Chapitre 1

La théorie eulérienne des réseaux newtoniens déformables

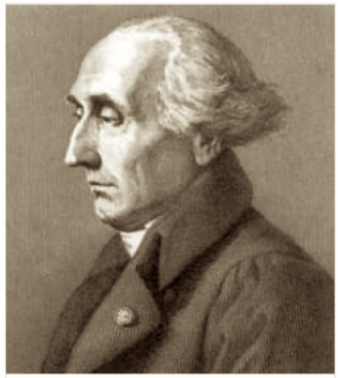
Pour décrire l'évolution spatio-temporelle de la déformation d'un réseau solide, il faut en premier lieu qu'on définisse un système de référence pour faire les mesures d'espace et de temps dans le laboratoire. Pour cela, on a le choix entre plusieurs systèmes de coordonnées possibles, et on choisira ici *le système des coordonnées d'Euler* pour plusieurs raisons qui seront expliquées en détail. Suite à ce choix, il devient possible de décrire comment la déformation d'un réseau peut être caractérisée par *des distorsions* et *des contorsions*. Mais pour quantifier ces distorsions et ces contorsions, il sera nécessaire d'utiliser des objets mathématiques appelés *des scalaires, des vecteurs* et *des tenseurs.* On tentera donc d'y expliquer simplement ces objets mathématiques, et pourquoi on fait appel systématiquement à une *représentation vectorielle des tenseurs*, qui présente des avantages indéniables sur la représentation purement tensorielle, ne serait-ce que par la possibilité d'utiliser le formalisme puissant d'un outil mathématique appelé *l'analyse vectorielle*. Ce choix crucial permet d'obtenir assez facilement des équations qui assurent la solidité du réseau, dites *équations de géométrocompatibilité*, et des équations qui permettent de décrire la cinétique de la déformation, dites *équations de géométrocinétique.*

Les concepts de base de la physique, à savoir *la dynamique newtonienne* et *la thermocinétique eulérienne,* peuvent ensuite être introduits dans ce contexte topologique. Avec tous ces ingrédients, il devient alors possible de décrire nombre de comportements particuliers des réseaux solides déformables, comme par exemple *l'élasticité, l'anélasticité,* et *l'auto-diffusion*.

Les systèmes de coordonnées pour décrire la déformation d'un milieu

Si un observateur, que nous appellerons par la suite *Grand Observateur* ***GO***, désire décrire dans son laboratoire l'évolution d'un certain *milieu continu* qui se déplace dans l'espace par translation et rotation, et qui, de plus, peut se déformer au cours du temps (figure 1.1), il faut en premier lieu qu'il définisse le comportement cinétique du milieu. En prenant pour *axiome de base* que l'évolution du milieu dans l'espace et le temps satisfait *le principe d'additivité des vitesses*, à savoir que la vitesse d'un objet se déplaçant à vitesse v_1 par rapport à un autre objet se déplaçant à vitesse v_2 dans le laboratoire aura une vitesse v_1+v_2 dans le laboratoire, on aura alors à faire à une cinétique satisfaisant *la transformation de Galilée,* et appelée *cinétique galiléenne.* En ce cas, l'observateur ***GO*** peut décrire cette évolution spatio-temporelle sur la base d'un référentiel absolu placé dans son laboratoire. Ce référentiel est composé d'un *repère euclidien orthonormé* $\boldsymbol{O}x_1x_2x_3$, c'est-à-dire de trois règles de longueur unité, orientées perpendiculairement entre elles et représentées par trois flèches qu'on appelle *les vecteurs de base* $(\vec{e}_1,\vec{e}_2,\vec{e}_3)$ du repère, et d'une horloge universelle assurant que le temps t est mesuré de manière identique en tout lieu du laboratoire (figures 1.1 et 1.2).

Pour décrire l'évolution spatio-temporelle d'un milieu continu déformable, l'observateur a


Joseph Louis Lagrange
(1736-1813)

alors plusieurs possibilités parmi lesquelles le système des *coordonnées de Lagrange,* utilisé pour décrire la déformation des solides, et le système des *coordonnées d'Euler,* utilisé en général pour décrire l'hydrodynamique des fluides.

Pour décrire simplement et complètement l'évolution spatio-temporelle d'un milieu continu solide, l'observateur ***GO*** peut se servir du *système de coordonnées de Lagrange*. En premier lieu, il procède à un marquage du milieu matériel solide à l'instant initial $t = 0$ à l'aide d'un quadrillage de points $\boldsymbol{P}_0$. Ensuite, il peut définir un repère $\boldsymbol{O}x_1x_2x_3$ immobile dans le référentiel de son laboratoire. En munissant ce repère fixe $\boldsymbol{O}x_1x_2x_3$ de règles de longueur unité $(\vec{e}_1,\vec{e}_2,\vec{e}_3)$, et en l'orientant judicieusement par rapport à la position initiale du milieu à l'instant $t = 0$, il peut mesurer *la position* de tous les points $\boldsymbol{P}_0$ du milieu à l'instant initial $t = 0$ à l'aide de flèches, les vecteurs[1] $\vec{r}$.

A un instant $t > 0$, un point $\boldsymbol{P}_0$ du milieu se sera déplacé en $\boldsymbol{P}$, et l'observateur peut alors relier le point $\boldsymbol{P}_0$ au point $\boldsymbol{P}$ à l'aide d'une flèche, le vecteur $\vec{u}$ qui est appelé le *vecteur de déplacement* du point $\boldsymbol{P}_0$. Comme ce vecteur dépend de la position initiale $\vec{r}$ du point $\boldsymbol{P}_0$ et du temps t, l'ensemble des vecteurs $\vec{u}(\vec{r},t)$ repérant tous les points du milieu est appelé le *champ de déplacement* du milieu en coordonnées de Lagrange.

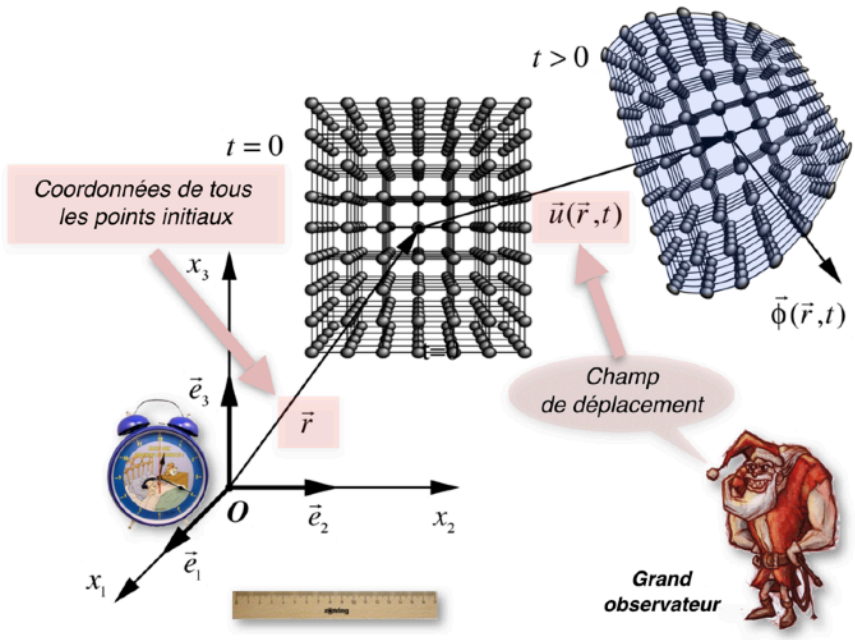
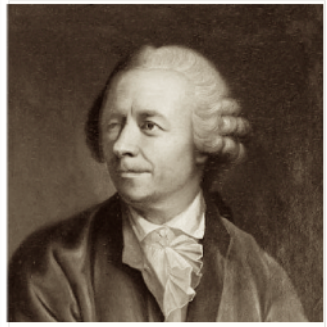


Figure 1.1 - *Les coordonnées de Lagrange*

---

[1] ***Vecteur:*** un vecteur est un objet mathématique correspondant à *une flèche orientée dans l'espace*. Un vecteur représente en fait une grandeur physique décrite par *trois nombres* qui correspondent respectivement aux longueurs des trois projections de la flèche sur les axes $\boldsymbol{O}x_1x_2x_3$ du système de coordonnées. On parle de *champ vectoriel* lorsqu'une grandeur physique vectorielle prend différentes valeurs en tous les points de l'espace et au cours du temps.



Leonhard Euler
(1707-1783)

Le système des coordonnées de Lagrange est donc basé sur la description de l'évolution dans l'espace et le temps *des vecteurs du champ de déplacement* $\vec{u}(\vec{r},t)$ défini précédemment, connaissant les coordonnées $\vec{r}$ de tous les points du solide initial dans le repère fixe $\boldsymbol{O}x_1x_2x_3$ du laboratoire de l'observateur, comme illustré à la figure 1.1.

En utilisant précédemment l'expression de *milieu continu*, on a fait appel à un concept intuitif, à savoir qu'un milieu ne présente, à *l'échelle macroscopique* où il est observé, ni structure discontinue à l'état statique, ni apparition de discontinuités, telles que des déchirures, des ruptures locales ou des formations de cavités au cours de son évolution spatio-temporelle.

De l'observation macroscopique du comportement du milieu, et notamment de la *continuité du champ de déplacement* $\vec{u}$, il est possible d'attribuer des qualificatifs au milieu observé. Si le milieu présente un champ de déplacement $\vec{u}$ parfaitement continu au cours de son évolution spatio-temporelle, il est qualifié de *milieu solide*. Il a alors la propriété macroscopique de posséder une forme qui lui est propre et qu'il est difficile de modifier.

Si, par contre, le milieu présente un champ de déplacement $\vec{u}$ discontinu, formant au cours du temps un enchevêtrement inextricable, il est qualifié de *milieu fluide*. Celui-ci présente la propriété macroscopique de s'écouler et doit par conséquent être maintenu dans un récipient dont il épouse la forme. En ce cas, le champ de déplacement $\vec{u}$ des coordonnées de Lagrange perd toute signification physique, et seule la vitesse vectorielle $\vec{\phi}(\vec{r},t)$ du fluide ou du solide situé à l'instant t à la coordonnée d'espace $\vec{r}$ du référentiel absolu conserve un sens phy-

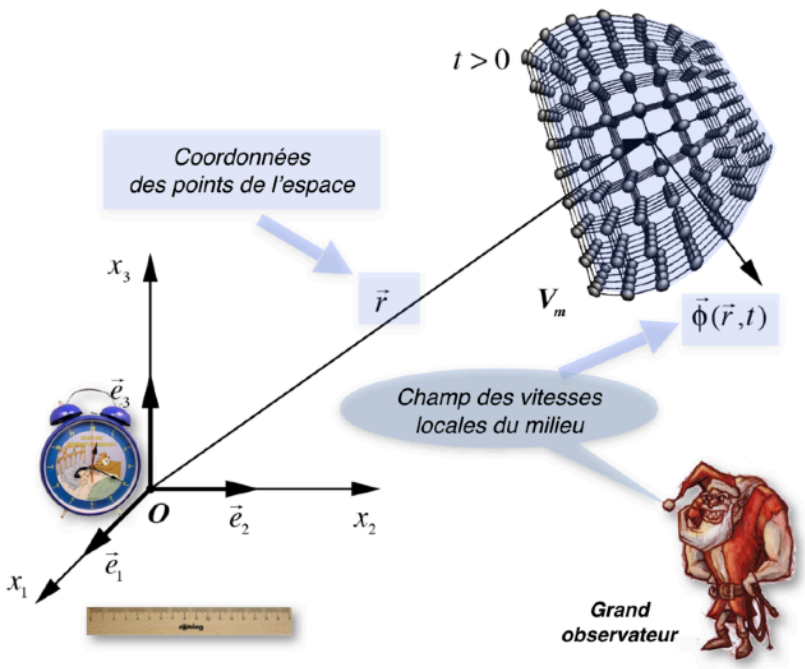


Figure 1.2 *- Les coordonnées d'Euler*

sique. Cette définition des mouvements du milieu par l'observateur ***GO*** s'appelle *le système des coordonnées d'Euler*.

Le système des coordonnées d'Euler est donc basé sur la description de l'évolution dans l'espace et le temps *des vecteurs du champ de vitesse* $\vec{\phi}(\vec{r},t)$ des points du milieu fluide ou solide situés aux coordonnées d'espace $\vec{r}$ et au temps t dans le repère absolu $\boldsymbol{O}x_1x_2x_3$ du laboratoire de l'observateur ***GO*** (figure 1.2).

Qu'est-ce qu'un réseau solide?

Le concept de milieu continu défini ci-dessus ne s'applique que lorsque ce milieu est observé à *une échelle macroscopique*. En effet, un agrandissement du même milieu à *une échelle suffisamment microscopique* fera apparaître une collection discontinue d'objets, auxquels on attribuera dans la suite le nom générique de *particules* (par exemple des corpuscules, des atomes, des molécules, etc.). On en conclue logiquement que les propriétés phénoménologiques globales observées à l'échelle macroscopique où le milieu paraît continu sont en fait des effets statistiques résultant du grand nombre de particules interagissant entre elles à l'échelle microscopique.

L'agrandissement du milieu permet aussi de définir certaines caractéristiques microscopiques importantes du milieu, telles que sa *structure*, c'est-à-dire la façon dont sont assemblées entre elles les particules qui le composent, et sa *composition chimique*, c'est-à-dire la nature des particules qui le composent.

Un milieu continu sera dit *solide* lorsque, à l'échelle microscopique, il correspond à une collection de particules telle que *l'identité des plus proches voisines d'une particule donnée ne change pas au cours du temps*. Autrement dit, chaque particule est reliée à ses plus proches voisines par des liaisons élastiques qui l'empêchent de se mouvoir à grande distance de celles-ci. Par conséquent, seuls des mouvements relatifs à courte distance de ses plus proches voisines lui sont autorisés via l'élasticité des liaisons. Sous l'effet de ces liaisons, on dit que les particules forment alors un *réseau solide.*

Il est possible de définir différentes classes de réseaux solides, suivant l'arrangement des particules les unes par rapport aux autres. Si l'arrangement des particules présente un ordre bien établi, qui se répète à grande distance par translation d'une cellule élémentaire, on parle d'un *réseau de structure cristalline*. Par exemple, les réseaux tridimensionnels dessinés dans les figures 1.1 et 1.2 sont obtenus par la translation d'une cellule unité cubique, et ils présentent un ordre parfait aussi bien à longue distance qu'à courte distance. Il en est de même du réseau bi-dimensionnel reporté à la figure 1.3a, qui est obtenu par translation dans l'espace d'une cellule de forme hexagonale.

