G_Δ des symétries des équations de Lagrange associées à S contient l'ensemble G_S des symétries variationnelles de S (voir figure IV.1).

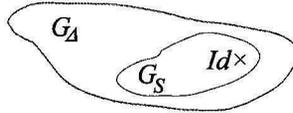


Fig. IV.1: Représentation schématique de l'inclusion de G_S dans G_Δ . Le groupe "identité" noté Id est donné par $\bar{x} = x$ et $\bar{u} = u$ est commun aux deux ensembles.

Les symétries des équations de Lagrange $\Delta = E(L)$ peuvent être calculées grâce au théorème (E.3.1) qui exige ainsi que :

$$pv^{(1)}\Delta = 0 \quad \text{partout où} \quad \Delta = 0 \tag{IV.11}$$

En général, cette condition permet de trouver toutes les symétries du jeu d'équations $\Delta = 0$ ([Olv-1989]), donc la connaissance de l'ensemble complet G_Δ . L'inconvénient majeur de cette approche est la lourdeur des calculs qu'elle implique. Nous avons testé cette méthode sur plusieurs formulations très simplifiées de l'approche DNLR⁶, et certains programmes Maple® ont été exécutés pendant une journée complète sans résultats, en dépassant souvent la mémoire disponible sur nos machines. Pour pouvoir aboutir "au moins" à quelques solutions, nous avons choisi de calculer (dans un premier temps) les symétries de l'approche DNLR à partir de sa formulation variationnelle, donc dans l'ensemble G_S . Nous aboutissons ainsi à une formulation plus "compacte" de la condition de symétrie. L'inconvénient de cette méthode, quoique plus "légère", est qu'elle ne fournit pas toutes les symétries contenues dans les équations DNLR (rappelons que $G_S \subset G_\Delta$). Ajoutons de plus que la résolution complète de la condition de symétrie ne permet pas toujours de calculer tous les éléments de G_S .

⁴L'intégration des composantes dans le but d'obtenir l'expression explicite du groupe G constitue l'exponentielle du générateur v (voir le théorème (E.1.1))

⁵Rappelons ici qu'un groupe de symétrie pour une équation différentielle $\Delta = 0$ transforme une solution de Δ en une autre solution de Δ .

⁶Nous entendons par "simplifiée" la prise en compte d'un seul mode dissipatif, et le calcul des groupes de symétries sur un sous système du système d'équations complet, comme l'équation en contrainte seule par exemple.

Avant de poursuivre, précisons que le formalisme classique des groupes de symétrie nécessite ici d'être "généralisé" afin de prendre en compte le statut des différentes variables thermodynamiques. Une fois cette méthode générale exposée, nous la mettrons immédiatement en oeuvre dans le cas d'une approche DNLR simplifiée, ce qui nous permettra de dégager un principe de superposition faisant intervenir les variables temps t et température T . Voyons à présent comment formuler plus précisément la condition de symétrie variationnelle.

IV.1.3 Retour à l'approche DNLR

On choisit dans toute la suite de notre rapport de travailler avec le potentiel énergie libre de Helmholtz⁷, dans lequel intervient une contrainte σ scalaire⁸ :

$$df = df(\varepsilon, T, \mathbf{z}) = \sigma(\varepsilon, T, \mathbf{z})d\varepsilon - s(\varepsilon, T, \mathbf{z})dT - \mathbf{A}(\varepsilon, T, \mathbf{z}) \cdot d\mathbf{z} \quad (IV.12)$$

Nous avons vu au chapitre précédent (voir la section (III.2.3)) qu'une formulation variationnelle possible pour l'ensemble des équations DNLR s'écrivait sous la forme :

$$S = \int_{t_0}^t \left[\dot{f} + \sum_{k=1}^n \lambda_k \left(\dot{z}_k + \frac{z_k - z_k^T}{\tau_k} \right) \right] dt \quad (IV.13)$$

Rappelons que la stationnarité de cette intégrale d'action vis à vis des variables de contrôle $\varepsilon, T, \mathbf{z}$ et des multiplicateurs de Lagrange λ conduit aux équations⁹ thermodynamiques (qui impliquent que la fonction f garde son statut de fonction potentielle) et cinétiques.

La recherche des symétries contenues dans ce problème variationnel revient ainsi à trouver tous les générateurs v qui satisfont la condition (IV.9) avec :

$$L = \dot{f} + \sum_{k=1}^n \lambda_k \left(\dot{z}_k + \frac{z_k - z_k^T}{\tau_k} \right) \quad (IV.14)$$

La difficulté majeure que nous avons rencontrée lors de l'application de la condition (IV.9) provient du statut des différentes variables thermodynamiques considérées ici :

$$t, \varepsilon, T, \mathbf{z}, \sigma, s, \mathbf{A} \quad (IV.15)$$

Sur le plan physique, il faut bien noter que les variables σ, s, A_k sont des observables, et qu'elles ne peuvent en aucun cas avoir le même statut que les variables indépendantes de contrôle ε, T , et z_k . Mathématiquement, ceci se traduit par le fait que σ, s, A_k doivent être considérées comme des fonctions explicites de ε, T , et z_k (voir par exemple la relation (IV.12)). Cette remarque soulève une différence profonde entre les variables intervenant dans le cadre des groupes de symétrie et celles propres à la thermodynamique. Sur le plan mathématique, la théorie de la géométrie différentielle exige la considération de deux jeux de variables :

⁷Le fait de considérer ce potentiel ne limite aucunement la méthodologie exposée ici. Cela permet simplement une écriture plus "lisible" de nos équations.

⁸On fait cette hypothèse car elle est conforme aux situations expérimentales que nous rencontrerons dans la suite.

⁹Les multiplicateurs de Lagrange sont donnés par les équations (III.64) et (III.65)

- un jeu de variables indépendantes $x_i, i = 1..4$. Nous nous restreignons ici à l'unique variable t qui est le temps.
- un jeu de variables dépendantes $u_i(x_j)$,

Les variables thermodynamiques (IV.15) semblent sortir de ce cadre puisqu'elles se classent en :

- un jeu de variables ayant le statut de paramètres : la variable temps t (et éventuellement les variables d'espace r).
- un jeu de variables de contrôle paramétrées par le temps : ε, T, z_k si on travaille avec l'énergie libre de Helmholtz.
- un jeu de variables observables : $\sigma(\varepsilon, T, z_k), s(\varepsilon, T, z_k), A_i(\varepsilon, T, z_k)$.

Cette profonde différence entre variables nous a obligé à "généraliser" la notion de vecteur générateur, ce que nous allons montrer à présent. Pour construire notre méthode de calcul, nous avons travaillé dans un premier temps sur la variété $I \times \mathbb{M}_{con}$ engendrée par (i) la variable temps t évoluant dans un intervalle I , et (ii) les variables de contrôle ε, T, z_k définissant l'espace¹⁰ \mathbb{M}_{con} . Nous considérons ainsi comme variable indépendante $x_1 = t$ et comme variables dépendantes u les variables thermodynamiques de contrôle :

$$u_1 = \varepsilon(t) ; u_2 = T(t) ; u_{2+k} = z_k(t), k = 1..n \quad (IV.16)$$

Introduisons un générateur v_{con} sur $I \times \mathbb{M}_{con}$ sous la forme¹¹ :

$$v_{con} = \xi \frac{\partial}{\partial t} + \phi^\varepsilon \frac{\partial}{\partial \varepsilon} + \phi^T \frac{\partial}{\partial T} + \phi^{z_k} \frac{\partial}{\partial z_k} \quad (IV.17)$$

où $\xi, \phi^\varepsilon, \phi^T$, et ϕ^{z_k} sont a priori des fonctions inconnues. Ce générateur permet de définir des variations $\delta\varepsilon, \delta T$, et δz_k qui s'écrivent (voir les relations (IV.5) et (IV.6)) :

$$\delta\varepsilon = \mu\phi^\varepsilon ; \delta T = \mu\phi^T ; \delta z_k = \mu\phi^{z_k} \quad (IV.18)$$

Remarquons maintenant que les équations d'état :

$$\sigma = f_{,\varepsilon}(\varepsilon, T, z) ; s = -f_{,T}(\varepsilon, T, z) ; A_i = -f_{,z_i}(\varepsilon, T, z) \quad (IV.19)$$

sous-tendent que les variations (IV.18) impliquent *de fait* des variations $\delta\sigma, \delta s$, et δA_k données par :

$$\delta\sigma = f_{,\varepsilon\varepsilon}\delta\varepsilon + f_{,T\varepsilon}\delta T + f_{,z_k\varepsilon}\delta z_k \quad (IV.20)$$

$$\delta s = -f_{,\varepsilon T}\delta\varepsilon - f_{,TT}\delta T - f_{,z_k T}\delta z_k \quad (IV.21)$$

$$\delta A_i = -f_{,\varepsilon z_i}\delta\varepsilon - f_{,T z_i}\delta T - f_{,z_k z_i}\delta z_k \quad (IV.22)$$

et qui possèdent la structure des lois d'évolutions DNLR. Par suite, l'écriture même du générateur (IV.17) doit induire (i) l'extension de l'espace $I \times \mathbb{M}_{con}$ à l'espace de toutes les

¹⁰L'indice "con" se réfère à "contrôlable".

¹¹On adopte désormais la convention de sommation sur l'indice k . La somme porte sur tous les modes, soit pour $k = 1..n$. On intègre la composante vis à vis du temps t dans v_{con} bien que t n'ait pas le statut de variable contrôlable.

variables thermodynamiques (et le temps) $(t, \varepsilon, T, z, \sigma, s, \mathbf{A})$ que nous noterons $I \times \mathbb{M}_{con} \times \mathbb{M}_{obs}$, où \mathbb{M}_{obs} est engendré par σ, s, \mathbf{A} et (ii) l'existence de composantes ϕ^σ, ϕ^s et ϕ^{A_k} pour les observables σ, s et A_k , donc l'existence d'un champ de vecteur v_{obs} sous la forme¹² :

$$v_{obs} = \phi^\sigma \frac{\partial}{\partial \sigma} + \phi^s \frac{\partial}{\partial s} + \phi^{A_k} \frac{\partial}{\partial A_k} \quad (IV.23)$$

Les composantes ϕ^σ, ϕ^s , et ϕ^{A_k} de ce générateur peuvent être obtenues en divisant les relations (IV.20), (IV.21) et (IV.22) par μ , ce qui compte tenu des égalités (IV.18), mène à :

$$\phi^\sigma = f_{,\varepsilon\varepsilon} \phi^\varepsilon + f_{,T\varepsilon} \phi^T + f_{,z_k\varepsilon} \phi^{z_k} \quad (IV.24)$$

$$\phi^s = -f_{,\varepsilon T} \phi^\varepsilon - f_{,TT} \phi^T - f_{,z_k T} \phi^{z_k} \quad (IV.25)$$

$$\phi^{A_i} = -f_{,\varepsilon z_i} \phi^\varepsilon - f_{,T z_i} \phi^T - f_{,z_k z_i} \phi^{z_k} \quad (IV.26)$$

L'idée nouvelle apportée ici¹³ est donc que le champ de vecteur v nécessaire à l'étude des symétries de S doit être scindé en deux "sous-vecteurs" v_{con} et v_{obs} afin de rendre compte de la nature thermodynamique des variables. Nous calculerons les symétries variationnelles de l'approche DNLR à partir d'un générateur "complet" sur $I \times \mathbb{M}_{con} \times \mathbb{M}_{obs}$:

$$v = v_{con} + v_{obs} = \underbrace{\xi \frac{\partial}{\partial t} + \phi^\varepsilon \frac{\partial}{\partial \varepsilon} + \phi^T \frac{\partial}{\partial T} + \phi^{z_k} \frac{\partial}{\partial z_k}}_{v_{con}} + \underbrace{\phi^\sigma \frac{\partial}{\partial \sigma} + \phi^s \frac{\partial}{\partial s} + \phi^{A_k} \frac{\partial}{\partial A_k}}_{v_{obs}} \quad (IV.27)$$

en gardant à l'esprit que les composantes du "sous-vecteur" v_{obs} sont données par celles de v_{con} via les relations (IV.24), (IV.25) et (IV.26). Le prolongement du générateur (IV.27) est donné par l'application de la définition (E.2.1) ce qui mène à :

$$\begin{aligned} pr^{(1)}v &= \xi \frac{\partial}{\partial t} + \phi^\varepsilon \frac{\partial}{\partial \varepsilon} + \phi^T \frac{\partial}{\partial T} + \phi^{z_k} \frac{\partial}{\partial z_k} + \phi^\sigma \frac{\partial}{\partial \sigma} + \phi^s \frac{\partial}{\partial s} \\ &+ \phi^{A_k} \frac{\partial}{\partial A_k} + (\dot{\phi}^\varepsilon - \dot{\xi} \varepsilon) \frac{\partial}{\partial \dot{\varepsilon}} + (\dot{\phi}^T - \dot{\xi} T) \frac{\partial}{\partial \dot{T}} + (\dot{\phi}^{z_k} - \dot{\xi} z_k) \frac{\partial}{\partial \dot{z}_k} \\ &+ (\dot{\phi}^\sigma - \dot{\xi} \sigma) \frac{\partial}{\partial \dot{\sigma}} + (\dot{\phi}^s - \dot{\xi} s) \frac{\partial}{\partial \dot{s}} + (\dot{\phi}^{A_k} - \dot{\xi} A_k) \frac{\partial}{\partial \dot{A}_k} \end{aligned} \quad (IV.28)$$

IV.1.4 Simplification de la condition de symétrie

Nous sommes désormais en mesure d'appliquer la condition de symétrie :

$$pr^{(1)}vL + LDiv\xi = 0 \quad (IV.29)$$

où le prolongement du générateur v et le lagrangien L sont respectivement donnés par les relations (IV.28) et (IV.14), compte tenu du fait que la divergence totale $Div\xi$ prend ici la forme¹⁴ :

$$Div\xi = D_t \xi = \dot{\xi} \quad (IV.30)$$

¹²L'indice "obs" se réfère à "observable".

¹³En ce sens qu'elle sort du cadre de calcul "usuel" de la géométrie différentielle.

¹⁴La variable t est ici la seule variable indépendante.

Nous avons scindé le lagrangien (IV.14) en deux contributions¹⁵ :

$$L = L_{thermo} + L_{cine} \quad (IV.31)$$

avec :

$$L_{thermo} = f \quad \text{et} \quad L_{cine} = \sum_{k=1}^n \lambda_k \left(\dot{z}_k + \frac{z_k - z_k^T}{\tau_k} \right) \quad (IV.32)$$

car ceci va nous permettre de simplifier la condition de symétrie (IV.29). En effet, remarquons que :

$$\begin{aligned} pr^{(1)} \mathbf{v} L_{thermo} + L_{thermo} \dot{\xi} &= pr^{(1)} \mathbf{v} \left(f_{,\varepsilon} \dot{\varepsilon} + f_{,T} \dot{T} + f_{,z_k} \dot{z}_k \right) + \left(f_{,\varepsilon} \dot{\varepsilon} + f_{,T} \dot{T} + f_{,z_k} \dot{z}_k \right) \dot{\xi} \\ &= \frac{d}{dt} \left(f_{,\varepsilon} \phi^\varepsilon + f_{,T} \phi^T + f_{,z_k} \phi^{z_k} \right) \end{aligned} \quad (IV.33)$$

ce qui mène après multiplication par le paramètre μ et la prise en compte des variations (IV.18) :

$$\frac{d}{dt} (\mu f_{,\varepsilon} \phi^\varepsilon + \mu f_{,T} \phi^T + \mu f_{,z_k} \phi^{z_k}) = \frac{d}{dt} (f_{,\varepsilon} \delta \varepsilon + f_{,T} \delta T + f_{,z_k} \delta z_k) = \frac{d}{dt} (\delta f) \quad (IV.34)$$

Le dernier terme de l'équation (IV.34) fait intervenir l'expression δf que l'on peut calculer comme suit :

$$\delta f = \delta \int_0^t \dot{f} dt = \int_0^t [(f_{,x_i x_j} - f_{,x_j x_i}) \dot{x}_j \delta x_i] dt = 0 \quad \text{avec } \mathbf{x} = \varepsilon, T, z_k \quad (IV.35)$$

(somme pour $j = 1..3$ et $i..3$) et qui s'identifie à 0 compte tenu des conditions de Maxwell sur f . On retiendra donc de (IV.34) et (IV.35) que la relation :

$$pr^{(1)} \mathbf{v} L_{thermo} + L_{thermo} Div \xi = \frac{1}{\mu} \delta \int_0^t \dot{f} dt = 0 \quad (IV.36)$$

est satisfaite pour tout générateur \mathbf{v} de la forme (IV.27). Pour illustrer ce propos, considérons simplement un comportement élastique dans l'exemple :

EXEMPLE IV.1.1 : Imaginons que l'énergie libre de Helmholtz soit donnée par :

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{2} E \varepsilon^2 \quad (IV.37)$$

où E est le module de Young. Le générateur (IV.27), compte tenu de (IV.34) se réduit à l'expression¹⁶ :

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_{con} + \mathbf{v}_{obs} = \xi \frac{\partial}{\partial t} + \phi^\varepsilon \frac{\partial}{\partial \varepsilon} + E \phi^\varepsilon \frac{\partial}{\partial \sigma} \quad (IV.38)$$

et montre qu'une variation $\delta \varepsilon$ donnée par $\mu \phi^\varepsilon$ implique *de fait* une variation $E \delta \varepsilon$ pour la contrainte σ . Ceci revient en quelque sorte à dire que le générateur \mathbf{v} contient l'équation d'état :

$$\sigma = f_{,\varepsilon}(\varepsilon) = E \varepsilon \quad (IV.39)$$

¹⁵L'indice "thermo" se rattache à l'information thermodynamique tandis que l'indice "cine" évoque l'information cinétique.

¹⁶L'espace d'étude se réduit ici à l'espace $I \times \mathbb{M}_{con}$ engendré par les variables (t, ε) qui s'étend à $I \times \mathbb{M}_{con} \times \mathbb{M}_{obs}$ engendré par (t, ε, σ) lorsqu'on prend en compte l'existence de \mathbf{v}_{obs} .

La condition de symétrie sur la première partie du lagrangien L , que nous avons notée :

$$L_{thermo} = \dot{f} = E\dot{\varepsilon}\varepsilon \quad (IV.40)$$

soit :

$$pr^{(1)}\mathbf{v}\dot{f} + \dot{f}\dot{\xi} = 0 \quad (IV.41)$$

s'écrit ici, compte tenu de (IV.28) :

$$\left(\xi \frac{\partial}{\partial t} + \phi^e \frac{\partial}{\partial \varepsilon} + E\phi^e \frac{\partial}{\partial \sigma} + (\dot{\phi}^e - \dot{\xi}\dot{\varepsilon}) \frac{\partial}{\partial \dot{\varepsilon}} + (\dot{\phi}^\sigma - \dot{\xi}\dot{\sigma}) \frac{\partial}{\partial \dot{\sigma}} \right) (E\varepsilon\dot{\varepsilon}) + (E\varepsilon\dot{\varepsilon})\dot{\xi} = 0 \quad (IV.42)$$

et se simplifie sous la forme :

$$\frac{d}{dt}(E\varepsilon\phi^e) = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt}(E\varepsilon\delta\varepsilon) = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt}(\delta f) = 0 \quad (IV.43)$$

Cette condition est trivialement satisfaite le long de la solution de l'équation de Lagrange car :

$$\frac{d}{dt}(\delta f) = \frac{d}{dt} \left(\delta \int_0^t \dot{f} dt \right) = \frac{d}{dt} \left(\delta \int_0^t \left(\frac{\partial \dot{f}}{\partial \varepsilon} - \frac{d}{dt} \frac{\partial \dot{f}}{\partial \dot{\varepsilon}} \right) \delta \varepsilon dt \right) = \frac{d}{dt} \left(\delta \int_0^t (E\dot{\varepsilon} - E\dot{\varepsilon}) \delta \varepsilon dt \right) = 0 \quad (IV.44)$$

Concluons ainsi cette section en affirmant que sur le plan physique, toute l'information thermodynamique a été "transférée" sur le générateur (IV.27) (via les relations (IV.24), (IV.25), et (IV.26)) qui contient en lui même les équations d'état. Il semble donc cohérent d'observer que le terme L_{thermo} n'apporte pas de contribution dans le calcul des symétries. Finalement, la condition de symétrie (IV.29) se réduit à :

$$pr^{(1)}\mathbf{v}L_{cine} + L_{cine}Div\xi = pr^{(1)}\mathbf{v}L_{cine} + L_{cine}\dot{\xi} = 0 \quad (IV.45)$$

où L_{cine} est donné par (IV.32). Sur le plan physique, l'écriture de L_{cine} nécessite une modélisation (i) de l'état relaxé (via le terme z_k^r de (IV.32)) et (ii) du spectre de relaxation (terme τ_k). La méthode de recherche des symétries variationnelles étant exposée, nous sommes désormais en mesure de l'appliquer à une situation particulière de l'approche DNLr.

IV.2 Première mise en oeuvre pour un comportement visqueux

IV.2.1 Formulation du problème

On se propose dans cette section de présenter une première application de la méthode de calcul de symétries variationnelles pour un comportement visqueux isotherme ($\dot{T} = 0$), que l'on pourra qualifier de "thermo-élasto-visco-plastique". Nous nous plaçons dans le cas simplifié où l'expression du facteur de glissement $a(t)$ (équation (III.74)) se réduit à¹⁷ $a(t) = 1$. Le spectre des temps de relaxation retenue se réduit donc à la forme (équation (III.74)) :

$$\tau_k = \frac{h}{kT} \exp\left(\frac{\Delta F_k^+}{RT}\right) = \frac{h}{kT} \exp\left(\frac{\Delta H_k^+ - T\Delta S_k^+}{RT}\right) \quad k = 1..n \quad (IV.46)$$

où ΔH_k^+ et ΔS_k^+ sont respectivement l'enthalpie et l'entropie d'activation du mode k . Nous supposons le matériau rhéologiquement simple, ce qui se traduit par le fait que l'enthalpie

¹⁷On qualifie parfois cette approche de DLR (Distribution of Linear Relaxations), puisqu'elle ne prend pas en compte les effets de non linéarité contenus dans le facteur de glissement $a(t)$.

d'activation est identique pour tous les modes, soit $\Delta H_k^+ = \Delta H^+$. Les équations DNLR (III.45) associées à l'énergie libre f dans lesquelles on a injecté les relations cinétiques :

$$\dot{z}_k = -\frac{z_k - z_k^r}{\tau_k} \quad k = 1..n \quad (IV.47)$$

peuvent se réécrire (compte tenu du fait que $\dot{T} = 0$) :

$$\begin{cases} \dot{\sigma} - E_u \dot{\varepsilon} + \sum_{k=1}^n b_k^1 \frac{z_k - z_k^r}{\tau_k} = 0 \\ -\dot{s} + \alpha_u E_u \dot{\varepsilon} + \sum_{k=1}^n b_k^2 \frac{z_k - z_k^r}{\tau_k} = 0 \\ -\dot{A}_i - b_i^1 \dot{\varepsilon} + \sum_{k=1}^n g_{ik} \frac{z_k - z_k^r}{\tau_k} = 0 \quad i = 1..n \end{cases} \quad (IV.48)$$

où les constantes E_u (module de Young instantané), b_k^1 , α_u (coefficient de dilatation), b_k^2 , et g_{ik} sont définies à partir des dérivées secondes de l'énergie libre de Helmholtz f :

$$E_u = f_{,\varepsilon\varepsilon} ; b_k^1 = f_{,\varepsilon z_k} ; -\alpha_u E_u = f_{,\varepsilon T} ; b_k^2 = f_{,T z_k} ; g_{ik} = f_{,z_i z_k} \quad (IV.49)$$

Introduisons également le coefficient C_u (chaleur spécifique) défini par l'égalité :

$$\frac{C_u}{T} = f_{,TT} \quad (IV.50)$$

La valeur z_k^r de la $k^{\text{ième}}$ variable interne à l'état relaxé est donnée par la condition $-\dot{A}_k^r = 0$. Calculons cette valeur grâce à la troisième équation de (IV.48) combinée à (IV.47) :

$$-\dot{A}_i^r = 0 = b_i^1 \dot{\varepsilon} + \sum_{k=1}^n g_{ik} \dot{z}_k^r \Rightarrow \dot{z}_k^r = -\sum_{i=1}^n (g^{-1})_{ki} b_i^1 \dot{\varepsilon} \quad (IV.51)$$

En première approximation, nous supposons que les constantes apparaissant dans l'intégration de (IV.51) sont nulles, ce qui implique que z_k^r ne dépend que de la déformation ε :

$$z_k^r = -\sum_{i=1}^n (g^{-1})_{ki} b_i^1 \varepsilon = c_k \varepsilon \quad k = 1..n \quad (IV.52)$$

où les c_k sont des constantes¹⁸. La partie cinétique L_{cine} du lagrangien donnée par la relation (IV.32) dans laquelle on injecte (IV.46) et (IV.47) prend donc la forme :

$$L_{cine} = \sum_{k=1}^n \lambda_k \left(\dot{z}_k + \frac{z_k - c_k \varepsilon}{\frac{\hbar}{\kappa T} \exp\left(\frac{\Delta H^+ - T \Delta S_k^+}{H I}\right)} \right) \quad (IV.53)$$

Ceci étant posé, rappelons que la recherche des symétries variationnelles pour le comportement visqueux considéré ici peut mener à des propriétés d'invariance. Le calcul de ces symétries se fait à l'aide de la condition :

$$pr^{(1)} v L_{cine} + L_{cine} \dot{\xi} = 0 \quad (IV.54)$$

où le prolongement du vecteur générateur v est donné par l'équation (IV.28) et L_{cine} par (IV.53).

¹⁸Rappelons ici que nous avons supposé (par souci de simplicité) que toutes les dérivées secondes de f sont constantes.

IV.2.2 Mise en évidence d'une symétrie particulière

❶ **Forme générale** : A l'aide d'un programme réalisé avec le logiciel de calcul formel Maple®, nous avons cherché par "tâtonnements"¹⁹ des solutions à la condition de symétrie (IV.54). Nous avons pu mettre en évidence la solution particulière :

$$v_0 = \xi \frac{\partial}{\partial t} + \phi^T \frac{\partial}{\partial T} + \phi^\sigma \frac{\partial}{\partial \sigma} + \phi^s \frac{\partial}{\partial s} + \phi^{A_k} \frac{\partial}{\partial A_k} \quad (\text{IV.55})$$

avec :

$$\xi = t ; \quad \phi^T = -\frac{RT^2}{RT + \Delta H^+} ; \quad \phi^\sigma = -\alpha_u E_u \phi^T ; \quad \phi^s = -\frac{C_u}{T} \phi^T ; \quad \phi^{A_k} = -b_k^2 \phi^T \quad (\text{IV.56})$$

Les composantes en ε et z_k de cette solution particulière sont nulles :

$$\phi^\varepsilon = 0 ; \quad \phi^{z_k} = 0 \quad (\text{IV.57})$$

L'expression du groupe G_0 associé au générateur (IV.55) est, conformément au théorème (E.1.1), donnée par la résolution du système différentiel :

$$\frac{d\bar{t}}{d\mu} = \bar{t} ; \quad \frac{d\bar{T}}{d\mu} = -\frac{R\bar{T}^2}{R\bar{T} + \Delta H^+} ; \quad \frac{d\bar{\sigma}}{d\mu} = \frac{\alpha_u E_u R\bar{T}^2}{R\bar{T} + \Delta H^+} ; \quad \frac{d\bar{\varepsilon}}{d\mu} = 0 \quad (\text{IV.58})$$

$$\frac{d\bar{z}_k}{d\mu} = 0 ; \quad \frac{d\bar{s}}{d\mu} = \frac{C_u \bar{T}}{R\bar{T} + \Delta H^+} ; \quad \frac{d\bar{A}_k}{d\mu} = \frac{b_k^2 R\bar{T}^2}{R\bar{T} + \Delta H^+} \quad (\text{IV.59})$$

Ce système doit être complété par des conditions initiales afin d'être totalement résolu. Ces conditions sont données par l'axiome d'existence d'un élément neutre pour le groupe G_0 , soit :

$$\bar{t}|_{\mu=0} = t ; \quad \bar{T}|_{\mu=0} = T ; \quad \bar{\sigma}|_{\mu=0} = \sigma ; \quad \bar{\varepsilon}|_{\mu=0} = \varepsilon \quad (\text{IV.60})$$

$$\bar{z}_k|_{\mu=0} = z_k ; \quad \bar{s}|_{\mu=0} = s ; \quad \bar{A}_k|_{\mu=0} = A_k \quad (\text{IV.61})$$

❷ **Expression d'une propriété d'invariance** : Le groupe de symétrie G_0 présenté ici traduit l'évolution des grandeurs σ , s et A_k quand le paramètre T (la température) varie. Pour vérifier la validité de G_0 sur des données expérimentales, nous allons considérer dans la prochaine section des courbes de traction simple dans le plan (ε, σ) , toutes caractérisées par la condition initiale :

$$\varepsilon(t=0) = 0 ; \quad \sigma(t=0) = 0 \quad (\text{IV.62})$$

Pour prendre en compte la conservation de cette condition initiale par le groupe G_0 , nous réécrivons cette dernière comme un système d'EDP d'ordre 0 :

$$\Delta^{CI} = \begin{cases} t = 0 \\ \varepsilon = 0 \\ \sigma = 0 \end{cases} \quad (\text{IV.63})$$

¹⁹Nous entendons par tâtonnements l'annulation arbitraire de certaines composantes de v jusqu'à que la machine renvoie une solution.

dont l'unique solution est le triplet $(t = 0, \varepsilon = 0, \sigma = 0)$. Le groupe engendré par le vecteur v_0 (donné par (IV.55)) conserve cette unique solution s'il représente un groupe de symétrie pour Δ^{CI} , ce qui nous permet d'imposer, en appliquant le théorème (E.3.1), la condition²⁰ :

$$pr^{(0)}v_0\Delta^{CI} = v_0\Delta^{CI} = 0 \text{ là où } \Delta^{CI} = 0 \quad (IV.64)$$

Le calcul de (IV.64) compte tenu de (IV.63) et (IV.55) mène à :

$$\xi = 0 \text{ pour les valeurs } t = 0, \varepsilon = 0, \sigma = 0 \quad (IV.65)$$

$$\phi^\varepsilon = 0 \text{ pour les valeurs } t = 0, \varepsilon = 0, \sigma = 0 \quad (IV.66)$$

$$\phi^\sigma = 0 \text{ pour les valeurs } t = 0, \varepsilon = 0, \sigma = 0 \quad (IV.67)$$

Vu les composantes $\xi = t$ et $\phi^\varepsilon = 0$ de v_0 (voir (IV.56) et (IV.57)), les relations (IV.65) et (IV.66) sont trivialement vérifiées; la relation (IV.67) implique quant à elle :

$$\frac{\alpha_u E_u R T^2}{RT + \Delta H^+} = 0 \Rightarrow \alpha_u = 0 \Rightarrow \phi^\sigma = 0 \quad (IV.68)$$

Sur le plan physique, cette hypothèse revient à négliger les effets de couplage thermomécanique ($\alpha_u = 0$), donc la variation de volume engendrée par le changement de température. Nous verrons ultérieurement que cette hypothèse coïncide avec l'hypothèse usuelle de l'approche de Williams, Landel et Ferry. Si on s'intéresse seulement à l'écriture explicite du groupe pour les composantes en t, T, σ , et ε , la résolution de (IV.58) sous l'hypothèse $\alpha_u = 0$ et complétée de (IV.60), mène à :

$$\bar{t} = e^{\mu t} \quad ; \quad \bar{\sigma} = \sigma \quad ; \quad \bar{\varepsilon} = \varepsilon \quad (IV.69)$$

$$\bar{T} = \exp \left(L_W \left(\frac{\Delta H^+}{R} \exp \left(\frac{\mu T - T \ln(T^*) + \frac{\Delta H^+}{R}}{T} \right) \right) - \mu + \ln(T^*) - \frac{\Delta H^+}{RT} \right) \quad (IV.70)$$

où $L_W(x)$ est la fonction de Lambert²¹, μ le paramètre du groupe, et T^* la température sans dimensions définie par²² :

$$T^* = \frac{T}{T_0} \text{ avec } T_0 = 1K \quad (IV.71)$$

Une inversion de l'équation (IV.70) permet d'écrire l'expression du paramètre du groupe en fonction de T et \bar{T} :

$$\mu(T, \bar{T}) = \frac{\Delta H^+(T - \bar{T})}{RT\bar{T}} + \ln \frac{T}{\bar{T}} \quad (IV.72)$$

qui nous sera très utile dans la suite. Nous allons désormais déduire des relations (IV.69) et (IV.70) une propriété d'invariance sur le module sécant²³ $E_s(t, T)$, défini à partir de $\varepsilon(t, T)$ et $\sigma(t, T)$ qui sont respectivement les valeurs de la déformation et de la contrainte à l'instant t et à la température T :

$$E_s(t, T) = \frac{\sigma(t, T)}{\varepsilon(t, T)} \quad (IV.73)$$

²⁰La forme générale de cette condition est donnée dans la section E.5.

