

Contents lists available at ScienceDirect

C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I



www.sciencedirect.com

Problèmes mathématiques de la mécanique/Calcul des variations

Variation de forme pour une équation instationnaire du 4ème ordre dans un modèle de dislocations

Shape optimization for a time-dependent 4th-order equation in a dislocation model

Nicolas Van Goethem

Universidade de Lisboa, Faculdade de Ciências, Departamento de Matemática, Centro de Matemática e Aplicações Fundamentais, Av. Prof. Gama Pinto 2, 1649-003 Lisboa, Portugal

INFO ARTICLE

Historique de l'article : Reçu le 9 décembre 2010 Accepté après révision le 22 juillet 2011 Disponible sur Internet le 17 août 2011

Présenté par Olivier Pironneau

RÉSUMÉ

Nous présentons un modèle thermodynamique simple et inédit pour décrire l'évolution d'une phase cristalline disloquée dans un monocristal et analysons la force configurationnelle exercée à l'interface, cabable de déplacer le front de cette zone à travers un processus dissipatif stable. Cette force dépend de la courbure (moyenne) de l'interface mais aussi de la courbure (de Gauss) de la métrique non Riemannienne sous-jacente.

© 2011 Académie des sciences. Publié par Elsevier Masson SAS. Tous droits réservés.

ABSTRACT

A simple novel thermodynamic model is given to describe the evolution of a dislocation phase in a single crystal. The main result is the expression of a configurational force acting on the dislocation front and driving the dislocated region to vanish, under a stable dissipative process. This force depends on the curvature of the front and on the (scalar) curvature of the underlying non-Riemannian metric.

© 2011 Académie des sciences. Publié par Elsevier Masson SAS. Tous droits réservés.

Abridged English version

The single crystal Ω is decomposed into a dislocated Ω_0 and non-dislocated region Ω_1 separated by an interface Σ . By dislocated we simply mean that the elastic strain is incompatible, whose trace u we consider as state variable. A simple expression of the internal dissipation whose imposed positivity and time decrease together yield a 4th-order state equation, $\dot{u}_i + \gamma_i \Delta^2 u_i = 0$ on $\Omega_i \times [0, t]$. We follow Hill-Mandel principle of maximal dissipation, and hence maximize *locally* a dissipated energy $J_{\Omega}^t(u)$. To provide the shape derivative $D_{\Sigma} J_{\Omega}^t$, the method of the Lagrangian is considered with an appropriate choice of the adjoint equation. A configurational force $F_{\Sigma}(t)$ depending on the interface (mean) and metric (Gauss) curvatures is found, which is able to displace the front of the dislocated region under a stable thermodynamic process. Remarkable relations are then observed at equilibrium.

1. Modèle thermodynamique scalaire à deux phases dans un mono cristal disloqué

Nous considérons un monocristal représenté par l'ouvert Ω qui, pour tout temps $\tau \in [0, t]$ se décompose en un sousdomaine disloqué Ω_0 et non disloqué $\Omega_1 = \Omega \setminus \overline{\Omega}_0$ séparés par une interface Σ que nous supposons immobile dans [0, t].¹

Adresse e-mail : vangoeth@ptmat.fc.ul.pt.

¹ Le temps t est donc la variable «lente» qui régit le mouvement de la zone disloquée, insensible en revanche aux fluctuations de la variable rapide τ dont dé pendent les variables d'états du modèle.

Par zone disloquée nous entendons exactement la propriété suivante. Soit $\varepsilon_0^e \in C^{\infty}(\Omega_0)$ la déformation thermo-élastique supposée infinitésimale, telle que son incompatibilité, $\operatorname{inc}(\varepsilon_0^e) := \nabla \times \varepsilon_0^e \times \nabla$, est non nulle (où $\nabla \times$ représente le rotationnel appliqué aux lignes, et $\times \nabla$ aux colonnes de la matrice). Par la décomposition de Helmholtz (cf. [10]), nous pouvons choisir ε_0^e solénoïdale (i.e., à divergence nulle). De plus, il existe une déformation (non triviale) ε_0^p telle que $\operatorname{inc}(\varepsilon_0^e + \varepsilon_0^p) = 0$, de sorte qu'il existe un déplacement U (défini à un déplacement rigide près, fixé par les conditions frontières du problème en déplacements) tel que $\nabla^S U = \varepsilon_0^e + \varepsilon_0^p$ est la déformation compatible totale.

