MÉMOIRE

pour une

HABILITATION À DIRIGER DES RECHERCHES

Étude numérique et mathématique de quelques modèles de transition de phase, de séparation de phases et de cristaux liquides

par

Morgan PIERRE

Université de Poitiers

Soutenue le 6 octobre 2011 devant un jury composé des Professeurs

François ALOUGES	École Polytechnique
Franck BOYER	Université Paul Cézanne (Aix-Marseille III)
Ralph CHILL	Université de Dresde (Allemagne)
Arnaud DEBUSSCHE	École Normale Supérieure de Cachan Bretagne
Alberto FARINA	Université de Picardie Jules Verne
Alain MIRANVILLE	Université de Poitiers

au vu des rapports des Professeurs

Franck BOYER	Université Paul Cézanne (Aix-Marseille III)
Charles M. ELLIOTT	Université de Warwick (Royaume-Uni)
Alberto FARINA	Université de Picardie Jules Verne

REMERCIEMENTS

Je tiens tout d'abord à remercier Franck Boyer, Charles M. Elliott, et Alberto Farina d'avoir accepté de rapporter ce travail et de faire partie du jury.

Je remercie également les autres membres du jury : François Alouges, Ralph Chill, Arnaud Debussche et Alain Miranville.

Je remercie mes collègues du Laboratoire de Mathématiques et Applications de Poitiers, où il règne une ambiance agréable et où les jeunes sont encouragés pour faire de la recherche. Les directeurs successifs du laboratoire, Abderrazak Bouaziz puis Pol Vanhaecke, ont beaucoup oeuvré dans ce sens, et je leur en suis reconnaissant. Merci également aux différents directeurs du département pour leur soutien : Patrice Tauvel, Gérard Grélaud, Hassan Emamirad et Alain Miranville. Je pense également aux personnels ita/iatos du département et du laboratoire, que je remercie vivement pour leur aide et leur disponibilité : Jocelyne Attab à la reprographie et à la bibliothèque, Brigitte Brault au secrétariat, Nathalie Marlet à la bibliothèque, Benoît Métrot au service informatique et Nathalie Mongin à la comptabilité.

Je dois beaucoup à Alain Miranville, qui m'a toujours soutenu, et avec qui j'ai beaucoup appris depuis mon arrivée à Poitiers, et je profite de ces quelques lignes pour l'en remercier chaleureusement.

Merci à François Alouges, Olivier Binda, Laurence Cherfils, Maurizio Grasselli, Sami Injrou, Nicolas Lecoq, Benoît Merlet, Madalina Petcu et Arnaud Rougirel pour les collaborations que nous avons menées à bien et les mathématiques que nous avons faites ensemble.

Merci enfin à ma famille, notamment à mes parents et à mon frère, qui m'ont toujours encouragé, et à Hélène, qui me soutient au quotidien.

Table des matières

Introduction

Ce mémoire est la synthèse des travaux réalisés depuis la fin de ma thèse et mon arrivée à Poitiers en septembre 2003. Il présente les principaux résultats des publications [5] à [18], à l'exception de l'article [7] qui est à l'écart des thématiques présentées. Les résultats sont rassemblés en chapitres selon les modèles étudiés, que l'on peut schématiquement diviser en deux groupes :

– modèles de séparation ou de transition de phases de type Allen-Cahn ou Cahn-Hilliard, décrits par des équations aux dérivées partielles de nature parabolique ou elliptique semi-linéaire, pour un paramètre d'ordre scalaire (Chapitres 2 à 7) ;
– un modèle simplifié de cristaux liquides, à savoir le flot des applications harmoniques à valeurs dans la sphère, qui est une équation aux dérivées partielles géométrique, avec un paramètre d'ordre vectoriel et de norme unité (Chapitre 8).

Le deuxième groupe, qui apparaît plus restreint que le premier dans ce mémoire, se situe en fait dans la continuité de mes travaux de thèse (références [1] à [4]) avec lesquels il forme un ensemble. Les deux groupes, apparemment indépendants, ont un lien très intéressant puisque le flot des applications harmoniques peut être obtenu comme limite asymptotique de l'équation d'Allen-Cahn vectorielle (cf. Section 1.4). Notons tout de suite que je n'ai jusqu'à présent pas exploité ce lien, mais qu'il pourrait être une source intéressante de directions de recherches futures.

Il est frappant de remarquer *a posteriori* que tous les modèles étudiés sont des flots de type gradient, dans le sens où l'évolution générée par l'équation possède une fonctionnelle de Liapounov, c'est-à-dire une fonctionnelle énergie qui décroît au cours du temps ; ceci mène assez naturellement à des méthodes d'énergie, utilisées de manière variable pour chaque problème (problème d'évolution ou problème stationnaire), en complément d'autres techniques. Avant de détailler pour chaque problème les principaux résultats obtenus, j'en présente un résumé dans la Section C de cette introduction. Les caractéristiques essentielles des équations d'Allen-Cahn, de Cahn-Hilliard et du flot des applications harmoniques sont rappelées dans les Sections A et B, et des détails complémentaires sur ces équations sont donnés dans le Chapitre 1.

A Équation d'Allen-Cahn, équation de Cahn-Hilliard et flots de gradient

A.1 Équation d'Allen-Cahn

L'équation d'Allen-Cahn [49] (ou de Ginzburg-Landau [130])

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \varepsilon^2 \Delta u - f'(u) \quad x \in \Omega,\ t \geq 0 \tag{1}$$

où Ω est un ouvert de $\mathbb{R}^d$ (d entier), ε un (petit) paramètre strictement positif et f' la dérivée d'un potentiel double-puits, est fondamentale en science des matériaux. Dans ce contexte, Ω est le volume occupé par le matériau ($d = 3$, ou par simplification du modèle, $d = 1$ ou 2), u est un paramètre d'ordre qui représente par exemple l'ordonnancement d'atomes par cellule unité dans un réseau cristallin et les puits de f correspondent aux deux phases du matériau. Rappelons que $\Delta = \sum_{i=1}^d \dfrac{\partial^2}{\partial x_i^2}$ désigne le laplacien par rapport aux variables d'espace. L'équation (1) était déjà connue en dimension un d'espace avant le modèle de Ginzburg-Landau dans des modèles de génétique, de biologie et d'écologie [88, 126, 176, 155] (équation de Fisher-Kolmogorov ou équation de Nagumo), et son importance dépasse largement le cadre de la science des matériaux.

Un choix typique de potentiel est

$$f(s) = \frac{1}{4}(s^2-1)^2 \quad (s \in \mathbb{R}), \tag{2}$$

dont les deux puits, en ± 1, sont au même niveau d'énergie. Pour $\varepsilon = 0$, l'équation (1) se réduit à une EDO, et $u(t,x)$ évolue alors vers $+1$ ou -1 selon que $u(0,x) > 0$ ou $u(0,x) < 0$ respectivement. Le terme $\varepsilon^2 \Delta u$ est un terme de diffusion, qui se produit à une échelle de temps plus lente que la réaction $f'(u)$. Un raisonnement heuristique, dû historiquement à Allen et Cahn [49], montre que, une fois la réaction effectuée, et modulo un changement d'échelle de temps $t = \varepsilon^{-2}\tilde{t}$, la solution u de (1) sépare Ω en deux régions où $u \approx 1$ et $u \approx -1$ respectivement, et l'interface entre les deux régions se déplace avec une vitesse normale égale à la somme des courbures principales. L'équation (1) est ainsi une élégante approximation du mouvement par courbure moyenne. Ce raisonnement heuristique a été rendu rigoureux dans plusieurs papiers (voir Section 1.4 pour plus de détails).

L'équation (1) est habituellement obtenue comme le *flot de gradient* de la fonctionnelle d'énergie

$$E(u) = \int_\Omega \frac{\varepsilon^2}{2} |\nabla u|^2 + f(u) \, \mathrm{d}x \tag{3}$$

pour le produit scalaire $L^2(\Omega)$. Le terme $f(u)$ représente l'énergie pour un paramètre u uniforme et le terme $\varepsilon^2 |\nabla u|^2 /2$ représente l'énergie d'interface, introduite par Cahn et Hilliard [50]. Un tel modèle interdit les discontinuités de u et l'interface est représentée par une fine couche de transition d'une phase à l'autre possédant une petite épaisseur, d'où le terme de *modèle à interface diffuse* (par opposition aux modèles à interface nette, que l'on retrouve en faisant tendre ε vers 0). Si le potentiel est défini par (2), la largeur typique d'une interface est ε, ce que l'on voit en remarquant que la fonction

$$u(x) = \tanh\left(\frac{x}{\sqrt{2}\varepsilon}\right) \tag{4}$$

est une solution stationnaire explicite de (1) pour $\Omega = \mathbb{R}$.

A.2 Flots de gradient et flots de type gradient

Si $E : V \to \mathbb{R}$ est une fonctionnelle de classe C^1 sur un espace de Banach V, et si $V \subset H$ où H est un espace de Hilbert, et où l'inclusion est continue et dense, on appelle *flot de gradient de E pour le produit scalaire $(\cdot,\cdot)_H$ de H* l'équation différentielle

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(u(t), \varphi)_H = -\langle E'(u(t)), \varphi \rangle_{V',V} \quad \forall \varphi \in V, \; t \geq 0, \tag{5}$$

où $E'(u) \in V'$ est la différentielle de E en u. En dimension infinie, la notion de solution à ce type d'équation peut être délicate ; une solution globale u vérifie typiquement (cf., par exemple, [59])

$$u \in L^\infty_{loc}([0,+\infty), V) \cap W^{1,2}_{loc}([0,+\infty), H) \tag{6}$$

ainsi que l'équation (5) au sens des distributions sur $(0,+\infty)$. Le gradient de E pour le produit scalaire de H est défini par

$$\begin{aligned} D(\nabla_H E) &= \big\{ u \in V \ : \ \exists v \in H \text{ tel que } \langle E'(u), \varphi \rangle_{V',V} = (v, \varphi)_H \quad \forall \varphi \in V \big\}, \text{ et} \\ \nabla_H E(u) &= v, \end{aligned}$$

de sorte que (5) peut se récrire

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t}(t) = -\nabla_H E(u(t)) \quad t \geq 0, \tag{7}$$

et une solution de (5) avec la régularité (6) vérifie $u(t) \in D(\nabla_H E)$ ainsi que l'égalité (7) p.p. $t \in \mathbb{R}_+$. Si l'on choisit $\varphi = \dfrac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t}(t)$ dans (5), on obtient (pour une solution assez régulière)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}E(u(t)) = -\frac{1}{2}\left\|\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t}(t)\right\|_H^2 \leq 0,$$

où $\|\cdot\|_H$ désigne la norme de H. Ainsi, $E(u(t))$ décroît avec le temps, et pour une évolution générée par (7), la solution $u(t)$ évolue heuristiquement vers un minimiseur global de E.

La décroissance de l'énergie confère des propriétés asymptotiques très intéressantes à un flot de gradient (moyennant quelques hypothèses supplémentaires), comme la convergence vers un état d'équilibre, ou l'existence d'un attracteur global. Ces propriétés asymptotiques peuvent souvent être étendues à d'autres flots qui ne sont pas nécessairement des flots de gradients au sens précédent, mais auxquels on peut associer une fonctionnelle énergie décroissant au cours du temps. Dans ce mémoire, on appellera *flot de type gradient* une évolution à laquelle on peut associer une fonctionnelle (dite fonctionnelle de Liapounov) qui décroît au cours du temps.

Il est intéressant de noter qu'en dimension finie, une forme de réciprocité existe : Bárta, Chill et Fašangová ont ainsi mis en évidence dans [23] qu'un flot défini par une équation différentielle ordinaire et possédant une fonctionnelle de Liapounov stricte peut être vu comme un flot de gradient pour une métrique riemannienne appropriée sur l'ensemble des points non stationnaires (cependant, dans ce cas, la notion de flot de gradient est plus générale que celle considérée ci-dessus, car le produit scalaire dépend de u).

Exemple 1 Si l'espace H est de dimension finie, il peut être identifié via une de ses bases à $\mathbb{R}^d$ muni d'un produit scalaire

$$(X, Y)_A = X^t AY, \quad \forall X, Y \in \mathbb{R}^d,$$

où A est une matrice symétrique définie positive carré de taille d. Pour une fonctionnelle $E : V = H \simeq \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ de classe C^1, le flot de gradient de E (7) est le système d'équations différentielles ordinaires

$$AU'(t) = -\nabla E(U(t)), \quad t \geq 0, \tag{8}$$

où $U = (u_1, \ldots, u_d)^t$ et $\nabla E = (\partial_{u_1}E, \ldots, \partial_{u_d}E)^t$. En choisissant une base orthonormée de H, on peut toujours se ramener au cas où A est la matrice identité. Cependant, dans une discrétisation en espace (de type Galerkin) d'un flot de gradient donné par (7), on choisit typiquement un sous-espace V_h de V de dimension finie, et comme la base la plus pratique de V_h n'est pas nécessairement orthonormée pour le produit scalaire de H, la forme (8) apparaît naturellement.

Exemple 2 On peut vérifier, comme annoncé ci-dessus, que pour E définie par (3), si l'on choisit $V = H^1(\Omega)$ où Ω est un domaine borné de $\mathbb{R}^d$ à frontière régulière, et $H = L^2(\Omega)$, alors (7) donne l'équation d'Allen-Cahn (1) avec des conditions au bord de Neumann homogène.

A.3 Équation de Cahn-Hilliard

Si l'on considère la fonctionnelle E donnée par (3) et définie sur $V = H^1_0(\Omega)$, en choisissant $H = H^{-1}(\Omega)$, où $H^{-1}(\Omega) = [H^1_0(\Omega)]'$ est muni du produit scalaire $(u, v)_{H^{-1}(\Omega)} = \langle(-\Delta)^{-1}u, v\rangle_{V,V'}$ (produit scalaire obtenu par dualité à partir du produit scalaire $(u, v) \mapsto \int_\Omega \nabla u \cdot \nabla v \,\mathrm{d}x$ sur $H^1_0(\Omega)$), on obtient l'équation de Cahn-Hilliard [50]

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\Delta(\varepsilon^2 \Delta u - f'(u)) \quad x \in \Omega,\ t \geq 0, \tag{9}$$

avec des conditions au bord de type Dirichlet homogène. L'équation (9) est en général plutôt associée à des conditions de type Neumann homogène ou périodiques, car dans ce cas, en plus de la décroissance de l'énergie E, l'évolution générée par (9) conserve la masse totale :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_\Omega u\,\mathrm{d}x = 0.$$

Pour ce type de conditions au bord, il est encore possible de considérer (9) comme un flot de gradient dans $H^{-1}(\Omega)$, à condition de raisonner modulo les constantes. L'équation (9) traduit dans ce cas une évolution vers un minimiseur global de E avec contrainte de masse totale imposée, c'est-à-dire un matériau dont les deux phases sont complètement séparées. Cette EDP également fondamentale en science des matériaux a été introduite par Cahn et Hilliard [50] pour expliquer le phénomène de décomposition spinodale observé dans des alliages métalliques binaires.

Aujourd'hui, les équations d'Allen-Cahn et de Cahn-Hilliard bien comprises, tant du point de vue théorique (même si quelques questions importantes restent ouvertes) que du point de vue numérique, et de nombreuses discrétisations efficaces de ces équations sont disponibles. Cependant, en science des matériaux, pour se rapprocher des applications, on souhaite en général prendre en compte d'autres phénomènes, tels que des impuretés additionnelles, des effets élastiques, des transferts de chaleur, des effets visqueux. Les équations (1) et (9) apparaissent alors souvent sous une forme plus générale, et sont très souvent couplées à d'autres équations modélisant de tels phénomènes : on peut citer, entre autres, des couplages avec les équations de Navier-Stokes [35], ou avec l'équation de la chaleur [187]. Pour de tels modèles, tout un champ d'étude mathématique et numérique reste ouvert, et une partie de mes travaux, détaillée dans les Chapitres 2 à 7, apporte une pierre à un tel édifice.

B Applications harmoniques à valeurs dans la sphère

Soit Ω un ouvert de $\mathbb{R}^d$ et $S^{m-1} = \{x \in \mathbb{R}^m \ : \ |x| = 1\}$ la sphère unité de $\mathbb{R}^m$ (où $|\cdot|$ désigne la norme euclidienne dans $\mathbb{R}^m$). Une application $u \in C^2(\Omega, S^{m-1})$ est dite *harmonique* si elle satisfait l'EDP

$$-\Delta u = u\,|\nabla u|^2 \qquad \text{dans } \Omega. \tag{10}$$

Les applications harmoniques sont des points critiques de l'énergie de Dirichlet

$$\mathcal{E}(u) = \frac{1}{2}\int_\Omega |\nabla u|^2\,\mathrm{d}x.$$

Les applications harmoniques entre variétés sont des généralisations des fonctions harmoniques (pour lesquelles S^{m-1} est remplacé par $\mathbb{R}$) et des géodésiques (pour lesquelles Ω est un intervalle de $\mathbb{R}$). Le flot des applications harmoniques, qui pour des fonctions $u : \Omega \times (0, +\infty) \to S^{m-1}$ s'écrit

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta u + u\,|\nabla u|^2\,, \quad x \in \Omega,\ t \geq 0 \tag{11}$$

a été introduit pour construire des solutions particulières de (10) (voir, par exemple, [179]). Il peut également être obtenu comme la limite asymptotique de l'équation d'Allen-Cahn vectorielle (cf. Section 1.4), et il apparaît également dans la théorie des cristaux liquides nématiques (modèle d'Oseen-Franck, cf. [20] et références citées).

Pour considérer des solutions d'énergie finie, il est naturel d'introduire l'ensemble

$$H^1(\Omega, S^{m-1}) = \{u \in H^1(\Omega, \mathbb{R}^m) \ : \ |u(x)| = 1 \text{ p.p. } x \in \Omega\}. \tag{12}$$

On dit alors que $u \in H^1(\Omega, S^{m-1})$ est *faiblement harmonique* si elle vérifie (10) sens des distributions dans $\mathcal{D}'(\Omega, \mathbb{R}^m)$ (remarquer que le second membre $u\,|\nabla u|^2$ de (10) appartient dans ce cas à $L^1(\Omega, \mathbb{R}^m)$) ou, de manière équivalente, si

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\mathcal{E}\left(\frac{u+s\varphi}{|u+s\varphi|}\right)_{|s=0} = 0 \quad \forall \varphi \in \mathcal{D}(\Omega, \mathbb{R}^m), \tag{13}$$

où $\mathcal{D}(\Omega, \mathbb{R}^m)$ désigne l'espace des fonctions de classe C^∞ de Ω à valeurs dans $\mathbb{R}^m$, et à support compact dans Ω. Même si la fonctionnelle $\mathcal{E}$ est convexe, l'ensemble (12) n'est pas une partie convexe de $H^1(\Omega, \mathbb{R}^m)$, de sorte que l'EDP (10) est fortement non linéaire

En dimension $d \geq 3$, une application faiblement harmonique n'est pas nécessairement régulière. Par exemple, si $\Omega = B^3 = \{x \in \mathbb{R}^3 \ : \ |x| < 1\}$ est la boule unité de $\mathbb{R}^3$, un calcul direct (cf. [120]) montre que l'application

$$u_\star(x) = \frac{x}{|x|}$$

qui est singulière en $x = 0$, appartient à $H^1(B^3, S^2)$ et est faiblement harmonique dans B^3. L'application $u_\star$ est même minimisante parmi les applications de $H^1(B^3, S^2)$ prenant les mêmes valeurs que $u_\star$ sur le bord ∂B^3 [41, 133]. Un exemple dû à Rivière [171] montre qu'une application faiblement harmonique $u : B^3 \to S^2$ peut même être partout discontinue.

En dimension $d = 1$ ou 2 de domaine, un tel phénomène ne se produit pas : toute application faiblement harmonique est de classe C^∞ sur Ω. Lorsque $d = 1$, un bootstrap standard sur l'équation (10) le montre ; lorsque $d = 2$, il s'agit d'un résultat difficile, obtenu par Hélein [113, 114] à la suite de plusieurs résultats de régularités intermédiaires. Si l'on essaie d'adapter l'exemple précédent, on remarque ainsi que l'application

$$B^2 \ni x \mapsto x/\,|x| \in S^1$$

est harmonique sur $B^2 \setminus \{0\}$, mais n'appartient pas à $H^1(B^2, \mathbb{R}^2)$.

En dimension deux de domaine, même si toute application faiblement harmonique est lisse, les solutions du flot (11) peuvent en revanche développer en temps fini ou infini des singularités ponctuelles liées à un phénomène de concentration d'énergie. Un tel phénomène permet notamment de construire des solutions faibles distinctes du flot (11) pour une même condition initiale et une même donnée au bord. Dans [5], je me suis intéressé (avec B. Merlet) à la simulation et à l'analyse numérique de telles solutions singulières, sous une hypothèse de symétrie corotationnelle, continuant ainsi l'étude faite dans ma thèse sur la version stationnaire du problème.

Dans deux autres de mes articles ([6] et [8]), résumés avec le précédent dans le Chapitre 8 de ce mémoire, je m'intéresse à la version stationnaire du problème précédent (sans l'hypothèse de symétrie corotationnelle), et qui consiste en la construction et la description d'applications harmoniques (régulières) du disque unité de $\mathbb{R}^2$ dans la sphère unité S^2 avec condition au bord de Dirichlet imposée. Ce problème a été mis en évidence par Brezis et Coron [40] et mes résultats montrent un phénomène étonnamment riche de brisure de symétrie ; ils apportent des nouvelles perspectives à une question d'unicité de Brezis, question qui apparaît déjà en 1992 dans [25], et qui reste encore ouverte aujourd'hui.

Pour terminer cette introduction, notons que les applications harmoniques ont été énormément étudiées dans les années 80 et 90, et que leur étude a évolué depuis dans différentes directions. Pour en évoquer une, disons que les travaux antérieurs servent de base à toute une famille de modèles avec un paramètre d'ordre vectoriel et de norme unité : modèle de Ginzburg-Landau (popularisé en mathématiques par le livre de Bethuel, Brezis et Hélein [26]), modèles de micromagnétisme et de ferromagnétisme (étudiés notamment par F. Otto).

C Résumé des résultats obtenus

Mes travaux se situent principalement en analyse numérique, avec une composante sur l'étude théorique des équations aux dérivées partielles, les deux thématiques étant motivées ou complétées par les simulations numériques.

C.1 Analyse numérique de modèles de type Cahn-Hilliard ; convergence vers l'équilibre

Un des premiers aspects de mon travail concerne l'analyse numérique et la simulation de modèles de type Cahn-Hilliard, à savoir l'équation de Cahn-Hilliard-Gurtin [9, 15], l'équation de Cahn-Hilliard avec conditions au bord dynamiques [14], et l'équation de Cahn-Hilliard avec terme inertiel [13, 18], qui sont des généralisations de l'équation de Cahn-Hilliard

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\varepsilon^2 \Delta^2 u + \Delta f'(u), \quad x \in \Omega,\ t \geq 0, \tag{14}$$

où Δ est le laplacien, $\varepsilon > 0$ est un petit paramètre et f est un potentiel double-puits polynomial (typiquement $f(u) = (u^2-1)^2/4$), ou plus généralement un potentiel régulier avec une croissance polynomiale ; la fonction inconnue $u : \Omega \times (0, +\infty) \to \mathbb{R}$ est un paramètre d'ordre (une concentration renormalisée). Notons que les trois modèles étudiés possèdent chacun une fonctionnelle de Liapounov qui est une généralisation de l'énergie libre

$$E(u) = \int_\Omega \frac{\varepsilon^2}{2} |\nabla u|^2 + f(u)\, \mathrm{d}x \tag{15}$$

associée à (14). La propriété de conservation de la masse est également vérifiée dans les trois cas (de manière asymptotique pour le dernier modèle).

Dans ce type de modèle, l'interface diffuse d'épaisseur typique ε oblige à maillage finement le domaine (avec un pas d'espace d'épaisseur ε, typiquement), d'une part, et les échelles de temps pour l'évolution sont lentes (de l'ordre de 1 pour la réaction, et de l'ordre de ε^{-2} pour la diffusion) ; cela rend nécessaire l'utilisation de schémas implicites ou linéairement implicites.

Avec mes collaborateurs (L. Cherfils, M. Grasselli, S. Injrou, N. Lecoq ou M. Petcu), j'ai notamment écrit :

- des schémas semi-discrétisés en espace par éléments finis conformes (méthode de « splitting » pour le bilaplacien) ou par différences finies ;
- des schémas complètement discrétisés obtenus à partir des précédents par une discrétisation en temps implicite (schéma d'Euler implicite) ou semi-implicite.

Pour ces schémas, nous avons obtenu des résultats d'existence et d'unicité, de stabilité (de type Liapounov), des résultats de convergence de la solution discrète vers la solution du problème continu, des estimations d'erreurs *a priori* [9, 13, 14, 15, 18] : ces résultats sont basés sur des méthodes d'énergie classiques dans les problèmes paraboliques en général (cf. le livre de Thomée [184]) et l'équation de Cahn-Hilliard en particulier (travaux d'Elliott *et al.* [77, 78] notamment). Des simulations numériques avec les logiciels `Scilab`[1] (en dimension un d'espace) et `FreeFem++`[2](en dimension deux d'espace) illustrent l'étude théorique [9, 14, 15]. Des calculs numériques en dimension trois d'espace ont été effectuées par Lecoq *et al.* [131] pour le modèle de Cahn-Hilliard avec terme inertiel, qui se prête bien aux méthodes de FFT ; cependant, pour les deux autres modèles, la dimension trois reste un enjeu intéressant, et nos travaux constituent une étape indispensable à ce saut quantitatif.

Pour les schémas précédents, nous avons également obtenu, grâce à l'inégalité de Łojasiewicz et à la stabilité de Liapounov, des résultats de convergence asymptotique (en temps) vers l'état stationnaire, pour des potentiels polynomiaux [9, 13, 14, 15]. De tels résultats sont relativement attendus pour les problèmes semi-discrétisés en espace, pour lesquels la littérature est vaste (cf. la référence [118]), mais sont encore en développement en ce qui concerne les schémas semi-discrétisés en temps, pour lesquels les premiers travaux sont encore récents (les premiers résultats abstraits étant, à ma connaissance [19, 92, 21]). J'ai ainsi pu dégager des versions abstraites de résultats de convergence vers l'équilibre pour des schémas discrétisés en temps dans

[1] `Scilab` est un logiciel libre disponible sur http ://www.scilab.org/
[2] `FreeFem++` est un logiciel libre disponible sur http ://www.freefem.org/ff++/

les références [12, 17], en collaboration avec M. Grasselli ou B. Merlet ; des taux de convergence optimaux ont également été obtenus dans ce cadre discret.

C.2 Étude numérique ou théorique de singularités dans des problèmes de nature parabolique

Une deuxième partie de mes travaux concerne l'étude numérique ou théorique de différents types de singularités apparaissant dans des équations de nature parabolique.

Dans [10], L. Cherfils et moi-même avons étudié un modèle de type Allen-Cahn dû à Gurtin, pour un potentiel logarithmique défini par

$$f(u) = \frac{\theta}{2}\left[(1+u)\ln(1+u) + (1-u)\ln(1-u)\right] + \frac{\theta_c}{2}(1-u^2) \quad u \in (-1,1)\ (0 < \theta < \theta_c).$$

Ce potentiel singulier correspond à la « solution régulière » justifiée du point de vue physique [50, 58]. Dans les modèles de type Allen-Cahn ou Cahn-Hilliard, il contraint en particulier la concentration (renormalisée) u à rester dans l'intervalle $(-1,1)$, même en l'absence d'un principe du maximum. En dimension un d'espace, le modèle d'Allen-Cahn-Gurtin considéré s'écrit

$$u_t + bu_{xt} - au_{xxt} = \varepsilon^2 u_{xx} - f'(u), \quad x \in (0,1),\ t > 0, \tag{16}$$

avec des conditions au bord périodiques sur le domaine $\Omega = (0,1)$, et des paramètres constants $a > 0$, $b \in \mathbb{R}$ et $\varepsilon > 0$. Si u est une solution (assez régulière) de (16), en multipliant l'équation par u_t et en intégrant sur le domaine $\Omega = (0,1)$, on voit que l'énergie $E(u(t))$ définie par (15) décroît avec le temps. Dans le cas particulier où $a = 1$ et $b = 0$, l'équation (16) est plus précisément un flot de gradient de E pour le produit scalaire $H^1(0,1)$. En nous basant sur des simulations numériques en `Scilab`, nous avons montré que pour des données initiales de u à valeurs dans $(-1,1)$, l'équation (16) était bien posée localement en temps, mais n'admettait pas toujours une solution classique globale car il peut arriver (pour ε assez petit) que u prenne les valeurs ± 1 en un (ou plusieurs) points du domaine, au bout d'un temps fini $T > 0$. Ce comportement est assez surprenant au regard des résultats habituellement obtenus dans les modèles de type Allen-Cahn et est lié à l'absence d'un principe de comparaison pour (16). On peut l'expliquer par l'aspect non local de la partie non linéaire de l'équation, ce qui se voit en récrivant (16) comme une équation intégro-différentielle dans le cas $\varepsilon = 0$ (le cas $\varepsilon > 0$ apparaissant comme une perturbation).

Dans [8], j'ai fait une analyse numérique par une méthode d'éléments finis de l'équation de diffusion visqueuse

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \nu\Delta\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta f'(u) \quad x \in \Omega,\ t > 0, \tag{17}$$

avec des conditions au bord de type Neumann, où ν est un paramètre strictement positif et Ω un domaine polygonal borné de $\mathbb{R}^d$ ($d = 1$, 2 ou 3). Cette équation, qui a déjà attiré l'attention de plusieurs auteurs dans le passé [158, 83], peut être vue comme un flot de gradient de l'énergie (15) pour un paramètre $\varepsilon = 0$, et pour un produit scalaire de type L^2 dans l'espace $L^\infty(\Omega)$. Elle modélise donc une évolution qui ne prend pas en compte l'énergie d'interface, et les solutions, même pour des données initiales très régulières, développent (asymptotiquement en temps) des singularités de type discontinuité. Elle est proche de certains modèles de type Perona-Malik [79]. Pour prendre en compte ces singularités, j'ai utilisé des éléments finis P^0 discontinus, et j'ai montré la convergence uniforme de la solution du problème semi-discrétisé en espace vers la solution du problème continu sur tout intervalle de temps fini, pour des données initiales pouvant même être discontinues. Les estimations L^∞ sont basées sur le principe du maximum discret, ce qui impose des contraintes géométriques fortes sur les maillages (condition d'angle aigü). Les simulations numériques obtenues avec avec `Scilab` (pour la dimension un d'espace) et `FreeFem++` (pour la dimension deux d'espace) donnent des indications sur les bornes L^∞ des solutions de l'équation de Cahn-Hilliard visqueuse dont (17) est un cas limite singulier.

Dans [5], B. Merlet et moi avons calculé numériquement des solutions singulières $u : D \times [0, +\infty) \to S^2$ du flot des applications harmoniques du disque dans la sphère, défini par

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta u + u\,|\nabla u|^2 \quad x \in D,\ t > 0, \tag{18}$$

où $D = \{x \in \mathbb{R}^2 \ :\ |x| < 1\}$ et $S^2 = \{x \in \mathbb{R}^3 \ :\ |x| = 1\}$. L'équation (18) est complétée par une donnée initiale $u_0 : \overline{D} \to S^2$ qui impose également la valeur au bord (condition de Dirichlet). Un tel problème admet une solution faible $u \in H^1_{loc}(\overline{D} \times [0, +\infty), S^2)$, régulière en dehors d'un nombre fini de points de singularité $(x_i, t_i)_{1 \leq i \leq N} \subset \overline{D} \times (0, +\infty)$, comme l'ont montré Struwe [179] et Chang [53].

En une singularité, en un temps t_i, un phénomène de concentration nommé *bubbling* se produit : un « blow-up » approprié de la solution converge vers une application harmonique de $S^2 \simeq \overline{\mathbb{R}^2}$ dans S^2 et l'énergie de Dirichlet

$$\mathcal{E}(u) = \frac{1}{2} \int_D |\nabla u|^2 \, \mathrm{d}x \tag{19}$$

a un saut (une discontinuité) multiple de 4π, qui correspond en général à un saut dans le degré S^2 de u. Ceci est lié au fait que la limite d'une suite convergeant pour la topologie H^1-faible n'a en général pas le même degré que les éléments de la suite [40]. Le phénomène inverse (*debubbling*) a été utilisé dans [24, 185] pour construire une solution faible distincte de la solution de Struwe. L'idée est de garder en réserve l'énergie perdue lors d'un « bubbling » au temps t_1 et de la relâcher à un temps $t_2 > t_1$ pour un « debubbling » (au temps t_2, l'énergie a un saut de discontinuité vers le haut). Une telle solution faible semble plus adaptée pour la description de cristaux liquides nématiques, et un de nos buts était de présenter un schéma qui permette de les calculer numériquement.

Pour simplifier le problème, nous avons considéré des applications corotationnellement symétriques, qui sont complètement définies par une fonction d'angle $\theta : [0, 1] \times [0, +\infty) \to \mathbb{R}$ (θ est obtenu en considérant la restriction de u sur un rayon du disque, paramétré par $r = |x| \in [0, 1]$). L'évolution générée par (18) se ramène à une équation parabolique pour θ, singulière en $r = 0$ (le phénomène de concentration ne peut se produire qu'au centre du disque). A la fonction d'angle θ, on peut associer un degré corotationnel caractérisé par un entier relatif k, plus précis que le degré S^2 de u. Le schéma semi-discrétisé en temps que nous proposons permet de construire des solutions corotationnelles de (18) avec un degré corotationnel k prescrit. Il s'agit d'un schéma d'Euler implicite introduit par Bethuel *et al.* [27] pour des domaines de $\mathbb{R}^3$ et basé sur l'idée que le flot des applications harmoniques est le flot de gradient L^2 d'une énergie relaxée $\mathcal{E}_k$ de $\mathcal{E}$. En particulier, l'énergie totale $\mathcal{E}_k$ de la solution semi-discrète est décroissante.

Pour la simulation numérique, effectuée avec le logiciel `MATLAB`[3], nous utilisons une discrétisation en espace par éléments finis P^1, couplée avec une méthode de maillage mobile qui permet de gérer la singularité en $r = 0$ et d'obtenir ainsi une partie purement verticale dans le graphe de la solution θ aux temps singuliers. Cette méthode de maillage mobile est une adaptation du cas stationnaire traité dans [3].

C.3 Étude théorique et numérique de problèmes stationnaires

Le troisième aspect de mon travail concerne l'étude de problèmes stationnaires (de type elliptique non linéaire). Outre leur intérêt spécifique, les solutions stationnaires de problèmes d'évolution sont intéressantes également pour mieux comprendre la dynamique de l'évolution.

Mon travail le plus récent dans ce domaine, en collaboration avec A. Rougirel dans [16], concerne l'étude théorique et numérique de solutions stationnaires d'un modèle de champ de phase cristallin. Le modèle de champ de phase cristallin introduit par Elder et ses collaborateurs [74, 75, 164] en science des matériaux est une version conservative de l'équation de Swift-Hohenberg [181], cette dernière ayant été initialement introduite dans l'étude de la convection de Rayleigh-Bénard.

[3] http ://www.mathworks.fr/

L'équation stationnaire que nous avons considérée, en dimension un d'espace et ayant valeur de modèle, s'écrit : trouver $u : [0,1] \to \mathbb{R}$ solution de

$$\varepsilon^2 u_{xxxx} + 2\varepsilon u_{xx} + u + f(u) = \int_0^1 f(u)\,\mathrm{d}x \quad \text{dans } (0,1), \tag{20}$$

$$u_x(0) = u_x(1) = u_{xxx}(0) = u_{xxx}(1) = 0, \tag{21}$$

$$\int_0^1 u\,\mathrm{d}x = m, \tag{22}$$

où le paramètre m (la masse) est imposé, et où $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ est la dérivée d'un potentiel double-puits défini par

$$f(s) = s^3 + rs \quad (s \in \mathbb{R}),$$

avec un paramètre $r < 0$. Les conditions au bord (21) sont de type Neumann et le paramètre $\varepsilon > 0$ a la dimension du carré de l'inverse d'une longueur. La constante $\bar{u} = m$ est une solution évidente de (20)–(22), qui est toujours stable lorsque $f'(m) > 0$, mais qui devient instable pour $\varepsilon > 0$ assez petit lorsque $f'(m) < 0$, comme on le voit en considérant l'opérateur linéarisé en $\bar{u}$,

$$\mathcal{L}_\varepsilon(v) = \varepsilon^2 v_{xxxx} + 2\varepsilon v_{xx} + v + f'(m)v,$$

de domaine

$$\dot{V}_0 = \left\{ v \in H^4(\Omega) \ : \ v_x(0) = v_x(1) = v_{xxx}(0) = v_{xxx}(1) = 0 \quad \text{et} \quad \int_0^1 v\,\mathrm{d}x = 0 \right\}.$$

Il est facile de voir qu'il existe une infinité dénombrable de valeurs de ε pour lesquelles $\mathcal{L}_\varepsilon(v)$ n'est pas inversible. En une telle valeur $\varepsilon_\star$, le noyau de $\mathcal{L}_\varepsilon$ est génériquement une droite vectorielle engendrée par un vecteur propre non constant $\varphi_\star$ de l'opérateur laplacien avec condition de Neumann sur $(0,1)$. En utilisant des méthodes standard de bifurcation, nous avons montré qu'au voisinage de $\varepsilon_\star$ (et sous une condition de non dégénérescence), le problème (20)–(22) admet une unique branche u_ε de solutions non triviales vérifiant

$$u_\varepsilon - m \simeq \pm \left(c(\varepsilon - \varepsilon_\star)\right)^{1/2} \varphi_\star \quad \text{dans } \dot{V}_0, \text{ lorsque } \varepsilon \to \varepsilon_\star,$$

où le signe de la constante c impose la concavité de la branche. Des résultats de stabilité, de périodicité et de symétrie de ces solutions non triviales ont également été établis. Ces résultats théoriques locaux ont été complétés par des calculs numériques en `Scilab` des branches complètes de bifurcation. Nos résultats théoriques et numériques confirment certaines des prévisions faites par Elder et ses collaborateurs pour leur modèle, notamment sur la périodicité des solutions stables et sur la coexistence possible des phases solide et liquide.

Dans [6, 8], en cherchant à comprendre des phénomènes de brisure de symétrie observés dans des simulations numériques effectuées pendant ma thèse, je me suis intéressé de manière systématique aux symétries du problème des applications harmoniques du disque à valeurs dans la sphère avec condition de Dirichlet. Ce problème, mis en évidence par Brezis et Coron [40], est la version stationnaire de (18), et s'énonce : pour une donnée au bord $\gamma : \partial D \to S^2$, trouver $u : \overline{D} \to S^2$ solution de

$$-\Delta u = u\,|\nabla u|^2 \quad \text{dans } D, \tag{23}$$

$$u = \gamma \quad \text{sur } \partial D. \tag{24}$$

Une solution u de ce problème sera appelée un prolongement harmonique de γ. En considérant une suite minimisante de l'énergie de Dirichlet (19) dans l'ensemble $\mathcal{E}_\gamma$ des applications de $H^1(D, S^2)$ (cf. (12)) satisfaisant la donnée au bord, on montre facilement que le problème (23)–(24) admet toujours au moins une solution dès que $\mathcal{E}_\gamma$ n'est pas vide. La question de l'existence d'un minimiseur de $\mathcal{E}$ dans une classe d'homotopie (*i.e.* une composante connexe de $\mathcal{E}_\gamma$) donnée a été résolue dans [167, 129] par des méthodes d'analyse complexe, en terme de l'existence d'un prolongement holomorphe et/ou anti-holomorphe de γ à $\overline{D}$.

L'invariance de l'énergie de Dirichlet (19) par transformation conforme du domaine (dû à la dimension deux) et sous l'action d'isométries de $\mathbb{R}^3$ confère à ce problème de nature géométrique une structure très riche de symétries, source des difficultés rencontrées dans sa résolution, et qui le rapproche des problèmes elliptiques avec exposant critique. Pour préciser les choses dans la suite, nous notons $\mathrm{Aut}(D)$ le groupe des difféomorphismes holomorphes ou anti-holomorphes de D dans D, et $O(3)$ le groupe des isométries vectorielles de $\mathbb{R}^3$. L'invariance de $\mathcal{E}$ sous l'action de $\mathrm{Aut}(D) \times O(3)$ implique que $\mathrm{Aut}(D) \times O(3)$ agit également sur l'ensemble des points critiques de $\mathcal{E}$, *i.e.* les solutions de (23).

Une première question naturelle est de chercher à classifier les données au bord γ pour cette action de groupe (en remarquant que tout difféomorphisme de $\mathrm{Aut}(D)$ admet un prolongement holomorphe ou anti-holomorphe à un voisinage de $\overline{D}$). Dans [8], j'ai montré que toute donnée au bord $\gamma : S^1 \to S^2$ assez régulière (*i.e.*, soit continue, soit admettant un prolongement à $\overline{D}$ d'énergie finie) et dont le stabilisateur est de cardinal infini appartient à l'orbite d'une donnée au bord $\gamma_{a,n}$ de paramètres $a \in [1, +\infty)$ et $n \in \mathbb{N}^\star$ et connue explicitement. La classification des données au bord dans le cas général semble hors de portée, mais je suis tout de même parvenu à classifier tous les stabilisateurs possibles de données au bord. Ces résultats reposent sur des classifications bien connues des sous-groupes de $\mathrm{Aut}(D)$ et de $O(3)$.

Les données au bord $\gamma_{a,n}$ mises en évidence par la classification se trouvent en fait être invariantes par un groupe continu de rotations. En exploitant cette symétrie, j'ai pu réduire l'équation (23) à un système d'équations différentielles, et montrer que tout prolongement harmonique d'une donnée au bord $\gamma_{a,n}$, s'il n'est pas holomorphe ou anti-holomorphe, a nécessairement un stabilisateur de cardinal fini ; l'existence d'un tel prolongement implique en particulier l'existence d'un continuum de prolongements harmoniques pour la même donnée au bord $\gamma_{a,n}$. Pour $n = 1$, l'existence d'un tel prolongement est l'objet d'une question ouverte mise en évidence par Brezis, tandis que pour $n \geq 2$, un résultat de Soyeur [178] fournit $n - 1$ solutions de ce type, appartenant à $n - 1$ classes d'homotopie distinctes.

Ce résultat de brisure de symétrie pour le problème (23)–(24), établi pour les données au bord invariantes par un groupe continu de rotations, a son pendant dans le cas discret. La remarque fondamentale est que la symétrie d'une solution impose en général des restrictions arithmétiques sur le degré, ce dernier caractérisant l'appartenance d'une solution à une classe d'homotopie. Par contraposée, toute solution du problème qui ne satisfait pas ces restrictions sur le degré, mais qui appartient à une classe d'homotopie globalement invariante pour les symétries en question, génère plusieurs solutions distinctes dans la même classe d'homotopie. En remarquant qu'une telle situation était étonnamment fréquente, et en me basant sur le résultat d'existence de Qing [167], j'ai pu exhiber des données au bord invariantes par des groupes finis de rotations, et pour lesquelles une infinité de classes d'homotopie admettent plusieurs solutions distinctes du problème (23)–(24). L'étude des symétries discrètes de rotation a également permis de mieux décrire la structure du stabilisateur d'un prolongement harmonique pour les données au bord $\gamma_{a,n}$.

Mes résultats montrent ainsi un phénomène étonnamment riche de brisure de symétrie pour le problème, et ils apportent des nouvelles perspectives à la question d'unicité de Brezis.

Chapitre 1

Quelques compléments sur les équations d'Allen-Cahn et de Cahn-Hilliard

1.1 Compléments sur la modélisation

1.1.1 Dérivation phénoménologique

Les équations d'Allen-Cahn et de Cahn-Hilliard sont habituellement obtenues à partir de l'énergie libre totale

$$E(u) = \int_\Omega f(u) + \frac{\alpha}{2} |\nabla u|^2 \, \mathrm{d}x. \tag{1.1}$$

Le terme $f(u)$ est un potentiel double-puits qui représente l'énergie pour un paramètre u uniforme (par exemple, un mélange homogène uniforme si u représente une concentration) ; les puits de f définissent les phases du système binaire (Figure 1.1) et le terme $(\alpha/2)\,|\nabla u|^2$ avec $\alpha > 0$ représente l'énergie d'interface [50].

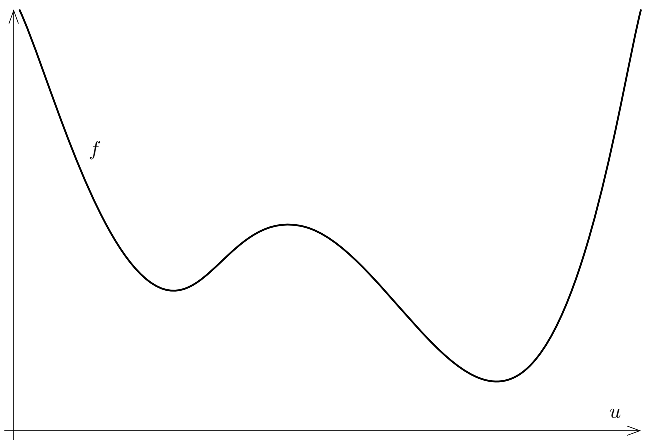


FIG. 1.1: Potentiel f double-puits

Pour l'équation d'Allen-Cahn, la dérivation classique (voir par exemple [187]) se base sur le fait que l'évolution vers l'équilibre est gouvernée par un paramètre $\beta > 0$ via la relation de type « flot de gradient »

$$\beta \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\delta E}{\delta u},$$

où le terme de droite est la dérivée distributionnelle (le gradient $L^2(\Omega)$) de E, *i.e.*

$$\frac{\delta E}{\delta u} = f'(u) - \alpha \Delta u, \tag{1.2}$$

de sorte que l'équation s'écrit finalement

$$\beta \frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \Delta u - f'(u) \qquad x \in \Omega,\ t \geq 0. \tag{1.3}$$

L'équilibre du système est caractérisé par l'équation $\dfrac{\delta E}{\delta u} = 0$. L'équation d'Allen-Cahn est un modèle prototype de *transition de phase* avec interface diffuse. Si elle est considérée avec un terme source faisant intervenir la température, elle peut modéliser par exemple une transition de phase solide/liquide (dans ce cas, pour avoir un système fermé, l'équation sera couplée avec la conservation de l'énergie, de type équation de la chaleur ; le système complet est connu sous le terme de modèle de champ de phase (voir [187]).

