Introduction
1er Principe
2ième Principe
Finalité

MEC6418 - NOTES DE COURS

Thermodynamique des processus irréversibles

Par: Martin Lévesque
professeur du département de génie mécanique

Introduction

Introduction
▷ Introduction
1er Principe
2ième Principe
Finalité

→ L'écriture d'une loi de comportement n'est pas une tâche facile ni arbitraire.

- On ne peut pas simplement écrire que $\boldsymbol{\sigma} = \mathfrak{F}[\boldsymbol{\varepsilon}]$, où $\mathfrak{F}$ serait un opérateur mathématique quelconque.
- En effet, en plus de représenter le plus adéquatement possible des expériences, il faudrait que la loi de comportement $\mathfrak{F}$ fasse en sorte que, pour toute histoire de chargement donnée, les principes de base de la thermodynamique soient respectés.
- Donc, le but du jeu lorsque l'on écrit une loi de comportement est de donner une forme mathématique à $\mathfrak{F}$ qui:
  1. Représente le plus fidèlement possible les données expérimentales.
  2. Aie un sens physique et fasse intervenir des grandeurs ayant un sens.
  3. Respecte tous les principes de la thermodynamique, peu importent les chargements appliqués.

Introduction

Introduction
▷ Introduction
1er Principe
2ième Principe
Finalité

→ L'approche va consister principalement en:

1. Écrire le premier et le second principe de la thermodynamique de manière à faire apparaître les conditions sur les contraintes et déformations pour que ces deux principes soient rencontrés simultanément.
2. Définir une quantité abstraite que l'on appelle *énergie libre*. Cette notion est fondamentale au développement.
3. Introduire une série d'hypothèses de modélisation qui conduiront aux lois de comportement de la viscoélasticité linéaire.
4. Établir la solution mathématique des équations découlant de ces hypothèses.

→ La présentation va porter principalement sur les aspects conceptuels ou philosophiques. Il est bien important de comprendre toutes les étapes sinon les développements mathématiques à la fin perdent leur sens.

L'équilibre (théorème de la dynamique)

Introduction
1er Principe
▷ Équilibre
Ener. Cinétique
1er Principe
2ième Principe
Finalité

Considérons le corps suivant en mouvement, soumis à des forces de volume $\vec{f}$ dans son volume Ω et des tractions sur sa surface $\delta\Omega$:

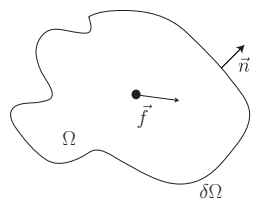

Figure 1: Corps soumis à des forces de volume et de surface

Le théorème de la dynamique stipule que:

$$\int_{\delta\Omega} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n} \mathrm{d}S + \int_{\Omega} \boldsymbol{f} \mathrm{d}V = \int_{\Omega} \rho \boldsymbol{a} \mathrm{d}V \tag{1}$$

où $\boldsymbol{\sigma}$ est le tenseur des contraintes, $\boldsymbol{n}$ le vecteur normal à la surface, $\boldsymbol{f}$ une force de volume, ρ la masse volumique et $\boldsymbol{a}$ l'accélération du corps.

→ On reconnaît ici la loi de Newton: $\vec{F} = M\vec{a}$

L'équilibre (théorème de la dynamique) – suite

Introduction
1er Principe
▷ Équilibre
Ener. Cinétique
1er Principe
2ième Principe
Finalité

$$\int_{\delta\Omega} \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\mathrm{d}S + \int_{\Omega} \boldsymbol{f}\mathrm{d}V = \int_{\Omega} \rho\boldsymbol{a}\mathrm{d}V$$

→ En utilisant le théorème de la divergence, l'équation (1) devient:

$$\int_{\delta\Omega} \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\mathrm{d}S = \int_{\Omega} \underline{\mathrm{div}}\,(\boldsymbol{\sigma})\,\mathrm{d}V \quad \text{où} \quad \underline{\mathrm{div}}\,(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{\partial\sigma_{ij}}{\partial x_j}\boldsymbol{e_i} \tag{2}$$

où $\boldsymbol{e_i}$ est un vecteur de base dans la direction i (pas de somme sur i).

