

# Explosion en temps fini de la solution d'un problème d'évolution de surface de film mince

M. Boutat<sup>1</sup>, S. Hilout<sup>2</sup>, V. Lods<sup>1</sup>, Y. D'Angelo<sup>3</sup>

## Abstract

In this note, we are interested in the evolution of a surface of a crystal structure, constituted by an elastic substrate and a thin film. If the crystal is constrained, some morphological instabilities may appear. To study these instabilities, we made use of the model developed in [5]. In [5], the map  $f$  of the free surface of the film satisfies a parabolic partial differential equation, depending on the elastic displacement of the substrate. For simplicity, the substrate is assumed to be linearly elastic and the structure to be infinite in one direction. Then, under some formal asymptotic assumptions, a formal expansion of the displacement can be determined after some appropriate scalings, allowing to derive a simplified parabolic nonlinear equation. We give here some results about the finite-time blow-up and the existence and uniqueness of the solution in an appropriate space. To validate the theoretical results, we also performed some numerical simulations (see figure (1)) using a pseudo-spectral method and also compute the initial-profile dependent critical value of the parameter  $\theta$  involved in the nonlinear equation (see system (4)).

**Résumé** Nous considérons un cristal, constitué d'un substrat élastique et d'un film de faible épaisseur. Le cristal étant sous contrainte, sa surface devient instable et des rugosités peuvent apparaître. Pour étudier ces instabilités, nous utilisons le modèle développé dans [5]. La carte  $f$  de la surface libre du film vérifie alors une équation aux dérivées partielles parabolique, qui fait intervenir le vecteur déplacement de la structure. Pour simplifier, nous supposons que la structure est linéairement élastique et infinie dans une direction. Alors, sous des hypothèses asymptotiques formelles, et avec des changements d'échelle appropriés, nous obtenons un développement formel du vecteur déplacement, ce qui nous permet de simplifier l'équation parabolique satisfaite par  $f$ . Nous présentons ici des résultats d'existence locale, d'unicité et d'explosion en temps fini de la solution du problème d'évolution de la surface du film. Nous effectuons également des validations numériques en utilisant une méthode pseudo-spectrale, bien adaptée au cas envisagé, et déterminons numériquement la valeur critique du paramètre  $\theta$  (dépendant de la condition initiale) intervenant dans l'équation 4.

## 1 Position du problème

Nous considérons un cristal élastique, composé d'un film mince et d'un substrat. A l'instant  $\tau$ , le solide occupe une région  $\Omega_f(\tau)$  où :  $f : [0, \infty[ \times [0, l_1] \times [0, l_2] \rightarrow \mathbb{R}$  et  $\Omega_f(\tau) = \{(x, y, z), 0 \leq x \leq l_1; 0 \leq y \leq l_2; 0 \leq z \leq f(\tau; x, y)\}$ . Le film est constitué par les points de  $\Omega_f(\tau)$  tels que  $a \leq z \leq f(\tau, x, y)$  où  $a$  est un réel strictement positif supposé indépendant du temps.

D'après le modèle détaillé dans [5], l'évolution de la surface libre est régie par l'équation :

$$\frac{\partial f}{\partial \tau} = D(1 + |\nabla f|^2)^{\frac{1}{2}} \nabla_s^2 (E(u; f) + \gamma K(u; f)) \quad (1)$$

où  $D$  est le coefficient de diffusion,  $\nabla f$  désigne le gradient de  $f$  par rapport aux variables  $(x; y)$ ;  $\nabla_s f = \nabla f / (1 + |\nabla f|^2)^{\frac{1}{2}}$  est le gradient de surface;  $E(u; f)$  est l'énergie élastique de la structure définie en tout point de  $\Omega_f(\tau)$  par  $E(u; f) = 1/2 (\sigma(u) - \sigma_0)(e(u) - e_0)$ , où  $e(u), \sigma(u)$  sont respectivement les tenseurs de déformation linéarisée et des contraintes, et  $e_0, \sigma_0$  sont des tenseurs

---

<sup>1</sup>Laboratoire d'Applications des Mathématiques, Université de Poitiers, Boulevard Marie et Pierre Curie, Téléport 2, BP 30179, 86962 Futuroscope Chasseneuil cedex, France