La densité tensorielle classique de dislocations Λ , sera remplacée par la *contorsion* $\kappa := \Lambda - \frac{1}{2} \operatorname{tr} \Lambda$ liée à l'incompatibilité par la formule $\operatorname{inc}(\varepsilon_0^e) = \kappa \times \nabla - \frac{1}{2} \operatorname{tr}(\kappa \times \nabla)$ où l'on reconnaîtra au second membre la forme apparaissant dans les équations de champ d'Einstein. En outre, on identifiera $\kappa \times \nabla$ avec le tenseur de Ricci de la métrique élastique $g := I - 2\varepsilon^e$, et noterons R sa trace (pour plus de détails sur le modèle, cf. [10,11]).

Nous considérons un modèle thermodynamique scalaire faisant intervenir la *dissipation interne* $\mathcal{D} = \int_{\Omega_0} v \operatorname{inc}(\varepsilon_0^e) \cdot \dot{\varepsilon}_0^e dx$ où $v(x) \ge 0$ représente une tension locale, où le point indique sans risque de confusion soit une dérivée temporelle totale soit un produit scalaire.

Une condition suffisante pour garantir le second principe de la Thermodynamique (i.e., la positivité de la dissipation) est que le flux de déformation élastique vérifie $\dot{\varepsilon}_0^e = \frac{\alpha_0}{2} \operatorname{inc}(\varepsilon_0^e)$ où $\alpha_0(\tau) \ge 0$ est un scalaire avec les dimensions d'une viscosité cinématique.

D'autre part, le processus sera *stable* si la dissipation est décroissante en temps. On montre que cela implique que $\int_{\Omega_0} v \operatorname{inc}(\dot{\varepsilon}_0^e) \cdot \dot{\varepsilon}_0^e \, dx \leq 0$, qui sera vérifiée dès lors que le taux de déformation obéit à la loi « harmonique » $\lambda_{\Omega_0} \dot{\varepsilon}_0^e = -\operatorname{inc}(\dot{\varepsilon}_0^e)$ où $\lambda_{\Omega_0} \geq 0$ est la valeur propre de l'opérateur – inc sur Ω_0 . Introduisons la fonction caractéristique χ_i de Ω_i , ainsi que $\alpha_{\chi}^{\epsilon} := \alpha_0^{\epsilon} \chi_0 + \alpha_1^{\epsilon} \chi_1 \geq 0$ et $\lambda_{\chi}^{\epsilon} := \lambda_0^{\epsilon} \chi_0 + \lambda_1^{\epsilon} \chi_1 > 0$ avec $\lambda_1^{\epsilon} \to 0$ et $\alpha_1^{\epsilon} \to \infty$ lorsque $\epsilon \to 0$ (ainsi que $\alpha_0^{\epsilon} = \alpha_0$ et $\lambda_0^{\epsilon} = \lambda_{\Omega_0}$). On obtient les équations tensorielles (auquelles on adjoindra des conditions initiales, en t = 0, frontière, sur $\partial \Omega$, et de transmission, sur Σ , afin qu'elles soient bien posées) :

$$2\lambda_i^e \dot{\varepsilon}_i^e + \operatorname{inc}(\alpha_i^e \operatorname{inc}(\varepsilon_i^e)) = 0 \quad \operatorname{dans} \, \Omega_i \times [0, t] \, (i = 0, 1), \tag{1}$$

où Ω_1 est modélisé par un matériau fictif «approché» pour $\epsilon > 0$. On prendra finalement $\epsilon \to 0$ pour obtenir le matériau réel dans Ω_1 .²

2. Equations du modèle

La frontière $\partial \Omega$ se compose de deux bords disjoints Γ_D et Γ_N . Introduisons les espaces fonctionnels $V(\Omega) := \{u \in H^2(\Omega) \text{ t.q. } u = \partial_N u = 0 \text{ sur } \Gamma_D\}$ ainsi que $X^t(\Omega) := L^2(0, t; V(\Omega)) \cap H^1(0, t; V'(\Omega))$ et $X^t_A(\Omega) := \{u \in X^t(\Omega) \text{ t.q. } u(0) = A\}$.

