

MÉCANIQUE DES MILIEUX CONTINUS. — *Thermodynamique et lois de comportement thermomécanique homogénéisées.* Note(*) de Gilles Francfort, Quoc Son Nguyen et Pierre Suquet, présentée par Paul Germain.

On étudie le comportement thermomécanique macroscopique d'un matériau hétérogène par une méthode d'homogénéisation en se basant sur la connaissance de son comportement thermomécanique microscopique et on relie les résultats obtenus à la notion d'état d'équilibre accompagnant.

CONTINUUM STATE MECHANICS. — Thermodynamics and the Homogenized Thermomechanical Behaviour.

The macroscopic thermomechanical behaviour of a heterogeneous medium is investigated through a homogenization method. The study is based upon the knowledge of the microscopic thermomechanical behaviour of this medium. A better understanding of the results obtained is achieved through the notion of accompanying equilibrium state.

1. INTRODUCTION. — 1.1. Considérons un échantillon macroscopique de matière composé d'éléments hétérogènes de masse volumique ρ , d'énergie interne spécifique u , d'énergie libre spécifique w , d'entropie spécifique s . Si ε , σ , β , θ désignent respectivement la déformation, la contrainte, l'état interne et la température microscopique, nous admettons la description usuelle [1] :

$$(1) \quad u = u(\varepsilon, \beta, s) \quad \text{avec} \quad \frac{\sigma}{\rho} = \frac{\partial u}{\partial \varepsilon}, \quad \theta = \frac{\partial u}{\partial s}, \quad b = -\frac{\partial u}{\partial \beta},$$

ou de façon équivalente :

$$(2) \quad w = w(\varepsilon, \beta, \theta) \quad \text{avec} \quad \frac{\sigma}{\rho} = \frac{\partial w}{\partial \varepsilon}, \quad s = -\frac{\partial w}{\partial \theta}, \quad b = -\frac{\partial w}{\partial \beta},$$

en laissant de côté l'existence éventuelle d'une partie irréversible de la contrainte. Nous admettrons, en accord avec l'inégalité du 2^e principe de la thermodynamique au niveau microscopique qu'une loi de Fourier généralisée (¹) lie le flux de chaleur microscopique q et sa variable duale $\nabla \theta / \theta$:

$$(3) \quad q = -k \left(\frac{\nabla \theta}{\theta} \right) = -k (\nabla (\log \theta)),$$

où k désigne une application monotone $\mathcal{R}^3 \rightarrow \mathcal{R}^3$.

1.2. La description du comportement global des milieux hétérogènes (homogénéisation) est liée à la notion de volume élémentaire représentatif (v.e.r.); ce volume V est choisi assez petit pour qu'on y distingue les hétérogénéités, et assez grand pour décrire le comportement global du matériau. Par exemple, pour un milieu périodique, V sera la cellule de base du matériau. Chaque échelle a sa variable d'espace : x macroscopique, y microscopique (échelle du v.e.r.).

A chacune des grandeurs thermodynamiques microscopiques ρ , σ , ε , u , s , w , q , $\nabla \theta / \theta$ nous associons, par l'opérateur de moyenne sur V , une grandeur macroscopique :

$$(4) \quad \left\{ \begin{array}{l} \langle \cdot \rangle = \frac{1}{|V|} \int_V \cdot dy, \\ \bar{\rho} = \langle \rho \rangle, \quad \bar{\Sigma} = \langle \sigma \rangle, \quad E = \langle \varepsilon \rangle, \quad \bar{\rho} U = \langle \rho u \rangle, \\ \bar{\rho} S = \langle \rho s \rangle, \quad \bar{\rho} W = \langle \rho w \rangle, \quad Q = \langle q \rangle, \quad \frac{\nabla T}{T} = \left\langle \frac{\nabla \theta}{\theta} \right\rangle. \end{array} \right.$$

Il est clair qu'à tout état microscopique correspond par le processus de moyenne (4) un unique état macroscopique. En revanche, la détermination des lois homogénéisées (liant

les grandeurs macroscopiques Σ , E , U , S) nécessite le passage d'un état macroscopique donné à un état microscopique aussi proche que possible de l'état réel, vérifiant les lois de comportement (1), (2), (3) et les conditions de moyenne (4).