<sup>2</sup>Département de Mathématiques Appliquées et Informatique, Faculté des Sciences et Techniques, B.P 523, Béni-Mellal, Maroc

<sup>3</sup>Laboratoire de Combustion et de Détonique, UPR 9028 CNRS, ENSMA, BP 109, 86960 Futuroscope, France

constants, modélisant la contrainte initiale. Enfin,  $K(u; f)$  est la courbure du film, calculée dans l'état de référence (cf. [5]), qui dépend de  $f$  et du déplacement  $u$ . Il s'agit donc d'étudier le comportement de  $f$ ,  $f(0; \cdot, \cdot)$  étant connu.

## 2 Hypothèses simplificatrices

Le solide étant supposé infini dans la direction  $Oy$ , le vecteur déplacement et la fonction  $f$  deviennent indépendants de  $y$  et la composante  $u_2$  le long de l'axe  $Oy$  du déplacement est nulle. Afin de calculer le vecteur déplacement  $u$ , nous supposons que la longueur du film est grande devant sa hauteur et nous introduisons les changements d'échelle suivants  $x = l_1 X$ ,  $z = Z$ ,  $f(\tau; x) = h(t; X)$ ,  $u_1(x, z) = U_1(X, Z)/l_1$ ,  $u_3(x, z) = U_3(X, Z)$  et  $\tau = tl_1^4/D\gamma$ . Les composantes mises à l'échelle  $U_i$  sont alors développées en puissance de  $\alpha^2$ , où  $\alpha = \frac{1}{l_1}$ . Après calculs, nous obtenons le problème adimensionné suivant (où, pour alléger la notation dans la suite, la variable spatiale adimensionnée est notée de nouveau  $x$ ):

$$\begin{cases} \frac{\partial h}{\partial t} = -h^{(4)} + \theta(hh^{(4)} + 3h'h^{(3)} + 2h''^2) \text{ dans } ]0, T[ \times ]0, 1[; \\ h^{(1)}(\cdot, 0) = h^{(2)}(\cdot, 0) = 0 \\ h(t, \cdot) \text{ périodique, de période } 1, h(0, \cdot) = h_0. \end{cases} \quad (2)$$

avec  $\theta = \frac{\sigma_0^2}{\gamma\mu}$  et la notation  $(\cdot)^{(k)}$  désigne la dérivée spatiale d'ordre  $k$ <sup>4</sup>. Nous introduisons l'espace  $\mathcal{V} = L^2(0, t_*; H_{per}^4(0, 1)) \cap L^\infty(0, t_*; H_{per}^2(0, 1))$  ( $t_*$  sera choisi ultérieurement) que l'on munit de la norme:

$$\|v\|_{\mathcal{V}} = \left( \int_0^{t_*} \int_0^1 v^{(4)2}(t, x) dx dt + \sup_{t \in (0, t_*)} \left( \int_0^1 v''^2(t, x) dx + \int_0^1 v^2(t, x) dx \right) \right)^{\frac{1}{2}}.$$

## 3 Explosion en temps fini et estimations a priori

Nous présentons ici un résultat d'explosion en temps fini de la solution de l'équation (4) en utilisant une fonction propre et positive  $\varphi_1$  du laplacien [6]. Nous donnons aussi un résultat d'existence locale et d'unicité de la solution de (4), dont les preuves sont détaillées dans [1].

Pour cela, nous introduisons la boule fermée  $\mathcal{X} = \{v \in \mathcal{V}, \|v\|_{\mathcal{V}} \leq R\}$  (avec  $R > 0$ ) et  $S$  l'application de  $\mathcal{X}$  dans  $\mathcal{X}$ , donnée, pour tout  $v \in \mathcal{X}$  par  $Sv = h$  avec  $h$  solution du problème :

$$\begin{cases} \frac{\partial h}{\partial t} = -h^{(4)}(1 - \theta v) + 3\theta v'v^{(3)} + 2\theta v''^2 - h + v \text{ dans } ]0, T[ \times ]0, 1[ \\ h(t, \cdot) \text{ périodique, de période } 1, h(0, \cdot) = h_0 \\ h^{(1)}(\cdot, 0) = h^{(2)}(\cdot, 0) = 0. \end{cases} \quad (3)$$