Certains réseaux solides peuvent présenter des arrangements de particules n'ayant pas d'ordre à grande distance, mais seulement un certain ordre à courte distance. On parle dans ce cas d'un *réseau de structure amorphe*. L'exemple bi-dimensionnel reporté à la figure 1.3(b) représente un réseau amorphe de particules, obtenu par pavage de la surface avec des pentagones, des hexagones et des heptagones irréguliers, dont les côtés ont une longueur fixe. L'ordre à courte distance du réseau amorphe transparaît dans le fait que chacune des particules a exactement trois plus proches voisines.

Il peut aussi exister des réseaux solides dont l'arrangement des particules ne présente pas

d'ordre par translation à longue distance, mais un certain ordre par rotation. On parle en ce cas d'un *réseau de structure quasi-cristalline*, dont l'exemple de la figure 1.3(c) montre clairement l'absence d'ordre par translation à grande distance. Ce réseau est obtenu par un pavage bidimensionnel à l'aide de deux types de losanges d'angles au sommet différents (on parle en ce cas précis d'un *pavage de Penrose*). A première vue, ce réseau semble amorphe. Mais l'analyse plus détaillée de la figure 1.3(d) montre que les particules s'alignent sur des droites parallèles entre elles. Les distances entre particules alignées sur une droite, ainsi que les distances entre les droites parallèles, ne sont pas régulières. Il existe en fait cinq directions privilégiées pour l'orientation de ces alignements de particules. Cette structure quasi-cristalline bidimensionnelle présente donc une forme de symétrie par rotation d'ordre cinq, qui est interdite dans le cas d'une structure cristalline obtenue par translation d'un motif de base.

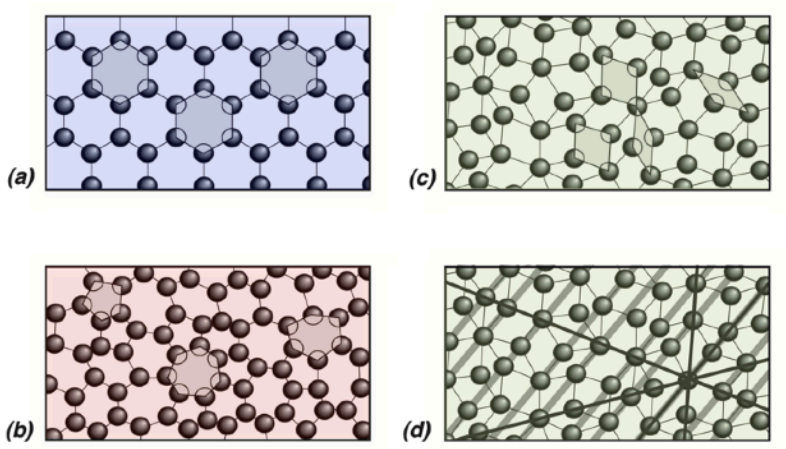


Figure 1.3 - *Réseaux bidimensionnels cristallin* ***(a)****, amorphe* ***(b)*** *et quasi-cristallin* ***(c)*** *et* ***(d)***

Les exemples donnés à la figure 1.3 sont des représentations bidimensionnelles. Il faut donc encore généraliser ces notions à l'espace tridimensionnel. A trois dimensions, les réseaux cristallins sont constitués par la translation d'une cellule élémentaire tridimensionnelle qui est appelée la *maille du réseau* (figure 1.4). Les réseaux cristallins peuvent être classés suivant les opérations de symétrie de rotation, de réflexion et d'inversion par rapport à un point qu'il est possible d'appliquer à la maille élémentaire du réseau. Ces opérations de symétrie conduisent à l'existence de quatorze réseaux différents, appelés *réseaux de Bravais*, qui sont représentés dans la figure 1.4. Ces quatorze réseaux de Bravais peuvent encore être décomposés en sept *systèmes cristallins* (triclinique, monoclinique, orthorhombique, tétragonal, rhomboédrique, hexagonal et cubique) en considérant la façon dont l'espace est pavé par la maille élémentaire. Pour certains de ces sept systèmes cristallins, il peut exister différents types de réseaux (*P, C, I* ou *F*), qui correspondent aux différents motifs de remplissage de la maille élémentaire par les particules.

Il est intéressant de noter que le motif de remplissage d'une maille par les particules peut conduire à différentes valeurs du nombre de sites substitutionnels propres à chaque maille et

pouvant contenir une particule liée. Par exemple, dans le cas des structures cubiques représentées à la figure 1.4, le nombre de sites propre à une maille est de 1 pour le système cubique simple, de 2 pour le système cubique centré et de 4 pour le système cubique à faces centrées. Dans le cas de milieux solides non ordonnés, comme les milieux amorphes, les milieux quasi-cristallins ou les milieux polycristallins à grains très fins, la notion de maille de réseau n'a plus de signification. Par contre, le concept de site de réseau conserve une signification physique précise, même s'il n'existe pas une maille élémentaire unique.

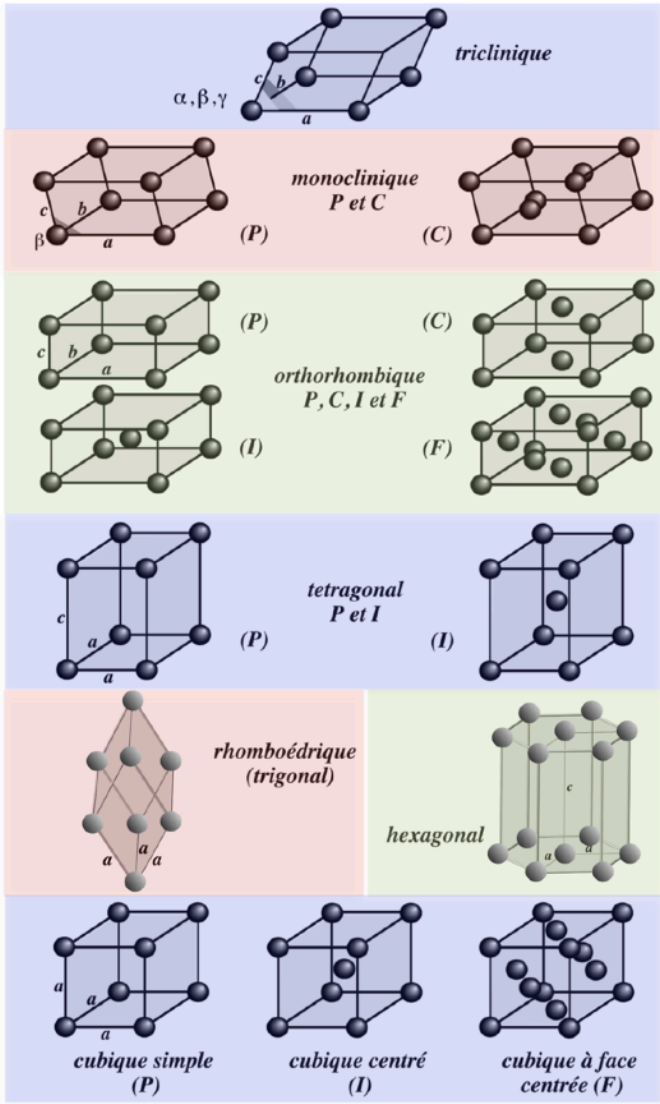


Figure 1.4 - *Les sept systèmes cristallins et les quatorze réseaux de Bravais*

Dans le cas d'un réseau solide ordonné, il peut apparaître des *défauts de structure* dans l'assemblage régulier des particules en réseau. Ces *défauts de structure* ont des origines diverses, telles que *des irrégularités dans l'espèce chimique* des objets composant le réseau, ou des *singularités topologiques*, c'est -à-dire des irrégularités dans la structure topologique du

réseau, comme des dislocations ou des désinclinaisons dont on reparlera plus tard, et ils peuvent être classés en défauts *ponctuels, linéaires ou plans* suivant leur topologie dans le réseau.

C'est aussi par des observations de la *dynamique* à l'échelle microscopique, au cours de l'évolution spatio-temporelle macroscopique du réseau, qu'il sera possible de comprendre les raisons objectives de certains comportements macroscopiques. Par exemple, on verra qu'il existe des liens étroits entre les *propriétés macroscopiques de déformation* des réseaux ordonnés et les *distorsions de la maille du réseau* induites par la présence de singularités topologiques mobiles au sein du réseau, comme des dislocations ou des désinclinaisons.

En conclusion, une description complète de l'évolution spatio-temporelle d'un réseau pouvant être considéré comme continu à l'échelle macroscopique ne peut absolument pas se passer de la description des phénomènes intervenant à l'échelle microscopique. La recherche d'une théorie décrivant l'évolution spatio-temporelle macroscopique d'un réseau continu déformable doit donc se baser sur la définition de champs macroscopiques moyens (de nature scalaire, vectorielle et tensorielle) déduits à partir d'une description statistique de la dynamique à l'échelle microscopique d'une multitude d'objets interagissant entre eux.

Pour décrire un réseau solide, il est donc parfaitement possible d'utiliser le système des coordonnées de Lagrange ou le système des coordonnées d'Euler. Cependant, *l'utilisation des coordonnées de Lagrange* pour décrire les solides déformables présente un certain nombre de difficultés qui leur sont inhérentes. D'un point de vue mathématique, les objets mathématiques (les tenseurs) décrivant les déformations d'un solide continu en coordonnées de Lagrange sont toujours très compliqués (d'ordre supérieur à un en les dérivées spatiales des composantes du champ de déplacement), ce qui conduit à un formalisme mathématique très difficile à gérer lorsqu'un solide présente de fortes distorsions (déformations et rotations). A ces difficultés d'ordre mathématique s'ajoutent encore des difficultés d'ordre physique lorsqu'il s'agit d'introduire certaines propriétés connues des solides. En effet, le système des coordonnées de Lagrange devient pratiquement inutilisable, par exemple lorsqu'il faut décrire l'évolution temporelle de la structure microscopique d'un réseau solide (transitions de phase) et de ses défauts de structure (défauts ponctuels, dislocations, désinclinaisons, joints, etc.), ou s'il est nécessaire d'introduire certaines propriétés physiques du milieu (thermiques, électriques, magnétiques, chimiques, etc.) se traduisant par l'existence dans l'espace réel de champs scalaires, vectoriels ou tensoriels. Vu la complexité des calculs obtenus dans le cas du système des coordonnées de Lagrange, qui est pourtant généralement utilisé pour décrire les solides, il était souhaitable d'essayer de développer la description des solides en utilisant le système des coordonnées d'Euler, qui est généralement utilisé pour décrire les fluides. Cette approche des solides déformables par les coordonnées d'Euler, qui est finalement nettement plus simple et beaucoup plus rigoureuse que celle obtenue avec les coordonnées de Lagrange, a été mise au point et publiée en 2013 dans le livre *«Théorie eulérienne des milieux déformables»*[2].

---

[2] *G. Gremaud, "Théorie eulérienne des milieux déformables – charges de dislocation et désinclinaison dans les solides", Presses polytechniques et universitaires romandes (PPUR), Lausanne (Switzerland) 2013, 751 pages, ISBN 978-2-88074-964-4*
G. Gremaud, "Eulerian theory of newtonian deformable lattices – dislocation and disclination charges in solids", Amazon, Charleston (USA) 2016, 312 pages, ISBN 978-2-8399-1943-2

Définition de grandeurs locales en coordonnées d'Euler

Dans le cas d'une collection de particules dans l'espace à l'état liquide ou solide, chaque particule i possède une vitesse propre représentée par un vecteur $\vec{v}_i$ (figure 1.5),. Pour déterminer une vitesse locale moyenne des particules, il faut se fixer un petit élément de volume $\boldsymbol{V}_f$ centré sur la coordonnée d'espace $\vec{r}$, puis mesurer les vitesses $\vec{v}_i$ de toutes les particules contenues dans le volume fixé $\boldsymbol{V}_f$.

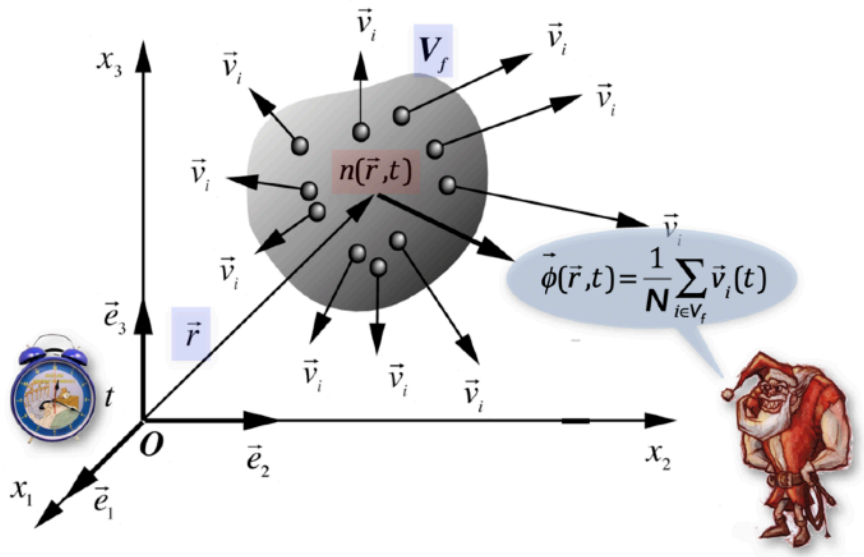


Figure 1.5 - *Vitesse et densité locales moyennes d'un milieu*

Si le nombre instantané de particules dans ce volume $\boldsymbol{V}_f$ est égal à $\boldsymbol{N}$, et que $\boldsymbol{N}$ est suffisamment grand, la vitesse moyenne $\vec{\phi}$ à l'endroit $\vec{r}$ et à l'instant t est définie par la moyenne des vitesses $\vec{v}_i$ prise sur les toutes les particules contenues dans $\boldsymbol{V}_f$.

