Instabilités de forme en croissance cristalline

Morgan Brassel
morgan.brassel@imag.fr

sous la direction de

Éric Bonnetier
Pierre Saramito

Table des matières

Mouvements géométriques d'interfaces 7

1 Mouvement par courbure moyenne 9
- 1.1 Définition et résultats connus 9
- 1.2 Approche par champ de phase : l'équation d'Allen–Cahn 11
- 1.3 Schémas numériques utilisés 14
- 1.4 Tests numériques préliminaires 20
- 1.5 Quelques exemples de résultats numériques 30

2 Lien avec le périmètre 35
- 2.1 Définition du périmètre d'un ensemble 35
- 2.2 Un problème isopérimétrique 37
- 2.3 Notion de dérivation par rapport au domaine 39
- 2.4 Approximation du périmètre par champ de phase 43
- 2.5 Retour à l'équation d'Allen–Cahn 48

3 La question de la conservation du volume 49
- 3.1 Pénalisation de la contrainte 50
- 3.2 Méthode de Lagrangien 61
- 3.3 Mouvement par courbure moyenne conservé 68
- 3.4 Quelques exemples de résultats numériques 73

4 Mouvement par courbure moyenne forcé 79
- 4.1 Forçage normal à l'interface 80
- 4.2 Forçage vectoriel 84

5 Mouvement par courbure moyenne anisotrope 87
- 5.1 Quelques définitions 87
- 5.2 Modèle de champ de phase anisotrope 92
- 5.3 Schéma de discrétisation 94
- 5.4 Résultats numériques 96
- 5.5 Anisotropies non convexes 98

Applications en croissance cristalline 101

6 Croissance hétéro-épitaxiale et instabilité de Grinfeld 103
6.1 Rappels sur le contexte physique 103
6.2 Un modèle variationnel 108

7 Simulation numérique de l'instabilité de Grinfeld 117
7.1 Méthode numérique et algorithme de résolution 118
7.2 Résultats de simulations 123

8 Un modèle incluant le substrat 131
8.1 Présentation du modèle 131
8.2 Méthode numérique et simulations 136

9 Un modèle pour l'évolution des surfaces vicinales 143
9.1 Contexte physique 143
9.2 Description du modèle 146
9.3 Méthode de résolution numérique 148
9.4 Résultat et analyse des simulations 149

10 Le champ de phase comme outil d'optimisation globale 157
10.1 Présentation du problème modèle 158
10.2 Construction d'une fonction relaxée 159
10.3 Relevé de la position de l'interface 161

Bibliographie 169

Introduction

Ce manuscrit est consacré à l'étude des instabilités morphologiques susceptibles d'intervenir en croissance cristalline.

La cristallisation, c'est-à-dire le processus de formation d'un cristal, peut se décomposer en deux étapes. La première est la germination, qui correspond à l'apparition d'une phase cristalline solide dans un milieu liquide ou gazeux. La seconde est la croissance, au cours de laquelle les premiers germes vont grossir petit à petit pour effectivement former le réseau d'atomes qui constitue le cristal. Le processus de croissance peut aussi bien être naturel qu'artificiel.

Le procédé industriel qui nous intéressera en particulier est l'épitaxie. Ce terme regroupe l'ensemble des techniques qui consistent en la déposition couche par couche d'un film cristallin sur un substrat. L'épitaxie par jets moléculaires, ou *Molecular Beam Epitaxy* (MBE) en anglais, est un mode d'épitaxie en phase vapeur incontournable dans le domaine de la micro-électronique. Il intervient en effet dans la fabrication des circuits intégrés qui composent les puces électroniques. Le matériau le plus utilisé pour ce type d'applications reste aujourd'hui, et de très loin, le silicium.

La compréhension et le contrôle des mécanismes physiques qui entrent en jeu durant l'épitaxie sont d'une importance capitale. Les enjeux, à la fois technologiques et économiques, sont de premier ordre. Le travail effectué dans cette thèse s'inscrit principalement dans cette optique, et l'objectif est de mieux appréhender certaines des instabilités de forme qui apparaissent dans les films minces épitaxiés.

Mouvements d'interfaces

D'un point de vue mathématique, les problèmes que nous aurons à considérer sont des problèmes à frontières libres, la surface du film étant généralement la principale inconnue dans les modèles de croissance cristalline. C'est la raison pour laquelle toute la première partie de ce manuscrit est consacrée à la question des mouvements d'interfaces.

