Mini-symposium MoChaPha
Etudes théoriques et numériques de modèles de champ de phase

Résumé

L'utilisation de modèles de champ de phase a pris une grande ampleur récemment : ils sont présents dans la physique des matériaux, en chimie, en biologie, en astrophysique, en écologie, etc. Le but de ce mini-symposium est de réunir des chercheurs travaillant sur différents aspects de ces problèmes, afin de présenter plusieurs champs d'application et plusieurs approches possibles. Nous sommes notamment intéressés par les nouvelles recherches dans la modélisation, ainsi que l'étude théorique et numérique de modèles de type Cahn-Hilliard ou Allen-Cahn.

Organisateur(s)

1. **Madalina Petcu**, LMA, Université de Poitiers.
2. **Morgan Pierre**, LMA, Université de Poitiers.

Liste des orateurs

1. **Clara ALKOSSEIFI**, Université de Picardie Jules Verne (UPJV) et Université Libanaise (UL)
   Titre : Méthode bigrilles à séparation d'échelle pour les équations de champ de phase d'un mélange binaire de fluide en éléments finis.
2. **Ahmad MAKKI**, LMA, Université de Poitiers
   Titre : On the Viscous Allen-Cahn and Cahn-Hilliard systems with Willmore regularization.
3. **Flore NABET**, CMAP, Ecole polytechnique
   Titre : Approximation Volumes Finis d'un modèle de type Cahn-Hilliard avec mobilité dégénérée.
4. **Shuiran PENG**, LMA, Université de Poitiers
   Titre : Higher-order anisotropic models in phase separation.

Madalina Petcu, Université de Poitiers, Laboratoire de Mathématiques et Applications, UMR CNRS 7348, 11 Boulevard Marie et Pierre Curie, Téléport 2 - BP 30179, 86962 Chasseneuil Futuroscope Cedex, `madalina.petcu@math.univ-poitiers.fr`
Morgan Pierre, Université de Poitiers, Laboratoire de Mathématiques et Applications, UMR CNRS 7348, 11 Boulevard Marie et Pierre Curie, Téléport 2 - BP 30179, 86962 Chasseneuil Futuroscope Cedex, `morgan.pierre@math.univ-poitiers.fr`
Clara Alkosseifi, Laboratoire Amiénois de Mathématique Fondamentale et Appliquée (LAMFA), Université de Picardie Jules Verne (UPJV), 33, rue Saint-Leu, 80039 Amiens et Laboratoire de Physique Appliquée (LPA), Faculté des Sciences II, Université Libanaise (UL), `clara.al.kosseifi@u-picardie.fr`
Ahmad Makki, Université de Poitiers, Laboratoire de Mathématiques et Applications, UMR CNRS 7348, 11 Boulevard Marie et Pierre Curie, Téléport 2 - BP 30179, 86962 Chasseneuil Futuroscope Cedex, `ahmad.makki@math.univ-poitiers.fr`
Flore Nabet, CMAP, Ecole polytechnique, CNRS, Université Paris-Saclay, 91128, Palaiseau, France, `flore.nabet@polytechnique.edu`
Shuiran Peng, Université de Poitiers, Laboratoire de Mathématiques et Applications, UMR CNRS 7348, 11 Boulevard Marie et Pierre Curie, Téléport 2 - BP 30179, 86962 Chasseneuil Futuroscope Cedex, `shuiran.peng@math.univ-poitiers.fr`

1 Méthode bigrilles à séparation d'échelle pour les équations de champ de phase d'un mélange binaire de fluide en éléments finis (C. Alkosseifi)

Mots-clés : méthode bigrilles, séparation d'échelle, équations de champs de phase, éléments finis
En collaboration avec : Hyam ABBOUD, Jean-Paul CHEHAB et Youssef ZAATAR.

Nous présentons ici des schémas bigrilles en éléments finis pour la simulation d'EDP de réaction-diffusion, particulièrement de type champs de phase.