La variable d'Etat est $u = u_0 \chi_0 + u_1 \chi_1$ avec $u_i := \operatorname{tr} \varepsilon_i^e$ solution de l'équation scalaire obtenue en prenant la trace de (1), en notant que pour tout ε solénoïdal, $\operatorname{trinc}(\varepsilon) = \Delta \operatorname{tr} \varepsilon$. Soit $u^0 \in V(\Omega)$ la condition initiale. L'équation d'Etat sous forme faible [3] revient à chercher $u \in X_{u^0}^t(\Omega)$ satisfaisant

$$0 = \mathcal{A}_{\Omega;\lambda_{\chi}^{\epsilon}}^{\epsilon}(u,\varphi) - \int_{0}^{t} \int_{\Gamma_{0N}}^{t} \alpha_{0} V \partial_{N} \varphi \, \mathrm{d}S(x) \, \mathrm{d}\tau \quad \forall \varphi \in X^{t}(\Omega), \quad \text{avec}$$

$$\tag{2}$$

$$\mathcal{A}_{\Omega;\lambda_{\chi}^{\epsilon}}^{\epsilon}(u,v) := \int_{0}^{t} \langle 2\lambda_{\chi}^{\epsilon} \dot{u}(\tau), v \rangle_{V'(\Omega), V(\Omega)} \, \mathrm{d}\tau + \int_{0}^{t} \left(\alpha_{\chi}^{\epsilon} \Delta u(\tau), \Delta v \right)_{L^{2}(\Omega)} \, \mathrm{d}\tau \tag{3}$$

la forme bilinéaire sur $X^t(\Omega) \times X^t(\Omega)$, et la source $V \in L^2(0, t; L^2(\Gamma_{0N}))$. Par le théorème de Lax-Milgram (cf. la généralisation au cas parabolique [6]), le problème est bien posé et admet une solution unique dont la régularité dépend de celles du bord, de V et de u^0 . La forme forte associée est une EDP instationnaire du 4ème ordre :

$$2\lambda_{\chi}^{\epsilon}\dot{u} + \Delta(\alpha_{\chi}^{\epsilon}\Delta u) = 0 \quad \text{sur } \Omega \times [0, t], \tag{4}$$

où $\Delta u = V \delta_{i0}$ sur $\Gamma_{iN} := \Gamma_N \cap \overline{\Omega}_i$, $\partial_N \Delta u = 0$ sur Γ_N , $u = \partial_N u = 0$ sur Γ_D , et $u(0) = u^0$.

Conformément au principe de Hill-Mandel [8] nous postulons que le système tend à adopter une configuration maximisant localement (i.e., par rapport à Σ) l'énergie dissipée :

$$J_{\Omega}^{t}(u) = \int_{0}^{t} \mathrm{d}\tau \int_{\Omega_{0}} \frac{\alpha_{0}\nu\beta}{2} \left| \mathrm{tr}\operatorname{inc}(\varepsilon_{0}^{e}) \right|^{2} \mathrm{d}x = \int_{0}^{t} \mathrm{d}\tau \int_{\Omega_{0}} j^{\tau}(u) \,\mathrm{d}x,\tag{5}$$

où $j^{\tau}(u) = \zeta |\Delta u(\tau)|^2$ avec $\zeta := \frac{\nu \alpha_0 \beta}{2}$ et $\beta \ge 0$ (en pratique nous prendrons $\beta = 2$).

² Remarquons que $\lambda_1^{\epsilon} \to 0$ et $\alpha_1^{\epsilon} \to \infty$ laissent $\dot{\varepsilon}_1^{e}$ arbitraire et $inc(\varepsilon_1^{e}) \to 0$ dans Ω_1 lorsque $\epsilon \to 0$.