L'équation de Cahn-Hilliard, quant à elle, est un modèle prototype de *séparation de phases* avec conservation de la masse. Un tel processus peut être observé lorsque qu'un alliage binaire, *i.e.* un mélange de deux phases (deux phases solides, typiquement, comme dans les alliages métalliques), homogène à température élevée, est brutalement refroidi en dessous d'une température critique. On observe alors une nucléation partielle (l'apparition de nucléides dans le matériau), ou une nucléation totale, le phénomène dit de *décomposition spinodale* : l'ensemble du matériau devient inhomogène et des petits grains apparaissent, formé de l'une ou l'autre des phases ; dans une seconde étape, qui intervient à une échelle de temps plus lente, on observe une coalescence de ces microstructures. La décomposition spinodale est visible lorsque la concentration initiale du mélange est choisi dans l'intervalle spinodal, défini par le lieu des concentrations u telles que $f''(u) < 0$ (voir [48] pour plus de détails, ainsi que les références dans [148])

Le point de départ de la dérivation phénoménologique de l'équation de Cahn-Hilliard est la conservation de la masse [77, 157, 187] :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\operatorname{div} h,$$

où h est le flux de masse et u représente la concentration (ou fraction massique) d'une des phases. Le flux h est relié au potentiel chimique w par l'équation constitutive

$$h = -\kappa \nabla w.$$

Dans l'approche classique en thermodynamique, le potentiel chimique w est défini comme la dérivée de l'énergie libre par rapport à u (à température et volume constants, par exemple) ; cette définition doit être adaptée ici à cause du terme en ∇u, et w est défini comme la dérivée distributionnelle de E par rapport à u, *i.e.* $w = \dfrac{\delta E}{\delta u}$. En éliminant h, on obtient ainsi le système

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = -\operatorname{div}\left(\kappa \nabla w\right), \\ w = f'(u) - \alpha \Delta u. \end{cases} \tag{1.4}$$

En éliminant w, on trouve l'équation

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \kappa \left(\Delta f'(u) - \alpha \Delta^2 u\right) \qquad x \in \Omega,\ t \geq 0. \tag{1.5}$$

Pour la discrétisation par éléments finis, la formulation « splitting » donnée par (1.4) est plus naturelle, ainsi que l'avaient remarqué Elliott *et al.* [78]. Cette remarque est valable pour toutes les variantes de cette équation que nous avons considérées.

1.1.2 Condition initiale et conditions au bord

Pour pouvoir définir un problème bien posé du point de vue mathématique, les équations d'évolution (1.3) et (1.5) doivent être complétées par une condition initiale $u(x, 0) = u_0(x)$ et des conditions au bord. Un choix typique de condition initiale est une solution uniforme en espace (*i.e.* un mélange homogène dans le cas de Cahn-Hilliard) perturbée par des fluctuations aléatoires de moyenne nulle (qui peuvent correspondre par exemple à des impuretés du matériau).

Pour les conditions au bord dans le cas de l'équation de Cahn-Hilliard, il est raisonnable de supposer l'absence de flux de masse à travers le bord et des « conditions au bord naturelles » pour u, *i.e.* (en utilisant que $h = -\kappa\nabla w$)

$$n \cdot \nabla w = 0 \quad \text{et} \quad n \cdot \nabla u = 0 \qquad \text{sur } \partial\Omega,$$

où n représente la normale à $\partial\Omega$ dirigée vers l'extérieur. Avec ces conditions au bord, de type Neumann homogène, l'équation de Cahn-Hilliard conserve la masse, *i.e.*

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_\Omega u(x, t)\,\mathrm{d}x = 0,$$

pour tout $t \geq 0$. D'autres conditions au bord sont également considérées, justifiées notamment du point de vue mathématique :

– conditions au bord périodiques : dans ce cas, le domaine Ω est un d-parallélépipède et u et w sont périodiques. Ce type de condition au bord est très intéressant car la masse est conservée et l'on évite les problèmes de bord ; dans les modèles de type Gurtin décrits dans la Section 3.1, ces conditions sont naturelles, à cause des termes $a \cdot \nabla\partial_t u$ et $b \cdot \nabla w$ qui ressemblent à un terme convectif et qui posent des difficultés pour d'autres type des conditions au bord ;
– conditions de Dirichlet homogène, qui s'écrivent

$$u = 0 \quad \text{et} \quad w = 0 \qquad \text{sur } \partial\Omega.$$

L'inconvénient de ces conditions au bord est que la masse n'est plus conservée ; par contre, elles sont appréciées des mathématiciens car elles simplifient l'analyse mathématique tout en gardant l'essentiel des caractéristiques de l'équation ; elles sont utilisées par exemple dans [22] pour l'équation de Cahn-Hilliard visqueuse et dans [105] pour l'étude asymptotique de l'équation de Cahn-Hilliard avec terme inertiel ;
– conditions au bord dynamiques : ce type de conditions modélise plus finement l'influence du bord du domaine sur l'évolution ; elles s'écrivent typiquement (voir par exemple [86, 152]) :

$$\gamma_s u_t = \sigma_s \Delta_\| u - g_s'(u) - n \cdot \nabla u \quad \text{et} \quad n \cdot \nabla w = 0 \qquad \text{sur } \partial\Omega,$$

où γ_s et σ_s sont des constantes positives et g_s est un potentiel (quadratique, typiquement, de sorte que g_s' est affine). Le terme $\Delta_\|$ désigne l'opérateur de Laplace-Beltrami sur le bord. Lorsque $\gamma_s = \sigma_s = g_s = 0$, on retrouve les conditions au bord de type Neumann pour u ; l'équation sur w traduit toujours la conservation de la masse.

Pour l'équation d'Allen-Cahn, on considère habituellement des conditions au bord de type Neumann homogènes (*i.e.* $n \cdot \nabla u = 0$), et les variantes ci-dessus. Remarquer que l'équation d'Allen-Cahn ne possède pas la propriété de conservation de la masse.

1.1.3 Choix du potentiel

Un choix typique de potentiel est donné par la « solution régulière » [50, 81]

$$f(u) = \theta[u \ln u + (1-u)\ln(1-u)] + 2\theta_c u(1-u), \tag{1.6}$$

où $u \in [0,1]$ est la fraction massique d'un des deux composants, θ la température absolue et $\theta_c > 0$ une température critique (la constante de Boltzmann a été prise égale à 1). Pour $\theta \geq \theta_c$, f est convexe, et les cas intéressants correspondent à $\theta < \theta_c$, températures pour lesquelles f est un double-puits et pour lesquelles la décomposition spinodale peut être observée.

Pour l'étude mathématique, on préfère souvent pour des raisons de symétrie utiliser la concentration renormalisée $\tilde{u} = 2u - 1 \in [-1,1]$. Dans ce cas, le même potentiel s'écrit (à une constante près, qui est sans importance)

$$f(\tilde{u}) = \frac{\theta}{2}\left[(1+\tilde{u})\ln(1+\tilde{u}) + (1-\tilde{u})\ln(1-\tilde{u})\right] + \frac{\theta_c}{2}(1-\tilde{u}^2). \tag{1.7}$$

Avec ce choix, on a

$$f'(\tilde{u}) = \frac{\theta}{2}\ln\left(\frac{1+\tilde{u}}{1-\tilde{u}}\right) - \theta_c\tilde{u}, \quad \tilde{u} \in (-1,1), \tag{1.8}$$

Avec cette expression, pour $\theta < \theta_c$, f' admet une unique racine strictement positive $\beta > 0$, et l'intervalle spinodal est $[-\gamma,\gamma]$, où $\gamma = \sqrt{1-\theta/\theta_c}$ est l'unique racine positive de f". On a en particulier $0 < \gamma < \beta < 1$ et $f'(\gamma) < f'(\beta)$ (cf. Figure 1.2).

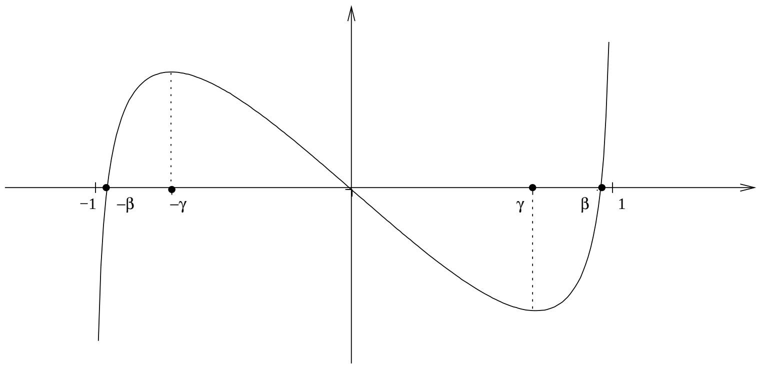


FIG. 1.2: $f'(s) = \frac{\theta}{2}\ln(\frac{1+s}{1-s}) - \theta_c s$

Pour simplifier l'étude mathématique et les simulations numériques, on préfère souvent utiliser une approximation de ce potentiel par une fonction définie sur $\mathbb{R}$, typiquement un polynôme, qui est obtenu par exemple en tronquant la série de Taylor définissant f [70]. Une hypothèse standard [183, 22] est de choisir f sous la forme

$$f(u) = \sum_{i=0}^{2p} a_i u^i \quad (a_{2p} > 0), \tag{1.9}$$

avec $p \in \mathbb{N}^\star$. Le plus petit entier p pour lequel f peut être un potentiel double-puits est $p = 2$, et ce cas particulier est très largement utilisé, notamment sous la forme

$$f(u) = c(u^2-1)^2 \quad (c > 0), \tag{1.10}$$

cas dans lequel les deux minima de f sont atteints en ± 1. Ce dernier choix de potentiel est également pleinement justifié lorsque l'on considère les modèles à interface diffuse comme des versions relaxées de modèles à interface nette, et que l'on s'intéresse au passage à la limite $\alpha \to 0$. Ce passage peut être d'ailleurs justifié rigoureusement pour beaucoup de modèles, avec une normalisation adéquate (voir [187, 77] et les références citées).

Comme le remarquent Grinfeld et Novick-Cohen (cf. [108]), l'étude de l'équation de Cahn-Hilliard (1.5) avec f défini par (1.10) contient tous les cas où f est un polynôme de degré 4 définissant un double-puits, par translation et homothétie du paramètre u. En effet, si f est défini par (1.9) avec $p = 2$, on a

$$f'(u) = 4a_4(u^3 + bu^2 + cu + d),$$

avec $b, c, d \in \mathbb{R}$; on peut récrire cela

$$f'(u) = 4a_4 \left[\left(u + \frac{b}{3} \right)^3 - \left(\frac{b^2}{3} - c \right) u + d - \frac{b^3}{27} \right].$$

De plus, f définit un double-puits si et seulement si f' a exactement trois racines réelles, ce qui impose que f'' possède exactement deux racines réelles, *i.e.* $b^2/3 - c > 0$. En posant

$$\tilde{u} = \frac{1}{\mu} \left(u + \frac{b}{3} \right) \text{ avec } \mu = \left(\frac{b^2}{3} - c \right)^{1/2} > 0,$$

et en définissant $\tilde{f}'(\tilde{u}) = f'(u)$, on trouve que

$$\tilde{f}'(\tilde{u}) = 4a_4\mu^3 \left(\tilde{u}^3 - \tilde{u} \right) + C, \tag{1.11}$$

pour une constante $C \in \mathbb{R}$ qui dépend de a_4, b, c et d. Pour l'équation de Cahn-Hilliard (1.5), on peut supposer sans perte de généralité que $C = 0$, puisque l'on considère seulement $\Delta f'(u)$. On retrouve alors bien un potentiel du type (1.10), et l'équation vérifiée par $\tilde{u}$ est

$$\frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} = \kappa \left(\Delta f'(\tilde{u}) - \alpha \Delta \tilde{u} \right), \quad x \in \Omega,\ t \geq 0,$$

avec où f est défini par (1.10) avec $c = a_4\mu^2$. En revanche, pour l'équation d'Allen-Cahn, la constante C a une importance dans la dynamique (par exemple dans l'étude de la stabilité des « traveling waves » – voir, par exemple, [182]) et la simplification s'arrête à la forme (1.11).

Plutôt que de simplifier le potentiel logarithmique en un potentiel polynomial, une autre démarche est de le généraliser. Dans [123], le caractère bien posé de l'équation de Cahn-Hilliard avec conditions au bord de type Neumann est établi pour des potentiels du type $f(u) = \beta(u) + g(u)$, où $\beta : \mathbb{R} \to (-\infty, +\infty]$ est une fonction convexe propre semi-continue inférieurement et $g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ est une fonction de classe C^1 positive et dont la dérivée g' est globalement lipschitzienne. Dans ce cas, $f' = \partial\beta + g'$ peut être multivalué. Ce type de potentiel comprend en particulier le potentiel logarithmique (1.6), le potentiel polynomial (1.9), et le potentiel suivant :

$$f(u) = \begin{cases} 2\theta_c u(1-u) & \text{si } 0 \leq u \leq 1, \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases}$$

Ce dernier potentiel peut d'ailleurs être vu comme un cas limite du potentiel logarithmique (« deep quench limit »), puisqu'on peut l'obtenir à partir de (1.6) en faisant tendre θ vers 0. Dans [101], le type de potentiel $f(u) = \beta(u) + g(u)$ est également considéré, avec des conditions au bord dynamiques.

1.2 Un contre-exemple au principe de comparaison pour l'équation de Cahn-Hilliard

Un caractère indésirable du modèle de Cahn-Hilliard avec mobilité constante et potentiel régulier est l'absence d'un principe du maximum, contrairement à ce qui se passe pour l'équation d'Allen-Cahn. Cela est souligné par plusieurs auteurs, comme par exemple Novick-Cohen [157], qui propose de considérer des mobilités de type $M(u) = 1 - u^2$ avec $u \in [0, 1]$ (dans ses notations) pour pallier ce problème. Debussche *et al.* [71] le remarquent également, pour des modèles de Cahn-Hilliard stochastiques.

Nous proposons ci-dessous un exemple qui confirme cette affirmation, dans le sens suivant : si la donnée initiale est à valeurs dans $[-1, 1]$ et la nonlinéarité est $f(u) = u^3 - u$, alors la solution u de l'équation de Cahn-Hilliard ne reste pas nécessairement à valeurs dans $[-1, 1]$.

Considérons le problème de Cauchy pour l'équation de Cahn-Hilliard avec conditions de Neumann sur $\Omega = (-L/2, L/2)$ $(L > 0)$:

$$\begin{cases} u_t = [f(u)]_{xx} - \alpha u_{xxxx} & x \in \Omega, \quad t > 0, \\ u_x(x,t) = 0, \quad u_{xxx}(x,t) = 0, & x \in \partial\Omega, \quad t > 0, \\ u(x,0) = u_0(x) & x \in \Omega, \end{cases} \tag{1.12}$$

où $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ est un polynôme de degré impair à coefficient dominant strictement positif, $\alpha > 0$ et $u_0 : \Omega \to \mathbb{R}$ est la donnée initiale.

Remarquons que toute constante $u \equiv c$ est solution de (1.12) pour la condition initiale $u_0 \equiv c$. Comme la fonctionnelle d'énergie associée à (1.12) est la même que pour l'équation d'Allen-Cahn (1), il est légitime de se demander si on a un principe de comparaison pour (1.12). Par exemple, si $f(y) = y^3 - y$ $(y \in \mathbb{R})$, $u \equiv 1$ et $u \equiv -1$ sont deux solutions particulières de (1.12) ; a-t-on $u(x,t) \in [-1,1]$ pour tout (x,t) dès que $u_0(x) \in [-1,1]$? Cela est faux en général. On a en effet, de façon élémentaire :

Proposition 1.1 *On suppose que $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ est un polynôme de degré impair à coefficient dominant strictement positif et que $\alpha > 0$. Pour tout $m \in (a,b)$ avec $-\infty \leq a < b < +\infty$, il existe une solution*

$$u \in C^\infty([-L/2, L/2] \times \mathbb{R}_+)$$

du problème (1.12) *telle que $L^{-1} \int_\Omega u_0(x)\,\mathrm{d}x = m$, $u_0(x) \in (a,b]$ pour tout $x \in \Omega$ et $u(0,t) > b$ pour $t > 0$ assez petit.*

Démonstration. Soit $m \in (a,b)$. On construit $u_0 \in C^\infty([-L/2, L/2], \mathbb{R})$ paire telle que $u_0(x) = b - x^4$ au voisinage de $x = 0$, $u_0 = c$ au voisinage de $\pm L/2$, avec $c \in (a,b)$, $u_0(x) \in (a,b]$ pour tout $x \in [-L/2, L2]$ et $L^{-1} \int_\Omega u_0(x)\,\mathrm{d}x = m$. Par régularité parabolique (voir par exemple [115]), l'unique solution u de (1.12) vérifie $u \in C^\infty([-L/2, L/2] \times \mathbb{R}_+)$ dans le sens où $u \in C^k(\mathbb{R}_+, C^l[-L/2, L/2])$ pour tout $k, l \in \mathbb{N}$. Par conséquent, la première équation de (1.12) est encore vérifié en $(x,t) = (0,0)$ et donc

$$u_t(0,0) = f''(u(0,0))u_x^2(0,0) + f'(u(0,0))u_{xx}(0,0) - \alpha u_{xxxx}(0,0).$$

Comme par construction $u(x,0) = b - x^4$ au voisinage de $x = 0$, on a

$$u_x(x,0) = -4x^3, \quad u_{xx}(x,0) = -12x^2 \quad \text{et } u_{xxxx}(x,0) = -24.$$

Ainsi,

$$u_t(0,0) = 24\alpha > 0.$$

D'autre part, pour tout $t > 0$, il existe $\xi_t \in (0,t)$ tel que

$$u(0,t) = u(0,0) + t u_t(0,0) + t^2 u_{tt}(0,\xi_t)/2,$$

donc $u(0,t) = b + 24\alpha t + o(t)$ et ainsi $u(0,t) > b$ pour $t > 0$ assez petit, comme annoncé. □

Remarque 1.1 Dans la démonstration ci-dessus, on a essentiellement utilisé le fait que le problème $u_t = -\alpha u_{xxxx}$ ne satisfait pas le principe de comparaison

$$\Big(u(x,0) \geq 0 \quad \forall x \in \Omega\Big) \Rightarrow \Big(u(x,t) \geq 0 \quad \forall x \in \Omega, \quad \forall t \geq 0\Big)$$

que l'on a pour le second ordre, *i.e.* pour l'équation $u_t = \alpha u_{xx}$ (avec conditions de Neumann). On n'a pas utilisé la forme spécifique de la nonlinéarité (mais plutôt sa régularité).

Remarque 1.2 Le contre-exemple ci-dessus avec conditions de Neumann fournit également un contre-exemple pour des conditions au bord périodiques puisque par parité,

$$u(-L/2,t) = u(L/2,t), \quad \forall t > 0.$$

Plus généralement, on remarque que l'argument est local au voisinage de $(x,t) = (0,0)$, de sorte que le contre-exemple est indépendant des conditions au bord choisies. Il s'applique également pour des conditions dynamiques au bord (comme considérées par exemple dans la Section 4.1), et il peut s'appliquer en toute dimension de domaine.

En l'absence d'un principe du maximum pour l'équation de Cahn-Hilliard, un des moyens standard pour obtenir des estimations L^∞ des solutions est d'augmenter la régularité de la condition initiale, et d'utiliser des injections de Sobolev (typiquement, on utilise que $H^2(\Omega) \subset C^0(\overline{\Omega})$ si Ω est un domaine borné de $\mathbb{R}^d$ ($1 \leq d \leq 3$) à bord lipschitzien). Une autre alternative est de modifier la non-linéarité à l'infini, comme dans [45].

1.3 A propos des solutions stationnaires du problème d'Allen-Cahn

Rappelons quelques résultats sur le problème modèle

$$\begin{cases} \varepsilon^2 \Delta u = u^3 - u, & \text{dans } \Omega \\ \partial_n u = 0 & \text{sur } \partial\Omega, \end{cases} \tag{1.13}$$

où Ω est un domaine borné de $\mathbb{R}^d$ ($d \in \mathbb{N}^\star$) et $\varepsilon > 0$.

Tout d'abord, lorsque $\Omega = \mathbb{R}^d$ (cas limite dans lequel on remplace la condition au bord de Neumann par d'autres conditions adaptées) on remarque que la première équation est invariante par translation et rotation sur $x \in \mathbb{R}^d$, et par la symétrie $u \mapsto -u$. Dans ce cas, par homothétie $x \mapsto x/\varepsilon$ on peut se ramener au cas $\varepsilon = 1$. Ces invariances, et plus généralement, la connaissance des solutions de (1.13) sur $\mathbb{R}^d$ donne des informations intéressantes sur ce qui peut se passer en domaine borné. Par exemple, pour $d = 1$, une solution explicite de $\varepsilon^2 u_{xx} = u^3 - u$ sur $\mathbb{R}$ est donnée par

$$u(x) = \tanh\left(\frac{x}{\sqrt{2}\varepsilon}\right) \tag{1.14}$$

Pour $\Omega = \mathbb{R}^d$, une conjecture de De Giorgi sur la symétrie de transition de certaines solutions de (1.13) a été abondamment étudiée (cf. [85] et références citées) : cette conjecture revient à savoir si, sous certaines hypothèses, l'on peut se ramener à une solution de la forme (1.14).

Cependant, une question telle que trouver *toutes* les solutions de (1.13) pour un domaine borné (par exemple, lorsque Ω est une boule de $\mathbb{R}^d$ pour $d \geq 2$) semble ouverte, même si beaucoup de résultats sur la multiplicité de solutions existent (cf., par exemple [128] et les références citées). Un résultat de Henry [116] assurant que pour un domaine générique, toutes les solutions de (1.13) sont hyperboliques, est à cet égard très intéressant (voir également [44] pour un résultat similaire lorsque la non-linéarité est générique, le domaine étant fixé). De tels résultats sont directement liés à la compréhension qualitative de la dynamique de l'équation d'évolution.

De manière beaucoup plus élémentaire, on peut remarquer que si Ω est un disque de $\mathbb{R}^2$, le problème (1.13) est invariant par rotation ; d'autre part, il est facile de montrer que pour $\varepsilon > 0$ petit, (1.13) admet une solution non radiale, et plus précisément, une solution impaire non nulle (voir par exemple [112]), de sorte que par rotation, le problème admet un continuum de solutions (cf. Figure 2.3). De même, si l'on remplace la condition de Neumann $\partial_n u = 0$ par des conditions périodiques sur le tore, le problème est invariant par translation : pour $\varepsilon > 0$ petit, le problème associé a une solution non constante et par translation, on a un continuum (même en dimension $d = 1$).

En relation avec le principe de comparaison valable pour le problème d'évolution, on peut remarquer :

Proposition 1.2 *Soit Ω domaine borné de $\mathbb{R}^d$ ($1 \leq d \leq 4$) à frontière lipschitzienne. Toute solution variationnelle $u \in H^1(\Omega)$ de* (1.13)*, i.e. telle que*

$$\int_\Omega \varepsilon^2 \nabla u \nabla \varphi \, \mathrm{d}x + \int_\Omega (u^3 - u)\varphi \, \mathrm{d}x = 0 \quad \forall \varphi \in H^1(\Omega)$$

est à valeurs dans $[-1, 1]$.

Démonstration. L'hypothèse que Ω est à frontière lipschitzienne et le fait que $d \leq 4$ garantissent l'injection de Sobolev $H^1(\Omega) \subset L^4(\Omega)$, de sorte que toutes les intégrales ci-dessus ont un sens. On choisit $\varphi = (u-1)_+$, de sorte que

$$\int_\Omega \varepsilon^2 |\nabla u|^2 1_{\{x \,:\, u(x)>1\}} \, \mathrm{d}x + \int_\Omega (u^3 - u)(u-1) 1_{\{x \,:\, u(x)>1\}} \, \mathrm{d}x = 0.$$

On a une contradiction si $\{x \,:\, u(x) > 1\}$ est de mesure > 0, car $(u^3 - u)(u - 1) > 0$ si $u > 1$. □

Lorsque $d = 1$, le problème (1.13) admet un nombre fini de solutions, que l'on sait déterminer plus ou moins explicitement à l'aide de fonctions elliptiques. Ce résultat est fondamental, car la connaissance de ces solutions permet de décrire finement la dynamique de l'équation d'évolution associée : on pourra consulter par exemple [115] pour la description de l'attracteur dans le cas des conditions au bord de Dirichlet, et [91, 42] pour la dynamique des états métastables.

L'argument de la démonstration, que nous rappelons ci-dessous, repose sur une méthode de tir et semble remonter à Chafee et Infante [52] qui ont établi le résultat pour le problème avec des conditions au bord de Dirichlet. L'argument peut s'étendre à d'autres problèmes stationnaires en dimension 1 ayant une structure proche : problème de Cahn-Hilliard, bien que l'argument soit plus technique [51, 127, 108, 157, 177], équation de Sivashinsky [159], problème de croissance épitaxiale [125],... Par contre, il ne semble pas pouvoir être appliqué au problème de Swift-Hohenberg ou au problème de champ de phase cristallin considérés dans le Chapitre 7 pour garantir un nombre fini de solutions en dimension un.

Théorème 1.1 *Si $\Omega = (0, L)$, le problème* (1.13) *admet un nombre fini de solutions. Plus précisément, si $L/\varepsilon \in (k\pi, (k+1)\pi]$ pour un $k \in \mathbb{N}$, alors l'ensemble des solutions est $\{0, \pm w_0, \pm w_1, \pm w_2, \ldots, \pm w_k\}$, où les fonctions w_j sont telles que w_1, w_3, w_5 sont impaires et w_0, w_2, w_4, w_6, ... sont paires par rapport au centre de Ω, et chaque w_j est $2L/(\varepsilon j)$-périodique (pour $j = 0$, $w_0 = 1$).*

Démonstration. Par régularité elliptique, toute solution variationnelle de (1.13) est une solution classique. En posant $u(x) = u(x/\varepsilon)$, on est ramené à trouver les solutions $u \in C^2([0, L/\varepsilon], \mathbb{R})$ de

$$\begin{cases} u_{xx} = u^3 - u & x \in (0, L/\varepsilon) \\ u_x(0) = u_x(L/\varepsilon) = 0. \end{cases} \tag{1.15}$$

On remarque que (1.15) admet les solutions constantes 0, 1 ou -1. Pour le cas général, on considère la solution maximale $u \in C^2([0, x_a^\star), \mathbb{R})$ ($a \in \mathbb{R}$) du problème de Cauchy

$$\begin{cases} u''(x) = u^3(x) - u(x), \quad x \geq 0, \\ u(0) = a, \\ u'(0) = 0, \end{cases} \tag{1.16}$$

et on va chercher les racines de u'. En multipliant (1.16) par $u'(x)$ et en intégrant entre 0 et x, on trouve

$$\frac{(u'(x))^2}{2} = \frac{u^4(x)}{4} - \frac{u^2(x)}{2} + C \quad \forall x \in [0, x_a^\star),$$

ce que l'on récrit en changeant la constante d'intégration

$$\frac{(u'(x))^2}{2} = \frac{1}{4}\left(u^2(x)-1\right)^2 - \frac{1}{4}\left(a^2-1\right)^2 \quad \forall x \in [0, x_a^\star). \tag{1.17}$$

D'après la Proposition 1.2, on peut se concentrer sur les cas $a \in [-1, 1]$, avec de plus $a \notin \{0, 1, -1\}$ puisque l'on connaît déjà les solutions constantes. D'autre part, par la symétrie $u \mapsto -u$ du problème, on peut supposer $a > 0$. Remarquons que $u''(0) < 0$, donc u atteint un maximum strict en $x = 0$. Soit $x_a \in (0, x_a^\star)$ le premier point tel que $u(x_a) = 0$ (il est clair qu'un tel point existe, car tant que u est à valeurs dans $(0, 1)$, on a $u'' < 0$). On a $u'(x) < 0$ pour tout $x \in (0, x_a)$, et d'après (1.17),

$$u'(x) = -\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\left(u^2(x)-1\right)^2 - \left(a^2-1\right)^2} \quad \forall x \in [0, x_a],$$

et donc

$$\int_{u(x)}^{a} \frac{\sqrt{2}\,\mathrm{d}v}{\sqrt{\left(v^2-1\right)^2 - \left(a^2-1\right)^2}} = x \quad \forall x \in [0, x_a]. \tag{1.18}$$

En particulier,

$$\int_0^a \frac{\sqrt{2}\,\mathrm{d}v}{\sqrt{\left(v^2-1\right)^2 - \left(a^2-1\right)^2}} = x_a,$$

ce que l'on peut récrire

$$x_a = \int_0^1 \frac{\sqrt{2}\,\mathrm{d}\sigma}{\sqrt{(1-\sigma^2)(2-a^2(1+\sigma^2))}},$$

On en déduit que $a \mapsto x_a$ est continue et strictement croissante sur $(0, 1)$. En particulier pour tout $a \in (0, 1)$,

$$x_a > \lim_{a \to 0^+} x_a = \int_0^1 \frac{\mathrm{d}\sigma}{\sqrt{1-\sigma^2}} = \frac{\pi}{2}, \tag{1.19}$$

et $\lim_{a \to 1^-} x_a = +\infty$. Par unicité pour le problème de Cauchy (1.16) et par symétrie, pour $x \in [x_a, 2x_a]$, on a $u(x) = -u(2x_a - x)$, et la première racine strictement positive de $u'(x)$ est donc $2x_a$. De même, pour $x \in [2x_a, 4x_a]$, on a $u(x) = -u(x - 2x_a)$. Ainsi, u est $4x_a$ périodique, les racines de u' sont 0, $2x_a$, $4x_a$, $6x_a, \ldots$

Si $L/\varepsilon \le \pi$, d'après (1.19), on ne peut pas trouver de $a \in (0, 1)$ tel que $2x_a = L/\varepsilon$. Si $L/\varepsilon \in (k\pi, (k+1)\pi]$, ($k \in \mathbb{N}^\star$), les k solutions du problème sont donnés par $2x_{a_1} = L/\varepsilon$, $4x_{a_2} = L/\varepsilon$, ..., $2kx_{a_k} = L/\varepsilon$, avec $1 > a_1 > a_2 > \cdots > a_k > 0$. A chaque racine a_j correspond un w_j et le résultat est démontré. □

Remarque 1.3 Si $L/\varepsilon > \pi$, on peut montrer que seules les solutions stationnaires ± 1 sont stables pour le problème d'évolution. D'autre part, l'intégrale (1.18) est une intégrale elliptique, que l'on sait calculer par des fonctions elliptiques.

1.4 De l'équation d'Allen-Cahn vectorielle au flot des applications harmoniques

Soit Ω un domaine borné de $\mathbb{R}^n$ ($n \ge 1$). Considérons la version vectorielle suivante de l'équation d'Allen-Cahn : trouver $u : \Omega \times \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}^m$ ($m \ge 1$) solution de

$$u_t = \Delta u + \frac{1}{\varepsilon^2} u(1 - |u|^2) \text{ dans } \Omega \times \mathbb{R}_+, \tag{1.20}$$

où $|\cdot|$ désigne la norme euclidienne dans $\mathbb{R}^m$. Ce système d'équations aux dérivées partielles est complétée par une condition initiale et des conditions au bord adéquates (Neumann homogène ou Dirichlet non homogène). Comme dans le cas $m = 1$, l'équation (1.20) est un flot de gradient de la fonctionnelle

$$E_\varepsilon(v) = \int_\Omega \frac{1}{2} |\nabla v|^2 + \frac{1}{4\varepsilon^2}(|v|^2 - 1)^2 \, \mathrm{d}x$$

pour le produit scalaire $L^2(\Omega)$. Lorsque $m = 1$, en faisant le changement d'échelle de temps $u(x,t) = w(x, \varepsilon^{-2}t)$, on retrouve l'équation d'Allen-Cahn classique

$$w_t = \varepsilon^2 \Delta w + w(1 - w^2) \text{ dans } \Omega \times \mathbb{R}_+. \tag{1.21}$$

Pour $m = 2$, l'équation (1.20) est attribuée à Ginzburg et Landau [130].

Intéressons-nous maintenant au comportement asymptotique de la solution u_ε de (1.20) lorsque $\varepsilon \to 0$. Lorsque $m = 1$ et $n \geq 2$, un raisonnement heuristique dû historiquement à Allen et Cahn [49] montre que u_ε sépare Ω en deux régions où $u_\varepsilon \approx +1$ et $u_\varepsilon \approx -1$, respectivement, et l'interface entre les deux régions se déplace avec une vitesse normale égale à la courbure moyenne (*i.e.* à la somme des courbures principales). Ce raisonnement heuristique a été rendu rigoureux dans plusieurs papiers (cf. [68, 43, 119] et les références citées), et l'équation limite peut être décrit en toute généralité comme le flot par courbure moyenne au sens de Brakke [36].

Le résultat Bronsard et Kohn dans [43] utilise une hypothèse de type $\varepsilon E_\varepsilon(u_\varepsilon(0)) \leq M < \infty$ pour la condition initiale. Leur démonstration est basée sur des méthodes d'énergies et sur des idées développées antérieurement pour le problème stationnaire. On sait en effet que $\varepsilon E_\varepsilon$ Γ-converge vers un problème de périmètre (cf. [154] et les références citées dans [43]), pour lequel l'équation d'évolution associée est le flot de courbure moyenne. Le résultat pour le problème d'évolution est donc attendu, sauf qu'il se produit moyennant un changement d'échelle de temps. En effet, le flot de gradient $L^2(\Omega)$ de $\varepsilon E_\varepsilon$ s'écrit

$$v_t = \varepsilon \Delta v + \frac{1}{\varepsilon} v(1 - |v|^2) \quad \text{dans } \Omega \times \mathbb{R}_+,$$

et l'on retrouve la bonne échelle de temps, celle du problème (1.20), en posant $u(x,t) = v(x, \varepsilon^{-1}t)$.

Notons que lorsque $m = 1$ et $n = 1$, l'interface est réduite à des points et il n'y a pas de courbure : dans ce cas, le déplacement des interfaces est plus lent que n'importe quelle puissance de ε, comme cela a été montré rigoureusement [42, 91]). Il s'agit d'un phénomène de *métastabilité dynamique*.

Pour $m = 2$ et $n \geq 2$, cas de l'équation de Ginzburg-Landau complexe, Bethuel, Orlandi et Smets ont décrit en toute généralité (pour le domaine $\Omega = \mathbb{R}^n$) dans [29] la limite asymptotique de la vorticité de u_ε lorsque $\varepsilon \to 0$, sous l'hypothèse

$$\frac{1}{|\log \varepsilon|} E_\varepsilon(u_\varepsilon(0)) \leq M < \infty.$$

Là encore, ce résultat est basé des résultats plus anciens pour le problème stationnaire décrivant la Γ-limite des fonctionnelles $|\log \varepsilon|^{-1} E_\varepsilon$ [26], ainsi que des résultats antérieurs de convergence pour le problème d'évolution (cf. [173] et les références citées). La difficulté de comprendre le cas limite vient de la présence de singularité ponctuelles (vortex) dans l'équation limite ; ces singularités expliquent également la présence du terme $|\log \varepsilon|$. Noter qu'un changement d'échelle de temps en $|\log \varepsilon|$ est encore nécessaire pour passer du flot de gradient de E_ε au flot de gradient limite.

Ces problèmes d'échelle de temps et les résultats de convergence asymptotiques évoqués ci-dessus sont liées à une question plus générale posée par De Giorgi dans les années 70, qui consiste à relier le flot de gradient d'une famille de fonctionnelles E_ε et le flot de gradient de F, lorsque E_ε Γ-converge vers F. Un critère général répondant à cette question, et basé sur des méthodes d'énergie, a été donné par Sandier et Serfaty dans [173].

Pour $m \geq 3$, il n'y a plus de phénomènes de concentration, et la fonctionnelle d'énergie E_ε Γ-converge vers la fonctionnelle des applications harmoniques, définie par

$$E_0 = \begin{cases} \int_\Omega |\nabla u|^2 \, \mathrm{d}x & \text{si } |u| = 1 \text{p.p.}, \\ +\infty & \text{sinon}. \end{cases}$$

Dans ce cas, le flot (1.20) converge vers le flot des applications harmoniques défini par (11). Notons cependant que si le problème de la limite asymptotique de u_ε est plus simple lorsque $m \geq 3$ (par rapport au cas $m = 1$ et $m = 2$), cela n'exclut nullement l'existence de singularités et les problèmes de non unicité pour les solutions (faibles) du flot des applications harmoniques, dès la dimension deux de domaine (cf. Section 8.2).

Chapitre 2

Convergence vers l'équilibre pour des systèmes discrétisés en temps (articles [12, 17])

Dans [12, 17], nous nous sommes intéressés au problème de la convergence vers l'équilibre pour des discrétisation en temps de flots de type gradient. L'outil essentiel est l'inégalité de Łojasiewicz pour des fonctions réelles analytiques. Avant de résumer les résultats obtenus, nous rappelons quelques généralités sur les flots de type gradient.

2.1 Convergence vers l'équilibre pour des flots de type gradient

Comme problème modèle, considérons le flot de gradient

$$U'(t) = -\nabla F(U(t)) \quad t \geq 0, \tag{2.1}$$

où $U = (u_1, \ldots, u_d)^t$, $F \in C^{1,1}_{loc}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ et

$$\nabla F = \left(\frac{\partial F}{\partial u_1}, \frac{\partial F}{\partial u_2}, \ldots, \frac{\partial F}{\partial u_d} \right)^t .$$

En faisant le produit scalaire de (2.1) par $-U'(t)$, on voit que

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} F(U(t)) = - \left\| U'(t) \right\|^2 , \tag{2.2}$$

où $\|\cdot\|$ est la norme euclidienne dans $\mathbb{R}^d$. En particulier, $F(U(t))$ décroît. On en déduit (cf. [112]) que si U est une solution de (2.1) qui est bornée sur $[0, +\infty)$, alors l'ensemble ω-limite de $U(0)$, défini par

$$\omega(U(0)) = \{U^\star \in \mathbb{R}^d \ : \ \exists t_n \to +\infty, \ U(t_n) \to U^\star\},$$

est un compact connexe non vide inclus dans l'ensemble $\mathcal{S}$ des points critiques de F, défini par

$$\mathcal{S} = \{U^\star \in \mathbb{R}^d \ : \nabla F(U^\star) = 0\}. \tag{2.3}$$

Si $\mathcal{S}$ est discret, cela implique que $U(t)$ a une limite lorsque $t \to +\infty$. Si $\mathcal{S}$ n'est pas discret et que $d \geq 2$, ce n'est plus nécessairement vrai, comme on le sait depuis [66, 160] (lorsque $d = 1$, c'est toujours vrai, par monotonie). La fonction suivante (voir Figure 2.1), donnée en coordonnées polaires (r, θ) dans $\mathbb{R}^2$, fournit un contre-exemple où une trajectoire est explicite (cf. [19, 118]) :

$$F(r,\theta) = \begin{cases} \mathrm{e}^{-1/(1-r^2)} \left[1 - \frac{4r^4}{4r^4+(1-r^2)^4} \sin(\theta - \frac{1}{1-r^2})\right] & \text{si } r < 1 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \tag{2.4}$$

En effet, $F \in C^\infty(\mathbb{R}^2 \setminus \{(0,0)\}) \cap C^1(\mathbb{R}^2)$, $F(r,\theta) > 0$ pour $r < 1$ et tout point du cercle $r = 1$ fournit un minimiseur global. D'autre part, F admet un nombre fini de points critiques tels que $r < 1$ (en particulier, l'origine et tout maximum global de F). On peut vérifier que la courbe d'équation $\theta = 1/(1-r^2)$ est une trajectoire solution. Comme $r(\theta) \to 1$ lorsque $\theta \to +\infty$, son ensemble ω-limite est le cercle unité. De plus, comme deux trajectoires ne se coupent pas, pour toute condition initiale telle que $r(0)$ est assez proche de 1, l'ensemble ω-limite associé est le cercle unité.

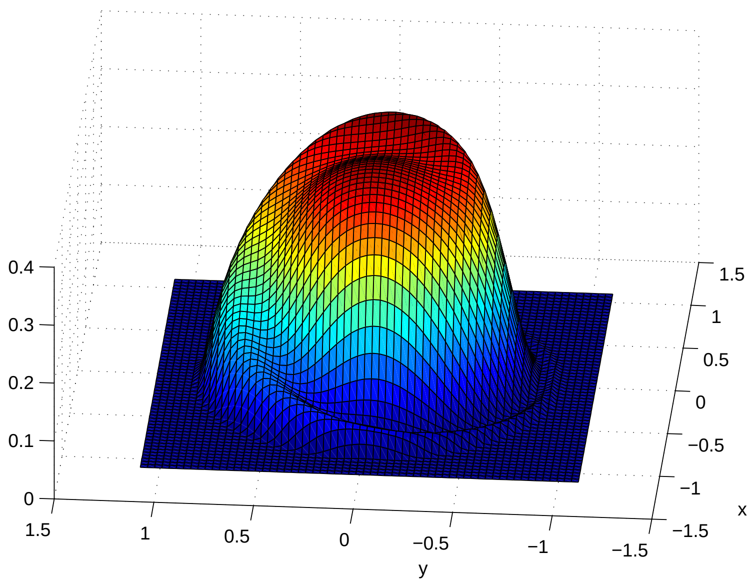


FIG. 2.1: la fonction « Mexican hat »

Un résultat de Łojasiewicz[1] [136, 137] montre que si F est réelle analytique, alors toute solution bornée de (2.1) converge vers un point critique de F lorsque $t \to +\infty$: en particulier, le phénomène ci-dessus ne peut pas se produire. Ce résultat repose sur l'inégalité suivante :

Définition 2.1 (Inégalité de Łojasiewicz) On dit que $F \in C^1(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ satisfait l'inégalité de Łojasiewicz au voisinage de $U^\star$ s'il existe $\sigma > 0$, $c_L > 0$ et $\theta \in (0, 1/2]$ tels que pour tout $V \in \mathbb{R}^d$ vérifiant $\|V - U^\star\| < \sigma$, on a

$$|F(V) - F(U^\star)|^{1-\theta} \leq c_L \|\nabla F(V)\| . \tag{2.5}$$

Łojasiewicz a montré que si F est réelle analytique au voisinage de $U^\star$, alors F satisfait l'inégalité de Łojasiewicz au voisinage de $U^\star$ (pour un exposant θ qu'on ne connaît pas explicitement en général). Il s'agit d'un résultat difficile (lorsque $U^\star$ est un point critique, bien sûr, ce qui est le cas d'intérêt).

Remarque 2.1 (Exposant de Łojasiewicz) L'exposant θ apparaissant dans l'inégalité (2.5) est appelé *exposant de Łojasiewicz*. Par exemple, si $F(U) = \|U\|^p$ avec $p \geq 2$, alors F satisfait l'inégalité de Łojasiewicz en

[1] consulter également la page web de M. Coste (`http ://perso.univ-rennes1.fr/michel.coste/`), qui a récrit [137] pour le rendre plus accessible

$U^\star = 0$ pour l'exposant (optimal) $\theta = 1/p$. Remarquer que si F satisfait l'inégalité de Łojasiewicz pour un exposant $\theta \in (0, 1/2]$, alors elle la satisfait également pour tous les exposants $\theta' \in (0, \theta]$ (quitte à changer les constantes σ et c_L). Par contre, il n'existe pas toujours un exposant optimal pour lequel l'inégalité est vérifié : par exemple, si $d = 1$ et $F(U) = |U|^p (\ln |U|)^{-1}$, avec $p \geq 2$, alors F satisfait l'inégalité Łojasiewicz pour tout $\theta \in (0, 1/p)$, mais pas pour $\theta = 1/p$. On pourrait envisager des exposants $\theta \in (1/2, 1]$, comme le font, par exemple, Attouch et Bolte [21] ; cependant, pour une fonction analytique F non constante, au voisinage d'un point critique $U^\star$, l'exposant θ est nécessairement $\leq 1/2$, comme on peut s'en convaincre par un développement limité en $U^\star$ selon une direction où F n'est pas constante. Ainsi, $\theta = 1/2$ est génériquement le meilleur exposant possible.

Une fois l'inégalité (2.5) établie, la preuve de la convergence est élémentaire. En effet, $F(U(t))$ décroît vers une limite $F^\star$, que nous supposerons égale à 0 sans perte de généralité. Soit $t_n \to +\infty$ et $U^\star \in \mathcal{S}$ tels que $U(t_n) \to U^\star$, et en particulier, $F^\star = F(U^\star)$. On choisit n assez grand pour que

$$\|U(t_n) - U^\star\| < \sigma/2 \quad \text{et} \quad c_L \theta^{-1} F(U(t_n))^\theta < \sigma/2,$$

et l'on pose

$$t^+ = \sup\{t \geq t_n \ : \ \|U(t_n) - U^\star\| < \sigma \quad \forall s \in [t_n, t)\}.$$

Pour $t \in [t_n, t^+)$,

$$\begin{aligned} -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} F(U(t))^\theta &= -\theta \langle U'(t), \nabla F(U(t)) \rangle F(U(t))^{\theta - 1}, \\ &\geq \theta \left\| U'(t) \right\| \|\nabla F(U(t))\| \, F(U(t))^{\theta-1}, \\ &\geq \theta c_L^{-1} \left\| U'(t) \right\|. \end{aligned}$$

En intégrant, on obtient ainsi

$$F(U(t_n))^\theta - F(U(t))^\theta \geq \theta c_L^{-1} \int_{t_n}^t \left\| U'(s) \right\| \, \mathrm{d}s \geq \theta c_L^{-1} \|U(t_n) - U(t)\|, \tag{2.6}$$

pour tout $t \in [t_n, t^+)$. Cela implique que $t^+ = +\infty$, sinon $\|U(t^+) - U^\star\| = \sigma$ d'une part, et

$$\left\| U(t^+) - U^\star \right\| \leq \left\| U(t^+) - U(t_n) \right\| + \|U(t_n) - U^\star\| < \sigma,$$

d'autre part, par le choix de t_n.