Nous montrons que nous sommes en mesure d'expliciter ce passage Macro-micro (qu'on peut appeler *localisation*), pour des évolutions au voisinage de l'équilibre. Nous donnerons alors l'expression des grandeurs thermodynamiques macroscopiques, et nous établirons la validité de l'expression macroscopique des deux lois de la Thermodynamique, lorsqu'on suppose valides leurs expressions microscopiques. Par contre, lorsque le système considéré est loin de l'équilibre et que les échelles de temps du problème sont comparables aux échelles d'espace, nous ne sommes plus en mesure d'expliciter la relation Macro-micro. Nous proposons alors une définition de la température macroscopique en accord avec toute tentative de mesure, et basée sur la notion d'état d'équilibre accompagnant.

2. ÉVOLUTIONS THERMODYNAMIQUES AU VOISINAGE DE L'ÉQUILIBRE. — 2.1. L'équilibre, thermique et mécanique, du corps hétérogène a un certain nombre de conséquences au niveau du v.e.r. :

(a) Lorsque les hétérogénéités sont petites (V peut donc être choisi petit) les équations d'équilibre global impliquent, même en présence de forces et des sources macroscopiques :

$$(5) \quad \operatorname{div}_y \sigma = 0 \quad \text{et} \quad \operatorname{div}_y q = 0 \quad \text{dans } V.$$

(b) La température microscopique est pratiquement uniforme (mais son gradient ne l'est pas) et égale à la température macroscopique :

$$(6) \quad \theta = T \quad \text{dans } V.$$

Le passage Macro-micro nécessite, en plus de la connaissance des lois de comportement microscopiques (1), (2), (3), des conditions de moyenne (4) et des équations d'équilibre (5), (6), l'adjonction de conditions aux limites, dites de localisation Macro-micro (l.M.m.) représentant au mieux l'état *in situ* du v.e.r. V dans l'échantillon. Ces conditions l.M.m. doivent :

(i) respecter les conditions de macro-homogénéité (dite de Hill) :

$$(7) \quad \Sigma' E' = \langle \sigma' \varepsilon' \rangle, \quad Q' \frac{\nabla T'}{T'} = \left\langle q' \frac{\nabla \theta'}{\theta'} \right\rangle,$$

pour tous les champs σ' , ε' , q' , $\nabla \theta'/\theta'$ vérifiant les seules équations d'équilibre (5) et les conditions l.M.m.;

(ii) assurer l'existence et l'unicité de la solution du problème ainsi posé : loi de comportement + conditions de moyenne + équilibre + conditions l.M.m.

Des exemples de telles conditions l.M.m. nous sont donnés par (*cf.* [2]) :

(a) la théorie de l'homogénéisation des milieux périodiques ou quasi périodiques. On a alors avec des notations classiques :

$$V = Y, \quad \sigma', \varepsilon', q', \frac{\nabla \theta'}{\theta'} \quad \text{périodiques sur } \partial V;$$

(b) la théorie des modules effectifs (Hill-Mandel) en contraintes-flux; on a alors :

$$\sigma' \cdot n = \Sigma' \cdot n \quad \text{sur } \partial V, \quad q' \cdot n = Q' \cdot n \quad \text{sur } \partial V;$$

(c) la théorie des modules effectifs en déplacement-température :

$$\varepsilon' = \varepsilon(u') \quad \text{avec} \quad u' = E' y \quad \text{sur } \partial V, \quad \log \theta' = \frac{\nabla T}{T} y \quad \text{sur } \partial V.$$

De multiples autres théories assurant (7) peuvent être construites. Nous supposons dans la suite que ces conditions l.M.m. sont linéaires et qu'elles sont satisfaites automatiquement par les champs constants.