Cette maximisation nécessitera un état adjoint, défini comme $p \in X^t(\Omega)$ solution de

$$0 = \mathcal{A}_{\Omega;\lambda_{\chi}^{\epsilon}}^{\epsilon}(\varphi, p) + \int_{0}^{t} \langle Dj^{\tau}(u), \varphi \rangle d\tau \quad \forall \varphi \in X_{0}^{t}(\Omega)$$
(6)

avec la dérivée de Fréchet de j^{τ} en u dans la direction $\varphi \in V(\Omega)$, $\langle Dj^{\tau}(u), \varphi \rangle = \int_{\Omega_0} 2\zeta \Delta u \Delta \varphi \, dx$. L'EDP associée est du 4ème ordre et rétrograde en temps :

$$2\lambda_{\chi}^{\epsilon}\dot{p} - \Delta(\alpha_{\chi}^{\epsilon}\Delta p) = 2\zeta\chi_{0}\Delta^{2}u \quad \text{sur } \Omega \times [0, t]$$
⁽⁷⁾

avec $\Delta p = \partial_N \Delta p = 0$ sur Γ_N , $p = \partial_N p = 0$ sur Γ_D , et p(t) = 0 (cf. Section 3).

3. Calcul de la dérivée de forme par la méthode du Lagrangien

Nous utiliserons la méthode du Lagrangien telle que proposée par Céa [4], et appliquée dans [7,1,2]. Le Lagrangien \mathcal{L} consiste en la somme de la fonction coût et de la formulation faible de l'Etat dans chaque sous-domaine, où la fonction test p joue le rôle d'un multiplicateur de Lagrange. Soit $v_i \in X_{i,0}^t(\Omega_i)$ et $q_i \in X^t(\Omega_i)$. Introduisons

$$\mathcal{L}(\mathbf{v}_{i}, q_{i}, \Sigma; \lambda_{i}^{\epsilon}) := J_{\Omega}^{t}(\mathbf{v}) + \sum_{i} \mathcal{A}_{\Omega_{i};\lambda_{i}^{\epsilon}}^{\epsilon}(\mathbf{v}_{i}, q_{i}) - \int_{0}^{1} d\tau \left\{ \int_{\Gamma_{0N}} \alpha_{0} V \partial_{N} q_{0} dS - \frac{1}{2} \int_{\Sigma} \left[\left(\alpha_{1}^{\epsilon} \partial_{N} \Delta v_{1} + \alpha_{0} \partial_{N} \Delta v_{0} \right) (q_{0} - q_{1}) - \left(\alpha_{0} \Delta v_{0} + \alpha_{1}^{\epsilon} \Delta v_{1} \right) (\partial_{N} q_{0} - \partial_{N} q_{1}) \right]_{p \leftrightarrow v} dS \right\},$$

où $[E(v,q)]_{q\leftrightarrow v} := E(v,q) + E(q,v)$. La dérivée de \mathcal{L} par rapport à q_i en $q_i = p_i$ donne l'Etat (2) avec ses conditions de transmission sur Σ (i.e., $\alpha_0 \Delta u_0 = \alpha_1^{\epsilon} \Delta u_1$ et $\alpha_0 \partial_N \Delta u_0 = \alpha_1^{\epsilon} \partial_N \Delta u_1$). On vérifie aussi que $J_{\Omega}(u_0) = \mathcal{L}(u_0, u_1, q_0, q_1, \Sigma; \lambda_{\Omega_0})$. L'Etat adjoint (6), avec ses conditions de transmission, est obtenu quant à lui par en dérivant \mathcal{L} par rapport à v_i , pour $v_i = u_i$. L'intérêt de la méthode est que la dérivée de forme de $J_{\Omega}^t(u)$ dans la direction du champ $\theta \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}^3; \mathbb{R}^3)$ s'obtient par deux simples dérivées partielles :

$$D_{\Sigma} J_{\Omega}^{t}(\theta) = \left\langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Sigma} (u_{i}, q_{i}, \Sigma; \lambda_{i}^{\epsilon}), \theta \right\rangle \Big|_{q=p} + \sum_{i} \left\langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda_{i}^{\epsilon}} (u_{i}, q_{i}, \Sigma; \lambda_{i}^{\epsilon}) D_{\Sigma} \lambda_{i}^{\epsilon}, \theta \right\rangle \Big|_{q=p},$$

$$\tag{8}$$

où le second terme fait apparaître une formule de type Hadamard. Rappelons enfin les expressions classiques [9] de dérivée de forme d'une intégrale de volume $J^V := \int_V F \, dx$ et de surface $J^S := \int_S f \, dS$, suivant un champ θ Lipschitzien :

$$\langle DJ^{V},\theta\rangle = \int_{\partial V} F\theta \cdot N \,\mathrm{d}S \quad \mathrm{et} \quad \langle DJ^{S},\theta\rangle = \int_{S} (H+\partial_{N})f\theta \cdot N \,\mathrm{d}S + \int_{\partial S} f\theta \cdot n \,\mathrm{d}L,$$
(9)

en supposant V et S suffisamment réguliers et où N est la normale à la surface, H sa courbure moyenne, et n un vecteur unitaire tangent à S tel que $n \perp N$ et $n \perp L$ avec L le vecteur tangent à ∂S .