L'exposant θ, lorsqu'il est connu, permet également d'obtenir des *taux de convergence* vers l'équilibre. En effet, d'après (2.1), (2.2) et (2.5), $y(t) = F(U(t)) \geq 0$ satisfait au voisinage de $U^\star$ l'inégalité différentielle $y'(t) \leq -c_L^2 y^{2(1-\theta)}$, de sorte que pour $\theta \in (0, 1/2)$, on a $0 \leq y(t) \leq C(1+t)^{-(1/(1-2\theta)}$, pour une constante $C > 0$. D'autre part, d'après (2.6), pour tout t assez grand, $\|U(t) - U^\star\| \leq \theta^{-1} c_L F(U(t))^\theta$, et on en déduit que

$$\|U(t) - U^\star\| \leq C'(1+t)^{-\theta/(1-2\theta)}, \quad \forall t \geq 0.$$

Lorsque $\theta = 1/2$, on trouve de même que

$$\|U(t) - U^\star\| \leq C''(\mathrm{e}^{-\alpha t}), \quad \forall t \geq 0,$$

pour des constantes $C'' > 0$ et $\alpha > 0$. Ces taux de convergence sont optimaux, dans le sens où pour $F(U) = |U|^p$ en dimension 1, la solution de (2.1) est

$$U(t) = \begin{cases} U(0)\,\mathrm{e}^{-2t} & \text{si } p = 2, \\ \left(U(0)^{-(p-2)} + (p-2)pt \right)^{-1/(p-2)} & \text{si } p > 2. \end{cases}$$

En dimension finie, le résultat de convergence, sa démonstration, ainsi que l'obtention des taux de convergence se généralisent à des systèmes différentielles possédant une fonction de Liapounov stricte qui satisfait une condition d'angle : cf. par exemple, [19, 23]. Le système différentiel du second ordre de type gradient

$$\varepsilon U''(t) + U'(t) = -\nabla F(U(t)), \quad t \geq 0,$$

où ε est une constante positive peut ainsi être inclus dans un tel cadre [23]. Des systèmes dissipatifs sortant de ce cadre mais ayant une structure proche peuvent parfois être traités de manière similaire : c'est le cas du système semi-discrétisé en espace des équations de Cahn-Hilliard-Gurtin traité dans [9] (cf. Théorème 3.2 ci-dessous). Des systèmes de type gradient et asymptotiquement autonomes, comme

$$\varepsilon U''(t) + U'(t) + \nabla F(U(t)) = G(t), \quad t \geq 0, \tag{2.7}$$

où $\varepsilon \geq 0$ et $G(t) \to 0$ dans un sens approprié, peuvent également être traités (cf. [62, 118]). Le système obtenu par semi-discrétisation en espace de l'équation de Cahn-Hilliard avec terme inertiel, qui a une structure proche de (2.7), a ainsi été traité dans [13] (cf. Théorème 4.4 ci-dessous).

Le résultat de Łojasiewicz a été étendu à des équations d'évolution en dimension infinie (comme l'équation de la chaleur semi-linéaire) par Simon [175]. Plus tard, Jendoubi [121] a simplifié la preuve de Simon et a ouvert la voie à tout un champ d'applications qui est actuellement encore en essor (voir, par exemple, [150, 118, 61] et les références citées). L'inégalité de Łojasiewicz est alors établie dans des normes adaptées, et les taux de convergence également. Notons la différence entre cette approche et des résultats génériques de convergence vers l'équilibre comme ceux de Lions [135] ou de Brunovsky et Polacik [44].

Étant donné le succès de la méthode pour des systèmes dynamiques continus, la question se pose de savoir dans quelle mesure on peut l'adapter à des systèmes dynamiques discrets. Cette thématique semble plus récente, mais est amenée à se développer : un des premiers papiers s'intéressant à cette question est, à ma connaissance, [19], dans un contexte d'optimisation. Des schémas discrets en temps utilisant l'inégalité de Łojasiewicz pour montrer la convergence vers l'équilibre apparaissent dans [92, 172]. Dans [21], Attouch et Bolte ont montré la convergence de l'algorithme proximal sous des conditions très générales, et ont également obtenu des taux de convergence. Notons que l'algorithme proximal n'est autre que le schéma d'Euler implicite appliqué à l'EDO (2.1). Bolte *et al.* ont généralisé ce résultat en dimension infinie dans [30]. Dans [12], de manière indépendante, nous avons démontré des résultats similaires à ceux de [21, 30] dans des cas particuliers, et nous les avons appliqué à des discrétisations d'EDP, notamment l'équation de Cahn-Hilliard (pour une discrétisation totale) et l'équation d'Allen-Cahn (problème semi-discrétisé en temps). Dans [17], nous avons montré la convergence vers l'équilibre pour la solution du schéma d'Euler implicite appliqué à (2.7), retrouvant ainsi dans un cadre discret le résultat de Chill et Jendoubi. Nous détaillons ci-dessous les principaux résultats obtenus.

2.2 Convergence vers l'équilibre pour des schémas discrets : cas du flot de gradient

Le schéma d'Euler implicite appliqué à (2.1) s'écrit : pour $U^0 \in \mathbb{R}^d$ donné, la suite $(U^n)_{n\in\mathbb{N}}$ satisfait

$$\frac{U^{n+1} - U^n}{\Delta t} = -\nabla F(U^{n+1}), \quad n \geq 0, \tag{2.8}$$

où $\Delta t > 0$ est le pas de temps.

Exemple 3 (Un contre-exemple numérique) La Figure 2.2 montre une simulation effectuée pour le schéma d'Euler implicite appliquée à la fonction « mexican hat » définie par (2.4). Le pas de temps est $\Delta t = 0.05$, la condition initiale est $r = 0.01$, $\theta = 0$, et j'ai effectué 1.5 milliard d'itérations. La solution est en pointillés

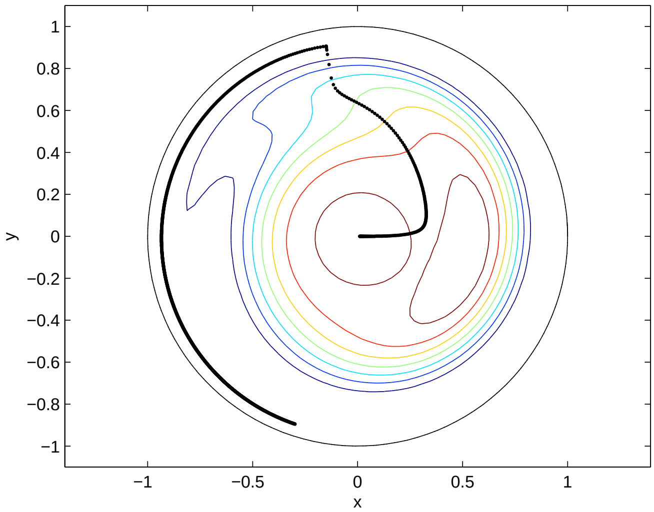


FIG. 2.2: Euler implicite pour la fonction « Mexican hat »

noirs, et les autres lignes représentent des lignes de niveau de la fonction. Noter que la solution s'approche du bord rapidement (elle atteint $r \approx 0.9191$ en 36 secondes), puis commence à spiraler très lentement en s'approchant du bord.

La Figure 2.2 indique que l'on peut s'attendre à des contre-exemples du même type pour le système discrétisé que pour le système continu – même si un tel contre-exemple n'est pas forcément immédiat à expliciter. Il est donc naturel de chercher des conditions sur la fonction F pour garantir que la suite (U^n) définie par (2.8) ait une limite.

Pour obtenir une solution à l'équation (2.8), il est plus pratique de l'écrire sous la forme d'un problème de minimisation :

$$U^{n+1} \in \text{argmin} \left\{ \frac{\|W - U^n\|^2}{2\Delta t} + F(W) \ : \ W \in \mathbb{R}^d \right\}. \tag{2.9}$$

L'existence d'une suite définie par (2.9) est garantie par exemple si $\inf_{\mathbb{R}^d} F > -\infty$ (sans condition supplémentaire, l'unicité n'est a priori pas garantie). Toute suite satisfaisant (2.9) vérifie également (2.8), en considérant l'équation d'Euler-Lagrange associée au problème de minimisation. La réciproque n'est pas vraie, mais si l'on dispose d'un critère d'unicité pour (2.8) (ce qui est souvent le cas dans les applications, dès que Δt est assez petit), alors les deux formulations sont équivalentes.

Dans [12], nous avons établi le résultat suivant, où $\mathcal{S}$ est l'ensemble des points critiques de F, défini par (2.3). La démonstration est une adaptation de la démonstration du cas continu, rappelée ci-dessus.

Théorème 2.1 (Merlet & P. [12]) *On suppose que $F \in C^1(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ est coercive, i.e, $\lim_{\|V\| \to +\infty} F(V) = +\infty$, et que F satisfait l'inégalité de Łojasiewicz (Définition 2.1) au voisinage de tout point de $\mathcal{S}$. Si $(U^n)_{n \geq 0}$ est une suite définie par* (2.9)*, alors il existe $U^\star \in \mathbb{R}^d$ tel que $U^n \to U^\star$ lorsque $n \to +\infty$. De plus, en notant θ l'exposant de Łojasiewicz au voisinage de $U^\star$, on a :*

- *si $\theta = 1/2$, il existe $C > 0$ et $\alpha > 0$ tels que*

$$\|U^n - U^\star\| \leq C\,\mathrm{e}^{-\alpha n \Delta t}, \quad \forall n > 0;$$

- *si $\theta \in (0, 1/2)$, il existe $C > 0$ telle que*

$$\|U^n - U^\star\| \leq C(n\Delta t)^{-\theta/(1-2\theta)}, \quad \forall n > 0.$$

Remarque 2.2 Le résultat obtenu parallèlement par Attouch et Bolte [21] est plus général sur plusieurs points :

- il considère le schéma à pas variable $0 < \Delta t_\star \le \Delta t_n \le \Delta t^\star < +\infty$;
- il remplace l'hypothèse « $F \in C^1(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ » par « F définie et continue sur $dom(F) \subset \mathbb{R}^d$ » (et la définition de l'inégalité de Łojasiewicz est généralisée, avec un exposant $\theta \in (0,1]$) ;
- il remplace l'hypothèse « F coercive » par « $\inf_{\mathbb{R}^d} F > -\infty$ et $(U^n)_n$ bornée ».

Remarque 2.3 Dans le résultat ci-dessus, et dans la définition de l'algorithme (2.9), on peut remplacer $\mathbb{R}^d$ muni de la norme $\|\cdot\|$ par un espace euclidien E de dimension d, muni de sa norme euclidienne. En choisissant une base orthonormée de E, on retrouve l'algorithme (2.9). En particulier, on peut choisir $\mathbb{R}^d$ muni du produit scalaire $\langle X, Y\rangle_A = X^t AY$, où A est une matrice symétrique définie positive de taille d. La norme $\|\cdot\|$ est alors remplacée par la norme $\|X\|_A = (X^t AX)^{1/2}$. Cette remarque est utile dans les applications (cf. exemples ci-dessous).

Exemple 4 Dans [12], nous avons appliqué le Théorème 2.1 à un schéma totalement discrétisé de l'équation de Cahn-Hilliard (1.5). Nous avons ainsi pu améliorer un résultat de comportement asymptotique de Elliott [77]. Rappelons que l'équation de Cahn-Hilliard est un flot de gradient pour le produit scalaire H^{-1}. Avec une semi-discrétisation en espace *ad hoc* par éléments finis (ou une discrétisation standard par différences finies), nous retrouvons cette structure de flot de gradient, et le Théorème 2.1 s'applique naturellement. La Figure 2.3 illustre ce résultat : elle montre la solution asymptotique de l'équation de Cahn-Hilliard (9) sur le disque unité, pour des conditions au bord de Neumann, pour la non-linéarité $f'(u) = u^3 - u$, et pour un paramètre $\varepsilon^2 = 0.05$. La solution est obtenue par le schéma complètement discrétisé d'Elliott [77] (éléments finis P^1 « splitting » en espace, Euler implicite en temps) au bout de 600 itérations pour un pas de temps $\Delta t = 0.015$. On a choisi deux conditions initiales aléatoires distinctes et de moyenne nulle ; chacune de ces conditions génère une solution asymptotique distincte.

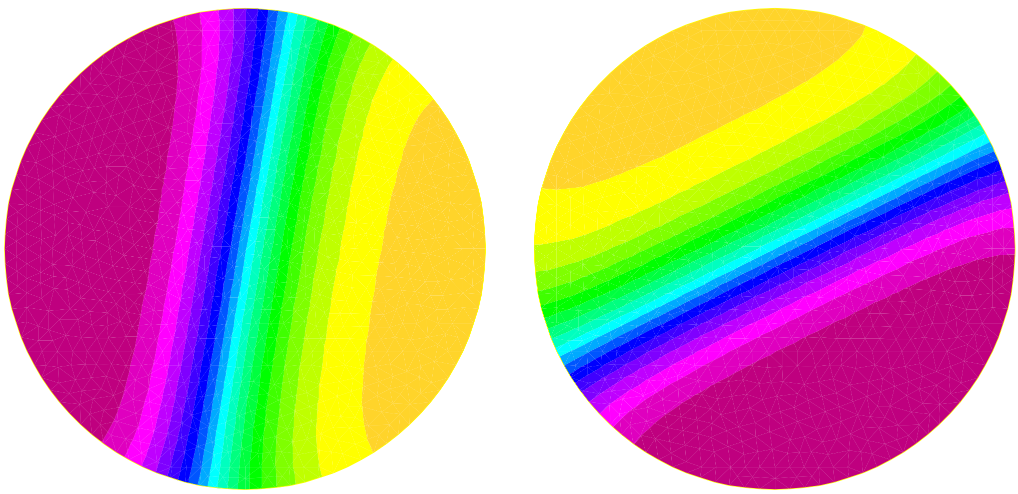


FIG. 2.3: Deux solutions stationnaires de l'équation de Cahn-Hilliard sur le disque unité ($\varepsilon^2 = 0.05$)

Exemple 5 De la même manière, dans [14], la discrétisation du problème de Cahn-Hilliard avec conditions au bord dynamiques nous a permis de mettre en évidence une structure de flot de gradient. Avec cette remarque, la convergence du schéma semi-discrétisé en espace et du schéma totalement discrétisé s'en déduisent (cf. Théorèmes 4.1 et 4.3 ci-dessous).

Exemple 6 Le cas des équations de Cahn-Hilliard-Gurtin (3.3)–(3.4), traité dans [9, 15], ne rentre pas dans le cadre ci-dessus, sauf pour certaines valeurs des coefficients (par exemple, en dimension 1 d'espace si $a = b = 0$). En effet, les termes de type convectif $a \cdot \nabla u_t$ et $b \cdot \nabla w$ brisent la symétrie. Pour les résultats de convergence vers l'équilibre des Théorèmes 3.2 et 3.5 ci-dessous, nous avons donc dû adapter les démonstrations.

Nous énonçons un résultat de convergence reliant le problème continu et le problème discret.

Proposition 2.1 (Merlet & P. [12]) *Soit $U \in C^1([0, +\infty), \mathbb{R}^d)$ une solution (bornée) de* (2.1)*, où $F \in C^{1,1}_{loc}(\mathbb{R}^d)$ est coercive et satisfait l'inégalité de Łojasiewicz en un point $U^\star$ de $\omega(U(0))$, de sorte que*

$$\lim_{t \to +\infty} U(t) = U^\star.$$

Si $U^\star$ est un minimiseur local de F, alors pour $\Delta t > 0$ assez petit, et pour $U^0_{\Delta t}$ assez proche de $U(0)$, l'unique suite $(U^n_{\Delta t})_n$ générée par (2.8) *converge vers une limite $U^\star_{\Delta t}$ lorsque $n \to +\infty$, et de plus, $U^\star_{\Delta t} \to U^\star$ lorsque $\Delta t \to 0$ et $U^0_{\Delta t} \to U(0)$.*

Remarque 2.4 Dans [12], nous avons également considéré le cas du θ-schéma pour la discrétisation de (2.1), qui dans le cas particulier $\theta = 1/2$, est un schéma de Crank-Nicolson, d'ordre 2 en temps (dans le cas $\theta = 1$, on retrouve le schéma d'Euler implicite). Nous avons obtenu la convergence vers l'équilibre sous les hypothèses du Théorème 2.1, en supposant de plus $\Delta t > 0$ assez petit et $F \in C^{1,1}_{loc}(\mathbb{R}^d)$ semi-convexe (cf. (2.18)).

Le Théorème 2.1 peut s'étendre, dans une certaine mesure, en dimension infinie (cf. [30]). Nous l'avons montré dans [12] sur un problème modèle : l'équation d'Allen-Cahn

$$u_t = \Delta u - f'(u), \quad \text{dans } \Omega \times [0, +\infty), \tag{2.10}$$

où Ω est un domaine borné de $\mathbb{R}^d$ à frontière lisse ($d \in \mathbb{N}^\star$ quelconque). L'EDP (2.10) est complétée par des conditions au bord de type Dirichlet homogène, et nous posons $V = H^1_0(\Omega)$. La discrétisation en temps s'écrit : soit $u^0 \in L^2(\Omega)$ et pour $n \geq 0$, $u^{n+1} \in V$ est solution de

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\delta t} - \Delta u^{n+1} + f'(u^{n+1}) = 0. \tag{2.11}$$

On suppose que $f \in C^2(\mathbb{R}, \mathbb{R})$ satisfait

$$\exists C > 0, \quad \left| f''(s) \right| \leq C(1 + |s|)^{p_1}, \quad \forall s \in \mathbb{R}, \tag{2.12}$$

où $p_1 < 4/(d-2)$ si $d \geq 3$, $p_1 < \infty$ si $d = 2$, et aucune condition de croissance n'est exigée si $d = 1$. On suppose également

$$\exists c_f \geq 0, \quad f''(s) \geq -c_f, \quad \forall s \in \mathbb{R}, \tag{2.13}$$

et

$$\liminf_{|s| \to +\infty} \frac{f'(s)}{s} > -\lambda_1, \quad \text{avec} \quad \lambda_1 = \inf_{v \in V \,:\, v \neq 0} \frac{\int_\Omega |\nabla v|^2 \, \mathrm{d}x}{\int_\Omega v^2 \, \mathrm{d}x} > 0. \tag{2.14}$$

Par minimisation de l'énergie associée au problème, pour $\delta t \leq 1/c_f$, l'équation admet une unique solution $u^{n+1} \in V$. On a :

Théorème 2.2 (Merlet & P. [12]) *On suppose que $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ est réelle analytique et satisfait* (2.12)–(2.14)*, et que $\delta t \leq 1/c_f$. Pour tout $u^0 \in L^2(\Omega)$, la suite $(u^n)_{n \geq 1}$ définie par* (2.11) *converge dans V vers une solution $u^\star$ de $\Delta u^\star = f'(u^\star)$.*

Remarquer que les hypothèses sont satisfaites en particulier pour $f'(u) = u^3 - u$ lorsque $1 \leq d \leq 3$.

2.3 Convergence vers l'équilibre pour des schémas discrets : cas d'un flot de type gradient asymptotiquement autonome

Dans [17], en adaptant un résultat de Jendoubi et Chill [62] établi en dimension infinie dans un cadre hilbertien, nous avons considéré le problème de la convergence vers l'équilibre pour la discrétisation suivante du système différentiel (2.7) : $(U^n)_{n\geq 0}$ est une suite de $\mathbb{R}^d$ qui satisfait

$$\varepsilon\frac{\left(U^{n+1}-2U^n+U^{n-1}\right)}{\Delta t^2}+\frac{U^{n+1}-U^n}{\Delta t}+\nabla F(U^{n+1})=G^{n+1},\quad n\geq 0, \tag{2.15}$$

où $\Delta t>0$ est le pas de temps, ε est une constante positive (ou nulle) et $(G^{n+1})_{n\in\mathbb{N}}$ est une suite donnée dans $\mathbb{R}^d$; on suppose que $F\in C^1(\mathbb{R}^d,\mathbb{R})$ (au moins). L'intérêt de cette étude, par rapport au cas du flot de gradient, est double : tout d'abord, nous considérons un terme perturbateur G^{n+1}, qui rend le système non autonome ; d'autre part, même dans le cas autonome ($G^{n+1}=0$), le système discrétisé (2.15) ne rentre pas dans un cadre déjà établi dans la littérature.

Pour mieux comprendre le schéma utilisé, nous récrivons (2.7) sous la forme d'un système équivalent du premier ordre en temps :

$$\begin{cases}U'(t)=V(t)\\ \varepsilon V'(t)=-V(t)-\nabla F(U(t))+G(t)\end{cases}\qquad t\geq 0. \tag{2.16}$$

Le schéma d'Euler implicite, appliqué à (2.16), s'écrit : soit $(U^0,V^0)\in\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d$ et pour $n=0,1,2,\ldots$, $(U^{n+1},V^{n+1})\in\mathbb{R}^d\times\mathbb{R}^d$ est une solution de

$$\begin{cases}\dfrac{U^{n+1}-U^n}{\Delta t}=V^{n+1}\\[2ex] \varepsilon\dfrac{\left(V^{n+1}-V^n\right)}{\Delta t}=-V^{n+1}-\nabla F(U^{n+1})+G^{n+1}\end{cases} \tag{2.17}$$

où $(G^{n+1})_{n\in\mathbb{N}}$ est une suite donnée dans $\mathbb{R}^d$. On retrouve (2.15) à partir de (2.17), en éliminant V^n et V^{n+1}.

Pour le résultat de stabilité nous supposons que F est semi-convexe, *i.e.*,

$$\langle\nabla F(U)-\nabla F(W),U-W\rangle\geq -c_F\left\|U-W\right\|^2,\quad \forall U,W\in\mathbb{R}^d, \tag{2.18}$$

pour une constante (optimale) $c_F\geq 0$. Ici et dans la suite, $\langle\cdot,\cdot\rangle$ est le produit scalaire euclidien sur $\mathbb{R}^d$. L'hypothèse (2.18), que l'on peut comprendre comme une condition de Lipschitz unidirectionnelle (cf. [180]) est équivalent à l'hypothèse que l'application

$$W\mapsto F(W)+\frac{c_F}{2}\left\|W\right\|^2$$

est convexe. Noter que si F satisfait (2.18) pour une constante $c_F<0$, alors F est strictement convexe et possède au plus un point critique. Dans ce cas, la convergence vers l'équilibre est triviale. Le cas convexe, $c_F=0$, a également été très étudié (cf., par exemple, [138] et les références citées). La nouveauté ici est vraiment le cas $c_F>0$.

La suite $(G^{n+1})_n$ satisfait

$$\sup_{n\in\mathbb{N}}\left(n^{1+\delta}\sum_{k=n}^{\infty}\left\|G^{k+1}\right\|^2\right)<\infty, \tag{2.19}$$

pour une constante $\delta>0$. Cette condition implique en particulier que $G^{n+1}\to 0$ lorsque $n\to\infty$, de sorte que le schéma (2.17) est asymptotiquement autonome.

Pour $(U^0, V^0) \in \mathbb{R}^d$ donnés, l'existence d'une suite vérifiant (2.17) est garantie dès que $\inf_{\mathbb{R}^d} F > -\infty$. L'unicité est garantie dès que $\varepsilon/\Delta t^2 + 1/\Delta t > c_F$ [17].

Le résultat suivant montre que la stabilité de Liapounov est assurée dès que $1/\Delta t > c_F/2$. On définit l'énergie du système discret par

$$E(U,V) := \frac{\varepsilon}{2}\|V\|^2 + F(U).$$

Théorème 2.3 (Grasselli & P. [17]) *On suppose que $F \in C^1(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ satisfait* (2.18) *et que $1/\Delta t > c_F/2$. Si $(U^n, V^n)_{n\in\mathbb{N}}$ est une suite qui satisfait* (2.17)*, alors, pour $\mu > 0$ assez petit,*

$$E(U^{n+1}, V^{n+1}) + \left(1 - \frac{c_F \Delta t}{2} - \mu\right)\Delta t \left\|V^{n+1}\right\|^2 \leq E(U^n, V^n) + \frac{\Delta t}{4\mu}\left\|G^{n+1}\right\|^2, \tag{2.20}$$

pour tout $n \geq 0$.

Remarque 2.5 Si $\varepsilon > 0$ est petit, la condition de stabilité $1/\Delta t > c_F/2$ peut être vérifiée sans que la condition d'unicité $\varepsilon/\Delta t^2 + 1/\Delta t > c_F$ ne le soit. En particulier, l'opérateur qui à (U^n, V^n) associe (U^{n+1}, V^{n+1}) via (2.17) peut être multivalué (comme c'était le cas pour l'algorithme proximal (2.9)).

Remarque 2.6 Si F est coercive, *i.e.*, $\lim_{\|V\|\to+\infty} F(V) = +\infty$, alors ce résultat de stabilité implique que la suite $(U^n)_n$ est bornée, dès que $\sum_{n=0}^{\infty}\left\|G^{n+1}\right\|^2 < +\infty$.

Une fois la stabilité de Liapounov établie, la démonstration de la convergence vers l'équilibre se fait en adaptant la démonstration du cas continu de Chill et Jendoubi [62]. Rappelons que l'ensemble ω-limite d'une suite $(U^n)_{n\geq 0}$ est défini par :

$$\omega\left((U^n)_n\right) := \left\{U^\star \in \mathbb{R}^d \ : \ \exists n_k \to \infty \text{ tels que } U^{n_k} \to U^\star\right\}. \tag{2.21}$$

Notre résultat de convergence vers l'équilibre s'énonce :

Théorème 2.4 (Grasselli & P. [17]) *Soit $(U^n, V^n)_{n\in\mathbb{N}}$ une suite qui satisfait* (2.17) *avec $\varepsilon \geq 0$. On suppose que*

1. *$F \in C^{1,1}_{loc}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ satisfait* (2.18)*,*
2. *$1/\Delta t > c_F/2$,*
3. *la suite $(U^n)_{n\in\mathbb{N}}$ est bornée,*
4. *il existe $U^\star \in \omega((U^n)_n)$ tel que F vérifie l'inégalité de Łojasiewicz au voisinage de $U^\star$ (Définition 2.1), pour un exposant de Łojasiewicz θ,*
5. *il existe $\delta > 0$ tel que $(G^{n+1})_{n\in\mathbb{N}}$ vérifie* (2.19).

Alors, $\lim_{n\to\infty} U^n = U^\star$. De plus, il existe une constante C telle que pour tout $n > 0$,

$$\|U^n - U^\star\| \leq C n^{-\alpha} \quad \textit{avec } \alpha = \min\left\{\frac{\theta}{1-2\theta}, \frac{\delta}{2}\right\}.$$

Remarque 2.7 L'exposant $\alpha = \min\left\{\dfrac{\theta}{1-2\theta}, \dfrac{\delta}{2}\right\}$ est optimal en général.

Exemple 7 Dans [17], nous avons appliqué ce résultat à une discrétisation de l'équation des ondes amortie asymptotiquement autonome, et à la discrétisation de l'équation de Swift-Hohenberg avec terme inertiel asymptotiquement autonome.

Chapitre 3

Équation de Cahn-Hilliard-Gurtin (articles [9, 15])

3.1 Modèle

Dans [111], Gurtin a donné des généralisations des équations d'Allen-Cahn et de Cahn-Hilliard, en introduisant une notion de microforce (*i.e.* des forces à l'échelle microscopique) et des lois d'équilibre pour ces microforces. Son approche permet notamment de bien distinguer les lois constitutives des lois de conservations, et autorise des couplages avec des phénomènes de déformation [145] et des phénomènes de transfert de chaleur (voir par exemple la dérivation dans [151], basée sur les idées de Gurtin, et prenant en compte des transferts de chaleur). Son approche présente de nombreuses similarités avec l'approche de Frémond [90], dans le sens où les équations obtenues satisfont automatiquement le second principe de la thermodynamique, ce principe étant justement le fondement de la dérivation. Ces approches mathématiquement plus satisfaisantes sont différentes des célèbres modèles de Penrose-Fife [162] ou de Caginalp [46].

Une des généralisations de l'équation de Cahn-Hilliard obtenue par Gurtin dans [111] s'écrit

$$\begin{aligned} \partial_t u - \operatorname{div}(a(Z)\partial_t u) &= \operatorname{div}(B(Z)\nabla w) + m, & (3.1)\\ w - b(Z)\cdot\nabla w &= \partial_u\psi(u,\nabla u) - \operatorname{div}(\partial_{\nabla u}\psi(u,\nabla u)) + \beta(Z)\partial_t u - \gamma, & (3.2)\end{aligned}$$

où $\beta = \beta(Z)$ est un scalaire, $a = a(Z)$ et $b = b(Z)$ sont des vecteurs de $\mathbb{R}^d$, $B = B(Z)$ est une matrice carrée de taille d, dépendant tous de la variable $Z = (u, \nabla u, \partial_t u, w, \nabla w)$ (Z est le choix de variables constitutives) ; u est le paramètre d'ordre, w est le potentiel chimique, $\psi = \psi(u, \nabla u)$ est l'énergie libre volumique, et m, γ sont des termes sources. Les coefficients β, a, b et B vérifient la condition de dissipativité suivante, qui garantit que l'équation est consistante du point de vue thermodynamique : pour toutes les valeurs de $Z = (u, \nabla u, \partial_t u, w, \nabla w)$,

$$\beta(Z)(\partial_t u)^2 + (\partial_t u)(a(Z)+b(Z))^t\nabla w + \nabla w^t B(Z)\nabla w \geq 0.$$

Lorsque β, a, b et B sont constants, et que ψ est défini comme dans l'équation de Cahn-Hilliard classique (cf. (1.1)) par

$$\psi(u) = f(u) + \frac{\alpha}{2}\left|\nabla u\right|^2,$$

ces équations s'écrivent plus simplement

$$\begin{aligned} \partial_t u - a\cdot\nabla\partial_t u &= \operatorname{div}(B\nabla w) + m, & (3.3)\\ w - b\cdot\nabla w &= f'(u) - \alpha\Delta u + \beta\partial_t u - \gamma, & (3.4)\end{aligned}$$

et la condition de dissipativité devient : pour tout $x \in \mathbb{R}$, pour tout $y \in \mathbb{R}^d$,

$$\beta x^2 + x(a+b)^t y + y^t B y \geq 0. \qquad (3.5)$$

Dans la dérivation de Gurtin, la matrice B n'est pas supposée symétrique a priori. Cependant, dans cette version du modèle avec coefficients constants, on peut supposer sans perte de généralité que B est symétrique (et nous ferons cette hypothèse), car le terme

$$\operatorname{div}(B\nabla w) = \sum_{1\le i,j\le d} b_{ij} \frac{\partial^2 w}{\partial x_i \partial x_j} \tag{3.6}$$

est inchangé (pour w de classe C^2) lorsque l'on remplace $B = (b_{ij})_{1\le i,j\le d}$ par sa partie symétrique, $(B + B^t)/2$. La condition (3.5) implique en particulier que $\beta \ge 0$ et que B est (symétrique) semi-définie positive. Elle implique également, lorsque $\beta > 0$ (voir par exemple [150]), que la matrice

$$\tilde{B} := \beta B - \frac{1}{2}(ab^t + ba^t) \tag{3.7}$$

est symétrique et (semi-définie) positive.

En l'absence de termes de forçage ($m = \gamma = 0$), il est possible d'éliminer w des équations (3.3)–(3.4). En supposant que (u, w) est une solution assez régulière, on applique $\operatorname{div} B\nabla$ à l'équation (3.4), on injecte le résultat obtenu dans (3.3), et l'on voit que u satisfait

$$\partial_t u - (a+b)\cdot\nabla\partial_t u - \operatorname{div}(\tilde{B}\nabla\partial_t u) + \alpha\operatorname{div}(B\nabla\Delta u) - \operatorname{div}(B\nabla f'(u)) = 0, \tag{3.8}$$

où $\tilde{B}$ est la matrice définie par (3.7). L'étude mathématique a initialement été faite sur cette formulation dans [143]. Cependant, pour l'analyse numérique, il est très intéressant de garder la formulation (3.3)–(3.4), qui permet d'utiliser des éléments finis P^1 conformes.

Lorsque $a = b = 0$, $\beta \ge 0$ et $B = \kappa I$ dans (3.8), on retrouve l'équation de Cahn-Hilliard visqueuse introduite par Novick-Cohen dans [156], qui s'écrit

$$\partial_t u - \kappa\beta\Delta\partial_t u = \kappa(\Delta f'(u) - \alpha\Delta^2 u). \tag{3.9}$$

Cette dernière équation se retrouve dans de nombreux modèles de type Cahn-Hilliard. Si de plus $\beta = 0$, on retrouve l'équation de Cahn-Hilliard classique (1.5). Du point de vue mathématique, le terme $-\Delta\partial_t u$ est régularisant, ce qui fait que l'étude mathématique pour $\beta > 0$ peut être plus facile que le cas $\beta = 0$. Ainsi, un des moyens d'obtenir des solutions pour le modèle de Cahn-Hilliard avec conditions au bord dynamiques considéré dans [152] est de considérer le modèle avec viscosité et de passer à la limite (cette régularisation est également très utile avec un potentiel singulier logarithmique [58]). Dans le Chapitre 5, j'étudie plus en détail (3.9) dans le cas limite $\alpha = 0$ et $\beta > 0$ fixé.

Comme on le verra lors de l'étude mathématique qui suit, le système de Cahn-Hilliard-Gurtin (3.1)–(3.2) avec des conditions au bord périodiques préserve la masse ; de plus, l'énergie définie par

$$\mathcal{E}(u) = \int_\Omega \frac{\alpha}{2}|\nabla u|^2 + f(u)\,\mathrm{d}x \tag{3.10}$$

est une fonctionnelle de Liapounov pour le système dynamique associé.

3.2 Le problème continu

L'étude mathématique des équations (3.3)–(3.4) a été faite par Miranville *et al.* dans [31, 33, 57, 73, 142, 143, 144, 146, 147, 148, 149, 150]. Le caractère bien posé et l'existence d'attracteurs de dimension finie ont été établis avec différentes hypothèses sur la non-linéarité, les conditions au bord, et la formulation des équations. Le cas avec terme source a été traité plus spécifiquement dans [147]. Notons que le choix de conditions au bord périodiques est plus ou moins obligatoire, à cause des termes $a \cdot \nabla\partial_t u$ et $b \cdot \nabla w$ qui ressemblent à des termes de convection.

Pour l'étude numérique, faite dans [9, 15] par mon étudiant S. Injrou et moi-même (consulter également [34]), nous avons suivi ce cadre mathématique déjà établi. Pour simplifier légèrement la présentation, nous considérons ci-dessous le cas sans terme source $m = \gamma = 0$, bien que les résultats dans [15] aient été établis avec des termes sources de moyenne nulle.

Le problème est considéré avec des conditions au bord périodiques pour un domaine défini par

$$\Omega = \Pi_{i=1}^d (0, L_i), \quad (L_i > 0, \quad i = 1, \dots, d), \quad 1 \leq d \leq 3.$$

Pour la formulation variationnelle du problème, on note $V = H^1_{per}(\Omega)$ l'espace de Sobolev usuel, $(\cdot, \cdot)$ le produit scalaire dans $L^2(\Omega)$ et $|\cdot|_0$ la norme $L^2(\Omega)$ associée. Rappelons que l'injection de Sobolev $V \subset L^q(\Omega)$ est valable pour tout $q \in \mathbb{N}^\star$ si $d = 1$, 2 et pour $q = 6$ si $d = 3$. Si $d = 1$, on a même $V \subset C(\overline{\Omega})$. Nous utiliserons fréquemment l'inégalité de Poincaré

$$|v - \langle v \rangle|_0 \leq c_P \, |\nabla v|_0 \,, \qquad \text{pour tout } v \in V, \tag{3.11}$$

où c_P est la meilleure constante possible et où l'on a noté

$$\langle v \rangle = \frac{1}{|\Omega|}(v, 1).$$

Le problème de Cauchy sur un intervalle de temps $[0, T)$ (avec $T \in (0, +\infty]$) s'écrit : pour $u_0 : \Omega \to \mathbb{R}$, trouver $u, w : [0, T) \to V$ tels que

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}[(u, \chi) - (a \cdot \nabla u, \chi)] + (B \nabla w, \nabla \chi) = 0, \qquad \text{pour tout } \chi \in V, \tag{3.12}$$

$$\beta \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(u, \chi) + \alpha(\nabla u, \nabla \chi) + (f'(u), \chi) - (w, \chi) + (b \cdot \nabla w, \chi) = 0, \qquad \text{pour tout } \chi \in V, \tag{3.13}$$

$$u(0) = u_0, \tag{3.14}$$

où les deux premières équations doivent être valables dans $\mathcal{D}'(0, T)$.

On rappelle que $\beta \in \mathbb{R}$, que $a, b \in \mathbb{R}^d$ et que B est une matrice carrée symétrique de taille d. Une version forte de la condition de dissipativité (3.5) est utilisée : il existe une constante $c_0 > 0$ telle que

$$\beta x^2 + y^t B y + y^t (a + b) x \geq c_0 (x^2 + \|y\|^2), \tag{3.15}$$

pour tout $x \in \mathbb{R}$ et pour tout $y \in \mathbb{R}^d$. Le potentiel f satisfait les hypothèses de régularité et de croissance suivantes :

$$f \in C^2(\mathbb{R}), \tag{3.16}$$

$$c_1 s^{2p+2} - c_2 \leq f(s) \leq c_3 s^{2p+2} + c_4, \quad \text{pour tout } s \in \mathbb{R}, \tag{3.17}$$

$$|f'(s)| \leq c_5 |s|^{2p+1} + c_6, \qquad \text{pour tout } s \in \mathbb{R}, \tag{3.18}$$

$$|f''(s)| \leq c_7 s^{2p} + c_8, \qquad \text{pour tout } s \in \mathbb{R}, \tag{3.19}$$

pour des constantes $c_1, c_3 > 0$ et $c_2, c_4, c_5, c_6, c_7, c_8 \geq 0$, avec $p \in \mathbb{N}^\star$ si $d = 1, 2$ et $p = 1$ si $d = 3$. Par exemple, tout polynôme de degré $2p + 2$ avec un coefficient dominant strictement positif satisfait ces hypothèses, *i.e.* un potentiel de la forme (1.9), et en particulier le potentiel double-puits $f(s) = (s^2 - 1)^2$.

Rappelons qu'une solution stationnaire pour le problème (3.12)–(3.14) est un couple $(u^\star, w^\star) \in V \times \mathbb{R}$ tel que

$$\begin{cases} (u^\star, 1) = (u_0, 1) \\ \alpha(\nabla u^\star, \nabla \chi) + (f'(u^\star), \chi) = (w^\star, \chi) \qquad \forall \chi \in V. \end{cases} \tag{3.20}$$

Notons que l'ensemble des solutions stationnaires ne dépend pas des coefficients a, b, B et β. Il s'agit des mêmes solutions stationnaires que pour l'équation de Cahn-Hilliard classique. En raison des conditions au bord périodiques, cet ensemble est invariant par translation dans n'importe quelle direction, et contient donc un continuum dès qu'il contient au moins une solution non constante (ce qui est le cas pour $\alpha > 0$ petit et f un double-puits par exemple).

Nous établirons ci-dessous des versions discrètes du résultat suivant :

Théorème 3.1 (Miranville et Rougirel [150]) *On suppose que les coefficients satisfont* (3.15) *et que f satisfait* (3.16)–(3.19). *Alors, pour tout $u_0 \in V$, le système* (3.12)–(3.14) *admet une unique solution (u, w) telle que*

$$u \in C(\mathbb{R}_+; L^2(\Omega)) \cap L^\infty(\mathbb{R}_+; V), \quad u_t \in L^2(\mathbb{R}_+; L^2(\Omega)) \quad \textit{et} \quad w \in L^2(\mathbb{R}_+; V) + L^\infty(\mathbb{R}_+; \mathbb{R}).$$

De plus, pour tout $t \geq 0$,

$$\mathcal{E}(u(t)) + c_0 \int_0^t |u_t(s)|_0^2 + |\nabla w(s)|_0^2 \, \mathrm{d}s \leq \mathcal{E}(u_0). \tag{3.21}$$

Si de plus f est réelle analytique, il existe une solution stationnaire $(u^\star, w^\star) \in V \times \mathbb{R}$ telle que $u(t) \to u^\star$ lorsque $t \to +\infty$.

Démonstration. L'unicité est établie dans [147], grâce au lemme de Gronwall et des injections de Sobolev. La convergence vers l'équilibre est basée sur l'inégalité de Łojasiewicz-Simon pour les fonctions analytiques (voir [118]). L'existence est démontrée par une méthode de Galerkin. Nous rappelons par souci de clarté les estimations a priori, que nous retrouverons dans les versions discrétisées du problème. Rappelons que les calculs qui suivent sont valables en supposant les solutions assez régulières, et que les estimations obtenues peuvent être justifiées par la méthode de Galerkin.

En choisissant $\chi \equiv 1$ dans (3.12), on obtient

$$(u_t(t), 1) = 0 \quad \text{pour tout } t \geq 0. \tag{3.22}$$

En choisissant $\chi \equiv 1$ dans (3.13), on trouve

$$(w(t), 1) = (f'(u(t)), 1) \quad \text{pour tout } t \geq 0. \tag{3.23}$$

En choisissant $\chi = w$ dans (3.12) et $\chi = u_t$ dans (3.13), et en sommant, on obtient

$$-(a \cdot \nabla u_t, w) + (B\nabla w, \nabla w) + \beta \, |u_t|_0^2 + (b \cdot \nabla w, u_t) + \tfrac{\alpha}{2} \tfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} |\nabla u|_0^2 + \tfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \textstyle\int_\Omega f(u) = 0.$$

On utilise maintenant l'inégalité de coercivité (3.15) avec $x = u_t$ et $y = \nabla w$, on remarque que la forme bilinéaire $(a \cdot \nabla \cdot, \cdot)$ est anti-symétrique, et l'on trouve

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \mathcal{E}(u(t)) + c_0(|u_t(t)|_0^2 + |\nabla w(t)|_0^2) \leq 0, \quad \text{pour tout } t \geq 0, \tag{3.24}$$

où l'on rappelle que $\mathcal{E}$ est définie par (3.10). En intégrant entre 0 et t, on trouve (3.21) pour tout $t \in [0, T]$. De cette estimation, et en utilisant (3.17) et (3.22), on déduit l'estimation a priori sur u et sur u_t. On obtient également l'estimation sur w, grâce à (3.11), (3.23), (3.18) et l'injection $V \subset L^{2p+1}(\Omega)$, qui impliquent que

$$|(w(t), 1)| \leq c(\|u(t)\|_V^{2p+1} + 1), \quad \text{pour tout } t \geq 0.$$

□

Remarque 3.1 On peut obtenir l'existence en remplaçant l'hypothèse (3.16) par $f \in C^1(\mathbb{R})$ et en supprimant l'estimation (3.19) (ces deux hypothèses supplémentaire servent pour l'unicité). Dans [143], Miranville montre que dans le cas où f est polynomiale (de la forme (1.9)), il est possible d'obtenir l'existence pour p quelconque sur la formulation (3.8), et d'obtenir l'unicité dans le cas $n = 3$ et $p = 2$ (qui n'est pas compris dans les hypothèses ci-dessus), à l'aide de l'inégalité d'Agmon. Cet argument d'unicité est adapté dans [34] sur la formulation (3.12)–(3.14).

3.3 Le problème semi-discrétisé en espace

3.3.1 Estimations d'énergie et convergence vers l'équilibre

Pour la discrétisation en espace, on se donne une suite $\{V^h\}_{h>0}$ de sous-espaces vectoriels de V tels que :

$$V^h \text{ est de dimension finie et contient les constantes (pour tout } h > 0)\,; \tag{3.25}$$

$$\cup_{h>0} V^h \text{ est dense dans } V. \tag{3.26}$$

L'espace V^h sera typiquement un espace d'éléments finis et h est le pas d'espace. Nous donnerons ci-dessous des hypothèses supplémentaires sur V^h pour établir les estimations d'erreur.

La version semi-discrétisée en espace du problème (3.12)–(3.14) s'écrit : pour $u_0^h \in V^h$, trouver $u^h, w^h : [0,T) \to V^h$ (avec $T \in (0,+\infty]$) tels que

$$(u_t^h, \chi) - (a\cdot\nabla u_t^h, \chi) + (B\nabla w^h, \nabla\chi) \;=\; 0, \quad \text{pour tout } \chi \in V^h, \tag{3.27}$$

$$\beta(u_t^h, \chi) + \alpha(\nabla u^h, \nabla\chi) + (f'(u^h), \chi) - (w^h, \chi) + (b\cdot\nabla w^h, \chi) \;=\; 0, \quad \text{pour tout } \chi \in V^h, \tag{3.28}$$

$$u^h(0) = u_0^h, \tag{3.29}$$

où les deux premières équations sont valables dans $\mathcal{D}'(0,T)$.

Une solution stationnaire du problème semi-discrétisé (3.27)–(3.29) est un couple $(u^{h,\star}, w^{h,\star}) \in V^h \times \mathbb{R}$ tel que

$$\begin{cases} (u^{h,\star}, 1) = (u_0^h, 1), \\ \alpha(\nabla u^{h,\star}, \nabla\chi) + (f'(u^{h,\star}), \chi) = (w^{h,\star}, \chi) \qquad \forall \chi \in V^h. \end{cases} \tag{3.30}$$

La version semi-discrète du Théorème 3.1 s'énonce :

Théorème 3.2 (Injrou & P. [9]) *On suppose que $V^h \subset V$ satisfait* (3.25) *et que les hypothèses du Théorème 3.1 sont satisfaites. Pour tout $u_0^h \in V^h$, le problème* (3.27)–(3.28) *admet une unique solution $(u,w) \in C^1(\mathbb{R}_+, V^h \times V^h)$. De plus, pour tout $t \geq 0$,*

$$\mathcal{E}(u^h(t)) + c_0 \int_0^t \left|u_t^h(s)\right|_0^2 + \left|\nabla w^h(s)\right|_0^2 \mathrm{d}s \leq \mathcal{E}(u_0^h). \tag{3.31}$$

Si de plus f est réelle analytique et $V^h \subset L^\infty(\Omega)$, il existe une solution stationnaire $(u^{h,\star}, w^{h,\star}) \in V^h \times \mathbb{R}$ telle que $(u^h(t), w^h(t)) \to (u^{h,\star}, w^{h,\star})$ lorsque $t \to +\infty$.

