

ACADÉMIE ROYALE DE BELGIQUE

MÉMOIRES DE LA CLASSE DES SCIENCES

Collection in-8° - 2° série, T. XLIV - Fascicule 1 - 1981

Aspects contemporains de la Science

*Actes du Colloque organisé en commun les 2 et 3 mars 1979
par l'Académie des Sciences de l'Institut de France
et la Classe des Sciences de l'Académie Royale de Belgique*



BRUXELLES - PALAIS DES ACADÉMIES

Dissipation virtuelle et thermodynamique des systèmes ouverts

par Maurice A. BIOT

Dans le cadre des problèmes généraux de stabilité des milieux continus je vais essayer de résumer brièvement certains travaux qui s'échelonnent au cours des vingt-cinq dernières années et qui aboutissent à des conceptions à la fois nouvelles et profondément unitaires en thermodynamique de non-équilibre.

Ces travaux comportent deux développements distincts. Celui qui est le plus récent consiste en une restructuration de la Thermodynamique des systèmes ouverts qui élimine les lacunes fondamentales de la théorie de Gibbs dans sa forme non statistique. On évite notamment le célèbre paradoxe de Gibbs. Ce résultat découle de nouvelles définitions opérationnelles de l'énergie et de l'entropie d'une cellule ouverte, conduisant au concept de « potentiel thermobarique » qui remplace celui de potentiel chimique de Gibbs. Ceci permet d'obtenir des expressions entièrement nouvelles pour l'affinité et la chaleur de réaction en thermodynamique chimique.

L'autre développement qui est beaucoup plus ancien a débuté vers les années 1954-1955. Il est représenté par un « principe de dissipation virtuelle » qui généralise le principe de d'Alembert et s'applique à tous les systèmes thermodynamiques dissipatifs ouverts ou fermés. Faute de temps c'est à ce domaine particulier que je limiterai mon exposé.

Dans le cas particulier d'un milieu continu le principe de dissipation virtuelle s'écrit.

$$\sum_i I_i \delta q_i + \delta_R \mathcal{P} + \int_{\Omega} T \delta s^* d\Omega = \delta W \quad (1)$$

Le milieu est représenté par le domaine Ω qui peut être un domaine initial avant déformation. Le domaine est ouvert. Les termes ont la signification suivante:

— $I_i \delta q_i$ représente le travail virtuel des forces d'inertie au sens de d'Alembert et δq_i sont les variations des coordonnées généralisées au sens de Lagrange. Ces coordonnées ont un caractère beaucoup plus général que celui de bases dans l'espace fonctionnel. Elles sont choisies de façon à satisfaire identiquement les liaisons mécaniques aussi bien que les contraintes thermodynamiques de continuité de flux.

— $\delta_R \mathcal{P}$ est une variation « restreinte » d'un potentiel collectif mixte $\mathcal{P} = U - T_o S + G$ où U et S sont l'énergie et l'entropie collectives, du système ouvert, définis d'une manière opérationnelle, T_o est la température d'un réservoir isotherme adjoint et G est le potentiel dans le champ de forces gravifiques. On a pu montrer dès les années 54-55 que $\mathcal{P}$ est le *potentiel clef* de la thermodynamique de non-équilibre.

— $T \delta s^*$ est la « dissipation virtuelle » due à la production d'entropie δs^* dans l'élément $d\Omega$ et T est la température « locale » définie de manière appropriée.

— δW est le travail virtuel, sur le système, des forces dues à l'environnement et autres que les forces gravifiques déjà comprises dans G .

Le principe variationnel (1) conduit directement aux équations d'évolution des systèmes collectifs ouverts. Elles présentent une forme analogue à celles de Lagrange avec coordonnées collectives généralisées q_i . Celles-ci comprennent le concept de « profondeur de pénétration » qui s'est révélé particulièrement fécond dans les problèmes de diffusion. Les équations d'évolution collectives s'écrivent

$$I_i + R_i + \frac{\partial D}{\partial \dot{q}_i} + \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial q_i} = Q \quad (2)$$

où les termes s'interprètent comme suit:

— I_i est la force d'inertie généralisée exprimable à partir de l'énergie cinétique, plus, éventuellement, des termes complémentaires pour les systèmes ouverts.