²¹Rappelons que cette fonction est définie par l'équation $L_W(x)e^{L_W(x)} = x$ pour tout x réel positif.

²²Cette température est nécessaire pour "supprimer" la dimension contenue dans le terme logarithmique de l'équation (IV.70).

²³Il peut paraître inhabituel que le module sécant soit écrit comme une fonction des variables t et T au lieu de la déformation ε . On désigne simplement par $E_s(t, T)$ la valeur de ce module à l'instant t et à la température T .

Pour y parvenir, faisons l'hypothèse que les valeurs $\bar{\varepsilon}$ et $\bar{\sigma}$ des transformées de ε et σ par G_0 sont des fonctions de \bar{t} et \bar{T} . Cette hypothèse est justifiée par l'application du théorème des fonctions implicites pour l'image d'une partition $\varepsilon = \varepsilon(t, T)$ (ou $\sigma = \sigma(t, T)$) de l'espace (t, T, ε) (respectivement (t, T, σ)). Un schéma représentatif pour l'espace (t, T, ε) est donné dans la figure IV.2.

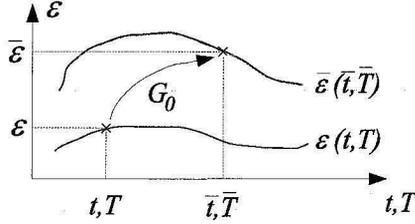


Fig. IV.2: Représentation schématique d'une partition de l'espace (t, T, ε) par une fonction explicite $\varepsilon = \varepsilon(t, T)$. Les images $(\bar{t}, \bar{T}, \bar{\varepsilon})$ des points (t, T, ε) par G_0 le long de la courbe rouge permettent de construire une courbe image (courbe bleue) qui induit l'existence d'une fonction $\bar{\varepsilon} = \bar{\varepsilon}(\bar{t}, \bar{T})$.

Nous pouvons ainsi déduire de (IV.69) la relation :

$$E_s(t, T) = \frac{\sigma(t, T)}{\varepsilon(t, T)} = \frac{\bar{\sigma}(\bar{t}, \bar{T})}{\bar{\varepsilon}(\bar{t}, \bar{T})} = E_s(\bar{t}, \bar{T}) = E_s(e^{\mu t}, \bar{T}) \quad (\text{IV.74})$$

ainsi que l'écriture logarithmique :

$$\log \bar{t} = \log t + \frac{\mu}{\ln 10} \quad (\text{IV.75})$$

qui nous permet de réécrire (IV.74) sous la forme :

$$E_s(\log t, T) = E_s(\log t + \frac{\mu}{\ln 10}, \bar{T}) \quad (\text{IV.76})$$

Cette relation implique qu'une réponse $E_s(\log \bar{t}, \bar{T})$ obtenue à une température \bar{T} peut a priori être déduite d'une réponse $E_s(\log t, T)$ à T par l'application d'une translation de facteur $\frac{\mu}{\ln 10}$ sur l'échelle logarithmique des temps. Le facteur de translation $\frac{\mu}{\ln 10}$ est donné par l'équation (IV.72). L'existence de ce principe de superposition "temps/température" a également été soulignée via une approche utilisant les groupes de symétries par Rahouadj *et al* ([Rah2-2002]). Le complément apporté ici réside dans l'obtention d'une formule explicite pour le facteur de translation (équation IV.72).

IV.2.3 Validation expérimentale sur un polymère

Nous avons vérifié la validité de la relation (IV.76) sur un jeu de courbes expérimentales d'un polymère de type polyamide 66 (Ehrenfest, [Ehr-1999]). Les conditions expérimentales sont caractérisées par $\dot{T} = 0$ et $\dot{\varepsilon} = \text{constante}$ (traction simple isotherme, pour différentes températures supérieures à celle de la transition vitreuse donnée par $T_g = 363\text{K}$). Les quatre réponses expérimentales $\sigma = f(\varepsilon)$ obtenues pour quatre températures (393K, 413K, 433K,

453K) et que nous allons présenter plus loin ont été interpolées avec la première équation de (IV.48) que nous avons réécrite sous la forme :

$$\dot{\sigma} - E_u \dot{\varepsilon} + \sum_{k=1}^n \frac{\sigma_k - \sigma_k^r}{\tau_k} = 0 \quad (\text{IV.77})$$

dans laquelle nous avons défini la contrainte partielle σ_k (associée au mode k) par :

$$\sigma_k = b_k^1 z_k \quad (\text{IV.78})$$

et la contrainte partielle relaxée :

$$\sigma_k^r = b_k^1 z_k^r \quad (\text{IV.79})$$

Cette dernière peut être réécrite, compte tenu de (IV.52), sous la forme :

$$\sigma_k^r = b_k^1 c_k \varepsilon \quad (\text{IV.80})$$

ou encore, en introduisant le module relaxé E_r et le poids p_k^0 du $k^{\text{ième}}$ mode dissipatif (donné par la relation (III.91)) :

$$\sigma_k^r = p_k^0 E_r \varepsilon \quad (\text{IV.81})$$

Le calcul pratique de σ se fait à partir d'une partition en n contraintes modales σ_k sous la forme :

$$\sigma = \sum_{k=1}^n \sigma_k \quad (\text{IV.82})$$

qui permet d'aboutir, via les équations (IV.77) et (IV.81), ainsi que l'introduction de la contribution $p_k^0 E_u \dot{\varepsilon}$ de chaque mode à la réponse instantanée totale, à n équations découplées :

$$\dot{\sigma}_k - p_k^0 E_u \dot{\varepsilon} + \frac{\sigma_k - p_k^0 E_r \varepsilon}{\tau_k} = 0 \quad k = 1..n \quad (\text{IV.83})$$

Pour résoudre ces équations, nous avons considéré un nombre arbitraire de $n = 20$ modes²⁴, associés à des temps de relaxation distribués linéairement sur une échelle logarithmique de $D = 3$ décades (i.e. $\tau_{max}/\tau_{min} = 10^D$) :

$$\log \tau_k = \log \tau_{min} + \frac{(k-1)D}{n-1} = \log \tau_{max} - D + \frac{(k-1)D}{n-1} \quad k = 1..n \quad (\text{IV.84})$$

L'interpolation des courbes expérimentales consiste (i) à résoudre les n équations découplées données par (IV.83), et (ii) calculer la contrainte totale σ en utilisant la relation (IV.82). Les paramètres ajustés sont les modules E_u et E_r supposés indépendants de la température (sur la plage de température explorée), et le temps de relaxation maximal τ_{max} qui lui change pour chaque température. Les courbes expérimentales et les modèles DLR correspondants sont présentés sur la figure (IV.3).

²⁴La considération de plus de modes influe "peu" sur la réponse $\sigma(t)$.

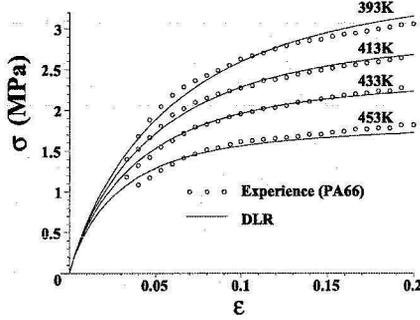


Fig. IV.3: Représentation graphique des courbes de traction expérimentales et ajustées par l'approche DLR, pour différentes températures.

La connaissance de la contrainte σ et de la déformation ε en fonction du temps t et des différentes températures nous permet de calculer le module sécant $E_s(t, T)$ avec la relation (IV.73). Nous avons représenté (en \log/\log) les modules sécants expérimentaux et théoriques sur la figure IV.4 (a), et obtenu une courbe maîtresse à 393K par translation horizontale des courbes à 413K, 433K, et 453K le long de l'axe des temps (figure IV.4 (b)). La superposition des quatre courbes confirme l'existence de trois valeurs de μ pour lesquelles la relation (IV.76) est valide. Pour pouvoir comparer ces valeurs de μ avec les véritables facteurs de glissement, calculons la valeur de l'enthalpie d'activation ΔH^+ .

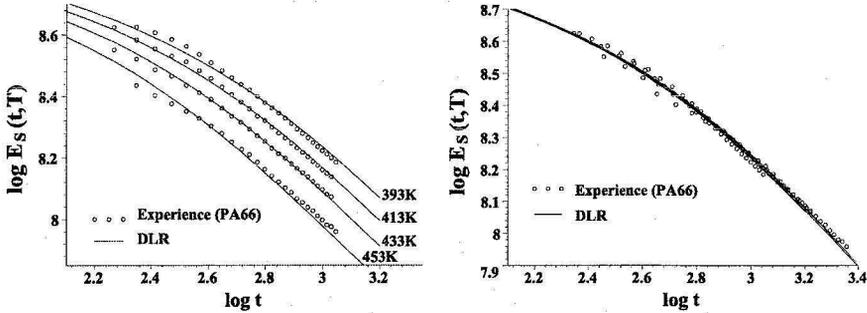


Fig. IV.4: (a) Représentations graphiques des modules sécants expérimentaux et théorique (DLR) (b) Courbe maîtresse à 393K obtenue par translation des courbes à 413K, 433K, et 453K le long de l'axe des temps.

Les temps de relaxation maximaux τ_{max} obtenus pour chaque température permettent de calculer les valeurs des enthalpies libres d'activation $\Delta F_j^+ = \Delta H^+ - T\Delta S_j^+$ pour chaque mode j . En effet, l'inversion de la relation (IV.46) mène à l'égalité :

$$\Delta F_j^+ = RT \ln \left(\frac{kT}{h} \tau_j \right) \quad (IV.85)$$

qui, combinée à l'équation (IV.84), permet d'écrire :

$$\Delta F_j^+ = RT \ln \left(\frac{kT}{h} \left(\tau_{max}^{-D + \frac{(j-1)D}{n-1}} \right) \right) \quad (IV.86)$$

Les valeurs des ΔF_j^+ étant acquises, il est possible d'effectuer une régression linéaire de ΔF_j^+ en fonction de T , et d'accéder aux valeurs de ΔH^+ et ΔS_j^+ pour chaque mode et chaque température. La valeur moyenne obtenue pour l'enthalpie d'activation est :

$$\Delta H^+ = 13620 \text{ J.mol}^{-1} \quad (IV.87)$$

Cette valeur nous permet, via l'égalité (IV.72), de calculer un facteur de glissement théorique $\mu/\ln 10$ pour les trois couples de températures :

$$(T = 393\text{K}, \bar{T} = 413\text{K}) ; (T = 393\text{K}, \bar{T} = 433\text{K}) ; (T = 393\text{K}, \bar{T} = 453\text{K}) \quad (IV.88)$$

Ces facteurs de glissement théoriques peuvent être comparés avec ceux directement mesurés lors de l'élaboration de la courbe maîtresse de la figure IV.4 (b) (voir le tableau IV.1).

$T \rightarrow \bar{T}$	393 \rightarrow 453	393 \rightarrow 433	393 \rightarrow 413
$\mu/\ln 10$	-0.31	-0.19	-0.10

TAB. IV.1: Tableau récapitulatif des facteurs de glissement trouvés lors de l'élaboration de la courbe maîtresse de la figure IV.4.

La figure IV.5 donne une représentation graphique de cette comparaison.

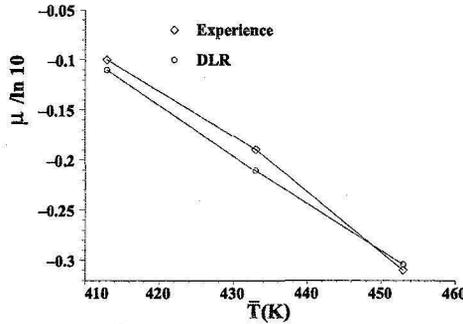


Fig. IV.5: Comparaison des facteurs de glissement obtenus directement par translation des courbes de la figure IV.4 (a) avec les facteurs de glissement DLR (équation (IV.72)).

La formule (IV.72) semble donner une bonne approximation du facteur de glissement réel.

IV.2.4 Comparaison avec la formule empirique de Williams, Landel et Ferry

Il est intéressant de comparer l'expression du facteur de glissement $\mu/\ln 10$ donné par la relation (IV.72) avec celui proposé par Williams, Landel et Ferry (voir Ferry [Fer-1980], Williams *et al* [Wil-1955]). Ces derniers énoncent entre autre une propriété d'invariance empirique pour le module sécant des polymères, valable en viscoélasticité, via la relation :

$$E_s(t, T) = E_s(ta_{\bar{T}, T}, \bar{T}) \frac{\rho(T)T}{\rho(\bar{T})\bar{T}} \quad (IV.89)$$

où $\rho(T)$ est la masse volumique à la température T , et $a_{\bar{T},T}$ un facteur de glissement donné par la relation :

$$\log a_{\bar{T},T} = -\frac{C_1(\bar{T} - T)}{C_2 + \bar{T} - T} \quad (IV.90)$$

Les constantes C_1 et C_2 dépendent a priori du polymère. Cette relation empirique a été validée de façon expérimentale par de nombreux auteurs, comme Ferry ([Fer-1980]), Laot ([Lao-2001]), Ricco ([Ric-2000]), Chen *et al* ([Che-1999]), Hotta ([Hot-2001]). Si on admet comme la plupart de ces auteurs que le terme $\frac{\rho(T)\bar{T}}{\rho(\bar{T})T}$ reste proche de 1²⁵, on remarque que le paramètre $\mu(T, \bar{T})/\ln 10$ peut être comparé à $a_{\bar{T},T}$. En effet, le rapprochement des relations (IV.74) et (IV.89) sous l'hypothèse $\frac{\rho(T)\bar{T}}{\rho(\bar{T})T} = 1$ permet d'obtenir :

$$E_s(t, T) = E_s(e^{\mu t}, \bar{T}) \equiv E_s(t a_{\bar{T},T}, \bar{T}) \quad (IV.91)$$

ce qui mène à :

$$a_{\bar{T},T} \equiv e^{\mu(T, \bar{T})} \Leftrightarrow \frac{\mu(T, \bar{T})}{\ln 10} \equiv \log a_{\bar{T},T} \quad (IV.92)$$

Par conséquent, nous nous sommes demandé s'il existait des valeurs pour les constantes C_1 et C_2 telles que le facteur de glissement WLF $\log a_{\bar{T},T}$ (relation (IV.90)) coïncide avec le facteur de glissement DLR $\mu(T, \bar{T})/\ln 10$ (équation (IV.72)). Au sens des moindres carrés, nous avons trouvé pour une température de référence $T = 393\text{K}$ les valeurs $C_1 = 3$ et $C_2 = 530\text{K}$. La comparaison des facteurs de glissement DLR et WLF a été représentée sur la figure (IV.6).

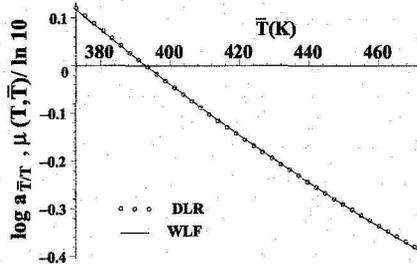


Fig. IV.6: Comparaison des facteurs de glissement de l'approche WLF ($\log a_{\bar{T},T}$) et DLR ($\mu(T, \bar{T})/\ln 10$) pour une température de référence $T = 393\text{K}$.

Le facteur de glissement obtenu par l'approche DNLR simplifiée semble bien correspondre à une formulation de type WLF.

IV.2.5 Discussion

Les valeurs des coefficients $C_1 = 3$ and $C_2 = 530\text{K}$ sont assez différentes de celles que nous avons rencontrées dans la littérature. La plupart de ces valeurs (Ferry [Fer-1980], Carrot ([Carr-1958]), Laot ([Lao-2001]), Hotta ([Hot-2001])) sont comprises entre les valeurs limites :

$$2 \lesssim C_1 \lesssim 30$$

²⁵Ceci est justifié par une dépendance en $1/T$ de la masse volumique $\rho(T)$ (Carrot, [Carr-1958]).

$$35\text{K} \lesssim C_2 \lesssim 220\text{K}$$

Nous pensons que la différence observée avec les valeurs trouvées ici ($C_1 = 3$ et $C_2 = 530\text{K}$) est due au fait que le domaine exploré dépasse largement celui de la viscoélasticité. Les déformations qui interviennent dans les mesures expérimentales vont en effet jusqu'à 20%. Ajoutons que le modèle proposé ici ne saurait traduire l'évolution de la contrainte lors du déchargement. En effet, ce modèle simplifié ne prend pas en compte les non-linéarités qui pourraient apparaître lors de chargements cycliques par exemple (changement de signe de $\dot{\epsilon}$).

Nous avons vu que la conservation de la condition initiale (IV.62) impose la nullité du coefficient de dilatation α_u . Nous remarquons également que la plupart des mises en oeuvre de la formule empirique WLF (citées précédemment) nécessite l'hypothèse $\frac{\rho(T)T}{\rho(\bar{T})\bar{T}} \approx 1$ pour être validées expérimentalement. Le lien entre ces deux exigences peut être établi en considérant un volume $V(T)$ du milieu à la température T , de masse $M(T)$. Ecrivons que l'application de la loi WLF suggère :

$$\frac{\rho(T)T}{\rho(\bar{T})\bar{T}} \approx 1 \quad \Rightarrow \quad \frac{\frac{V(T)}{M(T)} T}{\frac{V(\bar{T})}{M(\bar{T})} \bar{T}} \approx 1 \quad (\text{IV.93})$$

Compte tenu de la conservation de la masse entre les températures T et \bar{T} , soit $M(T) = M(\bar{T})$, la relation (IV.93) peut se réécrire sous la forme :

$$\frac{V(T)T}{V(\bar{T})\bar{T}} \approx 1 \quad (\text{IV.94})$$

Si on suppose de plus que les températures T et \bar{T} sont voisines, alors l'équation (IV.94) conduit à :

$$\frac{T}{\bar{T}} \approx 1 \quad \Rightarrow \quad \frac{V(T)}{V(\bar{T})} \approx 1 \quad \Rightarrow \quad \frac{V(\bar{T}) - V(T)}{V(T)} \approx 0 \quad \Rightarrow \quad \alpha_u \approx 0 \quad (\text{IV.95})$$

Le rapprochement intuitif entre l'hypothèse WLF $\frac{\rho(T)T}{\rho(\bar{T})\bar{T}} \approx 1$ et l'hypothèse DLR $\alpha_u = 0$ semble confirmer un lien étroit entre les deux approches.

Remarquons à présent que les modules E_u et E_r ont été supposés indépendants de la température. Cette hypothèse ne peut être supposée valide que sur une plage de température limitée au dessus de la transition vitreuse (Ehrenfest, [Ehr-1999]). Nous avons ainsi obtenu un meilleur ajustement des courbes expérimentales en faisant varier légèrement les paramètres E_u et E_r avec la température. Toutefois, la prise en compte d'une dépendance explicite $E_u(T)$ et $E_r(T)$ dans le calcul des symétries variationnelles n'a pas donné de résultats.

Ajoutons enfin qu'il est possible de définir une énergie d'activation apparente E_a^{DLR} pour l'approche DLR, qui peut être comparée à celle de l'approche WLF (notée E_a^{WLF}) et donnée par :

$$E_a^{WLF} = R \frac{d(\ln a_{\bar{T},T})}{d\left(\frac{1}{\bar{T}}\right)} = \frac{R\bar{T}^2 C_1 C_2 \ln 10}{(C_2 + \bar{T} - T_g)^2} \quad (\text{IV.96})$$

où T_g est la température de transition vitreuse du polymère ($T_g = 363\text{K}$ pour le PA66) et R la constante des gaz parfaits. Pour ce faire, partons de la correspondance entre les modèles DLR et WLF :

$$\ln a_{\bar{T},T} \equiv \mu(T, \bar{T}) \quad (\text{IV.97})$$

La dérivation de cette dernière relation par rapport à $1/\bar{T}$, multipliée ensuite par R , permet (par analogie avec l'égalité (IV.96)) de définir E_a^{DLR} sous la forme :

$$E_a^{DLR} = R \frac{d\mu(T, \bar{T})}{d\left(\frac{1}{\bar{T}}\right)} \quad (\text{IV.98})$$

qui, compte tenu de (IV.72), conduit à :

$$E_a^{DLR} = \Delta H^+ + R\bar{T} \quad (\text{IV.99})$$

La valeur de l'enthalpie d'activation E_a^{WLF} augmente avec la température \bar{T} , de 15481 J.mol⁻¹ pour $\bar{T} = 413\text{K}$, jusqu'à 16300 J.mol⁻¹ pour $\bar{T} = 453\text{K}$. Ces valeurs restent voisines des valeurs de E_a^{DLR} qui sont données par 16924 J.mol⁻¹ pour $\bar{T} = 413\text{K}$ et 17244 J.mol⁻¹ pour $\bar{T} = 453\text{K}$. Elles confirment le bon accord observé entre notre approche et l'approche WLF.

IV.2.6 Conclusion

Retenons de ce chapitre que la condition de symétrie variationnelle pour l'intégrale fonctionnelle S donnée par :

$$S = \int_{t_0}^t \left[\dot{f} + \sum_{k=1}^n \lambda_k \left(\dot{z}_k + \frac{z_k - z_k^r}{\tau_k} \right) \right] dt \quad (\text{IV.100})$$

nécessite la construction d'un générateur v_{con} sur l'ensemble $I \times \mathbb{M}_{con}$ engendré par les variables de contrôle ε , T , z_k et le temps t . Ce champ de vecteur v_{con} s'écrit donc²⁶ :

$$v_{con} = \xi \frac{\partial}{\partial t} + \phi^\varepsilon \frac{\partial}{\partial \varepsilon} + \phi^T \frac{\partial}{\partial T} + \phi^{z_k} \frac{\partial}{\partial z_k} \quad (\text{IV.101})$$

L'existence de ce générateur implique *de fait* (i) l'extension de l'espace $I \times \mathbb{M}_{con}$ à l'espace $I \times \mathbb{M}_{con} \times \mathbb{M}_{obs}$ dans lequel on intègre les variables observables σ , s , A_k , et (ii) l'existence de variations pour ces variables qui vont donner naissance à un générateur v_{obs} donné par :

$$v_{obs} = \phi^\sigma \frac{\partial}{\partial \sigma} + \phi^s \frac{\partial}{\partial s} + \phi^{A_k} \frac{\partial}{\partial A_k} \quad (\text{IV.102})$$

et dont les composantes s'écrivent :

$$\phi^\sigma = f_{,\varepsilon\varepsilon} \phi^\varepsilon + f_{,T\varepsilon} \phi^T + f_{,z_k\varepsilon} \phi^{z_k} \quad (\text{IV.103})$$

$$\phi^s = -f_{,\varepsilon T} \phi^\varepsilon - f_{,TT} \phi^T - f_{,z_k T} \phi^{z_k} \quad (\text{IV.104})$$

$$\phi^{A_k} = -f_{,\varepsilon z_i} \phi^\varepsilon - f_{,T z_i} \phi^T - f_{,z_k z_i} \phi^{z_k} \quad (\text{IV.105})$$

Nous avons démontré que les symétries variationnelles de l'intégrale d'action (IV.100) associée au lagrangien :

$$L = L_{thermo} + L_{cine} \quad (\text{IV.106})$$

avec :

$$L_{thermo} = \dot{f} \quad \text{et} \quad L_{cine} = \sum_{k=1}^n \lambda_k \left(\dot{z}_k + \frac{z_k - z_k^r}{\tau_k} \right) \quad (\text{IV.107})$$

²⁶Cette écriture sous entend que le potentiel thermodynamique choisi est l'énergie libre de Helmholtz f . La généralisation à tout autre potentiel ne pose aucun problème.

peuvent se calculer grâce à la condition :

$$pr^{(1)}vL_{cine} + L_{cine}\dot{\xi} = 0 \quad (\text{IV.108})$$

Dans le cas d'un comportement visqueux, nous avons mis en évidence une symétrie variationnelle particulière qui correspond à un principe de superposition vis à vis du temps et de la température. Nous observons une bonne concordance entre l'approche théorique et l'approche empirique de type WLF.

On peut envisager l'application de cette technique de recherche de symétrie dans un cadre plus général, où le paramètre de contrôle, qui était jusqu'ici la température, pourrait s'identifier à la vitesse de déformation, l'amplitude de déformation, le temps de vieillissement, etc...

V

Contribution à la modélisation du comportement d'une colle acrylique par le biais de groupes de symétries

Sommaire

V.1	Présentation de la problématique industrielle	86
V.1.1	Contexte industriel et objectifs	86
V.1.2	Résultats expérimentaux en compression	87
V.2	Contribution à la modélisation	90
V.2.1	Choix <i>a priori</i> d'une forme de loi de comportement	90
V.2.2	Construction de courbes maîtresses expérimentales	92
V.2.3	Position du problème sur le plan mathématique	100
V.2.4	Simplification du problème	100
V.2.5	Conclusion	102

Le chapitre précédent montre qu'il est possible de prédire l'existence d'une courbe maîtresse lorsque la forme variationnelle associée à la loi de comportement DNLR est connue. Nous allons à présent nous intéresser au deuxième volet que nous voulons aborder.

La recherche d'une loi de comportement de matériau dans une gamme de sollicitations thermiques et/ou mécaniques variées est complexe. L'association d'une démarche expérimentale et d'une méthodologie de recherche des groupes de symétrie est susceptible de limiter l'effort expérimental et de rationaliser la recherche du comportement.

La stratégie d'approche qu'on va évoquer n'est pas entièrement nouvelle. La mise en évidence de principes de superposition plus généraux, en ce sens qu'il font intervenir d'autres paramètres que la température, a été particulièrement soulignée par Struik, [Str-1978], mais également par Riccò, [Ric-2000]. Ces auteurs montrent la possibilité de construire des courbes maîtresses pour des polymères (et d'autres matériaux) via des principes de superposition portant sur la température, l'amplitude de déformation (en fatigue) ou le temps de vieillissement (en relaxation) par exemple. La mesure des facteurs de glissements associés à ces superpositions permet (via une interpolation) de déterminer le comportement du matériau à partir d'une seule courbe maîtresse. Rappelons enfin que l'existence de telles courbes maîtresses a poussé Cunat à rechercher un spectre de relaxations "universel" en prenant appui sur la théorie des fluctuations ([Cun-1988]).

C'est dans cet état d'esprit empirique que nous allons développer les points suivants : nous essaierons dans un premier temps de trouver une courbe maîtresse à partir de données expérimentales relatives à un matériau de type colle acrylique. L'élaboration de cette courbe maîtresse nous permettra ensuite de construire un groupe de symétrie "empirique", qui devrait enfin fournir (a priori) une forme particulière de loi de comportement. Avant d'entrer dans les développements mathématiques relatifs à ce sujet, commençons par présenter plus précisément les enjeux de ce travail ainsi que les résultats obtenus dans la littérature.

V.1 Présentation de la problématique industrielle

V.1.1 Contexte industriel et objectifs

Lors de la procédure de recyclage du papier, les particules de colles qui proviennent (entre autres) d'étiquettes auto-adhésives se mêlent à la pâte dont on souhaite récupérer les fibres. Ces particules peuvent se déformer et passer au travers des fentes des tamis d'épurateurs. Par suite, il est possible que des morceaux de colles se déposent sur la machine à papier (celle qui fabrique effectivement les rouleaux de papier recyclé). Ces amas entraînent des défauts dans le produit final, comme l'apparition de tâches adhésives qui posent des problèmes d'impression (voir Julien Saint Amand, [Jul-2004]).

Il apparaît donc primordial de connaître le comportement mécanique des colles provenant d'étiquettes auto-adhésives afin de trouver une éventuelle solution technique pour le recyclage du papier. C'est à cette fin que le projet "ScreenClean" (filtrage propre) a été créé au niveau européen. Il a pour but de trouver un moyen d'enlever les particules de colle dans les différentes phases de recyclage. Dans le cadre de ce projet européen, de nombreuses recherches ont été effectuées.

Au sein de notre laboratoire, une première étude en compression d'une colle à papier adhésif a été menée par Rahouadj et Skali-Lami ([Rah-2004]) et des élèves de l'ENSEM (Doctobre et Pidoux, [Doc-2004], Rouillard, [Rou-2004]). Nous avons choisi de reprendre la modélisation du comportement en adoptant une stratégie fondée sur l'analyse des symétries continues, associées à l'existence de courbes maîtresses expérimentales. Notre but est ainsi de déterminer le comportement rhéologique de la colle sous la forme d'une relation liant la contrainte σ , sa dérivée par rapport au temps $\dot{\sigma}$, ainsi que la déformation ε et sa vitesse $\dot{\varepsilon}$:

$$f(\sigma, \dot{\sigma}, \varepsilon, \dot{\varepsilon}) = 0 \quad (\text{V.1})$$

La gamme de déformation explorée ici s'étale de $\varepsilon = 0$ à 0.5 environ et les vitesses de déformation sont de l'ordre de 10s^{-1} . Nous allons commencer par présenter brièvement les résultats obtenus par Rahouadj et Skali-Lami ([Rah-2004]).

V.1.2 Résultats expérimentaux en compression

Pour commencer, précisons que la colle est fournie sous forme de blocs que les auteurs ont dû façonner afin d'obtenir des lopins de forme cylindrique. La procédure de fabrication de ces lopins est la suivante :

- les expérimentateurs ont fondu la colle de manière à la couler dans des moules de forme cylindrique (voir figure V.1 (a)). Ils ont pris soin d'éviter la formation de bulles d'air en retournant les lopins en cours de refroidissement.
- la forme finale des lopins n'étant pas toujours cylindrique, un grand nombre de lopins a été moulé afin de sélectionner les plus cylindriques (voir figure V.1 (b)).

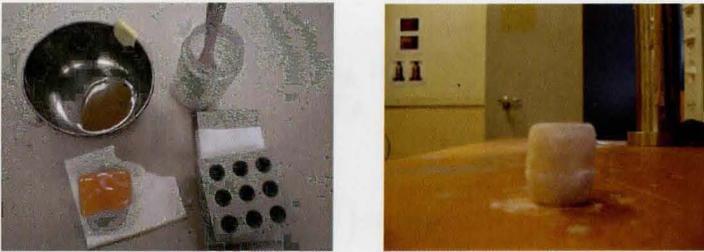


Fig. V.1: (a) Bloc de colle, récipient servant à recueillir la colle fondue, et moule de forme cylindrique (b) Exemple de lopin obtenu par moulage.

Les lopins obtenus ont fait l'objet d'une série de mesures à "forte" vitesse de déformation. Pour effectuer ces mesures, les auteurs utilisent un rail vertical autour duquel une masse m peut glisser. A $t = 0$, cette masse est lâchée d'une hauteur initiale H_0 et vient percuter une plaque de poids négligeable posée sur le lopin de colle. Le déplacement $\delta(t)$ de cette plaque est mesuré par un laser, et la force de compression $F(t)$ du lopin est quant à elle mesurée par un capteur d'effort solidaire d'une autre plaque, située sous le lopin. Un système d'acquisition de données permet de tracer l'évolution de la force de compression $F(t)$ exercée sur le lopin en fonction du déplacement de la plaque supérieure $\delta(t)$ (voir figure V.2).

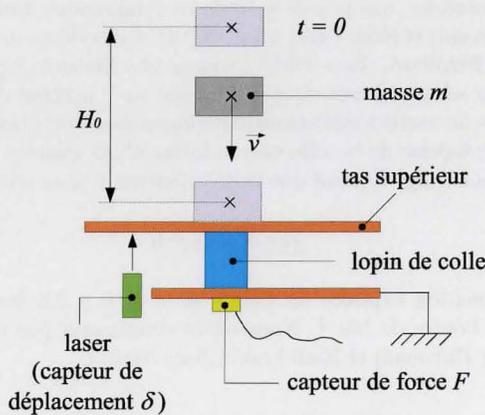


Fig. V.2: Schéma de principe du dispositif expérimental employé pour les mesures de compression à "fortes" vitesse de déformation.