→ On aura donc:

$$\int_{\Omega} (\underline{\mathrm{div}}\,(\boldsymbol{\sigma}) + \boldsymbol{f})\,\mathrm{d}V = \int_{\Omega} \rho\boldsymbol{a}\mathrm{d}V \tag{3}$$

→ Si l'on suppose que l'équation (3) est rencontrée en tous points de l'espace, on suppose que chaque point est en équilibre. Au lieu d'un équilibre en moyenne, on a un équilibre point par point. Cette restriction est appelée *forme locale* et est une restriction plus sévère que l'équation (3):

$$\underline{\mathrm{div}}\,(\boldsymbol{\sigma}) + \boldsymbol{f} = \rho\boldsymbol{a} \quad \forall\,\boldsymbol{x} \tag{4}$$

L'énergie cinétique

Introduction
1er Principe
Équilibre
▷ Ener. Cinétique
1er Principe
2ième Principe
Finalité

→ L'énergie cinétique K d'un corps est donnée par:

$$K = \int_{\Omega} \frac{1}{2}\rho\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{v}\mathrm{d}V \tag{5}$$

où $\boldsymbol{v}$ est la vitesse.

→ La variation temporelle de l'énergie cinétique est donnée par:

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}K}{\mathrm{d}t} &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{\Omega}\frac{1}{2}\rho\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{v}\mathrm{d}V \\ &= \int_{\Omega}\frac{1}{2}\rho\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{v} + \boldsymbol{v}\cdot\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{v}\right)\mathrm{d}V \\ &= \int_{\Omega}\rho\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{v}\mathrm{d}V\end{aligned} \tag{6}$$

→ En utilisant la forme locale de l'équilibre (4) on a:

$$\frac{\mathrm{d}K}{\mathrm{d}t} = \int_{\Omega}(\underline{\mathrm{div}}\,(\boldsymbol{\sigma}) + \boldsymbol{f})\cdot\boldsymbol{v}\mathrm{d}V \tag{7}$$

L'énergie cinétique – suite

Introduction
1er Principe
Équilibre
▷ Ener. Cinétique
1er Principe
2ième Principe
Finalité

→ Avec la relation suivante (**demo**):

$$\underline{\mathrm{div}}\,(\boldsymbol{\sigma})\cdot\boldsymbol{v} = \underline{\mathrm{div}}\,(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{v}) - \boldsymbol{\sigma} : \underline{\underline{\mathrm{grad}}}\,(\boldsymbol{v}) \tag{8}$$

on aura:

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}K}{\mathrm{d}t} &= \int_{\Omega}\left(\underline{\mathrm{div}}\,(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{v}) + \boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{v} - \boldsymbol{\sigma} : \underline{\underline{\mathrm{grad}}}\,(\boldsymbol{v})\right)\mathrm{d}V \\ &= \left[\int_{\delta\Omega}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{v})\cdot\boldsymbol{n}\mathrm{d}S + \int_{\Omega}\boldsymbol{f}\cdot\boldsymbol{v}\mathrm{d}V\right] - \int_{\Omega}\boldsymbol{\sigma} : \underline{\underline{\mathrm{grad}}}\,(\boldsymbol{v})\,\mathrm{d}V \\ &= P_e + P_i\end{aligned} \tag{9}$$

où P_e est la puissance des efforts externes et P_i la puissance des efforts internes.