Dans le chapitre 1, nous étudions l'exemple classique du mouvement par courbure moyenne

$$V_n = -H,$$

où V_n désigne la vitesse normale de l'interface et H sa courbure moyenne. En vue d'effectuer des simulations numériques sur ce mouvement, nous en présentons une

approximation par la méthode de champ de phase. Ceci nous amène à considérer l'équation d'Allen–Cahn [3]

$$\varepsilon\frac{\partial\phi}{\partial t} - \varepsilon\Delta\phi + \frac{1}{\varepsilon}W'(\phi) = 0,$$

où ε est un petit paramètre strictement positif, et W un potentiel positif ne s'annulant qu'en 0 et en 1. L'approche par champ de phase repose sur une description implicite de l'interface. La fonction ϕ prendra essentiellement les valeurs 0 et 1 dans tout l'espace, en variant continûment d'une de ces valeurs à l'autre sur une zone de taille ε. L'interface sera repérée par la ligne de niveau $\{\phi = \frac{1}{2}\}$. Un avantage majeur de cette approche est qu'elle permet de gérer sans effort les changements de topologie. Nous en faisons la preuve sur quelques exemples numériques.

Le chapitre 2 est consacré au lien entre le mouvement par courbure moyenne, l'équation d'Allen–Cahn et le périmètre d'un ensemble. Nous y introduisons le problème de la minimisation du périmètre à volume fixé. Le résultat essentiel est ensuite le théorème de Modica–Mortola [75, 74], qui assure la Γ-convergence d'une suite de fonctionnelles

$$F_\varepsilon(\phi) = \int_Q \left(\frac{\varepsilon}{2}|\nabla\phi|^2 + \frac{1}{\varepsilon}W(\phi)\right) dx$$

vers la fonction périmètre.

Nous étudions, dans le chapitre 3, la question de la conservation pratique du volume. Nous comparons deux approches : une procédure de pénalisation et une méthode de Lagrangien. Cette dernière nous conduit finalement à considérer un nouveau mouvement d'interfaces, le mouvement par courbure moyenne conservé (*conserved mean curvature flow*)

$$V_n = -H + \bar{H},$$

où $\bar{H}$ désigne la valeur moyenne de H sur la surface. L'approximation par champ de phase de ce nouveau mouvement est donnée par l'équation d'Allen–Cahn non locale

$$\varepsilon\frac{\partial\phi}{\partial t} - \varepsilon\Delta\phi + \frac{1}{\varepsilon}W'(\phi) - \frac{1}{\varepsilon}\frac{1}{|Q|}\int_Q W'(\phi)\,dx = 0.$$

Le chapitre 4 est consacré au mouvement par courbure moyenne forcé. Nous envisageons deux situations. Dans la première, le terme de forçage est un scalaire porté par la normale à la courbe :

$$V_n = -H + g.$$

Ceci conduit à l'équation d'Allen–Cahn avec second membre

$$\varepsilon\frac{\partial\phi}{\partial t} - \varepsilon\Delta\phi + \frac{1}{\varepsilon}W'(\phi) = \lambda_W g,$$

où λ_W est une constante liée au potentiel W, et donnée par le théorème de Modica–Mortola. Dans la seconde, le forçage est vectoriel :

$$\boldsymbol{V} = -H\boldsymbol{n} + \boldsymbol{g},$$

et nous avons à considérer un terme de transport non linéaire dans l'approximation par champ de phase

$$\varepsilon\frac{\partial\phi}{\partial t} - \varepsilon\Delta\phi + \frac{1}{\varepsilon}W'(\phi) - \lambda_W \boldsymbol{g}\cdot\frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|} = 0.$$

Dans le chapitre 5, nous nous intéressons à la question primordiale de l'anisotropie dans le mouvement par courbure moyenne. Nous y définissons les notions de périmètre, de normale et de courbure anisotropes. Les concepts de diagramme de Frank et de forme de Wulff sont également introduits. En notant γ la fonction qui définit l'anisotropie, l'équation du mouvement devient

$$V_{n_\gamma} = -H_\gamma,$$

où H_γ désigne la courbure moyenne anisotrope, et V_{n_γ} la vitesse de l'interface dans la direction normale anisotrope $\boldsymbol{n}_\gamma$. L'équation d'Allen–Cahn correspondante fait intervenir un opérateur de diffusion anisotrope :