De ces données expérimentales, nous pouvons déduire les valeurs des trois grandeurs qui nous intéressent, c'est à dire la contrainte σ , la déformation ε , et la vitesse de déformation $\dot{\varepsilon}$. Exprimons ces trois dernières grandeurs en fonction de $F(t)$ et $\delta(t)$.

❶ **Définition de la déformation ε et de la vitesse de déformation $\dot{\varepsilon}$** : Appelons $h(t)$ la hauteur du lopin à l'instant t et h_0 cette même hauteur à l'instant initial¹ $t = 0$. Ecrivons d'emblée la relation :

$$h(t) = h_0 - \delta(t) \quad (\text{V.2})$$

La déformation vraie est définie par :

$$\varepsilon(t) = \int_{h_0}^{h(t)} \frac{dh}{h(t)} = \ln \left(\frac{h(t)}{h_0} \right) \quad (\text{V.3})$$

soit, en tenant compte de (V.2) :

$$\varepsilon(t) = \ln \left(\frac{h_0 - \delta(t)}{h_0} \right) \quad (\text{V.4})$$

La vitesse de déformation se déduit de cette dernière relation, soit :

$$\dot{\varepsilon}(t) = \frac{\dot{h}(t)}{h(t)} = \frac{\dot{\delta}(t)}{h_0 - \delta(t)} \quad (\text{V.5})$$

❷ **Définition de la contrainte σ** : La contrainte de Cauchy est définie par la relation :

$$\sigma(t) = \frac{F(t)}{S(t)} \quad (\text{V.6})$$

¹On définit cet instant initial comme le moment où la masse entre en contact avec le tas supérieur.

où $S(t)$ est la section du lopin à l'instant t . Pour calculer cette section, Rahouadj et Skali-Lami font l'hypothèse que la transformation du lopin est isochore, en ce sens que la valeur de son volume $V(t)$ reste égale à sa valeur V_0 à l'instant initial :

$$V(t) = V_0 \quad (\text{V.7})$$

En notant S_0 la section du lopin à $t = 0$, on peut réécrire (V.7) sous la forme :

$$S(t)h(t) = S_0h_0 \Rightarrow S(t) = \frac{S_0h_0}{h(t)} \quad (\text{V.8})$$

La combinaison des équations (V.8), (V.2) et (V.6) permet donc d'écrire la contrainte sous la forme :

$$\sigma(t) = \frac{F(t)(h_0 - \delta(t))}{S_0h_0} \quad (\text{V.9})$$

Nous voyons ainsi que les grandeurs σ , ε et $\dot{\varepsilon}$ peuvent être calculées à partir des mesures de $F(t)$ et $\delta(t)$.

Cinq séries d'expériences pour les différentes hauteurs H_0 suivantes :

$$H_0 = 15\text{cm} ; H_0 = 30\text{cm} ; H_0 = 50\text{cm} ; H_0 = 60\text{cm} ; H_0 = 90\text{cm} \quad (\text{V.10})$$

ont été réalisées. Précisons que le terme "série" signifie la réalisation de la même expérience de compression (i.e. la même hauteur H_0) sur plusieurs lopins différents, afin de calculer une réponse moyenne en contrainte². Les réponses en contrainte fonction de la déformation associées à ces différentes mesures sont tracées en représentation $(\ln \varepsilon, \ln \sigma^*)$ ³ (σ^* est une contrainte adimensionnelle définie comme étant la mesure de σ qui est exprimée en Pa, soit $\sigma^* = \sigma / \sigma_{ref}$ avec $\sigma_{ref} = 1\text{Pa}$) dans la figure V.3.

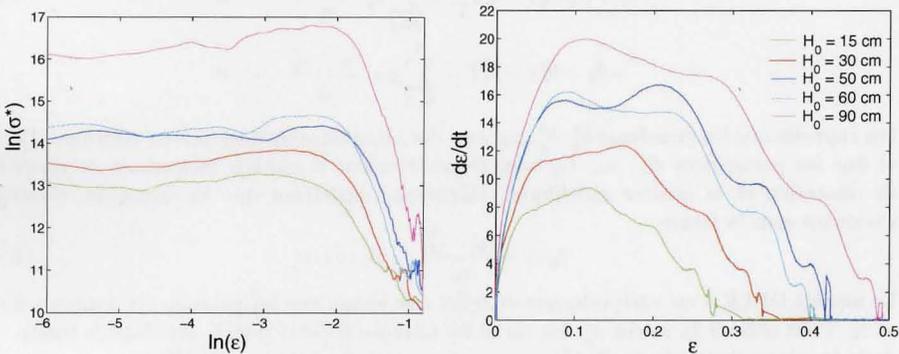


Fig. V.3: (a) Représentation graphique dans le plan $(\ln \varepsilon, \ln \sigma^*)$ de la contrainte σ en fonction de la déformation ε pour les différentes hauteurs H_0 (b) Représentation graphique de la vitesse de déformation $\dot{\varepsilon}$ en fonction de la déformation ε pour les différentes hauteurs H_0 .

²Rappelons que les lopins n'étant pas tous parfaitement cylindriques, la réponse en contrainte peut varier d'un lopin à l'autre. Les auteurs ont donc préféré calculer la moyenne de σ sur plusieurs lopins.

³Les écarts entre les valeurs des contraintes pour les expériences $H_0 = 15\text{cm}$ et $H_0 = 90\text{cm}$ sont "grands". L'emploi d'une représentation $\ln - \ln$ est donc nécessaire pour rendre les résultats lisibles.

Nous allons à présent tenter de modéliser le comportement en compression de la colle. Notre stratégie d'approche est la suivante :

- nous faisons l'hypothèse que le comportement est régi par un jeu d'équations de type DNLR, dans laquelle certaines inconnues sont à trouver (les facteurs de glissement). Notons $\Delta = 0$ ce système d'EDP.
- à l'aide des courbes expérimentales, nous allons chercher l'expression d'une forme de groupe de symétrie qui permet la superposition de toutes les courbes de la figure V.3.
- l'application de la condition de symétrie pour la loi de comportement $\Delta = 0$ est susceptible de fournir des précisions sur la forme des inconnues du problème.

Nous sommes en mesure de passer plus précisément en revue les différentes étapes de cette stratégie.

V.2 Contribution à la modélisation

V.2.1 Choix *a priori* d'une forme de loi de comportement

Dans cette section, nous allons construire une forme de loi de comportement à partir des équations DNLR. Réécrivons à cet effet les relations (IV.48) sous une forme plus générale (c'est à dire où \dot{T} n'est a priori pas égal à 0) :

$$\begin{aligned} \dot{\sigma} - E_u \dot{\varepsilon} + \alpha_u E_u \dot{T} + \sum_{k=1}^n b_k^1 \frac{z_k - z_k^r}{\tau_k} &= 0 \\ -\dot{s} + \alpha_u E_u \dot{\varepsilon} - C_u \frac{\dot{T}}{T} + \sum_{k=1}^n b_k^2 \frac{z_k - z_k^r}{\tau_k} &= 0 \\ -\dot{A}_i - b_i^1 \dot{\varepsilon} - b_i^2 \dot{T} + \sum_{k=1}^n g_{ik} \frac{z_k - z_k^r}{\tau_k} &= 0 \end{aligned} \quad (\text{V.11})$$

(on rappelle que les grandeurs b_k^1 , b_k^2 , g_{ik} sont des constantes définies par les relations (IV.49), et que les paramètres E_u , α_u , C_u sont respectivement le module instantané, le coefficient de dilatation et la chaleur spécifique). Rappelons également que les équations cinétiques s'écrivent sous la forme :

$$\dot{z}_k = -\frac{z_k - z_k^r}{\tau_k} \quad k = 1..n \quad (\text{V.12})$$

Le modèle DNLR n'est véritablement complet que lorsqu'une formulation est donnée pour z_k^r et τ_k . Pour obtenir la valeur z_k^r des variables internes à l'état relaxé, annulons le terme $-\dot{A}_i$ de la troisième équation de (V.11) en tenant compte des relations (V.12) :

$$-\dot{A}_i^r = 0 = b_i^1 \dot{\varepsilon} + b_i^2 \dot{T} + \sum_{k=1}^n g_{ik} \dot{z}_k^r \Rightarrow \dot{z}_k^r = -\sum_{i=1}^n (g^{-1})_{ki} (b_i^1 \dot{\varepsilon} + b_i^2 \dot{T}) \quad (\text{V.13})$$

Nous supposons, (de même que dans la section IV.2.1) que les constantes apparaissant dans l'intégration de (V.13) sont nulles, ce qui implique que \dot{z}_k^r est linéaire vis à vis de ε et T :

$$z_k^r = -\sum_{i=1}^n (g^{-1})_{ki} (b_i^1 \varepsilon + b_i^2 T) = c_k^1 \varepsilon + c_k^2 T \quad (\text{V.14})$$

Il nous reste désormais à postuler une forme pour les temps de relaxation. Réécrivons d'abord les relations (III.74) compte tenu de $\boldsymbol{y} \equiv \boldsymbol{\varepsilon}$ et $\boldsymbol{\beta} \equiv \boldsymbol{\sigma}$ soit :

$$\begin{aligned} \tau_k &= \tau_k^r a(t) \\ a(t) &= a_\nu(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}, \boldsymbol{z}) \exp\left(\frac{K_\sigma(\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}^r)}{kT}\right) \end{aligned} \quad (\text{V.15})$$

Plusieurs tentatives de simulations ont montré que l'expression du facteur de glissement $a(t)$ des équations (V.15) n'est pas convenable pour décrire le comportement de la colle. Pour résoudre ce problème, Rahouadj et Skali-Lami proposent de remplacer (de manière empirique) l'exponentielle en contrainte (équation (V.15)) par une exponentielle en déformation, complétée d'un facteur de glissement en fréquence $a_\nu(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}, \boldsymbol{z})$. Le facteur de glissement retenu par les auteurs s'écrit :

$$a(t) = \left(\frac{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_0}{\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_0}\right)^k \exp\left(\frac{K_\varepsilon |\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^r|^m}{RT}\right) \quad (\text{V.16})$$

(où $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_0$, k , et m sont des constantes positives) et permet de rendre compte du comportement de la colle. On peut toutefois noter, contrairement à l'intuition, que ce facteur de glissement croît lorsque la vitesse de déformation $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$ augmente. Or, il semble raisonnable de croire que le spectre se déplace vers les temps courts quand la vitesse de déformation croît, ce qui se traduit par un facteur de glissement en fréquence qui diminue quand $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$ augmente. Pour éclaircir ce point, et tenté de "reconstruire" le facteur de glissement $a(t)$ par une autre approche empirique, nous avons élaboré la stratégie de modélisation suivante :

- nous avons retenu dans un premier temps une forme beaucoup plus générale pour le facteur de glissement $a(t)$ donné par la relation (V.15) (nous précisons cette forme un peu plus loin).
- nous avons recherché l'expression d'une forme de groupe de symétrie pour la loi de comportement à partir des courbes expérimentales de la figure V.3. Notons \boldsymbol{v}_0 le générateur de ce groupe.
- l'expression générale du facteur de glissement $a(t)$ devrait être "particularisée" par l'application de la condition de symétrie (voir le théorème (E.3.1)) :

$$pr^{(1)}\boldsymbol{v}_0\boldsymbol{\Delta} = 0 \quad \text{là où } \boldsymbol{\Delta} = 0 \quad (\text{V.17})$$

où $\boldsymbol{\Delta} = 0$ est une notation condensée pour l'écriture des équations de comportement (V.11).

Nous avons retenu deux contributions pour le facteur de glissement $a(t)$:

- un terme $a_T(T, T^r)$ traduisant le glissement du spectre lorsque la température passe d'une température de référence T^r à une température quelconque T . Il est en effet raisonnable de penser qu'il existe un couplage déformation/température et que le lopin de colle s'échauffe sous l'action de la percussion de la masse m .
- un terme $a(\boldsymbol{\varepsilon}, \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}, \boldsymbol{\sigma})$ traduisant le glissement du spectre lorsque les grandeurs mécaniques $(\boldsymbol{\varepsilon}, \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}, \boldsymbol{\sigma})$ varient. La "différence" d'écriture entre les équations (V.15) et (V.16) suggère une forme suffisamment générale pour ce facteur de glissement.

Compte tenu des relations (V.14), (V.15) et de la forme retenue pour $a(t)$, les équations

(V.11) et (V.12) du modèle DNLR peuvent donc se réécrire sous la forme :

$$\Delta = \begin{cases} \Delta_1 = 0 \\ \Delta_2 = 0 \\ \Delta_{2+i} = 0 & i = 1..n \\ \Delta_{n+k+2} = 0 & k = 1..n \end{cases} \quad (V.18)$$

avec :

$$\begin{aligned} \Delta_1 &= \dot{\sigma} - E_u \dot{\varepsilon} + \alpha_u E_u \dot{T} + \sum_{k=1}^n b_k^1 \frac{z_k - c_k^1 \varepsilon - c_k^2 T}{\tau_k^r a_T(T, T^r) a(\varepsilon, \dot{\varepsilon}, \sigma)} \\ \Delta_2 &= -\dot{s} + \alpha_u E_u \dot{\varepsilon} - C_u \frac{\dot{T}}{T} + \sum_{k=1}^n b_k^2 \frac{z_k - c_k^1 \varepsilon - c_k^2 T}{\tau_k^r a_T(T, T^r) a(\varepsilon, \dot{\varepsilon}, \sigma)} \\ \Delta_{2+i} &= -\dot{A}_i - b_i^1 \dot{\varepsilon} - b_i^2 \dot{T} + \sum_{k=1}^n g_{ik} \frac{z_k - c_k^1 \varepsilon - c_k^2 T}{\tau_k^r a_T(T, T^r) a(\varepsilon, \dot{\varepsilon}, \sigma)} \quad i = 1..n \\ \Delta_{n+k+2} &= \dot{z}_k + \frac{z_k - c_k^1 \varepsilon - c_k^2 T}{\tau_k^r a_T(T, T^r) a(\varepsilon, \dot{\varepsilon}, \sigma)} \quad k = 1..n \end{aligned} \quad (V.19)$$

Essayons à présent de proposer une forme de groupe de symétrie pour le système (V.19).

V.2.2 Construction de courbes maîtresses expérimentales

La question que nous allons nous poser dans cette section est la suivante : "existe-t-il une transformation analytique qui permet de transformer un jeu de courbes expérimentales $\sigma = \sigma(\varepsilon)$ et $\dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}(\varepsilon)$ obtenues pour une certaine hauteur H_0 (voir la figure V.3) en un autre jeu de courbes $\sigma' = \sigma'(\varepsilon)$ et $\dot{\varepsilon}' = \dot{\varepsilon}'(\varepsilon)$ obtenues pour une autre valeur de H_0 ?". Intéressons nous pour l'instant à l'évolution de la vitesse de déformation $\dot{\varepsilon}$ en fonction de la déformation ε .

❶ **Superposition des courbes expérimentales $(\varepsilon, \dot{\varepsilon})$:** L'allure des courbes de la figure V.3 (b) laisse croire au premier coup d'oeil qu'une courbe \tilde{C} représentant un ensemble de point $(\tilde{\varepsilon}, \tilde{\dot{\varepsilon}})$ (par exemple la courbe violette) serait l'image d'une autre courbe C (représentant un ensemble de points $(\varepsilon, \dot{\varepsilon})$, par exemple la courbe verte) par une homothétie. Pour vérifier la validité de cette hypothèse, nous avons tout d'abord affecté une notation pour les différentes courbes. Nous noterons ainsi $\varepsilon_X(t)$ et $\dot{\varepsilon}_X(t)$ la déformation et la vitesse de déformation au cours du temps obtenue pour une hauteur initiale de la masse donnée par $H_0 = X$ cm. Nous avons ensuite essayé de trouver un jeu de coefficients :

$$a_{15 \rightarrow 90} ; a_{30 \rightarrow 90} ; a_{50 \rightarrow 90} ; a_{60 \rightarrow 90} \quad (V.20)$$

tels que les relations :

$$\begin{cases} \varepsilon_{90}(t) = a_{15 \rightarrow 90} \varepsilon_{15}(t) \\ \dot{\varepsilon}_{90}(t) = a_{15 \rightarrow 90} \dot{\varepsilon}_{15}(t) \end{cases} ; \begin{cases} \varepsilon_{90}(t) = a_{30 \rightarrow 90} \varepsilon_{30}(t) \\ \dot{\varepsilon}_{90}(t) = a_{30 \rightarrow 90} \dot{\varepsilon}_{30}(t) \end{cases} \quad (V.21)$$

$$\begin{cases} \varepsilon_{90}(t) = a_{50 \rightarrow 90} \varepsilon_{50}(t) \\ \dot{\varepsilon}_{90}(t) = a_{50 \rightarrow 90} \dot{\varepsilon}_{50}(t) \end{cases} ; \begin{cases} \varepsilon_{90}(t) = a_{60 \rightarrow 90} \varepsilon_{60}(t) \\ \dot{\varepsilon}_{90}(t) = a_{60 \rightarrow 90} \dot{\varepsilon}_{60}(t) \end{cases}$$

soient valides à chaque instant. Soulignons le fait qu'une homothétie vis à vis des variables $(\varepsilon, \dot{\varepsilon})$ se traduit par une translation dans le plan $(\ln \varepsilon, \ln \dot{\varepsilon}^*)$ en réécrivant les relations (V.21) sous forme logarithmique⁴ :

$$\begin{cases} \ln \varepsilon_{90}(t) = \ln a_{15 \rightarrow 90} + \ln \varepsilon_{15}(t) \\ \ln \dot{\varepsilon}_{90}^*(t) = \ln a_{15 \rightarrow 90} + \ln \dot{\varepsilon}_{15}^*(t) \end{cases} ; \begin{cases} \ln \varepsilon_{90}(t) = \ln a_{30 \rightarrow 90} + \ln \varepsilon_{30}(t) \\ \ln \dot{\varepsilon}_{90}^*(t) = \ln a_{30 \rightarrow 90} + \ln \dot{\varepsilon}_{30}^*(t) \end{cases} \quad (\text{V.22})$$

$$\begin{cases} \ln \varepsilon_{90}(t) = \ln a_{50 \rightarrow 90} + \ln \varepsilon_{50}(t) \\ \ln \dot{\varepsilon}_{90}^*(t) = \ln a_{50 \rightarrow 90} + \ln \dot{\varepsilon}_{50}^*(t) \end{cases} ; \begin{cases} \ln \varepsilon_{90}(t) = \ln a_{60 \rightarrow 90} + \ln \varepsilon_{60}(t) \\ \ln \dot{\varepsilon}_{90}^*(t) = \ln a_{60 \rightarrow 90} + \ln \dot{\varepsilon}_{60}^*(t) \end{cases} \quad (\text{V.23})$$

dans lesquelles nous avons défini une vitesse de déformation adimensionnelle sous la forme :

$$\dot{\varepsilon}^* = \frac{\dot{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}_{ref}} \quad \text{avec } \dot{\varepsilon}_{ref} = 1 \text{ s}^{-1} \quad (\text{V.24})$$

Les équations (V.22) et (V.23) montrent clairement que si l'hypothèse d'homothétie est valide, alors toutes les courbes expérimentales $(\varepsilon, \dot{\varepsilon})$ peuvent se déduire l'une de l'autre par une translation parallèlement au vecteur directeur $(1, 1)$ dans le plan $(\ln \varepsilon, \ln \dot{\varepsilon}^*)$. Pour vérifier la validité de notre hypothèse, nous avons ainsi retracé les courbes de la figure V.3 (b) dans le plan $(\ln \varepsilon, \ln \dot{\varepsilon}^*)$, et vérifié qu'il était possible de superposer approximativement toutes les courbes sur une courbe de référence en traduisant celles-ci parallèlement au vecteur directeur $(1, 1)$. La courbe de référence choisie ici, qualifiée de courbe maîtresse, est la courbe obtenue pour $H_0 = 90 \text{ cm}$ (voir figure V.4).

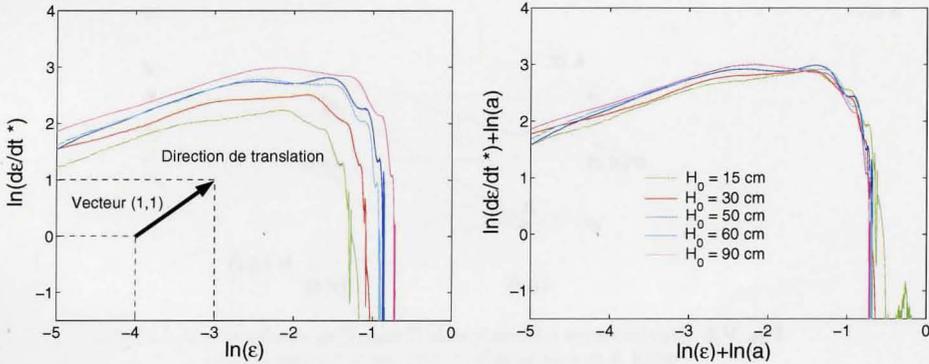


Fig. V.4: (a) Représentation graphique dans le plan $(\ln \varepsilon, \ln \dot{\varepsilon}^*)$ de la vitesse de déformation $\dot{\varepsilon}$ en fonction de la déformation ε pour les différentes hauteurs H_0 (b) Courbe maîtresse obtenue pour $H_0 = 90 \text{ cm}$ par translation des autres courbes parallèlement à une droite de vecteur directeur $(1, 1)$.

Les logarithmes des coefficients $a_{15 \rightarrow 90}$, $a_{30 \rightarrow 90}$, $a_{50 \rightarrow 90}$, $a_{60 \rightarrow 90}$ ont pu être mesurés directement lors de l'élaboration de la courbe maîtresse de la figure V.4. Les valeurs obtenues sont les suivantes :

$$\ln a_{15 \rightarrow 90} \approx 0.52 ; \quad \ln a_{30 \rightarrow 90} \approx 0.36 ; \quad \ln a_{50 \rightarrow 90} \approx \ln a_{60 \rightarrow 90} \approx 0.22 \quad (\text{V.25})$$

⁴On devrait rigoureusement écrire $\ln \frac{\dot{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}_0}$ avec $\dot{\varepsilon}_0 = 1 \text{ s}^{-1}$ au lieu de $\ln \dot{\varepsilon}$. Par abus de notations, on peut ici ne pas faire apparaître le terme $\dot{\varepsilon}_0$ car celui-ci se simplifie dans les relations (V.21)

Les imprécisions expérimentales font que les courbes obtenues pour les hauteurs $H_0 = 50\text{cm}$ et $H_0 = 60\text{cm}$ sont difficilement différentiables. Nous avons admis pour la suite un facteur de glissement identique pour ces deux courbes, comme le montre l'équation (V.25). Ajoutons également que la courbe obtenue pour $H_0 = 90\text{cm}$ se déduit d'elle même, ce qui nous permet de poser $\ln a_{90 \rightarrow 90} = 0$. Intéressons-nous maintenant à la superposition des courbes en contraintes.

❶ **Superposition des courbes expérimentales** (ε, σ) : Nous pouvons à ce stade formuler intuitivement une "ébauche de groupe de symétrie" pour le comportement de la colle via les relations :

$$\begin{cases} \ln \bar{\varepsilon} &= \ln a + \ln \varepsilon \\ \ln \bar{\varepsilon}^* &= \ln a + \ln \varepsilon^* \\ \bar{\sigma} &= \bar{\sigma}(\varepsilon, \dot{\varepsilon}, \sigma) \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} \bar{\varepsilon} &= a\varepsilon \\ \bar{\varepsilon}^* &= a\varepsilon^* \\ \bar{\sigma} &= \bar{\sigma}(\varepsilon, \dot{\varepsilon}, \sigma) \end{cases} \quad (\text{V.26})$$

Pour trouver la forme de $\bar{\sigma}$ à partir des courbes expérimentales, nous avons scindé le "groupe" en deux "parties". La figure V.5 représente symboliquement l'image C (de coordonnées $(\bar{\varepsilon}, \bar{\varepsilon}^*, \bar{\sigma})$) d'un point A de coordonnées $(\varepsilon, \dot{\varepsilon}, \sigma)$. Le point A appartient à une partition $\sigma(\varepsilon, \dot{\varepsilon})$ du plan $(\varepsilon, \dot{\varepsilon}, \sigma)$ (courbe rouge de la figure V.5) et le point C à une partition $\bar{\sigma}(\bar{\varepsilon}, \bar{\varepsilon}^*)$ de ce même plan (courbe bleue de la figure V.5). L'idée employée ici est de voir le passage du point A au point C comme la succession du passage de A à B (de coordonnées $(\bar{\varepsilon}, \bar{\varepsilon}^*, \sigma)$), puis de B à C.

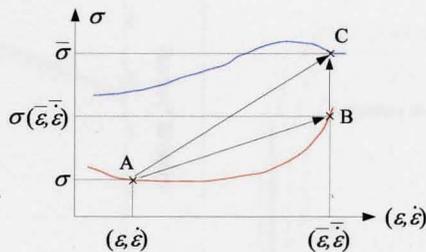


Fig. V.5: Représentation schématique de l'image C de coordonnées $(\bar{\varepsilon}, \bar{\varepsilon}^*, \bar{\sigma})$ d'un point A de coordonnées $(\varepsilon, \dot{\varepsilon}, \sigma)$ par le "groupe" (V.26).

En d'autres termes, nous avons tracé (voir la figure V.6) le jeu de courbes (passage de A à B) :

1. $\ln \sigma_{15}^*$ en fonction $\ln \varepsilon_{15} + \ln a_{15 \rightarrow 90}$
2. $\ln \sigma_{30}^*$ en fonction $\ln \varepsilon_{30} + \ln a_{30 \rightarrow 90}$
3. $\ln \sigma_{50}^*$ en fonction $\ln \varepsilon_{50} + \ln a_{50 \rightarrow 90}$
4. $\ln \sigma_{60}^*$ en fonction $\ln \varepsilon_{60} + \ln a_{60 \rightarrow 90}$
5. $\ln \sigma_{90}^*$ en fonction $\ln \varepsilon_{90}$

et tenté de superposer par une application analytique les nouvelles courbes obtenues (passage de B à C).

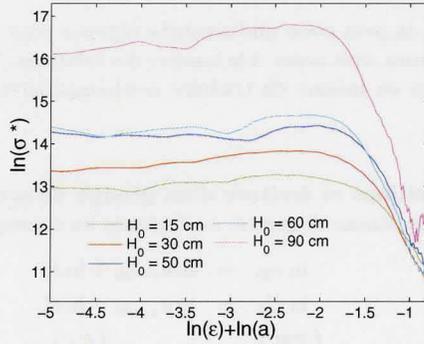


Fig. V.6: Représentation graphique dans le plan $(\ln \varepsilon, \ln \sigma^*)$ du logarithme $\ln \sigma^*$ de la contrainte adimensionnelle en fonction de la déformation $a\varepsilon$ transformée par le "groupe" (voir équation (V.26)) pour les différentes hauteurs H_0 .

Comme dans le paragraphe précédent la courbe de référence est celle obtenue pour $H_0 = 90\text{cm}$. La forme des courbes de la figure V.6 suggère qu'on peut passer d'une courbe à une autre par le biais d'une dilatation sur l'échelle des ordonnées. Nous avons ainsi essayé de trouver un jeu de coefficients :

$$b_{15 \rightarrow 90} ; b_{30 \rightarrow 90} ; b_{50 \rightarrow 90} ; b_{60 \rightarrow 90} ; \sigma_0 \tag{V.27}$$

tels que les relations de correspondance suivantes :

$$\begin{aligned} \ln \left(\frac{\sigma_{90}}{\sigma_0} \right) &= b_{15 \rightarrow 90} \ln \left(\frac{\sigma_{15}}{\sigma_0} \right) & \ln \left(\frac{\sigma_{90}}{\sigma_0} \right) &= b_{50 \rightarrow 90} \ln \left(\frac{\sigma_{50}}{\sigma_0} \right) \\ \ln \left(\frac{\sigma_{90}}{\sigma_0} \right) &= b_{30 \rightarrow 90} \ln \left(\frac{\sigma_{30}}{\sigma_0} \right) & \ln \left(\frac{\sigma_{90}}{\sigma_0} \right) &= b_{60 \rightarrow 90} \ln \left(\frac{\sigma_{60}}{\sigma_0} \right) \end{aligned} \tag{V.28}$$

soient "graphiquement" vérifiées pour les courbes de la figure V.6. La constante σ_0 intervenant dans les relations (V.28) permet d'adimensionner le contenu des logarithmes. Les valeurs retenues pour les coefficients (V.27) sont les suivantes :

$$b_{15 \rightarrow 90} \approx 2.48 ; b_{30 \rightarrow 90} \approx 1.97 ; b_{50 \rightarrow 90} \approx b_{60 \rightarrow 90} \approx 1.53 ; \sigma_0 \approx 59900 \text{ Pa} \tag{V.29}$$

et la courbe maîtresse obtenue est tracée dans la figure V.7.

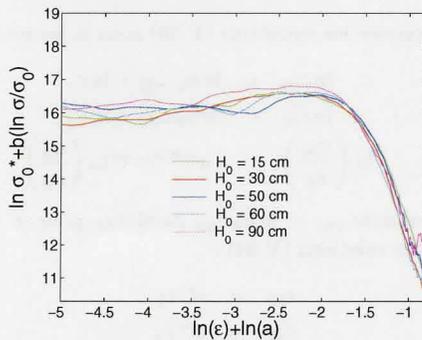


Fig. V.7: Courbe maîtresse en contrainte pour la hauteur $H_0 = 90\text{cm}$ obtenue dans le plan $(\ln \varepsilon, \ln \sigma^*)$ par l'application des relations (V.28).

Comme précédemment, on peut noter que la courbe obtenue pour $H_0 = 90\text{cm}$ peut se déduire d'elle même. Nous pourrions ainsi poser, à la lumière des relations (V.28), la valeur $b_{90 \rightarrow 90} = 1$. Nous sommes désormais en mesure de traduire mathématiquement les résultats que nous venons d'exposer.

❸ **Bilan des superpositions et écriture d'un groupe de symétrie :** Pour résumer ce qui vient d'être dit, nous venons de mettre en évidence les correspondances :

$$\begin{aligned} \ln \varepsilon_{90} &= \ln a_{x \rightarrow 90} + \ln \varepsilon_x \\ \ln \dot{\varepsilon}_{90}^* &= \ln a_{x \rightarrow 90} + \ln \dot{\varepsilon}_x^* \\ \ln \left(\frac{\sigma_{90}}{\sigma_0} \right) &= b_{x \rightarrow 90} \ln \left(\frac{\sigma_x}{\sigma_0} \right) \end{aligned} \quad (\text{V.30})$$

où x peut prendre les valeurs 15, 30, 50 et 60. L'ensemble des valeurs des coefficients $\ln a_{x \rightarrow 90}$ et $b_{x \rightarrow 90}$ a été résumé dans le tableau V.1.

x	15	30	50	60	90
$\ln a_{x \rightarrow 90}$	0.52	0.36	0.22	0.22	0
$b_{x \rightarrow 90}$	2.48	1.97	1.53	1.53	1

TAB. V.1: Tableau récapitulatif des coefficients trouvés lors de l'élaboration des courbes maîtresses.