— R_i et $\partial D / \partial \dot{q}_i$ sont les forces de dissipation généralisées où D est une forme quadratique en $\dot{q}_i$ avec coefficients fonction de q_i ($\dot{q}_i$ représente la dérivée temporelle de q_i). La fonction de dissipation D incorpore la cinétique de thermodiffusion et la viscosité. Elle s'applique à toute

évolution qui peut être non-linéaire mais proche de la réversibilité. Sinon on doit considérer une force de dissipation plus générale R_i . Pour des réactions chimiques loin de la réversibilité R_i est une affinité généralisée exprimée en fonction des vitesses de réaction $\dot{q}_i$. En mécanique des milieux non linéaires R_i représente les tensions de viscosité non Newtoniennes ou la plasticité, et devient l'équivalent tensoriel de l'affinité. Ceci rejoint le point de vue de De Donder qui comparait l'affinité à la viscosité.

— $\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial q_i}$ est la force motrice due au déséquilibre du système collectif.

— Q_i est la force motrice généralisée thermodynamique et mécanique due à l'environnement et exercée sur le système ouvert. Ces forces peuvent résulter par exemple de concentrations de solutions dans l'environnement, et de températures motrices.

Notons que le principe variationnel (1) conduit aussi bien à la forme non globale des équations c'est-à-dire aux *équations différentielles d'évolution des champs continus avec dérivées spatiales*. Ce résultat marque une différence fondamentale avec les procédés courants qui déduisent les principes variationnels à partir des équations des champs continus supposées connues.

En utilisant l'une et l'autre forme des équations d'évolution on peut traiter d'une manière systématique les bifurcations, les instabilités, les structures dissipatives et les coordonnées internes.

Un cas particulier important est représenté par les équations linéaires d'évolution autour de l'équilibre. Elles sont à coefficients constants et s'écrivent

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{T}}{\partial \dot{q}_i} \right) + \frac{\partial D}{\partial \dot{q}_i} + \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial q_i} = 0 \quad (3) \quad / \dot{q}_i$$

où $\mathcal{T}$ est l'énergie cinétique. Les invariants $\mathcal{T}$ et D sont des formes quadratiques en $\dot{q}_i$ à coefficients constants et $\mathcal{P}$ une forme quadratique en q_i également à coefficients constants. Les variables q_i mesurent l'écart à l'équilibre. Ces équations *unifient un domaine extrêmement vaste de phénomènes* qui sont tous représentés par le même modèle physique. Pour un système stable, c'est-à-dire pour $\mathcal{P} > 0$, ce modèle physique est constitué par des masses ponctuelles reliées par des ressorts et des amortisseurs. Ce modèle comprend les phénomènes d'hérédité, tels que la viscoélasticité, par l'introduction de coordonnées internes.

Un cas très intéressant dans le cadre de notre colloque est celui d'application des équations (3) lorsque $\mathcal{P}$ n'est pas positif défini. Dans ce cas $\mathcal{P}$ peut évoluer vers des valeurs négatives et le système est *instable autour de l'équilibre*. Ceci peut correspondre à un équilibre avec *minimum d'entropie globale du système*. On obtient ainsi des instabilités et des structures dissipatives qui ne sont *pas des bifurcations et n'impliquent pas, contrairement à la croyance, que l'on soit loin de l'équilibre*. Selon un théorème fondamental ces instabilités ne sont jamais oscillantes malgré la présence de forces d'inertie. Un exemple de structures dissipatives de ce type est donné par une couche visqueuse reposant sur une base rigide et surmontée par une autre matière visqueuse de densité plus élevée (Fig. 1). L'interface est instable et des

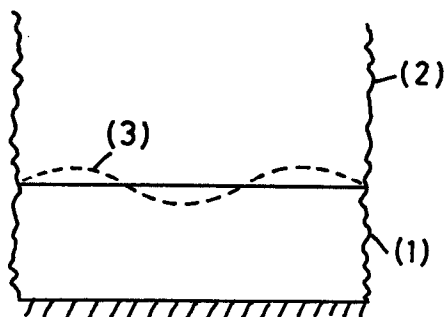


FIG. 1. — Couche visqueuse (1) surplombée par un milieu visqueux pesant plus dense (2). Des ondulations d'amplitude croissante apparaissent à l'interface (3).

ondulations apparaissent croissant exponentiellement avec le temps dont on peut calculer très simplement la longueur d'onde. Le modèle correspond à la théorie proposée par Arrhenius pour expliquer la formation des domes de sel en géophysique. Les résultats donnent des valeurs entièrement compatibles avec les dimensions observées et l'échelle des temps géologiques.