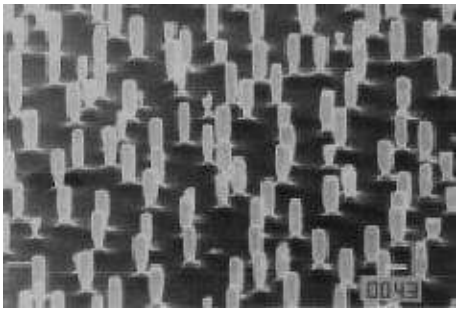
$$\varepsilon\frac{\partial\phi}{\partial t} - \varepsilon\,\mathrm{div}\Big(\gamma(\nabla\phi)\,\nabla\gamma(\nabla\phi)\Big) + \frac{1}{\varepsilon}W'(\phi) = 0.$$

Nous présentons des simulations numériques basées sur cette équation, et nous évoquons brièvement le cas d'anisotropies non convexes.

La seconde partie du manuscrit présente le travail réalisé sur les applications en croissance cristalline. Nous nous penchons tout d'abord sur le phénomène d'instabilité de Grinfeld dans les films cristallins hétéro-épitaxiés.

Instabilité de Grinfeld

En croissance cristalline, on parle d'hétéro-épitaxie lorsque le film et le substrat sont de natures chimiques différentes. Un exemple connu pour ses applications en micro-électronique est le système SiGe/Si, ou silicium–germanium sur silicium. En hétéro-épitaxie, le décalage entre le réseau atomique du film et celui du substrat induit des contraintes élastiques à l'intérieur du film. Pour relaxer une partie de l'énergie associée à ces contraintes, les atomes du film peuvent diffuser le long de sa surface libre, et créer ainsi des configurations plus favorables du point de vue énergétique. Ce mécanisme de diffusion de surface génère une instabilité dans la forme du cristal. Il s'agit de l'instabilité de Grinfeld, ou d'Asaro–Tiller–Grinfeld [6, 60]. Elle peut aboutir à la formation d'îlots en surface du film, et ces îlots peuvent



Un exemple d'îlots cristallins.

ensuite interagir entre eux selon des mécanismes complexes. On parle alors d'auto-organisation du système cristallin.

Selon les applications, cette auto-organisation peut être souhaitée ou non. L'apparition des instabilités est, par exemple, une limitation à la production massive de puces SiGe, le cristal devant être le plus plat possible dans cette situation. À l'inverse, l'auto-organisation, parfaitement maÎtrisée, permettrait la fabrication de structures rendues très intéressantes par leur taille réduite (plots quantiques).

L'instabilité de Grinfeld fait l'objet des chapitres 6, 7 et 8 de ce manuscrit.

La plupart des modèles dans la littérature définissent la surface libre du film comme une courbe paramétrée Γ, qui doit évoluer selon une loi géométrique faisant intervenir la courbure moyenne d'une part, et un terme local d'énergie élastique d'autre part :

$$V_n = D\frac{\partial^2}{\partial s^2}\Big(\gamma H + \tfrac{1}{2}\,\boldsymbol{\sigma} : e(\boldsymbol{u})_{|\Gamma}\Big).$$

L'inconvénient de cette approche est qu'elle suppose la régularité de la surface du cristal. Or, les observations expérimentales montrent des formes d'équilibre souvent singulières, présentant des fissures, ou des *cusps*.

Bonnetier et ses collaborateurs [11, 10] ont cherché à mettre en place un cadre mathématique permettant de prendre en compte de telles singularités dans la forme du cristal. Le modèle variationnel qu'ils introduisent définit les formes d'équilibre comme minima d'une fonctionnelle d'énergie libre, somme d'une énergie élastique volumique et d'une énergie surfacique :

$$E(\Omega, \boldsymbol{u}) = K\int_\Omega \boldsymbol{A}e(\boldsymbol{u}) : e(\boldsymbol{u})\,dx + L(\partial\Omega).$$

Ce modèle est détaillé dans le chapitre 6. Les principaux résultats des articles [11] et [10] y sont résumés.