Pour faire apparaître un groupe de symétrie à un paramètre μ , nous avons recherché une description paramétrique des coefficients $\ln a_{x \rightarrow 90}$ et $b_{x \rightarrow 90}$ sous la forme :

$$\ln a_{x \rightarrow 90} = \ln a_{x \rightarrow 90}(\mu) \quad (\text{V.31})$$

$$b_{x \rightarrow 90} = b_{x \rightarrow 90}(\mu) \quad (\text{V.32})$$

Pour y parvenir, nous avons essayé deux ajustements "simples" de $b_{x \rightarrow 90}$ en fonction de $a_{x \rightarrow 90}$: un ajustement linéaire et un ajustement exponentiel. Le coefficient de corrélation R de l'ajustement exponentiel étant sensiblement plus grand que celui obtenu pour l'ajustement linéaire (99.24 % au lieu de 99.18 %), nous avons retenu :

$$b_{x \rightarrow 90} = \beta e^{\alpha \ln a_{x \rightarrow 90}} \quad \text{avec } \beta = 1.045 \text{ et } \alpha = 1.687 \quad (\text{V.33})$$

Il est ainsi possible de réécrire les équations (V.30) sous la forme :

$$\begin{aligned} \ln \varepsilon_{90} &= \ln a_{x \rightarrow 90} + \ln \varepsilon_x \\ \ln \dot{\varepsilon}_{90}^* &= \ln a_{x \rightarrow 90} + \ln \dot{\varepsilon}_x^* \\ \ln \left(\frac{\sigma_{90}}{\sigma_0} \right) &= \beta e^{\alpha \ln a_{x \rightarrow 90}} \ln \left(\frac{\sigma_x}{\sigma_0} \right) \end{aligned} \quad (\text{V.34})$$

où, en posant pour paramètre $\mu_x = \ln a_{x \rightarrow 90}$ (toujours pour $x = 15, 30, 50$ ou 60) et en prenant l'exponentielle des relations (V.34) :

$$\begin{aligned} \varepsilon_{90} &= e^{\mu_x} \varepsilon_x \\ \dot{\varepsilon}_{90}^* &= e^{\mu_x} \dot{\varepsilon}_x^* \\ \frac{\sigma_{90}}{\sigma_0} &= \left(\frac{\sigma_x}{\sigma_0} \right)^{\beta e^{\alpha \mu_x}} \end{aligned} \quad (\text{V.35})$$

Les équations (V.36) ne sont vérifiées expérimentalement que pour les quatre valeurs $x = 15, 30, 50$ et 60 , qui correspondent aux quatre valeurs du paramètre $\mu_x = \ln a_{x \rightarrow 90}$ données dans le tableau V.1. L'hypothèse clé que nous faisons ici est que ces équations restent valides pour toute valeur du paramètre μ_x que nous noterons désormais μ . Nous postulons ainsi que les relations :

$$\begin{aligned} \bar{\varepsilon} &= e^\mu \varepsilon \\ \bar{\dot{\varepsilon}} &= e^\mu \dot{\varepsilon} \\ \frac{\bar{\sigma}}{\sigma_0} &= \left(\frac{\sigma}{\sigma_0} \right)^{\beta e^{\alpha \mu}} \end{aligned} \quad (V.36)$$

définissent la forme d'un groupe de symétrie pour la loi de comportement de la colle, en ce sens qu'elles transforment une évolution réelle de la colle donnée par un jeu d'application $\varepsilon(t), \dot{\varepsilon}(t)$, et $\sigma(t)$ en une autre évolution réelle, donc un autre jeu de courbes $\bar{\varepsilon}(t), \bar{\dot{\varepsilon}}(t)$, et $\bar{\sigma}(t)$.

④ **Vérification de la structure de groupe et écriture du générateur :** Pour s'assurer que les relations (V.36) définissent bien un groupe de symétrie, nous avons vérifié les 3 axiomes suivants :

1. **existence d'un élément neutre :** si $\mu = 0$, alors les égalités (V.36) s'écrivent :

$$\begin{aligned} \bar{\varepsilon} &= \varepsilon \\ \bar{\dot{\varepsilon}} &= \dot{\varepsilon} \\ \bar{\sigma} &= \sigma \end{aligned} \quad (V.37)$$

ce qui correspond bien à l'application identique.

2. **existence d'un inverse au sens de la composition :** réécrivons d'abord les égalités (V.36) sous la forme :

$$\begin{aligned} \bar{\varepsilon} &= e^\mu \varepsilon \\ \bar{\dot{\varepsilon}} &= e^\mu \dot{\varepsilon} \\ \bar{\sigma} &= \sigma_0 \left(\frac{\sigma}{\sigma_0} \right)^{\beta e^{\alpha \mu}} \end{aligned} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{aligned} \bar{\varepsilon} &= f(\varepsilon, \dot{\varepsilon}, \sigma, \mu) \\ \bar{\dot{\varepsilon}} &= g(\varepsilon, \dot{\varepsilon}, \sigma, \mu) \\ \bar{\sigma} &= h(\varepsilon, \dot{\varepsilon}, \sigma, \mu) \end{aligned} \quad (V.38)$$

L'inversion de (V.36) mène à :

$$\begin{aligned} \varepsilon &= e^{-\mu} \bar{\varepsilon} \\ \dot{\varepsilon} &= e^{-\mu} \bar{\dot{\varepsilon}} \\ \sigma &= \sigma_0 \left(\frac{\bar{\sigma}}{\sigma_0} \right)^{\frac{1}{\beta e^{\alpha \mu}}} = \sigma_0 \left(\frac{\bar{\sigma}}{\sigma_0} \right)^{\frac{e^{-\alpha \mu}}{\beta}} \end{aligned} \quad (V.39)$$

Nous voyons, en comparant les équations (V.36), (V.38), et (V.39) que les relations :

$$\begin{aligned} \varepsilon &= f(\bar{\varepsilon}, \bar{\dot{\varepsilon}}, \bar{\sigma}, -\mu) \\ \dot{\varepsilon} &= g(\bar{\varepsilon}, \bar{\dot{\varepsilon}}, \bar{\sigma}, -\mu) \\ \bar{\sigma} &= h(\bar{\varepsilon}, \bar{\dot{\varepsilon}}, \bar{\sigma}, -\mu) \end{aligned} \quad (V.40)$$

sont vérifiées à condition que l'égalité :

$$\beta = \frac{1}{\beta} \Leftrightarrow \beta = 1 \quad (\text{V.41})$$

soit satisfaite. Nous admettons que cette contrainte est validée compte tenu de la valeur numérique $\beta = 1.045$ (voir l'équation (V.33)). Nous avons ainsi admis $\beta = 1$, ce qui confirme l'axiome d'inversion.

3. associativité au sens de la composition : supposons les relations :

$$\begin{aligned} \varepsilon_2 &= e^{\mu_1} \varepsilon_1 & \varepsilon_3 &= e^{\mu_2} \varepsilon_2 \\ \dot{\varepsilon}_2 &= e^{\mu_1} \dot{\varepsilon}_1 & \dot{\varepsilon}_3 &= e^{\mu_2} \dot{\varepsilon}_2 \\ \frac{\sigma_2}{\sigma_0} &= \left(\frac{\sigma_1}{\sigma_0} \right)^{e^{\alpha \mu_1}} & \text{et} & \quad \frac{\sigma_3}{\sigma_0} = \left(\frac{\sigma_2}{\sigma_0} \right)^{e^{\alpha \mu_2}} \end{aligned} \quad (\text{V.42})$$

Alors, il vient :

$$\begin{aligned} \varepsilon_3 &= e^{\mu_1 + \mu_2} \varepsilon_1 \\ \dot{\varepsilon}_3 &= e^{\mu_1 + \mu_2} \dot{\varepsilon}_1 \\ \frac{\sigma_3}{\sigma_0} &= \left(\frac{\sigma_1}{\sigma_0} \right)^{e^{\alpha \mu_1} e^{\alpha \mu_2}} = \left(\frac{\sigma_1}{\sigma_0} \right)^{e^{\alpha(\mu_1 + \mu_2)}} \end{aligned} \quad (\text{V.43})$$

Nous avons ainsi montré que si :

$$\begin{aligned} \varepsilon_2 &= f(\varepsilon_1, \dot{\varepsilon}_1, \sigma_1, \mu_1) & \varepsilon_3 &= f(\varepsilon_2, \dot{\varepsilon}_2, \sigma_2, \mu_2) \\ \dot{\varepsilon}_2 &= g(\varepsilon_1, \dot{\varepsilon}_1, \sigma_1, \mu_1) & \dot{\varepsilon}_3 &= g(\varepsilon_2, \dot{\varepsilon}_2, \sigma_2, \mu_2) \\ \sigma_2 &= h(\varepsilon_1, \dot{\varepsilon}_1, \sigma_1, \mu_1) & \sigma_3 &= h(\varepsilon_2, \dot{\varepsilon}_2, \sigma_2, \mu_2) \end{aligned} \quad (\text{V.44})$$

alors nous avons les relations :

$$\begin{aligned} \varepsilon_3 &= f(\varepsilon_1, \dot{\varepsilon}_1, \sigma_1, \mu_1 + \mu_2) \\ \dot{\varepsilon}_3 &= g(\varepsilon_1, \dot{\varepsilon}_1, \sigma_1, \mu_1 + \mu_2) \\ \sigma_3 &= h(\varepsilon_1, \dot{\varepsilon}_1, \sigma_1, \mu_1 + \mu_2) \end{aligned} \quad (\text{V.45})$$

Par suite, l'axiome d'associativité est aisément vérifié.

Nous avons ainsi montré que les relations (V.36) définissent bien une forme de groupe de symétrie, que nous noterons désormais G_0 . Nous allons dès à présent calculer les composantes ϕ^ε , $\phi^{\dot{\varepsilon}}$, et ϕ^σ du générateur v_0 de G_0 associées respectivement aux variables ε , $\dot{\varepsilon}$ et σ . Ces composantes sont définies via les relations (V.38) (pour lesquelles on prend $\beta = 1$) sous la forme :

$$\phi^\varepsilon = \left. \frac{\partial f(\varepsilon, \dot{\varepsilon}, \sigma, \mu)}{\partial \mu} \right|_{\mu=0} ; \quad \phi^{\dot{\varepsilon}} = \left. \frac{\partial g(\varepsilon, \dot{\varepsilon}, \sigma, \mu)}{\partial \mu} \right|_{\mu=0} ; \quad \phi^\sigma = \left. \frac{\partial h(\varepsilon, \dot{\varepsilon}, \sigma, \mu)}{\partial \mu} \right|_{\mu=0} \quad (\text{V.46})$$

ce qui, après calcul, permet d'écrire :

$$\phi^\varepsilon = \varepsilon ; \quad \phi^{\dot{\varepsilon}} = \dot{\varepsilon} ; \quad \phi^\sigma = \alpha \sigma \ln \left(\frac{\sigma}{\sigma_0} \right) \quad (\text{V.47})$$

Pour trouver la composante ξ associée à la variable temps t , nous avons réécrit la formule du prolongement (voir l'équation (E.14)), qui implique dans notre cas que :

$$\phi^{\dot{\varepsilon}} = \dot{\phi}^\varepsilon - \dot{\xi} \dot{\varepsilon} \Rightarrow \dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon} - \dot{\xi} \dot{\varepsilon} \Rightarrow \dot{\xi} = 0 \Rightarrow \xi = C \quad (\text{V.48})$$

Pour trouver la valeur de la constante C , nous exigeons que la condition initiale suivante, écrite comme la solution du système d'EDP d'ordre 0 :

$$t = 0 ; \quad \varepsilon = 0 ; \quad \sigma = 0 \quad (V.49)$$

doit être conservée par le groupe G_0 . Nous avons montré au chapitre précédent (voir l'équation (IV.64)), que cette condition initiale impose que :

$$\xi = 0 \quad \text{pour les valeurs} \quad t = 0, \varepsilon = 0, \sigma = 0 \quad (V.50)$$

$$\phi^\varepsilon = 0 \quad \text{pour les valeurs} \quad t = 0, \varepsilon = 0, \sigma = 0 \quad (V.51)$$

$$\phi^\sigma = 0 \quad \text{pour les valeurs} \quad t = 0, \varepsilon = 0, \sigma = 0 \quad (V.52)$$

L'équation (V.51) est vérifiée compte tenu du fait que $\phi^\varepsilon = \varepsilon$. L'équation (V.52) est satisfaite car la fonction $x \rightarrow x \ln x$ admet un prolongement par continuité en $x = 0$. Par suite :

$$\lim_{\sigma \rightarrow 0} \left[\alpha \sigma \ln \left(\frac{\sigma}{\sigma_0} \right) \right] = 0 \quad (V.53)$$

si bien que l'on peut poser $\phi^\sigma = 0$ pour $\sigma = 0$. Enfin, la relation (V.50) implique clairement que la constante C de la relation (V.48) est nulle, ce qui mène à $\xi = 0$. Nous avons ainsi construit une "partie" du générateur \mathbf{v}_0 . Rappelons en effet que nous n'observons expérimentalement que les grandeurs ε , $\dot{\varepsilon}$, et σ , si bien qu'il est impossible a priori de modéliser des composantes de \mathbf{v}_0 vis à vis des autres variables thermodynamiques (T , z_k , s , et A_k) apparaissant dans le système (V.19). La nullité de la composante ξ associée au temps fait que la composante $\phi^{\dot{x}}$ associée à la variable \dot{x} (qui peut être ε , T , z_k , σ , s , ou A_k) coïncide avec la dérivée $\dot{\phi}^x$ de la composante en x . Ecrivons ainsi le prolongement à l'ordre 1 de \mathbf{v}_0 sous la forme⁵ (voir la définition (E.2.1)) :

$$\begin{aligned} pr^{(1)} \mathbf{v}_0 = & \varepsilon \frac{\partial}{\partial \varepsilon} + \phi^T \frac{\partial}{\partial T} + \phi^{z_k} \frac{\partial}{\partial z_k} + \alpha \sigma \ln \left(\frac{\sigma}{\sigma_0} \right) \frac{\partial}{\partial \sigma} + \phi^s \frac{\partial}{\partial s} \\ & + \phi^{A_k} \frac{\partial}{\partial A_k} + \dot{\varepsilon} \frac{\partial}{\partial \dot{\varepsilon}} + \dot{\phi}^T \frac{\partial}{\partial \dot{T}} + \dot{\phi}^{z_k} \frac{\partial}{\partial \dot{z}_k} \\ & + \alpha \dot{\sigma} \left(1 + \ln \left(\frac{\sigma}{\sigma_0} \right) \right) \frac{\partial}{\partial \dot{\sigma}} + \dot{\phi}^s \frac{\partial}{\partial \dot{s}} + \dot{\phi}^{A_k} \frac{\partial}{\partial \dot{A}_k} \end{aligned} \quad (V.54)$$

Les composantes ϕ^T , ϕ^{z_k} , ϕ^s et ϕ^{A_k} respectivement associées à la température T , aux variables internes z_k , à l'entropie s et aux forces de non équilibre A_k sont des fonctions a priori inconnues du jeu de variables complet :

$$t, \varepsilon, T, z_k, \sigma, s, A_k \quad (V.55)$$

Nous sommes maintenant en mesure de chercher la forme du facteur de glissement $a(\varepsilon, \dot{\varepsilon}, \sigma)$ compatible avec le groupe de symétrie que nous avons trouvé à l'aide des courbes expérimentales.

⁵La variable indépendante est ici le temps t et les variables dépendantes sont ε , T , z_k , σ , s , A_k .

V.2.3 Position du problème sur le plan mathématique

Le système différentiel que nous proposons de résoudre consiste en l'application de la condition de symétrie :

$$pr^{(1)}v_0\Delta = 0 \quad \text{là où} \quad \Delta = 0 \quad (\text{V.56})$$

dans laquelle le vecteur Δ et le champ de vecteur $pr^{(1)}v_0$ sont donnés respectivement par les équations (V.19) et (V.54). Les inconnues du problème sont les fonctions :

$$\phi^T ; \phi^{z_k} ; \phi^s ; \phi^{A_k} ; a_T ; a \quad (\text{V.57})$$

c'est-à-dire les composantes en T , z_k , s et A_k ainsi que les deux facteurs de glissement a_T et a (voir les équations (V.19)). La stratégie de résolution adoptée est la suivante :

1. calculer effectivement la quantité $pr^{(1)}v_0\Delta$ dans laquelle apparaissent les termes $\dot{\sigma}$, \dot{s} , \dot{A}_k et \dot{z}_k .
2. réinjecter dans l'expression précédente les valeurs de $\dot{\sigma}$, \dot{s} , \dot{A}_k et \dot{z}_k obtenues par résolution du système $\Delta = 0$, soit :

$$\begin{aligned} \dot{\sigma} &= E_u \dot{\varepsilon} - \alpha_u E_u \dot{T} - \sum_{k=1}^n b_k^1 \frac{z_k - c_k^1 \varepsilon - c_k^2 T}{\tau_k^r a_T(T, T^r) a(\varepsilon, \dot{\varepsilon}, \sigma)} \\ \dot{s} &= \alpha_u E_u \dot{\varepsilon} - C_u \frac{\dot{T}}{T} + \sum_{k=1}^n b_k^2 \frac{z_k - c_k^1 \varepsilon - c_k^2 T}{\tau_k^r a_T(T, T^r) a(\varepsilon, \dot{\varepsilon}, \sigma)} \\ \dot{A}_i &= b_i^1 \dot{\varepsilon} - b_i^2 \dot{T} + \sum_{k=1}^n g_{ik} \frac{z_k - c_k^1 \varepsilon - c_k^2 T}{\tau_k^r a_T(T, T^r) a(\varepsilon, \dot{\varepsilon}, \sigma)} \quad i = 1..n \\ \dot{z}_k &= - \frac{z_k - c_k^1 \varepsilon - c_k^2 T}{\tau_k^r a_T(T, T^r) a(\varepsilon, \dot{\varepsilon}, \sigma)} \quad k = 1..n \end{aligned} \quad (\text{V.58})$$

3. résoudre le système d'EDP ainsi obtenu vis à vis des inconnues (V.57).

Nous avons tenté de résoudre ce problème à l'aide du logiciel Maple[®]. Malheureusement, la lourdeur des calculs fait qu'aucune solution n'a pu être renvoyée par la machine.

V.2.4 Simplification du problème

La résolution de la condition de symétrie (V.56) peut être simplifiée si l'on se donne quelques hypothèses supplémentaires :

- on ne s'intéresse qu'à l'équation d'évolution vis à vis de la contrainte σ .
- on néglige les effets de couplage thermomécanique et la dépendance en température du facteur de glissement a .
- on ne considère qu'un seul mode.

Commençons par reformuler l'équation qui déterminera le comportement en contrainte et déformation de la colle.

❶ **Réécriture de la loi de comportement :** Compte tenu des hypothèses précédentes, l'équation rhéologique reliant la contrainte σ et la déformation ε est donnée par une réécriture de la relation (IV.77) pour $n = 1$, soit :

$$\Delta = \dot{\sigma} - E_u \dot{\varepsilon} + \frac{\sigma - \sigma^r}{\tau} = 0 \quad (\text{V.59})$$

Comme pour le problème général, le temps de relaxation τ s'écrit comme le produit d'un temps de référence τ^r par un facteur de glissement a . Nous ne garderons toutefois que la dépendance vis à vis des variables ε , $\dot{\varepsilon}$, et σ , soit :

$$\tau = \tau^r a(\varepsilon, \dot{\varepsilon}, \sigma) \quad (\text{V.60})$$

Pour la contrainte relaxée, nous avons gardé l'approximation linéaire de l'équation (IV.81), soit :

$$\sigma^r = E_r \varepsilon \quad (\text{V.61})$$

où E_r est le module relaxé. Finalement, compte tenu des relations (V.60) et (V.61), la loi de comportement (V.59) s'écrit :

$$\Delta = \dot{\sigma} - E_u \dot{\varepsilon} + \frac{\sigma - E_r \varepsilon}{\tau^r a(\varepsilon, \dot{\varepsilon}, \sigma)} = 0 \quad (\text{V.62})$$

Voyons à présent comment réécrire la relation (V.56).

❷ **Application de la condition de symétrie :** Les seules variables dépendantes qui apparaissent dans l'équation (V.62) sont σ et ε . Le prolongement du champ de vecteur \mathbf{v}_0 (voir l'équation (V.54)) peut donc être réécrit (dans ce calcul simplifié) uniquement à l'aide de ses composantes en ε , $\dot{\varepsilon}$, σ , $\dot{\sigma}$:

$$pr^{(1)}\mathbf{v}_0 = \varepsilon \frac{\partial}{\partial \varepsilon} + \alpha \sigma \ln \left(\frac{\sigma}{\sigma_0} \right) \frac{\partial}{\partial \sigma} + \dot{\varepsilon} \frac{\partial}{\partial \dot{\varepsilon}} + \alpha \dot{\sigma} \left(1 + \ln \left(\frac{\sigma}{\sigma_0} \right) \right) \frac{\partial}{\partial \dot{\sigma}} \quad (\text{V.63})$$

La condition de symétrie :

$$pr^{(1)}\mathbf{v}_0 \Delta = 0 \quad \text{là où} \quad \Delta = 0 \quad (\text{V.64})$$

où $pr^{(1)}\mathbf{v}_0$ est donné par (V.63) et Δ par (V.62) conduit à une EDP dont l'unique inconnue est la fonctionnelle $a(\varepsilon, \dot{\varepsilon}, \sigma)$. Nous avons une fois de plus programmé cette EDP à l'aide de Maple[®], et la solution est donnée par :

$$a(\varepsilon, \dot{\varepsilon}, \sigma) = \frac{\sigma_0(\sigma - E_r \varepsilon)}{E_u \dot{\varepsilon} \tau^r \sigma_0 + \varepsilon^\alpha \sigma f \left[\frac{\dot{\varepsilon}}{\varepsilon}, \frac{1}{\varepsilon^\alpha} \ln \left(\frac{\sigma}{\sigma_0} \right) \right]} \quad (\text{V.65})$$

où $f(x, y)$ est une fonction arbitraire de deux variables. En réinjectant cette forme de facteur de glissement dans la relation (V.62), on obtient une structure "particularisée" mais formelle de loi de comportement⁶ :

$$\dot{\sigma} = \frac{\sigma \varepsilon^\alpha}{\tau^r \sigma_0} f \left[\frac{\dot{\varepsilon}}{\varepsilon}, \frac{1}{\varepsilon^\alpha} \ln \left(\frac{\sigma}{\sigma_0} \right) \right] \quad (\text{V.66})$$

⁶Pour s'assurer que la formule trouvée est bien la plus générale, nous avons appliqué la condition de symétrie (V.56) à l'équation $\Delta = \dot{\sigma} - F(\varepsilon, \dot{\varepsilon}, \sigma) = 0$, où F est une fonctionnelle quelconque, et nous avons obtenu une forme identique à celle donnée par l'équation (V.66).

❶ **Discussion :** L'équation (V.66) serait la forme générale de la loi de comportement reliant contrainte et déformation. Nous n'avons pas réussi à trouver une forme finale compatible avec les données expérimentales. Remarquons de plus qu'il semble impossible d'établir un lien entre cette équation et l'équation choisie initialement (V.62). De ce fait, nous pouvons discuter la stratégie de modélisation que nous avons proposée.

Dans un premier temps, il faut garder à l'esprit que l'équation (V.66) n'est que la conséquence de la condition de symétrie associée au générateur v_0 , dont les composantes sont données par les relations (V.47). Ce générateur a été obtenu par une superposition graphique (donc approximative) de courbes expérimentales. Par suite, rien ne nous permet d'affirmer formellement que le champ de vecteur v_0 que nous avons trouvé est bien un groupe de symétrie pour la loi de comportement.

De manière générale, la connaissance d'une ou plusieurs symétries de l'équation de comportement nous obligerait à choisir une forme de loi de comportement (la relation (V.62) pour notre étude sur les colles) assez "souple", c'est à dire contenant un nombre de paramètres et/ou une forme tels que toutes les conditions de symétries puissent être satisfaites. La connaissance de plusieurs symétries, donc de plusieurs contraintes sur le plan mathématique, peut nous "éloigner" de la forme de loi de comportement choisie initialement, mais également du cadre thermodynamique que nous avons considéré.

Si l'on fait abstraction des deux faiblesses précédentes, le point fort qui se dégage de la stratégie proposée semble être sa grande efficacité sur le plan de la modélisation. Nous pouvons voir dans notre étude partielle sur la colle que la connaissance de la seule symétrie G_0 permet de considérablement "restreindre" la forme générale de la loi de comportement. En effet, l'application de la seule condition de symétrie (V.64) sur l'équation tout à fait générale :

$$\dot{\sigma} = f(\varepsilon, \dot{\varepsilon}, \sigma) \quad (V.67)$$

mène à la relation (V.66), qui fait déjà apparaître certains groupements de variables.

V.2.5 Conclusion

Pour clore ce chapitre, retenons que nous avons construit une stratégie a priori générale⁷ pour modéliser le comportement de matériaux. Cette stratégie repose sur l'analyse de réponses expérimentales qu'il peut être possible de superposer. Nous traduisons mathématiquement cette superposition à l'aide d'un groupe de transformation, et nous postulons que ce dernier est un groupe de symétrie pour une forme assez générale de loi de comportement. L'écriture de la condition de symétrie trouvée expérimentalement est alors susceptible de "particulariser" la forme générale retenue.

Nous avons appliqué la présente stratégie de modélisation à un matériau polymère de type colle, dans le but de commenter la forme de facteur de glissement proposée par Rahouadj et Skali-Lami (V.16). Compte tenu de la difficulté rencontrée pour trouver la fonction f apparaissant dans la relation (V.66), nous n'avons pas encore réussi à obtenir une forme de loi de comportement vérifiant la condition de symétrie et qui reproduise les données

⁷En ce sens qu'elle peut s'appliquer à tous types de matériau, et dans la mesure où elle ne nécessite qu'un jeu de courbes expérimentales.

expérimentales.

Conclusion et perspectives

L'objet principal de ce travail a consisté en une exploration des voies d'extension du formalisme de Lagrange à la mécanique des milieux continus dissipatifs, et la recherche concomittante des symétries variationnelles et locales associées au principe de la moindre action ainsi construit. Le cadre thermodynamique d'écriture des lois de comportement choisi est celui de la thermomécanique de la relaxation (approche DNLR, dont on rappelle les fondements au chapitre III), qui prend en compte les variables internes de microstructure et les cinétiques qui en fixent les lois d'évolution.

En effet, la mécanique de Lagrange n'est a priori pas compatible avec la TPI, ce que clamaient déjà en leur temps les pionniers (Poincaré,) qui s'attelaient à la tâche assignée par cette tentative de conciliation. Les débats qui agiterent la communauté des scientifiques pendant plus d'un siècle furent caractérisés par des difficultés de dialogue entre les thermodynamiciens et les mathématiciens (approches de géométrie différentielles et de mécanique symplectique). L'objectif premier de ce travail a alors consisté en une synthèse de ces deux points de vue - objet des chapitres I et II -, résultant en l'élucidation des conditions d'existence d'une forme lagrangienne associée à un ensemble donné d'EDP. La notion d'auto-adjonction en apparaît comme la clé de voute (condition nécessaire et suffisante).

L'examen des références bibliographiques montre qu'il se dégage 4 grandes classes d'approches pour l'écriture d'une fonction lagrangienne associée à des EDP non auto-adjointes. Nous pensons que ces approches présentent toutes une lacune sur le plan thermodynamique, car la notion d'auto-adjonction peut être rapprochée de celle de potentiel. En effet, l'auto-adjonction du jeu d'équations thermodynamiques peut être assurée par une généralisation de la relation d'Euler aux situations de non équilibre, conformément aux fondements de l'approche DNLR. L'ajout de variables internes qui gardent le statut de variables indépendantes tant que l'état relaxé n'est pas atteint, permet de conférer le statut de fonction potentielle à l'énergie interne E . Les équations de Maxwell sur ce potentiel E sont alors équivalentes à l'auto-adjonction des équations thermodynamiques. Le lagrangien des équations thermodynamiques d'un système décrit par un potentiel ψ peut alors être donné par :

$$L = \dot{\psi}$$

Ce résultat conduit aux jeux d'implications écrites sous forme symbolique⁸ :

$$\text{potentiel } \psi \Rightarrow \text{conditions de Maxwell sur } \psi \Rightarrow E(\dot{\psi}) \text{ autoadjoint}$$

Les équations cinétiques régissant l'évolution des variables internes ont ensuite été intégrées

⁸ $E()$ est l'opérateur d'Euler-Lagrange

dans le lagrangien L , sous forme de contrainte. Ce lagrangien prend la forme complète :

$$L = \dot{\psi} + \sum_{k=1}^n \lambda_k \frac{z_k - z_k^r}{\tau_k}$$

Le deuxième volet exploré dans ce mémoire a consisté en l'étude des symétries variationnelles des équations de comportement. Deux voies complémentaires ont été explorées :

- Une méthode de calcul des symétries variationnelles d'une loi de comportement supposée connue a été élaborée. Cette étude a mis en évidence (chapitre IV) une symétrie particulière dans le cas d'une approche DNLR simplifiée. Sur le plan physique, cette symétrie traduit un principe de superposition en temps-température dont nous avons montré la conformité à l'approche empirique WLF. Le facteur de glissement :

$$\mu(T, \bar{T}) = \frac{\Delta H^+(T - \bar{T})}{RT\bar{T}} + \ln \frac{T}{\bar{T}}$$

associé à la construction d'une courbe maîtresse a été calculé à partir de l'expression du groupe de symétrie, renforçant l'empirisme de l'approche WLF par un cadre mathématique rigoureux.

- Dans une seconde étape, nous avons mis en place une stratégie de modélisation du comportement qui s'appuie sur l'existence présupposée de courbes maîtresses expérimentales. L'existence de ces dernières est décrite mathématiquement par un groupe de Lie, qui permet a priori de dégager la structure de la loi de comportement. Cette démarche a été mise en oeuvre dans le chapitre V pour un matériau de type colle, sollicité de façon dynamique. Si une forme générale de loi de comportement a bien été mise en évidence :

$$\dot{\sigma} = \frac{\sigma \varepsilon^\alpha}{\tau^r \sigma_0} f \left[\frac{\dot{\varepsilon}}{\varepsilon}, \frac{1}{\varepsilon^\alpha} \ln \left(\frac{\sigma}{\sigma_0} \right) \right]$$

nous n'avons en revanche pas encore trouvé une forme particulière de cette loi qui soit en adéquation avec les données expérimentales.

En résumé, ce travail a ouvert des pistes nouvelles et prometteuses dans une démarche d'identification prédictive du comportement de matériaux sièges de phénomènes de relaxation. La problématique initiale de recherche de lagrangiens, que ce travail a permis de faire progresser, s'ouvre vers une perspective appliquée dont nous pouvons espérer un impact fort en science des matériaux. L'obtention de courbes maîtresses révèle toutes les propriétés d'invariance du milieu et s'avère ainsi très riche d'informations de nature prédictive. Cette démarche a une portée tout à fait générale en physique, dans ce que l'on appelle communément des lois d'échelle. Dégageons alors dans ce qui suit les perspectives qu'ouvrent à notre sens ces premiers résultats.

Essayons tout d'abord d'expliquer l'écriture d'un principe d'optimum sur une trajectoire reliant deux états thermodynamiques (à deux instants t_0 et t_1), i.e. en intégrant la dynamique du système entre un instant initial et un instant final (il peut apparaître mystérieux de connaître d'emblée cette information globale avant même d'avoir résolu les équations de la dynamique) soit :

$$\delta \int_{t_0}^{t_1} L dt = 0$$

alors que le statut de fonction potentielle doit être conféré au lagrangien à tout instant. On peut penser que l'écriture d'un principe d'optimum à "l'échelle différentielle", c'est à dire pendant l'intervalle de temps dt , est d'une nature physique plus profonde, en ce sens qu'elle permet de lever une propriété très "gênante" du principe de la moindre action. En effet, comment la Nature peut-elle (i) analyser un ensemble de trajectoires possibles entre t_0 et un instant ultérieur t_1 , et (ii) choisir *a posteriori* la trajectoire correspondant à la valeur minimale de l'intégrale d'action ? Ajoutons ensuite que la relation fondamentale de Gibbs-Duhem :

$$\varepsilon d\sigma - s dT - z_k dA_k = 0$$

qui est intimement liée au principe variationnel exposé ici (voir le chapitre III), est "déjà" valide pour un incrément des variables de contrôle. Il semblerait alors judicieux de retranscrire nos résultats dans le cadre de la géométrie différentielle, qui permet l'écriture de principes d'optimum à l'aide de la théorie des invariants intégraux, et ce sous la forme :

$$i_{\mathbf{X}} d\omega = 0$$

où ω serait une forme différentielle dépendant des variables thermodynamiques, et où C est un contour s'appuyant sur les courbes intégrales du champ de vecteur \mathbf{X} (le générateur des trajectoires réalisant l'optimum). Une telle écriture implique *de fait* un principe d'optimum sur tout intervalle de la forme $[t_0, t_1]$:

$$i_{\mathbf{X}} d\omega = 0 \quad \Rightarrow \quad \delta \int_C \omega = \delta \int_{t_0}^{t_1} \omega = 0$$

si on introduit un paramétrage en t pour parcourir la courbe C . Le principe de moindre action est ainsi équivalent à une condition satisfaite par la forme différentielle $\omega = L dt$. Par suite, on pourrait s'attendre à l'égalité :

$$\omega = d\psi + \sum_{k=1}^n \lambda_k \frac{z_k - z_k^r}{\tau_k} dt$$

Cette écriture permettrait finalement de considérer le principe de la moindre action comme une simple conséquence des principes fondamentaux de la thermodynamique⁹.