Un autre exemple d'instabilité de ce type est donné par un système stratifié composé de couches alternativement peu visqueuses et très visqueuses. Ces couches d'épaisseur h sont confinées entre deux plans rigides séparés par une distance H . Lorsque ces couches sont soumises à une compression P parallèle à la stratification, elles se plissent par flambage interne avec une longueur d'onde (Fig. 2)

$$L = 1,9\sqrt{hH} \quad (4)$$

indépendante de la compression. Ce phénomène explique une des caractéristiques très générales des plissements géologiques représentée par une structure dissipative. Les valeurs obtenues s'accordent également avec l'échelle des temps géologiques. Dans le cas d'une seule couche enrobée dans un milieu visqueux les longueurs d'onde de plissement prévues par la théorie ont été vérifiées sur modèle réduit en laboratoire. La mécanique des solides déformés à partir d'un état d'équilibre sous tension initiale avec viscoélasticité, basée sur la thermodynamique linéaire a fait l'objet d'une analyse très détaillée dans une monographie publiée en 1965. Un traitement récent plus général du même problème tient compte des réactions chimiques avec diffusion thermomoléculaire.

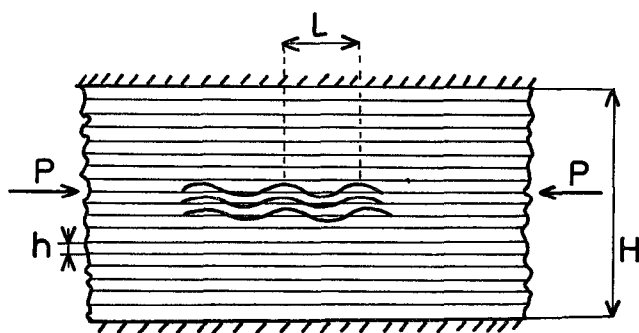


FIG. 2. — Milieu stratifié de couches alternativement peu visqueuses et très visqueuses entre deux plans rigides et soumis à une compression P . Apparition de plissements de longueur d'onde L par « flambage interne »

Pour en revenir aux équations générales, aussi bien non linéaires que linéaires, leur éventail d'application est considérable. Il comprend de nouvelles méthodes d'analyse systématique de transmission de chaleur présentées dans une monographie publiée en 1970. On y introduit de nouveaux concepts tel que la fonction de sillage qui permet de formuler de manière simple et rigoureuse la transmission de chaleur à travers la couche limite d'un fluide en mouvement au contact d'une paroi solide. Citons aussi une formulation nouvelle d'évolution des systèmes géothermiques et des aquifers, ainsi que l'élaboration d'une nouvelle thermodynamique des roches en tant que systèmes poreux ouverts. On a pu aussi obtenir des équations nouvelles et générales de la dynamique des mélanges fluides visqueux avec interdiffusion thermomoléculaire. Les mêmes méthodes ont permis de traiter la dissipation dans les cristaux piézoélectriques. Une application particulièrement

féconde concerne le couplage des réactions chimiques avec les déformations et la diffusion thermomoléculaire dans un champ gravifique qui offrent des possibilités nouvelles en géophysique et en astrophysique. Ces résultats conduisent également à un traitement systématique simplifié du transport actif dans les membranes biologiques.

Après ce trop bref exposé du principe lui-même je voudrais ajouter quelques remarques concernant les aspects fondamentaux des idées qui ont été formulées.

Tout d'abord j'attire l'attention sur le fait que le concept de *dissipation virtuelle ne postule aucunement une cinétique particulière des phénomènes en jeu*. Ceci permet une grande souplesse dans les applications puisqu'on peut introduire par exemple une cinétique conforme au principe d'Onsager aussi bien qu'une cinétique plus générale représentée par des réactions chimiques non linéaires ou par une viscosité non Newtonienne. L'extrême généralité de ce point de vue ouvre un champ très vaste qui n'exclut pas la cinétique quantique.