Dans le chapitre 7, nous présentons des simulations numériques réalisées à partir d'une approximation par champ de phase. Des observations expérimentales semblent indiquer que les instabilités d'origine élastique n'apparaissent que lorsque la couche de film déposée atteint une certaine épaisseur. Bonnetier, Falk et Grinfeld démontrent un résultat de stabilité cohérent avec ces observations, sur un modèle

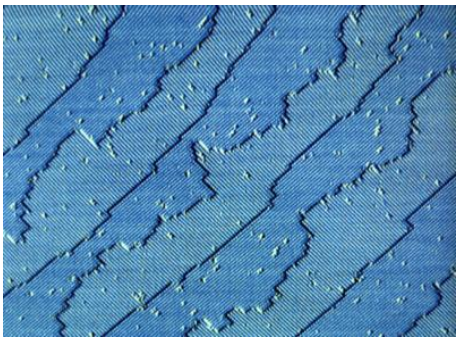
simplifié à une dimension [11]. Celui-ci permet d'affirmer qu'il existe une épaisseur moyenne critique en dessous de laquelle le film plat est la seule forme optimale. L'un des objectifs de nos simulations est de savoir si le modèle complet à deux dimensions étudié par Bonnetier et Chambolle [10] fait lui aussi apparaître une épaisseur critique.

Le chapitre 8 propose ensuite une extension du modèle, qui fait intervenir l'élasticité du substrat. Dans le modèle présenté au chapitre 6, le substrat n'intervient que par l'intermédiaire d'une condition de Dirichlet sur le déplacement élastique à l'interface film/substrat. Cela revient à considérer le substrat comme un matériau infiniment rigide, indéformable. Dans les modèles physiques microscopiques, l'affinité du film pour un substrat dépend de conditions géométriques de couplage entre les réseaux atomiques. Une partie des contraintes élastiques induites par ce couplage est localisée à la surface du substrat. Le substrat peut, par ailleurs, « transmettre » les interactions élastiques entre îlots. C'est pourquoi nous avons souhaité implémenter une condition de contact film/substrat plus réaliste. Notre amélioration consiste à inclure le substrat en tant que matériau élastique. L'interaction avec le film est alors modélisée par une condition sur le saut des contraintes normales au travers de l'interface film/substrat. Nous présentons les premières simulations numériques effectuées sur ce modèle.

Dans le chapitre 9, nous abordons une autre problématique classique en croissance cristalline, celle de la formation et de l'évolution des surfaces vicinales.

Évolution des surfaces vicinales

De l'échelle atomique à l'échelle « macroscopique » des îlots, il existe un grand nombre de descriptions possibles de la surface d'un cristal. Aux échelles intermédiaires, une approche mésoscopique classique consiste à représenter le cristal comme une succession de terrasses, séparées par des marches de hauteur mono-atomique.



Marches et terrasses en surface d'un cristal.
(Source : *Lagally Research Group*)

Une surface vicinale est une surface sur laquelle toutes les marches et les terrasses ont la même orientation. Au cours de la croissance, les surfaces vicinales vont évoluer

sous l'effet de la dynamique des marches. Selon les cas, des instabilités peuvent se produire. On peut ainsi assister à la mise en paquet de marches (*step bunching*), à la création de facettes (*facetting*) et à l'apparition de nouvelles directions de croissance.

Le chapitre 9 propose un modèle simplifié pour l'évolution des surfaces vicinales. L'objectif à terme sera de simuler la croissance au-delà de l'apparition des premières instabilités.

La dynamique des marches peut être décrite selon plusieurs échelles. Des modèles atomiques et des simulations numériques de dynamique moléculaire rendent compte de manière satisfaisante de l'évolution d'une marche unique, et de la dynamique locale d'adsorption des atomes. Les résultats de ces simulations ne sont cependant pas pertinents pour des échelles de temps et d'espace significatives dans l'étude de systèmes réels (quelques centaines de nanomètres pour les variables d'espace). Pour étudier comment la dynamique des marches détermine la morphologie d'un cristal à ces échelles, il faut s'intéresser à des modèles décrivant les marches de manière mésoscopique dans leur plan, mais préservant leur caractère atomique en hauteur. On parle de modèles « 2+1 ». Un modèle classique est le modèle BCF (Burton, Cabrera, Frank) [18]. Plus récemment, Pierre-Louis a proposé un modèle de champ de phase pour l'étude de la dynamique des marches [89].