On se donne deux espaces d'approximations en éléments finis : V_h, l'espace fin et v_H l'espace grossier. Les nouveaux schémas proposés reposent sur une décomposition de l'approximation de la solution u sur l'espace fin V_h en partie principale $\bar{u}$ et partie fluctuante $\tilde{u}$: $u = \bar{u} + \tilde{u}$, où $\bar{u} \in V_H$ est le prolongé L^2 de l'approximation. $\tilde{u} \in V_h$ est donc une erreur d'interpolation qui contient les modes élevés de la solution, c'est à dire des composantes de petit ordre, comparées à celles principales (u et $\bar{u}$) qui sont de l'ordre de la solution physique. Dans ce cadre nous introduisons des schémas à deux grilles de type prédiction-correction consistant à calculer d'abord une approximation de la solution sur V_H par un schéma implicite puis, après prolongation de calculer la partie fluctuante dans V_h par un schéma simplifié, [4, 5]. Cette approche permet de stabiliser le schéma sur V_h sans compromettre la consistance [3].

Nous appliquons cette stratégie à des problèmes de type Allen-Cahn ou Cahn Hilliard [2] et mettons en avant une réduction du temps CPU de calcul et une stabilisation plus fine de l'équation. Nous considérons différent type d'EF (P_1, P_2).

Références

[1] H. Abboud, V. Girault and T. Sayah, *A second order accuracy for a full discretized time-dependent Navier-Stokes equations by a two-grid scheme*, Numer. Math. DOI 10. 1007/s00211-009-0251-5.

[2] A. Bertozzi, S. Esedoglu, and A. Gillette, *Inpainting of binary images using the Cahn-Hilliard equation*, IEEE Trans. Image Proc. (2007), 285–291.

[3] J.-P. Chehab and B. Costa, *Multiparameter schemes for evolutionary equations*, Numerical Algorithms 34 : 245–257, 2003.

[4] C. Calgaro, J.-P. Chehab, J. Laminie and E. Zahrouni, *Séparation des échelles et schémas multiniveaux pour les équations d'ondes non-linéaires*, ESAIM : Proceedings, May 2009, Vol. 27, p. 180–208.

[5] M. Marion, J. Xu, *Error Estimates on a New Nonlinear Galerkin Method Based on Two-Grid Finite Elements*, SIAM Journal on Numerical Analysis Vol. 32, No. 4 (Aug., 1995), pp. 1170–1184.

[6] J. Shen, X. Yang, *Numerical Approximations of Allen-Cahn and Cahn-Hilliard Equations*, DCDS, Series A, (28), (2010), pp 1669–1691.

2 On the viscous Allen-Cahn and Cahn-Hilliard systems with Willmore regularization (A. Makki)

We consider the viscous Allen-Cahn and Cahn-Hilliard models with an additional term called the nonlinear Willmore regularization. First, we are interested in the well-posedness of these two models. Furthermore, we prove that both models possess a global attractor. In addition, as far as the viscous Allen-Cahn equation is concerned, we construct a robust family of exponential attractors, i.e. attractors which are continuous with respect to the perturbation parameter. Finally, we give some numerical simulations which show the effects of the viscosity term on the anisotropic and isotropic Cahn-Hilliard equation [1][2].

Références

[1] A. Makki, *On the viscous Allen-Cahn and Cahn-Hilliard systems with Willmore regularization*, Applications of Mathematics, 2016.

[2] A. Makki and A. Miranville, *Existence of solutions for anisotropic Cahn-Hilliard and Allen-Cahn systems in higher space dimensions*, Discrete Contin. Dyn. Syst. Ser. S 9 (2016), 759–775.

3 Approximation Volumes Finis d'un modèle de type Cahn-Hilliard avec mobilité dégénérée (F. Nabet)

Mots-clés : modèle de Cahn-Hilliard, mobilité dégénérée, méthode non-linéaire
En collaboration avec : Clément CANCÈS.
Dans ce travail on s'intéresse à l'étude d'un écoulement diphasique incompressible non-miscible de type Cahn-Hilliard. Ce modèle, proche de celui proposé dans [1], permet de prendre en compte une mobilité dégénérée, c'est à dire qui s'annule dans les phases pures.
Il présente de fortes similarités avec les modèles classiques d'écoulements diphasiques en milieu poreux (voir par exemple [2]). En effet, dans les deux cas, ces modèles peuvent s'interpréter comme un flot de gradient d'une énergie singulière dans des espaces métriques de type Wasserstein.
On propose ici un schéma de type volumes finis, utilisant une approximation à deux points des flux, pour la discrétisation spatiale de ce modèle. Ce schéma numérique conserve au niveau discret les propriétés fondamentales du modèle continu. Notamment la concentration de chacune des phases reste comprise entre 0 et 1, l'énergie libre du système est dissipée et l'entropie de Boltzmann est bornée. On montre alors l'existence d'une solution au problème discret.
Nous présenterons également des simulations numériques illustrant le comportement du modèle et du schéma numérique.