C'est un point de vue totalement différent des procédés purement formels conventionnels qui ont pour point de départ les propriétés mathématiques des opérateurs différentiels des équations de champ dont on déduit ensuite le principe variationnel correspondant. Ceci implique la connaissance préalable des équations qui gouvernent le champ continu et l'on traite chaque fois les cas particuliers avec leurs conditions aux limites propres. Dans cette optique *le point de vue physique profondément unitaire est perdu*. Par contraste le principe que j'ai énoncé introduit des invariants physiques fondamentaux qui conduisent à la fois aux équations différentielles d'évolution du champ continu aussi bien qu'aux équations globales d'évolution collective en coordonnées généralisées. On obtient même parfois des termes physiques nouveaux dont on ne soupçonnait pas l'existence et dont la présence est essentielle à une formulation variationnelle. *La connaissance préalable des équations différentielles des champs n'est donc pas requise* et l'on peut ainsi traiter globalement des systèmes très complexes qui peuvent comporter des domaines couplés de propriétés physiques très différentes. Un exemple typique en mécanique classique est celui des équations de Lagrange qui gouvernent la dynamique des solides immergés dans un fluide. La méthode est aussi *à la base d'une grande variété de formulations directes par éléments finis* sans passer par les équations des champs continus.

En réalité on peut dire que ces idées ne sont que le prolongement à la thermodynamique de celles développées par Lagrange, d'Alem-

bert et Rayleigh dans le domaine plus restreint de la mécanique. L'emploi de coordonnées généralisées globales pour décrire de manière systématique approximative l'évolution de systèmes continus est connue de longue date et a d'ailleurs été utilisé massivement en technique aéronautique dès le début des années 40 aux États-Unis. Ces coordonnées au sens de Lagrange sont fondamentalement plus générales que celles représentées par un choix de bases en analyse fonctionnelle. Il en résulte par exemple qu'à partir d'un système linéaire on peut obtenir des équations non linéaires plus faciles à résoudre que les équations initiales. En analogie avec la mécanique de Lagrange les coordonnées généralisées sont choisies de manière à satisfaire identiquement les liaisons mécaniques aussi bien que les contraintes globales ou locales de conservation de flux de masse et de chaleur. Ceci résout donc déjà une partie du problème par le choix même des coordonnées et donne à la méthode une remarquable précision avec des moyens de calcul très modeste qui va jusqu'au simple usage de la règle à calcul. Ce caractère de simplicité est très important dans les problèmes industriels où le contact étroit avec la réalité physique, la fiabilité et la rentabilité, jouent un rôle primordial.

Remarquons aussi que les dérivées spatiales en physique macroscopique n'ont qu'un sens conventionnel. Ceci résulte du caractère discontinu de la matière. Du point de vue du physicien il est tout aussi rigoureux de traiter les problèmes macroscopiques en éléments finis avec un nombre fini de coordonnées généralisées sans passer par les équations différentielles du champ. La dimension des éléments finis doit simplement dépasser un certain « seuil de résolution » en deça duquel les lois macroscopiques tombent en défaut. On élimine ainsi l'emploi des notions de mesures, de représentations complètes, et d'autres sources de difficultés attachées aux théories d'espaces fonctionnels. On en déduit aussi des procédés satisfaisants en pratique pour tester la convergence et les erreurs sans appareil mathématique sophistiqué. Par ailleurs les méthodes purement formelles ont souvent tendance à masquer l'aspect profondément unitaire des principes physiques dont elles émanent. Par contre on peut noter que c'est parfois l'inverse qui a lieu et que c'est dans le cadre des applications physiques que l'on découvre des généralisations de caractère abstrait. Je pense en particulier à la formulation variationnelle généralisée en termes d'opérateurs symboliques d'Heaviside et de convolutions correspondantes, qui a servi de catalyseur à de nombreux développements plus récents.

En résumé l'extension du principe de d'Alembert à la thermodynamique est obtenue en figeant à la fois les forces d'inerties et les forces dissipatives. Ceci, avec l'adjonction de nouveaux concepts que je n'ai pu que mentionner et qui complètent la thermodynamique de Gibbs, conduit directement aux équations d'évolution des systèmes ouverts.

Ce point de vue contraste avec les méthodes qui postulent ces équations d'évolution et en déduisent les propriétés variationnelles pour chaque cas par des manipulations formelles dans un contexte d'espaces fonctionnels. *Ces méthodes formelles ont un rôle à jouer mais il ne doit pas être exclusif.* Éloignées du contexte physique elles conduisent parfois de ce fait à des erreurs graves dans les applications et sont préjudiciables à la compréhension intuitive profonde des phénomènes en jeu aussi bien qu'à leur analyse par des méthodes plus simples et plus directes. Concernant les applications, à notre époque de pénurie d'énergie et de problèmes économiques je crois inutile d'insister sur l'importance que présentent des méthodes globales d'analyse du bilan énergétique des systèmes ouverts que constituent les structures industrielles complexes.