Dans la lignée de ce travail, nous avons voulu proposer un modèle qui permette une description microscopique des marches, mais mésoscopique des facettes. Dans notre cas simplifié, les marches ne peuvent être qu'horizontales ou verticales, c'est-à-dire dirigées suivant les directions Ox ou Oy. Elles sont créées par l'intermédiaire d'un potentiel en boîte à œufs typique de ce genre de problèmes.

Une difficulté se pose immédiatement en pratique : le potentiel en boîte à œufs introduit de nombreux minima locaux dans l'énergie que nous considérons. Pour tenter malgré tout d'accéder au minimum global, nous proposons un algorithme inspiré par les techniques de recuit simulé. Cet algorithme semble être relativement fiable, bien qu'aucun résultat théorique ne garantisse, pour le moment, la convergence vers le minimum global. Notre stratégie consiste essentiellement à initialiser le calcul avec une valeur élevée du paramètre de champ de phase ε, et à progressivement diminuer cette valeur au cours des itérations.

Nous avons voulu étudier de façon plus détaillée cette utilisation de la méthode de champ de phase comme outil d'optimisation globale. C'est l'objet du chapitre 10.

Optimisation globale et champ de phase

Nous nous intéressons, dans le chapitre 10, au cas simple de la minimisation d'une fonction de $\mathbb{R}$ dans $]0, +\infty[$. La démarche que nous adoptons est avant tout expérimentale. À l'aide de quelques tests numériques, nous tentons de comprendre comment le choix d'une valeur élevée de ε permet de relaxer le problème initial, et d'échapper aux minima locaux.

Première partie

Mouvements géométriques d'interfaces

Chapitre 1

Mouvement par courbure moyenne

Le mouvement par courbure moyenne est un exemple bien connu de mouvement géométrique d'interfaces. Comme nous le verrons dans la suite de ce manuscrit, il joue un rôle prépondérant en croissance cristalline, et il interviendra tout naturellement dans les modèles que nous présenterons dans la partie II.

Le but de ce premier chapitre est, avant tout, de présenter et de valider les schémas numériques que nous avons choisi d'utiliser pour la discrétisation du mouvement par courbure moyenne. Nos algorithmes seront en effet utilisés à de nombreuses reprises par la suite, et il est indispensable que notre implémentation soit la plus robuste possible.

Nous rappelons, dans un premier temps, la définition du mouvement par courbure moyenne, et donnons un aperçu des résultats obtenus dans son étude. Pour plus de précisions sur ces résultats, nous renvoyons aux revues d'Elliott [33] et de Deckelnick, Dziuk et Elliott [30], ainsi qu'aux nombreuses références qu'elles contiennent.

Nous introduisons ensuite l'équation d'Allen–Cahn, qui apparaît dans l'approche par la méthode de champ de phase du mouvement par courbure moyenne, et présentons brièvement les résultats connus sur cette équation. Là encore, les revues [33] et [30] pourront être consultées.

Nous poursuivons en décrivant la méthode numérique que nous avons utilisée pour discrétiser l'équation d'Allen–Cahn et simuler le mouvement par courbure moyenne.

Nous terminons en présentant les nombreux tests que nous avons effectués pour valider nos algorithmes et notre code de calcul, et nous proposons quelques exemples de résultats obtenus.

1.1 Définition et résultats connus

Soit $\Gamma(t)$ une hypersurface fermée de $\mathbb{R}^N$ de codimension un, supposée être la frontière d'un ensemble $\Omega(t)$, ouvert borné de $\mathbb{R}^N$. On note $\boldsymbol{n}$ le vecteur normal à $\Gamma(t)$ sortant de $\Omega(t)$. On dit que la surface $\Gamma(t)$ évolue par courbure moyenne si elle

suit la loi d'évolution géométrique suivante :

$$V_n = -H, \tag{1.1}$$

où V_n désigne la vitesse de propagation de $\Gamma(t)$ dans la direction normale $\boldsymbol{n}$, et H est la courbure moyenne de $\Gamma(t)$, c'est-à-dire la somme de ses $(N-1)$ courbures principales en dimension supérieure à deux. On adopte ici la convention de signe suivant laquelle H est positive si $\Omega(t)$ est une boule. Voir la figure 1.1 pour une représentation schématique.