En outre, on peut réécrire la variation d'une intégrale fonctionnelle S sous l'action d'un groupe quelconque (équation (B.27)) :

$$\delta S = \mu \int_{\Omega} \left(\frac{\partial L}{\partial u_k} - \mathcal{D}_i \frac{\partial L}{\partial u_{k,i}} \right) (\phi_k - \xi_j n_{i,j}) d\Omega + \mu \int_{\partial\Omega} \left(\Gamma_i \xi_i + (\phi_k - u_{i,j} \xi_j) \frac{\partial L}{\partial u_{k,i}} \right) n_i d(\partial\Omega)$$

à l'aide d'une formulation plus compacte (la "formule magique de Cartan") :

$$L_{\mathbf{X}} \omega = i_{\mathbf{X}} d\omega + d(i_{\mathbf{X}} \omega)$$

(où $L_{\mathbf{X}}$ est la dérivée de Lie par rapport au champ de vecteur \mathbf{X}). Cette équation permet une écriture très condensée du théorème de Noether : sous les conditions $L_{\mathbf{X}} \omega = 0$ (invariance

⁹On adhère ici à la philosophie de Lagrange, comme le montre la citation déjà évoquée au chapitre I : "Tel est, [...], le principe auquel je donne ici, quoique improprement, le nom de moindre action, et que je regarde non comme un principe métaphysique, mais comme un résultat simple et général des lois de la Mécanique."

de l'intégrale de ω par le groupe engendré par \mathbf{X} et $i_{\mathbf{X}}d\omega = 0$ (validité des équations de Lagrange), on aboutit à la loi de conservation $d(i_{\mathbf{X}}\omega) = 0$, qui se traduit par :

$$\text{Div}\left(L\xi_i + (\phi_k - u_{k,j}\xi_j)\frac{\partial L}{\partial u_{k,i}}\right) = 0$$

Des perspectives intéressantes s'ouvrent pour une écriture condensée (donc efficace sur le plan technique) de lois de conservation de milieux dissipatifs.

Pour clore les perspectives attenantes à la première partie du mémoire, ajoutons à ces remarques qu'il nous reste à comprendre l'interprétation physique des multiplicateurs de Lagrange λ_k apparaissant dans le lagrangien proposé :

$$L = \dot{\psi} + \sum_{k=1}^n \lambda_k \frac{z_k - z_k^r}{\tau_k}$$

Une nouvelle campagne de mesures en traction isotherme sur un alliage plomb-étain va prochainement être mise en place, afin de confirmer nos résultats théoriques sur le glissement temps-température. Nous retiendrons de plus qu'il est nécessaire d'apporter de grandes améliorations dans le but d'optimiser le calcul des groupes de symétrie, ce qui faciliterait l'obtention de la loi de comportement, ainsi que la prédiction de principes de superposition. Il semble que nous n'ayons pas utilisé toutes les propriétés mathématiques qui pourraient se révéler très utiles sur le plan physique. Par exemple, la connaissance de deux symétries obtenues de manière expérimentale, soient v_1 et v_2 , pourrait mener à la connaissance d'une troisième symétrie v_3 si l'on exploite le fait que l'ensemble des groupes de Lie d'une EDP admet une structure d'algèbre pour le crochet de Lie. On peut en effet écrire l'équation :

$$[v_1, v_2] = \alpha v_1 + \beta v_2 + \gamma v_3$$

où $[,]$ est le crochet de Lie et α, β, γ des constantes. Dans le même ordre d'idées, soulignons que nous n'avons utilisé dans un premier temps que l'algorithme de calcul de groupe évoqué dans l'ouvrage d'Olver, [Olv-1989]. Des progrès récents (voir Ibragimov, [Ibr-1996]) dans ce domaine laissent à penser que le calcul de symétries pourrait être considérablement simplifié.

Annexe A : Bref historique sur le principe de la moindre action

Pour les Grecs, les Mathématiques se limitent à la géométrie, qu'ils utilisent pour décrire la Nature. La géométrie des formes optimales, prélude à l'étude des surfaces d'énergie potentielle minimale, est ainsi inventée dans la Grèce antique. Citons par exemple le problème de Didon, appelé couramment problème isopérimétrique, qui consiste à trouver parmi toutes les courbes fermées de longueur donnée celle qui délimite la surface la plus grande. Le premier principe d'optimum découvert en physique interprète la réflexion de la lumière sur un miroir incurvé. Il est dû à Euclide (320-270 avant JC) qui affirme que "la lumière se propage en ligne droite dans l'espace". Au cours du dernier tiers du XVII^{ème} siècle, les mathématiciens font des progrès considérables avec l'invention par Newton (1642-1727) et Leibniz (1646-1716) du calcul infinitésimal, fondement de la science moderne. Peu après, les frères Bernoulli (Jacob (1654-1705), Johann (1667-1748)) et Euler (1707-1783), créent sur ces bases nouvelles le calcul des variations. Les mathématiciens de cette époque soulèvent alors des problèmes à résonance concrète, qui existent encore aujourd'hui : dans la vie quotidienne, il nous faut souvent savoir quelle situation est la meilleure ou la pire, quelle est la meilleure stratégie pour maximiser agrément, profit et succès, ou, inversement, minimiser inconfort, échec ou perte. Quelle est la forme d'une voiture qui minimisera la résistance à l'air ? Connaissant son volume intérieur, quelle forme donner à une maison pour minimiser les pertes de chaleur ?

Le XVIII^{ème} siècle voit naître la volonté de ramener toutes les lois de la Physique à un même principe fondamental. C'est en effet au milieu de ce siècle que le mathématicien Pierre Louis Moreau de Maupertuis (1698-1759) déclenche une polémique qui traversera les siècles. Son dessein est le suivant : regrouper toutes les lois de la Physique en un même principe d'optimum.

C'est en examinant les lois de la réfraction exposées par Descartes (1596-1650) et Fermat (1601-1665) que Maupertuis, en 1744, introduit le concept d'action. Les observations expérimentales de cette époque, effectuées sur la longueur des trajectoires prises par un rayon de lumière, contredisent le fait que la lumière se propage suivant la durée ou le chemin le plus court. Maupertuis affirme que c'est en fait la **quantité d'action**, nouvelle grandeur mesurant "l'importance" d'un phénomène, qui est minimisée au cours de la propagation. La première définition de l'action est formulée par Maupertuis de la manière suivante (voir par exemple Brunet, [Bru-2002]) :

"lorsqu'un corps est porté d'un point à un autre, il faut pour cela une certaine action : cette action dépend de la vitesse qu'a le corps et de l'espace qu'il parcourt ; mais elle n'est ni la vitesse ni l'espace pris séparément. La quantité d'action est d'autant plus grande que la vitesse du corps est plus grande, et que le chemin qu'il

parcourt est plus long, elle est proportionnelle à la somme des espaces multipliée chacun par la vitesse avec lequel le corps les parcourt."

Le "principe de la moindre action", tel qu'il est décrit dans sa version initiale, stipule donc que la lumière choisit la trajectoire qui minimise la quantité d'action. A l'heure où la philosophie est intimement liée à la science, comme le confirme la préface des *Philosophiae naturalis principia mathematica* de Newton :

"On s'est proposé dans ce Traité de contribuer à cet objet, en cultivant les Mathématiques en ce qu'elles ont de rapport avec la philosophie naturelle"

la volonté de comprendre le monde en terme de principes plus généraux pousse Maupertuis à s'interroger. Son questionnement peut s'énoncer de la manière suivante : si ce principe de la moindre action semble être vérifié pour la propagation de la lumière, pourquoi ne serait-il pas valable dans d'autres domaines de la Physique ? Après une généralisation de la notion d'action au cas des corps pesants :

"la quantité d'action est le produit de la masse des corps par leur vitesse et par l'espace qu'ils parcourent."

qui engendre, dès 1746, une généralisation du principe de la moindre action au cas des chocs des corps et des situations d'équilibre, Maupertuis propose d'ériger son principe de la moindre action comme le principe le plus fondamental régissant toutes les lois de la Nature :

"Lorsqu'il arrive quelque changement dans la Nature, la quantité d'action nécessaire pour ce changement est la plus petite qu'il soit possible."

Ainsi, selon Maupertuis, dans l'infinité des trajectoires (généralisées) "a priori" accessible par un système physique quelconque, seule celle qui minimise l'action est réellement suivie par ce système.

Peu après sa naissance, le principe de la moindre action est perçu comme le principe le plus général du mouvement des corps. Maupertuis le qualifie lui-même de '*principe véritablement universel, qui a lieu dans le mouvement des corps durs, des corps élastiques, de la lumière et de toutes les substances corporelles*'. Cette propriété de généralité du principe de la moindre action prend vite une dimension religieuse : l'économie de l'action traduirait d'une part l'harmonie du monde créée par Dieu, et d'autre part, l'infinie sagesse de ce Créateur. En effet, Maupertuis continue d'affirmer :

"Les lois du mouvement et du repos déduites de ce principe se trouvant précisément les mêmes qui sont observées dans la Nature, nous pouvons en admirer l'application dans tous les phénomènes. Le mouvement des animaux, la végétation des plantes, la révolution des astres n'en sont que les suites ; et le spectacle de l'Univers devient bien plus grand, bien plus beau, bien plus digne de son Auteur, lorsqu'on sait qu'un petit nombre de lois, le plus sagement établies, suffisent à tous ces mouvements."

mais encore :

"On ne peut douter que toutes choses ne soient réglées par un Etre suprême qui, pendant qu'il a imprimé à la matière des forces qui dénotent sa puissance, l'a destinée à exécuter des effets qui marquent sa sagesse."

A ses débuts, le principe de la moindre action est incontestablement vu comme une preuve de l'existence de Dieu.

Malgré son intuition originale, Maupertuis n'a donné qu'une formulation relativement vague de son principe. On peut donner une idée plus précise de la notion d'action en reprenant les termes de Hildebrandt et Tromba ([Hil-1986]) :

“Prenons un préposé des P et T. S'il parcourt deux kilomètres en une heure, nous dirons qu'il a déployé deux fois plus d'action que pour couvrir la même distance en deux heures. Nous dirons aussi qu'en parcourant deux kilomètres en deux heures, il déploie deux fois plus d'action qu'en parcourant un kilomètre en une heure. En parcourant deux kilomètres en une heure, il accomplit donc quatre fois plus d'action qu'en couvrant un kilomètre en une heure. Nous inspirant de ces remarques intuitives, nous définirons l'action comme le produit de la masse, de la distance, et de la vitesse :

$$\text{action} = \text{masse} \times \text{distance} \times \text{vitesse}$$

Cette définition de l'action est celle du mathématicien Leonhard Euler, qui est ainsi le premier à formuler le concept d'intégrale d'action :

“Soit M la masse du corps lancé, pendant qu'il parcourt l'élément ds, soit v sa vitesse due à la hauteur, [...]. Je dis que la ligne décrite par le corps sera d'une forme telle que parmi toutes les lignes ayant mêmes extrémités, l'expression $\int Mvds$ soit un minimum.”

Plus tard, le mathématicien et physicien Joseph Louis de Lagrange (1736-1813), dans son ouvrage *Mécanique Analytique*, approfondit encore les résultats d'Euler en analysant les conditions d'extrema d'une fonctionnelle intégrale quelconque, et applique ces nouveaux résultats à la Mécanique. Il donne ainsi naissance à une puissante technique de résolution qui portera son nom : le formalisme lagrangien.



Annexe B : Calcul des variations

Le but de cette synthèse est :

- de définir clairement la notion d'intégrale fonctionnelle.
- de définir précisément l'opérateur de variations δ à partir du concept de groupe de transformation à un paramètre, afin de les intégrer dans un développement de Taylor.
- de donner un sens à la variation (ou taux d'accroissement) d'une intégrale fonctionnelle δS et par suite, préciser la condition de stationnarité $\delta S = 0$.

B.1 Cadre de calcul et notations

Nous nous plaçons dans le cadre de calcul proposé par Olver ([Olv-1989]), dans lequel interviennent 4 variables dites indépendantes :

$$\mathbf{x} = \{x_i, i = 1..4\} = \{x_1 = t, x_2 = x, x_3 = y, x_4 = z\} \quad (\text{B.1})$$

qui sont respectivement le temps et les trois variables d'espace. On fait l'hypothèse de \mathbf{x} varie dans un ensemble Ω ouvert connexe¹⁰, tel que son bord $\partial\Omega$ soit de classe C^∞ . Considérons également q variables dépendantes $\mathbf{u} = \{u_i(\mathbf{x}), i = 1..q\}$, supposées de classe C^∞ par rapport aux x_j . On désigne par $\mathbf{u}^{(n)}$ la réunion de toutes les dérivées partielles d'ordre inférieur ou égal à n des u_i . On retiendra que le volume généralisé Ω de \mathbb{R}^4 s'écrira comme le produit cartésien d'un volume V de l'espace géométrique par un intervalle $I = [t_0, t_1]$ de temps :

$$\Omega = V \times I \quad (\text{B.2})$$

menant ainsi à l'incrément :

$$d\Omega = dV dt = dx_1 dx_2 dx_3 dx_4 \quad (\text{B.3})$$

On dénotera par ∂V le bord de V .

B.2 Définition d'une fonctionnelle intégrale

Enonçons la :

¹⁰Par définition, un ensemble ouvert connexe est appelé domaine

DÉFINITION B.2.1 : On appelle fonctionnelle intégrale une application de $C^\infty[\Omega]$ dans \mathbb{R} , de la forme :

$$S(\mathbf{u}) = \int_{\Omega} L(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(n)}) d\Omega \quad (\text{B.4})$$

La fonction $L(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(n)})$ est le lagrangien associé à la fonctionnelle S . ■

Nous nous limiterons ici à des lagrangiens qui ne dépendent que des dérivées premières des variables dépendantes, conformément à la plupart des ouvrages consacrés à ce sujet¹¹. Ainsi, nous retiendrons qu'une fonctionnelle intégrale s'écrit :

$$S(\mathbf{u}) = \int_{\Omega} L(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(1)}) d\Omega \quad (\text{B.5})$$

Le calcul des variations étudie la variation d'une telle fonctionnelle intégrale lorsque les variables indépendantes et dépendantes varient. Il consiste en une généralisation de la notion de taux d'accroissement définie sur les fonctions. Ainsi, si $f(x)$ est une fonction de \mathbb{R} dans \mathbb{R} , son accroissement est donné par $\delta f(x) = f(x + \delta x) - f(x)$, où δx est la variation de l'argument x . Par analogie, nous aurons besoin de préciser la notion de variation sur les variables dépendantes et indépendantes qui interviennent dans une intégrale fonctionnelle. C'est justement l'objet de la :

DÉFINITION B.2.2 : Un groupe de transformation continu à un paramètre (noté μ), est la donnée de plusieurs applications qui transforment le jeu de variables indépendantes \mathbf{x} et dépendantes \mathbf{u} :

$$G : \begin{cases} \bar{x}_j = \bar{x}_j(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mu) & j = 1..4 \\ \bar{u}_j = \bar{u}_j(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mu) & j = 1..q \end{cases} \quad (\text{B.6})$$

Ces applications doivent respecter les 3 axiomes explicités par les relations (B.7), (B.8), (B.9), (B.10), (B.11), (B.12). ■

Les axiomes cités dans la définition (B.2.2) sont :

- L'associativité (au sens de la composition notée \circ) : pour toutes les valeurs des paramètres μ_1, μ_2 et μ_3 alors :

$$\begin{aligned} & \bar{x}_j(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mu_1) \circ (\bar{x}_j(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mu_2) \circ \bar{x}_j(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mu_3)) \\ &= (\bar{x}_j(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mu_1) \circ \bar{x}_j(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mu_2)) \circ \bar{x}_j(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mu_3) \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

$$\begin{aligned} & \bar{u}_j(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mu_1) \circ (\bar{u}_j(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mu_2) \circ \bar{u}_j(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mu_3)) \\ &= (\bar{u}_j(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mu_1) \circ \bar{u}_j(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mu_2)) \circ \bar{u}_j(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mu_3) \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

¹¹La plupart des équations de la physique "classique" (propagation, diffusion, comportement mécanique, ...), pour lesquelles notre étude se restreint, sont d'ordre inférieur ou égal à 2. Ces équations dérivent donc de lagrangiens qui dépendent "au pire" des dérivées d'ordre 1.

- L'existence d'un élément neutre : si $\bar{x}_j^\mu(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ et $\bar{u}_j^\mu(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ désignent les fonctions de transformations de la définition (B.2.2) pour une valeur donnée du paramètre μ , alors $\bar{x}_j^0(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ et $\bar{u}_j^0(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ doivent coïncider avec les applications identiques de \mathbb{R}^4 et \mathbb{R}^q :

$$\bar{x}_j(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mu = 0) = x_j \quad (\text{B.9})$$

$$\bar{u}_j(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mu = 0) = u_j \quad (\text{B.10})$$

- L'existence d'un inverse au sens de la composition : pour toutes les valeurs du paramètre μ , on doit avoir :

$$\bar{x}_j(\mathbf{x}, \mathbf{u}, -\mu) \circ \bar{x}_j(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mu) = \bar{x}_j(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mu) \circ \bar{x}_j(\mathbf{x}, \mathbf{u}, -\mu) = x_j \quad (\text{B.11})$$

$$\bar{u}_j(\mathbf{x}, \mathbf{u}, -\mu) \circ \bar{u}_j(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mu) = \bar{u}_j(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mu) \circ \bar{u}_j(\mathbf{x}, \mathbf{u}, -\mu) = u_j \quad (\text{B.12})$$

Nous pouvons donner une idée de ce qu'est un groupe en considérant l'exemple :

EXEMPLE B.2.1 : L'application qui à tout instant t associe l'instant :

$$\bar{t}(t, \mu) = e^{\mu t} \quad (\text{B.13})$$

est un groupe car nous avons :

- Pour l'axiome d'associativité :

$$\bar{t}(\bar{t}(t, \mu_1), \mu_2), \mu_3) = \bar{t}(\bar{t}(t, \mu_3), \mu_2), \mu_1) \quad (\text{B.14})$$

- Pour l'axiome d'existence d'un élément neutre :

$$\bar{t}(t, 0) = t \quad (\text{B.15})$$

- Et pour l'axiome d'existence d'un inverse :

$$\bar{t}(\bar{t}(t, -\mu), \mu) = \bar{t}(\bar{t}(t, \mu), -\mu) = t \quad (\text{B.16})$$

Considérons donc un groupe à un paramètre (noté ici μ) donné par les applications :

$$\bar{x}_j = \bar{x}_j(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mu) \quad (\text{B.17})$$

$$\bar{u}_j = \bar{u}_j(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mu) \quad (\text{B.18})$$

Par un développement de Taylor à l'ordre 1 autour de la valeur $\mu = 0$, on peut introduire les variations associées aux $\{x_j\}$ et aux $\{u_j\}$ grâce à la :

DÉFINITION B.2.3 : Les 4 variations δx_j des variables dépendantes et les q variations δu_j des variables indépendantes sont données par les égalités :

$$\bar{x}_j = x_j + \mu \left. \frac{\partial \bar{x}_j}{\partial \mu} \right|_{\mu=0} + o(\mu) = x_j + \delta x_j + o(\mu) = x_j + \mu \xi_j + o(\mu), \quad \forall j = 1..4 \quad (\text{B.19})$$

$$\bar{u}_j = u_j + \mu \left. \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial \mu} \right|_{\mu=0} + o(\mu) = u_j + \delta u_j + o(\mu) = u_j + \mu \phi_j + o(\mu), \quad \forall j = 1..q \quad (\text{B.20})$$

où les fonctions $\xi_j(x, u) = \left. \frac{\partial \bar{x}_j}{\partial \mu} \right|_{\mu=0}$ et $\phi_j(x, u) = \left. \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial \mu} \right|_{\mu=0}$ sont respectivement appelées composantes horizontales et verticales du groupe. ■

Il est important de noter que ces variations sont a priori des fonctions des variables dépendantes et indépendantes : $\delta x_j = \delta x_j(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ et $\delta u_j = \delta u_j(\mathbf{x}, \mathbf{u})$. Voyons comment ces variations permettent la généralisation de la notion de taux d'accroissement au cas des fonctionnelles.

B.3 Variation δS induite par le groupe de transformation

Par analogie avec les fonctions, la variation δS de l'intégrale fonctionnelle sous l'action d'un groupe est définie par la relation :

$$\delta S = S(\bar{\mathbf{u}}) - S(\mathbf{u}) = S(\mathbf{u} + \delta \mathbf{u}) - S(\mathbf{u}) = \int_{\bar{\Omega}} L(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{u}}^{(1)}) d\bar{\Omega} - \int_{\Omega} L(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(1)}) d\Omega \quad (\text{B.21})$$

que l'on peut encore réécrire sous la forme :

$$\delta S = \int_{\bar{\Omega}} L(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{u}}^{(1)}) |J_a| - L(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(1)}) d\Omega \quad (\text{B.22})$$

où J_a est le jacobien de la transformation $\mathbf{x} \rightarrow \bar{\mathbf{x}}$ donné par :

$$J_a = \det \left| \frac{\partial \bar{x}_i}{\partial x_j} \right| = 1 + \mu \sum_{k=1}^4 \frac{d\xi_k}{dx_k} = 1 + \mu D_k \xi_k \quad (\text{B.23})$$

(la notation D_k symbolisant la dérivée totale $\frac{d}{dx_k}$ permet de synthétiser l'écriture avec la convention de sommation sur l'indice répété). En injectant cette dernière relation dans (B.22), on obtient l'égalité :

$$\delta S = \int_{\bar{\Omega}} \left(L(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{u}}^{(1)}) - L(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(1)}) + L(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(1)}) D_k \xi_k \right) d\Omega \quad (\text{B.24})$$

qui peut encore être réécrite par un développement de Taylor à l'ordre 1 sous la forme¹² :

$$\delta S = \int_{\bar{\Omega}} \left(\frac{\partial L}{\partial x_i} \mu \xi_i + \frac{\partial L}{\partial u_i} \mu \phi_i + \frac{\partial L}{\partial u_{i,j}} \mu \frac{\partial \bar{u}_{i,j}}{\partial \mu} \Big|_{\mu=0} + L D_k \xi_k \right) d\Omega \quad (\text{B.25})$$

Nous voyons qu'il est nécessaire de calculer la transformée des dérivées $\bar{\mathbf{u}}^{(1)}$ par le groupe. On obtient après quelques manipulations :

$$\frac{\partial \bar{u}_{i,j}}{\partial \mu} \Big|_{\mu=0} = D_j (\phi_i - u_{i,k} \xi_k) + u_{i,jk} \xi_k \quad (\text{B.26})$$

Des relations (B.26) et (B.25), on peut exprimer la variation δS en fonction des variations δx_i et δu_i via le :

THÉOREME B.3.1 : *La variation de la fonctionnelle $S(\mathbf{u})$ définie en (B.5) induite par les transformations (B.17) et (B.18) est donnée par :*

$$\delta S = \mu \int_{\Omega} \left(\frac{\partial L}{\partial u_k} - D_i \frac{\partial L}{\partial u_{k,i}} \right) (\phi_k - \xi_j u_{k,j}) d\Omega + \mu \int_{\partial \Omega} \left(L \xi_i + (\phi_k - u_{k,j} \xi_j) \frac{\partial L}{\partial u_{k,i}} \right) n_i d(\partial \Omega) \quad (\text{B.27})$$

la sommation se faisant pour $i = 1..4, j = 1..4, k = 1..q$. ■

¹²Pour alléger l'écriture, on omet d'écrire la dépendance de L vis à vis de \mathbf{x} et $\mathbf{u}^{(1)}$

L'intérêt de la relation (B.27) est (i) qu'elle fait apparaître une expression linéaire vis à vis des composantes ξ_i et ϕ_i (donc des variations δx_i et δu_i) qui pourra s'interpréter comme une généralisation de la notion de dérivation¹³ au cas des fonctionnelles et (ii) qu'elle donne ainsi, par la condition nécessaire $\delta S = 0$, une méthode de calcul de la (ou des) trajectoire(s) qui rendent l'intégrale fonctionnelle $S(\mathbf{u})$ extrémale. Voyons plus précisément comment exploiter cette nouvelle relation.

B.4 Application du calcul des variations en Physique

On désigne classiquement par "calcul des variations" la technique mathématique qui permet de calculer la trajectoire généralisée $\mathbf{u}^0(\mathbf{x})$ qui rend une fonctionnelle intégrale $S(\mathbf{u})$ extrémale¹⁴. En Physique, il est d'usage de se limiter au cadre du calcul des variations purement vertical¹⁵, caractérisé par l'annulation des composantes horizontales $\xi_i = 0$. Dans ces conditions, le groupe de transformation n'affecte pas les variables indépendantes, soit $\delta x_i = 0$, et on peut réécrire le théorème (B.3.1) en énonçant le :

THÉORÈME B.4.1 : *La variation de la fonctionnelle intégrale $S(\mathbf{u})$, définie par :*

$$S(\mathbf{u}) = \int_{\Omega} L(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(1)}) d\Omega \quad (\text{B.29})$$

sous l'action d'un groupe de transformation purement vertical, i.e. traduit par les applications :

$$\bar{\mathbf{x}} = \mathbf{x} \quad (\text{B.30})$$

$$\bar{\mathbf{u}} = \mathbf{u} + \delta \mathbf{u} = \mathbf{u} + \mu \phi \quad (\text{B.31})$$

est donnée par la relation :

$$\delta S = \int_{\Omega} \left(\frac{\partial L}{\partial u_k} - D_i \frac{\partial L}{\partial u_{k,i}} \right) \delta u_k d\Omega + \int_{\partial\Omega} \left(\frac{\partial L}{\partial u_{k,i}} \delta u_k \right) n_i d(\partial\Omega) \quad (\text{B.32})$$

la sommation se faisant pour $i = 1..4$, $j = 1..4$, $k = 1..q$. ■

Demandons nous maintenant comment caractériser une trajectoire \mathbf{u}^0 qui rend la fonctionnelle S extrémale. D'après précédemment, \mathbf{u}^0 doit satisfaire la condition nécessaire $\delta S = 0$. La relation (B.32) laisse apparaître un terme d'intégrale de volume et un terme d'intégrale surfacique. L'hypothèse clé du calcul des variations consiste à admettre ces deux termes indépendants a priori. Ainsi, la condition $\delta S = 0$ se traduit par les deux conditions simultanées :

$$\int_{\Omega} \left(\frac{\partial L}{\partial u_k} - D_i \frac{\partial L}{\partial u_{k,i}} \right) \delta u_k dx = 0 \quad (\text{B.33})$$

¹³En effet, rappelons par analogie que pour une fonction de \mathbb{R} dans \mathbb{R} , le développement à l'ordre 1 :

$$f(x + \delta x) = f(x) + \frac{df}{dx}(x) \delta x + o(\delta x) = f(x) + \delta f(x) + o(\delta x) \quad (\text{B.28})$$

montre que le terme en δx correspond bien à la dérivée de f .

¹⁴Ces trajectoires peuvent ne pas être uniques. Elles sont appelées extrémales.

¹⁵En Mécanique par exemple, les champs de déplacement virtuels sont définies à un instant donné soit $\delta t = 0$.

$$\int_{\partial\Omega} \left(\frac{\partial L}{\partial u_{k,i}} \delta u_k \right) n_i d(\partial\Omega) = 0 \quad (\text{B.34})$$

La condition (B.33) à laquelle s'ajoute le caractère arbitraire des variations δu_k , mène à la :

DÉFINITION B.4.1 : *Les équations dites d'Euler-Lagrange :*

$$\frac{\partial L}{\partial u_k} - D_i \frac{\partial L}{\partial u_{k,i}} = E_k(L) = 0 \quad (\text{B.35})$$

(la somme étant pour $i = 1..4$ et $\forall k = 1..q$) correspondent à l'annulation du terme volumique de l'équation (B.33). L'opérateur E_i , défini par :

$$E_k = \frac{\partial}{\partial u_k} - D_i \frac{\partial}{\partial u_{k,i}} \quad (\text{B.36})$$

est appelé opérateur d'Euler-Lagrange. Pour synthétiser les notations, on pourra écrire :

$$E(L) = \{E_k(L), k = 1..q\} \quad (\text{B.37})$$

Ces équations aux dérivées partielles d'ordre 2 permettent de trouver la forme des extrémales de S . Pour pouvoir conclure quant à la forme définitive de ces extrémales, il convient d'introduire des conditions limites sur le bord $\partial\Omega$. Ces dernières sont données par l'annulation du terme de bord de l'équation (B.34), pour laquelle on distingue deux grandes familles de problèmes.

B.5 Les problèmes à extrémités fixes

Dans ce type de problème, la valeur des u_i est connue sur la frontière $\partial\Omega$ du volume généralisé Ω , soit¹⁶ :

$$\mathbf{u}(\partial\Omega) = \mathbf{u}^0 \quad (\text{B.38})$$

Avant tout, il convient de donner un sens à l'ensemble de définition de la fonctionnelle S . La recherche des extrémales de S se fait dans un ensemble U^{ad} de fonctions admissibles, défini à l'aide des conditions limites sur la frontière $\partial\Omega$:

$$U^{ad} = \{\mathbf{u} \text{ tels que } \mathbf{u}(\partial\Omega) = \mathbf{u}^0\} = \{\{u_i \text{ tels que } u_i(\partial\Omega) = u_i^0, i = 1..n\}\} \quad (\text{B.39})$$

Pour que la variation $\delta S = S(\bar{\mathbf{u}}) - S(\mathbf{u})$ ait un sens, il faut que \mathbf{u} et sa transformée $\bar{\mathbf{u}}$ par un groupe de transformation quelconque (au sens de la relation (B.6)) soit contenue dans U^{ad} . On doit donc avoir :

$$\mathbf{u}(\partial\Omega) = \mathbf{u}^0 \quad (\text{B.40})$$

$$\bar{\mathbf{u}}(\partial\Omega) = \mathbf{u}(\partial\Omega) + \delta\mathbf{u}(\partial\Omega) = \mathbf{u}^0 \quad (\text{B.41})$$

Les relations (B.40) et (B.41) impliquent immédiatement que $\delta\mathbf{u}(\partial\Omega) = 0$. Ainsi, compte tenu de la définition (B.2.3), il est toujours possible d'écrire la différence de deux éléments

¹⁶Ce type de problème pourrait par exemple être celui de la minimisation de la consommation de carburant d'une fusée devant décoller et atterrir en des points connus.

de U^{ad} comme une variation $\delta u(x)$ qui est nulle sur la frontière $\partial\Omega$, comme le montre schématiquement la figure (V.8).

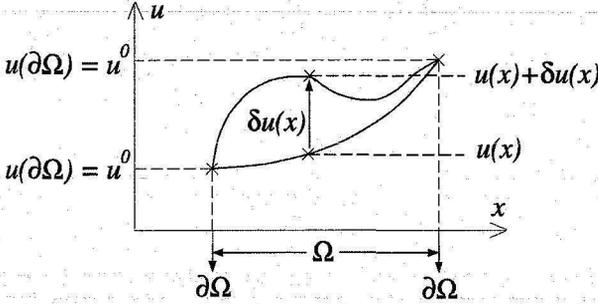


Fig. V.8: Représentation schématique de deux éléments de U^{ad} ($u(x)$ et $u(x) + \delta u(x)$) pour un problème à extrémités fixes

La nullité de $\delta u(x)$ sur la frontière $\partial\Omega$ implique que la relation (B.34) est bien vérifiée. Les extrémales de S sont donc données par la résolution du problème différentiel :

$$\begin{cases} E(L) = 0 & \text{dans } V \\ u = u^0 & \text{sur } \partial\Omega \end{cases} \quad (\text{B.42})$$

Examinons maintenant le cas où la valeur de $u = \{u_i, i = 1..q\}$ n'est pas connue sur toute la frontière $\partial\Omega$.