2.2. Un état macroscopique $(E, \beta, T, \nabla T/T)$ étant donné, l'état microscopique correspondant s'obtient en résolvant les problèmes statiques, thermiques et mécaniques (découplés) suivants :

$$(8) \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{\sigma}{\rho} = \frac{\partial w}{\partial \varepsilon}(\varepsilon, \beta, T), \quad \text{div}_y \sigma = 0 \quad \text{dans } V, \quad \langle \varepsilon \rangle = E \\ q = -k \left(\frac{\nabla \theta}{\theta} \right), \quad \text{div}_y q = 0 \quad \text{dans } V, \quad \left\langle \frac{\nabla \theta}{\theta} \right\rangle = \frac{\nabla T}{T}, \\ + \text{conditions l.M.m.,} \end{array} \right.$$

dont l'existence et l'unicité d'une solution $\sigma(E, \beta, T)$, $\varepsilon(E, \beta, T)$, $q(\nabla T/T)$, $\nabla \theta/\theta(\nabla T/T)$ est assurée par la condition (ii) précédente. On obtient les lois homogénéisées en passant aux moyennes :

$$(9) \quad \Sigma = \Sigma(E, \beta, T) = \langle \sigma(E, \beta, T) \rangle, \quad Q \left(\frac{\nabla T}{T} \right) = \left\langle q \left(\frac{\nabla T}{T} \right) \right\rangle.$$

Les lois (1), (2) restent alors valables sous leur forme macroscopique lorsqu'on définit U, W, S par (4) :

$$\bar{\rho} W(E, \beta, T) = \langle \rho w(\varepsilon(E, \beta, T), \beta, T) \rangle, \text{ etc...}$$

En effet, on a par exemple :

$$\frac{-\partial W}{\partial E} = \langle \rho \frac{\partial w}{\partial \varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial E} \rangle = \langle \sigma \frac{\partial \varepsilon}{\partial E} \rangle = \langle \sigma \rangle + \langle \sigma \frac{\partial \varepsilon^*}{\partial E} \rangle = \langle \sigma \rangle + \langle \sigma \rangle \langle \frac{\partial \varepsilon^*}{\partial E} \rangle = \Sigma,$$

en tenant compte de la décomposition $\varepsilon = E + \varepsilon^*$ avec $\langle \varepsilon^* \rangle = 0$, du fait que les conditions l.M.m., étant valables pour ε et E , le sont aussi pour ε^* et $\partial \varepsilon^*/\partial E$, et de la condition de Hill (7).

2.3. Lorsque l'échantillon est en évolution thermodynamique au voisinage de l'équilibre, le temps caractéristique gouvernant son évolution reste « grand », de sorte que les équations d'équilibre (6) et la condition de Hill (7) restent satisfaites. A chaque instant t on peut associer au système hétérogène des grandeurs thermodynamiques $u_t, s_t, \varepsilon_t, \sigma_t, \dots$; on admet la validité du 1^{er} et du 2^e principes de la thermodynamique pour chaque constituant et à chaque instant t :

$$(10) \quad \rho \dot{u}_t - \sigma_t \dot{\varepsilon}_t + \text{div } q_t = 0, \quad \rho \theta_t \dot{s}_t + \text{div } q_t - q_t \frac{\nabla \theta_t}{\theta_t} \geq 0.$$

On passe aux moyennes (3), en tenant compte de la condition de Hill, de la proximité de l'équilibre thermique qui implique $\theta_t \simeq T_t$ et de l'égalité :

$$(11) \quad \text{div } Q_t = \langle \text{div } q_t \rangle.$$

Il vient :

$$(12) \quad \bar{\rho} \dot{U}_t - \Sigma_t \dot{E}_t + \text{div } Q_t = 0, \quad \rho T_t \dot{S}_t + \text{div } Q_t - Q_t \frac{\nabla T_t}{T_t} \geq 0.$$

Ce qui implique la validité de la forme macroscopique des 1^{er} et 2^e principes de la thermodynamique pour des évolutions thermodynamiques macroscopiques lentes (au voisinage de l'équilibre).