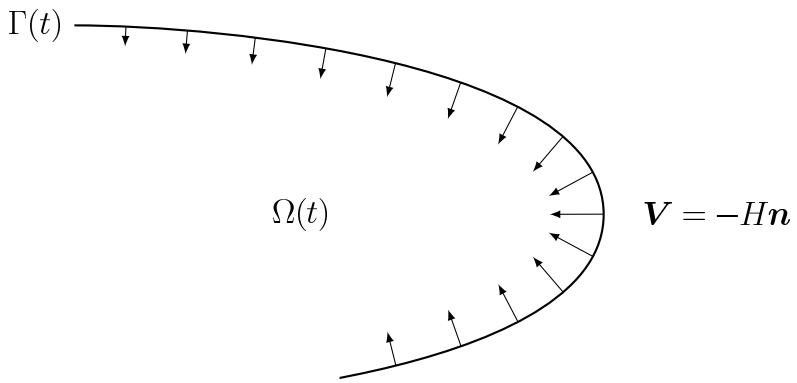


Figure 1.1 – Une surface évoluant par courbure moyenne.

Ce type d'évolution, où la vitesse normale d'une interface est fonction de sa courbure, apparaît de manière naturelle dans de nombreuses applications faisant intervenir des transitions de phase — solidification, précipitation, croissance cristalline, combustion, etc. — mais on le retrouve également dans des problèmes de traitement d'images et dans bien d'autres domaines.

Le mouvement par courbure moyenne a été largement étudié, en raison non seulement de ses nombreuses applications, mais aussi pour la difficulté et l'intérêt de ses aspects mathématiques.

Les premiers résultats sur le mouvement par courbure moyenne sont dus à Huisken [64], Gage et Hamilton [51], ainsi qu'à Grayson [58]. Ils montrent que les courbes convexes restent convexes sous l'effet de (1.1), et, en dimension deux, que les courbes régulières fermées se réduisent à un point en temps fini, en devenant asymptotiquement circulaires.

Dans le cas non convexe, l'évolution de la surface peut présenter des singularités et des changements de topologie complexes, comme dans l'exemple de Grayson [59] avec sa forme « en haltère » en dimension trois — voir les simulations présentées en fin de chapitre.

Ces changements de topologie rendent la simulation du mouvement par courbure moyenne délicate. En effet, les méthodes qui nécessitent de décrire explicitement la

surface, comme les approches de type paramétrique ou de type graphe — voir essentiellement les travaux de Deckelnick et Dziuk [32, 27, 28, 29] —, ne peuvent prendre en compte les changements de topologie, ou alors très difficilement, et s'avèrent souvent difficiles à implémenter en dimension supérieure à deux.

Deux autres méthodes, la méthode des lignes de niveau, ou *level set* en anglais, et la méthode de champ de phase, permettent de surmonter ces difficultés, en s'appuyant sur une description implicite de la surface.

Dans la méthode de *level set*, introduite par Osher et Sethian [87], la surface est vue comme la ligne de niveau zéro d'une certaine fonction ω, définie dans tout l'espace $\mathbb{R}^N$, et qui doit être calculée, dans le cas du mouvement par courbure moyenne, comme solution de l'équation

$$\frac{1}{|\nabla\omega|}\frac{\partial\omega}{\partial t} = \operatorname{div}\left(\frac{\nabla\omega}{|\nabla\omega|}\right).$$

Cette équation non linéaire parabolique dégénérée doit être étudiée à l'aide des solutions de viscosité — voir à ce sujet les travaux d'Evans et Spruck [46], ainsi que ceux de Chen, Giga et Goto [22].

La méthode de champ de phase se base, elle aussi, sur une description implicite de l'interface. Dans le cas du mouvement par courbure moyenne, elle fait intervenir l'équation d'Allen–Cahn, qui est abordée dans la section suivante.

1.2 Approche par champ de phase : l'équation d'Allen–Cahn

L'équation d'Allen–Cahn a été initialement introduite pour étudier des problèmes de transformation et de séparation de phases [3]. Son lien avec le mouvement par courbure moyenne, que nous présentons plus loin, n'a été rigoureusement démontré que plusieurs années plus tard — voir les références qui suivent dans cette section.