Démonstration. L'estimation d'énergie est basée sur le Théorème de Cauchy-Lipschitz et les estimations a priori établies pour le problème continu. La convergence vers l'équilibre est une conséquence de l'inégalité de Łojasiewicz. On utilise l'hypothèse $V^h \subset L^\infty$ (qui n'est pas restrictive en pratique) pour garantir que la fonction

$$V^h \ni u^h \mapsto \int_\Omega f(u^h)\,\mathrm{d}x$$

est réelle analytique, et donc vérifie l'inégalité de Łojasiewicz classique. Dans le cas particulier où f est un polynôme de croissance sous-critique, on peut éviter l'hypothèse $V^h \subset L^\infty$, puisque cette fonction est un polynôme des coordonnées de u^h dans une base de V^h. □

Remarque 3.2 Pour le résultat de convergence vers l'équilibre, comme nous travaillons ici avec V^h fixé, si l'on suppose que $V^h \subset V \cap L^\infty(\Omega)$, la restriction $p = 1$ en dimension 3 devient inutile, et l'on peut prendre $p \in \mathbb{N}^\star$.

L'estimation d'énergie (3.31) et l'unicité de la solution (u,w) du problème continu impliquent :

Corollaire 3.1 *On suppose que la suite* $\{V^h\}_{h>0}$ *satisfait* (3.25)–(3.26), *et l'on choisit* $u_0^h \in V^h$ *tel que* $u_0^h \to u_0$ *dans* V*. Alors, pour tout* $T > 0$, $u^h \to u$ *faiblement* $\star$ *dans* $L^\infty(0,T;V)$ *et fortement dans* $C([0,T];L^2(\Omega))$ *et* $w^h \to w$ *faiblement dans* $L^2(0,T;V)$*, où* (u,w) *est la solution du problème* (3.12)–(3.14).

3.3.2 Estimations d'erreur

Pour établir les estimations d'erreur, nous faisons des hypothèses supplémentaires sur V^h. Tout d'abord, nous considérons une famille quasi-uniforme $\{\mathcal{T}^h\}$ de triangulations conformes de $\overline{\Omega}$ en d-simplexes (*i.e.* des intervalles si $d=1$, des triangles si $d=2$ et des tétraèdres si $d=3$). La triangulation prend en compte les conditions au bord périodiques (*i.e.* que les faces de deux d-simplexes qui appartiennent à deux faces opposées de Ω et qui correspondent l'une avec l'autre sont identifiées) ; en particulier, chaque $\mathcal{T}^h$ est également une triangulation du tore $\simeq \mathbb{R}^d/(\Pi_{i=1}^d L_i\mathbb{Z})$. Comme Ω est un d-parallélépipède, il est clair qu'une telle famille de triangulations existe en dimension 1, 2 et 3.

Pour chaque triangulation $\mathcal{T}^h = \bigcup_{T\in\mathcal{T}^h} T$, nous définissons l'espace d'éléments finis P^1 conformes :

$$V^h = \{u \in C^0_{per}(\bar{\Omega}),\ u_{|T} \text{ est affine pour tout } T \in \mathcal{T}^h\}. \tag{3.32}$$

Il est clair que V^h est un sous-espace vectoriel de $V = H^1_{per}(\Omega)$ et que V^h satisfait (3.25). Dans la suite de cette section, nous notons $\|\cdot\|_k$ la norme hilbertienne $H^k_{per}(\Omega)$ ($k = 0, 1, 2\ldots$) et $|\cdot|_k$ la semi-norme associée, *i.e.* (en utilisant la notation multi-indices)

$$\text{pour tout } v \in H^k_{per}(\Omega), \quad \|v\|_k^2 = \sum_{|\alpha|\le k} |\partial^\alpha v|_0^2\,, \text{ et } |v|_k^2 = \sum_{|\alpha|=k} |\partial^\alpha v|_0^2\,.$$

Avec les hypothèses faites sur la triangulation, on sait [63, 170] qu'il existe une constante $C > 0$ indépendante de h telle que

$$\text{pour tout } v \in H^2_{per}(\Omega), \quad \left|v - I^h v\right|_0 + h\left|v - I^h v\right|_1 \le Ch^2\,|v|_2\,, \tag{3.33}$$

où $I^h v$ est l'interpolé P^1 de v, *i.e.* l'unique élément de V^h qui prend les mêmes valeurs que v aux nœuds de la triangulation $\mathcal{T}^h$. En fait, l'estimation (3.33) est également valable si la famille de triangulations est simplement supposée régulière, *i.e.* si l'angle minimal des d-simplexes appartenant aux triangulations $\mathcal{T}^h$ est borné inférieurement par une constante indépendante de d. L'estimation (3.33) garantit également que la famille $\{V^h\}_{h>0}$ satisfait (3.26), puisque l'espace $H^2_{per}(\Omega)$ est dense dans V.

L'hypothèse de quasi-uniformité de la triangulation fournit les estimations inverses suivantes (voir par exemple [82, 184]), valables pour tout $v^h \in V^h$:

$$\left\|v^h\right\|_{L^\infty(\Omega)} \le Ch^{-d/2}\left|v^h\right|_0\,, \tag{3.34}$$

$$\left\|v^h\right\|_{L^\infty(\Omega)} \le Ck_h\left\|v^h\right\|_1\,, \tag{3.35}$$

où $k_h = 1$ si $d = 1$, $k_h = \log(1/h)^{1/2}$ si $d = 2$ et $k_h = h^{-1/2}$ si $d = 3$. Dans toute la section, C désigne une constante générique qui ne dépend ni de h, ni du pas de temps δt.

Pour établir les estimations d'erreur, nous utilisons une approche classique dans les problèmes paraboliques [78, 184] ; nous utilisons la décomposition suivante :

$$\begin{aligned}
u^h(t) - u(t) &= \theta^u(t) + \rho^u(t),\ \text{avec } \theta^u(t) = u^h(t) - \tilde{u}^h(t),\ \rho^u(t) = \tilde{u}^h(t) - u(t),\\
w^h(t) - w(t) &= \theta^w(t) + \rho^w(t),\ \text{avec } \theta^w(t) = w^h(t) - \tilde{w}^h(t),\ \rho^w(t) = \tilde{w}^h(t) - w(t),
\end{aligned}$$

pour tout $t \in [0,T]$, où $\tilde{u}^h = \tilde{u}^h(t) \in V^h$ et $\tilde{w}^h = \tilde{w}^h(t) \in V^h$ sont les projections elliptiques de $u = u(t)$ et $w = w(t)$ sur V^h définies par

$$\begin{aligned}
(B\nabla \tilde{w}^h, \nabla\chi) &= (B\nabla w, \nabla\chi) \quad \text{pour tout } \chi \in V^h, && (3.36)\\
(\tilde{w}^h, 1) &= (w, 1), && (3.37)
\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
\alpha(\nabla\tilde{u}^h, \nabla\chi) - (\tilde{w}^h, \chi) + (b\cdot\nabla\tilde{w}^h, \chi) &= \alpha(\nabla u, \nabla\chi) - (w, \chi)\\
&\quad +(b\cdot\nabla w, \chi), \quad \text{pour tout } \chi \in V^h, && (3.38)\\
(\tilde{u}^h, 1) &= (u, 1). && (3.39)
\end{aligned}$$

Le théorème de Lax-Milgram assure que ces deux problèmes linéaires ont bien une solution.

Ici et dans le reste de ce chapitre, on note pour un espace de Banach E,

$$W^{1,2}(0,T;E) := \left\{u \in L^2(0,T;E) \ : \ \partial_t u \in L^2(0,T;E)\right\},$$

qui est un espace de Banach pour la norme

$$\|u\|_{W^{1,2}(0,T;E)} = \left(\int_0^T \|u(t)\|_E^2 + \|\partial_t u(t)\|_E^2 \,\mathrm{d}t\right)^{1/2}.$$

Dans le résultat suivant, on suppose que les hypothèses du Théorème 3.1 sont satisfaites et que la famille de triangulations est quasi-uniforme.

Théorème 3.3 (Injrou & P. [15]) *On suppose que la solution (u,w) de* (3.12)–(3.14) *satisfait*

$$u, w \in W^{1,2}\left(0,T; H^2_{per}(\Omega)\right),$$

et on considère la solution (u^h, w^h) de (3.27)–(3.29) *avec V^h défini par* (3.32)*. Si $\|\theta^u(0)\|_1 \le Ch^2$, alors*

$$\begin{aligned}
\left\|u-u^h\right\|_{L^\infty(0,T;L^2(\Omega))} + \left\|w-w^h\right\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega))} + \left\|u_t-u_t^h\right\|_{L^2(0,T;L^2(\Omega))} &\le Ch^2, && (3.40)\\
\left\|u-u^h\right\|_{L^\infty(0,T;H^1(\Omega))} + \left\|w-w^h\right\|_{L^2(0,T;H^1(\Omega))} \le Ch. &&& (3.41)
\end{aligned}$$

Si de plus $d = 1, 2$, $u \in L^\infty(0,T;W^{2,\infty}(\Omega))$ et $w \in L^2(0,T;W^{2,\infty}(\Omega))$, alors

$$\left\|u-u^h\right\|_{L^\infty(0,T;L^\infty(\Omega))} + \left\|w-w^h\right\|_{L^2(0,T;L^\infty(\Omega))} \le Ch^2\log(1/h)^{d-1}.$$

Démonstration. Donnons les arguments de la preuve. On voit que certaines estimations sont établies dans les normes données naturellement par l'estimation d'énergie (3.21) (estimations (3.41) pour u, w et (3.40) pour u_t). Les premiers calculs ressemblent donc fortement à ceux faits dans les estimations a priori pour l'estimation de θ^u et θ^w. Les estimations de ρ^u et ρ^w sont des résultats standards pour les problèmes elliptiques linéaires. Les non-linéarités sont traitées comme globalement lipschitzienne à l'aide d'estimations L^∞ basées sur les estimations inverses (3.34)–(3.35).

Lorsque la norme H^1 est en jeu, on obtient également par un argument de dualité des estimations L^2 (estimations (3.40) pour u et w). On obtient enfin les estimations L^∞ à l'aide d'estimations L^∞ standard pour les problèmes elliptiques (3.36)–(3.39) et à l'aide de l'estimation inverse (3.35). Notons qu'il serait également possible d'obtenir des estimations L^∞ dans le cas $d = 3$, mais elle ne serait plus optimale (ou quasi-optimal, dans le cas $d = 2$). $\square$

Remarque 3.3 Étant donnée la nature parabolique des équations, il est raisonnable d'espérer avoir la régularité demandée sur u et w si la condition initiale u_0 est choisie assez régulière. Dans [15], nous avons établi le résultat pour le problème avec des termes source, notamment pour garantir que l'on puisse trouver des solutions assez régulières.

Pour obtenir les estimations d'énergie, on peut éviter les estimations lipschitziennes de la non-linéarité et la remplacer par des estimations basées sur les injections de Sobolev (on utilise alors vraiment la croissance polynomiale de f). Un des avantages de cette méthode est d'affaiblir les hypothèses sur la triangulation. Le résultat s'énonce ainsi (on suppose toujours que les hypothèses du Théorème 3.1 sont satisfaites) :

Théorème 3.4 (Injrou & P. [15]) *Soit $\{\mathcal{T}^h\}$ une famille régulière de triangulations de $\overline{\Omega} \simeq \Pi_{i=1}^d \mathbb{R}/(L_i\mathbb{Z})$. On suppose que la solution (u, w) de* (3.12)–(3.14) *satisfait*

$$u \in W^{1,2}(0, T; H^2_{per}(\Omega)) \quad \textit{et} \quad w \in L^2(0, T; H^2_{per}(\Omega)),$$

et l'on considère la solution (u^h, w^h) de (3.27)–(3.29) *où V^h est défini par* (3.32). *Si $\left\|u^h(0)\right\|_1 \leq R$ pour une constante $R > 0$ indépendante de h, alors*

$$\left\|u - u^h\right\|_{L^\infty(0,T;H^1(\Omega))} + \left\|w - w^h\right\|_{L^2(0,T;H^1(\Omega))} \leq C \left\|u^h(0) - R^h u(0)\right\|_1 + Ch,$$

où $R^h : V \to V^h$ est la projection de Ritz définie par

$$(\nabla R^h v, \nabla \chi) = (\nabla v, \nabla \chi), \quad \textit{pour tout } \chi \in V^h \quad \textit{et} \quad (R^h v, 1) = (v, 1).$$

3.4 Le problème complètement discrétisé en espace et en temps

3.4.1 Estimations d'énergie et convergence vers l'équilibre

Pour la discrétisation en temps, nous appliquons le schéma d'Euler implicite au schéma précédent. Soit $\delta t > 0$ le pas de temps. Pour les estimations d'erreur, on travaille sur un intervalle de temps fini $[0, T]$, et on définit $\delta t = T/N$ avec $N \in \mathbb{N}^\star$. Pour l'étude asymptotique en temps, on travaille sur $\mathbb{R}_+$ et on fixe simplement $\delta t > 0$.

Le schéma est : soit $u_h^0 \in V^h$; pour $n = 1, 2, \ldots$, trouver $(u_h^n, w_h^n) \in V^h \times V^h$ tel que

$$(\bar\partial u_h^n, \chi) - (a \cdot \nabla \bar\partial u_h^n, \chi) + (B \nabla w_h^n, \nabla \chi) = 0, \quad \text{pour tout } \chi \in V^h, \tag{3.42}$$

$$\beta(\bar\partial u_h^n, \chi) + \alpha(\nabla u_h^n, \nabla \chi) + (f'(u_h^n), \chi) - (w_h^n, \chi) + (b \cdot \nabla w_h^n, \chi) = 0, \quad \text{pour tout } \chi \in V^h, \tag{3.43}$$

où l'on note $\bar\partial$ l'opérateur qui à une suite $(v^n)_{n \geq 0}$ associe la suite définie par

$$\bar\partial v^n = \frac{v^n - v^{n-1}}{\delta t}, \quad n \geq 1. \tag{3.44}$$

Nous supposons également qu'il existe une constante $C_{f''} \geq 0$ telle que

$$f''(s) \geq -C_{f''}, \quad \text{pour tout } s \in \mathbb{R}. \tag{3.45}$$

On définit $\lambda_1 = 1/c_P^2$ où c_P est la meilleure constante dans l'inégalité de Poincaré (3.11).

Nous avons la version discrète suivante du Théorème 3.1 :

Théorème 3.5 (Injrou & P. [9, 15]) *On suppose que le sous-espace V^h de V satisfait* (3.25), *que les coefficients satisfont* (3.15), *et que f satisfait* (3.16)–(3.18) *et* (3.45). *Si $\delta t > 0$ satisfait $c_0 + \delta t(\alpha\lambda_1 - C_{f''}) > 0$, alors pour toute donnée initiale $u_h^0 \in V^h$, le système* (3.42)–(3.43) *définit une unique suite $(u_h^n, w_h^n) \in (V^h \times V^h)^{\mathbb{N}^\star}$. De plus, pour tout $n \geq 1$,*

$$\mathcal{E}(u_h^n) + \frac{c_0\delta t}{2}\left(|\nabla w_h^n|_0^2 + \left|\bar{\partial} u_h^n\right|_0^2\right) \leq \mathcal{E}(u_h^{n-1}). \tag{3.46}$$

Si de plus f est réelle analytique et $V^h \subset L^\infty(\Omega)$, la suite (u_h^n, w_h^n) converge vers une solution stationnaire $(u_h^\star, w_h^\star) \in V^h \times \mathbb{R}$ lorsque $n \to +\infty$.

Rappelons qu'une solution stationnaire pour le problème (3.42)–(3.43) est définie comme dans la section précédente par (3.30).

Démonstration. L'existence est basée sur l'estimation a priori (3.46) (qui nécessite la restriction sur le pas de temps), sur le théorème des fonctions implicites et une méthode d'homotopie, dans l'esprit des théorèmes d'existence pour les équations elliptiques [102]. La convergence vers l'équilibre est basée sur l'inégalité de Łojasiewicz. Pour ce dernier résultat, remarquons qu'aucun résultat existant dans la littérature ne semble s'appliquer à ce problème (étant donné le peu de résultats de ce type pour les systèmes discrétisé en temps) : d'où l'intérêt de le démontrer « à la main ». □

Remarque 3.4 L'estimation d'énergie (3.46) permet également de montrer la convergence de la solution du problème complètement discrétisé vers la solution du problème continu (cf. [9, Corollaire 3]).

3.4.2 Estimations d'erreur a priori

Pour l'estimation d'erreur, nous avons des versions complètement discrétisées des Théorèmes 3.3 et 3.4. L'esprit de la démonstration est similaire au cas semi-discrétisé en espace. Dans le premier résultat, on suppose que les hypothèses du Théorème 3.1 sont satisfaites et que la famille de triangulation est quasi-uniforme.

Théorème 3.6 (Injrou & P. [15]) *On suppose que la solution (u, w) de* (3.12)–(3.14) *satisfait*

$$u \in W^{2,2}(0,T; H^2_{per}(\Omega)) \text{ et } w \in W^{1,2}(0,T; H^2_{per}(\Omega)),$$

et on considère la solution $(u_h^n, w_h^n)_{n\geq 1}$ de (3.42)–(3.43). *Si $\left\|\theta_u^0\right\|_1 \leq Ch^2$ et si $\delta t = o(k_h)$, alors*

$$\begin{aligned}
\max_{0\leq n\leq N} |u_h^n - u(t_n)|_0 + \left(\sum_{k=1}^N \delta t\, |w_h^n - w(t_n)|_0^2\right)^{1/2} &\leq C(h^2 + \delta t),\\
\max_{0\leq n\leq N} \|u_h^n - u(t_n)\|_1 + \left(\sum_{k=1}^N \delta t\, \|w_h^n - w(t_n)\|_1^2\right)^{1/2} &\leq C(h + \delta t),
\end{aligned}$$

Si de plus $d = 1$ ou 2, $u \in C^0([0,T]; W^{2,\infty}(\Omega))$ et $w \in C^0([0,T]; W^{2,\infty}(\Omega))$, alors

$$\begin{aligned}
\max_{0\leq n\leq N} \|u_h^n - u(t_n)\|_{L^\infty(\Omega)} + \left(\sum_{k=1}^N \delta t\, \|w_h^n - w(t_n)\|_{L^\infty(\Omega)}^2\right)^{1/2} &\leq Ch^2 \log(1/h)^{d-1}\\
&\quad + C\delta t k_h.
\end{aligned}$$

En utilisant la croissance polynomiale de f, on peut obtenir les estimations d'énergie avec des hypothèses plus faibles. En particulier, il n'y a plus de restriction sur le pas de temps.

Théorème 3.7 (Injrou & P. [15]) *Soit $\{\mathcal{T}^h\}$ une famille régulière de triangulations de $\overline{\Omega} \simeq \Pi_{i=1}^d \mathbb{R}/(L_i\mathbb{Z})$. On suppose que la solution (u, w) de* (3.12)–(3.14) *satisfait*

$$u \in W^{2,2}(0, T; H^2_{per}(\Omega)) \quad \textit{et} \quad w \in L^2(0, T; H^2_{per}(\Omega)),$$

et l'on considère la solution $(u_h^n, w_h^n)_{n\geq 1}$ de (3.42)–(3.43) *de condition initiale u_h^0, où V^h est défini par* (3.32)*. Si $\left\|u_h^0\right\|_1 \leq R$ pour une constante $R > 0$ indépendante de h, alors*

$$\max_{0\leq n\leq N} \|u_h^n - u(t_n)\|_1 + \left(\sum_{k=1}^{N} \delta t \, \|w_h^n - w(t_n)\|_1^2\right)^{1/2} \leq C \left\|u_h^0 - R^h u(0)\right\|_1 + C(h + \delta t).$$

3.5 Illustration numérique

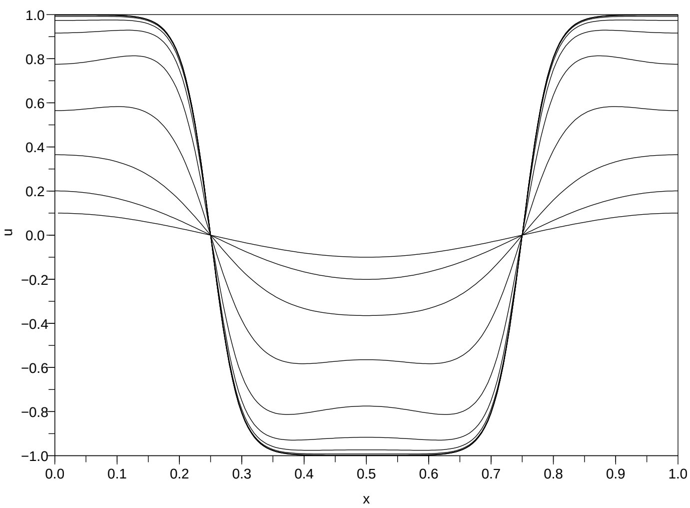


FIG. 3.1: $a = 0$, $b = 0$

A titre d'illustration, nous montrons dans les Figures 3.1–3.3 des simulations numériques en dimension $d = 1$ sur l'intervalle $\Omega = (0, 1)$, faites avec le logiciel `Scilab`. La condition initiale est $u_0(x) = 0.1\cos(2\pi x)$, et nous avons fixé les valeurs $\alpha = 0.001$, $B = 1$, $\beta = 0.01$. La non-linéarité est $f'(u) = u^3 - u$. Le maillage est uniforme de pas $h = 1/200$, le pas de temps est $\delta t = 0.005$, et la solution est vérifie le schéma (3.42)–(3.43). Dans les trois cas, la solution u évolue de u_0 vers un état stationnaire qui prend des valeurs proches de ± 1 à l'exception de deux couches de transition. La solution est représentée aux itérations de temps $n = 5n'$, $n' = 0, 1, 2 \ldots 10$.

On bien observe dans les trois cas la convergence vers un état d'équilibre. Dans les deux premières figures, les symétries de la condition initiale sont conservées au cours de l'évolution, ce que l'on peut comprendre sur l'équation (3.8) en remarquant que $a + b = 0$ (et que $d = 1$). Dans le dernier cas, on voit l'effet de translation provoqué par le coefficient $a = 0.1$. L'état stationnaire atteint est un translaté des deux cas précédents.

Des simulations numériques en dimension 1 et 2 ont également été effectuées dans [9] pour illustrer les estimations d'erreurs.

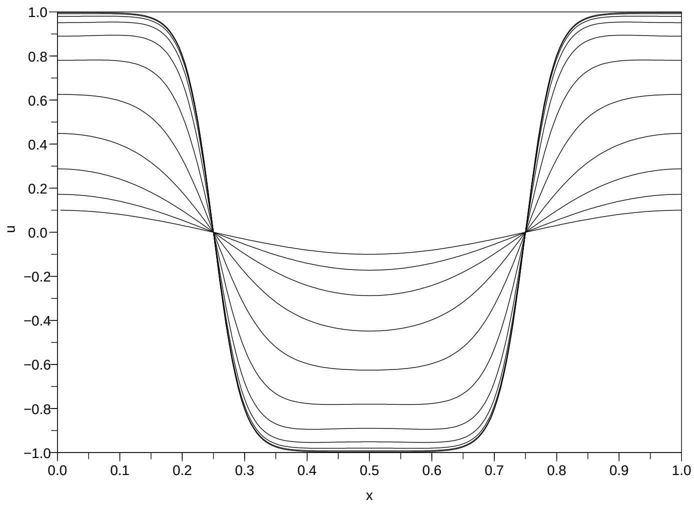


FIG. 3.2: $a = 0.1$, $b = -0.1$

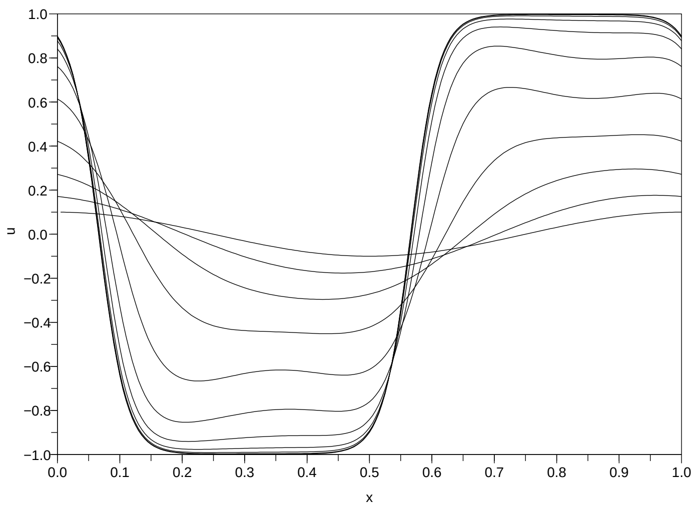


FIG. 3.3: $a = 0.1$, $b = 0$

Chapitre 4

Deux autres modèles de type Cahn-Hilliard (articles [13, 14, 18]

4.1 Équation de Cahn-Hilliard avec conditions au bord dynamiques (article [14])

4.1.1 Modèle

Dans [14], nous nous sommes intéressés à l'approximation par une méthode d'éléments finis de l'équation de Cahn-Hilliard avec conditions aux bords dynamiques. Les équations s'écrivent :

$$
\begin{aligned}
u_t &= \Delta w, \qquad t>0,\ x\in\Omega, && (4.1)\\
w &= f'(u) - \Delta u, \qquad t>0,\ x\in\Omega, && (4.2)\\
(1/\Gamma_s)u_t &= \sigma_s\Delta_{\|}u - \lambda_s u - g_s'(u) - \partial_n u, \qquad t>0,\ x\in\Gamma, && (4.3)\\
\partial_n w &= 0, \qquad t>0,\ x\in\Gamma, && (4.4)
\end{aligned}
$$

où Ω désigne une plaque de dimension 2 ou 3, *i.e.*

$$\Omega = \Pi_{i=1}^{d-1}\big(\mathbb{R}/(L_i\mathbb{Z})\big)\times(0,L_d), \qquad L_i>0,\ i=1,\dots,d, \quad d=2 \text{ ou } 3,$$

dont la frontière (de classe C^∞) est :

$$\Gamma = \partial\Omega = \Pi_{i=1}^{d-1}\big(\mathbb{R}/(L_i\mathbb{Z})\big)\times\{0,L_d\}.$$

En d'autres termes, lorsque $d=2$, Ω est le rectangle $(0,L_1)\times(0,L_2)$, u et w sont L_1-périodiques dans la direction x_1 et les conditions au bord (4.3)–(4.4) sont valables pour $x_2=0$ et $x_2=L_2$; lorsque $d=3$, Ω est le parallélépipède $(0,L_1)\times(0,L_2)\times(0,L_3)$, u et w sont L_1-périodiques dans la direction x_1 et L_2-périodique dans la direction x_2, et les conditions au bord (4.3)–(4.4) sont valables pour $x_3=0$ et $x_3=L_3$.

Dans les équations (4.1)–(4.4), les termes $\Gamma_s>0$, $\sigma_s>0$, $\lambda_s>0$ sont des constantes données par la physique du problème, Δ est le laplacien, $\Delta_{\|}$ est l'opérateur de Laplace-Beltrami sur Γ, n est la normale extérieure à Ω, f et g_s sont des fonctions qui appartiennent à $C^3(\mathbb{R},\mathbb{R})$ et satisfaisant les conditions de dissipativité suivantes :

$$\liminf_{|v|\to\infty} f''(v)>0, \qquad \liminf_{|v|\to\infty} g_s''(v)>0. \tag{4.5}$$

Un choix typique est

$$f'(v)=v^3-v \qquad \text{et} \quad g_s'(v)=k_sv-h_s \quad (v\in\mathbb{R}), \tag{4.6}$$

où $k_s > 0$ et $h_s \in \mathbb{R}$ sont constant. Le problème d'évolution (4.1)–(4.4) est complété par une condition initiale $u(0) = u_0$.

Les équations (4.1)–(4.4) sont un modèle prototype décrivant l'influence des parois sur le processus de séparation de phases (décomposition spinodale) dans les mélanges binaires ; u est le paramètre d'ordre (la concentration normalisée d'une des phases) et w est le potentiel chimique. Des physiciens ont considéré de tels modèles pour l'étude de la séparation de phases dans des systèmes confinés (cf. [86, 87, 124]).

L'équation de Cahn-Hilliard avec conditions dynamiques au bord est dérivée de l'énergie libre

$$\mathcal{E}(u) = \int_\Omega \left(\frac{1}{2} |\nabla u|^2 + f(u) \right) \mathrm{d}x + \int_\Gamma \left(\frac{\sigma_s}{2} \left|\nabla_\| u\right|^2 + \frac{\lambda_s}{2} |u|^2 + g_s(u) \right) \mathrm{d}\sigma. \tag{4.7}$$

La première intégrale est l'énergie de volume du matériau et la second intégrale est l'énergie de surface. Si u est une solution régulière de (4.1)–(4.4), alors u dissipe l'énergie $\mathcal{E}$ puisque

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathcal{E}(u(t)) = -\int_\Omega |\nabla w|^2 \,\mathrm{d}x - \frac{1}{\Gamma_s} \int_\Gamma |u_t|^2 \,\mathrm{d}\sigma, \qquad t \geq 0. \tag{4.8}$$

De plus, la masse totale de u est conservée :

$$\int_\Omega u(t) \,\mathrm{d}x = \int_\Omega u(0) \,\mathrm{d}x, \qquad t \geq 0.$$

Du point de vue mathématique, le problème (4.1)–(4.4) complété par une condition initiale a été étudié dans [60, 93, 94, 101, 152, 165, 169, 189]. Des résultats sur l'existence et l'unicité de solutions, la convergence vers l'équilibre et l'existence d'attracteurs exponentiels ont été établis sous différentes hypothèses. Remarquer que ces résultats ont été prouvés pour un domaine borné de $\mathbb{R}^d$ à frontière régulière, mais leur extension à notre situation est immédiate. Dans [152, Corollaire 2.1 et Théorème 2.2], l'existence et l'unicité d'une solution a été prouvée pour des nonlinéarités $f, g \in C^3(\mathbb{R}, \mathbb{R})$ satisfaisant l'hypothèse (4.5). L'existence d'une solution d'énergie finie a été établie dans [101] pour des nonlinéarités encore plus générales incluant le potentiel logarithmique habituel (voir également [153] pour le cas du potentiel logarithmique).

Du point de vue numérique, des schémas aux différences finies ont été utilisés dans [86, 87, 124]. Cependant, l'analyse restait incomplète en l'absence de preuve de convergence. L'objet de notre étude était d'établir un résultat de convergence et des estimations d'erreur. Nous avons pour cela choisi une approche par éléments finis pour la discrétisation en espace, en adaptant le schéma bien connu d'Elliott, French et Milner [78] pour l'équation de Cahn-Hilliard classique. Notre approche par éléments finis permet également de prendre en compte la condition au bord de manière élégante, comme le prouve les résultats numériques obtenus à l'aide du logiciel `FreeFem++`.

4.1.2 Le problème continu et sa version semi-discrétisée en espace

Remarquons tout d'abord que la condition de dissipativité (4.5) implique

$$f(v) \geq c_1 v^2 - c_2, \qquad g_s(v) \geq c_1 v^2 - c_2, \qquad \forall v \in \mathbb{R}, \tag{4.9}$$

pour des constantes $c_1 > 0$ et $c_2 \geq 0$. Étant donnée les estimations (4.7) et (4.8), il est naturel d'introduire l'espace

$$V = \left\{ v \in H^1(\Omega),\ v_{|\Gamma} \text{ (au sens des traces) } \in H^1(\Gamma) \right\},$$

qui est un espace de Hilbert pour la norme hilbertienne

$$\|v\|_V = \left(\|v\|^2_{H^1(\Omega)} + \left\|v_{|\Gamma}\right\|^2_{H^1(\Gamma)} \right)^{1/2}.$$

Soulignons que les conditions au bord périodiques sont prises en compte dans cette définition de V. Ainsi, pour $d = 2$, une fonction $v \in H^1(\Omega)$ est L_1-périodique dans la direction x_1, et l'on a $v_{|\Gamma} \in H^1(\Gamma)$ si et seulement si $v(\cdot, 0) \in H^1_{\text{per}}(0, L_1)$ et $v(\cdot, L_2) \in H^1_{\text{per}}(0, L_1)$, où

$$H^1_{\text{per}}(0, L_1) = \{w \in H^1(0, L_1),\ w \text{ est } L_1\text{-périodique}\}.$$

Lorsque $d = 3$, une définition semblable s'applique.

L'espace V peut également être vu comme la fermeture de $C^1(\overline{\Omega})$ pour la norme $\|\cdot\|_V$; l'inclusion V dans $H^1(\Omega)$ est continue et dense, et V est isométrique au sous-espace fermé $\tilde{V}$ de $H^1(\Omega) \times H^1(\Gamma)$ défini par

$$\tilde{V} = \left\{(u, \varphi) \in H^1(\Omega) \times H^1(\Gamma),\ u_{|\Gamma} = \varphi \text{ au sens des traces}\right\}.$$

Nous notons $(\cdot, \cdot)$ le produit scalaire $L^2(\Omega)$ et $|\cdot|_0$ la norme $L^2(\Omega)$ associée. Nous notons de même $(\cdot, \cdot)_\Gamma$ le produit scalaire $L^2(\Gamma)$ et $|\cdot|_{0,\Gamma}$ la norme associée. Plus généralement, pour $k \in \mathbb{N}$, $\|\cdot\|_k$ est la norme hilbertienne dans $H^k(\Omega)$ et $\|\cdot\|_{k,\Gamma}$ est la norme $H^k(\Gamma)$.

La formulation variationnelle de (4.1)–(4.4) s'écrit

$$\begin{aligned}
(u_t, \varphi) &= -(\nabla w, \nabla \varphi), && (4.10)\\
(w, \chi) &= (f'(u), \chi) + (\nabla u, \nabla \chi) + \sigma_s(\nabla_\| u, \nabla_\| \chi)_\Gamma + \lambda_s(u, \chi)_\Gamma \\
&\quad + (g_s'(u), \chi)_\Gamma + \Gamma_s^{-1}(u_t, \chi)_\Gamma, && (4.11)
\end{aligned}$$

pour tout $\varphi \in H^1(\Omega)$ et pour tout $\chi \in V$.

Pour la discrétisation en espace, nous considérons une famille quasi-uniforme de décompositions $\{\Omega^h\}$ de $\Pi_{i=1}^d[0, L_i]$ en d-simplexes ; ces décompositions prennent en compte les conditions au bord partiellement périodiques sur Ω, de sorte que chaque Ω^h est également une triangulation de $\overline{\Omega}$. Chaque triangulation Ω^h de $\overline{\Omega}$ induit naturellement une triangulation Γ^h de Γ en $d-1$-simplexes.

Pour une triangulation $\Omega^h = \cup_{T \in \Omega^h} T$ donnée, nous définissons V^h comme l'espace des éléments P^1 conformes

$$V^h = \left\{v^h \in C^0(\overline{\Omega}),\ v^h_{|T} \text{ est affine} \quad \forall T \in \Omega^h\right\}.$$

Remarquer que pour tout $v^h \in V^h$, la restriction $\varphi^h = v^h_{|\Gamma}$ sur la frontière est un élément P^1 conforme sur le domaine Γ de dimension $d - 1$. En fait, l'espace de ces fonctions φ^h est l'espace usuel des éléments P^1 conformes discrétisant $H^1(\Gamma)$ sur la triangulation Γ^h. Nous noterons V^h_Γ cet espace de trace discret. Remarquer que l'espace V^h sera utilisé à la fois pour la discrétisation de $H^1(\Omega)$ (où vit w) et celle de V (où vit u).

La version discrète de (4.10)–(4.11) s'écrit : trouver $(u^h, w^h) : [0, T] \to V^h \times V^h$ tels que

$$\begin{aligned}
(u^h_t, \varphi) &= -(\nabla w^h, \nabla \varphi), \quad \forall \varphi \in V^h, && (4.12)\\
(w^h, \chi) &= (f'(u^h), \chi) + (\nabla u^h, \nabla \chi) + \sigma_s(\nabla_\| u^h, \nabla_\| \chi)_\Gamma + \lambda_s(u^h, \chi)_\Gamma \\
&\quad + (g_s'(u^h), \chi)_\Gamma + \Gamma_s^{-1}(u^h_t, \chi)_\Gamma, \quad \forall \chi \in V^h. && (4.13)
\end{aligned}$$

Théorème 4.1 (Cherfils, Petcu & P. [14]) *Pour tout $u^h_0 \in V^h$, le problème* (4.12)–(4.13) *admet une unique solution $(u^h, w^h) \in C^1([0, +\infty); V^h \times V^h)$ telle que $u^h(0) = u^h_0$. De plus,*

$$\mathcal{E}(u^h(t)) + \int_0^t \left|w^h\right|_1^2 + \Gamma_s^{-1}\left|u^h_t\right|_{0,\Gamma}^2 \mathrm{d}s \le \mathcal{E}(u^h(0)), \quad \forall t \ge 0. \tag{4.14}$$

Si f et g_s sont réelles analytiques, il existe une solution stationnaire $(\bar{u}^h, \bar{w}^h) \in V^h \times \mathbb{R}$ telle que

$$\lim_{t \to +\infty} (u^h(t), w^h(t)) = (\bar{u}^h, \bar{w}^h).$$

Le théorème ci-dessus ci-dessus montre que $\mathcal{E}$ est une fonctionnelle de Liapounov pour le système dynamique défini par $S^h(t)u_0^h = u^h(t)$. En éliminant w^h dans (4.12)–(4.13), nous avons montré plus précisément que S^h est un flot de gradient pour $\mathcal{E}$: le résultat de convergence vers l'équilibre est alors une conséquence du résultat classique de Łojasiewicz.

Remarque 4.1 En supposant que les nonlinéarités f et g_s ont une croissance sous-critique, l'estimation d'énergie (4.14) permet de montrer que (u^h, w^h) tend vers une solution (u, w) lorsque $h \to 0$, sur tout intervalle de temps fini $[0, T]$ (cf. [14, Théorème 2.4]).

Pour établir les estimations d'erreur, la méthode est la même que pour le modèle de Cahn-Hilliard-Gurtin de la Section 3.3.2. On écrit la décomposition

$$\begin{aligned} u^h(t) - u(t) &= \theta^u(t) + \rho^u(t), \text{ avec } \theta^u = u^h - \tilde{u}^h,\ \rho^u = \tilde{u}^h - u, \\ w^h(t) - w(t) &= \theta^w(t) + \rho^w(t), \text{ avec } \theta^w = w^h - \tilde{w}^h,\ \rho^w = \tilde{w}^h - w, \end{aligned}$$

pour tout $t \in [0, T]$, où $\tilde{w}^h = \tilde{w}^h(t)$ et $\tilde{u}^h = \tilde{u}^h(t)$ sont les projections elliptiques $w = w(t)$ et $u = u(t)$ définies par

$$(\nabla \tilde{w}^h, \nabla \chi) = (\nabla w, \nabla \chi), \quad \forall \chi \in V^h, \tag{4.15}$$

$$(\tilde{w}^h, 1) = (w, 1), \tag{4.16}$$

$$(\nabla \tilde{u}^h, \nabla \chi) + \sigma_s(\nabla_\| \tilde{u}^h, \nabla_\| \chi)_\Gamma + \lambda_s(\tilde{u}^h, \chi)_\Gamma = (\nabla u, \nabla \chi) + \sigma_s(\nabla_\| u, \nabla_\| \chi)_\Gamma + \lambda_s(u, \chi)_\Gamma, \tag{4.17}$$

pour tout $\chi \in V^h$.

D'après le théorème de Lax-Milgram et l'inégalité de Poincaré, il est clair que pour tout $w \in H^1(\Omega)$, les équations (4.15)–(4.16) définissent un unique $\tilde{w}^h \in V^h$. De même, étant donnée une fonction $u \in V$, l'équation (4.17) définit un unique $\tilde{u}^h \in V^h$.

Le résultat d'estimation d'erreur est :

Théorème 4.2 (Cherfils, Petcu & P. [14]) *Soit* (u, w) *une solution de* (4.10)–(4.11) *telle que*

$$u,\ u_t,\ u_{tt},\ w,\ w_t \in L^2(0, T; H^2(\Omega)) \text{ et } u_{|\Gamma}, (u_t)_{|\Gamma}, (u_{tt})_{|\Gamma} \in L^2(0, T, H^2(\Gamma)), \tag{4.18}$$

et soit (u^h, w^h) *une solution de* (4.12)–(4.13). *Si* $\theta^u(0) = 0$ *et* $\theta^w(0) = 0$, *alors*

$$\begin{aligned} \sup_{[0,T]} \left(\left| u^h - u \right|_0 + \left| u^h - u \right|_{0,\Gamma} + \left\| u_t^h - u_t \right\|_{-1,h} + \left| u_t^h - u_t \right|_{0,\Gamma} \right) &\leq Ch^2 \\ \left(\int_0^T \left\| w^h - w \right\|_0^2 \mathrm{d}s \right)^{1/2} &\leq Ch^2, \\ \sup_{[0,T]} \left(\left\| u^h - u \right\|_1 + \left\| u^h - u \right\|_{1,\Gamma} \right) &\leq Ch, \\ \left(\int_0^T \left\| w^h - w \right\|_1^2 + \left\| u_t^h - u_t \right\|_1^2 + \left\| u_t^h - u_t \right\|_{1,\Gamma}^2 \mathrm{d}s \right)^{1/2} &\leq Ch. \end{aligned}$$

Remarque 4.2 La régularité demandée sur u et w est relativement élevée. Grâce à la nature parabolique des équations, pour des données assez régulières et pour des nonlinéarités f et g_s assez régulières, de telles solutions existent.

4.1.3 Problème complètement discrétisé

Le schéma totalement discrétisé est obtenu en appliquant le schéma d'Euler implicite au schéma semi-discrétisé en espace. Le pas de temps $\delta t > 0$ est fixé. Le schéma est : soit $u_h^0 \in V^h$; pour $n = 1, 2, \ldots$ trouver $(u_h^n, w_h^n) \in V^h \times V^h$ solution de

$$(\bar{\partial} u_h^n, \varphi) = -(\nabla w_h^n, \nabla \varphi), \quad \forall \varphi \in V^h, \tag{4.19}$$

$$\begin{aligned}(w_h^n, \chi) &= (f'(u_h^n), \chi) + (\nabla u_h^n, \nabla \chi) + \sigma_s(\nabla_\| u_h^n, \nabla_\| \chi)_\Gamma \\ &\quad + (\tilde{g}_s'(u_h^n), \chi)_\Gamma + \Gamma_s^{-1}(\bar{\partial} u_h^n, \chi)_\Gamma, \quad \forall \chi \in V^h,\end{aligned} \tag{4.20}$$

où $\bar{\partial}$ est défini comme précédemment par (3.44). Nous avons également posé

$$\tilde{g}_s'(\sigma) = \lambda_s \sigma + g_s'(\sigma), \quad \forall \sigma \in \mathbb{R}.$$

La condition de dissipativité (4.5) implique que pour tout $v \in \mathbb{R}$,

$$f''(v) \geq -C_f \quad \text{et} \quad \tilde{g}_s''(v) \geq -C_s, \tag{4.21}$$

pour des constantes positives C_f et C_s.

Le résultat suivant est la version totalement discrétisée du Théorème 4.1. Les preuves et résultats sont similaires à ceux de l'équation de Cahn-Hilliard classique (cf. [77, Théorème 4.1] et [12]).

Théorème 4.3 (Cherfils, Petcu & P. [14]) *Pour tout $u_h^0 \in V^h$, il existe une suite $(u_h^n, w_h^n)_{n \geq 1}$ satisfaisant les équations* (4.19)–(4.20) *et l'estimation d'énergie*

$$\mathcal{E}(u_h^n) + \frac{1}{2\delta t}\left|u_h^n - u_h^{n-1}\right|_{-1,h}^2 + \frac{1}{2\Gamma_s \delta t}\left|u_h^n - u_h^{n-1}\right|_{0,\Gamma}^2 \leq \mathcal{E}(u_h^{n-1}), \quad \forall n \geq 1. \tag{4.22}$$

De plus, si $\delta t < \delta t^\star$ où $\delta t^\star = \min\left\{4/C_f^2, 1/(\Gamma_s C_s)\right\}$, alors la suite est définie de manière unique. D'autre part, si f et g_s sont réelles analytiques, alors $(u_h^n, w_h^n)_{n \geq 1}$ converge vers une solution stationnaire $(\bar{u}_h, \bar{w}_h)$ lorsque $n \to +\infty$.

Remarquer que si f et $\tilde{g}_s$ sont croissantes, alors $C_f = C_s = 0$ et $\delta t^\star = +\infty$ et il n'y a pas de restriction sur δt. Si seulement $\tilde{g}_s$ est croissante, alors $\delta t^\star = 4/C_f^2$ et on retrouve la même restriction que pour l'équation de Cahn-Hilliard classique.

4.1.4 Simulations numériques

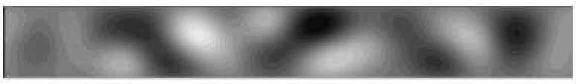


FIG. 4.1: $t = 10$

FIG. 4.2: $t = 100$

Les Figures 4.1–4.3 montre le résultat d'une simulation effectuée avec le schéma d'Euler semi-implicite (ESI) sur le domaine $L_x \times L_y = 80 \times 10$. Notons que le schéma ESI est le schéma (4.19)–(4.20) dans lequel les

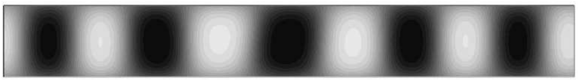


FIG. 4.3: $t = 250$

termes nonlinéaires implicites $f'(u_h^n)$ et $\tilde{g}'_s(u_h^n)$ sont remplacés par les termes explicites $f'(u_h^{n-1})$ et $\tilde{g}'_s(u_h^{n-1})$, respectivement.

La triangulation Ω^h a été obtenue en divisant la plaque en 256×50 rectangles et en divisant chaque rectangle en deux triangles et selon la même diagonale. Les nonlinéarités sont

$$f'(v) = v^3 - v/2 \quad \text{et} \quad \tilde{g}'_s(v) = (\lambda_s + k_s)v - h_s, \quad v \in \mathbb{R},$$

avec $\lambda_s + k_s = 1$ ($\lambda_s = 0.5$, par exemple), $h_s = 0$, les autres paramètres de l'EDP sont $\Gamma_s = 10$, $\sigma_s = 0.1$ et le pas de temps est $\delta t = 0.1$. La condition initiale est une distribution aléatoire uniforme de moyenne nulle et d'amplitude ± 0.01. Dans chaque image, le maximum et le minimum de u sont en blanc et noir respectivement, et les valeurs de u intermédiaires correspondent à différentes teintes de gris.