Si une vitesse moyenne $\vec{\phi}$ différente de zéro est mesurée, cela signifie aussi que, pour chaque particule i , il est possible de trouver une fluctuation $\Delta\vec{v}_i$ à la vitesse moyenne $\vec{\phi}$ par la relation $\Delta\vec{v}_i = \vec{v}_i - \vec{\phi}$.

Dans le cas d'un réseau solide, l'existence d'une vitesse moyenne $\vec{\phi}(\vec{r},t)$ différente de zéro implique que le réseau solide de particules est soumis à un mouvement collectif. La vitesse $\vec{\phi}(\vec{r},t)$ représente donc la vitesse locale moyenne de déplacement des particules liées aux sites du réseau, donc *la vitesse moyenne des sites du réseau* (figure 1.2), alors que les $\Delta\vec{v}_i$ sont des fluctuations de vitesse des particules liées au réseau autour de chacun de ces sites. Par exemple, dans un solide réelle, de telles fluctuations sont dues *aux mouvements désordonnés de l'agitation thermique des particules*, qui sont en relation directe avec *la température du milieu.*

Hormis la vitesse locale moyenne $\vec{\phi}(\vec{r},t)$ d'un réseau solide, il est une autre grandeur qui sera appelée à jouer un rôle fondamental en coordonnées d'Euler: c'est *la densité volumique de sites substitutionnels élémentaires du réseau*, qui sera écrite avec le symbole n , et qui représente le nombre de sites de réseau contenu dans l'unité de volume du réseau. Dans le cas de la figure 1.5, ce nombre n représente alors le nombre de particules contenue dans le volume

V_f quand on choisit un volume V_f égal à l'unité Ce choix implique alors de définir toutes les grandeurs physiques caractérisant le réseau solide comme des *valeurs moyennes prises sur chaque site du réseau*. Il est clair aussi que, dans le cas de réseaux non ordonnés, la grandeur n peut aussi être reliée à la *densité volumique de sites élémentaires du réseau non ordonné.*

La densité volumique $n(\vec{r},t)$ de sites substitutionnels du réseau solide présente un lien direct avec la notion d'expansion volumique du milieu, puisque $n \to 0$ pour les expansions intenses et $n \to \infty$ pour les contractions intenses. Cette notion d'expansion du volume du réseau peut être encore mieux exprimée en introduisant une grandeur v définie comme l'inverse de n, c'est-à-dire $v = 1/n$. En effet, cette grandeur v a pour dimension *un volume*. Elle représente le volume moyen occupé par un site du réseau solide. Ce volume v traduit bien la notion d'expansion volumique du milieu, puisque $v \to \infty$ pour les expansions intenses et $v \to 0$ pour les contractions intenses.

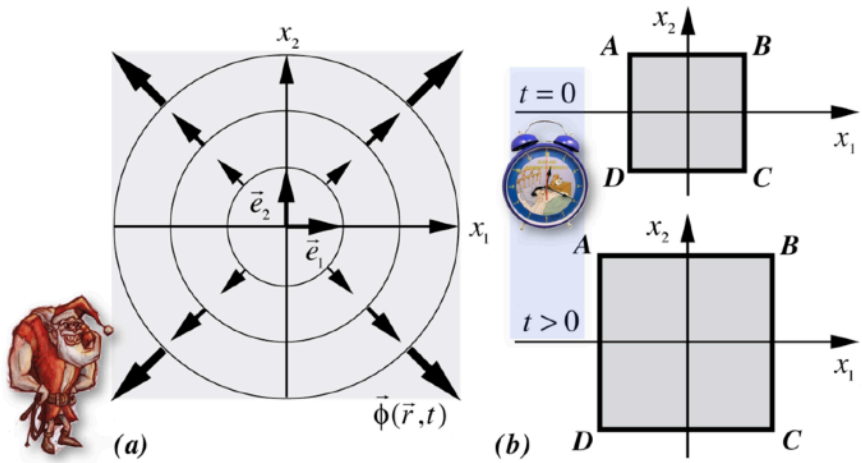


Figure 1.6 *- Expansion volumique du milieu*

Mais il est encore plus intéressant d'introduire une valeur sans dimension en utilisant *le logarithme naturel* de v grâce à la relation $\tau = -\ln(n/n_0) = \ln(v/v_0)$. Il apparaît alors *un scalaire*[3] $\tau(\vec{r},t)$ sans dimension qui sera appelé *scalaire d'expansion volumique*, dépendant des coordonnées d'espace $\vec{r}$ et de temps t au sein du réseau, et mesurant cette fois de manière parfaite la notion d'expansion volumique du réseau, puisque $\tau \to \infty$ pour les expansions intenses (lorsque $v \to \infty$), $\tau \to -\infty$ pour les contractions intenses (lorsque $v \to 0$) et $\tau \to 0$ lorsque $v \to v_0$. De par la construction du scalaire τ, les constantes v_0 et n_0 introduites ici peuvent être ajustées de sorte que le scalaire τ soit nul lorsque le réseau se trouve *dans l'état d'expansion de repos*. La figure 1.6 illustre un exemple de champs de vitesse qui conduit à une *expansion volumique uniforme* du milieu qui passe d'une certaine valeur de τ à l'instant $t = 0$ à une valeur de τ supérieure à l'instant $t > 0$, sans que l'expansion volumique τ dépende de l'endroit où on la mesure.

---

[3] ***Scalaire:*** un scalaire est un objet mathématique correspondant à une grandeur physique décrite par *un seul nombre.* On parle de *champ scalaire* lorsqu'une grandeur physique scalaire prend différentes valeurs en tous les points de l'espace et au cours du temps.

Les distorsions d'un réseau solide

En présence d'un champ de vitesse $\vec{\phi}(\vec{r},t)$ non nul dans l'espace, un réseau peut présenter des mouvements qui ne conduisent à aucune déformation, tels que la *translation globale* du milieu (figure 1.7a) ou la *rotation globale* du milieu (figure 1.7b).

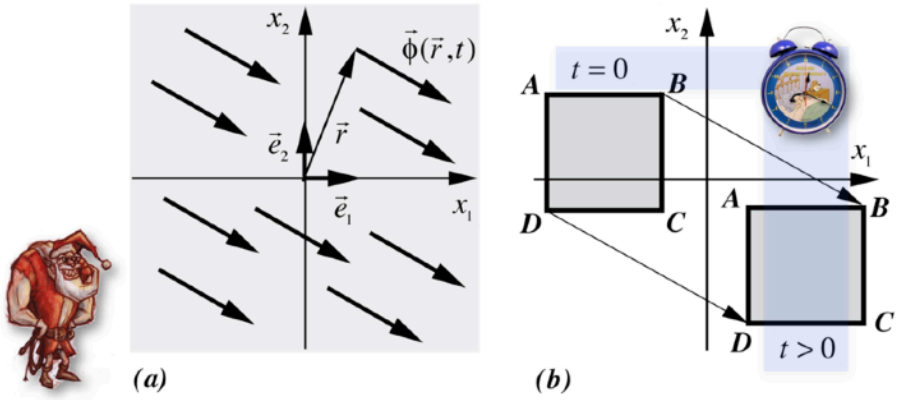


Figure 1.7a - *Translation globale du milieu*

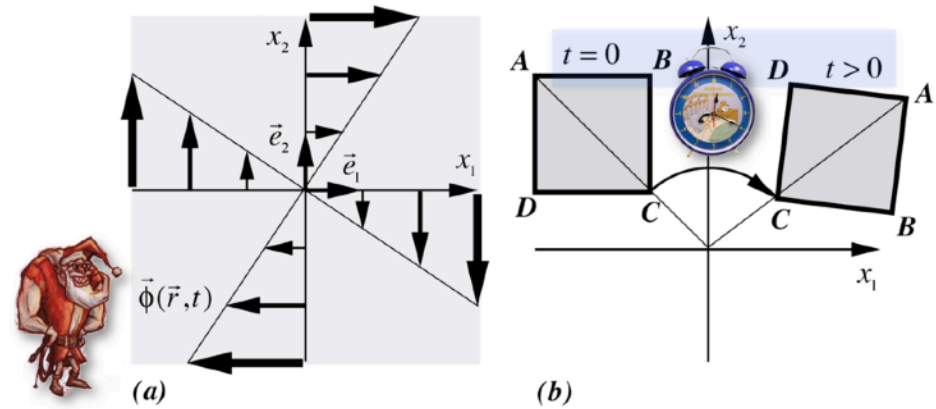


Figure 1.7b - *Rotation globale du milieu*

Mais il peut aussi exister des champs de vitesse $\vec{\phi}(\vec{r},t)$ non nul dans l'espace qui conduisent à de *réelles déformations* du milieu, comme par exemple l'*expansion volumique* du milieu décrite précédemment (figure 1.6), le *cisaillement pur à expansion volumique nulle* du milieu (figure 1.8) ou l'*allongement à expansion volumique nulle* du milieu (figure 1.9). Il peut aussi apparaître des champs de vitesse beaucoup plus compliqués conduisant par exemple à des *rotations locales avec cisaillement non uniforme* du milieu (figure 1.10a) ou à des *expansions non uniformes* du milieu qui conduisent à une expansion qui dépend non seulement du temps, mais aussi des coordonnées d'espace (figure 1.10b).

En présence d'un champ de vitesse $\vec{\phi}(\vec{r},t)$ non homogène dans l'espace, un réseau peut donc présenter, en plus d'une *translation globale* et d'une *rotation globale*, des mouvements

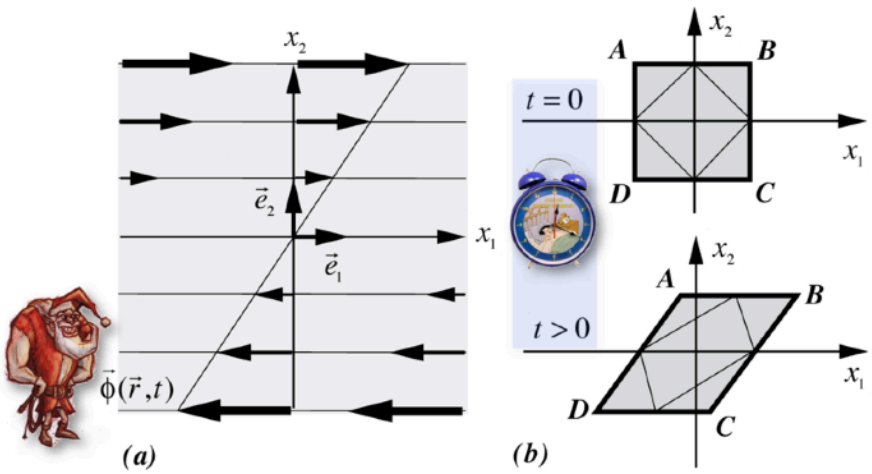


Figure 1.8 - *Cisaillement pur du milieu*

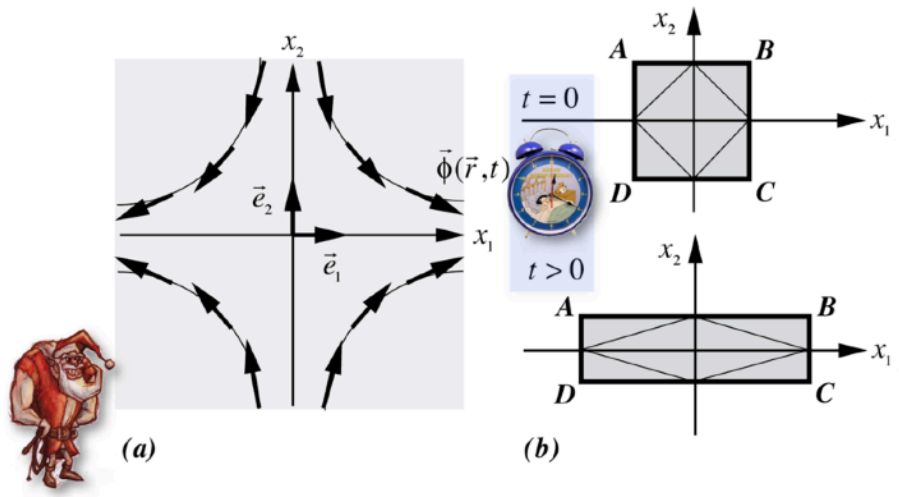


Figure 1.9 - *Allongement à expansion volumique nulle*

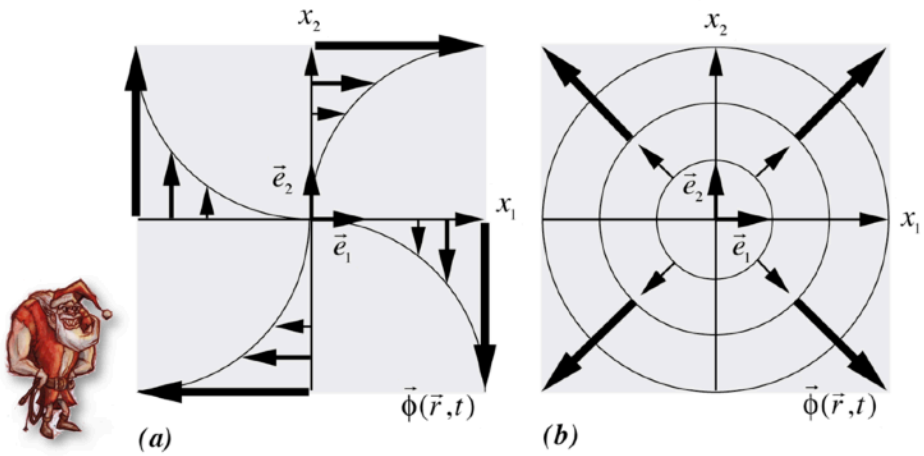


Figure 1.10 - *Rotations locales* ***(a)*** *et expansions* ***(b)*** *non-uniformes du milieu*

correspondant à toutes sortes de déformation. Pour expliciter en détail les comportements de rotation globale et locale et les comportements de déformations, qui seront appelés de façon générique des *distorsions* du réseau, il faut introduire des *grandeurs topologiques* devant traduire ces distorsions.