Les quantités $U_t, S_t, E_t, \Sigma_t, \dots$ restent liées par les relations (9) établies à l'équilibre; en particulier la température T est bien définie. *La forme macroscopique du principe de l'état local [1] est donc validée pour de telles évolutions.*

3. ÉVOLUTIONS THERMODYNAMIQUES LOIN DE L'ÉQUILIBRE : NOTION D'ÉTAT D'ÉQUILIBRE ACCOMPAGNANT. — Lorsque le système considéré est loin de l'équilibre, et en particulier si la température θ n'est pas uniforme dans V , les temps caractéristiques des évolutions deviennent alors « petits » (cf. [3]), et les équations d'équilibre (6) (et en particulier (7)) ne sont plus valables.

On peut néanmoins associer à l'état thermodynamique actuel une température T^e par la méthode de l'état accompagnant [4] ⁽²⁾ : à l'instant t , le système est isolé dans son état actuel, *par la pensée*, au double point de vue thermique et mécanique. La déformation macroscopique $E = \langle \varepsilon \rangle$ est maintenue à sa valeur E_t ainsi que l'ensemble des paramètres internes $\beta = \beta_t$, l'énergie cinétique est constante. Le système est alors en *évolution thermoélastique dynamique* vers un état d'équilibre thermodynamique défini par les valeurs $U^e, S^e, T^e, \Sigma^e, E^e, \beta^e$ avec $E^e = E_t, \beta^e = \beta_t, W^e = W(E^e, \beta^e, T^e)$ où W est la fonction déterminée à l'équilibre :

$$\Sigma^e = \frac{\partial W}{\partial E}(E^e, \beta^e, T^e), \quad S^e = - \frac{\partial W}{\partial T}(E^e, \beta^e, T^e).$$

Si on admet la validité du 1^{er} et du 2^e principes macroscopiques lors de cette transition à l'équilibre (nous ne les avons établis au paragraphe 2 que pour des évolutions lentes), on a de plus :

$$U^e = U_t, \quad S^e \geq S_t.$$

On peut adopter T^e comme définition de la température thermodynamique de l'état actuel. Cette définition est physique et compatible avec toute tentative de mesure expérimentale. La température T^e s'obtient par résolution d'une variante du problème (8), lorsqu'on impose $E = E^e = E_t, \beta = \beta^e = \beta_t, U = U^e = U_t$.

Si l'état actuel est loin de l'équilibre, il est clair que Σ_t, S_t, θ_t ne coïncident pas nécessairement avec Σ^e, S^e, T^e ⁽³⁾.

Dans le cas où le système tend vers l'état d'équilibre en un temps très court, on comprend alors le principe de l'état local : à chaque instant, l'état du matériau est pratiquement l'état d'équilibre accompagnant défini ci-dessus :

$$(U, T, S, E, \Sigma, \beta) = (U^e, T^e, S^e, E^e, \Sigma^e, \beta^e).$$

⁽¹⁾ L'équation (3) se réduit à la loi de Fourier linéaire classique pour de petites variations de température autour d'une température de référence T_0 . Elle est cependant plus satisfaisante que cette dernière; en particulier, elle assure la positivité de la température absolue, ce que ne fait pas la loi classique.

⁽²⁾ Notons ici une différence avec la méthode proposée par [4] : nous fixons *tous* les paramètres internes d'irréversibilité, le seul processus dissipatif conduisant à l'équilibre est la diffusion thermique.

⁽³⁾ C'est ainsi qu'on comprend le changement de condition initiale en température, observé en [3].

(*) Remise le 21 mars 1983.

[1] P. GERMAIN, *Cours de mécanique des milieux continus*, Masson, Paris, 1973.

[2] P. SUQUET, *Plasticité et Homogénéisation* (Thèse, Paris, 1982).

[3] G. FRANCFORT, *Thèse Ph. D.*, 1982, et *Comptes rendus*, 295, série I, 1982, p. 367.

[4] J. KESTIN et G. BATAILLE, *Thermodynamics of Solids*, Freudenstadt, 1979.

G. F. : 29, rue Descartes, 75005 Paris.

Q. S. N. : Laboratoire de Mécanique des Solides,
Ecole Polytechnique, 91120 Palaiseau.

P. S. : Laboratoire de Mécanique Théorique,
Université Pierre-et-Marie-Curie, 4, place Jussieu, 75005 Paris.