Les paramètres sont proches de ceux utilisés dans [124, Fig.5], et les résultats sont semblables : des domaines ayant la forme de gouttelettes se forment, et comme $h_s = 0$, aucune des phases n'est préférentiellement attirée par les parois.

4.2 Équation de Cahn-Hilliard avec terme inertiel (articles [13, 18])

4.2.1 Modèle et problématique

Dans [13, 18], nous nous sommes intéressés à la discrétisation de l'équation de Cahn-Hilliard avec terme inertiel

$$\varepsilon u_{tt} + u_t + \alpha \Delta^2 u - \Delta f'(u) = 0 \quad \text{dans } \Omega \times \mathbb{R}_+. \tag{4.23}$$

Nous avons choisi des conditions au bord périodiques sur le domaine $\Omega = \Pi_{k=1}^d (0, L_k)$ ($L_k > 0$ pour $k = 1, \ldots, d$), $1 \leq d \leq 3$; f' est typiquement la dérivée d'un potentiel double-puits polynomial (voir (4.24) pour une définition plus précise) et $\varepsilon > 0$ est un coefficient constant. L'inconnue u est la concentration relative d'une des phases. L'équation (4.23) est complétée par des conditions initiales $u(0)$ et $u_t(0)$.

Dans le cas limite $\varepsilon = 0$, nous retrouvons l'équation de Cahn-Hilliard classique (1.5). Galenko *et al.* ont proposé dans [95, 96, 97] d'ajouter le terme inertiel εu_{tt} pour modéliser des décompositions de phases hors équilibre observées dans certains verres lors d'un refroidissement brutal. L'équation (4.23) est en bonne adéquation avec l'expérience [98].

En comparaison avec l'équation de Cahn-Hilliard, l'équation (4.23) présente des difficultés mathématiques car les solutions ne régularisent plus en temps fini. Le cas de la dimension un d'espace est bien compris [32, 69, 100, 140, 141] mais le cas de la dimension deux [105] ou de la dimension trois [104, 106, 174] est plus compliqué, en particulier car les solutions d'énergie finie (de type H^1) ne sont plus bornées dans L^∞. Une question telle que l'unicité d'une solution d'énergie est par exemple toujours ouverte en dimension 3 de domaine. Une telle situation rappelle le cas des équations de Navier-Stokes incompressible.

Du point de vue numérique, l'équation (4.23) est plus délicate à manier que l'équation de Cahn-Hilliard classique, à cause notamment des oscillations générées par le terme u_{tt}, et qui provoquent plus facilement des instabilités numériques. Des simulations numériques mettant en évidence ces oscillations ont été faites par Lecoq *et al.* [131] en dimension 3 de domaine. Un des intérêts essentiels de l'analyse numérique de (4.23) que nous avons faite a été de comprendre les problèmes de stabilité. Dans [13], nous avons notamment montré que la discrétisation en espace par éléments finis P^1 « splitting » ou par différences finies standard était satisfaisante, dans le sens où les propriétés essentielles du problème continu sont conservées (Théorème 4.4).

Dans [18], nous avons montré que la discrétisation en temps par le schéma d'Euler implicite était dynamiquement stable, *i.e.* stable sur des temps longs (Théorème 4.5). La contrainte sur le pas de temps pour garantir cette stabilité est indépendante du pas d'espace, et ressemble fortement à celle observée numériquement par Lecoq *et al.* pour le schéma d'Euler semi-implicite.

Par rapport à l'équation de Cahn-Hilliard classique, deux difficultés supplémentaires sont apparues : d'une part, la masse n'est plus conservée (en revanche, la masse tend exponentiellement vite vers une constante), et d'autre part la solution (u, u_t) de l'équation appartient naturellement à $H^1 \times H^{-1}$, et il est nécessaire d'introduire des normes négatives discrètes. Nous présentons ci-dessous les résultats de stabilité. Notons que dans [13], des estimations d'erreur pour le schéma semi-discrétisé en espace ont également été établies.

4.2.2 Estimations a priori

La nonlinéarité f' est un polynôme de degré impair et dont le coefficient dominant est strictement positif :

$$f'(y) = \sum_{i=0}^{2p+1} a_i y^i, \quad \forall y \in \mathbb{R}, \text{ avec } a_{2p+1} > 0, \tag{4.24}$$

avec $p \in \mathbb{N}$ si $d = 1$ ou 2 et $p \in \{0, 1, 2\}$ si $d = 3$. Nous notons f une primitive positive de f' (une telle primitive existe à condition de choisir la constante d'intégration assez grande). Ce choix de f' garantit les estimations suivantes :

$$\exists c_f \geq 0, \quad f''(y) \geq -c_f \quad \forall y \in \mathbb{R}, \tag{4.25}$$
$$\exists c_1 > 0,\ c_2 \geq 0, \quad f(y) \geq c_1 y^{2p+2} - c_2, \quad \forall y \in \mathbb{R}, \tag{4.26}$$
$$\exists c_3 > 0,\ c_4 \geq 0, \quad \left|f'(y)\right| \leq c_3 f(y) + c_4, \quad \forall y \in \mathbb{R}. \tag{4.27}$$

Avant de décrire les schémas utilisés, rappelons les estimations a priori fondamentales que nous avons utilisées dans l'analyse. Rappelons que les calculs qui suivent sont valables pour une solution u assez régulière. Tout d'abord, en intégrant (4.23) sur Ω, et en intégrant par parties, on trouve que la masse de u, définie par

$$m(u) = |\Omega|^{-1} \int_\Omega u \, \mathrm{d}x,$$

satisfait l'EDO

$$\varepsilon m(u_{tt}(t)) + m(u_t(t)) = 0,$$

de sorte qu'en utilisant les conditions initiales,

$$m(u_t(t)) = m(u_t(0)) \exp(-t/\varepsilon) \quad \text{et} \quad m(u(t)) = m(u(0)) + \varepsilon m(u_t(0)) \left(1 - \exp(-t/\varepsilon)\right). \tag{4.28}$$

En particulier, si $m(u_t(0)) \neq 0$, $m(u(t))$ n'est plus constant (contrairement au cas $\varepsilon = 0$) ; en revanche, $m(u(t))$ tend exponentiellement vite vers une constante quand $t \to +\infty$.

La deuxième estimation fondamentale est l'estimation d'énergie. Notons tout d'abord $(\cdot, \cdot)$ le produit scalaire $L^2(\Omega)$ et $|\cdot|_0$ la norme associée. Notons $V = V_1 = H^1_{per}(\Omega)$ l'espace d'énergie, muni de la norme $\|\cdot\|_1$; la semi-norme homogène associée est $|v|_1 = |\nabla v|_0$; notons également $V_{-1} = V'$ son dual. L'opérateur $-\Delta$ opère continûment de V dans V_{-1}, mais il n'est pas inversible à cause des constantes. Pour cette raison, nous introduisons également

$$\dot{L}^2(\Omega) = \{v \in L^2(\Omega) \ : \ (v, 1) = 0\}, \quad \dot{V}_1 = V_1 \cap \dot{L}^2(\Omega) \quad \text{et} \quad \dot{V}_{-1} = \{v \in V_{-1} \ : \ \langle v, 1\rangle_{V_{-1},V_1} = 0\}.$$

L'opérateur $-\Delta$ définit une bijection de $\dot{V}$ sur $\dot{V}_{-1}$. La norme sur $\dot{V}_{-1}$, norme duale de $|\cdot|_1$, est notée $|\cdot|_{-1}$, de sorte que pour $v \in L^2(\Omega)$, $|v|_{-1} = ((-\Delta)^{-1} v, v)^{1/2}$. Pour tout $u \in L^2(\Omega)$, nous notons également

$$\dot{u} = u - m(u).$$

Lorsque $m(u_t) = 0$, en appliquant $(-\Delta)^{-1}$ à (4.23), en multipliant par u_t et en intégrant, on trouve que

$$\frac{\varepsilon}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\dot{u}_t|_{-1}^2 + |\dot{u}_t|_{-1}^2 + \frac{\alpha}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\dot{u}|_1^2 + (f'(u), \dot{u}_t) = 0. \tag{4.29}$$

En intégrant entre 0 et t, on trouve que

$$\mathcal{E}(u(t), u_t(t)) + \int_0^t |u_t|_{-1}^2 \,\mathrm{d}s \leq \mathcal{E}(u_0, u_1), \quad \forall t \geq 0,$$

où l'énergie est définie par

$$\mathcal{E}(u, v) = \frac{\varepsilon}{2}|v|_{-1}^2 + \frac{\alpha}{2}|\dot{u}|_1^2 + (f(u), 1). \tag{4.30}$$

Par rapport au cas $\varepsilon = 0$, on remarque que l'énergie $\mathcal{E}$ contient un terme d'énergie potentiel supplémentaire.

Lorsque $m(u_t) \neq 0$, l'égalité (4.29) est encore valable, mais il faut amener un terme correctif en intégrant. A l'aide de l'estimation (4.27), et du lemme de Gronwall, on obtient alors

$$\mathcal{E}(u(t), u_t(t)) + \int_0^t |u_t|_{-1}^2 \,\mathrm{d}s \leq \mathcal{E}(u_0, u_1)\, \mathrm{e}^{c_3|m(u_1)|t} + \frac{c_4\,|\Omega|}{c_3}(\mathrm{e}^{c_3|m(u_1)|t} - 1), \quad \forall t \geq 0. \tag{4.31}$$

4.2.3 Problème semi-discrétisé en espace et problème complètement discrétisé

Pour la discrétisation en espace, nous choisissons une méthode d'éléments finis avec intégration numérique, ce qui permet d'intégrer à la fois les éléments finis conformes et les différences finies standard.

Nous nous donnons donc une famille quasi-uniforme $\{\mathcal{T}_h\}_{h>0}$ de décompositions polygonales de $\overline{\Omega}$. Chaque décomposition $\mathcal{T}_h$ est composée soit de d-simplexes uniquement (*i.e.* des triangles si $d = 2$ et des tétrahèdres si $d = 3$), soit de d-parallélépipèdes uniquement (*i.e.* des rectangles si $d = 2$ et des parallélépipèdes si $d = 3$) ; la décomposition prend également en compte les conditions au bord périodiques.

Nous associons à $\mathcal{T}_h = \cup_{T \in \mathcal{T}_h} T$ l'espace d'éléments finis conformes de degré $k \geq 1$, P^k ou Q^k (voir par exemple [63, 82] pour une définition précise) : si l'élément de référence pour $\mathcal{T}_h$ est un d-simplexe, alors

$$V_h := \left\{ v_h \in C^0_{per}(\overline{\Omega}) \;:\; (v_h)_{|T} \in P^k \quad \forall T \in \mathcal{T}_h \right\} \tag{4.32}$$

et si l'élément de référence de $\mathcal{T}_h$ est un d-parallélépipède, alors

$$V_h := \left\{ v_h \in C^0_{per}(\overline{\Omega}) \;:\; (v_h)_{|T} \in Q^k \quad \forall T \in \mathcal{T}_h \right\}. \tag{4.33}$$

Lorsque $d = 1$, $\mathcal{T}_h$ est simplement une subdivision de $[0, L]$ et l'espace P^k coïncide avec l'espace Q^k. Par construction, V_h est un sous-espace de $V = H^1_{per}(\Omega)$. De plus, V_h contient les constantes.

On note $(\cdot,\cdot)_h$ soit le produit scalaire usuel $(\cdot,\cdot)$ sur $L^2(\Omega)$, soit une méthode d'intégration numérique définie par

$$(\varphi, \chi)_h := \sum_{T \in \mathcal{T}_h} \sum_{l=1}^{m} \omega_{T,l}\varphi(x_{T,l})\chi(x_{T,l}), \tag{4.34}$$

où, pour tout $T \in \mathcal{T}_h$, $(x_{T,l})_{1 \leq l \leq m}$ sont les nœuds d'intégration dans T et $\omega_{T,l} \geq 0$ sont les poids d'intégration de la formule. Les nœuds et les points sont basés sur une même formule d'intégration numérique sur l'élément de référence $\hat{T}$ (un simplexe unité pour les éléments P^k et le d-cube unité $[0,1]^d$ pour les éléments Q^k). Nous supposons que la formule (4.34) satisfait

$$(\varphi, 1)_h = (\varphi, 1) \quad \forall \varphi \in V_h, \tag{4.35}$$

$$(\varphi, \varphi)_h > 0 \quad \forall \varphi \in V_h \setminus \{0\}, \tag{4.36}$$

$$(\nabla\varphi, \nabla\varphi)_h > 0 \quad \forall \varphi \in \dot{V}_h \setminus \{0\}, \tag{4.37}$$

où $\dot{V}_h$ est le sous-espace de V_h défini par

$$\dot{V}_h := \{v_h \in V_h \ : \ (v_h, 1) = 0\},$$

et

$$(\nabla\varphi, \nabla\chi)_h := \sum_{i=1}^{d} (\partial_{x_i}\varphi, \partial_{x_i}\chi)_h, \quad \forall \varphi, \chi \in V_h.$$

Remarquer que d'après (4.35), $\dot{V}_h = \{v_h \in V_h \ : \ (v_h, 1)_h = 0\}$.

Exemple 8 Si V_h est l'espace des éléments finis P^k conformes, et si la formule de quadrature sur le simplexe de référence est exacte pour les polynômes d'ordre $\leq 2k$, alors

$$(\varphi, \chi)_h = (\varphi, \chi) \quad \text{et} \quad (\nabla\varphi, \nabla\chi)_h = (\nabla\varphi, \nabla\chi) \quad \forall \varphi, \chi \in V_h,$$

et les hypothèses (4.35)–(4.37) sont satisfaites ; dans ce cas, seul le terme non linéaire sera (éventuellement) calculé de manière approximative.

Exemple 9 Si V_h est l'espace des éléments Q^1 conformes, et si la formule de quadrature sur le d-cube unité est la formule du trapèze, alors les hypothèses (4.35)–(4.37) sont également satisfaites, et la discrétisation en espace proposée est équivalente à une discrétisation par un schéma aux différences finies standard (cf. [13] pour les détails).

Pour décrire les propriétés des version discrètes du problème, il est nécessaire d'introduire une norme discrète. Suivant une approche standard (cf. [184]), nous définissons d'abord l'opérateur linéaire $T_h : \dot{V}_h \to \dot{V}_h$ défini par pour tout $u_h \in \dot{V}_h$ par

$$(\nabla(T_h u_h), \nabla v_h)_h = (u_h, v_h)_h, \quad \forall v_h \in \dot{V}_h. \tag{4.38}$$

D'après (4.37), $(\nabla\cdot, \nabla\cdot)_h$ est un produit scalaire sur $\dot{V}_h$ et u_h est bien défini de manière unique. De plus, T_h est autoadjoint sur $\dot{V}_h$ pour le produit scalaire $(\cdot,\cdot)_h$ puisque

$$(v_h, T_h u_h)_h = (\nabla T_h v_h, \nabla T_h u_h)_h = (u_h, T_h v_h)_h, \quad \forall u_h,\ v_h \in \dot{V}_h. \tag{4.39}$$

Enfin, T_h est défini positif pour le produit scalaire $\dot{V}_h$ sur $(\cdot,\cdot)_h$. En effet, si l'on choisit $v_h = u_h$ dans l'égalité précédente, on voit que $(u_h, T_h u_h)_h = (\nabla T_h u_h, \nabla T_h u_h)_h \geq 0$, et si l'on choisit $v_h = u_h$ dans (4.38), on voit que $(\nabla T_h u_h, \nabla u_h)_h = (u_h, u_h)_h$, de sorte que T_h est injectif.

En diagonalisant T_h, on peut définir pour tout $s \in \mathbb{R}$ l'opérateur $(T_h)^s$ (pour $s = 0$, $(T_h)^0 = I$), et la norme discrète

$$|v|_{-s,h} = ((T_h)^s v, v)_h^{1/2}, \quad \forall v \in \dot{V}_h, \tag{4.40}$$

qui est une norme euclidienne sur $\dot{V}_h$.

En introduisant la variable $w = -\alpha\Delta u + f'(u)$, le schéma semi-discrétisé s'écrit : pour $(u_0^h, u_1^h) \in V_h \times V_h$ donné, trouver $(u^h, w^h) : [0, +\infty] \to V_h \times V_h$ solution de

$$\begin{aligned} \varepsilon(u_{tt}^h, \varphi)_h + (u_t^h, \varphi)_h &= -(\nabla w^h, \nabla\varphi)_h \quad \forall \varphi \in V_h, & (4.41)\\ (w^h, \chi)_h &= \alpha(\nabla u^h, \nabla\chi)_h + (f'(u^h), \chi)_h \quad \forall \chi \in V_h, & (4.42)\\ u^h(0) &= u_0^h, \quad u_t^h(0) = u_1^h. & (4.43) \end{aligned}$$

Avec le système écrit ainsi, il est possible d'obtenir des versions discrètes des estimations a priori (4.28) et (4.31). L'énergie discrète pour ce système est définie pour tout $(u_h, v_h) \in V_h \times V_h$ par

$$E_h(u_h, v_h) := \frac{\varepsilon}{2} |\dot{v}_h|_{-1,h}^2 + \frac{\alpha}{2} |\dot{u}_h|_{1,h} + F_h(u_h), \quad \text{avec } F_h(u^n) := (f(u_h^n), 1)_h. \tag{4.44}$$

On peut montrer :

Théorème 4.4 (Grasselli & P. [13]) *Soit* $(u_0^h, u_1^h) \in V_h \times V_h$. *Le problème* (4.41)–(4.43) *admet une unique solution* $(u^h, w^h) \in C^2([0,+\infty); V_h \times V_h)$. *De plus,*

$$E_h(u^h(t), u_t^h(t)) + \int_0^t \left|u_t^h\right|_{-1,h}^2 \mathrm{d}s \leq E_h(u_0^h, u_1^h)\, \mathrm{e}^{c_3|m(u_1)|t} + \frac{c_4\,|\Omega|}{c_3}(\mathrm{e}^{c_3|m(u_1)|t} - 1),\ \forall t \geq 0, \tag{4.45}$$

et $(u^h(t), u_t^h(t), w^h(t)) \to (u^{h,\star}, 0, w^\star)$ *lorsque* $t \to +\infty$, *où* $(u^{h,\star}, 0, w^{h,\star}) \in V_h \times V_h \times \mathbb{R}$ *est une solution stationnaire de* (4.41)–(4.42).

Le schéma totalement discrétisé est obtenu en appliquant le schéma d'Euler implicite à (4.41)–(4.42). On fixe un pas de temps $\delta t > 0$. Le schéma s'écrit : soient $u_h^0 \in V$ et $u_h^1 \in V_h$; pour $n \geq 1$, $(u_h^{n+1}, w_h^{n+1}) \in V_h \times V_h$ est solution de

$$\varepsilon(\frac{u_h^{n+1} - 2u_h^n + u_h^{n-1}}{\delta t^2}, \varphi)_h + (\frac{u_h^{n+1} - u_h^n}{\delta t}, \varphi)_h = -(\nabla w_h^{n+1}, \nabla\varphi)_h \quad \forall \varphi \in V_h, \tag{4.46}$$

$$(w_h^{n+1}, \chi)_h = \alpha(\nabla u_h^{n+1}, \nabla\chi)_h + (f'(u_h^{n+1}), \chi)_h \quad \forall \chi \in V_h. \tag{4.47}$$

Pour $\varepsilon = 0$, on retrouve le schéma d'Euler implicite pour l'équation de Cahn-Hilliard (cf. [77]). En utilisant un procédé de minimisation, il est facile de voir que pour (u_h^{n-1}, u_h^n) donnés, les équations (4.46)–(4.47) ont toujours au moins une solution (u_h^{n+1}, w_h^{n+1}). L'unicité est garantie si δt est assez petit (et plus précisément, si $\varepsilon/\delta t^2 + 1/\delta t > c_f^2/(4\alpha)$, avec c_f défini par (4.25)).

Étant donnée une suite $(u_h^n, w_h^n)_{n\in\mathbb{N}}$ dans $V_h \times V_h$ qui satisfait les équations (4.46)–(4.47), nous définissons la dérivée discrète

$$v_h^{n+1} := \frac{u_h^{n+1} - u_h^n}{\delta t}, \quad n \geq 0, \tag{4.48}$$

et l'énergie discrète

$$E^n := \frac{\varepsilon}{2}\,\|\dot{v}_h^n\|_{-1,h}^2 + \frac{\alpha}{2}\,\|\dot{u}_h^n\|_{1,h} + F_h(u_h^n), \quad n \geq 0, \tag{4.49}$$

où F_h est comme ci-dessus. On a la version discrète en temps du Théorème 4.4 :

Théorème 4.5 (Grasselli, Lecoq & P. [18]) *On suppose que* $(\cdot,\cdot)_h$ *est ou bien le produit scalaire usuel sur* $L^2(\Omega)$, *ou bien une formule d'intégration numérique définie par* (4.34) *et satisfaisant* (4.35)–(4.37). *Si* $\delta t c_f^2 < 8\alpha$ *(où* c_f *est la meilleure constante dans* (4.25)*) et si* $(u_h^n, w_h^n)_{n\in\mathbb{N}}$ *est une suite dans* $V_h \times V_h$ *qui satisfait* (4.46)–(4.47)*, alors pour* $\mu \in (0,1)$ *assez proche de* 1*, on a*

$$\begin{aligned} &E^n + \sum_{k=1}^n \delta t \left(1 - \frac{c_f^2\delta t}{8\mu\alpha}\right)\left|\dot{v}_h^k\right|_{-1,h}^2 + \frac{(1-\mu)\alpha}{2}\delta t^2 \left|\dot{v}_h^k\right|_{1,h}^2 \\ &\leq \exp\left(c_3\varepsilon\left|m(v_h^0)\right|\right)\left(E^0 + c_4\varepsilon\,|\Omega|\left|m(v_h^0)\right| + \frac{c_f}{2}\delta t\,|\Omega|\left|m(v_h^0)\right|^2 \frac{\varepsilon^2}{2\varepsilon + \delta t}\right), \end{aligned} \tag{4.50}$$

pour tout $n \geq 1$, *où* c_3 *et* c_4 *sont définies dans* (4.27). *De plus,* $(u_h^n, v_h^n, w_h^n) \to (u_h^\star, 0, w_h^\star)$, *où* $(u_h^\star, 0, w_h^\star) \in V_h \times V_h \times \mathbb{R}$ *est une solution stationnaire de* (4.46)–(4.47).

Remarque 4.3 Ce résultat de stabilité laisse apparaître un terme régularisant $\left|\dot{v}_h^k\right|_{1,h}$ que ne possède pas l'EDP (4.23). De plus, le schéma n'est que d'ordre 1 en temps. Il serait intéressant de trouver un schéma asymptotiquement stable, qui soit d'ordre 2 en temps et non régularisant.

Remarque 4.4 Lorsque $(\cdot,\cdot)_h = (\cdot,\cdot)$, les estimations d'énergie permettent de montrer qu'à une sous-suite près, les solutions discrète convergent vers une solution d'énergie finie du problème continu (sur tout intervalle de temps $[0,T]$, $T < \infty$). Dans [13], nous avons également montré des estimations d'erreur pour le schéma semi-discrétisé en espace.

Chapitre 5

Équation de diffusion visqueuse (article [11])

5.1 Problématique

Dans [11], je me suis intéressé à une discrétisation de l'équation de diffusion visqueuse

$$u_t - \nu\Delta u_t = \Delta f'(u) \quad x \in \Omega,\ t \geq 0, \tag{5.1}$$

avec des conditions au bord de type Neumann et où $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ est typiquement un potentiel double-puits, par exemple $f(s) = (s^2 - 1)^2$. Le domaine Ω est un ouvert borné de $\mathbb{R}^d$ avec $1 \leq d \leq 3$ et à frontière lipschitzienne. Cette équation peut être vue comme une régularisation (du type Yosida) de l'équation de diffusion

$$u_t = \Delta f'(u) \quad x \in \Omega,\ t \geq 0, \tag{5.2}$$

cette dernière étant mal posée lorsque f n'est pas convexe : en effet, si l'on développe le membre de droite de (5.2), le terme de dérivation le plus élevé est $f''(u)\Delta u$, et on a $f''(u) < 0$ lorsque u est dans l'intervalle spinodal ; le coefficient devant le laplacien a donc le mauvais signe.

Il est intéressant de noter que l'équation de Cahn-Hilliard (1.5) (avec $\kappa = 1$ ici) peut aussi être vue comme une régularisation d'ordre 4 en espace de (5.2). L'équation de Cahn-Hilliard visqueuse

$$u_t - \nu\Delta u_t = \Delta f'(u) - \alpha\Delta^2 u \quad x \in \partial\Omega,\ t \geq 0, \tag{5.3}$$

dont la modélisation a été introduite par Novick-Cohen dans [156], et qui apparaît dans de nombreux autres modèles (cf. (3.9)), généralise à la fois (5.1) et l'équation de Cahn-Hilliard classique (cas $\nu = 0$). Pour comprendre des modèles plus complexes, il apparaît donc important de comprendre les propriétés de (5.1). Cela a été fait sur le plan théorique par Novick-Cohen et Pego dans [158]. Evans et Portilheiro se sont également intéressés à cette équation dans [83], en étudiant notamment le modèle limite lorsque $\nu \to 0^+$ (ce modèle limite présente des phénomènes d'hystérésis).

Du point de vue numérique, l'équation (5.1) présente une différence notable avec l'équation de Cahn-Hilliard classique ou de Cahn-Hilliard visqueuse dans le sens où, en l'absence du bilaplacien régularisant, les états d'équilibre non constants présentent des discontinuités.

Pour être plus spécifique, reformulons (5.1) sous la forme

$$u_t = -\nu^{-1}(I - (I - \nu\Delta_N)^{-1})f'(u), \tag{5.4}$$

où l'opérateur $(I - \nu\Delta_N)^{-1}$ est défini par $w = (I - \nu\Delta_N)^{-1}g$, pour w satisfaisant

$$\begin{cases} (I - \nu\Delta)w = g & \text{in } \Omega, \\ \frac{\partial w}{\partial n} = 0 & \text{on } \partial\Omega. \end{cases} \tag{5.5}$$

Par le principe du maximum, $(I - \nu\Delta_N)^{-1}$ opère continûment de $L^\infty(\Omega)$ dans $L^\infty(\Omega)$, et l'équation (5.1) peut être vue comme une ODE non locale sur l'espace de Banach $L^\infty(\Omega)$. Toute fonction mesurable $u(x)$ telle que $f'(u(x))$ est constant est un état stationnaire de (5.4). En particulier, si f' n'est pas monotone, les phases peuvent être arrangées de manière arbitraire dans le domaine Ω.

La Figure 5.1 montre ainsi un état d'équilibre calculé numériquement sur le disque unité Ω, pour $f'(u) = u^3 - u$ et $\nu = 0.1$. Le noir correspond à des valeurs égales à $+1$ et le blanc à des valeurs égales à -1 ; la figure illustre notamment l'absence de motif distinctif, ainsi que l'absence de régularité à la frontière des sous-domaines définis par $u < 0$.

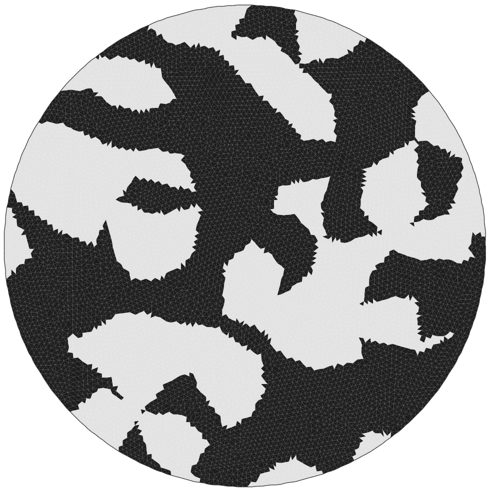


FIG. 5.1: Un état d'équilibre pour (5.4)

Il est facile de voir que la fonctionnelle d'énergie libre

$$\mathcal{F}(u) = \int_\Omega f(u)\,\mathrm{d}x \tag{5.6}$$

est une fonction de Liapounov pour les solutions de (5.4), mais dans un sens relativement faible. Pego et Novick-Cohen ont montré que sous des hypothèses raisonnables, une solution de (5.4) converge (presque partout) vers un état d'équilibre lorsque $t \to +\infty$. De plus, tout état d'équilibre $u(x)$ satisfaisant $f''(u(x)) > 0$ est presque partout dynamiquement stable pour des perturbations au sens de la convergence des mesures. Cela implique que des solutions régulières (qui existent dès que la condition initiale est régulière) peuvent converger vers un état d'équilibre discontinu. De plus, l'état ainsi atteint n'est pas génériquement un minimiseur de (5.6) sous la contrainte $\int_\Omega u\,\mathrm{d}x =$ constante.

Dans [11], le but principal était de trouver une discrétisation de (5.4) qui puisse reproduire ces caractéristiques de la dynamique. En particulier, afin d'obtenir des états discontinus, nous avons choisi une discrétisation en espace par des éléments finis discontinus. Nous avons pour cela utilisé les plus simples possibles, à savoir les éléments P^0, constants par morceaux, et notre problème discrétisé peut être vu comme un flot de gradient pour la fonctionnelle $\mathcal{F}$ en dimension finie (cf. Théorème 5.2). Le résultat principal établit que la solution u^h du problème discrétisé converge uniformément sur $\overline{\Omega} \times [0, T]$ vers la solution u du problème (5.4), pour tout intervalle de temps fini $[0, T]$. Nous énonçons ce résultat ci-dessous (Théorème 5.3), en commentant quelques points importants de la démonstration. Notons que des simulations par différences finies avaient déjà été effectuées en dimension un par Evans pour (5.4) ; citons également [76, 79] pour des discrétisations de problèmes proches (équation (5.2), modèle de Perona-Malik).

5.2 Le problème continu et sa semi-discrétisation en espace

Nous faisons les hypothèses suivantes sur f :

$$f \in C^{1,1}_{loc}(\mathbb{R}), \tag{5.7}$$

$$\liminf_{s\to-\infty} f'(s) = -\infty \text{ et } \limsup_{s\to\infty} f'(s) = +\infty. \tag{5.8}$$

En vue d'une approximation uniforme par éléments finis, il est naturel de supposer que $\overline{\Omega}$ est un domaine polyhédral connexe et borné, *i.e.* un intervalle si $d = 1$, un polygone si $d = 2$ et un polyhèdre si $d = 3$. En particulier, Ω a une frontière lipschitzienne (mais pas C^1). Il est inutile de supposer que Ω est convexe.

L'opérateur $(I - \nu\Delta_N)^{-1}$ est défini par $w = (I - \nu\Delta_N)^{-1}g$ où w satisfait la version faible de (5.5), *i.e.*

$$\nu(\nabla w, \nabla\varphi) + (w, \varphi) = (g, \varphi) \quad \forall\varphi \in H^1(\Omega). \tag{5.9}$$

La notation $(\cdot, \cdot)$ désigne le produit scalaire $L^2(\Omega)$. Pour l'approximation numérique, nous avons utilisé les propriétés suivantes de l'opérateur $(I - \nu\Delta_N)^{-1}$.

Lemme 5.1 *Pour tout $g \in L^\infty(\Omega)$, le problème* (5.9) *admet une unique solution $w \in H^1(\Omega)$. De plus,*

$$\inf \mathrm{ess}_\Omega\, g \leq w(x) \leq \sup \mathrm{ess}_\Omega\, g \quad \textit{p.p. } x \in \Omega,$$

et l'application linéaire $g \mapsto w$ est continue de L^∞ à valeurs dans $W^{1,p}(\Omega)$, pour un $p > d$ qui dépend de Ω. En particulier, $w \in C^0(\overline{\Omega})$.

Noter que le résultat de régularité est non trivial en dimension $d = 2$ ou $d = 3$, en particulier parce qu'on ne suppose pas Ω convexe. Pour la dimension $d = 2$, on a utilisé des résultats de Grisvard [109], et pour la dimension $d = 3$, un résultat de Dauge [67].

Avant de définir l'espace où vit la solution u de (5.4), nous introduisons une suite $\{\mathcal{T}_{h_k}\}_{k\in\mathbb{N}}$ de triangulations simpliciales conformes de Ω ; chaque triangulation couvre exactement Ω, et $h_k \to 0$ lorsque $k \to +\infty$, le paramètre h_k étant défini ci-dessous. Lorsque nous considérons une triangulation fixée, nous omettons l'index k, pour simplifier.

Pour une triangulation donnée, $\mathcal{T}_h = \mathcal{T}_{h_k}$, l'ensemble $\overline{\Omega}$ est l'union $\overline{\Omega} = \cup_{T\in\mathcal{T}_h} T$ d'un nombre fini de d-simplexes fermés et non dégénérés T ; le paramètre h est défini par

$$h = \max_{T\in\mathcal{T}_h} h(T),$$

où, pour tout T, $h(T)$ est le diamètre du d-simplexe T. A la triangulation $\mathcal{T}_h$, nous associons l'espace $V^h \subset H^1(\Omega)$ des fonctions continues et affines sur chaque élément :

$$V^h = \{u \in C^0(\overline{\Omega}),\ u_{|T} \text{ est affine pour tout } T \in \mathcal{T}_h\},$$

et l'espace $M^h \subset L^\infty(\Omega)$ des fonctions constantes sur chaque élément

$$M^h = \{u \in L^\infty(\Omega),\ u_{|T} \text{ est constant pour tout } T \in \mathcal{T}_h\}.$$

Nous notons q_i, $1 \leq i \leq N$ les sommets de la triangulation $\mathcal{T}_h$, et T_i, $1 \leq i \leq M$ les d-simplexes de $\mathcal{T}_h$.

La discrétisation en espace d'une solution u est faite par une fonction u^h de M^h. Comme nous souhaitons obtenir un résultat de convergence uniforme lorsque $h \to 0$, il est nécessaire de supposer que la condition initiale u_0 peut être approchée uniformément par une suite de fonctions $\{u^{h_k}\}_{k\in\mathbb{N}}$ avec $u^{h_k} \in M^{h_k}$, pour tout k.

Nous supposons donc que la suite de triangulations $\{\mathcal{T}_{h_k}\}_{k\in\mathbb{N}}$ vérifie

$$M^{h_k} \subset M^{h_{k+1}} \text{ pour tout } k \in \mathbb{N}, \tag{5.10}$$

et nous définissons l'espace $X(\{\mathcal{T}_{h_k}\})$ comme la complétion dans $L^\infty(\Omega)$ de $\cup_{k\in\mathbb{N}} M^{h_k}$. Avec cette définition, $X = X(\{\mathcal{T}_{h_k}\})$ est un espace de Banach séparable pour la norme $L^\infty(\Omega)$, et X contient $C^0(\overline{\Omega})$. De plus, tout élément $u \in X$ peut être approché uniformément sur Ω par une suite $\{u^{h_k}\}_{k\in\mathbb{N}}$ avec $u^{h_k} \in M^{h_k}$.

En considérons (5.4) comme une ODE sur X, nous obtenons le résultat d'*existence globale* suivant :

Théorème 5.1 (P. [11]) *On suppose que f satisfait* (5.7), (5.8) *et que $\{\mathcal{T}_{h_k}\}_{k\in\mathbb{N}}$ satisfait* (5.10). *Alors, pour tout $u_0 \in X = X(\{\mathcal{T}_{h_k}\})$, l'équation* (5.4) *admet une unique solution $u \in C^1([0,+\infty), X)$ telle que $u(0) = u_0$.*

L'existence locale est une application du Théorème de Cauchy-Lipschitz à l'espace X. L'existence globale est basée sur l'estimation a priori suivante, établie dans [158], et qui a son intérêt propre :

Proposition 5.1 (Novick-Cohen & Pego [158]) *Soit $[a,b]$ $(-\infty < a < b < \infty)$ un intervalle tel que*

$$f'(a) \le f'(s) \le f'(b) \quad \textit{pour tout } s \in [a,b].$$

Si $u_0 \in [a,b]$ p.p. dans Ω, alors pour tout $t \in [0,T)$, $u(t) \in [a,b]$ p.p. dans Ω.

Ainsi, pour $f'(s) = s^3 - s$, les valeurs optimales a et b telles que $[a,b]$ contient $[-1,1]$ et $f'(a) \le f'(s) \le f'(b)$ pour tout $s \in [a,b]$ sont $a = -2/\sqrt{3}$ et $b = 2/\sqrt{3}$ (cf. Figure 5.2).

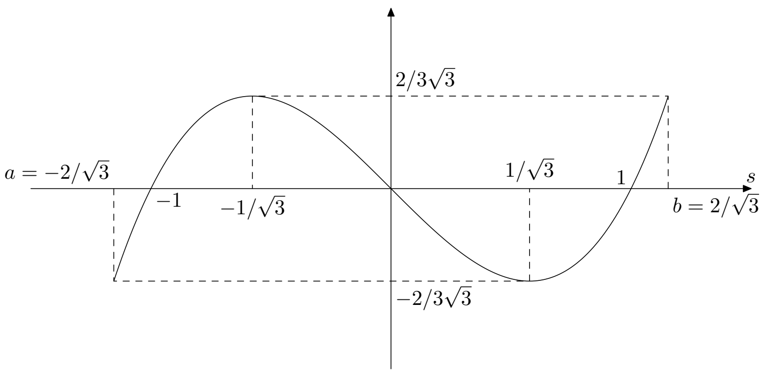


FIG. 5.2: Cubique $f'(s) = s^3 - s$

Remarque 5.1 Il est facile de voir que si $d = 1$, toute fonction réglée (*i.e.* une limite uniforme de fonctions en escalier) peut être choisie comme condition initiale dans le Théorème 5.1. Si $d = 2$ ou 3, la condition (5.10) sur la suite de maillages est plus contraignante. Elle est vérifiée pour une suite de type « dyadique » (découper les triangles en 4) en dimension 2.

La discrétisation du problème (5.4) que nous avons utilisée est assez naturelle. Nous résolvons (5.5) par éléments finis P^1, avec un second membre P^0, et nous reportons le résultat dans (5.4). Cela s'écrit : pour $u_0^h \in M^h$, trouver $(u^h, w^h) : \mathbb{R}_+ \to M^h \times V^h$ tels que

$$\nu(\nabla w^h(t), \nabla\varphi^h) + (w^h(t), \varphi^h) = (f'(u^h(t)), \varphi^h), \quad \forall \varphi^h \in V^h, \tag{5.11}$$

$$\nu(u_t^h(t), e^h) = (w^h(t), e^h) - (f'(u^h(t)), e^h), \qquad \forall e^h \in M^h, \tag{5.12}$$

$$u^h(0) = u_0^h. \tag{5.13}$$

Remarquer que l'on utilise encore une formulation « splitting » du problème, un peu comme pour la discrétisation de Cahn-Hilliard classique.

En analysant la forme matricielle de ce schéma, on obtient :

Théorème 5.2 (P. [11]) *Pour tout $u_0^h \in M^h$, le problème* (5.11)–(5.13) *admet une unique solution* (u^h, w^h) *dans* $C^1(\mathbb{R}_+, M^h) \times C^0(\mathbb{R}_+, V^h)$*. De plus,* (5.11)–(5.13) *peut être vu comme un flot de gradient pour la fonctionnelle $\mathcal{F}$ définie par* (5.6)*, pour un produit scalaire approprié sur M^h. En particulier, si f est analytique, il existe un état d'équilibre discret $(u^{h,\infty}, w^{h,\infty}) \in M^h \times \mathbb{R}$ tel que $u^h(t) \to u^{h,\infty}$ et $w^h(t) \to w^{h,\infty}$ lorsque $t \to +\infty$.*

La convergence uniforme de u^h vers u s'obtient relativement aisément en dimension $d = 1$. En dimension 2 et 3, elle est basée sur le principe du maximum discret pour la discrétisation par éléments finis P^1 du problème (5.5), discrétisation utilisée dans (5.11) : d'après un résultat célèbre de Ciarlet et Raviart [64], ce principe du maximum discret et la convergence uniforme qui en résulte sont assurés si la solution w appartient à $W^{1,p}(\Omega)$ pour un $p > d$. Pour garantir ce principe du maximum discret, il est en outre nécessaire de faire des hypothèses supplémentaires sur la suite de triangulations $\{\mathcal{T}_{h_k}\}$ (lorsque $d = 2, 3$). Nous supposons donc que cette triangulation est *régulière*, *i.e.* qu'elle satisfait la condition d'angle minimal, et qu'elle est à angles aigüs, *i.e.* : pour $d = 2$, l'angle de chacun triangle est inférieur à $\pi/2 - \varepsilon$, pour un $\varepsilon > 0$ indépendant de h_k ; pour $d = 3$, l'angle entre deux faces d'un même tétrahèdre est inférieur à $\pi/2 - \varepsilon$, pour un $\varepsilon > 0$ indépendant de h_k. Nous dirons également que la suite de triangulations $\{\mathcal{T}_{h_k}\}$ est croissante si elle satisfait (5.10). Sous ces conditions, nous avons :

Théorème 5.3 (P. [11]) *Soient $\{\mathcal{T}_{h_k}\}_{k\in\mathbb{N}}$ une suite croissante et régulière de triangulations à angles aigüs, $u_0 \in X(\{\mathcal{T}_{h_k}\})$ et $u_0^{h_k} \in M^{h_k}$ une suite telle que $\left\|u_0 - u_0^{h_k}\right\|_{L^\infty(\Omega)} \to 0$. Alors, pour tout $T > 0$,*

$$\sup_{0\le t\le T} \left\|u(t) - u^{h_k}(t)\right\|_{L^\infty(\Omega)} \to 0,$$

où u est la solution de (5.4) *telle que $u(0) = u_0$ et u^{h_k} est la solution de* (5.11)–(5.12) *telle que $u^{h_k}(0) = u_0^{h_k}$.*

Le schéma de la preuve de ce résultat est relativement standard : on utilise la projection elliptique de u (pour laquelle on a le résultat d'approximation uniforme de Ciarlet et Raviart), et l'on compare cette projection à u^{h_k} en utilisant les équations vérifiées par u et u^{h_k}.

Remarquons qu'en dimension $d = 1$, il est possible d'obtenir une estimation d'erreur optimale :

Théorème 5.4 (P. [11]) *Si $d = 1$, si u_0 est lipschitzienne par morceaux, relativement à la subdivision initiale $\mathcal{T}_{h_0}$, et si la suite de subdivisions $\{\mathcal{T}_{h_k}\}$ est croissante, alors il existe $C, C' > 0$ indépendantes de h_k telles que*

$$\sup_{0\le t\le T} \left\|u(t) - u^{h_k}(t)\right\|_{L^\infty(\Omega)} \le C \left(\left\|u_0 - u_0^{h_k}\right\|_{L^\infty(\Omega)} + C' h_k \right).$$

On a ainsi une estimation en $O(h_k)$ en choisissant $u_0^{h_k}$ comme le projeté de u_0 pour le produit scalaire $L^2(\Omega)$. Ce résultat est possible car les discontinuités de $u(t)$ ne dépendent pas de t. En dimension supérieure, on ne peut pas espérer un tel résultat, puisque l'on ne peut espérer pas une régularité de type $C^{0,1}$ pour la solution w du problème elliptique (5.5), lorsque g est seulement continu par élément. On pourrait espérer obtenir des estimations en $O(h^\alpha)$ pour un $\alpha \in (0, 1)$ dépendant du domaine.

5.3 Illustration numérique

La Figure 5.3 représente une solution u de (5.4) en dimension $d = 1$ sur l'intervalle $\Omega = (0, 1)$, pour la nonlinéarité $f'(s) = s^3 - s$, et pour $\nu = 0.1$. La condition initiale est la fonction régulière

$$u_0(x) = 0.5 \tanh(2(x - 0.2)) \quad x \in [0, 1].$$

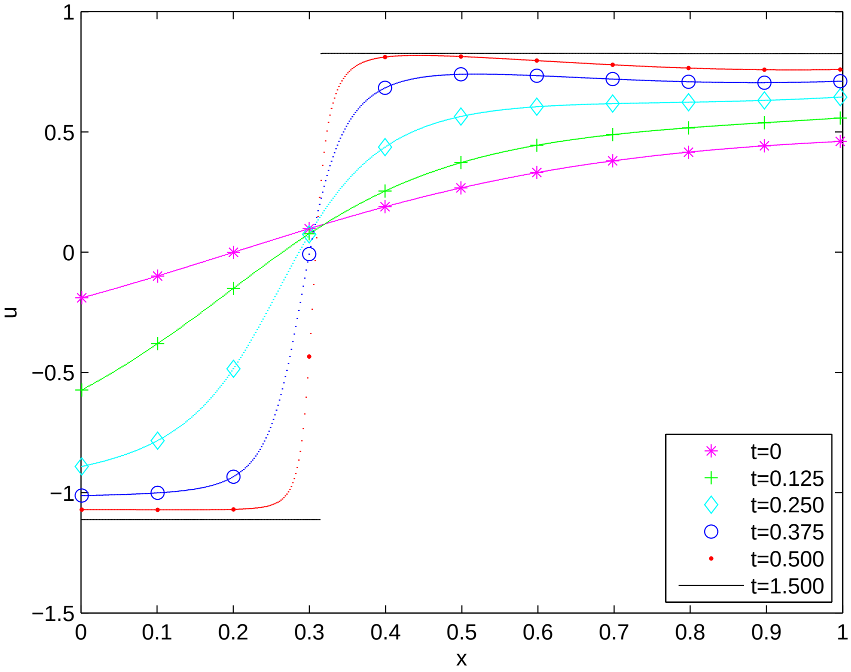


FIG. 5.3: Solution de (5.4) à des intervalles de temps de 0.125 et état final

La discrétisation en espace est faite par (5.11)–(5.12) avec une subdivision uniforme de pas $h = 2^{-12}$, et la discrétisation en temps est faite par un schéma de Crank-Nicolson de pas constant $\delta t = h$. On observe que la solution paraît continue pour chaque t et qu'elle évolue vers un état constant par morceaux lorsque $t \to +\infty$, comme prédit par la théorie. En pratique, avec la discrétisation, l'état final est visuellement atteint dès le temps $t = 1.5$. On remarque que l'état final prend des valeurs en dehors de l'intervalle $[-1, 1]$ (mais dans l'intervalle [], cf. Proposition 5.1), au contraire de ce qui est observé généralement pour l'équation de Cahn-Hilliard. En particulier, cet état final n'est pas un minimiseur de $\mathcal{F}$ avec masse imposée.