Références

[1] J.W. Barrett, J.F. Blowey and H. Garcke, *On fully practical finite element approximations of degenerate Cahn-Hilliard systems*, M2AN Math. Model. Numer. Anal., Vol. 35, Issue 4, 713–748, 2001.

[2] R. Eymard, R. Herbin and A. Michel, *Mathematical study of a petroleum-engineering scheme*, M2AN Math. Model. Numer. Anal., Vol. 37, Issue 6, 937–972, 2003.

4 Higher-order anisotropic models in phase separation (S. Peng)

Joint work with : Laurence CHERFILS et Alain MIRANVILLE.
The aim of this talk is to present higher-order (in space) Allen-Cahn and Cahn-Hilliard models, corresponding to a modified free energy proposed in [1], in which the temperature is omitted, namely,

$$\Psi_{\mathrm{HOGL}} = \int_\Omega \Big(\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{k}\sum_{|\alpha|=i} a_\alpha |\mathcal{D}^\alpha u|^2 + F(u)\Big)\, dx,\ \ k \in \mathbb{N}, \tag{1}$$

where, for $\alpha = (k_1, k_2, k_3) \in (\mathbb{N}\cup\{0\})^3$, $|\alpha| = k_1 + k_2 + k_3$, and, for $\alpha \neq (0,0,0)$, $\mathcal{D}^\alpha = \dfrac{\partial^{|\alpha|}}{\partial x_1^{k_1}\partial x_2^{k_2}\partial x_3^{k_3}}$ (it is agreed that $\mathcal{D}^{(0,0,0)}v = v$). Then the models read, for $k \in \mathbb{N}$, $k \geq 2$,

$$\text{Allen} - \text{Cahn equation :} \qquad \frac{\partial u}{\partial t} + \sum_{i=1}^{k}(-1)^i \sum_{|\alpha|=i} a_\alpha \mathcal{D}^{2\alpha}u + f(u) = 0 \tag{2}$$

and

$$\text{Cahn} - \text{Hilliard equation :} \qquad \frac{\partial u}{\partial t} - \Delta\sum_{i=1}^{k}(-1)^i \sum_{|\alpha|=i} a_\alpha \mathcal{D}^{2\alpha}u - \Delta f(u) = 0. \tag{3}$$

where, for problem (2), $\mathcal{D}^\alpha u = 0$ on $\partial\Omega$, $|\alpha| \leq k-1$ and $u|_{t=0} = u_0$; for problem (3), $\mathcal{D}^\alpha u = 0$ on $\partial\Omega$, $|\alpha| \leq k$ and $u|_{t=0} = u_0$. In particular, we will discuss their well-posedness results, and also the dissipativity of their solution operators, as well as the existence of the global attractor. Moreover, for the

Allen-Cahn models with periodic boundary conditions, numerical simulations which illustrate the effects of the higher-order terms and the anisotropy, will be displayed.
This article is accepted in Advances in Nonlinear Analysis.

Références

[1] G. Caginalp and E. Esenturk, *Anisotropic phase field equations of arbitrary order, Discrete Contin. Dyn. Systems S, 4 311–350, 2011.*

[2] S. Torabi, J. Lowengrub, A. Voigt and S. Wise, *A new phase-field model for strongly anisotropic systems, Proc. R. Soc. A, 465 1337–1359, 2009.*

[3] L. Cherfils, A. Miranville and S. Peng, *Higher-order models in phase separation, J. Appl. Anal. Comput., 7 39–56, 2016.*

[4] L. Cherfils, A. Miranville and S. Peng, *Higher-order Allen-Cahn models with logarithmic nonlinear terms, SSDC, 69 247–263, 2016.*

[5] L. Cherfils, A. Miranville and S. Zelik, *The Cahn-Hilliard equation with logarithmic potentials, Milan J. Math, 79 561–596, 2011.*