ETUDE DE SCHÉMAS VOLUMES FINIS POUR LE MODÈLE DE CAHN-HILLIARD

FRANCIS FILBET

Les méthodes volumes finis sont généralement considérées comme étant bien adaptées pour la simulation numérique de lois de conservations avec éventuellement un terme source. Elles ont été utilisées en mécanique des fluides, en modélisation de transfert de masse et de chaleur ou en ingénierie du pétrole.

Une loi de conservation exprime la conservation d'une quantité $u(t,x)$, par exemple l'énergie, la masse ou le nombre de particules. L'équation de conservation prend la forme suivante

$$\frac{\partial u}{\partial t} + div\mathbf{J}(t,x) = 0, \tag{1}$$

en tout point $x \in \Omega$ et tout temps $t \geq 0$ où la conservation de la quantité u est décrite. À l'aide de considérations physiques, le problème est fermé une fois que nous avons introduit une loi constitutive qui relie f et $\mathbf{J}$. L'équation (1) peut être vue comme l'expression de la conservation de f sur un domaine infinitésimal.

Dans le but de construire une discrétisation en espace par un méthode volumes finis, un maillage $\mathcal{M}$ du domaine de calcul $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ est introduit. Le maillage est tel que $\overline{\Omega} = \cup_{K\in\mathcal{M}}\overline{K}$, où un élément de $\mathcal{M}$, noté par K, est un ouvert de Ω et est appelé volume de contrôle. Le principe de base de la méthode consiste à intégrer l'équation (1) sur chaque K du maillage $\mathcal{M}$. Nous obtenons une loi de conservation sous une forme non locale écrite sur le volume K et en employant par exemple un schéma d'Euler rétrograde, il vient

$$\int_K \frac{u(t^{n+1},x) - u(t^n,x)}{\Delta t} dx + \int_{\partial K} \mathbf{J}(t^n,x)\cdot n_K(x)\, d\gamma(x) dt = 0.$$

Précisons alors deux propriétés importantes des schémas volumes finis,

(1) la conservation, c'est-à-dire $J^n_{K,L} = -J^n_{L,K}$, pour K et $L \in \mathcal{M}$ et pour tout $n \geq 0$.
(2) la consistance de l'approximation de $\mathbf{J}(t^n,x)\cdot n_K(x)$, qui doit être définie en fonction de la relation entre $\mathbf{J}$ et l'inconnue f.

À partir de ces propriétés et des estimations de stabilités sur l'approximation numérique, nous prouvons la convergence de la solution numérique obtenue vers la solution du problème continu.

Dans ce travail, nous considérons le modèle de Cahn-Hilliard afin d'étudier les modèles de transition de phases (formation de réseaux, d'ilots, d'essaims, etc). Das ce cas, le flus est donné par

$$\mathbf{J}(t^n,x) = \mathbf{B}(u)\nabla w$$

avec $\mathbf{B}$ une matrice symétrique définie positive et

$$w = -\gamma \Delta u + \Psi'(u)$$

où $\Psi(u)$ est l'énergie libre.

Le premier objectif est de mettre au point un schéma de type volumes finis pour ce modèle de manière à préserver les principales propriétés (conservation de la masse, décroissance de l'énergie). Il s'agit de contribuer à un programme de recherche pour la construction de méthodes discrètes permettant de décrire correctement le comportement en temps grand la solution numérique.

- Il s'agit donc d'étudier la solution du système de C-H, laquelle doit satisfaire
$$\frac{d\epsilon}{dt} \leq 0$$
où
$$\epsilon(t) = \int_\Omega \frac{\gamma}{2} |\nabla u(t,y)|^2 + \Psi(u(t,y)) + dy.$$
L'analogue discret permettrait d'assurer le bon comportement de la solution sur des temps longs. Le premier objectif de ce travail est de démontrer une propriété similaire pour une solution numérique.
- Dans un premier temps, il s'agit d'tudier la dynamique plus simple d'un modèle en dimension un et de proposer un schéma adapté.
- Il s'agit aussi de développer un algorithme efficace qui permettrait de résoudre ce problème sous une condition peu contriagnante sur le pas de temps. Nous devons traiter un problème differentiel d'ordre quatre (une CFL naturelle pour un schéma explicite serait $\Delta t \leq C \Delta x^4$, ce qui est très restrictif lorsque Δx devient petit).
- Il s'agira enfin de traiter les nombreux domaines d'applications en biologie (formation d'essaim, d'îlots).

References

[1] C. Chainais-Hillairet, J.-G. Liu et Y.-J. Peng, Finite volume scheme for multi-dimensional drift-diffusion equations and convergence analysis, *ESAIM Math. Model. Numer. Anal.* **37** (2003), 319–338.

[2] R. Eymard, T. Gallouët and R. Herbin, *Finite volume methods*, in Handbook of numerical analysis, Vol. VII, 713–1020, Handb. Numer. Anal., VII, North-Holland, Amsterdam, 2000.

[3] F. Filbet, A Finite Volume Scheme for the Patlak-Keller-Segel Chemotaxis Model, submitted to *Numeriche Mathematik*.

[4] P. Smerika J. Sci. Comput. (2006)