Convergence d'un schéma numérique pour l'équation de Cahn-Hilliard avec des conditions aux limites dynamiques

Flore NABET, I2M, Aix Marseille Université

Mots-clés : modèle de Cahn-Hilliard, conditions dynamiques, volumes finis, convergence

Le but de ce travail est l'analyse de convergence d'un schéma volumes finis pour le modèle de Cahn-Hilliard diphasique associé à des conditions aux limites dynamiques. Le problème est le suivant :
On cherche la concentration d'une des phases $c : (0,T) \times \Omega \to \mathbb{R}$ satisfaisant :

$$\begin{cases} \partial_t c = \Delta\mu, & \text{dans } (0,T)\times\Omega; \\ \mu = -\Delta c + f_b'(c), & \text{dans } (0,T)\times\Omega; \\ \partial_t c_\Gamma = \Delta_\parallel c_\Gamma - f_s'(c_\Gamma) - \partial_n c, & \text{sur } (0,T)\times\Gamma; \\ \partial_n \mu = 0, & \text{sur } (0,T)\times\Gamma; \\ c(0,.) = c_0, & \text{dans } \Omega; \end{cases} \tag{1}$$

où Ω est un ouvert régulier, borné et connexe de $\mathbb{R}^d$ de frontière Γ, $\Delta_\parallel$ représente l'opérateur de Laplace-Beltrami, c_Γ est la trace de c sur Γ et $T > 0$. Les termes f_b et f_s sont non linéaires et représentent respectivement les potentiels volumique et surfacique de Cahn-Hilliard.
L'équation de Cahn-Hilliard est très importante en science des matériaux et décrit le processus de séparation de phases dans des alliages métalliques binaires. Elle joue également un rôle majeur dans les modèles de champs de phase en mécanique des fluides complexes par exemple. La condition de Neumann sur le potentiel chimique μ est naturelle car elle rend compte du fait qu'il n'y a aucun flux de masse à travers la frontière. La condition aux limites pour la concentration que l'on trouve dans la littérature est souvent la condition de Neumann homogène. Cependant, cette condition impose que l'interface soit orthogonale au bord du domaine ce qui n'est pas toujours le cas (en particulier lorsqu'un fluide déplace un second fluide non miscible). Pour remédier à ceci, des physiciens [2] ont récemment introduit ces conditions aux limites dynamiques qui permettent de mieux modéliser les effets de paroi.
On pourra se reporter à [3] pour des résultats théoriques sur le système de Cahn-Hilliard (1).
L'un des principales difficultés de ce modèle réside dans le fait que la condition aux limites sur c est une équation parabolique, non linéaire (du fait du potentiel de surface f_s), posée sur le bord et couplée avec l'intérieur du domaine par la dérivée normale de c. De plus, l'équation dans Ω est une équation parabolique, non linéaire (dûe au potentiel de Cahn-Hilliard f_b), du 4$^{\text{ème}}$ ordre.
Le choix d'utiliser une méthode volumes finis pour la discrétisation en espace du système (1) vient du fait que le couplage entre Ω et sa frontière se fait alors naturellement par un terme de flux. De plus, cette méthode est bien adaptée à la géométrie courbe du domaine.
D'un point de vue numérique, bien que des résultats existent en différences finies ainsi qu'en éléments finis (voir [1, 2] par exemple), il n'y avait pas jusqu'ici de preuve de convergence dans le cadre d'un domaine Ω quelconque.
La compléxité du modèle (non linéarités, couplage,...) nous impose l'utilisation de compacité forte dans $L^2(\Omega)$ et $L^2(\Gamma)$. Dans ce but, on introduit une nouvelle estimation de translation en espace pour les solutions approchées qui nous permet d'obtenir une limite dans $H^1(\Omega)$ dont la trace est dans $H^1(\Gamma)$.
Nos résultats seront illustrés par des simulations numériques.

Références

[1] Cherfils, Petcu and Pierre *A numerical analysis of the Cahn-Hilliard equation with dynamic boundary conditions*, Discrete and Continuous Dynamical Systems, Vol 27, 1511–1533, 2010.

[2] Fischer, Maass and Dieterich, *Novel Surface Modes in Spinodal Decomposition*, American Physical Society, Vol. 79, Issue 5, 893–896, 1997.

[3] Goldstein,Miranville and Schimperna, *A Cahn-Hilliard model in a domain with non-permeable walls*, Physica D , Vol. 240, 754–766, 2011.

Flore NABET, Aix Marseille Université, CNRS, Centrale Marseille, I2M, UMR 7373, 13453 Marseille, France
flore.nabet@univ-amu.fr