Étant donné un petit paramètre $\varepsilon > 0$, l'équation d'Allen–Cahn s'écrit

$$\varepsilon\frac{\partial\phi}{\partial t} - \varepsilon\Delta\phi + \frac{1}{\varepsilon}W'(\phi) = 0, \tag{1.2}$$

où W est un potentiel dit « bistable », c'est-à-dire une fonction positive qui ne s'annule qu'en deux points. Les deux exemples typiques de tels potentiels sont le potentiel double puits,

$$W(r) = \tfrac{1}{4}r^2(1-r)^2,$$

et le potentiel double obstacle,

$$W(r) = \begin{cases} \frac{1}{2}r(1-r) & \text{si } r \in [0,1], \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases}$$

Ils sont représentés sur la figure 1.2. Les constantes $\frac{1}{4}$ et $\frac{1}{2}$ sont choisies de façon à « normaliser » les dérivées, au sens où leur coefficient dominant sera égal à -1. On a en effet

$$W'(r) = r(1-r)(\tfrac{1}{2}-r)$$

dans le cas du double puits, et

$$W'(r) = \tfrac{1}{2} - r$$

pour $r \in [0,1]$ dans le cas du double obstacle. Le potentiel double puits est généralement employé comme prototype de potentiel régulier, et le double obstacle comme prototype de potentiel non régulier.

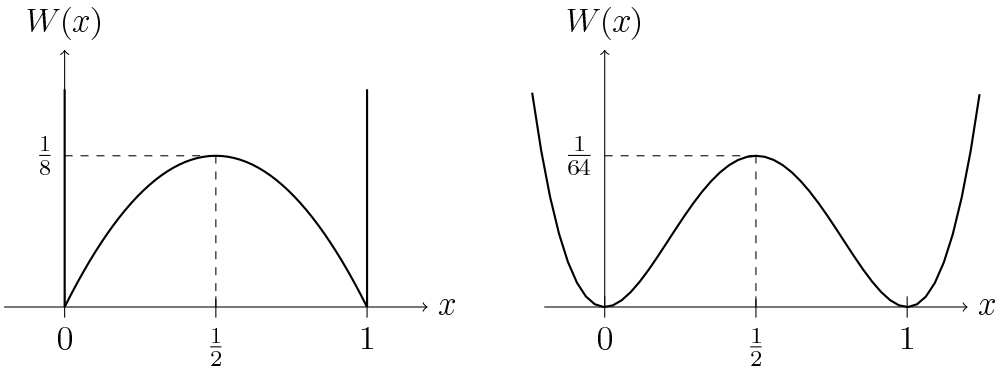


Figure 1.2 – Les potentiels double obstacle (à gauche) et double puits (à droite).

À ε fixé, des résultats d'existence et d'unicité de la solution de l'équation d'Allen–Cahn (1.2) peuvent être démontrés — voir à ce sujet le chapitre 15 de [5]. Un principe de comparaison des solutions ainsi qu'un principe du maximum peuvent également être obtenus. Grossièrement, ce dernier permet d'affirmer, sous certaines hypothèses de régularité, que si la donnée initiale ϕ_0 a ses valeurs comprises entre 0 et 1, alors il en sera de même pour la solution en tout temps.

Pour appréhender de manière intuitive le comportement des solutions de (1.2), nous pouvons considérer dans un premier temps l'équation différentielle

$$\frac{d\phi}{dt} = -\frac{1}{\varepsilon^2} W'(\phi).$$

Avec les choix de W qui précèdent, cette équation va clairement forcer à 0 les valeurs de ϕ inférieures à $\frac{1}{2}$, et à 1 ses valeurs supérieures à $\frac{1}{2}$. Le domaine dans lequel est posée l'équation sera ainsi progressivement divisé en deux régions, définies par les valeurs de ϕ, 0 et 1.

En ajoutant dans l'équation le terme de diffusion $\Delta\phi$, petit devant le terme de réaction, on peut s'attendre à voir apparaître, entre ces régions, d'étroites zones de transition — des « interfaces diffuses » — à l'intérieur desquelles ϕ varie continûment

d'une valeur à l'autre. La taille de ces zones de transition sera, bien sûr, liée au paramètre ε de l'équation. Dans la limite $\varepsilon \to 0$ — on parle de *sharp interface limit* en anglais —, on s'attend à voir apparaître des interfaces « raides » entre les deux régions [13], comme sur la figure 1.3.