→ Notons que:

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{n}\mathrm{d}S &= \sigma_{ij}v_jn_i\mathrm{d}S = \sigma_{ji}n_iv_j\mathrm{d}S = \sigma_{ij}n_iv_j \\ &= (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\mathrm{d}S)\cdot\boldsymbol{v}\end{aligned} \tag{10}$$

où le premier terme représente un élément de force, qui multiplié avec une vitesse donne un élément de puissance. L'intégration sur Ω conduit à la puissance totale.

Le Premier Principe de la thermodynamique

Introduction
1er Principe
Équilibre
Ener. Cinétique
▷ 1er Principe
2ième Principe
Finalité

→ Le premier principe de la thermodynamique est un bilan d'énergie entre l'énergie d'un corps et l'énergie qui lui est fournie par l'extérieur.

→ On énonce ce principe de la manière suivante:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(E + K) = P_e + Q \tag{11}$$

où:

- E est l'énergie interne
- K est l'énergie cinétique
- P_e la puissance des efforts extérieurs
- Q le taux de la chaleur apportée au système

→ L'énergie interne E totale peut être donnée par:

$$\int_{\Omega}\rho e\mathrm{d}V \tag{12}$$

où, on l'aura deviné, e est l'énergie interne du matériau par unité de masse.

Introduction
1er Principe
Équilibre
Ener. Cinétique
▷ 1er Principe
2ième Principe
Finalité

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(E+K) = P_e + Q$$

où:

→ E est l'énergie interne
→ K est l'énergie cinétique
→ P_e la puissance des efforts extérieurs
→ Q le taux de chaleur apporté au système

→ On a déjà donné l'expression de K
→ On a déjà donné l'expression de P_e
→ Le taux de la chaleur Q apportée au système est donné par:

$$\begin{aligned} Q &= \int_\Omega r \mathrm{d}V - \int_{\delta\Omega} \boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{n}\mathrm{d}S \\ &= \int_\Omega \left[r - \mathrm{div}\,(\boldsymbol{q})\right]\mathrm{d}V \quad \text{(Théorème de la divergence)} \end{aligned} \tag{13}$$

où r est le taux de production de chaleur par une source interne et q est le flux de chaleur qui s'échappe par la surface du solide (d'où le $(-)$).

Introduction
1er Principe
Équilibre
Ener. Cinétique
▷ 1er Principe
2ième Principe
Finalité

→ En remplaçant l'expression $\frac{\mathrm{d}K}{\mathrm{d}t} = P_e + P_i$ dans l'expression du premier principe, on obtient:

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t} + P_e + P_i = P_e + Q \tag{14}$$

→ Cela nous conduit à:

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_\Omega \rho e \mathrm{d}V &= -P_i + Q \\ &= \int_\Omega \left[\boldsymbol{\sigma} : \underline{\underline{\mathrm{grad}}}\,(\boldsymbol{v}) + r - \mathrm{div}\,(\boldsymbol{q})\right]\mathrm{d}V \end{aligned} \tag{15}$$

→ Sous sa forme locale, cette relation devient:

$$\rho\frac{\mathrm{d}e}{\mathrm{d}t} = \boldsymbol{\sigma} : \underline{\underline{\mathrm{grad}}}\,(\boldsymbol{v}) + r - \mathrm{div}\,(\boldsymbol{q}) \tag{16}$$

Introduction
1er Principe
Équilibre
Ener. Cinétique
▷ 1er Principe
2ième Principe
Finalité

→ Introduisons la notation $\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} = \dot{f}$
→ En utilisant le fait que le tenseur des contraintes est symétrique, on peut facilement montrer que:

$$\boldsymbol{\sigma} : \underline{\underline{\mathrm{grad}}}\,(\boldsymbol{v}) = \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} \tag{17}$$