4. Expression complète de la dérivée de forme

Supposons u^0 assez régulière pour que $u_0 \in H^1(0,t;V)$ et intégrons deux fois $\int_{\Omega_0} \zeta |\Delta u_0|^2 dx$ par parties en tenant compte de (2). Dès lors $\int_{\Omega} (u) s'$ exprime comme

$$\mathcal{L}(u_{0}, u_{1}, q_{0}, q_{1}, \Sigma; \lambda_{i}^{\epsilon}) = \int_{0}^{t} d\tau \int_{\Omega_{0}} \zeta \frac{-\lambda_{0} u_{0} \dot{u}_{0}}{\alpha_{0}} dx + \sum_{i} \mathcal{A}_{\Omega_{i};\lambda_{i}^{\epsilon}}^{\epsilon}(u_{i}, q_{i})$$

$$- \int_{0}^{t} d\tau \left\{ \int_{\Gamma_{0N}} \alpha_{0} V \partial_{N} q_{0} dS - \frac{1}{2} \int_{\Sigma} \left(\alpha_{1}^{\epsilon} \partial_{N} \Delta u_{1} + \alpha_{0} \partial_{N} \Delta u_{0} \right) (q_{0} - q_{1}) dS$$

$$+ \frac{1}{2} \int_{\Sigma} \left(\alpha_{0} \Delta u_{0} + \alpha_{1}^{\epsilon} \Delta u_{1} \right) (\partial_{N} q_{0} - \partial_{N} q_{1}) dS$$

$$+ \int_{\Sigma} \zeta (u_{0} \partial_{N} \Delta u_{0} - \Delta u_{0} \partial_{N} u_{0}) dS \right\} = J_{\Omega}^{t}(u).$$
(10)

On obtient finalement, par application de (9) à (8) et (10), en prenant $q_i = p_i$ et $\epsilon \to 0$:

. .

$$D_{\Sigma} J_{\Omega}^{t,1} := \left\langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Sigma} (u_{0}, u_{1}, p_{0}, p_{1}, \Sigma; \lambda_{i}^{\epsilon}), \theta \right\rangle \Big|_{q=p}$$

$$= \int_{\Gamma_{0N}} \frac{\nu \lambda_{\Omega_{0}} \beta}{2} ((u_{0}^{0})^{2} - u_{0}^{2}(t)) dS_{\theta} + \int_{0}^{t} d\tau \left\{ \sum_{i} \int_{\Gamma_{iN}} 2\lambda_{i}^{\epsilon} \dot{u}_{i} p_{i} dS_{\theta} + \int_{\Gamma_{0N}} \alpha_{0} V (\partial_{S}^{2} p_{0} - H \partial_{N} p_{0}) dS_{\theta} \right.$$

$$+ \int_{\Gamma_{0D}} \alpha_{0} \Delta u_{0} \Delta p_{0} dS_{\theta} + \int_{\Sigma} \lambda_{\Omega_{0}} \dot{u} p dS_{\theta} + \int_{\Sigma} (j^{\tau} (u_{0}) - \zeta H \{u, \Delta u_{0}\}_{N}) dS_{\theta}$$

$$+ \int_{\partial \Sigma \cap \Gamma_{0N}} \zeta \{u, \Delta u_{0}\}_{S^{2}} N \cdot \theta dL + \int_{\partial \Sigma} \lambda_{\Omega_{0}} \dot{u} p \theta \cdot n dL \Big\},$$
(11)