La Figure 5.4 illustre qu'une solution de l'équation de Cahn-Hilliard visqueuse (5.3) avec une condition initiale à valeurs dans $[-1, 1]$ ne reste pas nécessairement à valeurs dans $[-1, 1]$, lorsque $f'(s) = s^3 - s$. La discrétisation en espace est une formulation « splitting » P^1-P^1 comme pour le modèle de Cahn-Hilliard-Gurtin (3.27)–(3.29), avec des conditions au bord de type Neumann homogène ici au lieu des conditions périodiques. L'intervalle de calcul $[0, 1]$ est divisé en 800 intervalles égaux ; la discrétisation en temps est faite par un schéma de Crank-Nicolson de pas constant $\delta t = 1/800$. Les paramètres de l'équation sont $\nu = 0.1$, $\alpha = 0.0001$, et la condition initiale est $u_0(x) = -\frac{0.8-u_-}{2}\tanh(20(x-0.35)) + \frac{0.8+u_-}{2}$ avec $u_- = 0.28/0.65$.

On observe également que la solution converge asymptotiquement en temps vers un état stationnaire pour l'équation de Cahn-Hilliard, qui prend des valeurs dans $[-1, 1]$. Pour des petits temps, la solution de (5.3) se comporte en gros comme celle de (5.4) ($\alpha = 0$), et pour des grands temps, elle se comporte en gros comme celle de l'équation de Cahn-Hilliard ($\nu = 0$).

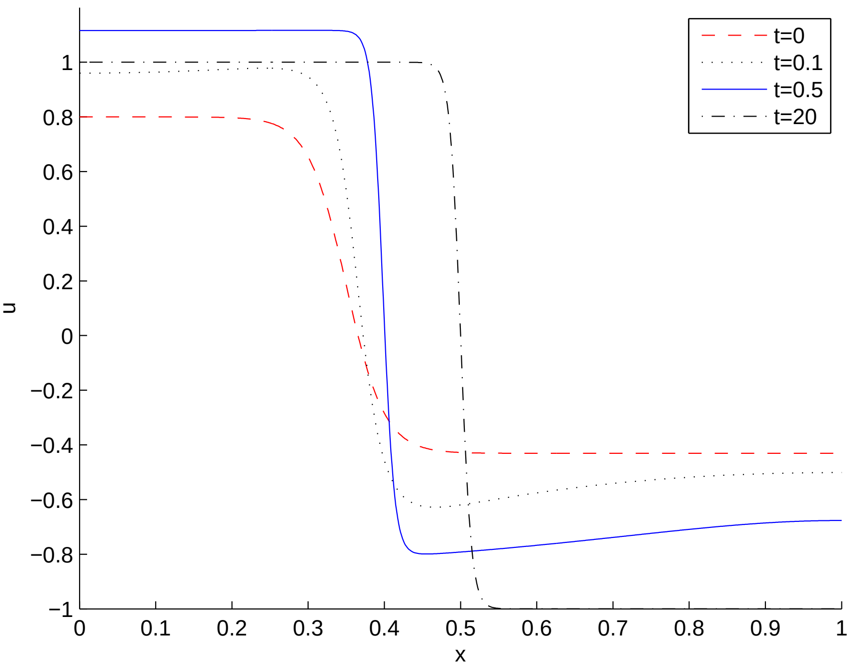


FIG. 5.4: Une solution de (5.3) pour $\nu = 0.1$, $\alpha = 0.0001$

Chapitre 6

Équation d'Allen-Cahn-Gurtin (article [10])

6.1 Modèle

Dans [111], Gurtin établit plusieurs généralisations de l'équation d'Allen-Cahn, en suivant la même démarche que celle adoptée pour l'équation de Cahn-Hilliard-Gurtin de la Section 3.1 (notion de microforces, séparation des lois constitutives et des lois de conservation). Une des généralisations proposée est

$$(\beta - \operatorname{div} a)\partial_t u + (b - a) \cdot \nabla \partial_t u - \operatorname{div} \Big(\partial_{\nabla u} \psi(u, \nabla u) + A \nabla \partial_t u \Big) + \partial_u \psi(u, \nabla u) = \gamma \tag{6.1}$$

où $\beta = \beta(Z)$ est un scalaire, $a = a(Z)$, $b = b(Z)$ sont des vecteurs de $\mathbb{R}^d$, $A = A(Z)$ est une matrice carrée de taille d à coefficients réels, dépendant tous de la variable $Z = (u, \nabla u, \partial_t u, \nabla \partial_t u)$ (Z représente la liste des variables constitutives) ; $\psi = \psi(u, \nabla u)$ est l'énergie libre volumique et γ est un terme source. Les coefficients β, a, b et A satisfont la condition de dissipativité suivante, qui garantit que l'équation est thermodynamiquement consistante : pour toutes les valeurs de $Z = (u, \nabla u, \partial_t u, \nabla \partial_t u)$, on a

$$\beta(Z)\,(\partial_t u)^2 + (\partial_t u)\,(a(Z) + b(Z))^t\,(\nabla \partial_t u) + (\nabla \partial_t u)^t\,A(Z)\,(\nabla \partial_t u) \geq 0.$$

Lorsque β, a, b et A sont constants, qu'il n'y a pas de terme source, et que ψ est défini comme dans l'équation d'Allen-Cahn classique par

$$\psi(u) = f(u) + \frac{\alpha}{2}\,|\nabla u|^2\,,$$

l'équation (6.1) se réduit à

$$\beta \partial_t u + \tilde{b} \cdot \nabla \partial_t u - \operatorname{div}\big(A \nabla \partial_t u\big) - \alpha \Delta u + f'(u) = 0, \tag{6.2}$$

avec $\tilde{b} = b - a$. Dans cette dernière équation, seule la différence $\tilde{b} = b - a$ intervient, de sorte qu'en choisissant sans perte de généralité $a + b = 0$, la condition de dissipativité s'écrit simplement

$$\beta \geq 0 \quad \text{et} \quad y^t A y \geq 0 \text{ pour tout } y \in \mathbb{R}^d.$$

Notons que comme pour le modèle de Cahn-Hilliard-Gurtin (cf. (3.6)), nous pouvons supposer que A est symétrique, sans perte de généralité pour l'étude de ce modèle à coefficients constants.

L'équation (6.2) a été étudiée dans [56] pour un potentiel f polynomial de la forme (1.9), en supposant $\beta > 0$ et A symétrique définie positive. L'existence globale et l'unicité de la solution pour une donnée initiale dans $H^1_{per}(\Omega)$ a été établie en dimension $d \leq 3$ pour une croissance sous-critique de f et des conditions au bord périodiques ; l'existence d'attracteurs de dimension finie a également été établie.

Lorsque nous avons voulu étudier la même équation avec un potentiel logarithmique de la forme (1.8), nous nous sommes heurtés à des difficultés inattendues, liées à l'absence d'un principe de comparaison pour (6.2). Nous avons montré que même pour des données initiales de u à valeurs dans $(-1,1)$, il peut arriver (pour α assez petit) que la solution u prenne les valeurs singulières ± 1 en un (ou plusieurs) points du domaine, au bout d'un temps fini. Un tel problème était inattendu pour plusieurs raisons. En effet, dans le cas particulier *linéaire* $f' \equiv 0$, $\tilde{b} = 0$, $A = aI$ $(a > 0)$, l'équation (6.2) satisfait un principe de comparaison (pour des conditions au bord périodiques, par exemple). Ce principe de comparaison a été établi dans [72] pour des équations pseudo-paraboliques et des opérateurs plus généraux que le laplacien (éventuellement non linéaires). L'absence de principe de comparaison pour (6.2) est dû à la partie *non linéaire*, et peut être attribué au caractère non local de l'équation, qui apparaît en la récrivant comme une équation intégro-différentielle (cf. (6.4)) ; le terme $\alpha\Delta$ apparaît alors comme une perturbation du cas $\alpha = 0$.

Cependant, dans les modèles de champ de phase avec potentiel logarithmique, même en l'absence d'un principe de comparaison, on arrive en général à montrer l'existence de solutions faibles globales : moralement, la singularité du potentiel suffit à imposer que le paramètre d'ordre u reste dans l'intervalle $(-1,1)$. C'est le cas par exemple de l'équation de Cahn-Hilliard classique (1.5) avec un potentiel logarithmique (voir [70, 81] et la Section 1.2) ou encore de l'équation de Cahn-Hilliard-Gurtin (3.8), qui est un modèle très proche de (6.2) (voir [57, 31]). Une des différences entre les deux modèles de Gurtin tient au fait que dans l'équation (6.2), l'ordre de dérivation le plus élevé est 3 (il est imposé par l'opérateur $\operatorname{div}\big(A\nabla\partial_t u\big)$, d'ordre 2 en espace et 1 en temps, tandis que dans (3.8), l'ordre le plus élevé est 4 (en espace).

Dans le cas de l'équation de Cahn-Hilliard classique avec conditions au bord dynamiques et potentiels logarithmiques, Miranville et Zelik [153] ont montré qu'une solution peut prendre les valeurs ± 1 sur une partie du bord de mesure strictement positive (voir également [58] pour des simulations numériques). Ils ont réussi à obtenir des solutions globales en redéfinissant le concept de solution. Le phénomène dans leur cas diffère de celui que nous avons observé pour l'équation d'Allen-Cahn-Gurtin car il se produit sur le bord du domaine et non pas à l'intérieur. De tels exemples montrent qu'il faut rester attentif dans l'analyse mathématique de modèles avec potentiels singuliers.

Nous détaillons ci-dessous les contre-exemples que nous avons exhibés. Ils sont valables dès la dimension un de domaine.

6.2 Contre-exemples théoriques et numériques

En dimension $d = 1$, l'équation (6.2) avec des conditions au bord périodiques s'écrit

$$u_t + bu_{xt} - au_{xxt} - \alpha u_{xx} + f'(u) = 0, \quad x \in \mathbb{T},\ t > 0, \tag{6.3}$$

où nous avons fixé $\beta = 1$ et $\mathbb{T} = \mathbb{R}/\mathbb{Z}$, sans perte de généralité. Dans toute la section, nous supposons que

$$b \in \mathbb{R}, \quad a > 0 \quad \text{et} \quad \alpha > 0.$$

Soit $L_{a,b}$ l'opérateur défini par $L_{a,b} = I + b.\nabla - a\Delta$ avec domaine $H^1(\mathbb{T})$, où $H^1(\mathbb{T}) = H^1_{\text{per}}(0,1)$. D'après le Théorème de Lax-Milgram, $L_{a,b}$ est un isomorphisme de $H^1(\mathbb{T})$ sur $\big(H^1(\mathbb{T})\big)'$. De même, Δ opère de $H^1(\mathbb{T})$ dans $(H^1(\mathbb{T}))'$. En remarquant que $L_{a,b}$ commute avec Δ, nous récrivons (6.3)

$$u_t = \alpha\Delta \circ L_{a,b}^{-1} u - L_{a,b}^{-1} f'(u). \tag{6.4}$$

Par régularité elliptique, $L_{a,b}^{-1}$ envoie $H^m(0,1)$ dans $H^{m+2}(\mathbb{T})$ pour $m \in \mathbb{N}^\star$, et $C^0(\mathbb{T})$ dans $C^2(\mathbb{T})$, où $C^k(\mathbb{T})$ est l'espace des fonctions k fois continûment différentiables sur $\mathbb{T}$. Par conséquent, l'opérateur $B = -\Delta \circ L_{a,b}^{-1}$ est borné de $C^0(\mathbb{T})$ dans $C^0(\mathbb{T})$ et de $H^1(\mathbb{T})$ dans $H^1(\mathbb{T})$. Nous considérons (6.4) comme une EDO non locale sur $C^0(\mathbb{T})$ ou sur $H^1(\mathbb{T})$. Avec ce cadre, l'existence locale de solutions est immédiate.

6.2.1 Cas d'un potentiel polynomial

Dans le cas d'un potentiel polynomial défini par (1.10), le Théorème de Cauchy-Lipschitz dans l'espace de Banach $H^1(\mathbb{T})$ implique

Proposition 6.1 (Cherfils & P. [10]) *On suppose que $f'(s) = s^3 - s$. Alors pour tout $u_0 \in H^1(\mathbb{T})$, l'équation* (6.4) *admet une unique solution maximale $u \in C^1((T^-, +\infty), H^1(\mathbb{T}))$ ($-\infty \leq T^- < 0$) telle que $u(0) = u_0$.*

Noter que l'existence globale pour $t \geq 0$ est assurée par les estimations a priori faites dans [56].

Lorsque $f'(s) = s^3 - s$, il est clair que l'équation (6.3) admet ± 1 comme solutions constantes. Dans ce cas, nous proposons le contre-exemple suivant au principe de comparaison.

Proposition 6.2 (Cherfils & P. [10]) *On suppose que $f'(s) = s^3 - s$. Alors, pour $\alpha > 0$ assez petit, la solution u de* (6.4) *de donnée initiale $u_0(x) = \cos(2\pi x)$ satisfait $\|u(-t)\|_\infty < 1$ et $\|u(t)\|_\infty > 1$, pour tout $t > 0$ assez petit.*

Démonstration. Par développement limité en $t = 0$,

$$u(x,t) = \cos(2\pi x) + t u_t(x,t) + o(t) \text{ lorsque } t \to 0, \text{ uniformément en } x \in \mathbb{T}.$$

Comme $\|u_0\|_\infty = 1$ et que la borne est atteinte seulement en $x = 0$ et $x = 1/2$ dans $\mathbb{T}$, avec $u_0(0) = 1$ et $u_0(1/2) = -1$, il suffit de montrer que $u_t(0,0) > 0$ et $u_t(x = 1/2, t = 0) < 0$. La preuve de ceci est basée sur un calcul explicite, utilisant le fait que la famille $(\mathrm{e}^{i2k\pi x})_{k\in\mathbb{Z}}$ est une famille de vecteurs propres de $L_{a,b}$ et Δ. On utilise également une formule de linéarisation pour traiter le terme u_0^3. Dans le cas $b = 0$, on montre en particulier que $u_t(0,0) > 0$ si et seulement si $\alpha < 2a/(1 + 36a\pi^2)$, ce qui donne une estimation explicite pour α. $\square$

La Figure 6.1 montre des simulations numériques effectuées avec `Scilab`, pour la non-linéarité $f'(s) = s^3 - s$. La condition initiale $u_0(x) = 0.8\cos(2\pi x)$ prend des valeurs dans $(-1, 1)$, et les paramètres sont $a = 1$, $b = 4$ et $\alpha = 0.001$. La discrétisation en espace est faite par éléments finis conformes continus et affines par morceaux (P^1), et la discrétisation en temps est un schéma de Crank-Nicolson [170, 180] ; cette discrétisation est faite sur la formulation variationnelle de l'équation (6.3). La subdivision en espace est uniforme, avec un pas $\Delta x = 0.0025$, et la subdivision en temps est uniforme aussi, avec un pas $\Delta t = 0.07$. La solution est affichée aux itérations en temps $n = 0$, 500, 1500 et 14000. On voit que la solution dépasse nettement les valeurs ± 1 à l'itération $n = 1500$. En fait, le maximum de la solution obtenu numériquement est 1.0719 à l'itération $n = 1621$ ($n\Delta t \approx 113$) et au point $x \approx 0.03$. La valeur de u pour de grands temps (itération $n = 14000$) illustre le comportement asymptotique de la solution, qui converge vers un état d'équilibre à valeurs dans $[-1, 1]$ (voir Proposition 1.2).

6.2.2 Cas d'un potentiel logarithmique

Dans cette section, nous considérons un potentiel logarithmique avec f' défini en (1.8) par

$$f'(u) = \frac{\theta}{2}\ln\left(\frac{1+u}{1-u}\right) - \theta_c u, \quad u \in (-1,1) \quad (0 < \theta < \theta_c).$$

En particulier, $\beta > 0$ est l'unique racine strictement positive de f' et l'on a

$$0 < \gamma < \beta < 1, \qquad f'(\gamma) < f'(\beta) = 0 \quad \text{et} \quad f''(\gamma) = 0 < f''(\beta).$$

Nous utiliserons l'espace $X = C^0(\mathbb{T})$, qui est un espace de Banach pour la norme

$$\|v\|_\infty = \sup_{x\in\mathbb{T}} |v(x)|, \quad v \in X.$$

Le Théorème de Cauchy-Lipschitz appliqué à (6.4) et avec une condition initiale dans X s'énonce :

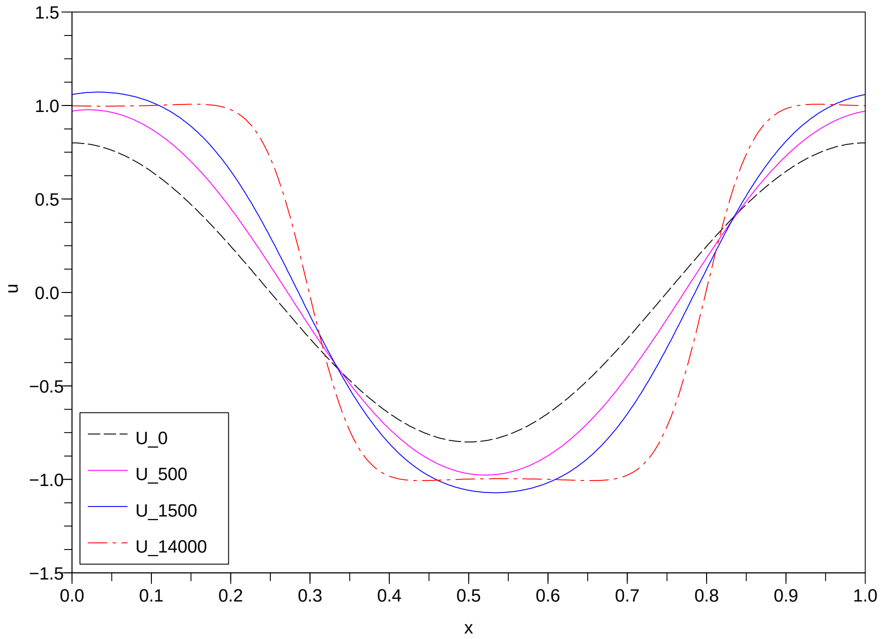


FIG. 6.1: $u_0(x) = 0.8\cos(2\pi x)$, $\alpha = 0.001$, $a = 1$, $b = 4$

Théorème 6.1 (Cherfils & P. [10]) *On suppose que f' est localement lipschitzienne sur $(-1, 1)$. Alors, pour tout $u_0 \in X$ tel que $\|u_0\|_\infty < 1$, l'équation* (6.4) *admet une unique solution maximale $u \in C^1([0, T^+); X)$ telle que $u(0) = u_0$ et $\|u(t)\|_\infty < 1$ pour tout $t \in [0, T^+)$. Si $T^+ < +\infty$, alors $\|u(t)\|_\infty \to 1$ lorsque $t \to T^+$.*

Une solution de (6.4) dans le sens ci-dessus sera appelée *solution classique*. Comme il s'agit d'une application du Théorème de Cauchy-Lipschitz, le résultat ci-dessus est également valable pour des temps négatifs, *i.e.* si l'on remplace $[0, T^+)$ par $(T^-, 0]$. Nous utiliserons cette remarque dans la démonstration du résultat principal.

Remarquons tout d'abord que certaines des solutions de (6.3) sont globales, *i.e.* définies pour tout $t \geq 0$. En effet, toutes les solutions stationnaires du problème d'Allen-Cahn (cf. Section 1.3), et en particulier les solutions constantes $u = 0$ et $u = \pm\beta$, sont des solutions stationnaires pour (6.3). Comme pour l'équation d'Allen-Cahn classique (1.3), ces deux solutions sont asymptotiquement stables :

Proposition 6.3 (Cherfils & P. [10]) *Si f' est défini par* (1.8)*, la solution constante β de* (6.4) *est asymptotiquement stable, i.e. il existe $\rho \in (0, 1-\beta)$ tel que si $u_0 \in X$ satisfait $\|u_0 - \beta\|_\infty < \rho$, alors la solution u de* (6.4) *de condition initiale u_0, donnée par le Théorème 6.1, est définie sur $[0, +\infty)$ et satisfait $u(t) \to \beta$ dans X lorsque $t \to +\infty$.*

Par invariance de (6.4) pour la symétrie $u \mapsto -u$, $-\beta$ est également asymptotiquement stable.

Démonstration. L'équation linéarisée de (6.4) en β est

$$v_t = -Cv, \quad t \geq 0, \text{ avec } C = -\alpha\Delta \circ L_{a,b}^{-1} + f''(\beta)L_{a,b}^{-1}.$$

Pour montrer que β est asymptotiquement stable, il suffit de montrer que le spectre de C dans X est contenu dans un demi-plan $\{z \in \mathbb{C} \ : \ Re(z) > \delta\}$, pour un $\delta > 0$. Un calcul simple montre que pour tout $k \in \mathbb{Z}$,

$C(\mathrm{e}^{i2k\pi x}) = \lambda_k\, \mathrm{e}^{i2k\pi x}$, avec

$$\lambda_k = \frac{[\alpha(2k\pi)^2 + \omega][1 + a(2k\pi)^2 - i2k\pi b]}{[1 + a(2k\pi)^2]^2 + [2k\pi b]^2} \quad (\omega = f''(\beta) > 0).$$

En d'autres termes, toute fonction $\mathrm{e}^{i2k\pi x}$ est un vecteur propre de C. On en déduit alors, par un raisonnement soigneux, que

$$\sigma_{L^2}(C) = \overline{\{\lambda_k,\ k \in \mathbb{Z}\}} = \sigma_X(C).$$

La première égalité vient du fait que $\{\mathrm{e}^{i2k\pi x}\}_{k\in\mathbb{Z}}$ forme une base hilbertienne de L^2, et la deuxième égalité s'en déduit par régularité elliptique. On remarque enfin que $Re(\lambda_k) > 0$ pour tout k, et que $Re(\lambda_k) \to \alpha/a > 0$ lorsque $k \to \pm\infty$, et ceci termine la preuve. □

Le résultat de *non-existence globale* d'une solution classique pour un potentiel logarithmique est le suivant :

Théorème 6.2 (Cherfils & P. [10]) *On suppose que f' est défini par* (1.8) *et on fixe $x_0 \in \mathbb{T}$. Alors, pour $\alpha > 0$ assez petit, il existe $T > 0$ et*

$$u \in C^1([-T, 0]; C^0(\mathbb{T})) \cap C^1([-T, 0); C^2(\mathbb{T}))$$

tels que $\|u(t)\|_\infty < 1$ pour tout $t \in [-T, 0)$, u satisfait (6.4) *sur $[-T, 0)$, $u(x_0, 0) = 1$ et $u_t(x_0, 0) > 0$. En particulier, u ne peut pas être prolongé pour des temps positifs comme une solution classique de* (6.4).

Démonstration. Comme (6.4) est invariante par la translation $x \mapsto x - x_0$, il suffit de prouver le résultat dans le cas $x_0 = 0$, et nous supposons donc que $x_0 = 0$. La preuve est divisée en plusieurs étapes. Dans une première étape, nou fixons $u_0 \in C^2(\mathbb{T})$ à valeurs dans $[\gamma, 1]$ satisfaisant

$$u_0(0) = 1,\ u_0(x) < 1 \text{ si } x \neq 0,\ f'(u_0) \in L^1(0, 1) \text{ et } (L_{a,b}^{-1} f'(u_0))(0) < 0.$$

Cela est possible car $L_{a,b}^{-1}$ est un opérateur intégral à noyau strictement positif : il existe une fonction $k \in C^0(\mathbb{T})$, $k > 0$ sur $\mathbb{T}$, telle que

$$L_{a,b}^{-1}(g)(0) = \int_{-1/2}^{1/2} g(y)k(y)\,\mathrm{d}y \quad \text{pour tout } g \in L^1(\mathbb{T}) \simeq L^1(0, 1).$$

On peut alors choisir par exemple

$$u_0(x) = \varphi(x/\delta), \quad x \in (-1/2, 1/2),$$

avec $\delta > 0$ assez petit, et $\varphi \in C^\infty(\mathbb{R})$, φ paire, φ strictement décroissante sur $[0, 1]$, telle que

$$\varphi(0) = 1, \quad \varphi'(0) = 0, \quad \varphi''(0) < 0 \quad \text{et } \varphi \equiv \gamma \text{ sur } [1, +\infty[.$$

Pour $\delta > 0$ petit, le signe de $[L_{a,b}^{-1} f'(\varphi(\cdot/\delta))](0)$ est celui de $f'(\gamma) < 0$. Ainsi, pour $\alpha > 0$ petit, on a bien (au moins formellement),

$$u_t(0, 0) = \alpha\Delta \circ L_{a,b}^{-1} u_0 - L_{a,b}^{-1} f'(u_0)](0) > 0. \tag{6.5}$$

Comme le résultat d'existence local ne s'applique pas directement pour la donnée u_0, on régularise u_0 en posant

$$u_0^\varepsilon(x) = \min(u_0(x), 1 - \varepsilon), \quad x \in \mathbb{T}.$$

Pour chaque u_0^ε, l'équation (6.4) admet une solution classique u^ε sur un intervalle $[-T^\varepsilon, 0]$, de donnée initiale u_0^ε. En passant soigneusement à la limite lorsque $\varepsilon \to 0$, on construit une solution $u \in C^1([-T, 0]; X)$ de (6.4) telle que $u(0) = u_0$. L'existence de la limite u est basée sur le Théorème d'Ascoli, sur une borne $T^\varepsilon \geq T > 0$ indépendante de ε, et sur des estimations a priori qui utilisent le fait que pour $\alpha > 0$ assez petit, on a (6.5). Un résultat de régularité basé sur la formule de Duhamel permet de montrer que u est en fait une solution classique (dans le sens défini par le Théorème 6.2). □

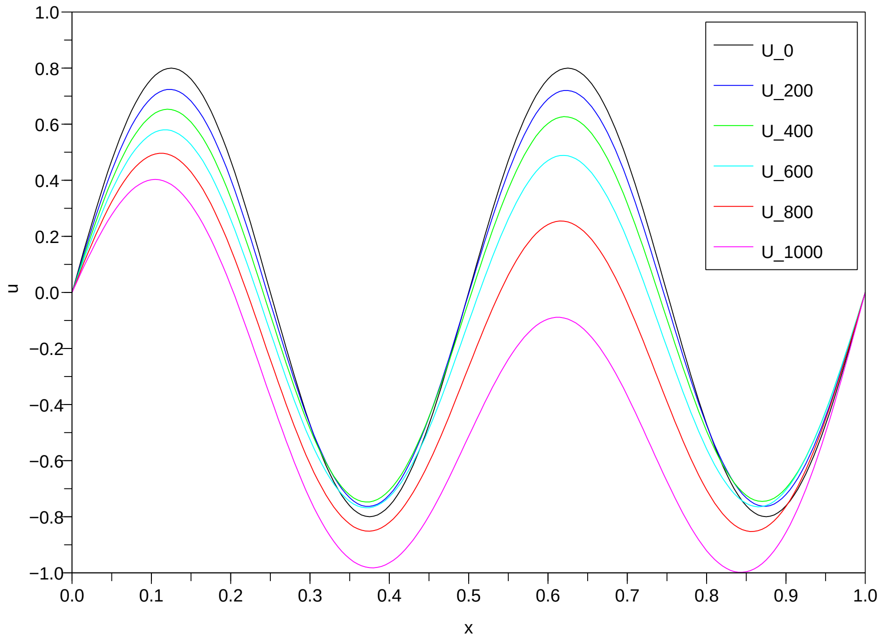


FIG. 6.2: « Explosion » en temps fini (CB Dirichlet)

Le contre-exemple ci-dessus peut facilement être adapté à des conditions au bord de type Dirichlet ou Neumann homogènes, ou encore des conditions de Robin homogènes telles que l'opérateur $I + b \cdot \nabla - a\Delta$ vérifie le principe du maximum. La Figure 6.2 illustre un cas d'explosion en temps fini (explosion de $f'(u)$ dans ce cas) pour des conditions au bord de Dirichlet homogène. La non-linéarité f' est définie par (1.8) avec $\theta = 1$ et $\theta_c = 2$, *i.e.*

$$f'(s) = \frac{1}{2}\ln(\frac{1+s}{1-s}) - 2s.$$

Le schéma utilisé pour la discrétisation de (6.3) est le même que pour la Figure 6.1 (avec des conditions au bord de Dirichlet), *i.e.* éléments finis P^1 en espace et schéma de Crank-Nicolson en temps. Les paramètres sont $\alpha = 0.01$, $a = 1$, $b = 4$ et la condition initiale est $u_0(x) = 0.8\sin(4\pi x)$. Le pas d'espace est $\Delta x = 0.005$ et le pas de temps, $\Delta t = 0.08$. La solution est représentée à des intervalles de temps réguliers correspondant aux itérations $n = 200k$, $k = 0, 1, \ldots 5$. La solution atteint la valeur -1 au point $x_0 \approx 0.845$ et au temps $t \approx 80.56$ ($n = 1007$) ; l'exécution du pas de temps suivant provoque une erreur. Ces valeurs pour l'explosion sont stables lorsque l'on raffine Δx et Δt.

6.3 Une piste pour définir une solution globale

Lorsque f' est défini par (1.8), on a

$$f'(s) = g(s) - \theta_c s \quad \text{avec } g(s) = \frac{\theta}{2}\ln\left(\frac{1+s}{1-s}\right) \qquad (s \in (-1,1)).$$

Comme $g'(s) = \theta(1-s^2)^{-1}$, la fonction g est strictement croissante sur $(-1, 1)$.

Si l'on suppose $b = 0$, l'équation (6.4) peut être récrite

$$u_t = -L_{a,0}^{-1} g(u) + (\alpha\Delta \circ L_{a,0}^{-1} + \theta_c L_{a,0}^{-1})u. \tag{6.6}$$

Soit A l'opérateur (non linéaire) défini par

$$D(A) = \{u \in H^1_{per}(0,1) \ : \ g(u) \in L^1(0,1)\} \text{ et pour tout } u \in D(A), Au = L^{-1}_{a,0} g(u).$$

Remarquons que $H^1_{per}(0,1) \subset C^0_{per}([0,1])$, et donc $L^1(0,1) \subset \left(H^1_{per}(0,1)\right)'$; en particulier, comme $L^{-1}_{a,0} = (I - a\Delta)^{-1}$ opère de $\left(H^1_{per}(0,1)\right)'$ dans $H^1_{per}(0,1)$, Au est bien défini et à valeurs dans $H^1_{per}(0,1)$.

Considérons l'espace $H = H^1_{per}(0,1)$ muni du produit scalaire

$$\langle u, v\rangle_H = \int_0^1 uv + au'v' \,\mathrm{d}x.$$

On remarque que si $u \in H$ est tel que $L_{a,0}u \in L^1(0,1)$, alors en intégrant par parties,

$$\langle u, v\rangle_H = \int_0^1 L_{a,0}uv \,\mathrm{d}x.$$

On en déduit que A est un opérateur (non linéaire) monotone sur H. En effet, pour tout $u, v \in D(A)$, on a

$$\langle Au - Av, u - v\rangle_H = \langle L^{-1}_{a,0}(g(u) - g(v)), u - v\rangle_H = \int_0^1 (g(u) - g(v))(u - v) \,\mathrm{d}x \geq 0.$$

L'équation (6.6) est de la forme

$$u_t = -Au + Lu \quad t \geq 0$$

où A est un opérateur monotone de H et L un opérateur linéaire borné de H dans H (que l'on peut considérer comme une perturbation lipschitzienne). La théorie des opérateurs maximaux monotones [37] donne une notion de solution globale à ce type d'équation. Il faut cependant s'assurer que A est *maximal monotone*, ce qui n'est pas le cas comme le suggèrent les problèmes rencontrés ci-dessus. On définit alors la fermeture $\overline{A}$ (au sens des graphes) de A dans H, et l'on peut montrer que $\overline{A}$ est maximal monotone. Cependant, $\overline{A}$ n'est plus univoque. On récrit alors (6.6) sous la forme

$$0 \in u_t + \overline{A}u - Lu,$$

et pour cette équation, il est possible d'énoncer un résultat d'existence globale et d'unicité pour toute donnée initiale $u(0) \in \overline{D(\overline{A})}$ (cf. [37, Remarque 3.14]). Le cas général ($b \neq 0$, dimension de domaine quelconque) est en cours d'étude.

Chapitre 7

Multiplicité de solutions stationnaires pour un modèle de champ de phase cristallin (article [16])

7.1 Modèle

Elder *et al.* [74, 75, 164] ont introduit un modèle de « champ de phase cristallin » pour décrire notamment des transitions de phase liquide/solide, de la croissance cristalline ou de la solidification. Le modèle se veut intermédiaire entre les modèles atomiques (dynamique moléculaire) et les modèles continus classiques (équation de Cahn-Hilliard), dans le sens où le champ qui est considéré (la densité moyennée en temps) est moyenné en temps, mais pas en espace : ainsi, le modèle de champ de phase cristallin permet de simuler des microstructures à l'échelle interatomique sur des temps très longs, et cette approche a connu un certain succès chez les physiciens spécialistes du champ de phase.

Le modèle le plus simple est basé sur l'énergie libre

$$\mathcal{E}(u) = \int_\Omega \frac{1}{2}\big(u^2 - 2\,|\nabla u|^2 + |\Delta u|^2\big) + F(u)\,\mathrm{d}x,$$

où u est le paramètre d'ordre (typiquement une densité), et F est un potentiel double-puits défini par

$$F(s) = \frac{s^4}{4} + r\frac{s^2}{2} \quad (s \in \mathbb{R})$$

avec $r < 0$ fixé ; Ω, un domaine borné de $\mathbb{R}^d$ ($d = 3$, typiquement, ou $d = 1$, 2 par simplification) est le volume occupé par le matériau.

Une telle forme de l'énergie libre permet (heuristiquement) d'obtenir des minimiseurs “périodiques”, car le terme

$$\int_\Omega u^2 - 2\,|\nabla u|^2 + |\Delta u|^2\,\mathrm{d}x = \int_\Omega u^2 + 2u\Delta u + |\Delta u|^2\,\mathrm{d}x \geq 0$$

peut être minimisé par un vecteur propre u de Δ (avec des conditions au bord de type Neumann, par exemple). Une évolution d'un état liquide avec une densité u (presque) constante vers un état solide avec une densité u périodique peut alors être décrite par une équation qui dissipe l'énergie tout en conservant la masse, par exemple

$$u_t = \Delta\frac{\delta\mathcal{E}}{\delta u},$$

ou encore

$$u_t = \Delta(u + 2\Delta u + \Delta^2 u + f(u)) \text{ dans } \Omega \times \mathbb{R}_+, \tag{7.1}$$

avec

$$f(s) = F'(s) = s^3 + rs \quad (s \in \mathbb{R}).$$

L'équation ainsi écrite, qui est un flot de gradient H^{-1} de l'énergie $\mathcal{E}$, est une version conservative de l'équation de Swift-Hohenberg [181], exactement comme l'équation de Cahn-Hilliard est une version conservative de l'équation d'Allen-Cahn. Rappelons que l'équation de Swift-Hohenberg, qui s'écrit

$$u_t = -\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial u},$$

a initialement été introduite dans l'étude de la convection de Rayleigh-Bénard (voir [65]). L'utilisation de modèles de type Swift-Hohenberg en science des matériaux semble plus récente (cf., par exemple, [47, 99], pour des modèles d'ordre élevé en espace).

Du point de vue mathématique, l'équation de Swift-Hohenberg a déjà été bien étudiée : des résultats sur l'existence globale et l'unicité de solution, sur la convergence vers une solution stationnaire [118], sur l'existence d'attracteurs [163, 190], et sur l'existence de solutions stationnaires [161] sont disponibles. Concernant la version conservative (7.1), outre l'étude dans [16], on peut mentionner l'analyse numérique faite dans [188], et les simulations numériques dans [55, 117].

Un des buts de l'étude dans [16] était de retrouver du point de vue mathématique la physique du problème, et de répondre à des questions telles que :

- Comment l'équation (7.1) peut-elle produire des solutions périodiques stables ?
- Quelle est la longueur d'onde de ces solutions périodiques ?
- Existe-t-il des équilibres stables qui peuvent s'interpréter comme la coexistence des phases liquide et solide ?

Pour cela, suivant une approche déjà classique pour l'équation de Swift-Hohenberg (cf. [161]), nous avons abordé plus précisément l'étude des solutions stationnaires de (7.1) par une méthode de bifurcation, en dimension d'espace $d = 1$.

7.2 Une étude de solutions stationnaires en dimension un d'espace

En dimension $d = 1$, pour $\Omega = (0, L)$ et des conditions au bord de type Neumann homogènes, les solutions stationnaires de (7.1) vérifient

$$\begin{aligned} u + 2u'' + u^{(4)} + f(u) &= cst \quad \text{dans} \quad (0, L), \\ u'(0) = u'(L) = u^{(3)}(0) = u^{(3)}(L) &= 0, \\ L^{-1} \int_0^L u \,\mathrm{d}x &= m, \end{aligned}$$

où m, la masse de u, est un réel fixé. Le changement de variable linéaire $x = L\tilde{x}$, $x \in (0, L)$, et $\tilde{x} \in (0, 1)$ donne le problème équivalent

$$u + 2L^{-2}u'' + L^{-4}u^{(4)} + f(u) = cst \quad \text{dans} \quad (0, 1), \tag{7.2}$$

$$u'(0) = u'(1) = u^{(3)}(0) = u^{(3)}(1) = 0, \tag{7.3}$$

$$\int_0^1 u \,\mathrm{d}x = m, \tag{7.4}$$

On remarque que la constante $\bar{u} = m$ est une solution triviale de ce problème. D'autre part, si l'on minimise $\mathcal{E}$ avec la contrainte de masse imposée, on obtient également une solution. Si la constante $\bar{u}$ est instable, on obtient ainsi deux solutions distinctes. Il est donc naturel d'étudier la stabilité de la solution constante en fonction des paramètres de l'équation, et plus généralement d'étudier les éventuelles bifurcations de cette solution constante.

Définissons l'espace des solutions fortes :

$$\dot{V}_0 = \{v \in H^4(0,1) \ : \ \int_0^1 v \, \mathrm{d}x = 0 \quad \text{et} \quad v'(0) = v'(1) = v^{(3)}(0) = v^{(3)}(1) = 0\}.$$

En posant $u = m + v$ et $\varepsilon = L^{-2}$, le problème (7.2)–(7.4) devient : trouver $v \in \dot{V}_0$ tel que

$$\mathcal{G}(v, \varepsilon) = 0 \quad \text{avec} \quad \mathcal{G}(v, \varepsilon) := \varepsilon^2 v^{(4)} + 2\varepsilon v^{(2)} + v + f(m+v) - \int_0^1 f(m+v) \, \mathrm{d}x.$$

Nous avons étudié le problème de la bifurcation par rapport au paramètre ε.

L'opérateur linéarisé en $v = 0$ s'écrit

$$\mathcal{L}(v, \varepsilon) = \partial_v \mathcal{G}(v, \varepsilon) = \varepsilon^2 v^{(4)} + 2\varepsilon v^{(2)} + v + f'(m)v, \quad v \in \dot{V}_0. \tag{7.5}$$

Cet opérateur admet une base orthogonale de vecteurs propres $\varphi_k : x \mapsto \cos(k\pi x)$, $k = 1, 2, \ldots$, pour les valeurs propres

$$(\varepsilon\lambda_k - 1)^2 + f'(m) \quad \text{avec } \lambda_k = (k\pi)^2. \tag{7.6}$$

Comme on le verra, il y a génériquement une bifurcation lorsque la valeur propre définie par (7.6) s'annule, car dans ce cas, l'opérateur linéarisé $\mathcal{L}(\cdot, \varepsilon)$ n'est pas inversible. En revanche, si $\mathcal{L}(\cdot, \varepsilon)$ est inversible, alors par le théorème des fonctions implicites, on peut paramétrer localement v en fonction de ε.

Si $f'(m) = 3m^2 + r > 0$ (et en particulier si $r > 0$), les valeurs propres de $\mathcal{L}(v, \varepsilon)$ sont strictement positives, et la solution constante $\bar{u} = m$ est toujours stable.

On suppose maintenant que $f'(m) = 3m^2 + r \le 0$, et l'on note

$$\varepsilon_k = \frac{1 + \sqrt{-f'(m)}}{\lambda_k}, \quad \bar{\varepsilon}_k = \frac{1 - \sqrt{-f'(m)}}{\lambda_k},$$

les racines de (7.6). On remarque que si $f'(m) \in (-1, 0)$, alors $0 < \bar{\varepsilon}_k < \varepsilon_k$; de plus,

$$1 \le k_1 < k_2 \Rightarrow \varepsilon_{k_1} > \varepsilon_{k_2} \text{ et } \bar{\varepsilon}_{k_1} > \bar{\varepsilon}_{k_2}.$$

Si $f'(m) \le -1$, alors $\bar{\varepsilon}_k \le 0 < \varepsilon_k$ et $1 \le k_1 < k_2$ implique $\varepsilon_{k_1} > \varepsilon_{k_2}$.

Par conséquent, lorsque $f'(m) \le -1$, on a $\bar{\varepsilon}_k \neq \varepsilon_{k'}$ pour tout $k, k' \ge 1$, et

$$Ker \mathcal{L}_\varepsilon = Vect\{\varphi_k\} \text{ si } \varepsilon = \varepsilon_k \text{ ou } \bar{\varepsilon}_k. \tag{7.7}$$

Lorsque $f'(m) \in (-1, 0)$, l'égalité $\bar{\varepsilon}_k = \varepsilon_{k'}$ se produit pour une infinité dénombrable de valeurs $f'(m) \in (-1, 0)$ telles que

$$\frac{1 - \sqrt{-f'(m)}}{1 + \sqrt{-f'(m)}} = \left(\frac{k'}{k}\right)^2, \text{ pour } 1 \le k' < k.$$

Ces valeurs forment un ensemble dense dans $(0, 1)$, mais dans le cas générique (*i.e.* en dehors de ces valeurs), on a $\bar{\varepsilon}_k \neq \varepsilon_{k'}$ pour tout $k, k' \ge 1$, et la relation (7.7) est encore vraie.

La stabilité de la solution constante $\bar{u} = m$ se déduit aisément des considérations ci-dessus :

Proposition 7.1 (P. & Rougirel [16]) *On suppose que $f'(m) < 0$ et que $\varepsilon \neq \varepsilon_k$, $\bar{\varepsilon}_k$ pour tout $1 \le k \le k'$. Alors la solution constante de* (7.2)–(7.4) *est instable si et seulement si*

$$\varepsilon \in (0, \varepsilon_{k_+}) \dot{\cup} (\bar{\varepsilon}_{k_+ - 1}, \varepsilon_{k_+ - 1}) \dot{\cup} \ldots \dot{\cup} (\bar{\varepsilon}_1, \varepsilon_1),$$

où k_+ est le plus grand entier ≥ 2 tel que $\varepsilon_k < \bar{\varepsilon}_{k-1}$ ($k_+ = 1$, si aucun tel entier n'existe).

En particulier, pour $\varepsilon > 0$ petit, la solution $\bar{u} = m$ est instable.

Théorème 7.1 (P. & Rougirel [16]) *Soit $\varepsilon_\star > 0$. On suppose que $f'(m) < 0$, et que $\varepsilon_\star = \varepsilon_{k_\star}$ ou $\bar{\varepsilon}_{k_\star}$ pour un $k_\star \geq 1$, avec $ker\mathcal{L}(\cdot, \varepsilon_\star) = Vect\{\varphi_{k_\star}\}$. Alors, il existe localement une unique branche de solutions non triviales de $\mathcal{G}(v, \varepsilon) = 0$ passant par $(0, \varepsilon_\star)$. De plus, si*

$$(\varepsilon_\star \lambda_{2k_\star} - 1)^2 + f'(m) \neq \frac{f''(m)}{f'''(m)},$$

alors ces solutions satisfont

$$v = \pm \left(\frac{2}{\ddot{\varepsilon}(0)} (\varepsilon - \varepsilon_\star) \right)^{1/2} \varphi_{k_\star} + o\left(|\varepsilon - \varepsilon_\star|^{1/2} \right) \quad \textit{dans} \quad \dot{V}_0, \tag{7.8}$$

où

$$\ddot{\varepsilon}(0) := \frac{\varepsilon_\star / 8}{\varepsilon_\star \lambda_{k_\star} - f'(m) - 1} \left(\frac{f''(m)^2}{(\varepsilon_\star \lambda_{2k_\star} - 1)^2 + f'(m)} - f'''(m) \right).$$

Remarque 7.1 La relation (7.8) implique que $(\varepsilon - \varepsilon_\star)/\ddot{\varepsilon}(0) \geq 0$, et donne le sens de la concavité de la branche au voisinage de $(0, \varepsilon_\star)$.

Remarque 7.2 Dans [16], d'autres résultats théoriques ont été montré :
- principe d'échange de stabilité ;
- $2/k_\star$ -périodicité des solutions au voisinage du point de bifurcation ;
- étude du cas critique $f'(m) = 0$;
- étude du cas non générique (avec un noyau de dimension deux), par la méthode du polygone de Newton.