→ En effet,

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial \dot{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \dot{u}_j}{\partial x_i}\right) \tag{18}$$

alors, si on utilise le fait que σ est symétrique, on peut écrire:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} &= \frac{1}{2}\left(\sigma_{ij}\frac{\partial \dot{u}_i}{\partial x_j} + \sigma_{ji}\frac{\partial \dot{u}_j}{\partial x_i}\right) \\ &= \frac{1}{2}\left(\sigma_{ij}\frac{\partial \dot{u}_i}{\partial x_j} + \sigma_{ij}\frac{\partial \dot{u}_i}{\partial x_j}\right) \\ &= \boldsymbol{\sigma} : \underline{\underline{\mathrm{grad}}}\,(\boldsymbol{v}) \end{aligned} \tag{19}$$

Introduction
1er Principe
Équilibre
Ener. Cinétique
▷ 1er Principe
2ième Principe
Finalité

→ Alors, le premier principe peut s'écrire sous la forme:

$$\rho\dot{e} = \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + r - \mathrm{div}\,(\boldsymbol{q}) \tag{20}$$

→ Cette relation fait intervenir $\boldsymbol{\sigma}$ et ε, on se rapproche donc d'une loi de comportement
→ Par contre, l'énergie interne est une quantité abstraite et l'on ne sait pas trop comment la relier ou la mesurer... On verra plus tard comment elle sera traitée.

Le Second Principe de la thermodynamique

Introduction
1er Principe
2ième Principe
▷ 2ième Principe
Finalité

→ L'entropie S est définie comme étant la quantité Q de chaleur divisée par la température T à laquelle elle est reçue

→ Le second principe de la thermodynamique stipule que pour un processus réel, la production d'entropie, $\dot{S}$ doit être positive

→ On aura donc:

$$\int_\Omega \rho \dot{s} \mathrm{d}V - \int_\Omega \frac{r}{T} \mathrm{d}V + \int_{\delta\Omega} \frac{\boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{n}}{T} \mathrm{d}S \geq 0 \tag{21}$$

où s est l'entropie par unité de masse.

→ En utilisant le théorème de la divergence, on a:

$$\int_\Omega \rho \dot{s} \mathrm{d}V + \int_\Omega \left[\mathrm{div}\left(\frac{\boldsymbol{q}}{T}\right) - \frac{r}{T} \right] \mathrm{d}V \geq 0 \tag{22}$$

→ Sous la forme locale, on aura:

$$\rho \dot{s} + \mathrm{div}\left(\frac{\boldsymbol{q}}{T}\right) - \frac{r}{T} \geq 0 \tag{23}$$

Le Second Principe de la thermodynamique – suite

Introduction
1er Principe
2ième Principe
▷ 2ième Principe
Finalité

→ On peut montrer mathématiquement que (**demo**):

$$\mathrm{div}\left(\frac{\boldsymbol{q}}{T}\right) = \frac{\mathrm{div}\left(\boldsymbol{q}\right)}{T} - \frac{\boldsymbol{q} \cdot \underline{\mathrm{grad}}\left(T\right)}{T^2} \tag{24}$$

→ Avec cette relation, le second principe devient:

$$\rho \dot{s} + \frac{\mathrm{div}\left(\boldsymbol{q}\right)}{T} - \frac{\boldsymbol{q} \cdot \underline{\mathrm{grad}}\left(T\right)}{T^2} - \frac{r}{T} \geq 0 \tag{25}$$

→ En multipliant de chaque côté par T on a:

$$\rho T \dot{s} + \mathrm{div}\left(\boldsymbol{q}\right) - \frac{\boldsymbol{q} \cdot \underline{\mathrm{grad}}\left(T\right)}{T} - r \geq 0 \tag{26}$$

L'inégalité de Clausius-Duhem

Introduction
1er Principe
2ième Principe
Finalité
▷ Clausius-Duhem
Fct. État
Var. État
Méthodologie

→ À partir du premier principe, on peut exprimer r:

$$r = \rho \dot{e} - \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + \mathrm{div}\left(\boldsymbol{q}\right) \tag{27}$$