Les théorèmes obtenus sont :

**Theorem 3.1** Soit  $h_0 \in H_{per}^4(0, 1)$  une donnée initiale strictement positive qui vérifie

$\int_0^1 \varphi_1(x)h_0(x)dx > \frac{2\sqrt{2}}{\theta}$ . Soit  $h : [0, T_{max}[ \times ]0, 1[ \rightarrow \mathbb{R}$  une solution locale (maximale) de (4) avec  $h \in L^2(0, t; H_{per}^4(0, 1)) \cap L^\infty(0, t; H_{per}^2(0, 1))$  pour  $t < T_{max}$ . Alors, si  $T_{max} = +\infty$ ,  $h$  explose en temps fini, ou plus précisément, il existe  $t_* < T_{max}$  tel que :

$$\int_0^1 \varphi_1(x)h(t, x)dx \xrightarrow{t \rightarrow t_*} +\infty$$

<sup>4</sup>Les dérivées d'ordre 1 et 2 sont notées aussi  $(\cdot)'$  et  $(\cdot)''$  respectivement.

**Theorem 3.2** Soit  $R = \frac{1}{2(10\theta + 1)}$  avec  $\theta = \sigma_0^2/\mu\gamma$ . Pour toute donnée initiale  $h_0 \in H_{per}^4(0, 1)$  strictement positive qui vérifie  $\|h_0\|_{H_{per}^4(0,1)} < R$ , le problème (4) admet une et une seule solution locale  $([0, t_*], h)$  avec  $h \in L^2(0, t_*; H_{per}^4(0, 1)) \cap L^\infty(0, t_*; H_{per}^2(0, 1))$ .

Le théorème 3.2 repose sur le théorème du point fixe de Picard [2] et sur le lemme suivant :

**Lemma 3.1** Sous les mêmes conditions du théorème 3.2, il existe une constante  $c > 0$  telle que pour  $t_* > 0$  qui vérifie :

$$4t_*(\theta c(3R^6 + 2R^3 + 3R) + R) + \|h_0\|_{H_{per}^2(0,1)}^2 \leq R^2, \quad \text{et} \quad 2t_*(\theta R(12 + 14c) + \frac{2}{R}) < 1,$$

l'application  $S$  est définie et contractante de  $\mathcal{X}$  dans  $\mathcal{X}$ .

## 4 Un exemple de validation numérique

Pour approcher la solution du système (4), nous avons adopté une méthode pseudo-spectrale associée à un schéma exponentiel en temps [3, 7]. Considérons une équation en  $h(x, t)$ , supposée périodique, de période  $2\pi$  (pour simplifier), du type

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \mathcal{L}(h) + \mathcal{N}(h) \quad (4)$$

où  $\mathcal{L}$  et  $\mathcal{N}$  représentent respectivement des opérateurs spatiaux linéaires et non-linéaires. En projetant  $h$  dans l'espace de Fourier (relatif à  $x$ ), cette équation devient pour chaque coefficient de Fourier  $\hat{h}_k(t) \in \mathbb{C}$

$$\frac{\partial \hat{h}_k}{\partial t} = L_k \times \hat{h}_k + N_k \quad (5)$$

(sous des hypothèses adéquates pour  $h$ ). On construit le schéma temporel au temps  $n + 1$ , en notant  $\delta t$  le pas de temps, choisi constant, selon  $\hat{h}_k^{n+1} = \hat{h}_k^n \exp(L_k \delta t) + N_k^n (\exp(L_k \delta t) - 1)/L_k$ . Ce schéma, fondé sur une version discrète de la "méthode de variation de la constante", est exact pour une équation linéaire. Le terme  $N_k$  est calculé à chaque pas de temps dans l'espace direct, puis dans l'espace de Fourier par une transformée discrète rapide. Sur la figure 1 est représentée l'évolution temporelle du profil  $h(x, t)$  pour une condition initiale positive  $h_0(x) = 3\sin(x) - \sin(3x) + 4.1$  et pour une valeur du paramètre  $\theta$  proche de la valeur critique  $\theta_c(h_0)$ . On n'impose pas de condition sur les dérivées aux bords dans la simulation. D'autre part, par dichotomie, on accède à une valeur approchée du paramètre critique  $\theta_c(h_0)$  : pour  $\theta > \theta_c$ , on assiste à l'explosion en temps fini; pour  $\theta < \theta_c$ , la solution aux temps longs tend vers la valeur moyenne du profil initial  $h_0$ .