B.6 Les problèmes à extrémités inconnues

Dans ce type de problèmes, la valeur de u sur un sous ensemble $\partial\Omega_0$ de $\partial\Omega$ s'ajoute comme inconnue du problème¹⁷. L'ensemble des fonctions admissibles dans lequel nous allons annuler la variation de S s'écrit désormais :

$$U^{ad} = \{u \text{ tels que } u(\partial\Omega_1) = u^0\} = \{\{u_i \text{ tels que } u_i(\partial\Omega_1) = u_i^0, i = 1..n\}\} \quad (\text{B.43})$$

où $\partial\Omega_1$ est le complémentaire de $\partial\Omega_0$ dans $\partial\Omega$, défini par la relation :

$$\partial\Omega_0 \cup \partial\Omega_1 = \partial\Omega \quad (\text{B.44})$$

Par une démarche strictement équivalente au paragraphe précédent, on montre que les variations $\delta u(x)$ entre deux éléments de U^{ad} sont nulles sur le sous ensemble $\partial\Omega_1$ (où la valeur de u est donnée), mais que cette valeur sur $\partial\Omega_0$ est inconnue. La figure (V.9) montre schématiquement deux éléments de U^{ad} .

¹⁷De même que dans la remarque précédente, il s'agirait ici de trouver le (ou les) point(s) d'atterrissage (ou décollage) d'une fusée, qui assurent une consommation de carburant minimale.

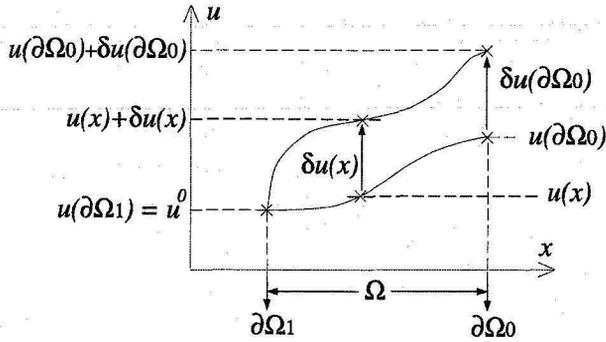


Fig. V.9: Représentation schématique de deux éléments de U^{ad} ($u(x)$ et $u(x) + \delta u(x)$) pour un problème à extrémités inconnues sur $\partial\Omega_0$.

Pour assurer la stationnarité de S , et par suite la nullité du terme de bord de l'équation (B.34), il est nécessaire d'introduire la condition :

$$\frac{\partial L}{\partial u_{k,i}} n_i = 0 \quad \text{sur } \partial\Omega_0 \quad (\text{B.45})$$

compte tenu du caractère arbitraire de δu sur $\partial\Omega_0$. Une telle condition est appelée condition de transversalité. Les extrémales de S sont donc données par la résolution du problème différentiel :

$$\begin{cases} E(L) = 0 & \text{dans } V \\ \frac{\partial L}{\partial u_{k,i}} n_i = 0 & \text{sur } \partial\Omega_0 \\ u = u^0 & \text{sur } \partial\Omega_1 \end{cases} \quad (\text{B.46})$$

Annexe C : Synthèse de Mécanique Analytique

C.1 L'intégrale d'action en dynamique du point

Soit un système de n masses ponctuelles m_i évoluant au cours du temps dans l'espace muni d'un repère $R = (\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$. Considérons l'ensemble $\mathbf{q} = \{\mathbf{q}_i(t), i = 1..n\}$ des positions de ces masses et leurs projections (q_{1i}, q_{2i}, q_{3i}) sur les axes de R :

$$\mathbf{q} = \{\mathbf{q}_i(t), i = 1..n\} = \{q_{1i}(t), q_{2i}(t), q_{3i}(t), i = 1..n\} \quad (\text{C.1})$$

En reprenant les notations de l'annexe B, le temps $x_1 = t$ est ici l'unique variable indépendante, évoluant dans le volume généralisé $\Omega = [t_0, t_1]$ (réduit à un intervalle) dont le bord $\partial\Omega$ correspond aux deux instants t_0 et t_1 . Les variables dépendantes \mathbf{u} sont ici les projections $(q_{1i}(t), q_{2i}(t), q_{3i}(t))$ des positions des masses. Si $\mathcal{V}(\mathbf{q})$ est l'énergie potentielle d'interaction entre les n masses ponctuelles, l'intégrale d'action du système est définie sous la forme ([Lag-1788]) :

$$S(\mathbf{q}) = \int_{t_0}^{t_1} \left(\sum_{i=1}^n \frac{1}{2} m_i (q_{1i,t}^2 + q_{2i,t}^2 + q_{3i,t}^2) - \mathcal{V}(\mathbf{q}) \right) dt \quad (\text{C.2})$$

dans laquelle apparaît l'expression du lagrangien :

$$L = \mathcal{K} - \mathcal{V} = \sum_{i=1}^n \frac{1}{2} m_i (q_{1i,t}^2 + q_{2i,t}^2 + q_{3i,t}^2) - \mathcal{V}(\mathbf{q}) \quad (\text{C.3})$$

qui est la différence entre l'énergie cinétique totale \mathcal{K} des n points et leur énergie potentielle d'interaction \mathcal{V} . Intéressons nous, conformément au "principe de la moindre action", à l'optimisation de cette fonctionnelle dans l'ensemble U^{ad} des trajectoires admissibles, pour lesquelles on suppose que les valeurs des positions en t_0 et t_1 sont fixées et égales à celles de la trajectoire réellement prise par le système, soit :

$$U^{ad} = \{\{\mathbf{q}_i(t), i = 1..n\} \text{ tels que } \mathbf{q}_i(t_0) = \mathbf{q}_i^0 \text{ et } \mathbf{q}_i(t_1) = \mathbf{q}_i^1 \text{ pour } i = 1..n\} \quad (\text{C.4})$$

On peut donc relier deux jeux de trajectoires admissibles :

$$\mathbf{q}(t) = \{\mathbf{q}_i(t), i = 1..n\} \quad \text{et} \quad \bar{\mathbf{q}}(t) = \{\bar{\mathbf{q}}_i(t), i = 1..n\} \quad (\text{C.5})$$

(i.e. deux éléments de U^{ad}) par une variation $\delta\mathbf{q}(t) = \{\delta\mathbf{q}_i(t), i = 1..n\}$ nulle aux extrémités t_0 et t_1 (cf section B.5) :

$$\bar{\mathbf{q}}(t) = \mathbf{q}(t) + \delta\mathbf{q}(t) \quad \text{avec} \quad \delta\mathbf{q}(t_0) = \delta\mathbf{q}(t_1) = 0 \quad (\text{C.6})$$

comme le montre la figure V.10.

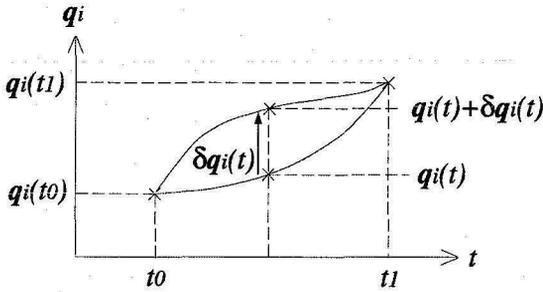


Fig. V.10: Représentation schématique de deux trajectoires admissibles \bar{q} et $\bar{q} = q + \delta q$.

Les trajectoires qui rendent l'intégrale d'action extrémale sont données par la condition nécessaire de stationnarité $\delta S = 0$, qui, compte tenu du théorème (B.4.1), prend ici la forme ([Ber-1997]) :

$$\delta S = S(\bar{q}) - S(q) = \sum_{i=1}^n \left[\int_{t_0}^{t_1} \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} - D_t \frac{\partial L}{\partial q_{i,t}} \right) \cdot \delta q_i dt + \left[\frac{\partial L}{\partial q_{i,t}} \cdot \delta q_i \right]_{t_0}^{t_1} \right] = 0 \quad (\text{C.7})$$

La nullité du terme de bord étant assurée par les relations $\delta q_i(t_0) = \delta q_i(t_1) = 0$, les extrémales de S sont données par l'annulation du terme intégral de l'égalité (C.7). Les variations δq étant arbitraires, cette annulation mène au problème différentiel :

$$\left(\frac{\partial L}{\partial q_i} - D_t \frac{\partial L}{\partial q_{i,t}} \right) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad m_i q_{i,tt} = \frac{\partial \mathcal{V}(q)}{\partial q_i} \quad \text{dans } [t_0, t_1] \quad \text{et pour } i = 1..n \quad (\text{C.8})$$

$$q_i(t_0) = q_i^0 \quad \text{pour } i = 1..n \quad (\text{C.9})$$

$$q_i(t_1) = q_i^1 \quad \text{pour } i = 1..n \quad (\text{C.10})$$

On retrouve ici l'expression des trajectoires de la dynamique newtonienne.

C.2 Remarques sur la nature de l'extremum et les conditions initiales

On peut se convaincre ici que les équations (C.8) sont bien celles d'un minimum en considérant une application numérique simple. Soit par exemple un unique point de masse $m = 1$ kg, évoluant sur une droite sur laquelle on note sa position $q(t)$ vérifiant arbitrairement $q(0) = 0$, $q(1) = 1$, et soumis à une énergie de rappel élastique $\mathcal{V} = \frac{1}{2} k q^2$ avec $k = 1 \text{ N.m}^{-1}$. Sous ces hypothèses, l'intégrale d'action (C.2) se réécrit :

$$S(q) = \int_0^1 \left(\frac{1}{2} \dot{q}^2 - \frac{1}{2} q^2 \right) dt \quad (\text{C.11})$$

et admet pour trajectoire optimale la solution au problème différentiel posé par les équations (C.8), (C.9), et (C.10), qui se simplifient ici sous la forme :

$$q_{opt,tt} + q_{opt} = 0 \text{ avec } q_{opt}(0) = 0 \text{ et } q_{opt}(1) = 1 \quad (\text{C.12})$$

menant ainsi à :

$$q_{opt}(t) = \frac{\sin(t)}{\sin(1)} \quad (\text{C.13})$$

Nous avons comparé la valeur de l'action $S(q_{opt})$ avec celle calculée pour différentes trajectoires (admissibles) possibles :

$$q_1(t) = \frac{e^t - 1}{e - 1} ; q_2(t) = t ; q_3(t) = t^2 ; q_4(t) = \frac{t \ln(t + 1)}{\ln(2)} ; q_5(t) = -(t - 1)^2 + 1 \quad (\text{C.14})$$

La figure V.11 montre l'allure de ces trajectoires et la valeur de l'action correspondante.

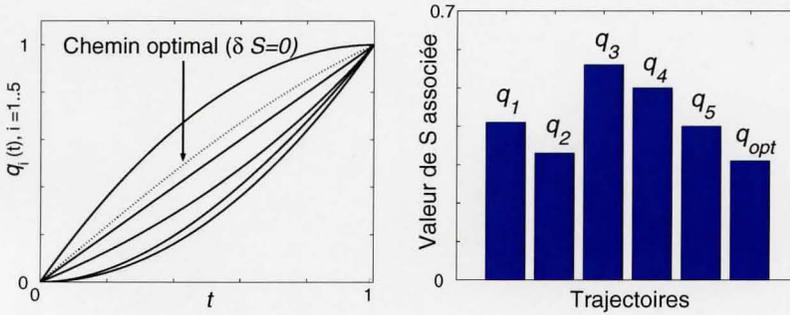


Fig. V.11: (a) représentation graphique des trajectoires admissibles $q_i(t)$ pour $i = 1..5$ et $q_{opt}(t)$. (b) valeurs correspondantes $S(q_i)$ et $S(q_{opt})$ de l'intégrale d'action (C.11).

Nous pouvons vérifier graphiquement que la valeur obtenue pour q_{opt} (environ 0.3) est bien la plus petite. De manière générale, rappelons que les équations (C.8), appelées équations d'Euler-Lagrange de l'intégrale d'action, sont des conditions nécessaires de stationnarité de l'intégrale d'action (C.2). Pour s'assurer que le point stationnaire ainsi trouvé est bien un extrémum S , et le cas échéant, trouver sa nature¹⁸, il convient de mener une étude de stabilité au voisinage du point stationnaire. Cette étude consiste à rechercher le signe de la variation seconde $\delta^2 S$ de S ([Ber-1997]). D'un point de vue pratique, on omet souvent cette étude puisque nous allons voir que la condition $\delta S = 0$ suffit à la mise en oeuvre de méthodes numériques et à la recherche de symétries variationnelles.

Ajoutons enfin qu'il est plus courant en dynamique du point de connaître les valeurs des positions et des vitesses initiales ($\mathbf{q}(t_0), \mathbf{q}_{,t}(t_0)$) plutôt que celles des positions ($\mathbf{q}(t_0), \mathbf{q}(t_1)$). Le principe variationnel précédent garde toutefois sa validité, à condition de travailler sur un nouvel ensemble de trajectoires admissibles satisfaisant de plus une condition initiale en

¹⁸Un point stationnaire de S peut correspondre à un minimum, un maximum, ou un point selle.

vitesse :

$$U^{ad} = \{\{\mathbf{q}_i(t), i = 1..n\} \text{ tels que } \mathbf{q}_i(t_0) = \mathbf{q}_i^0, \mathbf{q}_i(t_1) = \mathbf{q}_i^1 \text{ et } \mathbf{q}_{i,t}(t_0) = \mathbf{q}_{i,t}^0 \text{ pour } i = 1..n\} \quad (\text{C.15})$$

La formulation variationnelle exposée ici se transcrit très facilement au cadre de la mécanique des solides indéformables où les vecteurs positions $\mathbf{q}_i(t)$ des masses ponctuelles m_i sont celles des différents centres de gravité des solides en présence. C'est en particulier dans cette discipline qu'elle devient un outil très puissant pour parvenir rapidement aux équations d'un système possédant de nombreux degrés de libertés. En effet, l'intérêt de cette formulation est (i) qu'elle ne nécessite que la connaissance des énergies cinétique et potentielle du système, directement accessibles par l'écriture des matrices de masses et de raideurs équivalentes, et (ii) qu'elle fait "disparaître" naturellement toutes les inconnues de liaisons entre les solides¹⁹.

¹⁹Il suffit en effet de choisir un jeu de déplacements virtuels ne faisant pas travailler les réactions de liaisons (voir par exemple Talpaert, [Tal-1993]).

Annexe D : Méthode des éléments finis

Nous prenons ici l'exemple simple (voir par exemple Imbert, [Imb-1984]) d'un système mécanique dont l'énergie cinétique est homogène d'ordre 2. Les notations sont celles de la section I.1.1. La discrétisation du volume V en plusieurs sous volumes v^e appelés éléments, tels que $\bigcup v^e = V$, permet l'écriture d'un déplacement approché $\mathbf{u}^e(t, \mathbf{r})$ sur chacun de ces éléments sous la forme :

$$\mathbf{u}^e(t, \mathbf{r}) = \mathbf{A}^e(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{q}^e(t) \quad (\text{D.1})$$

où $\mathbf{A}^e(\mathbf{r})$ est la matrice d'interpolation pour l'élément e , et $\mathbf{q}^e(t)$ le vecteur des déplacements aux noeuds de cet élément. Les énergies cinétique et potentielle de l'élément se calculent ainsi sous la forme :

$$K^e = \int_{v^e} \mathcal{K}^e dV = \frac{1}{2} \int_{v^e} \rho \mathbf{u}_{,i}^e \cdot \mathbf{u}_{,i}^e dV = \frac{1}{2} \mathbf{q}_{,i}^e \cdot \mathbf{M}^e \cdot \mathbf{q}_{,i}^e \quad (\text{D.2})$$

$$V_1^e = \int_{v^e} \mathcal{V}_1^e dV = \int_{v^e} \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}^e) : \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{u}^e) dV = \frac{1}{2} \mathbf{q}^e \cdot \mathbf{K}^e \cdot \mathbf{q}^e \quad (\text{D.3})$$

$$V_2^e = \int_{v^e} \mathcal{V}_2^e dV = \int_{v^e} -\mathbf{f} \cdot \mathbf{u}^e dV = \mathbf{F}^e \cdot \mathbf{q}^e \quad (\text{D.4})$$

dans lesquelles on fait apparaître par identification les matrices de masse \mathbf{M}^e et de raideur \mathbf{K}^e de l'élément e , ainsi que le vecteur \mathbf{F}^e des forces extérieures s'exerçant sur cet élément. On peut enfin montrer que la condition de stationnarité de la fonctionnelle (I.15), portant sur l'ensemble de la structure, mène à un système d'équations :

$$\delta J = \delta \left(\sum_{v^e} K^e - V_1^e - V_2^e \right) = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{M} \cdot \mathbf{q}_{,tt} + \mathbf{K} \cdot \mathbf{q} = \mathbf{F} \quad (\text{D.5})$$

où les matrices \mathbf{M} , \mathbf{K} et le vecteur \mathbf{F} sont données par l'assemblage des matrices de masses et de raideur des éléments. La résolution de ce système vis à vis des inconnues \mathbf{q} permet de remonter à la forme du champ de déplacement approché \mathbf{u} . La méthode présentée ici très succinctement est à la base même des éléments finis, qui constituent un outil de résolution particulièrement puissant et très utilisé en calcul numérique.



Annexe E : Analyse de Noether

Nous entendons par "analyse de Noether" l'ensemble des techniques mathématiques qui permettent de dégager le rôle des symétries d'un système physique.

E.1 Générateur associé à un groupe

Soit un groupe à un paramètre G , donné par les applications :

$$G : \begin{cases} \bar{x}_i = \bar{x}_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mu) & i = 1..4 \\ \bar{u}_i = \bar{u}_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mu) & i = 1..q \end{cases} \quad (\text{E.1})$$

Rappelons que ces applications doivent satisfaire les axiomes d'associativité, d'élément neutre et d'inversion qui sont exposés dans l'annexe B. Le point de vue de la géométrie différentielle consiste (i) à considérer l'ensemble des variables dépendantes \mathbf{x} et indépendantes \mathbf{u} comme une surface généralisée²⁰, de telle sorte que la donnée de (\mathbf{x}, \mathbf{u}) est un point de cette "surface", et (ii) à voir les applications (E.1) comme la description paramétrique (vis à vis du paramètre μ) d'une courbe passant par un point (\mathbf{x}, \mathbf{u}) donné. On peut s'intéresser plus particulièrement au vecteur tangent à cette trajectoire généralisée pour la valeur $\mu = 0$, comme le montre la :

DÉFINITION E.1.1 : *Le champ de vecteur générateur v du groupe G est donné par l'opérateur différentiel :*

$$v = \sum_{i=1}^4 \left. \frac{\partial \bar{x}_i}{\partial \mu} \right|_{\mu=0} \frac{\partial}{\partial x_i} + \sum_{i=1}^q \left. \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial \mu} \right|_{\mu=0} \frac{\partial}{\partial u_i} = \sum_{i=1}^4 \xi_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \frac{\partial}{\partial x_i} + \sum_{i=1}^q \phi_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \frac{\partial}{\partial u_i} \quad (\text{E.2})$$

où, rappelons le, $\xi_i(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ et $\phi_i(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ sont appelées respectivement composantes horizontales et verticales du groupe. ■

Réciproquement, on peut, étant donné un champ de vecteur v de l'espace tangent à la variété (\mathbf{x}, \mathbf{u}) , remonter à l'écriture explicite d'un groupe par l'intégration de ses composantes²¹. Ainsi, pour le générateur :

$$v = \sum_{k=1}^4 \xi_k(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \frac{\partial}{\partial x_k} + \sum_{k=1}^q \phi_k(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \frac{\partial}{\partial u_k} \quad (\text{E.3})$$

²⁰On parle de variété (voir par exemple [Tal-1993])

²¹il faut en fait que certaines conditions d'intégrabilité soient vérifiées pour les composantes $\xi_k(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ et $\phi_k(\mathbf{x}, \mathbf{u})$, ce que nous supposons toujours par souci de simplicité. Ces conditions sont explicitées dans l'ouvrage de Cartan ([Car-1977]). On désignera donc abusivement par groupe toute solution à un système du type (E.4), qu'elle soit locale ou globale.

on peut remonter aux applications $\bar{x}_i = \bar{x}_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mu)$ et $\bar{u}_i = \bar{u}_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mu)$ via le :

THÉORÈME E.1.1 : *Les fonctions de transformation du groupe G associé au champ de vecteur v sont données par la résolution du système différentiel :*

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{x}_i}{d\mu} &= \xi_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}) & \frac{d\bar{u}_i}{d\mu} &= \phi_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \\ \bar{x}_i(\mu = 0) &= x_i & \bar{u}_i(\mu = 0) &= u_i \end{aligned} \quad (\text{E.4})$$

La résolution de ce système constitue l'exponentielle du champ de vecteur. ■

Le générateur contient donc toute l'information sur le groupe, de même que le vecteur vitesse initial d'un mobile permet de générer toute sa trajectoire. Il est intéressant de remarquer que c'est l'axiome d'existence d'un élément neutre qui fournit une condition initiale pour chacune des composantes

EXEMPLE E.1.1 : En guise d'illustration, soit $u_1 = \sigma(t)$, et le générateur :

$$v = t^2 \frac{\partial}{\partial t} + \sigma \frac{\partial}{\partial \sigma} \quad (\text{E.5})$$

Alors, la résolution du système différentiel :

$$\frac{d\bar{t}}{d\mu} = \bar{t}^2 \quad \bar{t}(\mu = 0) = t \quad (\text{E.6})$$

$$\frac{d\bar{\sigma}}{d\mu} = \bar{\sigma} \quad \bar{\sigma}(\mu = 0) = \sigma \quad (\text{E.7})$$

mène au groupe de transformation :

$$\bar{t} = \frac{t}{1 - \mu t} \quad \bar{\sigma} = e^{\mu} \sigma \quad (\text{E.8})$$

E.2 Prolongement d'un champ de vecteur

La variété engendrée par les variables (\mathbf{x}, \mathbf{u}) peut être étendue si on lui adjoint l'ensemble des dérivées d'ordre inférieur ou égal à un entier donné n . La nouvelle variété $(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(n)})$ ainsi obtenue est appelée "espace des jets d'ordre n ". Par exemple, l'espace des jets d'ordre 2 dénote l'ensemble $\{x_i, u_i, u_{i,j}, u_{i,jk}\}$. Le prolongement à l'ordre n , noté $pr^{(n)}v$, d'un champ de vecteur v est l'expression induite par v dans l'espace vectoriel tangent à l'espace des jets d'ordre n (voir par exemple [Olv-1989]). Plus précisément, si un groupe à un paramètre G transforme les variables \mathbf{x} et \mathbf{u} , le calcul du prolongement du champ de vecteur générateur v associé à G permet de trouver comment les dérivées des variables \mathbf{u} par rapport aux variables \mathbf{x} vont se transformer. Avant de donner la formulation explicite de ce prolongement, il convient de préciser quelques notations. On appellera multientier (noté J) de dimension k , la donnée de k entiers inférieurs ou égaux à 4 :

$$J = (j_1, \dots, j_k) \quad 1 \leq j_k \leq 4 \quad (\text{E.9})$$

L'ensemble vide, noté \emptyset , est un multientier à 0 élément. Nous noterons $u_{i,J}$ la dérivée partielle de u_i par rapport au multientier J , définie par :

$$u_{i,J} = \frac{\partial^k u_i}{\partial x_{j_1} \dots \partial x_{j_k}} \quad (\text{E.10})$$

La dérivée totale par rapport au multientier J , notée D_J s'écrit :

$$D_J = D_{j_1} \circ \dots \circ D_{j_k} = \frac{d}{dx_{j_1}} \circ \dots \circ \frac{d}{dx_{j_k}} \quad (\text{E.11})$$

$$(-D)_J = (-1)^k \frac{d}{dx_{j_1}} \circ \dots \circ \frac{d}{dx_{j_k}} \quad (\text{E.12})$$

Par convention, la dérivée d'une fonction par rapport au multientier vide est égale à elle-même soit : $D_{\emptyset}u = u$, $\forall u \in C^\infty[\Omega]$. Nous sommes en mesure d'énoncer la :

DÉFINITION E.2.1 : *Le prolongement à l'ordre n du champ de vecteur v défini en (E.3) est le champ de vecteur défini par :*

$$pr^{(n)}v = v + \sum_{k=1}^q \sum_J \phi_k^J(x, u^{(n)}) \frac{\partial}{\partial u_{k,J}} \quad (\text{E.13})$$

avec :

$$\phi_k^J(x, u^{(n)}) = D_J(\phi_k - \sum_{i=1}^4 \xi_i u_{k,i}) + \sum_{i=1}^4 \xi_i \frac{\partial}{\partial x_i} (D_J u^k) \quad (\text{E.14})$$

où J représente un multientier quelconque d'ordre inférieur à n . ■

La somme écrite en J dans le prolongement suggère que l'on somme sur tous les multientiers qu'il est possible d'effectuer jusqu'à l'ordre n^{22} . L'exponentielle du prolongement d'un champ de vecteur fera apparaître des fonctions de transformation pour les variables indépendantes, pour les variables dépendantes, mais également pour les dérivées $u^{(n)}$, ce que nous pouvons voir sur l'exemple :

EXEMPLE E.2.1 : Pour $x_1 = t$ et $u_1 = \sigma(t)$, soit le générateur :

$$v = at \frac{\partial}{\partial t} + b\sigma \frac{\partial}{\partial \sigma} \quad (\text{E.15})$$

Alors, son prolongement à l'ordre 1 s'écrit, conformément à la formule (E.13) :

$$pr^{(1)}v = at \frac{\partial}{\partial t} + b\sigma \frac{\partial}{\partial \sigma} + (b-a)\sigma \frac{\partial}{\partial \bar{\sigma}} \quad (\text{E.16})$$

L'exponentielle de ce prolongement permet d'écrire les fonctions de transformations :

$$\begin{cases} \bar{t} = e^{a\mu t} = k_t t \\ \bar{\sigma} = e^{b\mu \sigma} = k_\sigma \sigma \\ \bar{\bar{\sigma}} = e^{(b-a)\mu \sigma} = \frac{k_\sigma}{k_t} \bar{\sigma} \end{cases} \quad (\text{E.17})$$

Il est en effet cohérent d'observer que si la variable t est multipliée par une constante k_t , et que la variable σ est multipliée par une constante k_σ , alors la dérivée $\bar{\sigma} = \frac{d\sigma}{dt}$ est multipliée par la constante $\frac{k_\sigma}{k_t}$. ■

²²Si par exemple $n = 2$, et en se limitant à une fonction $u_1(t, x)$ des deux variables $x_1 = t$ et $x_2 = x$, alors on peut former des multientiers :

- d'ordre 0 : $J = \emptyset$ associé à $D_J = Id$.
- d'ordre 1 : $J = (1)$ associé à $D_J = \frac{d}{dx_1} = \frac{d}{dt}$, $J = (2)$ associé à $D_J = \frac{d}{dx_2} = \frac{d}{dx}$.
- d'ordre 2 : $J = (1, 1)$ associé à $D_J = \frac{d^2}{dt^2}$, $J = (1, 2)$ associé à $D_J = \frac{d^2}{dt dx}$, $J = (2, 1)$ associé à $D_J = \frac{d^2}{dx dt}$,
 $J = (2, 2)$ associé à $D_J = \frac{d^2}{dx^2}$.

L'intérêt de synthétiser dans un vecteur générateur toute l'information portant sur un groupe est le calcul des groupes de symétries d'un problème variationnel. Comme nous allons le voir, ce calcul permet d'aboutir à des lois de conservation, et à des propriétés très importantes sur le système physique étudié.

E.3 Notion de groupes de symétrie

Soit $\Delta(x, u^{(n)}) = \{\Delta_i(x, u^{(n)}), i = 1..q\} = 0$ un système d'EDP. Nous introduisons la notion de groupe de symétrie en énonçant la :

DÉFINITION E.3.1 : *Un groupe de transformation continu G est un groupe de symétrie pour le système d'EDP $\Delta(x, u^{(n)}) = 0$ si et seulement s'il transforme une solution à Δ en une autre solution à Δ .* ■

La recherche des groupes de symétrie d'un système d'EDP permet en général d'en trouver une solution analytique. Pour s'en convaincre, considérons l'exemple :

EXEMPLE E.3.1 : Pour illustrer ceci, soit une fonction de deux variables $u(t, x)$. L'équation de diffusion :

$$u_{,t} + u_{,xx} = 0 \tag{E.18}$$

admet comme groupe de symétrie le groupe de paramètre μ_1 défini par :

$$\bar{x} = \frac{x}{1 - 4\mu_1 t} \tag{E.19}$$

$$\bar{t} = \frac{t}{1 - 4\mu_1 t} \tag{E.20}$$

$$\bar{u} = u\sqrt{1 - 4\mu_1 t} \exp\left(\frac{-\mu_1 x^2}{1 - 4\mu_1 t}\right) \tag{E.21}$$

et le groupe de paramètre μ_2 :

$$\bar{t} = t + \mu_2 \tag{E.22}$$

Une solution triviale à l'équation (E.18) est donnée par $u = C$, où C est une constante. Le premier groupe de symétrie implique qu'une autre solution est donnée par :

$$u = \frac{C}{\sqrt{1 - 4\mu_1 t}} \exp\left(\frac{-\mu_1 x^2}{1 - 4\mu_1 t}\right) \tag{E.23}$$

Le second groupe, pris pour la valeur particulière $\mu_2 = \frac{4(1-4\mu_1)t+1}{4\mu_1}$, implique la nouvelle solution :

$$u = \frac{C}{\sqrt{4t}} \exp\left(-\frac{\bar{x}^2}{4t}\right) \tag{E.24}$$

qui est exactement la solution fondamentale de (E.18). ■

Pour d'autres exemples, on pourra se référer aux panorama très exhaustif proposé par Ibragimov ([Ibr-1994], [Ibr-1995], [Ibr-1996]). Cette puissante technique de résolution est en général directement intégrée dans les noyaux de calcul formel. Pour calculer ces groupes, il convient évidemment de formuler une technique de calcul pratique. Explicitons la méthode générale qui permet de les calculer. On fait désormais l'hypothèse que notre système d'EDP $\Delta(x, u^{(n)}) = 0$ admet au moins une solution. Pour calculer les groupes de symétrie de Δ , nous aurons besoin de la :

DÉFINITION E.3.2 : Le système d'EDP $\{\Delta_i(x, u^{(n)}), i = 1..q\} = 0$ est de rang maximal si et seulement si la matrice :

$$J = \left(\frac{\partial \Delta_i}{\partial x_k}, \frac{\partial \Delta_i}{\partial u_{j,J}} \right) \quad i = 1..q, \quad k = 1..4, \quad j = 1..q \quad (\text{E.25})$$

est de rang q partout où $\{\Delta_i(x, u^{(n)}), i = 1..q\} = 0$, J étant un multientier quelconque d'ordre inférieur ou égal à n . ■

En pratique, le calcul du rang se fait de manière classique : il correspond à la dimension de l'espace vectoriel engendré par les combinaisons linéaires des vecteurs colonnes de J . Nous pouvons illustrer ce théorème avec l'exemple :

EXEMPLE E.3.2 : Soit $u_1 = u(x, y)$ vérifiant l'équation harmonique :

$$\Delta = u_{,xx} + u_{,yy} = 0 \quad (\text{E.26})$$

Alors, la matrice définie en (E.25) s'écrit :

$$\begin{aligned} J &= \left(\frac{\partial \Delta}{\partial x}, \frac{\partial \Delta}{\partial y}, \frac{\partial \Delta}{\partial u}, \frac{\partial \Delta}{\partial u_x}, \frac{\partial \Delta}{\partial u_y}, \frac{\partial \Delta}{\partial u_{xx}}, \frac{\partial \Delta}{\partial u_{xy}}, \frac{\partial \Delta}{\partial u_{yx}}, \frac{\partial \Delta}{\partial u_{yy}} \right) \\ &= (0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 1) \end{aligned} \quad (\text{E.27})$$

La dimension de l'espace engendré par combinaison linéaire des éléments de J , soit 0 et 1, est constante et reste égale à 1. Ainsi l'équation (E.26) est de rang maximal. ■

On peut calculer tous les groupes de symétries d'un système d'EDP Δ , à l'aide du²³ :

THÉORÈME E.3.1 : Le groupe de transformation continu G , associé au générateur v est un groupe de symétrie pour le système d'EDP de rang maximal $\Delta = 0$ si et seulement si $pr^{(n)}v\Delta = 0$ partout où $\Delta = 0$. ■

Montrons l'application de ce théorème en l'appliquant à une équation simple considérée dans l'exemple :