→ Avec cette relation, le second principe devient:

$$\rho \left(T\dot{s} - \dot{e}\right) + \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \frac{\boldsymbol{q} \cdot \underline{\mathrm{grad}}\left(T\right)}{T} \geq 0 \tag{28}$$

L'inégalité de Clausius-Duhem – suite

Introduction
1er Principe
2ième Principe
Finalité
▷ Clausius-Duhem
Fct. État
Var. État
Méthodologie

→ Introduisons la définition suivante:

$$\Psi \equiv e - Ts \tag{29}$$

où Ψ est appelée *énergie libre*. Avec cette relation, on aura:

$$\dot{e} = \dot{\Psi} + s\dot{T} + T\dot{s} \tag{30}$$

→ Avec cette relation, l'inégalité (28) devient:

$$\boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \rho \left(\dot{\Psi} + s\dot{T}\right) - \frac{\boldsymbol{q} \cdot \underline{\mathrm{grad}}\left(T\right)}{T} \geq 0 \tag{31}$$

→ Cette dernière relation est connue sous *l'inégalité de Clausius-Duhem*

→ Pour un processus adiabatique et où le champ de température est constant, elle devient:

$$\boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \rho \dot{\Psi} \geq 0 \tag{32}$$

L'inégalité de Clausius-Duhem – suite

Introduction
1er Principe
2ième Principe
Finalité
▷ Clausius-Duhem
Fct. État
Var. État
Méthodologie

$$\boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \rho\dot{\Psi} \geq 0$$

→ Dans l'inégalité de Clausius-Duhem décrite précédemment, on voit que l'énergie libre spécifique Ψ apparaît

→ Pour le reste de la présentation, on va supposer que

$$\rho\Psi = \Psi \tag{33}$$

(on aura ainsi une énergie libre).

→ Le but du jeu dans ce qui va suivre est d'exprimer l'énergie libre en fonction de certaines variables pour déduire une **forme mathématique** qui fera le lien entre les contraintes et les déformations appliquées

→ Mais avant tout, il faut introduire une certaine terminologie...

Fonction d'état

Introduction
1er Principe
2ième Principe
Finalité
Clausius-Duhem
▷ Fct. État
Var. État
Méthodologie

FONCTION D'ÉTAT

Fonction **scalaire** qui permet de déterminer entièrement l'état thermodynamique d'un matériau

→ Si la fonction d'état est continue, elle prendra une infinité de valeurs

→ Alors, on pourra interpréter la fonction d'état comme fonction $f(x)$ qui associe à une valeur de x un état particulier du matériau

- C'est comme si on prenait une photo de la position de tous les atomes dans le matériau et qu'on l'on associait cette photo à une valeur particulière de la fonction d'état

Variable d'état

Introduction
1er Principe
2ième Principe
Finalité
Clausius-Duhem
Fct. État
▷ Var. État
Méthodologie

VARIABLE D'ÉTAT

Variable qui est l'argument de la fonction d'état

→ On distingue deux catégories: les variables observables et les variables cachées

- Observable: Qui peut facilement être mesurée expérimentalement. Exemple: déformation, température, etc.
- Cachée: Qui ne peut être directement mesurée par l'expérience mais qui caractérise l'état du système. Exemple: densité de dislocations, endommagement, etc.

Schématisation des variables et des fonctions d'état

Introduction
1er Principe
2ième Principe
Finalité
Clausius-Duhem
Fct. État
▷ Var. État
Méthodologie