Une façon élégante de procéder en coordonnées d'Euler est de constater que le champ scalaire d'expansion volumique τ défini précédemment est déjà une grandeur topologique scalaire qui décrit parfaitement l'expansion volumique du milieu. On peut alors montrer que ce scalaire est en fait déductible d'une grandeur topologique plus compliquée, à savoir *un tenseur*[4] *d'ordre deux* qu'on appelle *le tenseur de distorsion* β_{ij}. Un tenseur d'ordre deux est un objet mathématique représenté par un tableau 3 sur 3 de 9 nombres différents (figure 1.11).

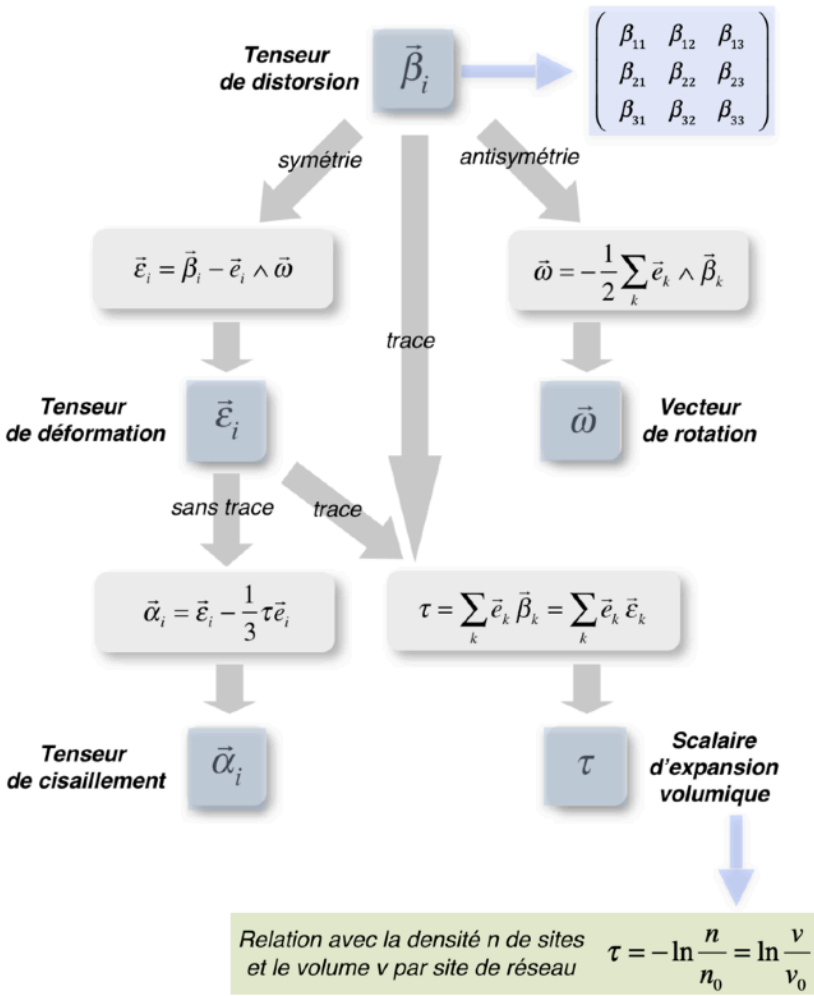


Figure 1.11 - *Les décompositions du tenseur de distorsion*

---

[4] ***Tenseur d'ordre deux:*** un tenseur d'ordre deux est un objet mathématique représenté par un tableau 3 sur 3 de *neuf nombres différents*. Un tenseur d'ordre deux représente en fait une grandeur physique décrite par *neufs nombres.* Il peut être très commode de représenter un tenseur d'ordre deux à l'aide de trois vecteurs dans le système des coordonnées d'Euler. On parle de *champ tensoriel d'ordre deux* lorsqu'une grandeur physique tensorielle prend différentes valeurs en tous les points de l'espace et au cours du temps.

Ces neufs nombres suffisent alors pour décrire parfaitement *l'ensemble des rotations globales et locales et des déformations* du réseau solide. Mais comme la manipulation de ce tenseur est mathématiquement assez compliquée, et surtout que celui-ci camoufle en général le comportement physique réel du milieu, on choisit une façon tout à fait originale de le représenter sous la forme de trois vecteurs. Ainsi, le champ tensoriel de distorsion β_{ij} du réseau sera représenté par commodité par *un champs de trois vecteurs* $\vec{\beta}_1$, $\vec{\beta}_2$, $\vec{\beta}_3$, en se rappelant qu'un vecteur est une flèche orientée dans l'espace composée de trois nombres. Cette *représentation vectorielle des champs tensoriels* est tout à fait originale et extrêmement puissante, car elle permet mathématiquement de faire appel aux opérateurs spatiaux de *l'analyse vectoriel*, et elle simplifie ensuite considérablement l'interprétation physique des champs tensoriels.

Il est possible d'appliquer des *opérations de symétrie* sur le *tenseur de distorsion* $\vec{\beta}_i$ pour en extraire les détails des rotations et des déformations du milieu. L'opération consistant à effectuer la somme des éléments diagonaux du tenseur, à savoir $\beta_{11}+\beta_{22}+\beta_{33}$, fournit un scalaire appelé *la trace du tenseur* et qui n'est en fait rien d'autre que *le scalaire d'expansion volumique* τ . L'opération consistant à prendre la partie symétrique du tenseur de distorsion fournit *un tenseur d'ordre deux symétrique* $\vec{\varepsilon}_i$, appelé *tenseur de déformation*, qui représente l'ensemble des déformations du milieu, mais sans les rotations globales du milieu. L'opération consistant à prendre la partie anti-symétrique du tenseur de distorsion fournit *un vecteur axial* $\vec{\omega}$, appelé *vecteur de rotation*, qui représente toutes *les rotations locales et globales* au sein du milieu. Finalement, en retirant sa trace au tenseur de déformation $\vec{\varepsilon}_i$, on obtient un tenseur d'ordre deux symétrique et sans trace $\vec{\alpha}_i$, appelé *tenseur de cisaillement,* qui représente l'ensemble des cisaillements du milieu. Ces opérations de symétrie sont décrites dans la figure 1.11, où, pour les fins connaisseurs du calcul vectoriel, on a fait apparaître explicitement les opérations mathématiques de symétrie utilisées, ainsi que la relation existant entre le scalaire d'expansion volumique τ , la densité de sites n du réseau et le volume v par site de réseau.

Géométro-cinétique d'un réseau en coordonnées d'Euler

En coordonnées d'Euler, on décrit l'évolution du réseau solide dans l'espace et le temps à l'aide *des vecteurs du champ de vitesse* $\vec{\phi}(\vec{r},t)$ des points du réseau situés aux coordonnées d'espace $\vec{r}$ et au temps t dans le repère absolu $\boldsymbol{O}x_1x_2x_3$ du laboratoire de l'observateur ***GO*** (figure 1.2). Or, s'il existe un champ de vitesse non homogène au sein du réseau, il doit forcément y apparaître une évolution spatio-temporelle des distorsions au sein de ce réseau. En coordonnées d'Euler, les relations existant entre le champ de vitesse $\vec{\phi}(\vec{r},t)$ et l'évolution du tenseur de distorsion $\vec{\beta}_i$, du vecteur de rotation $\vec{\omega}$ et du scalaire d'expansion volumique τ seront appelées *les équations géométrocinétiques.* Ces équations sont reportées dans la figure 1.12.

Les équations géométrocinétiques relient en fait les *variations temporelles des distorsions du solide*, qui sont calculées le long de la trajectoire des particules du milieu à l'aide d'un *opérateur mathématique de temps* appelé *la dérivé particulaire*[5], aux *variations spatiales du champ de vitesse* $\vec{\phi}(\vec{r},t)$ du milieu, qui sont calculées à l'aide d'*opérateurs mathématiques d'espace*

---

[5] ***Opérateur dérivée particulaire:*** c'est un opérateur mathématique de temps permettant de calculer les variations temporelles d'une grandeur physique le long de la trajectoire des particules d'un milieu (voir glossaire).

de l'analyse vectoriel appliqués au champ de vitesse, et qui sont appelés *le gradient*[6] dans le cas du tenseur de distorsion, *le rotationnel*[7] dans le cas du vecteur de rotation et *la divergence*[8] dans le cas du scalaire d'expansion volumique. Dans ces équations de géométrocinétique, il

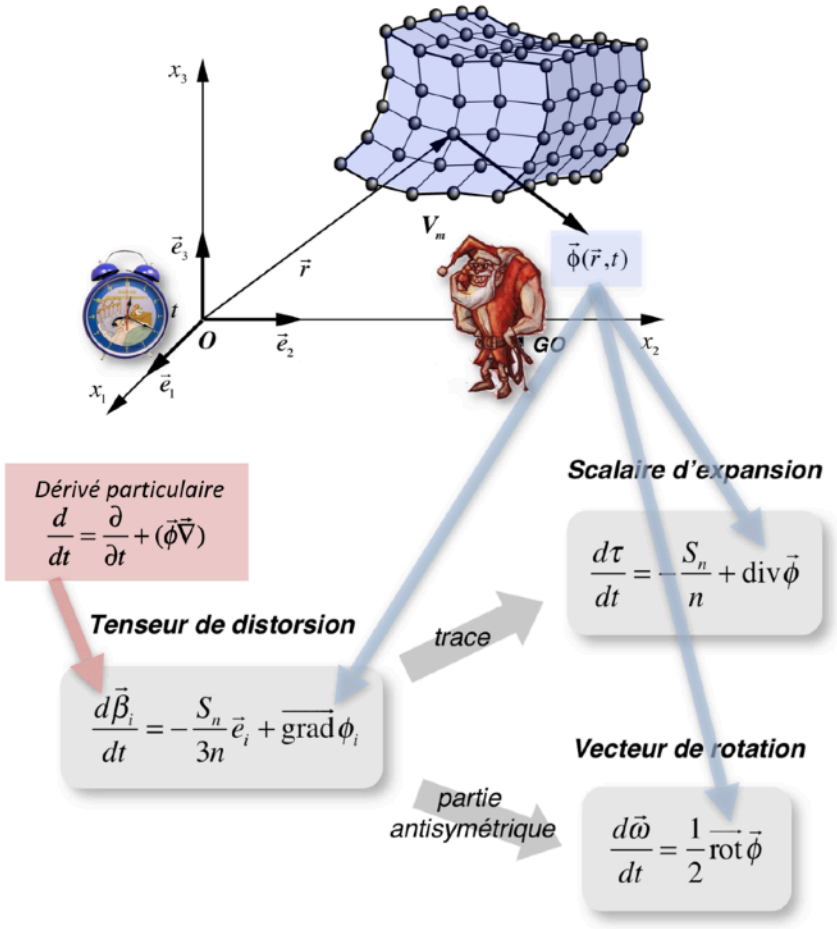


Figure 1.12 - *Les équations géométrocinétiques*

apparaît aussi la grandeur S_n qui correspond à la possibilité d'existence d'un mécanisme qui peut créer ou annihiler des sites de réseau. La grandeur S_n est appelée la *source de sites de réseau*, et correspond au nombre de sites de réseau créés ou annihilés par unité de temps et par unité de volume du réseau. On rediscutera ultérieurement des mécanismes conduisant à de telles sources de sites de réseau.

---

[6] ***Opérateur gradient:*** le *gradient d'un champ scalaire* f est un opérateur mathématique d'espace fournissant un champ vectoriel $\vec{u}$ (voir glossaire).

[7] ***Opérateur rotationnel:*** le *rotationnel d'un champ vectoriel* $\vec{u}$ est un opérateur mathématique d'espace fournissant un autre champ vectoriel $\vec{v}$ (voir glossaire).

[8] ***Opérateur divergence:*** la *divergence d'un champ vectoriel* $\vec{u}$ est un opérateur mathématique d'espace fournissant un champ scalaire g (voir glossaire).

Géométro-compatibilité des distorsions d'un réseau

Nous avons montré précédemment que la description des solides en coordonnées de Lagrange est caractérisée par un champ de déplacement $\vec{u}(\vec{r},t)$. En effet, en coordonnées de Lagrange (figure 1.1), le solide est décrit par un rayon-vecteur $\vec{r}$ repérant la position initiale de tous ses points dans le repère $\boldsymbol{O}x_1x_2x_3$ du référentiel de l'observateur ***GO***. Le champ de vecteur de déplacement de Lagrange permet alors de repérer dans l'espace à l'instant t la position de tous les points du solide situés initialement à la coordonnée $\vec{r}$ du repère $\boldsymbol{O}x_1x_2x_3$.

Il est intuitivement clair que la description des distorsions d'un solide en coordonnées d'Euler devrait aussi permettre de retrouver un tel champ de déplacement. En effet, en coordonnées d'Euler (figure 1.2), le solide déformé est décrit à l'instant t dans le référentiel absolu de l'observateur ***GO***. Pour un point $\boldsymbol{A}$ du solide situé à la coordonnée $\vec{r}$ de ce repère il doit être possible de définir un vecteur de déplacement $\vec{u}_E(\vec{r},t)$ qui relie ce point $\boldsymbol{A}$ à l'endroit $\boldsymbol{A}'$ *où se situait le même point* $\boldsymbol{A}$ *du solide à l'instant initial* $t=0$.

Il y a un lien étroit entre la dérivé temporelle particulaire du tenseur de distorsion $\vec{\beta}_i$ et le gradient des composantes du champ de vitesse $\vec{\phi}(\vec{r},t)$ comme le montre l'équation géométro-cinétique reportée dans la figure 1.12. Mais le champ de vitesse $\vec{\phi}(\vec{r},t)$ doit lui-même être en lien étroit avec la variation temporelle, appelée dérivé temporelle, du champ de déplacement $\vec{u}_E(\vec{r},t)$. On en déduit par conséquent qu'il doit forcément exister un lien étroit entre le tenseur de distorsion $\vec{\beta}_i$ et le gradient du champ de déplacement $\vec{u}_E$ si celui-ci existe, et que le tenseur de distorsion $\vec{\beta}_i$ est très probablement *le tenseur gradient* $\vec{\beta}_i = -\overrightarrow{\mathrm{grad}}\, u_{Ei}$ des composantes du champ de déplacement $\vec{u}_E$. Même si ce raisonnement paraît compliqué, il conduit spontanément à une condition mathématique sur le tenseur de distorsion $\vec{\beta}_i$ pour qu'il existe réellement un champ de déplacement $\vec{u}_E$. En effet, en analyse vectorielle, on démontre une propriété mathématique incontournable, à savoir que le rotationnel d'un gradient est forcément nul. Par conséquent, pour qu'il existe réellement un champ de déplacement $\vec{u}_E$ en coordonnées d'Euler, il *faut* que le rotationnel du tenseur de distorsion $\vec{\beta}_i$ soit nul, donc que $\overrightarrow{\mathrm{rot}}\,\vec{\beta}_i = 0$.