EXEMPLE E.3.3 : Soit l'équation différentielle d'ordre 1 suivante sur une fonction $\sigma(t)$:

$$\Delta(t, \sigma, \dot{\sigma}) = \dot{\sigma} + \sigma = 0 \quad (\text{E.28})$$

Alors, le générateur $v = \frac{\partial}{\partial t}$ à pour prolongement :

$$pr^{(1)}v = \frac{\partial}{\partial t} \quad (\text{E.29})$$

qui vérifie :

$$pr^{(1)}v\Delta(t, \sigma, \dot{\sigma}) = \frac{\partial}{\partial t}(\dot{\sigma} + \sigma) = 0 \quad (\text{E.30})$$

Le groupe associé à ce générateur est le groupe des translations pour la variable t : $\bar{t} = t + \mu$. Il est équivalent d'affirmer que si $\sigma(t)$ est solution de $\Delta(t, \sigma, \dot{\sigma}) = 0$, alors il en est de même pour $\sigma(t - \mu)$, et ce pour toute valeur de μ . ■

La recherche des groupes de symétrie d'un système d'EDP de rang maximal $\Delta = 0$ d'ordre n se fait donc par l'algorithme suivant : il suffit de calculer $pr^{(n)}v\Delta$ pour un générateur :

$$v = \sum_{k=1}^4 \xi_k(x, u) \frac{\partial}{\partial x_k} + \sum_{k=1}^q \phi_k(x, u) \frac{\partial}{\partial u_k} \quad (\text{E.31})$$

²³la preuve complète de ce théorème est donnée dans [Olv-1989]

a priori inconnu. Il faut ensuite exprimer les dérivées d'ordre le plus haut (ici n) en fonction des dérivées d'ordre inférieur en tenant compte du système $\Delta = 0$. Une fois ces dérivées injectée dans la condition $pr^{(n)}\mathbf{v}\Delta = 0$, on obtient un système d'EDP linéaire vis à vis des composantes ξ_k et ϕ_k , appelé système caractéristique. Cet algorithme de recherche est illustré par l'exemple :

EXEMPLE E.3.4 : Soit $u_1 = \sigma(t)$, et l'équation différentielle :

$$\Delta(t, \sigma, \dot{\sigma}) = \dot{\sigma} + a\sigma = 0 \quad (\text{E.32})$$

où a est une constante. Soit le générateur a priori quelconque :

$$\mathbf{v} = \xi(t, \sigma) \frac{\partial}{\partial t} + \phi(t, \sigma) \frac{\partial}{\partial \sigma} \quad (\text{E.33})$$

dont le prolongement à l'ordre 1 est donné par :

$$pr^{(1)}\mathbf{v} = \xi(t, \sigma) \frac{\partial}{\partial t} + \phi(t, \sigma) \frac{\partial}{\partial \sigma} + \left(\frac{d\phi(t, \sigma)}{dt} - \frac{d\xi(t, \sigma)}{dt} \dot{\sigma} \right) \quad (\text{E.34})$$

La condition $pr^{(1)}\mathbf{v}\Delta = 0$, dans laquelle on injecte la liaison différentielle $\dot{\sigma} = -a\sigma$ mène à l'équation caractéristique linéaire vis à vis de $\xi(t, \sigma)$ et $\phi(t, \sigma)$:

$$-a^2\sigma^2\xi_\sigma - a\sigma\phi_\sigma + a\sigma\xi_t + \phi_t + a\phi = 0 \quad (\text{E.35})$$

La résolution de cette équation donne la forme générale des groupes de symétrie pour l'équation (E.32). ■

E.4 Cas des symétries variationnelles

Un cas très intéressant à examiner est celui des systèmes d'EDP qui proviennent de la stationnarité d'une intégrale fonctionnelle. Pour ce type de système, nous allons voir que le théorème dit de Noether permet d'aboutir à des lois de conservation. Dans cette section, nous supposons donc que le système $\Delta(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(n)}) = 0$ est autoadjoint et coïncide donc avec les équations de Lagrange d'un certain problème variationnel :

$$\delta \int_{\Omega} L(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(n)}) d\Omega = 0 \quad \Rightarrow \quad E_i(L) = \Delta_i \quad (\text{E.36})$$

Comme précédemment, nous pouvons introduire la notion de groupe de symétrie pour une intégrale fonctionnelle comme le montre la :

DÉFINITION E.4.1 : *Le groupe G donné par les applications (E.1) est un groupe de symétrie pour l'intégrale fonctionnelle :*

$$S = \int_{\Omega} L(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(n)}) d\Omega \quad (\text{E.37})$$

si et seulement si cette dernière garde la même valeur dans le jeu de variables transformées, i.e. :

$$\bar{S} = \int_{\bar{\Omega}} L(\bar{\mathbf{x}}, \bar{\mathbf{u}}^{(n)}) d\bar{\Omega} = S = \int_{\Omega} L(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(n)}) d\Omega \quad (\text{E.38})$$

Par analogie avec le théorème précédent, nous pouvons accéder à une méthode de calcul direct des symétries variationnelles comme le montre l'application du :

THÉORÈME E.4.1 : *Le champ de vecteur v est un groupe de symétrie pour l'intégrale fonctionnelle :*

$$S = \int_{\Omega} L(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(n)}) d\Omega \quad (\text{E.39})$$

si et seulement si :

$$pr^{(n)} \mathbf{v} L + L \text{Div} \boldsymbol{\xi} = pr^{(n)} \mathbf{v} L + L D_k \xi_k = 0 \quad (\text{E.40})$$

Le grand intérêt de ce théorème est qu'il permet d'aboutir au théorème de Noether, d'une importance capitale en mécanique théorique. Ce dernier s'énonce de la manière suivante :

THÉORÈME E.4.2 : *(dit de Noether) Si v est un groupe de symétrie pour le problème variationnel de l'équation (E.39), alors la relation de conservation :*

$$\text{Div} P = D_1 P_1 + \dots D_4 P_4 \quad (\text{E.41})$$

ou le quadruplet $P = \{P_i, i = 1..4\}$ est donné par :

$$P_i = \sum_{k=1}^q \sum_{j=1}^4 \xi_j u_{k,j} \frac{\partial L}{\partial u_{k,i}} - \sum_{j=1}^q \phi_j \frac{\partial L}{\partial u_{j,i}} - \xi_i L \quad (\text{E.42})$$

est vérifiée dans tout le volume généralisé Ω . ■

Ce théorème montre l'équivalence entre la symétrie et la conservation d'une grandeur. Rappelons qu'il permet de retrouver de manière formelle les conservations de l'énergie, impulsion et moment cinétique de la dynamique classique (voir section (I.1.2)).

E.5 Symétries et conditions initiales

Terminons la présentation de nos outils par une brève remarque sur les conditions initiales. Considérons encore un système d'EDP $\Delta(\mathbf{x}, \mathbf{u}^{(n)}) = 0$ mais cette fois complété par un vecteur de conditions initiales sur les $(n-1)$ ièmes dérivées des u_j en un point \mathbf{x}^0 :

$$\mathbf{u}^{(n-1)}(\mathbf{x}^0) = \mathbf{u}^0 \Leftrightarrow u_j^{(n-1)}(\mathbf{x}^0) = u_j^0 \quad j = 1..q \quad (\text{E.43})$$

L'idée développée ici est que nous pourrions intégrer simplement ces conditions initiales dans l'étude des symétries de Δ en les considérant comme la solution du système différentiel un peu particulier :

$$\mathbf{x} - \mathbf{x}_0 = 0 \quad (\text{E.44})$$

$$\mathbf{u}^{(n-1)}(\mathbf{x}^0) - \mathbf{u}^0 = 0 \quad (\text{E.45})$$

Par suite, l'étude des symétries d'un problème complet²⁴ se fera comme suit : il suffit de calculer comme précédemment les groupes de symétries de Δ puis d'imposer aux générateurs \mathbf{v} ainsi trouvés les deux conditions de symétrie supplémentaires :

$$pr^{(n)}(\mathbf{v})(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = 0 \text{ en } \mathbf{x} = \mathbf{x}_0 \quad (\text{E.46})$$

²⁴Nous entendons par problème complet la traduction mathématique d'une situation physique bien déterminée, c'est à dire la résolution d'un système d'EDP complété par des conditions limites et/ou initiales.

$$pr^{(n)}(\mathbf{v})(\mathbf{u}^{(n-1)}(\mathbf{x}^0) - \mathbf{u}^0) = 0 \text{ en } \mathbf{u}^{(n-1)}(\mathbf{x}^0) = \mathbf{u}^0 \quad (\text{E.47})$$

Annexe F : Application du théorème de Noether

On reprend ici quelques résultats de Hill, [Hill-1951], et Lévy-Leblond, [Lev-1970]), dans le but d'illustrer le théorème de Noether.

F.1 Conservation de l'impulsion

Reprenons l'expression de l'intégrale d'action de la Dynamique des masses ponctuelles (voir l'équation (C.2)), pour laquelle le lagrangien s'écrit :

$$L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) = \sum_{i=1}^n \frac{1}{2} m_i (\dot{q}_{1i,t}^2 + \dot{q}_{2i,t}^2 + \dot{q}_{3i,t}^2) - V(\mathbf{q}) \quad (\text{F.1})$$

L'écriture de ce lagrangien suggère que les variables indépendantes \mathbf{x} se réduisent au temps $x_1 = t$ et que les variables dépendantes \mathbf{u} s'identifient aux projections $q_{1i}(t)$, $q_{2i}(t)$, $q_{3i}(t)$ des positions de toutes les particules. Le principe d'invariance par origine de l'espace implique que l'intégrale (C.2), dans laquelle le lagrangien est donné par (F.1), doit être invariante par translation dans l'espace. L'application du théorème de Noether (théorème I.1.1) pour les générateurs des groupes de translation, soit :

$$\mathbf{v}_1 = \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial q_{1i}} ; \quad \mathbf{v}_2 = \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial q_{2i}} ; \quad \mathbf{v}_3 = \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial q_{3i}} \quad (\text{F.2})$$

implique que la quantité vectorielle :

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} P_1 \\ P_2 \\ P_3 \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad P_j = \sum_{i=1}^n \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{ji}} = \sum_{i=1}^n m_i \dot{q}_{ji} \quad (\text{F.3})$$

vérifie la loi de conservation :

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = 0 \quad (\text{F.4})$$

L'équation (F.3) montre que \mathbf{P} s'identifie à l'impulsion totale des n particules. Nous voyons que l'invariance par translation dans l'espace implique la conservation de l'impulsion.

F.2 Conservation du moment cinétique

De la même manière, si on postule maintenant que l'intégrale d'action (C.2) doit être invariante par le groupe des rotations continues autour de l'axe 3 :

$$\begin{pmatrix} \bar{q}_{1i} \\ \bar{q}_{2i} \\ \bar{q}_{3i} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_{1i} \\ q_{2i} \\ q_{3i} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\mu \end{pmatrix} \wedge \begin{pmatrix} q_{1i} \\ q_{2i} \\ q_{3i} \end{pmatrix}$$

associé au générateur :

$$\mathbf{v} = \sum_{i=1}^n q_{2i} \frac{\partial}{\partial q_{1i}} - q_{1i} \frac{\partial}{\partial q_{2i}} \quad (\text{F.5})$$

le théorème de Noether (théorème (I.1.1)) permet d'aboutir à la conservation de la quantité :

$$\Gamma_3 = \sum_{i=1}^n \left(q_{1i} \frac{\partial L}{\partial q_{2i}} - q_{2i} \frac{\partial L}{\partial q_{1i}} \right) \quad (\text{F.6})$$

soit :

$$\frac{d\Gamma_3}{dt} = 0 \quad (\text{F.7})$$

qui n'est autre que la composante sur l'axe 3 du moment cinétique total des n particules. Le même raisonnement sur les directions 1 et 2 conduit à l'expression vectorielle de la conservation du moment cinétique.

F.3 Conservation de l'énergie pour un système continu

Donnons maintenant un exemple d'application du théorème de Noether pour un système continu. Pour ce faire, considérons la fonctionnelle (I.15) en l'absence de forces extérieures ($\mathbf{f} = 0$) et dans laquelle on a injecté l'expression (I.13) du tenseur des petites déformations²⁵ :

$$J(\mathbf{u}) = \int_{t_0}^{t_1} \left(\int_V \left[\frac{1}{2} \rho \mathbf{u}_{,t}^2 - \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u}) : \mathbf{C} : (\nabla \mathbf{u}) \right] dV \right) dt \quad (\text{F.8})$$

Les variables indépendantes \mathbf{x} sont ici le temps $x_1 = t$. Les variables d'espace sont données par :

$$\mathbf{r} = \{x_2 = x, x_3 = y, x_4 = z\} \quad (\text{F.9})$$

et les variables dépendantes s'identifient aux composantes du champ de déplacement. Le principe d'invariance par translation de l'origine du temps exige que l'intégrale d'action (F.8) doit être invariante par le groupe à un paramètre μ de translation sur l'échelle des temps :

$$\bar{t} = t + \mu \quad (\text{F.10})$$

associé au générateur n'ayant qu'une composante non nulle $\xi_1 = \xi_t = 1$:

$$\mathbf{v} = \frac{\partial}{\partial t} \quad (\text{F.11})$$

²⁵L'écriture du double produit contracté $\frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}$ se simplifie en $\frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u}) : \mathbf{C} : (\nabla \mathbf{u})$ compte tenu de la symétrie des coefficients du tenseur \mathbf{C} .

L'équation (I.19) pour le lagrangien L de la fonctionnelle (F.8) donné par :

$$L = \frac{1}{2} \rho \mathbf{u}_{,t}^2 - \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u}) : \mathbf{C} : (\nabla \mathbf{u}) \quad (\text{F.12})$$

permet la construction d'un quadrivecteur $\mathbf{P} = \{P_t, P_x, P_y, P_z\}$, qui s'écrit ici :

$$P_t = \mathbf{u}_{,t} \cdot \frac{\partial L}{\partial \mathbf{u}_{,t}} - L = \frac{1}{2} \rho \mathbf{u}_{,t}^2 + \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{u}) : \mathbf{C} : (\nabla \mathbf{u}) \quad (\text{F.13})$$

$$\begin{pmatrix} P_x \\ P_y \\ P_z \end{pmatrix} = \mathbf{u}_{,t} \cdot \frac{\partial L}{\partial (\nabla \mathbf{u})} = -\mathbf{u}_{,t} \cdot \mathbf{C} : \nabla \mathbf{u} \quad (\text{F.14})$$

Ce quadrivecteur satisfait la loi de conservation :

$$D_t P_t + D_x P_x + D_y P_y + D_z P_z = \frac{dP_t}{dt} + \frac{dP_x}{dx} + \frac{dP_y}{dy} + \frac{dP_z}{dz} = 0 \quad (\text{F.15})$$

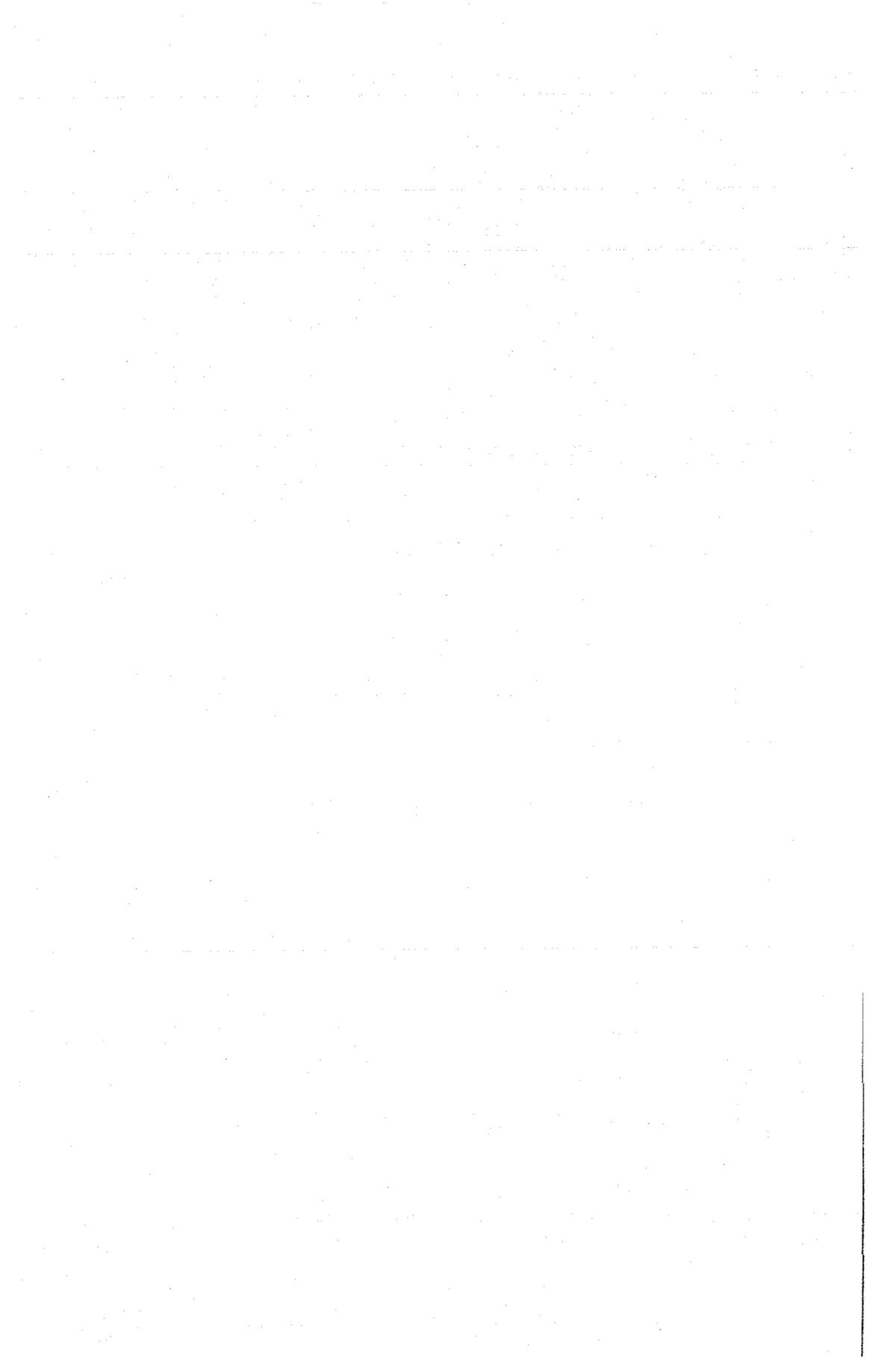
qui peut se réécrire, compte tenu des équations (F.13) et (F.14) :

$$\mathbf{u}_{,t} \cdot (\rho \mathbf{u}_{,tt} - \nabla \cdot (\mathbf{C} : \nabla \mathbf{u})) = 0 \quad (\text{F.16})$$

ou encore :

$$\mathbf{u}_{,t} \cdot (\rho \mathbf{u}_{,tt} - \nabla \cdot \sigma) = 0 \quad (\text{F.17})$$

si on introduit le tenseur des contraintes $\sigma = \mathbf{C} : \nabla \mathbf{u}$. On retrouve ici (avec l'hypothèse $\mathbf{f} = 0$) l'écriture en puissance de l'équation (I.17), en ce sens que la dérivée par rapport au temps de l'énergie cinétique égale la puissance des efforts appliqués. L'invariance de la fonctionnelle (F.8) par origine du temps conduit donc à la conservation de l'énergie dans le volume V .



Annexe G : Confrontation de l'irréversibilité et du déterminisme

Au début du XIX^{ème} siècle, l'industrialisation nécessite des machines thermiques fonctionnant grâce à la combustion du charbon. La productivité de ces machines ne rentabilise pas leur consommation, si bien que certains travaux sur la nature de la chaleur, en vue d'améliorer le rendement de ces machines, voient le jour. La thermodynamique naît donc avec les travaux de Sadi Carnot (1796-1832), qui tente de montrer que la chaleur (encore mal définie à l'époque) se conserve au cours d'un cycle d'une machine à vapeur. Ce résultat est vite démenti par James Watt (1736-1819), qui prouve de manière expérimentale que la chaleur et le travail sont deux formes d'une même grandeur nommée énergie, et qu'il existe un facteur d'équivalence entre les deux.

Quelques années plus tard, les travaux de William Thomson (1824-1907, devenu plus tard Lord Kelvin) et Rudolf Clausius (1822-1888) sur l'énergie montrent une profonde dissymétrie de la Nature : s'il est possible de transformer intégralement de l'énergie mécanique en chaleur (comme le fait un pendule subissant le frottement de l'air environnant), l'inverse ne se produit spontanément qu'avec un rendement très faible, et nécessite un apport d'énergie pour s'accomplir complètement. Clausius, pour expliquer le fait que l'énergie dite noble (ou utilisable) se convertit spontanément en énergie dégradée (la chaleur), introduit le nouveau concept d'*entropie*, qui mesure le désordre interne d'un système. Les observations expérimentales montrent que cette entropie ne peut que croître pour un système isolé, ce qui signifie que son énergie interne se répartit spontanément de manière chaotique. La croissance inexorable de l'entropie (donc du désordre interne) vers l'état le plus probable constitue l'énoncé du second principe de la thermodynamique. En guise d'illustration, citons Murray Gell - Mann (1929-) :

“L'explication de l'irréversibilité est qu'il y a plus de manières pour les clous ou les pièces de monnaie d'être mélangées que triés. Il y a plus de manières pour les pots de beurre et de confiture d'être contaminés l'un par l'autre que de rester purs. Et il y a plus de manières pour les molécules d'un gaz d'oxygène et d'azote d'être mélangées que séparées. Dans la mesure où on laisse aller les choses au hasard, on peut prédire qu'un système clos caractérisé par quelque ordre initial évoluera vers le désordre, qui offre tellement plus de possibilités.”

L'entropie est très vite associée à un nouveau concept qui va révolutionner la Physique du XX^{ème} siècle : celui de flèche du temps. Cette appellation désigne la direction (irréversible) prise par l'évolution des choses. Reprenons la métaphore de Gell-Mann : il est impossible d'observer un tas de clous de différentes tailles se trier tous seuls. En revanche, une caisse de clous rangés peut potentiellement tomber (et tombera forcément au bout d'un temps infini) et par suite créer du désordre. L'évolution vers le futur (même potentielle), qui contient

inexorablement le désordre, est donc privilégiée devant le retour à un ordre établi. Cette dissymétrie du temps renverse, dès le début du XX^{ème} siècle, la vision d'un monde déterministe qui régnait en maître depuis des siècles.

En effet, depuis les temps les plus anciens, l'observation des étoiles offre aux astronomes la vision d'une "machine céleste" bien huilée et éternellement reproductible. La mécanique bâtie par Newton, qui s'appuie sur l'hypothèse d'un temps uniforme, est jusqu'au début du XX^{ème} siècle, vue comme le fondement du déterminisme. Ce dernier stipule que les mouvements de tous les corps (les effets) sont forcément déterminés par des forces (les causes), et que la connaissance d'un état de l'Univers à un instant donné t_0 implique sa connaissance à tout autre instant t . Illustrons ceci en reprenant les termes de Laplace (1749-1827) :

"Une intelligence qui pour un instant donné connaîtrait toutes les forces dont la Nature est animée et la situation respective des êtres qui la composent, si d'ailleurs elle était assez vaste pour soumettre ces données à l'analyse, embrasserait dans la même formule les mouvements des plus grands corps de l'univers et ceux du plus léger atome : rien ne serait incertain pour elle et l'avenir comme le passé serait présent à ses yeux."

Cette vision est celle d'un monde parfaitement symétrique vis à vis du temps, prédictible à l'infini, aussi bien dans le sens présent - futur que dans le sens présent - passé. Nous pouvons illustrer ceci en remarquant que l'équation de Newton (dans le cas d'une masse m constante) :

$$F = m \frac{d^2x}{dt^2}$$

est invariante par la symétrie discrète $t \rightarrow -t$. Cette "réversibilité", qui régnait en maître jusqu'au début du XX^{ème} siècle, va pourtant être bouleversée par les découvertes d'un scientifique français.

Poincaré (1854-1912), au tout début du XX^{ème} siècle, tente de résoudre le problème dit "des trois corps" : il s'agit de calculer, à long terme, la trajectoire du système Terre - Lune - Soleil. Les résolutions antérieures de ce problème, destinées à guider les navigateurs en dressant les positions précises des trois astres, ont toutes mené à des erreurs d'approximation (de moins en moins grossières, mais toujours non nulles). Poincaré montre que les équations du problème (issue de la mécanique de Newton), quoique totalement déterministes, contiennent une part d'incertitude lorsque l'on fait varier légèrement les conditions initiales :

"Il peut arriver que de petites différences dans les conditions initiales en engendrent de très grandes dans les phénomènes finaux. Une petite erreur sur les premières produirait une erreur énorme sur les dernières. La prédiction devient impossible et nous avons le phénomène fortuit..."

Une cause très petite qui nous échappe, détermine un effet considérable que nous ne pouvons pas ne pas voir, et alors nous disons que cet effet est dû au hasard"

La mécanique de Newton, qui supposait jusqu'alors un monde parfaitement réglé par des lois totalement réversibles, contient en fait une part d'incertitude du fait de la très grande sensibilité aux conditions initiales : il s'agit de la notion de chaos. Nous voyons bien ce phénomène dans la vie quotidienne : deux lancers de dé quasiment identiques mèneront à deux résultats totalement différents. La mécanique de Newton perd donc son statut de "métronome" et laisse apparaître la diversité de trajectoires infiniment voisines. Cette diversité, que nous ne pouvons appréhender a priori, s'apparente à la notion même d'entropie, en ce sens que

l'évolution imprévisible et désordonnée de certains systèmes laisse apparaître une "créativité" de la Nature, intimement liée à la flèche du temps. Pour justifier ce propos, évoquons les dires de Kamarinos, [Kam-2004] :

La théorie du chaos, branche de la thermodynamique moderne, montre que la prédictibilité est restreinte dans le temps à cause de l'imprécision naturelle et indépassable des conditions limites, ou plus précisément à cause de la dépendance sensitive des conditions initiales. Le déterminisme tombe donc : un système complexe a une évolution d'autant plus imprévisible qu'il est plus complexe et mal défini à ses frontières spatiales et temporelles.

Peu avant l'exposé fracassant de Poincaré, Boltzmann (1844-1906) essaie de montrer que la flèche du temps n'est que "l'illusion due au caractère grossier de nos observations". En supposant que les mouvements de toutes les particules d'un milieu sont (à l'échelle microscopique) réversibles, Boltzmann montre que c'est la procédure probabiliste mise en jeu lors du passage micro - macroscopique qui est à l'origine de la flèche du temps. Cette théorie tente donc de concilier la dynamique Newtonienne, traduisant selon Prigogine (1917-2003) "la permanence, la stabilité et la simplicité", et une flèche du temps supposée n'être qu'illusion. La vision de Boltzmann est déjà critiquée à l'époque, si bien que Poincaré affirmera : "chercher à expliquer l'irréversible par du réversible apparaît comme une erreur que la logique suffit à condamner".

La flèche du temps a reçu ces dernières années un statut totalement différent. Des simulations sur ordinateurs ont montré que la flèche du temps est une réalité physique intrinsèque, et non une erreur due à l'observation. Citons Prigogine :

"[...] nous pouvons donc conclure qu'au niveau microscopique, la différence entre passé et avenir persiste même dans un système à l'équilibre. Ce n'est pas le non équilibre qui crée la flèche du temps, c'est l'équilibre qui empêche la flèche du temps, toujours présente au niveau microscopique, d'avoir des effets macroscopiques".

Cette existence, cette "nouvelle alliance" entre l'homme et un monde changeant, renvoie la science initialement perçue comme vérité immuable, au rang de dialogue avec la Nature. Ainsi, "la permanence, la stabilité et la simplicité [deviennent] évolution, incertitude et complexité".

Ainsi, nous voilà en face de deux conceptions du monde totalement différentes, à l'origine d'une confrontation qui bouleverse le XX^{ème} siècle :

- d'un côté le déterminisme et le temps uniforme de la mécanique Newtonienne : la prévisibilité infinie d'un monde réglé par des lois infiniment précises
- de l'autre, le chaos et la flèche du temps, c'est à dire l'imprévisibilité et la créativité : l'oubli absolu du passé pour la découverte d'un futur inconnu.

C'est au commencement de ce siècle que Poincaré affirme, en 1908 :

"[...] les phénomènes irréversibles et le théorème de Clausius ne sont pas explicables au moyen des équations de Lagrange."

Cet énoncé dogmatique stipule qu'il est impossible de concilier thermodynamique des processus irréversibles et formalisme lagrangien. Depuis le début du XX^{ème} siècle, certains scientifiques ont cherché une solution à ce problème, donnant ainsi quelque réponse aux interrogations de Prigogine :

“Ces lois sont déterministes : [...]. Futur et passé y jouent le même rôle. Mais le XIX^{ème} siècle nous a aussi légué une vision évolutive, temporelle, de l’univers,[...]. Comment réconcilier ces deux points de vue ?”

Annexe H : Géométrie différentielle

H.1 Produit extérieur de p 1-formes

On présente ici les outils mathématiques employés dans la section II.2.1. Soit M une variété de dimension n (on prendra en général $M = \mathbb{R}^n$) et (x_1, \dots, x_n) un système de coordonnées sur cette variété.

DÉFINITION H.1.1 : On appelle forme sur M une application multilinéaire de M dans \mathbb{R} . ■

EXEMPLE H.1.1 : L'application qui à tout couple (x, y) de \mathbb{R}^2 associe la valeur $ax^2 + by^2 + cxy$ est une 2-forme sur \mathbb{R}^2 . ■

Soient A_1, \dots, A_p p formes d'ordre 1 sur \mathbb{R}^n . A chacune de ces formes, on peut associer un vecteur de \mathbb{R}^n .