7.3 Simulations numériques

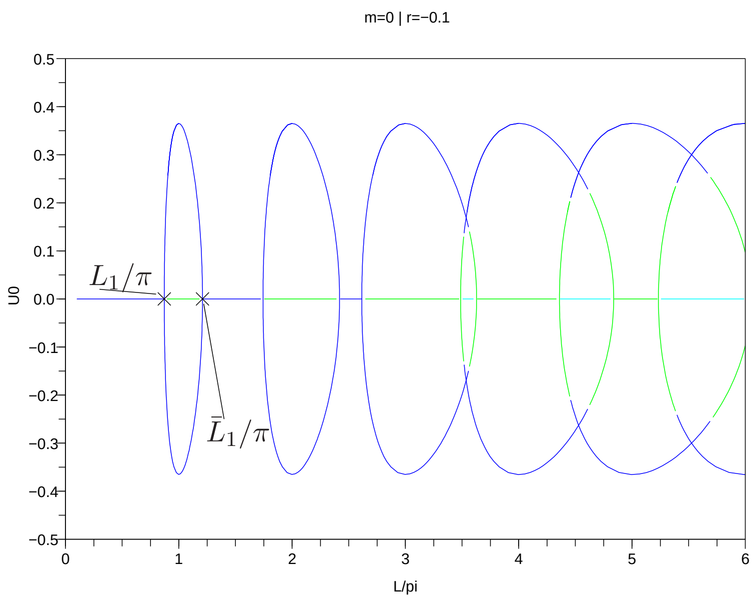


FIG. 7.1: Cas $m = 0$, $r = -0.1$

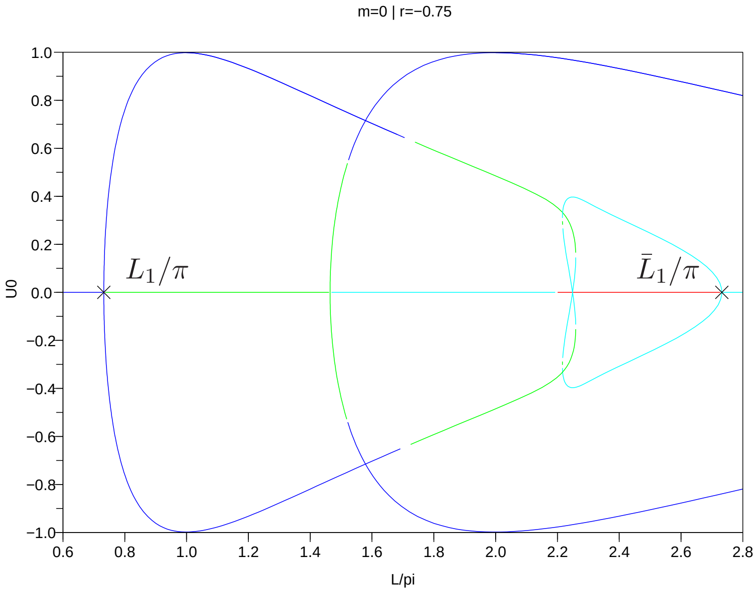


FIG. 7.2: 1ère et 2ème courbe pour $m = 0$, $r = -0.75$

Les Figures 7.1 à 7.5 montrent le résultat de simulations numériques avec le logiciel `Scilab`. Le problème (7.2)–(7.4), d'ordre 4 en espace, a été discrétisé par une méthode d'éléments finis P^1 avec « splitting », suivant les méthodes bien connue pour l'équation de Cahn-Hilliard (voir Section 3.3.2). L'algorithme utilisé pour suivre une branche est un algorithme standard de prédicteur-correcteur avec pas fixe (cf. [139, Algorithm 2.3.3]). Le point de départ sur chaque courbe est trouvé par un algorithme de Newton initialisé avec un profil en φ_k et en testant plusieurs amplitudes. Pour chaque figure de bifurcation, l'axe des abscisses représente L/π où $L = \varepsilon^{-1/2}$ et $u_\varepsilon(0)$, où u_ε vérifie $\mathcal{G}(u_\varepsilon, \varepsilon) = 0$. La couleur bleue est associée aux solutions stables ; plus généralement, chaque couleur représente la dimension de la variété instable de la solution pour le problème d'évolution (7.1).

Dans la Figure 7.1, pour $m = 0$ et $r = -0.1$, avec L variant de 0^+ à 6π, la ligne horizontale correspond à la solution triviale $u \equiv 0$. La première courbe sur la gauche, qui intersecte cette ligne horizontale, correspond à une branche de bifurcation initialisée avec un profil en φ_1. D'après le Théorème 7.1, l'intersection se produit aux valeurs

$$L_1 = \varepsilon_1^{-1/2} \approx 0.87\pi \text{ et } \bar{L}_1 = \bar{\varepsilon}_1^{-1/2} \approx 1.21\pi.$$

Les valeurs numériques de L_1 et $\bar{L}_1$ (qui peuvent être trouvées par un zoom sur le graphique) sont en excellent accord avec ces valeurs. De même, la $k$ème courbe sur la Figure 7.1 (en partant de la gauche) est une branche de bifurcation initialisée par un profil en φ_k ; elle intersecte la ligne horizontale en L_k et $\bar{L}_k > L_k$. On remarque que la stabilité de la solution triviale est comme annoncée dans la Proposition 7.1, avec $k_+ = 3$ et $L_3 \approx 2.61\pi$.

La Figure 7.2 montre les deux premières courbes de bifurcation dans le cas $m = 0$ et $r = -0.75$. La première courbe est plus complexe que dans la Figure 7.1 car semble se recouper entre L_1 et $\bar{L}_1$, mais seule la valeur de $u(0)$ en ces points vaut 0 (la solution u elle-même n'est pas constante, mais oscillante).

La Figure 7.3 illustre un cas où la solution stable n'appartient plus à une branche de bifurcation de la constante. Cette solution stable, trouvée indépendamment, correspond à un profil oscillant d'amplitude croissante, représenté dans la Figure 7.4 pour $L = 7\pi$. Si l'on prolonge la branche de cette solution stable, ces caractères s'accentuent et on trouve pour $L \approx 20\pi$ (Fig. 7.5) une solution stable présentant une partie presque constante et une partie oscillante d'amplitude presque constante. Une telle solution peut être interpré-

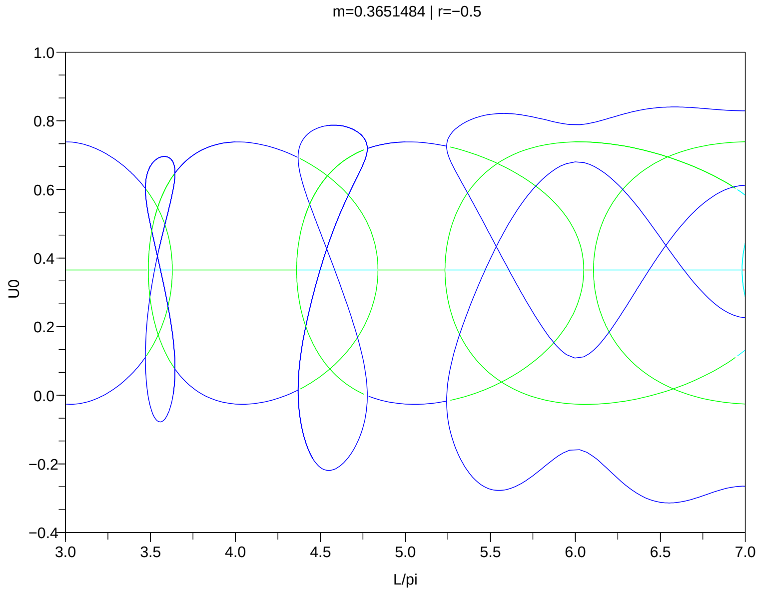


FIG. 7.3: Cas $m = \sqrt{0.4/3}$, $r = -0.5$ (détail, avec la solution stable)

tée comme une coexistence de phases liquide/solide, et ce résultat numérique confirme les prédictions d'Elder et Grant [74].

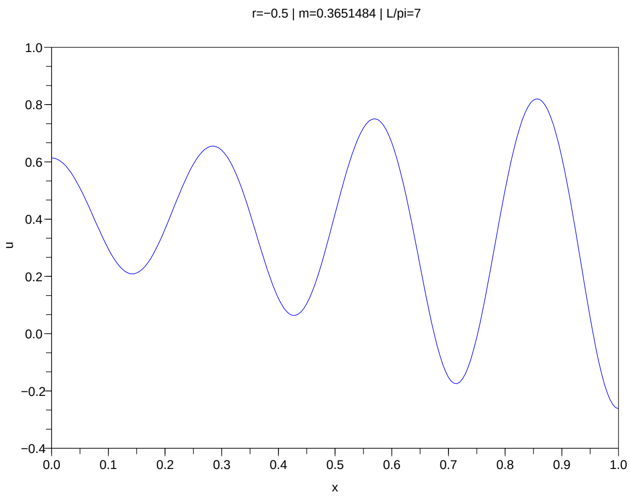


FIG. 7.4: Un minimiseur de $\mathcal{E}$ pour $m = \sqrt{0.4/3}$, $r = -0.5$ et $L = 7\pi$

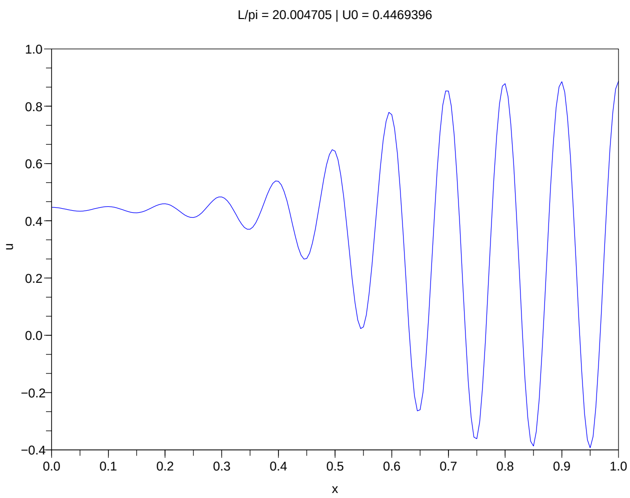


FIG. 7.5: Un minimiseur de $\mathcal{E}$ pour $m = \sqrt{0.4/3}$, $r = -0.5$ et $L \approx 20\pi$

Chapitre 8

Applications harmoniques du disque à valeurs dans la sphère (articles [5, 6, 8]

8.1 Brisure de symétrie pour le problème de Dirichlet (articles [6, 8])

Notons $D = \{(x,y) \in \mathbb{R}^2 \ : \ x^2+y^2<1\}$ le disque unité, de frontière $\partial D = S^1$, et $S^2 = \{v = (v_1,v_2,v_3) \in \mathbb{R}^3 \ : \ v_1^2+v_2^2+v_3^2=1\}$ la sphère unité de $\mathbb{R}^3$. Le problème de Dirichlet pour les applications harmoniques de D dans S^2 s'énonce ainsi : pour une donnée au bord $\gamma : \partial D \to S^2$, trouver $u : \overline{D} \to S^2$ solution de

$$-\Delta u = u\,|\nabla u|^2 \quad \text{dans } D, \tag{8.1}$$

$$u = \gamma \quad \text{sur } \partial D. \tag{8.2}$$

En considérant une suite minimisante de l'énergie de Dirichlet

$$\mathcal{E}(u) = \frac{1}{2}\int_D |\nabla u|^2 \,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y \tag{8.3}$$

dans l'ensemble $\mathcal{E}_\gamma$ des fonctions de $H^1(D,S^2)$ satisfaisant la donnée au bord, c-à-d

$$\mathcal{E}_\gamma = \left\{u \in H^1(D,S^2) \ : \ u_{|\partial D} = \gamma \text{ au sens des traces}\right\}, \tag{8.4}$$

on montre facilement que le problème (8.1)–(8.2) admet toujours au moins une solution dès que $\mathcal{E}_\gamma$ n'est pas vide (ce qui est le cas si $\gamma \in C^1(S^1,S^2)$, par exemple). Rappelons que $H^1(D,S^2)$, défini par (12), désigne l'ensemble des applications $u : \overline{D} \to S^2$ d'énergie finie ; d'après un résultat de régularité de Hélein [113], toute solution $u \in H^1(D,S^2)$ du problème (8.1)–(8.2) est de classe C^∞ dans Ω, avec la régularité maximale possible en fonction de la régularité de la donnée au bord [168].

Un résultat frappant de Lemaire [132] montre que si γ est constant, l'application constante est l'unique solution du problème (8.1)–(8.2). Si γ n'est pas constant et si $\mathcal{E}_\gamma$ n'est pas vide, Brezis et Coron [40] (voir également [122]) ont montré que le problème admet au moins deux solutions distinctes, chacune étant un minimiseur de $\mathcal{E}$ dans sa classe d'homotopie. Rappelons que les classes d'homotopie $\mathcal{E}_{\gamma,k}$ définies par

$$\mathcal{E}_{\gamma,k} = \{u \in \mathcal{E}_\gamma, Q(\underline{u}) - Q(u) = k\} \quad (k \in \mathbb{Z}) \tag{8.5}$$

sont les composantes connexes de $\mathcal{E}_\gamma$ pour la distance induite par la norme $H^1(D,\mathbb{R}^3)$; ici, la fonctionnelle Q est donnée par

$$Q(u) = \frac{1}{4\pi}\int_{D^2} u\cdot(u_x \wedge u_y)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y, \tag{8.6}$$

$\underline{u}$ désigne un élément fixé comme référence dans $\mathcal{E}_\gamma$ (un minimiseur global, typiquement), et l'entier relatif k est le degré de u (relativement à $\underline{u}$). La difficulté principale, surmontée par Brezis, Coron et Jost, est que le degré n'est en général pas conservé pour une suite de $H^1(D, S^2)$ convergeant faiblement dans $H^1(D, \mathbb{R}^3)$.

Lorsque γ est défini par

$$\gamma(x, y) = (Rx, Ry, \sqrt{1 - R^2}), \quad x^2 + y^2 = 1, \tag{8.7}$$

avec $R \in (0, 1]$, la question de savoir s'il existe d'autres solutions au problème (8.1)–(8.2) que les deux solutions de Brezis et Coron est encore ouverte aujourd'hui. L'enjeu est soit de trouver une solution non minimisante, soit de prouver la symétrie de toute solution au problème. Cette question d'unicité, qui a grandement motivé mon étude du problème, apparaît déjà dans l'article [25] ; elle est parfois appelée « problème de Brezis », car H. Brezis l'a mis en évidence et reformulée, notamment lors d'un colloque en son honneur à Paris en juin 2004, ainsi que dans [39].

Même si le problème de Brezis est encore ouvert, la question de l'existence d'un minimiseur de $\mathcal{E}$ dans une classe d'homotopie donnée a été résolue dans [167, 129] par des méthodes d'analyse complexe, en terme de l'existence d'un prolongement holomorphe et/ou anti-holomorphe de γ à $\overline{D}$. En appliquant une théorie de Morse pour les applications harmoniques, Qing [166] a également montré que pour certaines données au bord, il existait des solutions distinctes du problème (8.1)–(8.2) appartenant à une même classe d'homotopie.

Dans mes deux articles [6, 8], je me suis intéressé aux symétries du problème, qui sont très riches car l'énergie de Dirichlet (8.3) est invariante par toute transformation conforme du domaine D, d'une part, et par toute isométrie de $\mathbb{R}^3$, d'autre part. A ce titre, le problème (8.1)–(8.2) peut être rapproché des problèmes elliptiques avec exposant critique (cf., par exemple, [38]). L'étude des symétries du problème n'avait pas encore été abordée de manière systématique, et s'est révélée très fructueuse.

Pour préciser les choses, nous identifions dans la suite D à $\{z \in \mathbb{C} \ : \ |z| < 1\}$ et nous notons $\mathrm{Aut}(D)$ le groupe des difféomorphismes holomorphes ou anti-holomorphes de D dans D. Les groupe des isométries vectorielles de $\mathbb{R}^3$ est noté $O(3)$. L'invariance de $\mathcal{E}$ sous l'action de $\mathrm{Aut}(D)$ et de $O(3)$ signifie que pour tout $u \in H^1(D, S^2)$, $g \in \mathrm{Aut}(D)$ et $T \in O(3)$, on a

$$\mathcal{E}(T \circ u \circ g^{-1}) = \mathcal{E}(u).$$

On peut d'ailleurs montrer que le choix de $\mathrm{Aut}(D)$ et $O(3)$ comme groupes de difféomorphismes laissant $\mathcal{E}$ invariant est optimal [6]. Comme, d'autre part, $\left|T \circ u \circ g^{-1}\right| = |u| = 1$ p.p. dans D si $u \in H^1(D, S^2)$ (où $|\cdot|$ désigne la norme euclidienne de $\mathbb{R}^3$), le groupe $\mathrm{Aut}(D) \times O(3)$ agit (à gauche) sur l'espace $H^1(D, S^2)$ par

$$\begin{array}{ccccc} (\mathrm{Aut}(D) \times O(3)) & \times & H^1(D, S^2) & \to & H^1(D, S^2) \\ (g, T), & & u & \mapsto & T \circ u \circ g^{-1}. \end{array}$$

L'invariance de $\mathcal{E}$ implique aussi (en utilisant la définition (13)) que si u est faiblement harmonique, alors $T \circ u \circ g^{-1}$ est faiblement harmonique. Par une représentation explicite, il est facile de voir que toute application $g \in \mathrm{Aut}(D)$ admet un prolongement analytique (et plus précisément, holomorphe ou anti-holomorphe) à un voisinage de $\overline{D}$, de sorte que le groupe $\mathrm{Aut}(D) \times O(3)$ agit également sur l'ensemble des données au bord. Il est utile ici de préciser dans quel espace nous choisissons une donnée au bord.

Si $\mathcal{E}_\gamma$ n'est pas vide, alors, par densité des fonctions $C^1(\overline{D}, S^2)$ dans l'espace métrique $H^1(D, S^2)$ (pour la norme $H^1(D, \mathbb{R}^3)$), γ appartient à

$$H^{1/2}(S^1, S^2) = \left\{ \gamma \in H^{1/2}(S^1, \mathbb{R}^3) \ : \ |\gamma| = 1 \text{ p.p. dans } S^1 \right\},$$

où l'espace de Sobolev fractionnaire $H^{1/2}(S^1, \mathbb{R}^3)$ est l'ensemble des traces sur ∂D des applications de $H^1(D, \mathbb{R}^3)$, défini par

$$H^{1/2}(S^1, \mathbb{R}^3) = \{\gamma \in L^2(S^1, \mathbb{R}^3) : \ |\gamma|_{H^{1/2}(S^1, \mathbb{R}^3)} < \infty\},$$

et où la semi-norme est définie par

$$|\gamma|_{H^{1/2}(S^1,\mathbb{R}^3)} = \left(\int_{S^1} \int_{S^1} \frac{|\gamma(x) - \gamma(y)|^2}{|x-y|^2} \,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y \right)^{1/2} . \tag{8.8}$$

Plusieurs choix équivalents sont possibles dans la définition (8.8), mais avec ce choix particulier, la semi-norme $H^{1/2}$ est invariante sous l'action de $\mathrm{Aut}(D) \times O(3)$, et beaucoup de calculs s'en trouvent simplifiés [8]. Réciproquement, si $\gamma \in H^{1/2}(S^1, S^2)$, on sait par [28] que $\mathcal{E}_\gamma$ n'est pas vide. Dans la suite on supposera donc, sauf mention explicite du contraire, que $\gamma \in H^{1/2}(S^1, S^2)$.

Pour l'étude du problème (8.1)–(8.2), une première question naturelle, et que j'ai abordée essentiellement dans [8], est de classifier les données au bord γ pour cette action de groupe (puisque résoudre le problème pour une donnée au bord γ revient à le résoudre pour toutes les données au bord appartenant à l'orbite de γ !). Une telle classification des données au bord est une question difficile en général, mais je suis tout de même parvenu dans [8] à classifier les données au bord dont le stabilisateur est un *groupe continu*, le stabilisateur d'une donnée au bord γ étant défini par

$$\mathcal{S}[\gamma] = \left\{ (g, T) \in \mathrm{Aut}(D) \times O(3) : \; T \circ \gamma \circ g^{-1} = \gamma \text{ p.p. dans } S^1 \right\}$$

(dans cette notation, on utilise l'analycité pour identifier $g \in \mathrm{Aut}(D)$ à sa restriction à ∂D). Dans le cas général, j'ai classifié *tous les stabilisateurs possibles* de données au bord, ce qui constitue une étape intermédiaire vers la classification des données au bord. La classification obtenue, qui est valable également pour des données au bord continues (l'hypothèse $\gamma \in H^{1/2}(S^1, S^2)$ rajoutant des difficultés techniques), est basée sur des résultat connus de classification des sous-groupes de $\mathrm{Aut}(D)$ et de $O(3)$.

Dans la suite, nous notons $\mathrm{Aut}^+(D)$ ($O^+(3)$, respectivement) les difféomorphismes de $\mathrm{Aut}(D)$ ($O(3)$, respectivement) préservant l'orientation ; nous introduisons les données au bord particulières

$$\gamma_{a,n} : S^1 \ni z \mapsto \Pi_N^{-1}(az^n) \in S^2 \quad (a \in [1, +\infty), \; n \in \mathbb{N}^\star),$$

où $\Pi_N : S^2 \to \hat{\mathbb{C}}$ est la projection stéréographique de pôle nord, qui identifie S^2 à la sphère de Riemann $\hat{\mathbb{C}} = \mathbb{C} \cup \{\infty\}$, et où $S^1 \simeq \{z \in \mathbb{C} \; : \; |z| = 1\}$. Le premier résultat de classification s'énonce :

Théorème 8.1 (P. [8]) *Si $\gamma \in H^{1/2}(S^1, S^2)$ est une donnée au bord non constante dont le stabilisateur $\mathcal{S}[\gamma]$ est de cardinal infini, alors il existe $(g, T) \in \mathrm{Aut}^+(D) \times O^+(3)$ tel que $T \circ \gamma \circ g^{-1} = \gamma_{a,n}$ p.p. dans S^1, pour un unique $a \geq 1$ et un unique $n \in \mathbb{N}^\star$.*

Ce résultat est également valable si $\gamma \in C^0(S^1, S^2)$ (mais dans ce cas, l'existence d'un prolongement harmonique de γ n'est plus évidente !).

Les données au bord $\gamma_{a,n}$ constituent donc des exemples très intéressants pour la compréhension du problème. Elles apparaissaient d'ailleurs dans l'article de Soyeur à titre d'exemple [178]. L'observation (basée sur des simulations numériques) d'un phénomène de brisure de symétrie pour ces solutions m'a amené à étudier d'une manière systématique les symétries du problème, analysées dans [6, 8].

Si l'on s'intéresse au stabilisateur $\mathcal{S}[\gamma_{a,n}]$ de $\gamma_{a,n}$, on remarque que pour tout angle $\theta \in \mathbb{R}/(2\pi\mathbb{Z})$, et pour tout $z \in S^1$, on a $a(\mathrm{e}^{i\theta} z)^n = \mathrm{e}^{in\theta}(az^n)$, ce qui signifie que $\mathcal{S}[\gamma_{a,n}]$ contient le groupe continu de rotations

$$G_n = \{(R_\theta, R_{n\theta}) \; : \theta \in \mathbb{R}/2\pi\mathbb{Z}\} \,,$$

où R_α désigne ici la rotation vectorielle de $\mathbb{R}^3$ d'angle α par rapport à l'axe vertical (orienté vers les z positifs), ou bien sa restriction dans le plan horizontal $\mathbb{R}^2 \simeq \mathbb{R}^2 \times \{0\}$. Pour $\gamma = \gamma_{a,n}$, deux solutions distinctes de (8.1)–(8.2) sont données explicitement par

$$\underline{u}_{a,n} : z \mapsto \Pi_N^{-1}(az^n) \quad \text{et} \quad \overline{u}_{a,n} : z \mapsto \Pi_N^{-1}(a\bar{z}^{-n}),$$

et le stabilisateur de ces deux solutions contient également le groupe G_n. Le stabilisateur d'une application $u : \overline{D} \to S^2$ est défini ici par

$$\mathcal{S}[u] = \left\{(g,T) \in \mathrm{Aut}(D) \times O(3) :\ T \circ u \circ g^{-1} = u \text{ p.p. dans } D\right\}.$$

En réduisant l'équation des applications harmoniques à un système différentiel ordinaire grâce à cette symétrie, j'ai établi dans [8] :

Théorème 8.2 (P. [8]) *Si $\gamma = \gamma_{a,n}$ pour un $a \in [1,+\infty)$ et un $n \in \mathbb{N}^\star$, et si u est une solution de* (8.1)–(8.2) *distincte de $\underline{u}_{a,n}$ et $\overline{u}_{a,n}$, alors u a un stabilisateur fini. En particulier, l'existence d'un tel u implique l'existence d'un continuum de solutions au problème pour la même donnée au bord $\gamma_{a,n}$ et dans la même classe d'homotopie, par action du groupe G_n sur u.*

Ce résultat s'applique en particulier lorsque $n = 1$, valeur pour laquelle on retrouve la donnée au bord (8.7) du problème de Brezis (pour un paramètre $a = a(R) \geq 1$) ; les deux solutions explicites $\underline{u}_{a,n}$ et $\overline{u}_{a,n}$ sont actuellement les seules connues. Si $n \geq 2$, les résultats existant assurent l'existence d'un minimiseur de $\mathcal{E}$ dans chacune des $n-1$ classes d'homotopie intermédiaires entre les classes d'homotopies de ces deux solutions, comme l'illustre la simulation numérique de la Figure 8.1 dans le cas $n = 2$.

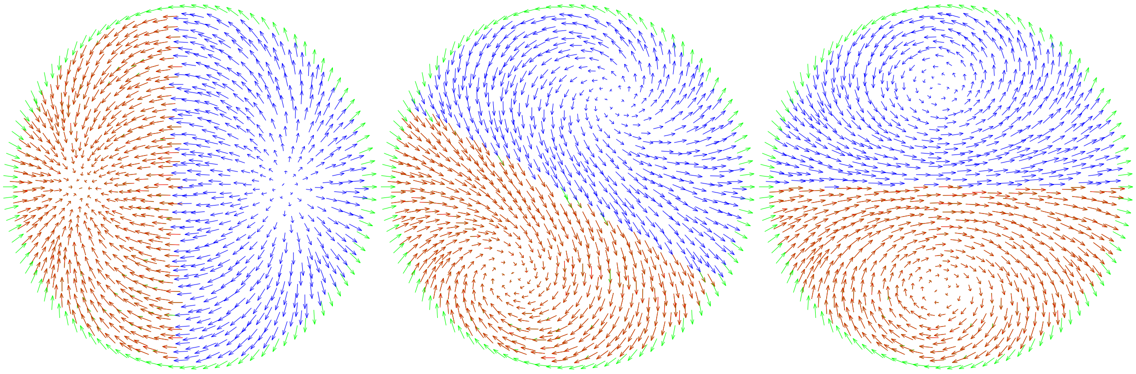


FIG. 8.1: Trois minimiseurs dans $\mathcal{E}_{\gamma,k}$ pour $\underline{u}(z) = \bar{z}^{-2}$, $k = 1$

La classification complète des stabilisateurs de cardinal fini est un peu fastidieuse, mais elle s'énonce simplement si l'on se restreint à $\mathrm{Aut}^+(D) \times O^+(3)$:

Théorème 8.3 (P. [8]) *Soit $\gamma \in H^{1/2}(S^1, S^2)$. Si le stabilisateur $\mathcal{S}[\gamma]$ de γ est de cardinal fini, alors son intersection avec $\mathrm{Aut}^+(D) \times O^+(3)$ est conjugué dans $\mathrm{Aut}^+(D) \times O^+(3)$ à un groupe de rotation fini engendré par $(R_{2\pi/p}, R^n_{2\pi/p})$, pour un unique $p \in \mathbb{N}^\star$ et un unique $n \in (\mathbb{Z}/p\mathbb{Z})/\{-1,+1\}$.*

Ce résultat est également valable si $\gamma \in C^0(S^1, S^2)$. On retrouve formellement le groupe G_n en faisant tendre p vers l'infini (le cas $n = 0$ étant un peu particulier).

On peut remarquer que les résultats de classification des Théorèmes 8.1 et 8.3 ne portent que sur les données au bord et sont finalement indépendants de l'existence d'un prolongement harmonique de γ, *i.e.* une solution u du problème (8.1)–(8.2). En revanche, le Théorème 8.2 montre qu'il n'existe pas en général dans chaque classe d'homotopie un prolongement harmonique présentant les mêmes symétries que la donnée au bord : il s'agit d'un phénomène de *brisure de symétrie*. Pour des conditions au bord dont le stabilisateur est fini, il existe en général des *obstructions topologiques* qui empêchent un prolongement harmonique d'avoir les mêmes symétries que la donnée au bord, comme je l'ai montré dans [6]. Pour les symétries de rotation discrètes introduites ci-dessus, cette obstruction s'énonce en fonction du degré de u et de l'application $\underline{u}$ choisie comme référence pour compter le degré (cf. (8.5)). Dans le cas $n = 0$, on a :

Théorème 8.4 (P. [6]) *On suppose que* $\underline{u} \in C^1(\overline{D}, S^2)$ *est invariant sous l'action de* $(R_{2\pi/p}, I)$ *pour un entier* $p \geq 2$*, et l'on pose* $\gamma = \underline{u}_{|\partial D}$*. Si* $u \in C^0(\overline{D}, S^2) \cap \mathcal{E}_\gamma$ *est également invariant par* $(R_{2\pi/p}, I)$*, alors*

$$Q(\underline{u}) - Q(u) = 0 \pmod{p}.$$

En particulier, si $k \neq 0 \pmod{p}$*, alors tout prolongement harmonique de* γ *dans* $\mathcal{E}_{\gamma,k}$ *fournit au moins* $p/\operatorname{pgcd}(k,p) \geq 2$ *prolongements harmoniques distincts dans* $\mathcal{E}_{\gamma,k}$*, par action de* $(R_{2\pi/p}, I)$*.*

Ici, I désigne l'identité de $\mathbb{R}^3$ et $\operatorname{pgcd}(k,p)$ est le plus grand commun diviseur de k et p. Ce résultat, couplé avec les résultats de Qing [167] et Kuwert [129] sur le problème, permet en particulier pour toute donnée au bord non analytique et $(R_{2\pi/p}, I)$-invariante d'obtenir la multiplicité de solutions au problème appartenant à une même classe d'homotopie, pour une infinité de classes d'homotopie. Dans le cas $n \neq 0 \pmod{p}$, on a

Théorème 8.5 (P. [6]) *On suppose que* $\underline{u} \in C^1(\overline{D}, S^2)$ *est invariant sous l'action de* $(R_{2\pi/p}, R^n_{2\pi/p})$ *pour un entier* $p \geq 2$ *et un entier* $n \neq 0 \pmod{p}$ *et que* $\underline{u}(0) = (0,0,1)$*, et l'on pose* $\gamma = \underline{u}_{|\partial D}$*. Si* $u \in C^0(\overline{D}, S^2) \cap \mathcal{E}_\gamma$ *est également invariant par* $(R_{2\pi/p}, R^n_{2\pi/p})$*, alors*

$$Q(\underline{u}) - Q(u) = 0 \text{ ou } n \pmod{p}.$$

En particulier, si $k \neq 0, n \pmod{p}$*, tout prolongement harmonique de* γ *dans* $\mathcal{E}_{\gamma,k}$ *fournit au moins*

$$\min\{p/\operatorname{pgcd}(k,p), p/\operatorname{pgcd}(k-n,p)\} \geq 2$$

prolongement harmoniques distincts dans $\mathcal{E}_{\gamma,k}$*, par action de* $(R_{2\pi/p}, R^n_{2\pi/p})$*.*

La contrainte $\underline{u}(0) = (0,0,1)$ est simplement une convention, car l'hypothèse d'invariance implique que $\underline{u}(0)$ vaut soit le pôle nord, soit le pôle sud. Dans ce dernier cas, il faut changer n en $-n$ dans les conclusions du Théorème ci-dessus. Ce résultat donne également des informations sur la structure du groupe de symétrie de tout prolongement harmonique d'une donnée au bord $\gamma_{a,n}$ dans une classe d'homotopie $k \neq 0 \pmod{n}$.

Les résultats de multiplicité ci-dessus étant obtenus par brisure de symétrie, il est naturel de se demander si, dans une classe d'homotopie donnée, il existe au plus une solution du problème (8.1)–(8.2) modulo les symétries admissibles. Cela n'est pas vrai en général. En utilisant le résultat de multiplicité de Qing [166] et la classification des stabilisateurs, on montre :

Proposition 8.1 (P. [8]) *Il existe une donnée au bord* $\gamma \in C^2(S^1, S^2)$ *dont le stabilisateur* $\mathcal{S}[\gamma]$ *est trivial et qui admet au moins deux prolongements harmoniques distincts appartenant à une même classe d'homotopie.*

8.2 Étude numérique du flot des applications harmoniques (article [5])

8.2.1 Problématique

Dans [5], nous avons calculé numériquement des solutions $u : D \times [0, +\infty) \to S^2$ du flot des applications harmoniques

$$u_t = \Delta u + u\,|\nabla u|^2 \quad \text{dans} \quad D \times [0, +\infty), \tag{8.9}$$

$$u = u_0 \quad \text{sur} \quad \partial D \times [0, +\infty), \tag{8.10}$$

$$u = u_0 \quad \text{sur} \quad D \times \{0\}, \tag{8.11}$$

avec une condition initiale $u_0 : \overline{D} \to S^2$ et une contrainte de degré. Comme dans la section précédente, D désigne le disque unité de $\mathbb{R}^2$ et S^2 la sphère unité de $\mathbb{R}^3$.

Un résultat de Struwe [179], complété par Chang [53] pour des variétés à bord, montre que si u_0 appartient à $H^1(D,S^2)$ avec $u_{0|\partial D}$ dans $H^{\frac{3}{2}}(\partial D,S^2)$, alors le problème (8.9)–(8.11) admet une unique solution faible $u \in H^1_{loc}(\overline{D}\times[0,+\infty),S^2)$, régulière en dehors d'un nombre fini de points de singularité $(x_i,t_i)_{1\leq i\leq N} \subset \overline{D}\times(0,+\infty)$. L'énergie de Dirichlet $\mathcal{E}(u(t))$ (cf. (8.3)) associée est décroissante, et Freire [89] a montré que cette décroissance garantit l'unicité dans la classe $H^1_{loc}(\overline{D}\times[0,+\infty),S^2)$. Cette solution est appelée « solution de Struwe ». La solution $u(t,\cdot)$ converge faiblement vers une application harmonique lorsque $t\to+\infty$ dans un sens approprié.

En une singularité, en un temps fini t_i ou infini, un phénomène de concentration nommé *bubbling* se produit : un « blow-up » approprié de la solution converge vers une application harmonique de $S^2 \simeq \overline{\mathbb{R}^2}$ dans S^2 et l'énergie de Dirichlet $\mathcal{E}(u(t))$ a une discontinuité. Ce comportement a été détaillé par plusieurs auteurs (voir [186] et les références citées). Le saut dans l'énergie est quantifié et est un multiple de 4π, qui correspond en général à un saut dans le degré S^2 de u, donné par $Q(u)$ (cf. (8.6)). Ceci est lié au fait que la limite d'une suite convergeant pour la topologie H^1-faible n'a en général pas le même degré que les éléments de la suite [40].

Le phénomène inverse (*debubbling*) a été utilisé dans [24, 185] pour construire une solution faible dans $H^1_{loc}(\overline{D}\times[0,+\infty),S^2)$ de (8.9)–(8.11) distincte de la solution de Struwe. L'idée est de garder en réserve l'énergie perdue lors d'un « bubbling » au temps t_1 et de la relâcher à un temps $t_2 > t_1$ pour un « debubbling » (au temps t_2, l'énergie a un saut de discontinuité vers le haut). Ce type de solution faible semble plus adapté pour la description de cristaux liquides nématiques, et notre but est de présenter un schéma qui permette de les calculer numériquement.

Dans la suite, nous considérons uniquement des applications corotationnellement symétriques, *i.e.* des applications $u : D \to S^2$ telles que

$$u(r\cos\varphi, r\sin\varphi) = (\cos\varphi\cos\theta(r),\, \sin\varphi\cos\theta(r),\, \sin\theta(r))$$

pour un $\theta : [0,1]\times[0,+\infty) \to \mathbb{R}$. Les exemples construits par Bertsch *et al.* [24] et Topping [185] pour montrer la non unicité de solution faible étaient de telles applications corotationnellement symétriques. En terme de θ, les équations (8.9)–(8.11) s'écrivent

$$\theta_t = \theta_{rr} + \frac{1}{r}\theta_r + \frac{\sin(2\theta)}{2r^2} \qquad (r,t)\in(0,1)\times(0,+\infty), \tag{8.12}$$
$$\theta(1,t) = \theta_0(1) \qquad t\in[0,+\infty), \tag{8.13}$$
$$\theta(r,0) = \theta_0(r) \qquad r\in[0,1], \tag{8.14}$$

où θ_0 est associé à une donnée initiale u_0 corotationnelle. L'énergie de Dirichlet est donnée par

$$\mathcal{E}(\theta) := \mathcal{E}(u) = \pi\int_0^1 \left(\frac{\cos^2\theta}{r} + \theta_r^2 r\right)\mathrm{d}r,$$

et l'ensemble des fonctions d'énergie finie est défini par

$$\mathcal{S}_\alpha := \left\{\theta\in\mathcal{C}^0([0,1],\mathbb{R}),\ \theta(1)=\alpha,\ \frac{\cos\theta}{\sqrt{r}}\in L^2(0,1) \text{ et } \sqrt{r}\theta'\in L^2(0,1)\right\},$$

où $\alpha = \theta_0(1) \in \mathbb{R}$ correspond à une condition au bord sur ∂D. Remarquons que toute fonction $\theta\in\mathcal{S}_\alpha$ satisfait

$$\theta(0) = -\frac{\pi}{2} + k\pi, \tag{8.15}$$

où $k\in\mathbb{Z}$ représente (à un facteur 2 près) le nombre de tours effectués par θ, nombre qui caractérise le *degré corotationnel* de θ.

Le schéma semi-discrétisé en temps que nous détaillons ci-dessous nous permet de construire des solutions de (8.12)–(8.14) avec un degré corotationnel prescrit $\theta(0) = -\pi/2 + k\pi$. Il s'agit d'un schéma d'Euler implicite introduit par Bethuel *et al.* [27] pour des domaines de $\mathbb{R}^3$ et basé sur l'idée que le flot des applications harmoniques est le flot de gradient L^2 d'une énergie relaxée $\mathcal{E}_k$ de $\mathcal{E}$ (en remplaçant $\mathcal{E}_k$ par $\mathcal{E}$, nous obtiendrions probablement la solution de Struwe). De plus, l'énergie totale du schéma semi-discret est décroissante. Nous pensons que ces solutions correspondent aux solutions décrites par Bertsch *et al.* dans l'introduction de [24]. Cependant, à l'heure actuelle, nous ne disposons pas d'une caractérisation rigoureuse de nos solutions qui garantirait leur unicité.

Pour la simulation numérique de notre solution, nous utilisons une discrétisation en espace par éléments finis P^1 couplée avec une méthode de maillage mobile qui permet de gérer la singularité en $r = 0$ et d'obtenir des parties purement verticales dans le graphe. Cette méthode est une adaptation du cas stationnaire traité dans [3] par des algorithmes d'optimisation.

8.2.2 Schéma semi-discrétisé en temps

Pour une application corotationnelle u associée à θ, le degré S^2 vaut

$$Q(u) = -\frac{1}{2}\int_{\theta(0)}^{\theta(1)} \cos\varphi \,\mathrm{d}\varphi.$$

Le *degré S^2-corotationnel*, plus précis, est défini par

$$\operatorname{cor}\deg_{S^2}(\theta) := -\frac{1}{2}\int_{\theta(0)}^{\theta(1)} |\cos\varphi| \,\mathrm{d}\varphi.$$

Si $\theta(1) - \theta(0) = k\pi$, alors $\operatorname{cor}\deg_{S^2}(\theta) = -k$. L'inégalité fondamentale (obtenue par l'inégalité de Cauchy-Schwarz) est que l'énergie contrôle le degré,

$$4\pi \left|\operatorname{cor}\deg_{S^2}(\theta)\right| \quad \leq \quad \mathcal{E}(\theta), \tag{8.16}$$

et que l'égalité se produit si et seulement si θ correspond à une application harmonique corotationnelle u [3] (*i.e.* une solution stationnaire de (8.12)).

Le degré S^2-corotationnel (ou plus simplement, la relation (8.15)) donne une partition de $\mathcal{S}_\alpha$ en classes d'homotopies $\mathcal{H}_{k,\alpha}$, où

$$\mathcal{H}_{k,\alpha} := \left\{ \theta \in \mathcal{S}_\alpha,\ \theta(0) = -\frac{\pi}{2} + k\pi \right\}.$$

En général, l'infimum $\inf\{\mathcal{E}(\theta)\,;\,\theta \in \mathcal{H}_{k,\alpha}\}$ n'est pas atteint, comme le montre par exemple le résultat de Lemaire [132] pour $\alpha = \pi/2$. Pour obtenir un minimum, il est naturel de définir pour tout $\theta \in \mathcal{S}_\alpha$ une *énergie relaxée* associée à la classe $\mathcal{H}_{k,\alpha}$, selon

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}_k(\theta) \quad &:= \quad \inf\left\{ \liminf_{i\to+\infty} \mathcal{E}(\theta_i)\,;\, \theta_i \in \mathcal{H}_{k,\alpha},\ \theta_i \underset{i\to+\infty}{\to} \theta \text{ dans } \mathcal{D}'(0,1) \right\}, \\
&= \quad \mathcal{E}(\theta) + 4\left|\theta(0^+) - k\pi + \frac{\pi}{2}\right|.
\end{aligned} \tag{8.17}$$

En disant qu'une suite (θ_n) converge faiblement vers θ dans $\mathcal{S}_\alpha$ si $\sup_n \mathcal{E}(\theta_n) < +\infty$ et $\theta_n \rightharpoonup \theta$ dans $\mathcal{D}'(0,1)$, on peut considérer que l'énergie $\mathcal{E}_k$ est la plus grande extension de $\mathcal{E}_{|\mathcal{H}_{k,\alpha}}$ dans $\mathcal{S}_\alpha$ séquentiellement semi-continue inférieurement qui minore $\mathcal{E}$. Dans [3], il est prouvé que $\mathcal{E}_k$ admet un unique minimiseur dans $\mathcal{S}_\alpha$, et que

$$\inf_{\theta\in\mathcal{S}_\alpha} \mathcal{E}_k(\theta) = \inf_{\theta\in\mathcal{H}_{k,\alpha}} \mathcal{E}(\theta).$$

Soient $k \in \mathbb{Z}$ et $\tau = T/N$ le pas de temps. Le schéma semi-discret en temps est le suivant : nous fixons $\theta^0 = \theta_0 \in \mathcal{S}_\alpha$ et nous supposons que $\theta^n \in \mathcal{S}_\alpha$, $n \geq 0$ est connu. Alors on choisit θ^{n+1} tel que

$$\theta^{n+1} \text{ minimise } \quad \mathcal{E}_k(\theta) + \frac{\pi}{\tau}\int_0^1 |\theta - \theta^n|^2 \, r \, \mathrm{d}r \quad \text{ dans } \mathcal{S}_\alpha. \tag{8.18}$$

D'après la semi-continuité de $\mathcal{E}_k$ [3] et la compacité faible de suites bornées de $\mathcal{S}_\alpha$, le problème (8.18) admet au moins une solution, qui satisfait l'équation d'Euler-Lagrange

$$r\left(\frac{\theta^{n+1} - \theta^n}{\tau}\right) = (r\theta_r^{n+1})_r + \frac{\sin(2\theta^{n+1})}{2r} \qquad \text{dans } \mathcal{D}'(0,1). \tag{8.19}$$

Comme l'énergie $\mathcal{E}_k$ n'est pas convexe, la suite $(\theta^n)_n$ n'est pas nécessairement unique.

Avec les valeurs discrètes $\theta_0, \theta_1, \ldots$, nous construisons deux fonctions θ^τ, $\overline{\theta}^\tau$: $[0,1] \times [0,\infty)$ en posant, pour tout $n \in \mathbb{N}$ et $t \in [n, (n+1)\tau)$:

$$\begin{aligned} \theta^\tau(\cdot,t) &= \frac{(n+1)\tau - t}{\tau}\theta^n + \frac{t - n\tau}{\tau}\theta^{n+1}, & (8.20)\\ \overline{\theta}^\tau(\cdot,t) &= \theta^n. & (8.21) \end{aligned}$$

Noter que $\theta^\tau(\cdot,t) \notin \mathcal{S}_\alpha$ en général. En effet, si $\theta^n(0) \neq \theta^{n+1}(0)$ alors $\theta^\tau(0,t) \notin \dfrac{\pi}{2} + \pi\mathbb{Z}$ pour presque tout $t \in (n\tau, (n+1)\tau)$. Par définition de θ^{n+1}, on a

$$\mathcal{E}_k(\theta^{n+1}) + \frac{\pi}{\tau}\int_0^1 \left|\theta^{n+1} - \theta^n\right|^2 r \, \mathrm{d}r \leq \mathcal{E}_k(\theta^n). \tag{8.22}$$

En sommant ces inégalités pour $n = 0 \ldots N-1$, nous obtenons l'estimation

$$\mathcal{E}_k(\overline{\theta}^\tau(\cdot, N\tau)) + \pi\int_0^{N\tau}\int_0^1 |\theta_t^\tau|^2 \, r \, \mathrm{d}r \, \mathrm{d}t \leq \mathcal{E}_k(\theta_0). \tag{8.23}$$

Il est alors possible de passer à la limite dans (8.19).

Avant cela, précisons les espaces fonctionnels utilisés. Nous considérons toute fonction θ définie sur $(0,1)$ comme une fonction axisymétrique définie sur D par $\theta(r\cos\varphi, r\sin\varphi) := \theta(r)$. Avec cette identification, $L^2(0,1;rdr)$ est isomorphique à $L^2_{axi}(D)$, défini comme la fermeture dans $L^2(D)$ de l'ensemble des fonctions régulières et axisymétriques. De même, l'espace de Hilbert $\{\theta \in L^2(rdr);\ \theta_r \in L^2(rdr)\}$ équipé de la norme $(|\theta|^2_{L^2(rdr)} + |\theta_r|^2_{L^2(rdr)})^{1/2}$, est isométrique à $H^1_{axi}(D)$ (la fermeture dans $H^1(D)$ de l'ensemble des fonctions régulières et axisymétriques).