Cette équation est appelée *la condition de géométrocompatibilité* du tenseur de distorsion $\vec{\beta}_i$, et elle assure qu'il existe bel et bien un champ de déplacement $\vec{u}_E$ continu en coordonnées d'Euler. A noter encore que si on prend la trace de l'équation de géométrocompatibilité pour $\vec{\beta}_i$, autrement dit la somme des éléments diagonaux du tenseur $\overrightarrow{\mathrm{rot}}\,\vec{\beta}_i$, on trouve une nouvelle condition de géométrocompatibilité qui s'applique alors au vecteur de rotation $\vec{\omega}$, à savoir que la divergence du vecteur de rotation $\vec{\omega}$ doit être nulle pour qu'il existe un champ de déplacement $\vec{u}_E$ continu en coordonnées d'Euler. Ces deux équations de géométrocompatibilité sont incontournables pour assurer qu'un solide ne se déchire pas et qu'il n'y apparaisse pas de cavités au cours de son évolution spatio-temporelle. Les diverses opérations pratiquées sur les tenseurs de distorsion sont résumées synoptiquement dans la figure 1.13.

L'interprétation physique de ces deux *conditions de géométrocompatibilité* peut s'illustrer assez facilement par les dessins reportés aux figures 1.14 et 1.15. La condition de compatibilité $\overrightarrow{\mathrm{rot}}\,\vec{\beta}_i = 0$ pour le tenseur de distorsion $\vec{\beta}_i$ implique que le champ de déplacement $\vec{u}_E$ possède de bonnes propriétés de continuité. Pour le montrer, il suffit de considérer un contour fermé $\boldsymbol{C}$ au sein du milieu, et de reporter les vecteurs de déplacement $\vec{u}_E$ le long de ce contour (figure 1.14). Si le milieu présente un champ de distorsions satisfaisant la condition de compati-

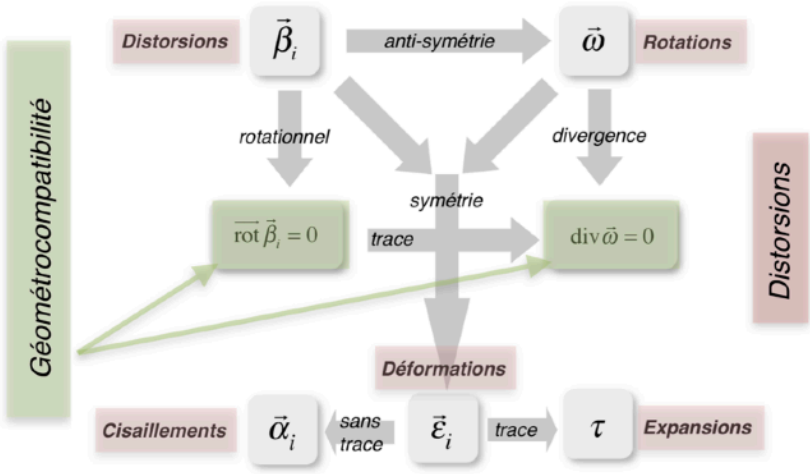


Figure 1.13 - *Le système complet des distorsions d'un réseau solide*

bilité $\overrightarrow{\mathrm{rot}}\,\vec{\beta}_i = 0$, le vecteur de fermeture $\vec{\boldsymbol{B}}$, appelé *dislocation du milieu,* est nul, ce qui signifie effectivement d'un point de vue topologique, qu'*il n'existe pas de discontinuités des déplacements*, appelées *dislocations,* au sein du milieu.

L'existence d'un champ de déplacement $\vec{u}_E$ sans discontinuités permet d'assurer la *connexité topologique* du milieu, c'est-à-dire d'un point de vue physique le fait qu'il n'y ait pas eu de localisation des distorsions, telles des déchirures suivies d'un glissement des mâchoires l'une par rapport à l'autre, ainsi que la *compacité topologique* du milieu, c'est-à-dire d'un point de vue physique le fait qu'il n'est pas apparu de formations de cavités ou de recouvrements au sein du milieu. En résumé, la condition $\overrightarrow{\mathrm{rot}}\,\vec{\beta}_i = 0$ *assure la solidité du milieu*.

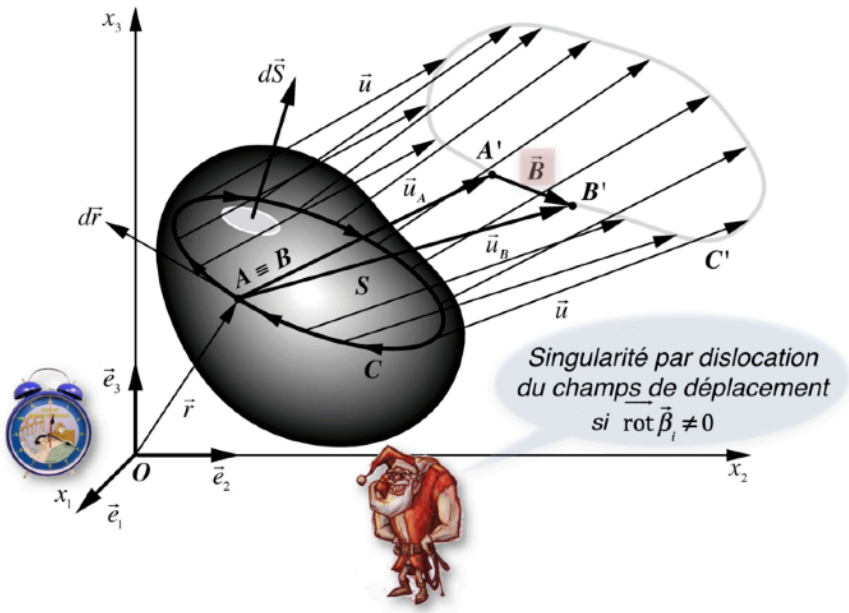


Figure 1.14 - *Singularité par dislocation du champs de déplacement*

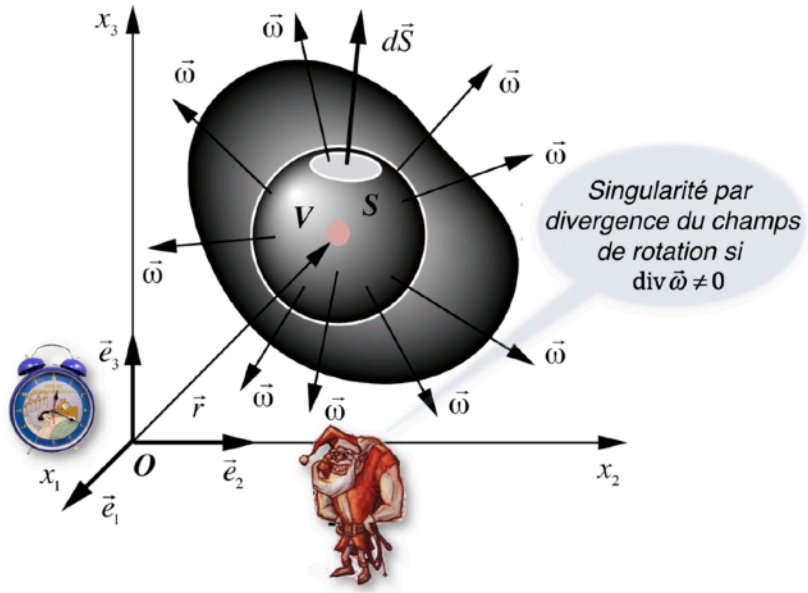


Figure 1.15 - *Singularité par divergence du champs de rotation*

Pour trouver la signification de la condition de compatibilité $\mathrm{div}\,\vec{\omega} = 0$ pour le vecteur de rotation $\vec{\omega}$, on dessine le vecteur de rotation $\vec{\omega}$ sur une surface fermée S entourant un volume V de solide (figure 1.15). La condition de compatibilité pour le vecteur de rotation $\vec{\omega}$ stipule alors que le flux du champ des rotations traversant la surface fermée S est nul, ce qui implique qu'*il n'existe pas de singularité divergente du champ de rotation* $\vec{\omega}$ au sein du solide, telle que celle reportée dans le dessin de la figure 1.15.

Les contorsions d'un réseau solide

Dans un réseau solide, les champs $\vec{\beta}_i, \vec{\varepsilon}_i, \vec{\alpha}_i, \vec{\omega}, \tau$ représentent l'ensemble des distorsions, des déformations, des cisaillements, des rotations et des expansions volumiques que subissent localement les mailles de ce réseau. Si chaque maille d'un réseau est soumise à un champ de distorsion, qui peut varier d'une maille à l'autre, il doit aussi apparaître des effets de flexions et de torsions à une échelle plus macroscopique du milieu solide, liés à la continuité du réseau.

Ces *"courbures"* du solide seront appelées les *contorsions du réseau.* Dans un milieu géométrocompatible, elles ne dépendent en fait que des déformations du réseau, et se déduisent donc comme des variations spatiales du champ de déformation $\vec{\varepsilon}_i$ de la manière illustrée par le diagramme de la figure 1.16. Il apparaît alors *un tenseur de contorsion* $\vec{\chi}_i$, qui peut se décomposer par des symétries en *un vecteur de flexion* $\vec{\chi}$ et *un tenseur symétrique transverse (sans trace) de torsion* $\left[\vec{\chi}_i\right]^{\mathrm{S}}$.

Dans un milieu géométrocompatible, les contorsions du réseau sont aussi étroitement liées aux dérivées spatiales du vecteur rotation $\vec{\omega}$ comme le montre bien les relations mathématiques donnant le tenseur de contorsion $\vec{\chi}_i$ et le vecteur de flexion $\vec{\chi}$ dans la figure 1.16. Ceux-ci doivent donc aussi mesurer des variations des rotations au sein du solide, telles que des *torsions* ou des *flexions*. On peut donc définir plus précisément la signification de ces ten-

seurs $\vec{\chi}_i$ et $\vec{\chi}$ en utilisant deux exemples typiques de variations spatiales de $\vec{\omega}$.

Dans le premier exemple, un milieu fléchi présente un vecteur rotation parallèle à l'axe Ox_3, et qui s'accroît dans la direction de l'axe Ox_2, comme représenté à la figure 1.17. En ce cas, il existe une *composante non diagonale* $\chi_{23} = \partial\omega_3 / \partial x_2 \neq 0$ du tenseur $\vec{\chi}_i$ qui n'est pas nulle, et cette composante est associée à la *flexion* du solide comme l'illustre bien la figure.

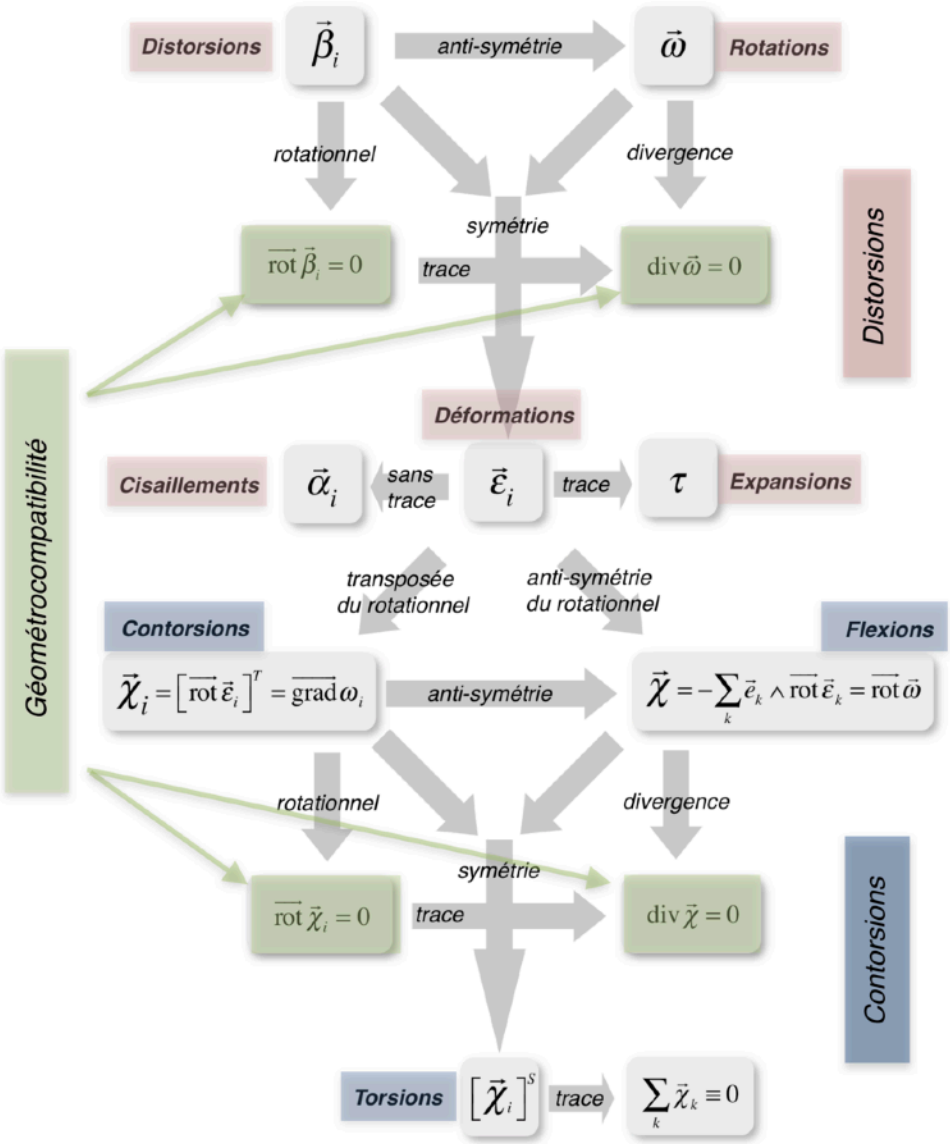


Figure 1.16 - *Le système complet des distorsions et des contorsions d'un solide*

Mais dans le cas illustré à la figure 1.17, le vecteur $\vec{\omega}$ semble tourner autour de l'axe Ox_1 de sorte qu'il existe un *vecteur de flexion* $\vec{\chi} = -\overrightarrow{\text{rot}}\,\vec{\omega}$ non nul parallèle à cet axe comme on l'a illustré dans la figure 1.17.