EXEMPLE H.1.2 : A la 1-forme de \mathbb{R}^2 : $\alpha = 3x_2 - x_1$ est associé le vecteur $(-1 \ 3)$. ■

On introduit la notion de produit tensoriel de 1-forme en "calquant" sa définition usuelle comme le montre la :

DÉFINITION H.1.2 : Le produit tensoriel de p 1-formes est la p -forme dont les composantes coïncident avec les composantes du produit tensoriel des p vecteurs associés. ■

EXEMPLE H.1.3 : Soit $\alpha(x_1, x_2) = 3x_2 - x_1$ et $\beta = 2x_2 + x_1$ alors :

$$\alpha \otimes \beta = (x_1 x_2) \left[\begin{pmatrix} -1 \\ 3 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = (x_1 x_2) \begin{pmatrix} -1 & -2 \\ 3 & 6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = -x_1^2 + x_1 x_2 + 6x_2^2 \quad (\text{H.1})$$

Nous sommes en mesure d'introduire la :

DÉFINITION H.1.3 : Le produit extérieur, noté \wedge , de p 1-formes A_i est la p -forme obtenue par antisymétrisation du produit tensoriel :

$$A_{i_1} \wedge \dots \wedge A_{i_p} = \delta_{I_1 \dots I_p}^{i_1 \dots i_p} A_{I_1} \otimes \dots \otimes A_{I_p} \quad (\text{H.2})$$

(avec somme sur les I_k), où l'opérateur δ est défini par :

$$\delta_{I_1 \dots I_p}^{i_1 \dots i_p} = \begin{cases} 0 & \text{si les } i_k \text{ ne sont pas une permutation des } I_k \\ 1 & \text{si les } i_k \text{ sont une permutation paire des } I_k \\ -1 & \text{si les } i_k \text{ ne sont pas une permutation impaire des } I_k \end{cases} \quad (\text{H.3})$$

EXEMPLE H.1.4 : Sur \mathbb{R}^4 , nous avons l'égalité :

$$x_3 \wedge x_1 = x_3 \otimes x_1 - x_1 \otimes x_3 = -x_1 \wedge x_3 \quad (\text{H.4})$$

La notion de produit extérieur permet de définir une base pour l'ensemble des k -formes comme le montre le :

THÉORÈME H.1.1 : Les C_n^p produit extérieurs $x_{i_1} \wedge \dots \wedge x_{i_p}$ avec $i_1 < \dots < i_p < n$ forment une base de l'ensemble des k -formes d'ordre $k \leq n$. Cette base est appelée base canonique ou base des produits extérieurs. ■

Lorsqu'on décompose une forme dans la base des produits extérieurs, la somme sur les indices $i_1 < \dots < i_p < n$ est sous entendue. Par exemple :

$$\omega = \sum_{i < j < k} \omega_{ijk} x_i \wedge x_j \wedge x_k = \omega_{ijk} x_i \wedge x_j \wedge x_k \quad (\text{H.5})$$

Terminons cette section en énonçant quelques propriétés du produit extérieur via le :

THÉORÈME H.1.2 : Le produit extérieur \wedge est bilinéaire, associatif, non commutatif, mais pour ω d'ordre p et μ d'ordre q , nous avons :

$$\omega \wedge \mu = (-1)^{pq} \mu \wedge \omega \quad (\text{H.6})$$

H.2 Différentiation extérieure et verticale

La différentiation extérieure généralise la notion de différentiation usuelle. Ainsi, introduisons la :

DÉFINITION H.2.1 : On appelle différentiation extérieure l'application d qui à une p -forme différentielle ω associe une $p+1$ -forme différentielle notée $d\omega$ et vérifiant :

- Si g est une fonction de \mathbb{M} dans \mathbb{R} alors dg coïncide avec la différentielle classique des fonctions.
- d est linéaire, soit $d(f + g) = df + dg$.
- d est 2-nihilotente, soit $d^2 f = dd f = 0 \quad \forall f$.
- d est antidérivative, soit :

$$d(\omega \wedge \mu) = d\omega \wedge \mu + (-1)^p \omega \wedge d\mu \quad (\text{H.7})$$

où p est l'ordre de ω . ■

On déduit simplement de cette définition le :

THÉORÈME H.2.1 : Soit ω une p -forme de degré p pair, alors $d\omega \wedge d\omega = 0$. Par suite, tout produit extérieur comportant au moins deux fois le même terme est nécessairement nul. ■

Une formule plus pratique permet le calcul d'une différentielle extérieure. Elle est donnée par le :

THÉOREME H.2.2 : Soit $\omega = \omega_{i_1 \dots i_p} dx_{i_1} \wedge \dots \wedge dx_{i_p}$ une p -forme différentielle, alors :

$$d\omega = d\omega_{i_1 \dots i_p} \wedge dx_{i_1} \wedge \dots \wedge dx_{i_p} = \frac{\partial \omega_{i_1 \dots i_p}}{\partial x_r} dx_r \wedge dx_{i_1} \wedge \dots \wedge dx_{i_p} \quad (\text{H.8})$$

EXEMPLE H.2.1 : Soit sur \mathbb{R}^3 la 2-forme $\omega = x_3 x_1 dx_2 \wedge dx_3$. Alors :

$$d\omega = d(x_3 x_1) \wedge dx_2 \wedge dx_3 = (x_3 dx_1 + x_1 dx_3) \wedge dx_2 \wedge dx_3 = x_3 dx_1 \wedge dx_2 \wedge dx_3 \quad (\text{H.9})$$

car $dx_3 \wedge dx_2 \wedge dx_3 = 0$. ■

La notion de différentiation verticale est enfin introduite par la :

DÉFINITION H.2.2 : La différentiation verticale d'une fonction f est donnée localement par :

$$\begin{aligned} d_v f &= \frac{\partial f}{\partial \dot{q}_i} dq_i \\ d_v(dq_i) &= d_v(d\dot{q}_i) = 0 \end{aligned} \quad (\text{H.10})$$

■

H.3 Produit intérieur

Soit X un champ de vecteur sur \mathbb{M} défini par :

$$X = X_k \frac{\partial}{\partial x_k} \quad (\text{H.11})$$

et $\omega = \omega_{i_1 \dots i_p} dx_{i_1} \wedge \dots \wedge dx_{i_p}$ une p -forme différentielle. Alors on peut énoncer la :

DÉFINITION H.3.1 : Le produit intérieur ou produit contracté de ω par X , noté $i_X \omega$ est la $(p-1)$ -forme donnée par :

$$i_X \omega = \frac{1}{(p-1)!} \omega_{k i_2 \dots i_p} X_k dx_{i_2} \wedge \dots \wedge dx_{i_p} \quad (\text{H.12})$$

EXEMPLE H.3.1 : Soit sur \mathbb{R}^2 la 1-forme $\omega = x_2 dx_1$ et le champ de vecteur :

$$X = x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{\partial}{\partial x_2} \quad (\text{H.13})$$

Alors, nous avons :

$$i_X \omega = \omega_k X_k = x_2^2 \quad (\text{H.14})$$

Références

- [And-1992] ANDERSON I., THOMPSON G. *The inverse problem of the calculus of variations for ordinary differential equations*. Memoirs of the American Society. 1992, Vol. 98, No. 473, ISSN : 0065-9266.
- [Ann-1985] ANNIN B.D., BYTEV V.O., SENASHOV S.I., *Group properties of equations of elasticity and plasticity*, Nauka, Novosibirsk, 1985.
- [Ant-2001] ANTHONY K.H. *Hamilton's action principle and thermodynamics of irreversible processes - a unifying procedure for reversible and irreversible processes*. J. Non-Newtonian Fluid Mech. 2001, Vol. 96, p 291-339.
- [Ant-1990] ANTHONY K.H. *Phenomenological thermodynamics of irreversible processes within Lagrange formalism*. Acta physica Hungaria. 1990, Vol. 67, p 321-340.
- [Aya-1995] AYADI Zoubeir. *Contribution à la modélisation du comportement mécanique des polymères à partir d'une approche thermodynamique de la relaxation des milieux continus. Applications aux expériences de fluage..* Th Sciences. 1995. INP Lorraine.

B

- [Ber-1997] BÉREST P. *Calcul des Variations*. Editions Ellipses, Paris, 1997.
- [Berg-2001] BERGOUNIOUX Maitine. *Optimisation et contrôle des système linéaires*. Editions Dunod. 2001. ISBN : 2-10-005626-3.
- [Bio-1956] BIOT M.A. *Variational and lagrangian methods in viscoelasticity*. Springer Verlag. 1956.
- [Bio-1955] BIOT M.A. *Variational principles in irreversible thermodynamics with application to viscoelasticity*. Physical Review. 1955, Vol. 97, No. 6, p 1463-1469.
- [Blo-1996] BLOCH Anthony, et.al. *The Euler-Poincaré equations and double bracket dissipation*. Commun. Math. Phys. 1996, No. 175, p 1-42.

[Boc-1968] BOCCARA Nino. *Les principes de la Thermodynamique Classique*. Presses universitaires de France. 1968. ISBN : 2-844771-005-1

[Bru-2002] BRUNET Pierre . *Etude historique sur le principe de la moindre action*. Edition Vigdor, 2002. ISBN : 2-844771-005-1

C

[Cal-1960] CALLEN Herbert. *Thermodynamics : an introduction to the physical theories of equilibrium thermostatics and irreversible thermodynamics*. 1960. New York.

[Car-1977] CARTAN Henri. *Cours de calcul différentiel*. Ed. Hermann, 1977. ISBN : 2-7056-5879-3

[Carr-1958] CARROT Christian, GUILLET Jacques. *Viscoélasticité linéaire des polymères fondus*. Techniques de l'Ingénieur. 1999. No. AM3620.

[Cat-1958] CATTANEO C.R. *Sur une forme de l'équation de la chaleur éliminant le paradoxe d'une propagation instantanée*. C.R. Hebd. séances Acad. Sci. 1958, Vol. 247, No. 4, p 431-433.

[Che-1999] CHEN H.Y., *et al*. *Creep behavior of amorphous ethylene-styrene interpolymers in the glass transition region*. Journal of Polymer Science. Part B. 1999, Vol. 37, p 2373-2382.

[Chi-1996] CHIEN N., HONEIN T.,HERMANN G. *Dissipative systems, conservation laws and symmetries*. Int J. Solids Structures. 1996, Vol. 33, No. 20-22, p 2959-2968

[Chi-1993] CHIEN N., HONEIN T.,HERMANN G. *Conservation laws for linear viscoelasticity*. Zangew Math Phys. 1993, Vol. 44.

[Chir-1973] CHIRKUNOV Y., *Group property of Lamé equation, Dinamika Splosh. Sredi, Novosibirsk* 14. 1973.

[Con-1984] CONSTANTELOS N. *On the Hamilton-Jacobi theory with derivatives of higher order*. Il nuovo cimento. 1984, Vol. 84B. No. 1.

[Cra-1981] CRAMPIN M. *On the differential geometry of the Euler - Lagrange equations, and the inverse problem of Lagrangian dynamics*. J. Phys. A. Math. Gen. 1981, p 2567-2575.

[Cun-1985] CUNAT Christian. *Approche statistique des propriétés thermodynamiques des états liquides et vitreux : relaxation des liquides et transition vitreuse ; influence des associations chimiques..* Thèse d'état Sciences. 1985. Nancy I.

-
- [Cun-1988] CUNAT Christian., *Thermodynamic treatment of relaxation in frozen-in systems. Universality of the distribution law for relaxation times.* Zeit. für Phys. Chem. Neue Folge. 1988, Vol. 157, p 419.
- [Cun-2001] CUNAT Christian. *The DNLN approach and relaxation phenomena. Part I Historical account and DNLN formalism,* Mech. of Time-Dependent Materials. 2001, Vol. 5, p 39-65.
- [Cun-2000] CUNAT Christian., *Lois constitutives de matériaux complexes stables ou vieillissants. Apport de la thermodynamique de la relaxation,* Rev. Gen. Ther. 2000, Vol. 35.
- [Cun-2003] CUNAT Christian. *Mécanique Statistique.* Cours E.N.S.E.M., I.N.P.L., 2002-2003.
- [Cun-2004] CUNAT Christian. *Echelles de temps et thermodynamique des processus irréversibles en mécanique des matériaux.* Proc. Colloque Mécamat, Aussois 2004.

D

- [DeD-1936] DE DONDER Théophile. *Thermodynamic Theory of Affinity : A Book of Principle.* Oxford, England : Oxford University Press. 1936.
- [Die-2002] DIENG Lamine. *Sur un modèle de comportement mécanique avec analyse modale de la dissipation intrinsèque : mise en oeuvre et validation numérique.* Th Sciences. 2002. INP Lorraine.
- [Doc-2004] DOCTOBRE Anne, PIDOUX Amélie. *Etude d'une colle en grandes déformations et pour des grandes vitesses de déformation.* Rapport de Projet. 2004. INP Lorraine.

E

- [Ech-1996] ECHEVERRIA-ENRIQUEZ Arturo, MUNOZ-LECANDA Miguel, ROMAN-ROY Narciso. *Geometry of Lagrangian first order classical field theory.* Fortschr. Phys. 1996, Vol. 44, No. 3, p 235-280
- [Ede-1976] EDELEN Dominic. *A thermodynamic with internal degrees of freedom and nonconservative form.* Int. J. Engng Sci. 1976, Vol. 14, p 1013-1032
- [Ehr-1999] EHRENSTEIN Gottfried, MONTAGNE Fabienne. *Matériaux polymères.* Ed. Hermès. 1999. ISBN : 2-7462-0149-6.
- [Elh-2001] EL HAOUET Karim. *Mécanique configurationnelle et D.N.L.R. : une première approche.* Rapport de stage. L.E.M.T.A., 2001.

[Eng-1975] ENGELS E. *On the Helmholtz conditions for the existence of a Lagrange formalism*. Il nuovo cimento. 1975, Vol. 26B, No. 2.

F

[Far-1985] FARIAS J. Ronald., *Conventional Hamiltonian for first order differential systems*. Hadronic Journal. 1985, Vol. 8, No. 2., p 93-96.

[Fat-1991] FATIC V. *A new variational principle for dissipative systems with reverse time scales*. International Symposium on Circuits and Systems. 1991, Vol. 5, p 2900-2903.

[Fer-1980] FERRY J.D., *Viscoelastic properties of polymers*, 3rd edition. Wiley. 1980.

[Fey-1990] FEYNMANN Richard. *The strange theory of light and matter*. Penguin Books. 1990. ISBN : 0-140-1-25051.

G

[Gao-1999] GAO David Yang. *Duality Principles in Nonconvex Systems*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht Hardbound. 1999. ISBN : 0-7923-6145-8.

[Ger-1998] GERMAIN Paul. *Functional concepts in continuum mechanics*. Kluwer Academic Publishers, Meccanica. 1998, Vol. 33, p 433-444.

[Gio-1991] GIORGI C, MORRO A. *Extremum principles for viscoelastic fluids*. Int. J. Engng. Sci. 1991, Vol. 29, No. 7, p 807-817.

[God-1969] GODBILLON Claude. *Géométrie différentielle et mécanique analytique*. Edition Hermann. 1969. ISBN : 2-7056-5658-8.

[Grm-1998] GRMELA M., JOU D., CASAS-VASQUEZ J.. *Nonlinear and Hamiltonian extended irreversible thermodynamics*. Journal of Chemical Physics. 1998, Vol 108, Issue 19, p 7937-7945.

[Gug-1939] GUGGENHEIM E. A., FOWLER R.H.. *Statistical thermodynamics : a version of statistical mechanics for students of physics and chemistry*. Cambridge : the university press. 1939.

[Gse-1995] G'SELL Christian, HAUDIN Jean-Marc. *Introduction à la mécanique des polymères*. Edité par l'auteur. 1995. ISBN : 2-905267-22-4.

[Gya-1970] GYARMATI I. *Non equilibrium thermodynamics, field theory and variational principles*. Springer. 1970.

H

[Her-1976] HERVAS BURGOS P. *Sistemas disipativos de naturaleza discreta*. Anales de Fisica. 1976.

[Hil-1986] HILDEBRANDT Stefan, TROMBA Anthony. *Mathématiques et formes optimales*. Ed. Belin. Paris. 1986. ISBN : 0-7167-5009-0.

[Hill-1951] HILL E. L. *Hamilton's principle and the conservation theorems of mathematical physics*. Reviews of Modern Physics. 1951. Vol. 23, No. 3, p 253-260.

[Hoo-1995] HOOVER William. *Temperature, least action, and Lagrangian mechanics*. Physics Letters A. 1995, Vol. 204, p 133-135.

[Hot-2001] HOTTA A., TARENTJEV E.M., *Long-time stress relaxation in polyacrylate nematic liquid crystalline elastomers*, Journal of Physics : Condensed Matter 13. 2001.

[Hue-1992] HUET C. *Minimum theorems for viscoelasticity*. Eur. J. Mech., A/Solids. 1992. Vol. 11, No. 5, p 653-684.

[Hyd-2000] HYDON Peter. *Symmetry methods for differential equations*. Cambridge University Press. 2000. ISBN : 0-521-49703-5.

I

[Ibr-1994] IBRAGIMOV N.H. et al. *Lie Group Analysis of Differential Equations. Symmetries, exact solutions, and conservation laws*. Ibragimov. 1994. Vol. 1. ISBN : 0-8493-4488-3.

[Ibr-1995] IBRAGIMOV N.H. et al. *Lie Group Analysis of Differential Equations. Applications in engineering and physical sciences*. Ibragimov. 1995. Vol. 2. ISBN : 0-8493-2864-0.

[Ibr-1996] IBRAGIMOV N.H. et al. *Lie Group Analysis of Differential Equations. New trends in theoretical developments and computational methods*. Ibragimov. 1996. Vol. 3. ISBN : 0-8493-9419-8.

[Imb-1984] IMBERT J.F. *Analyse des structures par éléments finis*. Cepadues editions. 1984. ISBN : 2-85428-125-X.

J

[Jau-1975] JAUCH Josef Maria. *Analytic Thermodynamics*. Foundations of Physics. 1975, Vol. 5, No. 1.

[Jul-2004] JULIEN SAINT AMAND François, *et al.* *Screening : fundamental studies on the extrusion of stickies through slots*. ATIP. 2004, Vol. 58, No. 1.

K

[Kam-2004] KAMARINOS Georges. *Les différents visages du temps en physique*.
http://www.u-grenoble3.fr/langages_scientifiques/articles/temps.html
(Consulté le 20 Octobre 2004).

[Kel-1970] KELLER J.B. *Extremum principles for irreversible processes*. J. Math. Phys. 1970, Vol. 2, No. 9, p 2919-2931.

[Ken-1974] KENNETT B.L.N. *On variational principles and matrix methods in elastodynamics*. Geophys. J. R. astr. 1974, Vol. 37, p 391-405.

[Kie-1974] KIEHN R.M. *An extension of Hamiltonian's principle to include dissipative systems*. J. Math. Phys. 1974, Vol. 15, No. 1.

[Kie-1975] KIEHN R.M. *Conformal invariance and Hamiltonian Jacobi theory for dissipative systems*. J. Math. Phys. 1975, Vol. 16, Issue 5, p 1032-1033

[Kie-2002] KIEHN R.M. Site internet contenant une trentaine de références :
<http://www22.pair.com/csdc/car/carhomep.htm>. Consulté en Février 2002.

[Kob-1986] KOBE D.H. *Lagrangians for dissipative systems*. American Journal of Physics. 1986, Vol. 54, No. 11, p 997-990.

[Kru-2001] KRUPKOVA Olga. *Hamiltonian field theory*. Journal of Geometry and Physics. 2001, Vol. 778, p 1-40.

L

[Lag-1788] LAGRANGE Joseph Louis (de). *Mécanique Analytique 1788*. Editions Jacques Gabay. 1989. ISBN : 2-87647-051-9.

[Lao-2001] LAOT C., *Gas transport properties in polycarbonate*, Physical Review Letters, Thesis, Virginia Polytechnic Institute, 2001. p 126-137.

[Lau-1995] LAUSTER Michael. *Conservation laws in non linear dissipative systems*. Int. J. Non-Linear Mechanics. 1995, Vol. 30, No. 6, p 915-925.

-
- [Lav-1974] LAVENDA B.H. *Principles and representations of non equilibrium thermodynamics*. Physical Review A. 1974, Vol. 9, No. 2, p 929-942.
- [Lem-1988] LEMAÎTRE J, CHABOCHE J.L. *Mécanique des matériaux solides*. Editions Dunod. 1988. ISBN : 2-04-018618-2.
- [Lev-1970] LÉVY-LEBLOND Jean-Marc. *Conservation laws for gauge-variant lagrangians in classical mechanics*. American Journal of Physics. 1970, Vol. 39, p 502-506.
- [Luc-1988] LUCEY C.A., NEWMANN E.T. *On the construction of Hamiltonians*. J. Math. Phys. 1988, Vol. 29, No. 11, p 2430-2433.

M

- [Mac-1982] MACKI Jack, STRAUSS Aaron. *Introduction to optimal control theory*. Undergraduate Texts in Mathematics. Springer-Verlag. New York. 1982.
- [Mag-2003] MAGNET V., GANGHOFFER J.F., RAHOUDJ R., CUNAT C., *On the Lie symmetry groups with application to a non linear viscoelastic behaviour*, proc. of the 5th Euromech Solids mechanics conference ESMC, Thessaloniki, 17-22 August 2003.
- [Mag-2004] MAGNET V., GANGHOFFER J.F., RAHOUDJ R., CUNAT C., *Master curves for viscous media predicted from symmetry analysis*, proc. of International Conference STAMM, 22-28 August 2004.
- [Mau-1990] MAUGIN G.A. *Internal variables and dissipative structures*. J. Non-Equilib. Thermodyn. 1990. Vol. 15, p 173-192.
- [Mes-2002] MESHAKA Yves. *Couplage thermomécanique et approche non entière de l'irréversibilité en viscoélasticité*. Th Sciences. 2002. INP Lorraine.
- [Mey-1999] MEYER A., BUSCH R., SCHÖBER H., *Time-Temperature superposition of structural relaxation in a viscous metallic liquid*, Physical Review Letters 83, 1999.
- [Mij-1987] MIJATOVIĆ Mijat, VESELINOVIC Valentina, TRENEVSKI Kostadin. *Differential geometry of equilibrium thermodynamics*. Physical Review A. 1987. Vol. 35, No. 4, p 1863-1867.
- [Mra-2003] MRABET Kais. *Comportement mécanique en grandes déformations du polyéthylène haute densité : approche thermodynamique de l'état relaxé*. Th Sciences. 2003. INP Lorraine.

[Muh-1991] MUHLHAUS H.B., AIFANTIS E.C. *A variational principle for gradient plasticity*. Int. J. Solids Structures. 1991. Vol. 28, No. 7, p 845-857.

N

[Ngo-1995] NGÔ Christian, NGÔ Hélène. *Physique statistique*. Dunod. 1995. ISBN : 2-10-005442-2.

[Nic-2001] NICHOLSON L.M., WHITLEY K.S., GATES T.S., *Crosslink density and molecular weight effects on the viscoelastic response of a glassy high-performance polyimide*, Polymer Preprints 42, 2001.

O

[Oco-1997] O'CONNELL P.A., MCKENNA G.B., *Large deformation response of polycarbonate : time temperature, time aging time and time strain superposition*, Polymer Engineering and Science 37, 1997.

[Olv-1989] OLVER Peter. *Application of Lie group to differential equations*. Springer Verlag, 1989. ISBN : 0-387-94007-3.

[Oze-2003] OZER T. *Symmetry group classification for one dimensional elastodynamics problems in nonlocal elasticity*. Mechanics Research Communications. 2003, Vol 30, p 539-546.

P

[Pai-1982] PAINE Gregory. *The developpement of Lagrangians for biological models*. Bulletin of Mathematical Biology. 1982, Vol. 44, No. 6., p 749-760.

[Ped-1983] PEDROSA I.A., BASEIA B., *Dissipative systems and Bateman's Hamiltonian*. Hadronic Journal. 1983, Vol. 6, Issue 6., p 1733-1741.

[Pri-1996] PRIGOGINE Ilya. *La fin des certitudes*. Edition Odile Jacob , 1996. ISBN : 2-7381-0986-1

[Pri-1996] PRIGOGINE Ilya, STENGERS Isabelle. *La nouvelle alliance. Métamorphose de la science*. Edition Gallimard , 1996. ISBN : 2-07-032324-2

[Pri-1968] PRIGOGINE Ilya. *Introduction à la thermodynamique des processus irréversibles*. Edition Dunod. 1968.

[Prin-1983] PRINCE Geoff. *Toward a classification of dynamical symmetries in classical mechanics*. Bull. Austral. Math. Soc. 1983, p 53-71

R

[Rah-2000] RAHOUADJ Rachid, GANGHOFFER Jean-François, CUNAT Christian. *Thermodynamics of relaxation processes and evolution of internal variables within a lagrangian formalism*. in Continuum thermodynamics, the art and science of modelling material behaviour, Paul Germain anniversary volume. Edited by G.A. MAUGIN, R. DROUOT, F. SIDOROFF. Kluwer academic publishers. Solid Mechanics and its Applications. Vol 76. 2000.

[Rah1-2002] RAHOUADJ Rachid, GANGHOFFER Jean-François, CUNAT Christian. *A thermodynamic approach with internal variables using Lagrange formalism. Part I : General framework*. Mechanics Research Communications. 2002.

[Rah2-2002] RAHOUADJ Rachid, GANGHOFFER Jean-François, CUNAT Christian. *A thermodynamic approach with internal variables using Lagrange formalism. Part II : Continuous symmetries in the case of the time-temperature equivalence*. Mechanics Research Communications. 2002.

[Rah-2004] RAHOUADJ Rachid, SKALI-LAMI Salaheddine. *Mechanical behaviour of stickies for dynamic and quasistatic solicitations*. Proc. of 5th Co-ordination Meeting. Screen-Clean. 2004.

[Ric-2000] RICCO T. , PEGORETTI A., *Nonlinear dynamic behavior of rubber compounds construction of dynamic moduli generalized master curves*, Polymer Engineering and Science 40, 2000.

[Rie-1997] RIEWE Fred. *Mechanics with fractional derivatives*. Physical Review E. 1997, Vol. 55, No. 3, p 3581-3592.

[Rie-1996] RIEWE Fred. *Nonconservative lagrangian and hamiltonian mechanics*. Physical Review E. 1996, Vol. 53, No. 2, p 1890-1899.

[Rou-2004] ROUILLARD François. *Etude du comportement dynamique HPP de la colle utilisée dans le scotch double face : influence de la fréquence de sollicitation*. Rapport de Projet. 2004. INP Lorraine.

S

[San1-1977] SANTILLI Ruggero Maria. *Variational approach to self adjointness for tensorial field equations*. Annals of physics. 1977, No 103, p 354-408.

-
- [San2-1977] SANTILLI Ruggero Maria. *Direct analytic representations of tensorial field equations*. Annals of physics. 1977, No 103, p 409-468.
- [San3-1977] SANTILLI Ruggero Maria. *Generalized analytic representations of tensorial field equations*. Annals of physics. 1977, No 103, p 227-258.
- [Sch-1990] SCHUCH D. *A new Lagrange-Hamilton formalisme for dissipative systems*. International Journal of Quantum Chemistry , Quantum Chemistry Symposia. 1990, Issue 24, p 767-780.
- [Sen-1980] SENASHOV S.I., *Invariant spatial solutions for equations of ideal plasticity*, Zhurnal Prikladnoi Mekhaniki i Tekhnicheskoi Fiziki 2, 1980.
- [Ser] SERO-GUILLAUME Olivier. *Mathématiques*. Cours E.N.S.E.M. I.N.P. Lorraine
- [Sew-1987] SEWELL M.J. *Maximum and minimum principles*. Cambridge University Press. 1987. ISBN : 0-521-33244-3.
- [Sha-1982] SHADWICK W.F. *The Hamiltonian formulation of regular rth-order lagrangian field theory*. Letters in Mathematical Physics. 1982, Vol. 6, No. 6, p 409-416.
- [Sie-1984] SIENIUTYCZ S. *Variational approach to extended irreversible thermodynamics of heat and mass transfer*. J. Non-Equilib. Thermodyn. 1984, Vol. 9, p 61-70.
- [Sie-1987] SIENIUTYCZ S. *From a least action principle to mass action law and extended affinity*. Chemical Engineering Science. 1987, Vol. 42, No. 11, p 2697-2711.
- [Siev-1996] SIEVERS B. *Non local Lagrange formalism in the thermodynamics of irreversible processes : variational procedures for kinetic equations*. Physica A. 1996, Vol. A, No. 225, p 89-128.
- [Sto-1988] STOLZ Claude. *Sur les équations générales de la dynamique des milieux continus anélastiques*. C.R. Acad Sci. 1988, Vol. 307, Série II, p 1997-2000
- [Str-1978] SRUIK L.C.E. *Physical aging in amorphous polymers and other materials..* Amsterdam. Elsevier. 1978. ISBN : 0444416552

T

- [Tal-1993] TALPAERT Yves. *Leçons et applications de géométrie différentielle et de mécanique analytique*. Cépaduès Editions. 1993. ISBN : 2-85428-325-2

[Thu-1998] THUAN Trinh Xuan. *Le chaos et l'harmonie, la fabrication du réel*. Edition Fayrd , 1998. ISBN : 2-213-03200-9

V

[Van-1999] VAN P, NYIRI B. *Hamilton formalism and variational principle construction*. Annals of Physics. 1999, No 4, p 331-354.

[Vuj-1970] VUJANOVIC B. *A group variational procedure for finding first integrals of dynamical systems*. Int. J. Non-Linear Mechanics. 1970, Vol. 5, p 269-278.

W

[Wat-1984] WATANABE Yoiti. *Canonical Hamiltonian formalism for dissipative systems*. Science Report Osaka University. 1984, Vol. 33, Issue 2, p 1-3.

[Wei-1974] WEINSTOCK R. *Calculus of variations*. Dover publications, New York. 1974. ISBN : 0-486-63069-2.

[Wil-1955] WILLIAMS M.L., LANDEL R.F., FERRY J.D. *The temperature dependance of relaxation mechanisms in amorphous polymers and other glass-forming liquids..* J. Amer. Chem. Soc. 1955, Vol. 77.



AUTORISATION DE SOUTENANCE DE THESE
DU DOCTORAT DE L'INSTITUT NATIONAL
POLYTECHNIQUE DE LORRAINE

o0o

VU LES RAPPORTS ETABLIS PAR :

Monsieur Patrick BOURGIN, Professeur, Ecole Supérieure de Plasturgie, Oyonnax

Monsieur Alain BRILLARD, Professeur, Université de Haute-Alsace, Mulhouse

Le Président de l'Institut National Polytechnique de Lorraine, autorise :

Monsieur MAGNET Vincent

à soutenir devant un jury de l'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE LORRAINE,
une thèse intitulée :

"Formulation thermodynamique de lois de comportement hors-équilibre : groupes de symétries continues issus d'une approche lagrangienne irréversible"

en vue de l'obtention du titre de :

DOCTEUR DE L'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE LORRAINE

Spécialité : « Mécanique et énergétique »

Fait à Vandoeuvre, le 29 novembre 2004

Le Président de l'I.N.P.L.

L. SCHUFFENECKER



NANCY BRABOIS
2, AVENUE DE LA
FORET-DE-HAYE
BOITE POSTALE 3
F - 5 4 5 0 1
VANCEUVRE CEDEX



Titre : *Formulation thermodynamique de lois de comportement hors-équilibre : groupes de symétries continues issus d'une approche lagrangienne irréversible.*

L'objet principal de ce travail est une exploration des extensions possibles du formalisme de Lagrange à la mécanique des milieux continus dissipatifs. Ce premier objectif conduit à la recherche concomitante des symétries variationnelles et locales associées au principe de la moindre action ainsi construit. Le cadre thermodynamique choisi pour l'écriture des lois de comportement est celui de la thermomécanique de la relaxation, qui prend en compte des variables internes de microstructure et les cinétiques qui en fixent les lois d'évolution. On montre que l'auto-adjonction (condition nécessaire et suffisante d'existence d'un lagrangien) du jeu d'équations thermodynamiques qui décrit le comportement peut être assurée par une généralisation de la relation d'Euler aux situations de non équilibre. Cette généralisation est conforme aux fondements d'une approche thermodynamique de la relaxation baptisée DNLR. Les équations cinétiques régissant l'évolution des variables internes ont ensuite été intégrées dans le lagrangien sous forme de contraintes. Le deuxième volet exploré dans ce mémoire concerne l'étude des symétries des équations de comportement. Deux voies complémentaires sont explorées : une méthode de calcul des symétries variationnelles d'une loi de comportement supposée connue a été élaborée. Cette étude met en évidence une symétrie particulière dans le cas d'une approche DNLR simplifiée, qui se traduit par un principe d'équivalence en temps / température. Dans une seconde étape, nous mettons en place une stratégie de modélisation du comportement qui s'appuie sur la construction de courbes maîtresses expérimentales. L'existence de ces dernières est décrite mathématiquement par un groupe de Lie, qui permet a priori de dégager une structure de loi de comportement. Cette démarche a été mise en oeuvre pour un matériau de type colle, sollicité de façon dynamique.

Mots-clés : *Thermodynamique de la relaxation, formalisme lagrangien, irréversibilité, groupes de Lie, symétries, principe d'équivalence temps-température, courbes maîtresses.*

Title : *Thermodynamic formulation of non-equilibrium behaviour laws : symmetry groups obtained from an irreversible Lagrangian formulation.*

Strategies for the elaboration of Lagrangian formulations of the constitutive laws of continuous media subjected to local dissipation are developed. The computation of the resulting variational and local continuous symmetries constitutes the backbone of this work. The theoretical framework chosen is based on a thermodynamics of relaxations, which allows the consideration of microstructural variables evolution, accounting for the kinetics law describing the evolution of the microstructure. It is demonstrated that the self-adjointness condition, which is the necessary and sufficient condition for the existence of a lagrangian associated to a system of partial differential equations, is fulfilled by the chosen constitutive laws, provided the fundamental Euler relation is being generalized for situations outside equilibrium. This postulate is one of the cornerstone of a thermodynamics of relaxation called DNLR (alias Distribution of Nonlinear Relaxations). The kinetics equations governing the evolution of the microstructural variables has been further incorporated into the Lagrangian by means of multipliers. The second aspect explored in this work concerns the analysis of the Lie symmetries of the constitutive behaviour, following two different routes. The first one consists in computing the variational symmetries, associated to given constitutive equations. A particular symmetry is highlighted in the case of a simplified DNLR model, that is related to the time-temperature equivalence principle. Enlarging the point of view, a methodology for setting up the constitutive behaviour of the material itself is proposed. It relies on the construction of experimental master curves that are given a Lie group structure, further leading to a formal structure of the constitutive equations. This method has been applied for a stick submitted to an impact loading under large strain.

Key-words : *Thermodynamics of relaxations, Lagrangian formalism, irreversibility, Lie groups, symmetries, time-temperature equivalence principle, master curves.*