avec *S* tangent à Σ , $\partial \Sigma$ le bord de Σ , $dS_{\theta} := \theta \cdot N dS$ et le «crochet différentiel» d'ordre $k \in \mathbb{N}$, $\{u, v\}_{A^k} := u(A \cdot \nabla)^k v - v$ $v(A \cdot \nabla)^k u$, et où l'on a considéré que $\lambda_1^{\epsilon} \to 0$. Donnons à titre indicatif le calcul d'un seul des termes de (10), la forme bilinéaire :

$$\left\langle D_{\Sigma} \mathcal{A}_{\Omega_{i};\lambda_{i}^{\epsilon}}^{\epsilon}(u_{i}, p_{i}), \theta \right\rangle = \int_{0}^{t} \int_{\Gamma_{iN}} 2\lambda_{i}^{\epsilon} \dot{u}_{i} p_{i} \theta \cdot N \, \mathrm{dS} \, \mathrm{d\tau} + \int_{0}^{t} \int_{\Gamma_{iD} \cup \Gamma_{iN}} \alpha_{i}^{\epsilon} \Delta u_{i} \Delta p_{i} \theta \cdot N \, \mathrm{dS} \, \mathrm{d\tau} \\ + \int_{0}^{t} \int_{\Sigma} (\lambda_{\Omega_{0}} - \lambda_{1}^{\epsilon}) \dot{u} p \theta \cdot N \, \mathrm{dS} \, \mathrm{d\tau} + \int_{0}^{t} \int_{\Sigma} \alpha_{0} \Delta u_{0} \Delta p_{0} \left(1 - \frac{\alpha_{0}}{\alpha_{1}^{\epsilon}}\right) \theta \cdot N \, \mathrm{dS} \, \mathrm{d\tau}$$
(12)

où, pour obtenir (11), on a utilisé les conditions de transmissions pour u et p et pris $\lambda_1^{\epsilon} \to 0$ et $\alpha_1^{\epsilon} \to \infty$ lorsque $\epsilon \to 0$ (le dernier terme de (12) se compense avec la dérivée d'un terme d'interface de (10)). Par (8), l'expression complète de $D_{\Sigma} J_{\Omega}^{t}$ s'obtient en additionnant le premier terme donné par (11) et le second donné par

$$D_{\Sigma} J_{\Omega}^{t,2} := \sum_{i} \left\langle \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda_{i}^{\epsilon}} (u_{i}, q_{i}, ; \lambda_{i}^{\epsilon}) D_{\Sigma} \lambda_{i}^{\epsilon}, \theta \right\rangle \Big|_{q=p} = \int_{0}^{t} d\tau \left\{ \sum_{i} \langle D_{\Sigma} \lambda_{i}^{\epsilon}, \theta \rangle \int_{\Omega_{i}} \lambda_{i}^{\epsilon} \dot{u}_{i} p_{i} dx \right\}$$
(13)

avec (cf. [5]) $\langle D_{\Sigma} \lambda_i^{\epsilon}, \theta \rangle = \frac{1}{\|u_i\|_2} (\int_{\Gamma_{iN} \cup \Sigma} (2Hu_i \partial_N u_i - \lambda_i^{\epsilon} u_i^2 - |\partial_N u_i|^2 + |\partial_S u_i|^2) dS_{\theta}).$

La dérivée de forme d'une inclusion $\omega_0 \in \Omega$ est obtenue lorsque $\theta = 0$ sur $\partial \Omega$ pour une interface $\Sigma = \partial \omega_0$ sans bord. Par (11) et (13), il vient l'expression

$$D_{\Sigma} J_{\Omega}^{t} = \int_{0}^{t} \mathrm{d}\tau \left(\int_{\Sigma} \lambda_{\omega_{0}} \dot{u} p \, \mathrm{d}S_{\theta} + \int_{\Sigma} \left(j^{\tau} (u_{0}) - \zeta H\{u, \Delta u_{0}\}_{N} \right) \mathrm{d}S_{\theta} \right) + D_{\Sigma} J_{\Omega}^{t,2}, \tag{14}$$

En supposant les champs assez réguliers et sachant que p(t) = 0 il vient par un développement de Taylor au premier ordre en t une force thermodynamique $F_{\partial \omega_0}(t) := (j^t(u_0) - \zeta H\{u, \Delta u_0\}_N(t))N$. A l'équilibre thermodynamique on a $F_{\partial \omega_0} = 0$ ce qui entraîne $j^t(u_0) = \zeta H\{u, \Delta u_0\}_N$ lorsque $t \to 0$. Notons que cette dernière expression donne la courbure de la zone disloquée à l'équilibre. En particulier $H \rightarrow 0$ si le crochet dissipatif tend vers l'infini.