## Remerciements

Nous remercions particulièrement J.M. Rakotoson ainsi que J. Colin et J. Grilhé de l' Université de Poitiers, pour leurs idées et remarques.

## References

- [1] M. Boutat, Y. D'Angelo, S. Hilout, V. Lods, Existence and finite-time blow-up for a thin-film surface evolution problem, en préparation.
- [2] H. Brézis, Analyse fonctionnelle, Théorie et applications, Masson, Paris, 1983.

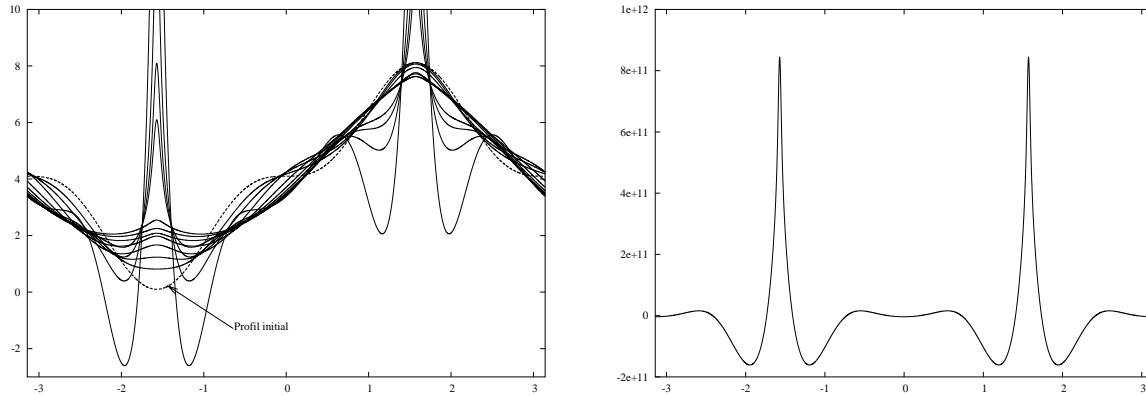


Figure 1: Evolution temporelle du profil  $h(x, t)$  pour une condition initiale en  $3\sin(x) - \sin(3x) + 4.1$  (courbe en pointillé). La valeur du paramètre  $\theta$  est de 0.203, proche de la valeur critique d'environ 0.20187. Le pas de temps utilisé est constant et vaut  $\delta t = 10^{-3}$ , le nombre de points de collocation est de 8192. A droite, on a représenté les profils aux itérations 0, 5, 10, 20, 50, 80, 110, 140, 168, 169, 170, 171; à gauche, profil au temps 0.175.

- [3] Y. D'Angelo, G. Joulin, G. Boury, On model evolution equation for the whole surface of 3D expanding wrinkled premixed flames, *Combustion Theory & Modelling*, **4**, (2000) 317–338.
- [4] V. Lods, A. Piétrus, J.M. Rakotoson, Mathematical study of the equation describing the evolution of the surface of a film, *Asymptotic Analysis*, **33/1**, pp. 67-91, 2003.
- [5] B.J. Spencer, S. H. Davis, P. W. Woorhees, Morphological instability in epitaxially–strained dislocation–free solid films : nonlinear evolution, *Physical Review B*, **47**, pp. 9760-9777, 1993.
- [6] R. Temam, *Infinite–Dimensional Dynamical Systems in Mechanics and Physics*, Springer–Verlag, New York, 1988.
- [7] O. Thual, U. Frisch, M. Hénon, Application of the pole–decomposition method to an equation describing the dynamics of wrinkled flame fronts, *Journal de Physique*, **46**, (1985) 1485–94.