Dans le deuxième exemple (figure 1.18), on représente un accroissement le long de l'axe Ox_2 d'un vecteur rotation parallèle à l'axe Ox_2. Cette fois c'est une *composante diagonale* $\chi_{22} = \partial\omega_2 / \partial x_2 \neq 0$ du tenseur $\vec{\chi}_i$ qui devient forcément non nulle. Et on constate qu'il s'agit là d'une *torsion* du milieu solide.

Dans ces deux exemples, on a illustré que des variations spatiales du vecteur de rotation $\vec{\omega}$ conduisent bien à des flexions ou des torsions du milieu solide. Mais dans un milieu géométrocompatible, ces mêmes flexions et torsions sont aussi déductibles directement du tenseur de déformation $\vec{\varepsilon}_i$.

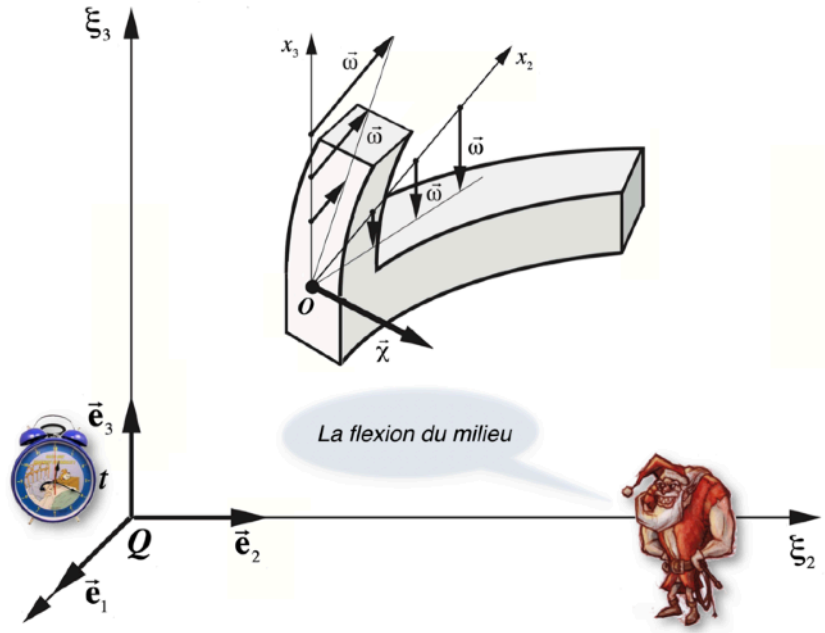


Figure 1.17 - *Flexion du milieu*

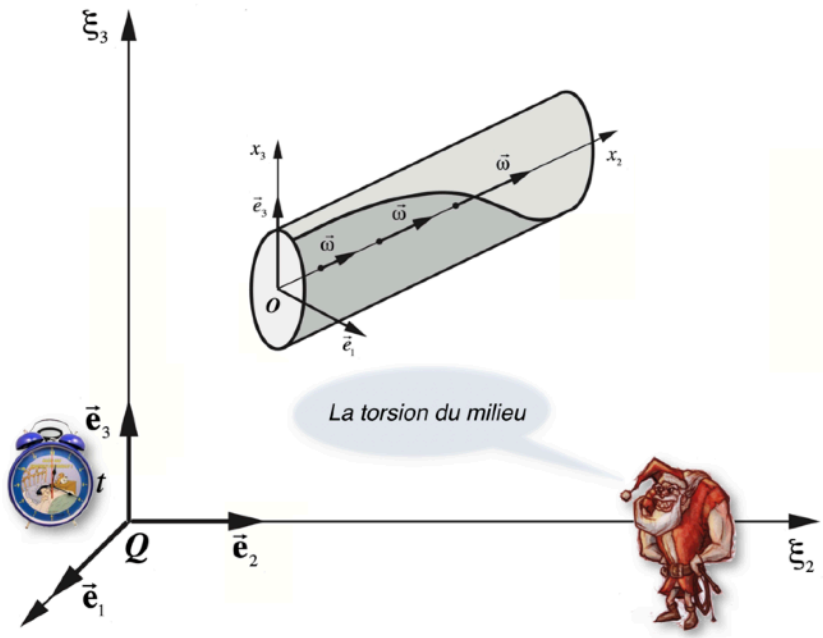


Figure 1.18 - *Torsion du milieu*

Géométro-compatibilité des contorsions d'un réseau

Dans le tableau de la figure 1.16, on constate qu'il existe aussi deux conditions de géométrocompatibilité pour le tenseur de contorsion $\vec{\chi}_i$ et le vecteur de flexion $\vec{\chi}$ respectivement, de manière très similaire que dans le cas du tenseur de distorsion et du vecteur de rotation.

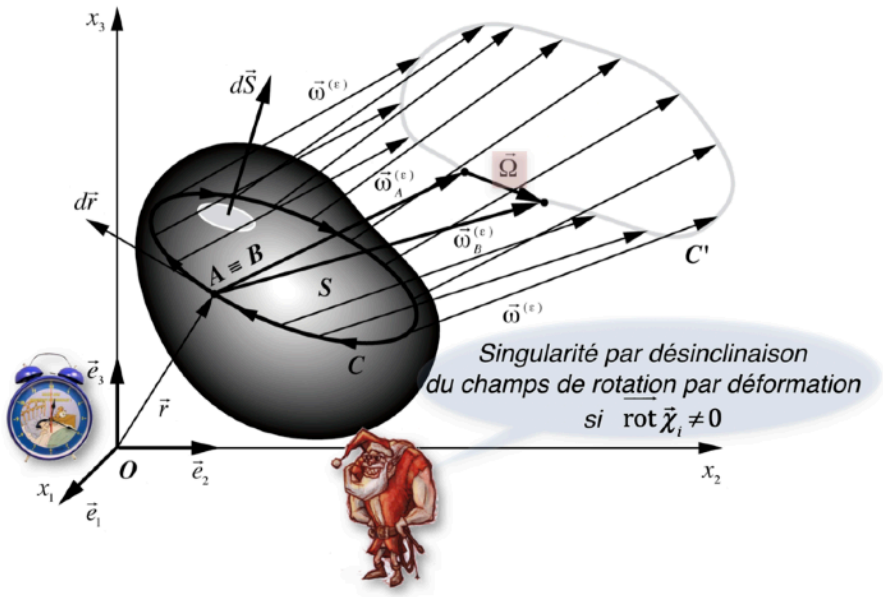


Figure 1.19 - *Singularité par désinclinaison du champs de rotation par déformation*

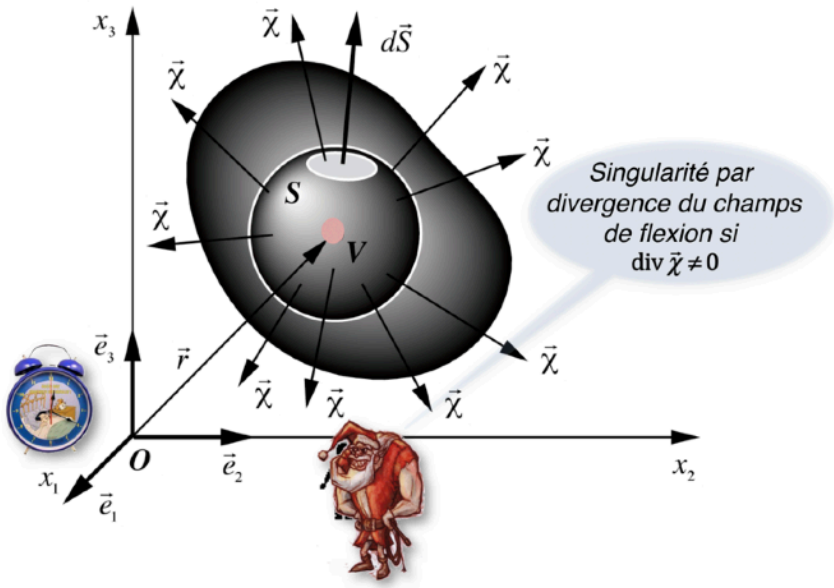


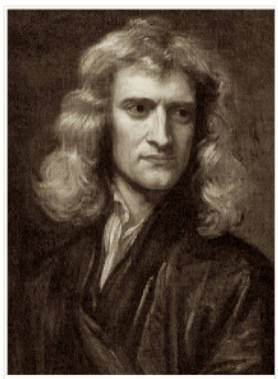
Figure 1.20 - *Singularité par divergence du champs de flexion*

La condition de compatibilité $\overrightarrow{\mathrm{rot}}\,\vec{\chi}_i = 0$ du tenseur de contorsion $\vec{\chi}_i$ peut s'interpréter en considérant contour fermé $\boldsymbol{C}$ au sein du milieu et en reportant *le vecteur de rotation locale* $\vec{\omega}^{(\varepsilon)}$ *déduit du tenseur de déformation* le long de ce contour (figure 1.19). La condition de compatibilité implique alors que le vecteur de fermeture $\vec{\Omega}$, appelé *vecteur de Frank*, soit nul, ce qui signifie d'un point de vue topologique et physique qu'*il n'existe pas de discontinuités des rotations par déformation,* qui sont appelées des *désinclinaisons (disclinations* en anglais), au sein du milieu.

La condition de compatibilité $\mathrm{div}\,\vec{\chi} = 0$ du vecteur de flexion $\vec{\chi}$ s'interprète en considérant une surface fermée $\boldsymbol{S}$ entourant un volume $\boldsymbol{V}$ de milieu (figure 1.20). La condition de compatibilité pour le vecteur de flexion $\vec{\chi}$ stipule alors que le flux du champ des flexions traversant la surface fermée $\boldsymbol{S}$ est nul, ce qui implique qu'*il n'existe pas de singularité divergente du champ de flexion* $\vec{\chi}$ au sein du solide, telle que celle reportée dans le dessin de la figure 1.20.

La dynamique newtonienne et la thermocinétique eulérienne

Il a été montré précédemment qu'une collection solide de particules dans l'espace peut présenter un mouvement collectif qui correspond aux mouvements globaux de translation, de rotation globale et locale et de déformation du milieu dans l'espace de l'observateur, et qu'en coordonnées d'Euler, ces mouvements sont décrits par une vitesse locale moyenne $\vec{\phi}(\vec{r},t)$. Pour aller plus avant dans la description et la prédiction de ces mouvements, il faut maintenant introduire les principes physiques auxquels le milieu obéit. On suppose alors que le réseau solide considéré se comporte de manière newtonienne dans le référentiel absolu du ***GO***, autrement dit que la dynamique des particules du milieu satisfont la loi de Newton $\vec{f} = m\vec{a}$ qui implique que l'accélération $\vec{a}$ d'une particule est liée à la force $\vec{f}$ qu'on lui applique via *la masse d'inertie* m de la particule. De plus, on admet aussi que les comportements physiques du réseau de particules obéissent aux deux premiers principes de la thermodynamique, qui n'ont jamais été mis en défaut, à savoir que l'énergie y est une grandeur conservée, et qu'il y existe une grandeur appelée *entropie* qui mesure l'état de désordre du réseau.



Isaac Newton (1643-1727)

On va introduire ici de manière rigoureuse la dynamique newtonienne et la thermocinétique du réseau en coordonnées d'Euler en partant de ces trois axiomes physiques de base tout-à-fait classiques et bien connus. Avec cette approche axiomatique et rigoureuse, on est conduit à définir des grandeurs moyennes par site du réseau, ainsi que des sources et des flux de grandeurs physiques, qui doivent satisfaire *trois principes de continuité* reportés à la figure 1.21.

En admettant l'axiome que le mouvement individuel de chaque particule du réseau satisfait *une dynamique newtonienne*, à savoir *la loi de Newton* $\vec{f} = m\vec{a}$, au mouvement de chaque particule à vitesse $\vec{\phi}$ doit correspondre une *quantité de mouvement* et une *énergie cinétique*. Par particule, d'après la mécanique newtonienne, la quantité de mouvement s'écrit $\vec{p} = m\vec{\phi}$ et l'énergie cinétique s'écrit $e_{cin} = m\vec{\phi}^2/2$. Ces expressions de la quantité de mouvement et de l'énergie cinétique d'une particule du milieu fait appel à une grandeur physique scalaire conser-

vative, propre à la particule: sa *masse d'inertie* ou *masse inerte* m . En coordonnées d'Euler, on montre que la conservation de la masse d'inertie conduit à un *principe de continuité pour la masse d'inertie* qui est reporté dans la figure 1.21.