Soit $\tau_1, \tau_2, \ldots$ une suite décroissante de réels strictement positifs telle que $\lim \downarrow \tau_i = 0$. Nous avons le résultat de convergence suivant :

Théorème 8.6 (Merlet & P. [5]) *Il existe une fonction axisymétrique*

$$\theta \in L^\infty([0,+\infty), H^1_{axi}(D)) \cap H^1_{loc}([0,+\infty), L^2_{axi}(D)) \tag{8.24}$$

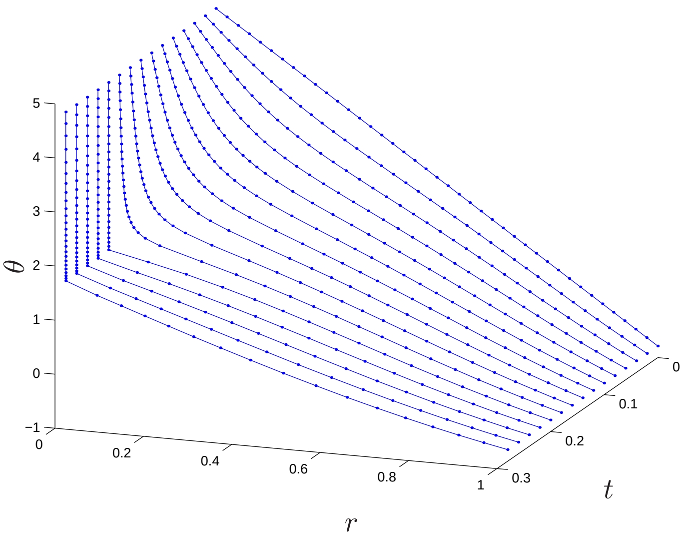
telle que, à une sous-suite près,

$$\begin{aligned} \theta^{\tau_i} \quad &\underset{i\to+\infty}{\longrightarrow} \quad \theta \qquad \textit{fortement dans } C^0([0,T], L^2_{axi}(D)), \qquad \forall T > 0, & (8.25)\\ \theta^{\tau_i}(\cdot,t), \overline{\theta}^{\tau_i}(\cdot,t) \quad &\underset{i\to+\infty}{\longrightarrow} \quad \theta(\cdot,t) \qquad \textit{faiblement dans } H^1_{axi}(D), \qquad \forall t \geq 0. \end{aligned}$$

De plus, θ est une solution de (8.12) *dans $\mathcal{D}'((0,1)\times(0,+\infty))$, qui satisfait* (8.13)–(8.14) *ainsi que l'estimation*

$$\mathcal{E}_k(\theta(\cdot,t)) + \pi\int_0^t\int_0^1 |\theta_t|^2 \, r \, \mathrm{d}r \, \mathrm{d}t \quad \leq \quad \mathcal{E}_k(\theta_0), \qquad \forall t \geq 0. \tag{8.26}$$

8.2.3 Illustration numérique



Cas de « bubbling »

La Figure 8.2.3 représente un cas de « bubbling » calculé pour un pas de temps $\tau = 0.02$ par un algorithme de maillage mobile. Dans cet exemple, $\alpha = -\pi/4$, $k = 2$, la donnée initiale est la fonction affine $\theta_0(r) = (\alpha - 3\pi/2)r + 3\pi/2$ ($r \in [0, 1]$) et le maillage initial est uniforme avec un pas d'espace $h = 1/40$. Nous avons représenté la solution calculée $\theta^{\tau,h}(r, t)$ comme fonction de r en coordonnées (t, r, θ) pour tout $t = n\tau$ avec $n = 0, \ldots, 14$.

La concentration se produit en $r = 0$ et le degré est préservé (*i.e.* la condition au bord $3\pi/2$ en $r = 0$) pour le graphe de la solution. Le temps de « bubbling » numérique est $t = 0.20$ (à $\tau = 0.02$ près). La distribution des points le long de la singularité est très proche de celle observée dans le cas stationnaire (avec la formule de Gauss, cf. [3]). La solution pour t large est très proche de la solution obtenue dans le cas stationnaire. Dans cet exemple, le nombre de points dans le maillage mobile reste constant au cours de l'évolution, égal à 41.

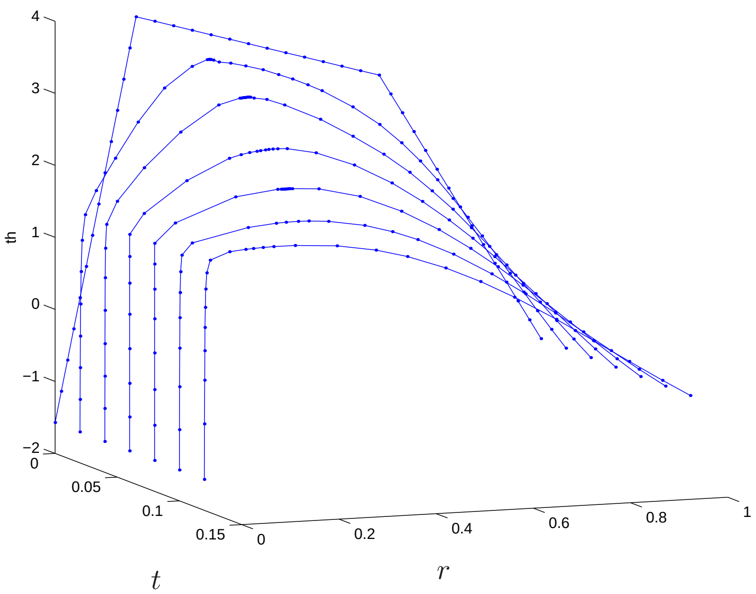


FIG. 8.2: Cas de « bubbling/debubbling » ($t \in [0, 0.12]$)

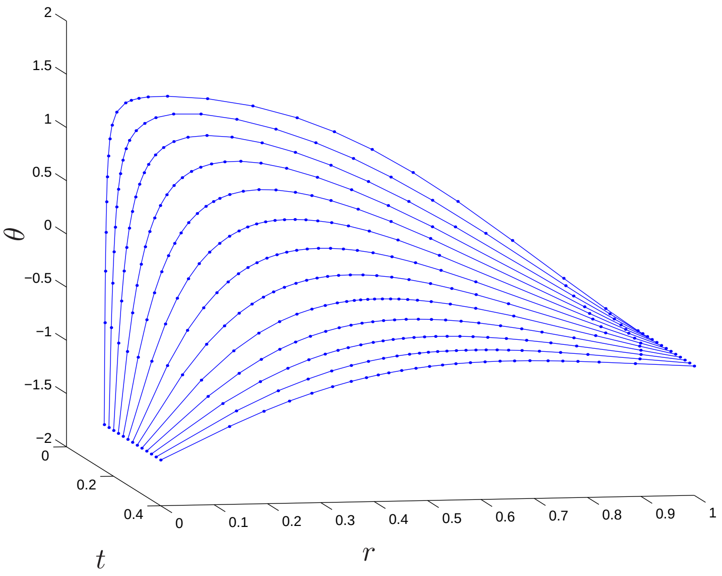


FIG. 8.3: Cas de « bubbling/debubbling » ($t \in [0.14, 0.38]$)

Les Figures 8.2 et 8.3 montrent un « bubbling » suivi d'un « debubbling », calculé par la même méthode de maillage mobile. Les paramètres sont $\alpha = -\pi/4$, $k = 0$ et la donnée initiale θ_0 est la fonction continue et affine par morceaux relative à la subdivision $0 < 1/6 < 2/3 < 1$ de $[0, 1]$, définie par ses valeurs en $r = 0$, $1/6$, $2/3$ et 1, qui sont respectivement $-\pi/2$, 4, 3 et α. Le pas de temps est $\tau = 0.02$ et la solution est représentée aux temps $t = n\tau$ avec $n = 0, \ldots, 19$.

Comme précédemment, nous observons la conservation du degré (la condition au bord en $r = 0$ est $-\pi/2$). Le « bubbling » se produit à la 2ème itération en temps $t = 0.04$, avec une concentration en $r = 0$ et une distribution de points le long de la singularité similaire au cas précédent. Noter que la solution au temps $t = 0.02$ paraît plus régulière que la condition initiale, ce qui correspond à un effet régularisant de l'équation de la chaleur. L'énergie reste concentrée pour $t \in [0.04, 0.08]$ et le « debubbling » se produit en $t = 0.10$. La solution pour $t \geq 0.10$ est régulière et converge vers l'application harmonique θ^∞ de degré $k = 0$ correspondant à la valeur au bord $\theta^\infty(0) = -\pi/2$ et $\theta^\infty(1) = -\pi/4$.

Dans la Figure 8.2, on peut voir un exemple de fusion de points lié à l'approche par maillage mobile. En démarrant avec 41 nœuds, on finit avec 26 nœuds, les nœuds fusionnant entre les itérations 3 et 6. Ce phénomène de perte de nœuds n'est pas gênant ici, puisque la longueur du graphe de la solution décroît avec le temps, de sorte que la densité de nœuds par unité de longueur du graphe reste approximativement constante au cours du temps.

Conclusion et perspectives

Pour résumer ce mémoire en une phrase, mes travaux jusqu'ici ont porté sur l'analyse numérique et mathématique d'équations aux dérivées partielles apparaissant dans des modèles de changement et de transformation de phases (le flot des applications harmoniques pouvant également être compris dans ce sens, comme on l'a vu). Dans une telle thématique, les directions de travail restent nombreuses, comme le montre la littérature abondante et récente sur le sujet (à titre d'exemple, le mot-clef « phase-field » apparaît ainsi 183 fois pour les années 2005 à 2010 dans les titres référencés par `MathSciNet`). Comme d'autre part, en recherche, chaque résultat nouveau paraît poser plus de questions qu'il n'en résout, les perspectives de problèmes nouveaux paraissent exponentielles. Dans ce spectre large, je vais simplement citer quelques pistes, des plus précises aux plus floues.

Tout d'abord, en ce qui concerne la convergence vers l'équilibre par la méthode de Łojasiewicz pour des schémas discrets en temps, deux questions me paraissent mériter qu'on s'y arrête : premièrement, dans quelle mesure la méthode peut-elle s'étendre à d'autres schémas que la méthode d'Euler implicite ? Et deuxièmement, comment l'appliquer à des schémas pour des EDP posées sur des variétés, comme l'avait fait initialement Simon [175] pour le flot des applications harmoniques ?

En ce qui concerne les modèles de champ de phase (au sens où l'équation met en jeu un ou plusieurs paramètres d'ordre, et que l'interface soit diffuse ou non), plusieurs aspects me paraissent particulièrement intéressants, du point de vue mathématique, notamment. Comme précisé dans la Section 6.3, le modèle d'Allen-Cahn-Gurtin avec non-linéarité logarithmique est toujours en cours d'étude. De manière générale, le rapport entre modèles discrets et modèles continus reste une source de questions intéressantes, notamment pour les aspects dynamiques (convergence vers l'équilibre, attracteurs, ...). La question des rapports entre modèles atomiques et modèles continus apparaît aussi naturellement dans une telle démarche, ainsi que l'intérêt pour des modèles stochastiques, dynamisés récemment par des résultats de Debussche, Zambotti et Goudenège [71, 103].

Comme principe général, il me paraît important d'aller vers des questions plus proches de la physique des problèmes, et éventuellement plus proche des applications. La volonté de se rapprocher des applications s'inscrit d'ailleurs dans un contexte général. De ce point de vue, la discussion et la collaboration avec des physiciens est une première étape, que j'ai concrétisée récemment dans [18], et que je souhaite continuer et renforcer à l'avenir.

Références bibliographiques

Ce mémoire présente les principaux résultats des publications [5] à [18], à l'exception de l'article [7] qui est à l'écart des thématiques présentées.

A - Travaux de l'auteur

[1] M. Pierre. *Graphes et maillages adaptés pour le calcul d'applications harmoniques minimisantes*. PhD thesis, Ecole Normale Supérieure de Cachan, 2002.

[2] M. Pierre. Newton and conjugate gradient for harmonic maps from the disc into the sphere. *ESAIM Control Optim. Calc. Var.*, 10(1) :142–167 (electronic), 2004.

[3] F. Alouges and M. Pierre. Mesh optimization for singular axisymmetric harmonic maps from the disc into the sphere. *Numer. Math.*, 101(3) :391–414, 2005.

[4] M. Pierre. Weak BV convergence of a moving finite-element method for singular axisymmetric harmonic maps. *SIAM J. Numer. Anal.*, 43(4) :1436–1454 (electronic), 2005.

[5] B. Merlet and M. Pierre. Moving mesh for the axisymmetric harmonic map flow. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 39(4) :781–796, 2005.

[6] M. Pierre. Symmetry breaking for the Dirichlet problem for harmonic maps from the disc into the 2-sphere. *Adv. Differential Equations*, 10(6) :675–694, 2005.

[7] O. Binda and M. Pierre. Asymptotic expansion for a delay differential equation with continuous and piecewise constant arguments. *Funkcial. Ekvac.*, 50(3) :421–448, 2007.

[8] M. Pierre. Symmetric boundary values for the Dirichlet problem for harmonic maps from the disc into the 2-sphere. *Calc. Var. Partial Differential Equations*, 31(2) :147–166, 2008.

[9] S. Injrou and M. Pierre. Stable discretizations of the Cahn-Hilliard-Gurtin equations. *Discrete Contin. Dyn. Syst.*, 22(4) :1065–1080, 2008.

[10] L. Cherfils and M. Pierre. Non-global existence for an Allen-Cahn-Gurtin equation with logarithmic free energy. *J. Evol. Equ.*, 8(4) :727–748, 2008.

[11] M. Pierre. Uniform convergence for a finite element discretization of a viscous diffusion equation. *IMA J. Numer. Anal.*, 30(2) :487–511, 2010.

[12] B. Merlet and M. Pierre. Convergence to equilibrium for the backward Euler scheme and applications. *Commun. Pure Appl. Anal.*, 9(3) :685–702, 2010.

[13] M. Grasselli and M. Pierre. A splitting method for the Cahn-Hilliard equation with inertial term. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 20(8) :1363–1390, 2010.

[14] L. Cherfils, M. Petcu, and M. Pierre. A numerical analysis of the Cahn-Hilliard equation with dynamic boundary conditions. *Discrete Contin. Dyn. Syst.*, 27(4) :1511–1533, 2010.

[15] S. Injrou and M. Pierre. Error estimates for a finite element discretization of the Cahn-Hilliard-Gurtin equations. *Adv. Differential Equations*, 15(11-12) :1161–1192, 2010.

[16] M. Pierre and A. Rougirel. Stationary solutions to phase field crystal equations. *Math. Methods Appl. Sci.*, 34(3) :278–308, 2011.

[17] M. Grasselli and M. Pierre. Convergence to equilibrium of solutions of the backward Euler scheme for asymptotically autonomous second-order gradient-like systems. *accepté dans Commun. Pure Appl. Anal.*

[18] M. Grasselli, N. Lecoq, and M. Pierre. A long-time stable fully discrete approximation of the Cahn-Hilliard equation with inertial term. *accepté dans AIMS Proceedings*.

B - Autres références citées dans ce mémoire

[19] P.-A. Absil, R. Mahony, and B. Andrews. Convergence of the iterates of descent methods for analytic cost functions. *SIAM J. Optim.*, 16(2) :531–547 (electronic), 2005.

[20] F. Alouges. A new algorithm for computing liquid crystal stable configurations : the harmonic mapping case. *SIAM J. Numer. Anal.*, 34(5) :1708–1726, 1997.

[21] H. Attouch and J. Bolte. On the convergence of the proximal algorithm for nonsmooth functions involving analytic features. *Math. Program.*, 116(1-2, Ser. B) :5–16, 2009.

[22] F. Bai, C. M. Elliott, A. Gardiner, A. Spence, and A. M. Stuart. The viscous Cahn-Hilliard equation. I. Computations. *Nonlinearity*, 8(2) :131–160, 1995.

[23] T. Bárta, R. Chill, and E. Fašangová. Every ordinary differential equation with a strict Lyapunov function is a gradient system. *submitted*.

[24] M. Bertsch, R. Dal Passo, and R. van der Hout. Nonuniqueness for the heat flow of harmonic maps on the disk. *Arch. Ration. Mech. Anal.*, 161(2) :93–112, 2002.

[25] F. Bethuel, H. Brezis, B. D. Coleman, and F. Hélein. Bifurcation analysis of minimizing harmonic maps describing the equilibrium of nematic phases between cylinders. *Arch. Rational Mech. Anal.*, 118(2) :149–168, 1992.

[26] F. Bethuel, H. Brezis, and F. Hélein. *Ginzburg-Landau vortices*. Progress in Nonlinear Differential Equations and their Applications, 13. Birkhäuser Boston Inc., Boston, MA, 1994.

[27] F. Bethuel, J.-M. Coron, J.-M. Ghidaglia, and A. Soyeur. Heat flows and relaxed energies for harmonic maps. In *Nonlinear diffusion equations and their equilibrium states, 3 (Gregynog, 1989)*, volume 7 of *Progr. Nonlinear Differential Equations Appl.*, pages 99–109. Birkhäuser Boston, Boston, MA, 1992.

[28] F. Bethuel and F. Demengel. Extensions for Sobolev mappings between manifolds. *Calc. Var. Partial Differential Equations*, 3(4) :475–491, 1995.

[29] F. Bethuel, G. Orlandi, and D. Smets. Convergence of the parabolic Ginzburg-Landau equation to motion by mean curvature. *Ann. of Math. (2)*, 163(1) :37–163, 2006.

[30] J. Bolte, A. Daniilidis, O. Ley, and L. Mazet. Characterizations of Łojasiewicz inequalities : subgradient flows, talweg, convexity. *Trans. Amer. Math. Soc.*, 362(6) :3319–3363, 2010.

[31] A. Bonfoh. Some Cahn-Hilliard-Gurtin models with a logarithmic potential. *Appl. Math. Lett.*, 18(3) :253–259, 2005.

[32] A. Bonfoh, M. Grasselli, and A. Miranville. Singularly perturbed 1d Cahn-Hilliard equation revisited. *NoDEA Nonlinear Diff. Eqns. Appl.*, to appear.

[33] A. Bonfoh and A. Miranville. On Cahn-Hilliard-Gurtin equations. In *Proceedings of the Third World Congress of Nonlinear Analysts, Part 5 (Catania, 2000)*, volume 47, pages 3455–3466, 2001.

[34] A. S. Bonfoh. Error analysis of a generalized Cahn-Hilliard equation. *Southeast Asian Bull. Math.*, 31(1) :29–42, 2007.

[35] F. Boyer, C. Lapuerta, S. Minjeaud, B. Piar, and M. Quintard. Cahn-Hilliard/Navier-Stokes model for the simulation of three-phase flows. *Transp. Porous Media*, 82(3) :463–483, 2010.

[36] K. A. Brakke. *The motion of a surface by its mean curvature*, volume 20 of *Mathematical Notes*. Princeton University Press, Princeton, N.J., 1978.

[37] H. Brezis. *Opérateurs maximaux monotones et semi-groupes de contractions dans les espaces de Hilbert*. North-Holland Publishing Co., Amsterdam, 1973. North-Holland Mathematics Studies, No. 5. Notas de Matemática (50).

[38] H. Brezis. Points critiques dans les problèmes variationnels sans compacité. *Astérisque*, (161-162) :Exp. No. 698, 5, 239–256 (1989), 1988. Séminaire Bourbaki, Vol. 1987/88.

[39] H. Brezis. New questions related to the topological degree. In *The unity of mathematics*, volume 244 of *Progr. Math.*, pages 137–154. Birkhäuser Boston, Boston, MA, 2006.

[40] H. Brezis and J.-M. Coron. Large solutions for harmonic maps in two dimensions. *Comm. Math. Phys.*, 92(2) :203–215, 1983.

[41] H. Brezis, J.-M. Coron, and E. H. Lieb. Harmonic maps with defects. *Comm. Math. Phys.*, 107(4) :649–705, 1986.

[42] L. Bronsard and R. V. Kohn. On the slowness of phase boundary motion in one space dimension. *Comm. Pure Appl. Math.*, 43(8) :983–997, 1990.

[43] L. Bronsard and R. V. Kohn. Motion by mean curvature as the singular limit of Ginzburg-Landau dynamics. *J. Differential Equations*, 90(2) :211–237, 1991.

[44] P. Brunovský and P. Poláčik. The Morse-Smale structure of a generic reaction-diffusion equation in higher space dimension. *J. Differential Equations*, 135(1) :129–181, 1997.

[45] L. A. Caffarelli and N. E. Muler. An L^∞ bound for solutions of the Cahn-Hilliard equation. *Arch. Rational Mech. Anal.*, 133(2) :129–144, 1995.

[46] G. Caginalp. An analysis of a phase field model of a free boundary. *Arch. Rational Mech. Anal.*, 92(3) :205–245, 1986.

[47] G. Caginalp and P. Fife. Higher-order phase field models and detailed anisotropy. *Phys. Rev. B (3)*, 34(7) :4940–4943, 1986.

[48] J. W. Cahn. On spinodal decomposition. *Acta Metall.*, 9 :795–801, 1961.

[49] J. W. Cahn and S. M. Allen. A macroscopic theory for antiphase boundary motion and its application to antiphase domain coarsening. *Acta Metall.*, 27 :1084–1095, 1979.

[50] J. W. Cahn and J. E. Hilliard. Free energy of a nonuniform system. i. interfacial free energy. *J. Chem. Phys.*, 28(2) :258–267, 1958.

[51] J. Carr, M. E. Gurtin, and M. Slemrod. Structured phase transitions on a finite interval. *Arch. Rational Mech. Anal.*, 86(4) :317–351, 1984.

[52] N. Chafee and E. F. Infante. A bifurcation problem for a nonlinear partial differential equation of parabolic type. *Applicable Anal.*, 4 :17–37, 1974/75.

[53] K.-C. Chang. Heat flow and boundary value problem for harmonic maps. *Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire*, 6(5) :363–395, 1989.

[54] J. V. Chaparova, L. A. Peletier, and S. A. Tersian. Existence and nonexistence of nontrivial solutions of semilinear fourth- and sixth-order differential equations. *Adv. Differential Equations*, 8(10) :1237–1258, 2003.

[55] M. Cheng and J. A. Warren. An efficient algorithm for solving the phase field crystal model. *J. Comput. Phys.*, 227(12) :6241–6248, 2008.

[56] L. Cherfils and A. Miranville. Finite-dimensional attractors for a model of Allen-Cahn equation based on a microforce balance. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 329(12) :1109–1114, 1999.

[57] L. Cherfils and A. Miranville. Generalized Cahn-Hilliard equations with a logarithmic free energy. *Rev. R. Acad. Cienc. Exactas Fís. Nat. (Esp.)*, 94(1) :19–32, 2000.

[58] L. Cherfils, A. Miranville, and S. Zelik. The Cahn-Hilliard equation with logarithmic potentials. *Milan J. Math.*, à paraître.

[59] R. Chill and E. Fašangová. Gradient systems - 13th International internet seminar. (http ://isem.univ-metz.fr/), 2010.

[60] R. Chill, E. Fašangová, and J. Prüss. Convergence to steady state of solutions of the Cahn-Hilliard and Caginalp equations with dynamic boundary conditions. *Math. Nachr.*, 279(13-14) :1448–1462, 2006.

[61] R. Chill, A. Haraux, and M. A. Jendoubi. Applications of the Łojasiewicz-Simon gradient inequality to gradient-like evolution equations. *Anal. Appl. (Singap.)*, 7(4) :351–372, 2009.

[62] R. Chill and M. A. Jendoubi. Convergence to steady states in asymptotically autonomous semilinear evolution equations. *Nonlinear Anal.*, 53(7-8) :1017–1039, 2003.

[63] P. G. Ciarlet. *The finite element method for elliptic problems*, volume 40 of *Classics in Applied Mathematics*. Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, PA, 2002. Reprint of the 1978 original [North-Holland, Amsterdam].

[64] P. G. Ciarlet and P.-A. Raviart. Maximum principle and uniform convergence for the finite element method. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 2 :17–31, 1973.

[65] P. Collet and J.-P. Eckmann. *Instabilities and fronts in extended systems*. Princeton Series in Physics. Princeton University Press, Princeton, NJ, 1990.

[66] H. B. Curry. The method of steepest descent for non-linear minimization problems. *Quart. Appl. Math.*, 2 :258–261, 1944.

[67] M. Dauge. Neumann and mixed problems on curvilinear polyhedra. *Integral Equations Operator Theory*, 15(2) :227–261, 1992.

[68] P. de Mottoni and M. Schatzman. Évolution géométrique d'interfaces. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 309(7) :453–458, 1989.

[69] A. Debussche. A singular perturbation of the Cahn-Hilliard equation. *Asymptotic Anal.*, 4(2) :161–185, 1991.

[70] A. Debussche and L. Dettori. On the Cahn-Hilliard equation with a logarithmic free energy. *Nonlinear Anal.*, 24(10) :1491–1514, 1995.

[71] A. Debussche and L. Zambotti. Conservative stochastic Cahn-Hilliard equation with reflection. *Ann. Probab.*, 35(5) :1706–1739, 2007.

[72] E. DiBenedetto and M. Pierre. On the maximum principle for pseudoparabolic equations. *Indiana Univ. Math. J.*, 30(6) :821–854, 1981.

[73] M. Efendiev and A. Miranville. New models of Cahn-Hilliard-Gurtin equations. *Contin. Mech. Thermodyn.*, 16(5) :441–451, 2004.

[74] K. R. Elder and M. Grant. Modeling elastic and plastic deformations in nonequilibrium processing using phase field crystals. *Phys. Rev. E*, 70(051605), 2004.

[75] K. R. Elder, N. Provatas, J. Berry, P. Stefanovic, and M. Grant. Phase-field crystal modeling and classical density functional theory of freezing. *Physical Review B*, 75(6), 2007.

[76] C. M. Elliott. The Stefan problem with a nonmonotone constitutive relation. *IMA J. Appl. Math.*, 35(2) :257–264, 1985. Special issue : IMA conference on crystal growth (Oxford, 1985).

[77] C. M. Elliott. The Cahn-Hilliard model for the kinetics of phase separation. In *Mathematical models for phase change problems (Óbidos, 1988)*, volume 88 of *Internat. Ser. Numer. Math.*, pages 35–73. Birkhäuser, Basel, 1989.

[78] C. M. Elliott, D. A. French, and F. A. Milner. A second order splitting method for the Cahn-Hilliard equation. *Numer. Math.*, 54(5) :575–590, 1989.

[79] C. M. Elliott, B. Gawron, S. Maier-Paape, and E. S. Van Vleck. Discrete dynamics for convex and non-convex smoothing functionals in PDE based image restoration. *Commun. Pure Appl. Anal.*, 5(1) :181–200, 2006.

[80] C. M. Elliott and S. Larsson. Error estimates with smooth and nonsmooth data for a finite element method for the Cahn-Hilliard equation. *Math. Comp.*, 58(198) :603–630, S33–S36, 1992.

[81] C. M. Elliott and S. Luckhaus. A generalised diffusion equation for phase separation of a multicomponent mixture with interfacial free energy. to appear.

[82] A. Ern and J.-L. Guermond. *Éléments finis : théorie, applications, mise en œuvre*, volume 36 of *Mathématiques & Applications (Berlin) [Mathematics & Applications]*. Springer-Verlag, Berlin, 2002.

[83] L. C. Evans and M. Portilheiro. Irreversibility and hysteresis for a forward-backward diffusion equation. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 14(11) :1599–1620, 2004.

[84] A. Farina. Some remarks on a conjecture of De Giorgi. *Calc. Var. Partial Differential Equations*, 8(3) :233–245, 1999.

[85] A. Farina and E. Valdinoci. The state of the art for a conjecture of De Giorgi and related problems. In *Recent progress on reaction-diffusion systems and viscosity solutions*, pages 74–96. World Sci. Publ., Hackensack, NJ, 2009.

[86] H. P. Fischer, Ph. Maass, and W. Dieterich. Novel surface modes in spinodal decomposition. *Phys. Rev. Letters*, 79 :893–896, 1997.

[87] H. P. Fischer, Ph. Maass, and W. Dieterich. Diverging time and length scales of spinodal decomposition modes in thin films. *Europhys. Letters*, 62 :49–54, 1998.

[88] R. A. Fisher. The advance of advantageous genes. *Ann. of Eugenics*, 7(355-369), 1937.

[89] A. Freire. Uniqueness for the harmonic map flow in two dimensions. *Calc. Var. Partial Differential Equations*, 3(1) :95–105, 1995.

[90] M. Frémond. *Non-smooth thermomechanics*. Springer-Verlag, Berlin, 2002.

[91] G. Fusco and J. K. Hale. Slow-motion manifolds, dormant instability, and singular perturbations. *J. Dynam. Differential Equations*, 1(1) :75–94, 1989.

[92] H. Gajewski and J. A. Griepentrog. A descent method for the free energy of multicomponent systems. *Discrete Contin. Dyn. Syst.*, 15(2) :505–528, 2006.

[93] C. G. Gal. A Cahn-Hilliard model in bounded domains with permeable walls. *Math. Methods Appl. Sci.*, 29(17) :2009–2036, 2006.

[94] C. G. Gal. Exponential attractors for a Cahn-Hilliard model in bounded domains with permeable walls. *Electron. J. Differential Equations*, pages No. 143, 23 pp. (electronic), 2006.

[95] P. Galenko and D. Jou. Diffuse-interface model for rapid phase transformations in non-equilibrium systems. *Phys. Rev. E*, 71 :046125 (13 pages), 2005.

[96] P. Galenko and V. Lebedev. Analysis of the dispersion relation in spinodal decomposition of a binary system. *Philos. Mag. Lett.*, 87 :821–827, 2007.

[97] P. Galenko and V. Lebedev. Local nonequilibrium effect on spinodal decomposition in a binary system. *Int. J. Thermodyn.*, 11 :21–28, 2008.

[98] P. Galenko and V. Lebedev. Nonequilibrium effects in spinodal decomposition of a binary system. *Phys. Lett. A*, 372 :985–989, 2008.

[99] R. A. Gardner and C. K. R. T. Jones. Traveling waves of a perturbed diffusion equation arising in a phase field model. *Indiana Univ. Math. J.*, 39(4) :1197–1222, 1990.

[100] S. Gatti, M. Grasselli, A. Miranville, and V. Pata. On the hyperbolic relaxation of the one-dimensional Cahn-Hilliard equation. *J. Math. Anal. Appl.*, 312(1) :230–247, 2005.

[101] G. Gilardi, A. Miranville, and G. Schimperna. On the Cahn-Hilliard equation with irregular potentials and dynamic boundary conditions. *Commun. Pure Appl. Anal.*, 8(3) :881–912, 2009.

[102] D. Gilbarg and N. S. Trudinger. *Elliptic partial differential equations of second order*. Classics in Mathematics. Springer-Verlag, Berlin, 2001. Reprint of the 1998 edition.

[103] L. Goudenège. Stochastic Cahn-Hilliard equation with singular nonlinearity and reflection. *Stochastic Process. Appl.*, 119(10) :3516–3548, 2009.

[104] M. Grasselli, G. Schimperna, A. Segatti, and S. Zelik. On the 3D Cahn-Hilliard equation with inertial term. *J. Evol. Equ.*, 9(2) :371–404, 2009.

[105] M. Grasselli, G. Schimperna, and S. Zelik. On the 2D Cahn-Hilliard equation with inertial term. *Comm. Partial Diff. Equations*, 34 :137–170, 2009.

[106] M. Grasselli, G. Schimperna, and S. Zelik. Trajectory and smooth attractors for Cahn-Hilliard equations with inertial term. *Nonlinearity*, 23(3) :707–737, 2010.

[107] M. Grinfeld, J. E. Furter, and J. C. Eilbeck. A monotonicity theorem and its application to stationary solutions of the phase field model. *IMA J. Appl. Math.*, 49(1) :61–72, 1992.

[108] M. Grinfeld and A. Novick-Cohen. Counting stationary solutions of the Cahn-Hilliard equation by transversality arguments. *Proc. Roy. Soc. Edinburgh Sect. A*, 125(2) :351–370, 1995.

[109] P. Grisvard. *Elliptic problems in nonsmooth domains*, volume 24 of *Monographs and Studies in Mathematics*. Pitman (Advanced Publishing Program), Boston, MA, 1985.

[110] C. Gui. On some problems related to De Giorgi's conjecture. *Commun. Pure Appl. Anal.*, 2(1) :101–106, 2003.

[111] M. E. Gurtin. Generalized Ginzburg-Landau and Cahn-Hilliard equations based on a microforce balance. *Phys. D*, 92(3-4) :178–192, 1996.

[112] A. Haraux. *Systèmes dynamiques dissipatifs et applications*, volume 17 of *Recherches en Mathématiques Appliquées [Research in Applied Mathematics]*. Masson, Paris, 1991.

[113] F. Hélein. Régularité des applications faiblement harmoniques entre une surface et une sphère. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 311(9) :519–524, 1990.

[114] F. Hélein. Régularité des applications faiblement harmoniques entre une surface et une variété riemannienne. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 312(8) :591–596, 1991.

[115] D. Henry. *Geometric theory of semilinear parabolic equations*, volume 840 of *Lecture Notes in Mathematics*. Springer-Verlag, Berlin, 1981.

[116] D. Henry. *Perturbation of the boundary in boundary-value problems of partial differential equations*, volume 318 of *London Mathematical Society Lecture Note Series*. Cambridge University Press, Cambridge, 2005. With editorial assistance from Jack Hale and Antônio Luiz Pereira.

[117] Z. Hu, S. M. Wise, C. Wang, and J. S. Lowengrub. Stable and efficient finite-difference nonlinear-multigrid schemes for the phase field crystal equation. *J. Comput. Phys.*, 228(15) :5323–5339, 2009.

[118] S.-Z. Huang. *Gradient inequalities*, volume 126 of *Mathematical Surveys and Monographs*. American Mathematical Society, Providence, RI, 2006. With applications to asymptotic behavior and stability of gradient-like systems.

[119] T. Ilmanen. Convergence of the Allen-Cahn equation to Brakke's motion by mean curvature. *J. Differential Geom.*, 38(2) :417–461, 1993.

[120] W. Jäger and H. Kaul. Rotationally symmetric harmonic maps from a ball into a sphere and the regularity problem for weak solutions of elliptic systems. *J. Reine Angew. Math.*, 343 :146–161, 1983.

[121] M. A. Jendoubi. A simple unified approach to some convergence theorems of L. Simon. *J. Funct. Anal.*, 153(1) :187–202, 1998.

[122] J. Jost. The Dirichlet problem for harmonic maps from a surface with boundary onto a 2-sphere with nonconstant boundary values. *J. Differential Geom.*, 19(2) :393–401, 1984.

[123] N. Kenmochi, M. Niezgódka, and I. Pawłow. Subdifferential operator approach to the Cahn-Hilliard equation with constraint. *J. Differential Equations*, 117(2) :320–356, 1995.

[124] R. Kenzler, F. Eurich, Ph. Maass, B. Rinn, J. Schropp, E. Bohl, and W. Dieterich. Phase separation in confined geometries : solving the Cahn-Hilliard equation with generic boundary conditions. *Comput. Phys. Comm.*, 133 :139–157, 2001.

[125] B. B. King, O. Stein, and M. Winkler. A fourth-order parabolic equation modeling epitaxial thin film growth. *J. Math. Anal. Appl.*, 286(2) :459–490, 2003.

[126] A. N. Kolmogorov, I. Petrovsky, and N.S. Piskunov. Etdue de l'équation de la diffusion avec croissance de la quantité de matière et son application à un problème biologique. *Bull. Univ. Moskou, ser. Internat., Sec. A*, 1 :1–25, 1937.

[127] S. Kosugi, Y. Morita, and S. Yotsutani. Stationary solutions to the one-dimensional Cahn-Hilliard equation : proof by the complete elliptic integrals. *Discrete Contin. Dyn. Syst.*, 19(4) :609–629, 2007.

[128] M. Kowalczyk. On the existence and Morse index of solutions to the Allen-Cahn equation in two dimensions. *Ann. Mat. Pura Appl. (4)*, 184(1) :17–52, 2005.

[129] E. Kuwert. Minimizing the energy of maps from a surface into a 2-sphere with prescribed degree and boundary values. *Manuscripta Math.*, 83(1) :31–38, 1994.

[130] L. D. Landau and I. M. Khalatnikov. On the theory of superconductivity. In *Collected papers of L. D. Landau*. ed. D. ter Haar, Pergamon, Oxford, 1965.

[131] N. Lecoq, H. Zapolsky, and P. Galenko. Evolution of the structure factor in a hyperbolic model of spinodal decomposition. *Eur. Phys. J. Special Topics*, 177 :165–175, 2009.

[132] L. Lemaire. Applications harmoniques de surfaces riemanniennes. *J. Differential Geom.*, 13(1) :51–78, 1978.

[133] F.-H. Lin. A remark on the map $x/|x|$. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 305(12) :529–531, 1987.

[134] J.-L. Lions. *Quelques méthodes de résolution des problèmes aux limites non linéaires*. Dunod, 1969.

[135] P.-L. Lions. Structure of the set of steady-state solutions and asymptotic behaviour of semilinear heat equations. *J. Differential Equations*, 53(3) :362–386, 1984.

[136] S. Łojasiewicz. Une propriété topologique des sous-ensembles analytiques réels. In *Les Équations aux Dérivées Partielles (Paris, 1962)*, pages 87–89. Éditions du Centre National de la Recherche Scientifique, Paris, 1963.

[137] S. Łojasiewicz. Ensemble semi-analytiques. *I.H.E.S. Notes*, 1965.

[138] P.-E. Maingé. Asymptotic convergence of an inertial proximal method for unconstrained quasiconvex minimization. *J. Global Optim.*, 45(4) :631–644, 2009.

[139] Z. Mei. *Numerical bifurcation analysis for reaction-diffusion equations*, volume 28 of *Springer Series in Computational Mathematics*. Springer-Verlag, Berlin, 2000.

[140] A. Milani and S. Zheng. Exponential attractors and inertial manifolds for singular perturbations of the Cahn-Hilliard equations. *Nonlinear Anal.*, 57(5-6) :843–877, 2004.

[141] A. Milani and S. Zheng. Global attractors for singular perturbations of the Cahn-Hilliard equations. *J. Differential Equations*, 209(1) :101–139, 2005.

[142] A. Miranville. Existence of solutions for a Cahn-Hilliard-Gurtin model. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 331(10) :845–850, 2000.

[143] A. Miranville. Some generalizations of the Cahn-Hilliard equation. *Asymptot. Anal.*, 22(3-4) :235–259, 2000.

[144] A. Miranville. Consistent models of Cahn-Hilliard-Gurtin equations with Neumann boundary conditions. *Phys. D*, 158(1-4) :233–257, 2001.

[145] A. Miranville. Long-time behavior of some models of Cahn-Hilliard equations in deformable continua. *Nonlinear Anal. Real World Appl.*, 2(3) :273–304, 2001.

[146] A. Miranville. Existence of solutions for Cahn-Hilliard type equations. *Discrete Contin. Dyn. Syst.*, (suppl.) :630–637, 2003. Dynamical systems and differential equations (Wilmington, NC, 2002).

[147] A. Miranville. Generalized Cahn-Hilliard equations based on a microforce balance. *J. Appl. Math.*, (4) :165–185, 2003.

[148] A. Miranville. Generalizations of the Cahn-Hilliard equation based on a balance law for microforces. In *Nonlinear partial differential equations and their applications*, volume 20 of *GAKUTO Internat. Ser. Math. Sci. Appl.*, pages 189–211. Gakkōtosho, Tokyo, 2004.

[149] A. Miranville and A. Piétrus. A new formulation of the Cahn-Hilliard equation. *Nonlinear Anal. Real World Appl.*, 7(2) :285–307, 2006.

[150] A. Miranville and A. Rougirel. Local and asymptotic analysis of the flow generated by the Cahn-Hilliard-Gurtin equations. *Z. Angew. Math. Phys.*, 57(2) :244–268, 2006.

[151] A. Miranville and G. Schimperna. Nonisothermal phase separation based on a microforce balance. *Discrete Contin. Dyn. Syst. Ser. B*, 5(3) :753–768, 2005.

[152] A. Miranville and S. Zelik. Exponential attractors for the Cahn-Hilliard equation with dynamic boundary conditions. *Math. Methods Appl. Sci.*, 28(6) :709–735, 2005.

[153] A. Miranville and S. Zelik. The Cahn-Hilliard equation with singular potentials and dynamic boundary conditions. *Discrete Contin. Dyn. Syst.*, 28(1) :275–310, 2010.

[154] L. Modica. The gradient theory of phase transitions and the minimal interface criterion. *Arch. Rational Mech. Anal.*, 98(2) :123–142, 1987.

[155] J. Nagumo, S. Yoshizawa, and S. Arimoto. Bistable transmission lines. *IEEE Trans. Circuit Theory*, 12 :400–412, 1965.

[156] A. Novick-Cohen. On the viscous Cahn-Hilliard equation. In *Material instabilities in continuum mechanics (Edinburgh, 1985–1986)*, Oxford Sci. Publ., pages 329–342. Oxford Univ. Press, New York, 1988.

[157] A. Novick-Cohen. The Cahn-Hilliard equation : mathematical and modeling perspectives. *Adv. Math. Sci. Appl.*, 8(2) :965–985, 1998.

[158] A. Novick-Cohen and R. L. Pego. Stable patterns in a viscous diffusion equation. *Trans. Amer. Math. Soc.*, 324(1) :331–351, 1991.

[159] A. Novick-Cohen and L. A. Peletier. The steady states of one-dimensional Sivashinsky equations. *Quart. Appl. Math.*, 50(4) :759–777, 1992.

[160] J. Palis, Jr. and W. de Melo. *Geometric theory of dynamical systems*. Springer-Verlag, New York, 1982. An introduction, Translated from the Portuguese by A. K. Manning.

[161] L. A. Peletier and W. C. Troy. *Spatial patterns*. Progress in Nonlinear Differential Equations and their Applications, 45. Birkhäuser Boston Inc., Boston, MA, 2001. Higher order models in physics and mechanics.

[162] O. Penrose and P. C. Fife. Thermodynamically consistent models of phase-field type for the kinetics of phase transitions. *Phys. D*, 43(1) :44–62, 1990.

[163] M. Polat. Global attractor for a modified Swift-Hohenberg equation. *Comput. Math. Appl.*, 57(1) :62–66, 2009.

[164] N. Provatas, J.A. Dantzig, B. Athreya, P. Chan, P. Stefanovic, N. Goldenfeld, and K.R. Elder. Using the phase-field crystal method in the multi-scale modeling of microstructure evolution. *J. of the Minerals, Metals and Materials Society*, 59(7) :83–90, 2007.

[165] J. Prüss, R. Racke, and S. Zheng. Maximal regularity and asymptotic behavior of solutions for the Cahn-Hilliard equation with dynamic boundary conditions. *Ann. Mat. Pura Appl. (4)*, 185(4) :627–648, 2006.

[166] J. Qing. Multiple solutions of the Dirichlet problem for harmonic maps from discs into 2-spheres. *Manuscripta Math.*, 77(4) :435–446, 1992.

[167] J. Qing. Remark on the Dirichlet problem for harmonic maps from the disc into the 2-sphere. *Proc. Roy. Soc. Edinburgh Sect. A*, 122(1-2) :63–67, 1992.

[168] J. Qing. Boundary regularity of weakly harmonic maps from surfaces. *J. Funct. Anal.*, 114(2) :458–466, 1993.

[169] R. Racke and S. Zheng. The Cahn-Hilliard equation with dynamic boundary conditions. *Adv. Differential Equations*, 8(1) :83–110, 2003.

[170] P.-A. Raviart and J.-M. Thomas. *Introduction à l'analyse numérique des équations aux dérivées partielles*. Collection Mathématiques Appliquées pour la Maîtrise. Masson, Paris, 1983.

[171] T. Rivière. Everywhere discontinuous harmonic maps into spheres. *Acta Math.*, 175(2) :197–226, 1995.

[172] J. Salomon. Convergence of the time-discretized monotonic schemes. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 41(1) :77–93, 2007.

[173] E. Sandier and S. Serfaty. Gamma-convergence of gradient flows with applications to Ginzburg-Landau. *Comm. Pure Appl. Math.*, 57(12) :1627–1672, 2004.

[174] A. Segatti. On the hyperbolic relaxation of the Cahn-Hilliard equation in 3D : approximation and long time behaviour. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 17(3) :411–437, 2007.

[175] L. Simon. Asymptotics for a class of nonlinear evolution equations, with applications to geometric problems. *Ann. of Math. (2)*, 118(3) :525–571, 1983.

[176] J.G. Skellam. Random dispersal in theoretical populations. *Biometrika*, 38 :196–218, 1951.

[177] Z. Songmu. Asymptotic behavior of solution to the Cahn-Hillard equation. *Appl. Anal.*, 23(3) :165–184, 1986.

[178] A. Soyeur. The Dirichlet problem for harmonic maps from the disc into the 2-sphere. *Proc. Roy. Soc. Edinburgh Sect. A*, 113(3-4) :229–234, 1989.

[179] M. Struwe. On the evolution of harmonic mappings of Riemannian surfaces. *Comment. Math. Helv.*, 60(4) :558–581, 1985.

[180] A. M. Stuart and A. R. Humphries. Model problems in numerical stability theory for initial value problems. *SIAM Rev.*, 36(2) :226–257, 1994.

[181] J. B. Swift and P. C. Hohenberg. Hydrodynamic fluctuations at the convective instability. *Phys. Rev. A*, 15 :319–329, 1977.

[182] M. Taniguchi. The uniqueness and asymptotic stability of pyramidal traveling fronts in the Allen-Cahn equations. *J. Differential Equations*, 246(5) :2103–2130, 2009.

[183] R. Temam. *Infinite-dimensional dynamical systems in mechanics and physics*, volume 68 of *Applied Mathematical Sciences*. Springer-Verlag, New York, second edition, 1997.

[184] V. Thomée. *Galerkin finite element methods for parabolic problems*, volume 25 of *Springer Series in Computational Mathematics*. Springer-Verlag, Berlin, second edition, 2006.

[185] P. Topping. Reverse bubbling and nonuniqueness in the harmonic map flow. *Int. Math. Res. Not.*, (10) :505–520, 2002.

[186] P. Topping. Winding behaviour of finite-time singularities of the harmonic map heat flow. *Math. Z.*, 247(2) :279–302, 2004.

[187] A. Visintin. *Models of phase transitions*. Progress in Nonlinear Differential Equations and their Applications, 28. Birkhäuser Boston Inc., Boston, MA, 1996.

[188] S. M. Wise, C. Wang, and J. S. Lowengrub. An energy-stable and convergent finite-difference scheme for the phase field crystal equation. *SIAM J. Numer. Anal.*, 47(3) :2269–2288, 2009.

[189] H. Wu and S. Zheng. Convergence to equilibrium for the Cahn-Hilliard equation with dynamic boundary conditions. *J. Differential Equations*, 204(2) :511–531, 2004.

[190] M. Yari. Attractor bifurcation and final patterns of the n-dimensional and generalized Swift-Hohenberg equations. *Discrete Contin. Dyn. Syst. Ser. B*, 7(2) :441–456 (electronic), 2007.