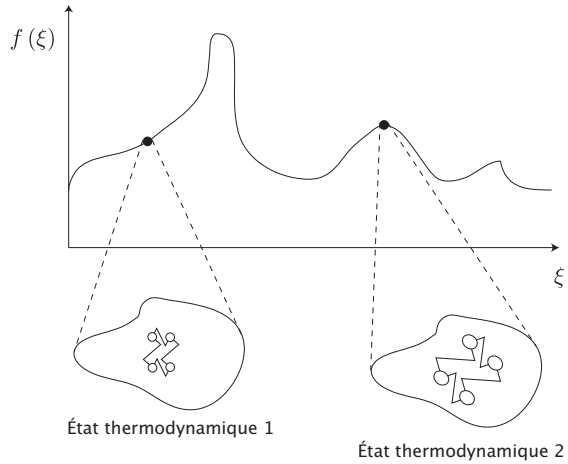

Figure 2: Représentation schématique d'une fonction d'état f en fonction de variables d'état ξ. La figure montre que pour deux valeurs différentes de f correspondent deux états thermodynamiques. Comme la fonction est continue, elle peut prendre une infinité de valeurs et représenter tous les états thermodynamiques. A chaque valeur scalaire de f correspond un état, ou si on veut, une " photo " de l'arrangement atomique dans le matériau.

Méthodologie

Introduction
1er Principe
2ième Principe
Finalité
Clausius-Duhem
Fct. État
Var. État
▷ Méthodologie

→ On va postuler une forme mathématique de Ψ qui fera intervenir les variables internes et observables

→ On va introduire certaines restrictions sur les valeurs numériques des paramètres de Ψ pour que l'inégalité de Clausius-Duhem soit rencontrée.

→ Prenons par exemple comme variables observables les 6 composantes de $\boldsymbol{\varepsilon}$

→ Prenons un certain nombre de variables internes que l'on notera par $\boldsymbol{\xi}$.

- On ne leur donne pas de sens physique pour le moment
- On dira que chacune d'elle est associée à un phénomène interne ou caché que l'on ne sait pas décrire encore

→ On aura alors:

$$\Psi = \Psi(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\xi}) \tag{34}$$

→ Avec ce choix, on aura (**demo**):

$$\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\varepsilon}}{\mathrm{d}t} + \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\xi}} \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\xi}}{\mathrm{d}t} \tag{35}$$

Méthodologie – suite

Introduction
1er Principe
2ième Principe
Finalité
Clausius-Duhem
Fct. État
Var. État
▷ Méthodologie

$$\boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \dot{\Psi} \geq 0$$

$$\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} : \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\varepsilon}}{\mathrm{d}t} + \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\xi}} : \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{\xi}}{\mathrm{d}t}$$

→ Avec ces deux équations, l'inégalité de Clausius-Duhem devient:

$$\left(\boldsymbol{\sigma} - \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}\right) : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\xi}} : \dot{\boldsymbol{\xi}} \geq 0 \tag{36}$$

→ On a vu que cette inégalité est reliée à la production d'entropie et que pour un processus réversible, la production d'entropie est nulle.

→ On va supposer que l'on fait subir à notre matériau une histoire de chargement réversible et qu'en plus, elle est telle que le variables internes demeurent constantes ($\dot{\boldsymbol{\xi}} = \mathbf{0}$).

→ On fait cela car la relation doit être vraie pour toute histoire de chargement, et en particulier celle décrite précédemment.

Méthodologie – suite

Introduction
1er Principe
2ième Principe
Finalité
Clausius-Duhem
Fct. État
Var. État
▷ Méthodologie

→ On aura alors:

$$\left(\boldsymbol{\sigma} - \left.\frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}\right|_{\boldsymbol{\xi}=\mathrm{cte}}\right) : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = 0 \tag{37}$$

où la dérivée est évaluée en considérant les variables internes comme constantes.

→ Pour que cette relation soit vraie, peu importe l'histoire de chargement, on doit avoir:

$$\boldsymbol{\sigma} = \left.\frac{\partial \Psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}\right|_{\boldsymbol{\xi}=\mathrm{cte}} \tag{38}$$

→ Ce dernier résultat est la loi de comportement recherchée

→ On voit que l'on doit donner une forme à Ψ et en plus, on doit être en mesure de connaître $\boldsymbol{\xi}$ pour un état donné (celui auquel on veut calculer les contraintes).