Ce principe relie la variation temporelle locale $\partial\rho/\partial t$ de la quantité de masse contenu dans l'unité de volume du milieu, qu'on appelle la *densité volumique de masse* ρ du milieu, à l'existence d'une *source volumique de masse* S_m , associée à la création ou l'annihilation de masse au sein du milieu et qui est généralement nulle de par le principe de conservation de la masse, à la variation temporelle du *scalaire d'expansion volumique* $d\tau/dt$ du milieu le long de la trajectoire de ses particules, à l'existence d'une *source de sites de réseau* S_n et à l'existence d'un *flux de transport de masse* $\vec{J}_m$, c'est-à-dire d'un déplacement de masse par un autre processus physique au sein du réseau, tel que l'auto-diffusion dont on va parler par la suite,


Sadi Carnot
(1837-1894)

Aux mouvements de fluctuations aléatoires $\Delta\vec{v}_i$ des particules du milieu correspondant à l'agitation thermique et aux interactions attractives ou répulsives pouvant exister entre les particules du milieu doivent correspondre respectivement une énergie thermique interne et une énergie potentielle interne. C'est précisément le sujet de l'axiome du *premier principe de la thermodynamique phénoménologique*, qui postule l'existence, pour un système physique donné, d'une fonction U dépendant de l'état du système, appelée l'*énergie interne* du système, qui est telle que, pour toute transformation infinitésimale du système (toute variation infinitésimale d'une des grandeurs physiques du système), on a la relation $dU = \delta W + \delta Q$, où dU représente la variation de l'énergie interne du système, δQ représente l'ensemble des *échanges de chaleur entre le système et le monde extérieur*, et δW l'ensemble des *échanges de travail entre le système et le monde extérieur.*

Dans le cas d'un réseau solide en mouvement à vitesse $\vec{\phi}$, l'énergie totale est liée à la fois à son énergie interne et à son énergie cinétique de mouvement global à vitesse $\vec{\phi}$. En coordonnées d'Euler, on montre que la conservation de l'énergie du solide se déformant conduit à un *principe de continuité pour l'énergie totale* qui est reporté dans la figure 1.21. En exprimant *l'énergie interne moyenne* u et *l'énergie cinétique moyenne* e_{cin} *par site de réseau,* le principe de continuité de l'énergie stipule que la somme des variations de l'énergie interne u et de l'énergie cinétique e_{cin} prises le long de la trajectoire des particules dépend de l'existence d'une *source de travail externe* S_w^{ext} correspondant à un apport d'énergie mécanique depuis l'extérieur du milieu, du *flux de travail* $\vec{J}_w$, c'est-à-dire des échanges d'énergie mécanique au sein du milieu, du *flux de chaleur* $\vec{J}_q$, c'est-à-dire des échanges de chaleur au sein du milieu, et de la *source de sites de réseau* S_n , c'est-à-dire de la création ou de l'annihilation d'un certain nombre de sites de réseau par unité de temps.

Le *deuxième principe de la thermodynamique phénoménologique* postule l'existence, pour un système physique donné, d'une fonction S dépendant de l'état du système, appelée l'*entropie* du système. Cette fonction caractérise en fait l'état de désordre régnant au sein du système, et elle est telle que toute transformation infinitésimale du système satisfait la relation

$dS \geq \delta Q / T$ où dS représente la variation de l'entropie du système, δQ représente l'ensemble des *échanges de chaleur entre le système et le monde extérieur* et T est *la température* du système.

En coordonnées d'Euler, on montre que le deuxième principe de la thermodynamique phénoménologique conduit à un *principe de continuité pour l'entropie* qui est reporté dans la figure 1.21. En exprimant *l'entropie moyenne* s par site de réseau, le principe de continuité de l'entropie stipule que la variation de l'entropie s prise le long de la trajectoire des particules dépend de l'existence d'une source volumique d'entropie S_e , c'est-à-dire de la création locale d'entropie au sein du milieu, du *flux de chaleur* $\vec{J}_q$ au sein du milieu, de la *température* T du milieu qui caractérise l'état d'agitation thermique des particules du milieu et de la *source de sites de réseau* S_n .

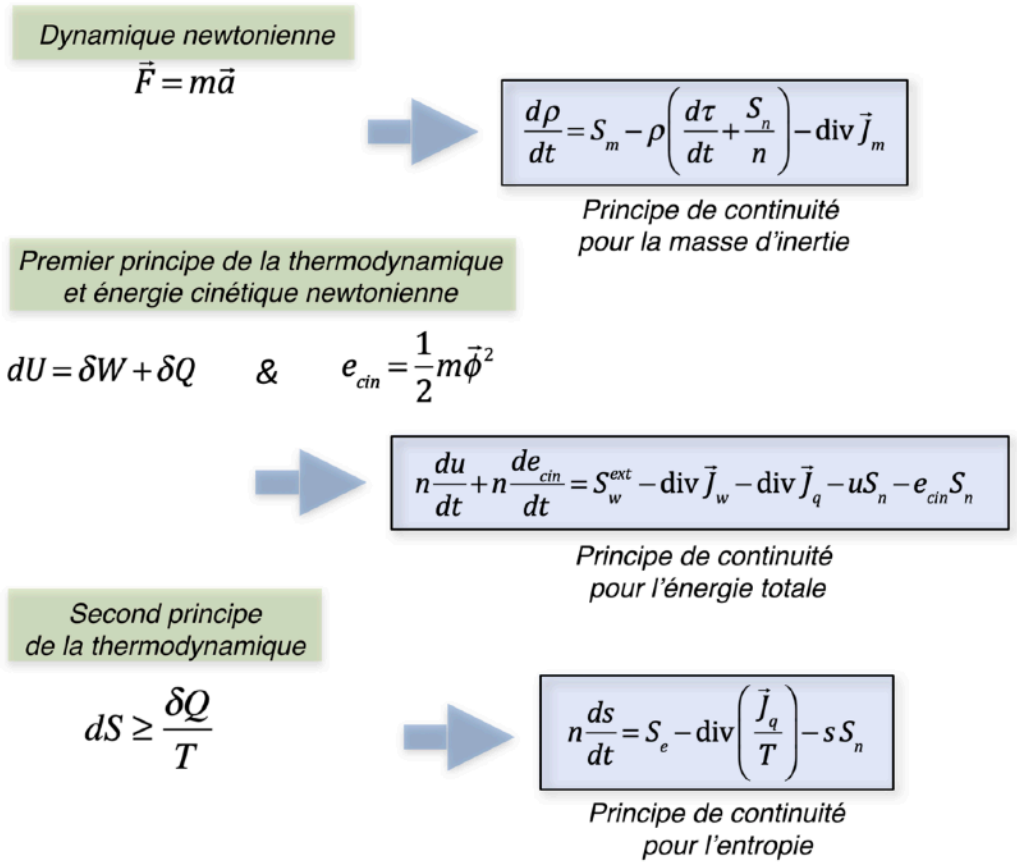


Figure 1.21 - *Les trois principes eulériens de continuité déduits de la dynamique newtonienne et des deux principes de base de la thermodynamique*

Ces trois principes physique sont absolument incontournables dans les milieux solides, et ce sont *les seuls principes physiques fondamentaux absolument nécessaires* à une description complète de la géométrodynamique newtonienne et de la thermodynamique phénoménologique des milieux déformables en coordonnées d'Euler.

Propriétés physiques propres au milieu

Les équations de géométrocinétique (figure 1.12) et de géométrocompatibilité (figure 1.16), ainsi que les trois principes de continuité déduits des lois de Newton et de la thermodynamique phénoménologique (figure 1.21) sont les concepts de base pour le traitement des milieux solides déformables en les coordonnées d'Euler, et restent les mêmes quel que soit le milieu considéré. Mais on sait pertinemment que les propriétés physiques et les comportements macroscopiques qu'on peut observer sur un milieu solide peuvent être très différents d'un milieu à un autre. Ces propriétés physiques sont appelés *les propriétés phénoménologiques* du milieu. On va donc aborder maintenant les propriétés physiques phénoménologiques les plus importantes d'un réseau solide, à savoir les *propriétés mécaniques* du réseau, comme *l'élasticité e*t *l'anélasticité*, et les *propriétés de transport de masse* au sein du réseau, comme *l'auto-diffusion*.

Il est d'expérience courante qu'on peut courber fortement une lame de scie à métaux sans grands efforts, et que celle-ci reprend toute sa rectitude lorsqu'on relâche la force qu'on lui appliquait. Ce comportement phénoménologique typique s'appelle *l'élasticité du solide*. L'élasticité du milieu est due aux forces de liaison internes entre particules du solide, de sorte que le fait de plier la lame de scie revient à stocker de l'énergie interne dans le milieu, en fait dans les liaisons entre ses particules, énergie qui est ensuite utilisée pour rendre à sa lame sa forme initiale lorsqu'on la relâche. Ainsi, pour introduire cette propriété d'élasticité dans les équations eulériennes du milieu, on va utiliser *l'énergie interne moyenne* u *par site de réseau* qu'on a défini au paragraphe précédent, et on va exprimer que celle-ci dépend des déformations appliquées au solide, autrement dit des champs de déformations élastiques $\vec{\beta}_i^{\,el}, \vec{\varepsilon}_i^{\,el}, \vec{\alpha}_i^{\,el}, \vec{\omega}^{el}, \tau^{el}$ apparaissant dans le solide lorsqu'on le déforme. On exprime cette situation en disant que l'énergie interne u est une fonction $u(\vec{\beta}_i^{\,el},s)=u(\vec{\varepsilon}_i^{\,el}, \vec{\omega}^{el},s)=u(\vec{\alpha}_i^{\,el}, \vec{\omega}^{el}, \tau^{el},s)$ dépendant de l'état des tenseurs de déformations élastiques, mais aussi de l'entropie locale du réseau, via *l'entropie moyenne* s par site de réseau. Cette dépendance en l'entropie s reflète l'effet sur l'énergie interne de l'existence d'un désordre spatial et cinétique au sein du milieu, et notamment l'effet de l'agitation thermique des particules sous l'effet de la chaleur.

Lorsqu'on déforme un solide, l'élasticité est une réponse immédiate du solide. Mais il peut exister parfois une autre réponse du solide qui s'ajoute en général à la réponse élastique et qui est retardée dans le temps par rapport à la sollicitation du solide, mais qui est aussi récupérable avec du retard lorsqu'on relâche la sollicitation. Une telle réponse du solide est appelée *l'anélasticité* du solide. Alors que la réponse élastique ne libère pas d'énergie thermique dans le solide, la réponse anélastique libère de l'énergie thermique lorsqu'elle est activée, et on dit qu'il s'agit là d'un *processus dissipatif.* C'est ce type de processus qui dissipe l'énergie de vibration de certains métaux, comme la fonte de fer par exemple, qui sont utilisés dans l'industrie précisément pour cette propriété d'amortissement des vibrations et du bruit. Lorsque des phénomènes de déformations anélastiques sont activés dans un solide, ceux-ci stockent aussi de l'énergie interne dans le solide, énergie qui est ensuite utilisée par le solide pour restaurer sa forme initiale, comme dans le cas de l'élasticité. Il peut donc apparaître des déformations anélastiques $\vec{\beta}_i^{\,an}, \vec{\varepsilon}_i^{\,an}, \vec{\alpha}_i^{\,an}, \vec{\omega}^{an}$ dans un solide, qui, comme dans le cas des déformations élastiques, modifient aussi la fonction de l'énergie interne du solide. L'énergie interne du solide s'écrit alors $u(\vec{\beta}_i^{\,el}, \vec{\beta}_i^{\,an},s)=u(\vec{\varepsilon}_i^{\,el}, \vec{\varepsilon}_i^{\,an}, \vec{\omega}^{el}, \vec{\omega}^{an},s)=u(\vec{\alpha}_i^{\,el}, \vec{\alpha}_i^{\,an}, \vec{\omega}^{el}, \vec{\omega}^{an},\tau^{el},s)$, qui signifie qu'elle est une fonction de l'état d'élasticité et d'anélasticité du solide On notera ici que,

par esprit de simplification, on a supposé qu'il n'existe pas d'expansion volumique anélastique, c'est-à-dire que $\tau^{an} = 0$.

En principe, l'existence d'une *source de sites de réseau* S_n différente de zéro violerait le principe newtonien de conservation de la masse, à moins qu'il n'existe un phénomène d'*auto-diffusion* par des défauts ponctuels intrinsèques au sein du réseau. Un *défaut ponctuel intrinsèque de type lacunaire,* appelé simplement *une lacune,* est un site du réseau solide de particules qui ne possède aucune particule (figure 1.22). Il s'agit donc d'un *"trou"* dans le réseau. Un *défaut ponctuel intrinsèque de type interstitiel* , appelé simplement *un auto-interstitiel*, est une particule qui se trouve dans le réseau solide, mais qui n'occupe pas un site substitutionnel régulier de ce réseau (figure 1.22). Il s'agit donc d'une particule *"supplémentaire"* dans le réseau.

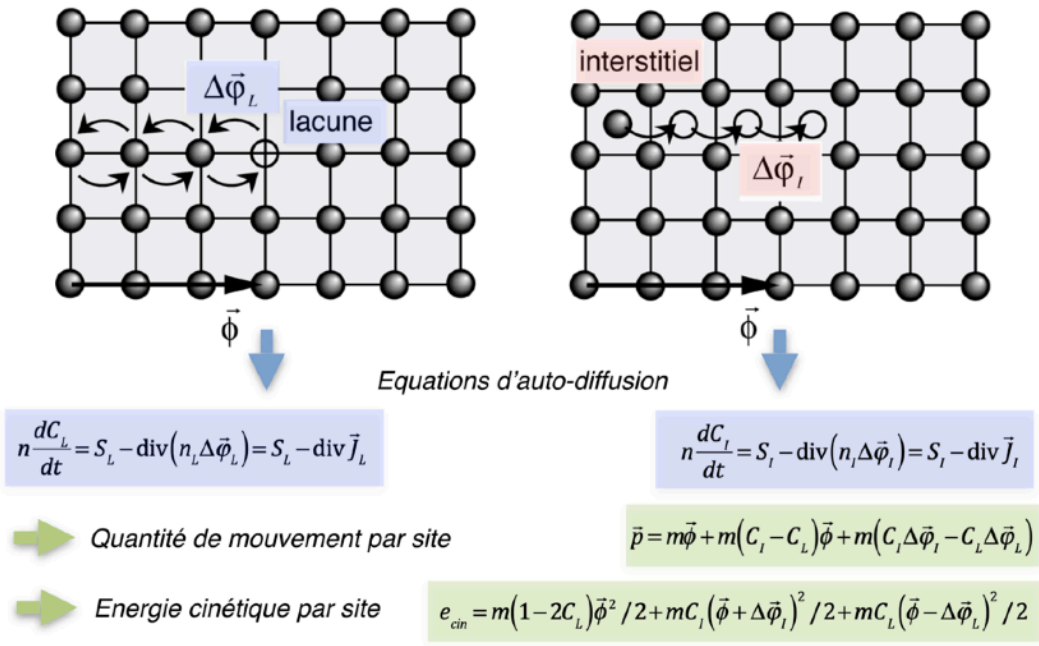


Figure 1.22 - *Auto-diffusion par lacune et par auto-interstitiel*

Il est simple de comprendre comment la présence de tels défauts ponctuels intrinsèques peut conduire à l'existence de phénomènes de transport de masse par *auto-diffusion lacunaire et/ou interstitielle*. Ces deux mécanismes de transport de masse peuvent être illustrés dans un réseau se déplaçant à la vitesse absolue $\vec{\phi}$ dans l'espace de l'observateur extérieur ***GO*** (figure 1.22). Le mouvement d'une lacune à vitesse relative $\Delta\vec{\varphi}_L$ par rapport au réseau dans une direction donnée conduit à un flux relatif de masse dans la direction opposée, à vitesse $-\Delta\vec{\varphi}_L$, alors que le mouvement d'un auto-interstitiel à vitesse relative $\Delta\vec{\varphi}_I$ par rapport au réseau dans une direction donnée entraîne un flux de masse dans la même direction, à vitesse $\Delta\vec{\varphi}_I$.