5. Perspectives du modèle

Ce modèle, simple et inédit, entend représenter le cristal disloqué comme un problème à deux phases séparées par une interface sur laquelle s'exerce une densité de force (configurationnelle, ou thermodynamique) $F_{\Sigma}(t)$ dépendant de la déformation élastique et de son incompatibilité. Il requiert le calcul d'une dérivée de forme $D_{\Sigma} J_{\Omega}^{t}$ dont l'expression (cf. (13)-(14)) fait apparaître comme grandeurs motrices la courbure de l'interface, H, et la courbure scalaire de la métrique élastique sousjacente, c'est-à-dire la trace du tenseur de Ricci $R = tr \kappa \times \nabla = \Delta u_0$, lui-même directement lié à la densité de dislocations, à son gradient et au gradient de température. Cette force s'applique perpendiculairement à $\Sigma(t)$ et son intensité est telle que la dissipation J_{Ω}^{t} est maximisée (localement), satisfaisant ainsi au principe de dissipation maximale de Hill–Mandel [8]. A l'équilibre on obtient une relation remarquable donnant la courbure de $\Sigma(t)$ en fonction de tr ε_{0}^{e} , tr inc ε_{0}^{e} et R:

$$H = \frac{|\operatorname{tr}\operatorname{inc}\varepsilon_0^e|^2}{\{\operatorname{tr}\varepsilon_0^e, R\}_N}.$$

L'Etat *u* obéit à une équation parabolique en temps court laissant Ω_0 invariant dans [0, t]. Pour tenir compte de changements de phases dans [0, t] nous pourrions étendre ce modèle en introduisant un potentiel non-linéaire *W* et généraliser (7) en s'inspirant du modèle de Van der Waals–Cahn–Hilliard :

$$2\lambda_{\chi}^{\epsilon}\dot{u} + \Delta \left(\alpha_{\chi}^{\epsilon} \Delta u - W'(u) \right) = 0 \quad \text{sur } \Omega \times [0, t].$$

Deux autres des étapes suivantes seraient d'analyser la version tensorielle complète (1) et également se poser la question de la nucléation de zones disloquées, ce qui nécessiterait de faire appel au concept de dérivée topologique (cf. [2,3]).

Références

- [1] G. Allaire, Conception optimale de structures, Collection Mathématiques et Applications, vol. 58, Springer, 2007.
- [2] G. Allaire, F. Jouve, N. Van Goethem, Damage and fracture evolution in brittle materials by shape optimization methods, J. Comput. Phys. 230 (12) (2011) 5010–5044.
- [3] S. Amstutz, T. Takahashi, B. Vexler, Topological sensitivity analysis for time-dependent problems, ESAIM Control Optim. Calc. Var. 14 (03) (2008) 427– 455.
- [4] J. Céa, Conception optimale ou identification de formes, calcul rapide de la dérivée de la fonction coût, Math. Model. Numer. Anal. 20 (3) (1986) 371-402.
- [5] P. Grinfeld, Hadamard's formula inside and out, J. Optim. Theory Appl. 145 (9) (2010) 654-690.
- [6] J.-L. Lions, E. Magenes, Problèmes aux limites non homogènes et applications, Dunod, Paris, 1969.
- [7] O. Pantz, Sensibilité de l'équation de la chaleur aux sauts de conductivité, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 341 (2005) 333-337.
- [8] J. Mandel, Plasticité Classique et Viscoplasticité, CISM Lecture Notes, Springer-Verlag, 1971.
- [9] F. Murat, S. Simon, Etudes de problèmes d'optimal design, in : Lecture Notes in Computer Science, vol. 41, Springer-Verlag, Berlin, 1976, pp. 54-62.
- [10] N. Van Goethem, Strain incompatibility in single crystals: Kröner's formula revisited, J. Elasticity 103 (1) (2011) 95-111.
- [11] N. Van Goethem, The non-Riemannian dislocated crystal: A tribute to Ekkehart Kröner (1910–2000), J. Geom. Mech. 2 (3) (2010) 303–320.