Pour transcrire mathématiquement l'existence de ces défauts ponctuels, il faut introduire tout d'abord les densités volumiques de lacunes et d'auto-interstitiels, c'est-à-dire le nombre de lacunes $n_L = n_L(\vec{r},t)$ et d'auto-interstitiels $n_I = n_I(\vec{r},t)$ par unité de volume du réseau. A partir de ces densités, il est possible de définir sans autre des *concentrations atomiques* de lacunes et d'auto-interstitiels par rapport à la densité n de sites de réseau par les relations $C_L = n_L / n$

et $C_I = n_I / n$. Contrairement aux apparences, il existe une certaine dissymétrie entre lacunes et auto-interstitiels, qui s'exprime dans le fait que la concentration atomique maximum de lacunes est toujours limitée à 1, lorsque tous les sites du réseau sont localement inoccupés, alors que la concentration atomique d'auto-interstitiels dépend du nombre de sites interstitiels accessibles dans chaque maille d'un réseau de structure donnée, et du nombre d'interstitiels qu'il est possible de caser sur chacun de ces sites.

On peut encore définir des *flux de diffusion* $\vec{J}_L$ et $\vec{J}_I$ de lacunes et d'interstitiels par rapport au réseau, définis par les relations $\vec{J}_L = nC_L\Delta\vec{\varphi}_L$ et $\vec{J}_I = nC_I\Delta\vec{\varphi}_I$, et qui mesurent le nombre de lacunes et d'interstitiels qui traversent l'unité de surface par unité de temps au sein du réseau. On peut alors déduire les *équations d'auto-diffusion* reportées dans la figure 1.22, qui permettent de calculer les variations temporelles des concentrations atomiques de lacunes et d'auto-interstitiels le long de la trajectoire du milieu, moyennant d'une part l'introduction de *sources volumiques de lacunes* S_L *et d'interstitiels* S_I associées au nombre de créations et d'annihilations de lacunes et d'interstitiels par unité de temps et par unité de volume, et d'autre part l'introduction de flux de lacunes et d'interstitiels $\vec{J}_L$ et $\vec{J}_I$ associés au nombre de de lacunes et d'interstitiels mobiles traversant par unité de temps une surface unité au sein du réseau. Le principe de conservation de la masse est alors satisfait si la source de sites de réseau est directement liée aux créations et annihilations locales de lacunes et d'interstitiels, c'est-dire

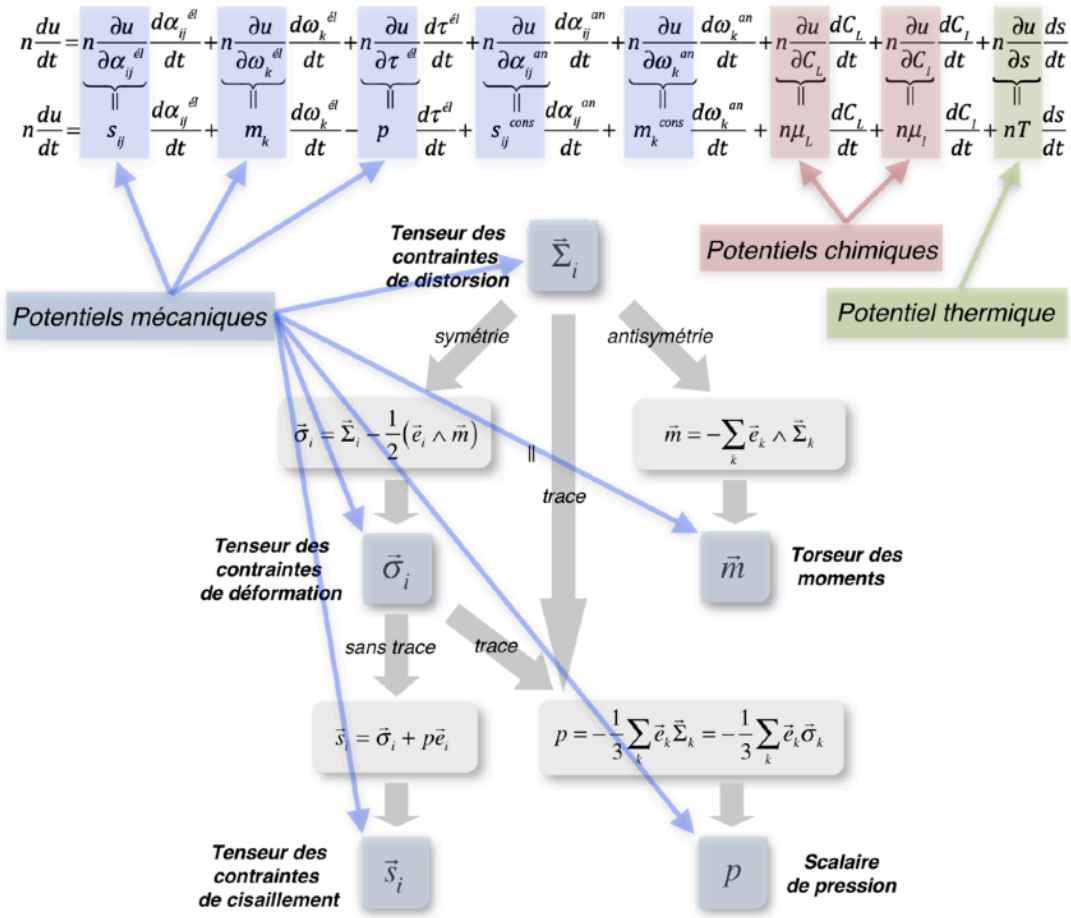


Figure 1.23 - *Equations thermocinétiques*

aux *sources de lacunes* S_L *et d'interstitiels* S_I, via la relation $S_n = S_L - S_I$.

Dans un réseau élastique et anélastique avec de l'auto-diffusion, il est intuitivement clair que les concentrations atomiques C_L et C_I de lacunes et d'auto-interstitiels doivent influer aussi sur l'état énergétique du réseau, de sorte qu'il faut compléter la fonction d'état énergie interne et l'écrire maintenant comme une fonction de l'ensemble des variables thermodynamiques $u(\vec{\beta}_i^{\,el}, \vec{\beta}_i^{\,an}, C_L, C_I, s) = u(\vec{\varepsilon}_i^{\,el}, \vec{\varepsilon}_i^{\,an}, \vec{\omega}^{el}, \vec{\omega}^{an}, C_L, C_I, s) = u(\vec{\alpha}_i^{\,el}, \vec{\alpha}_i^{\,an}, \vec{\omega}^{el}, \vec{\omega}^{an}, \tau^{el}, C_L, C_I, s)$ qui caractérisent l'état du milieu.

La présence de lacunes et d'auto-interstitiels dans le réseau va modifier les expressions de l'énergie cinétique et de la quantité de mouvement exprimées en valeur moyenne par particule ou par site de réseau, de la façon indiquée dans la figure 1.22

La fonction $u(\vec{\alpha}_i^{\,el}, \vec{\alpha}_i^{\,an}, \vec{\omega}^{el}, \vec{\omega}^{an}, \tau^{el}, C_L, C_I, s)$ qui caractérise l'état d'énergie interne du réseau solide est une grandeur phénoménologique du milieu considéré, au sens qu'elle doit être établie pour chaque milieu et qu'elle est propre à chaque milieu. C'est elle essentiellement qui va contrôler le comportement spatio-temporel du milieu via des *potentiels thermodynamiques*. En effet, si on exprime la variation temporelle de l'énergie interne le long de la trajectoire du milieu, on obtient une équation qu'on appelle *l'équation thermocinétique* du milieu, qui s'exprime directement à l'aide de l'expression $u(\vec{\alpha}_i^{\,el}, \vec{\alpha}_i^{\,an}, \vec{\omega}^{el}, \vec{\omega}^{an}, \tau^{el}, C_L, C_I, s)$ (fig. 1.23).

Cette équation thermocinétique fait apparaître des *potentiels mécaniques* $\vec{s}_k, \vec{m}, p, \vec{s}_k^{\,cons}, \vec{m}^{cons}$ appelés *les tenseurs de contrainte* $\vec{s}_k$ et $\vec{s}_k^{\,cons}$ conjugués respectivement aux tenseurs de cisaillements élastiques $\vec{\alpha}_i^{\,el}$ et anélastiques $\vec{\alpha}_i^{\,an}$, *les torseurs de moment* $\vec{m}$ et $\vec{m}^{cons}$ conjugués respectivement aux vecteurs de rotation élastique $\vec{\omega}^{el}$ et anélastique $\vec{\omega}^{an}$ et *la pression* p conjuguée au scalaire d'expansion volumique τ^{el}. Ces potentiels mécaniques représentent les forces mécaniques internes au milieu, qui tendent à éliminer les déformations du milieu pour rétablir l'état non déformé du milieu solide. Ces potentiels mécaniques peuvent se déduire l'un de l'autre selon le graphe reporté dans la figure 1.23.

L'équation thermocinétique fait aussi apparaître des *potentiels chimiques* μ_L et μ_I, conjugués respectivement aux concentrations atomiques C_L et C_I de lacunes et d'auto-interstitiels. Ces potentiels chimiques représentent en fait les forces chimiques internes agissant sur les lacunes et les auto-interstitiels au sein du milieu, qui tendent à éliminer les variations spatiales des concentrations atomiques C_L et C_I des lacunes et des auto-interstitiels afin de rétablir l'état chimique d'équilibre du milieu solide.

Finalement, l'équation thermocinétique fait encore apparaître une grandeur importante du milieu, à savoir sa *température* T, qui est conjuguée à son entropie s, et qui mesure l'agitation thermique au sein du milieu.

Des potentialités de la représentation eulérienne des milieux déformables

Pour terminer ce chapitre, on représente par un graphe dans la figure 1.24 toutes les potentialités de la représentation eulérienne vectorielle pour décrire l'évolution spatio-temporelle des milieux newtoniens déformables, potentialités qui sont développées dans mon premier livre.

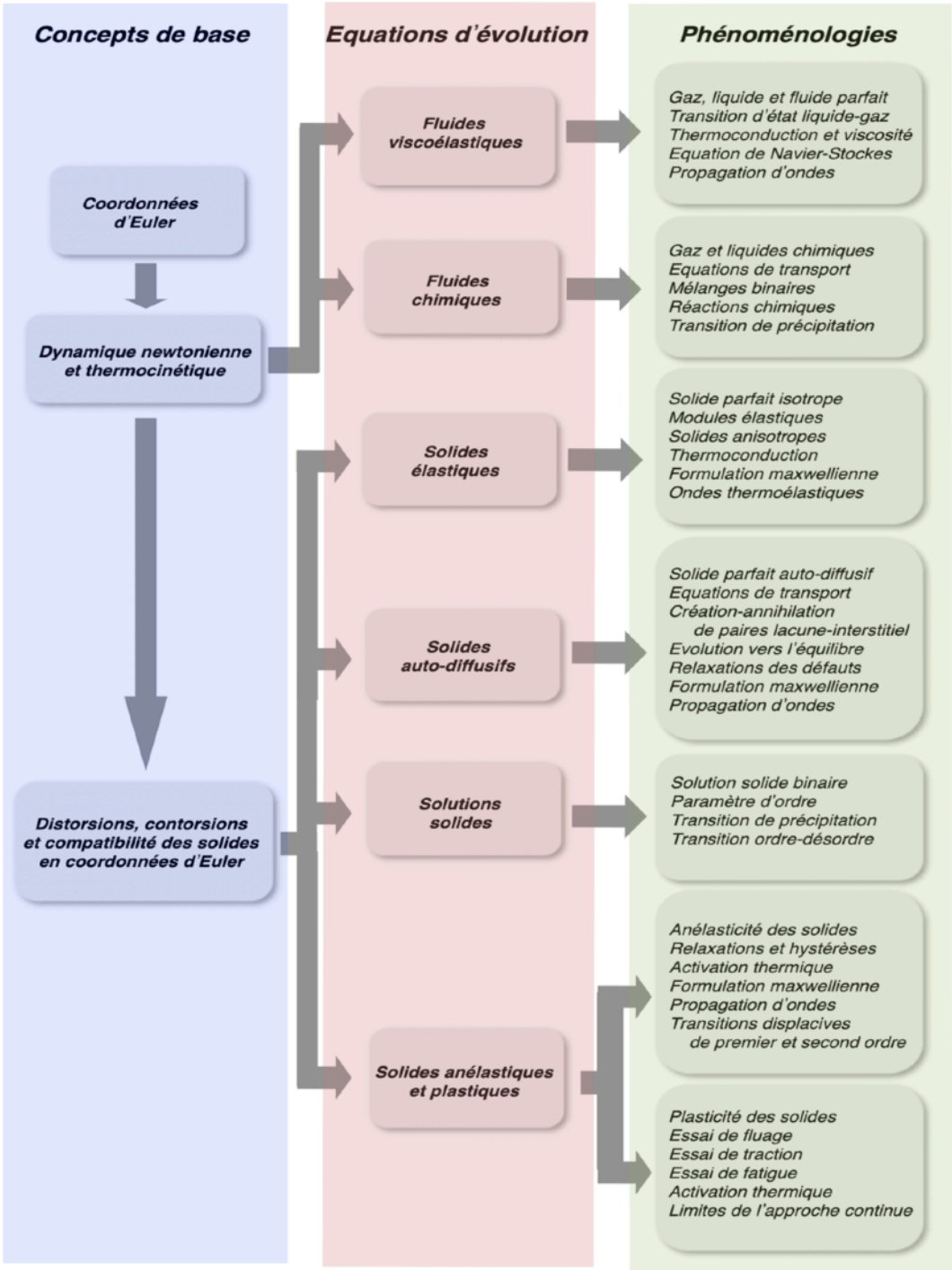


Figure 1.24 - *Les potentialités de la représentation eulérienne des milieux déformables newtoniens*