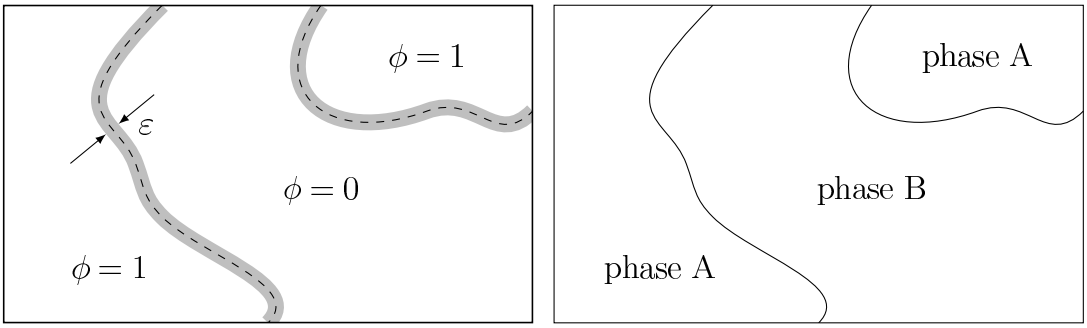


Figure 1.3 – Interfaces « diffuses » ($\varepsilon > 0$) et « raides » ($\varepsilon \to 0$) que font apparaître les solutions de l'équation d'Allen–Cahn.

Ce comportement attendu peut être rigoureusement justifié, et on peut, de plus, montrer que le mouvement des interfaces approche le mouvement par courbure moyenne dans la limite $\varepsilon \to 0$.

Allen et Cahn avaient déjà prévu ce comportement limite [3], qui fut ensuite confirmé par Rubinstein, Sternberg et Keller à l'aide de développements asymptotiques formels [94]. Le premier résultat rigoureux de convergence des solutions est dû à de Mottoni et Schatzman [25, 26], qui ont eux aussi effectué un développement asymptotique des solutions suivant les puissances de ε. Un résultat similaire a été obtenu de manière indépendante par Chen [20], qui, lui, s'est appuyé sur des sous-solutions et des sur-solutions de l'équation, basées sur la fonction distance à l'interface.

Chen donne également une estimation de la vitesse de convergence en $\varepsilon|\log\varepsilon|$, estimation qui sera par la suite améliorée par Bellettini et Paolini en $\varepsilon^2|\log\varepsilon|^2$ [8]. Ces estimations portent sur la distance de Hausdorff entre l'interface et la ligne de niveau $\frac{1}{2}$ du champ de phase ϕ. Elles sont obtenues à l'aide de théorèmes de comparaison détaillés en partie dans les notes d'Ambrosio [5].

Un résultat plus général est dû à Evans, Soner et Souganidis, qui utilisent là encore des théorèmes de comparaison pour démontrer la convergence vers les solutions de viscosité de la formulation *level set* [45].

Dans le cas du potentiel double obstacle, on doit à Chen et Elliott un premier résultat de convergence des solutions établissant le lien avec le mouvement par courbure moyenne [23]. Ils aboutissent à une erreur en ε pour la distance de Hausdorff entre l'interface et la ligne de niveau $\frac{1}{2}$ du champ de phase ϕ. Par la suite, cette erreur sera améliorée en ε^2 par Nochetto, Paolini et Verdi, dans le cas de mouvements par courbure moyenne réguliers, faisant éventuellement intervenir un terme

de forçage [77, 78, 80]. Un résultat de convergence vers les solutions de viscosité de la formulation *level set* a également été démontré par Nochetto et Verdi [82].

Sans entrer dans le détail de ces nombreux travaux, il est possible de se convaincre du lien existant entre le mouvement par courbure moyenne et l'équation d'Allen–Cahn par un tout autre moyen. On peut en effet interpréter l'équation d'Allen–Cahn comme un flot de gradient pour une certaine famille de fonctionnelles F_ε, et s'intéresser à la limite quand ε tend vers 0 de ces fonctionnelles. Cette approche fait l'objet du chapitre suivant, c'est pourquoi nous n'entrerons pas plus dans le détail ici.

Nous nous attachons, dans la section suivante, à présenter les schémas numériques que nous avons choisi d'utiliser pour effectuer nos simulations.

1.3 Schémas numériques utilisés

De très nombreux travaux présentent des simulations numériques de l'équation d'Allen–Cahn — voir les revues [33] et [30] pour une liste non exhaustive.

À titre d'exemples « historiques », nous pouvons citer Chen et ses collaborateurs, qui proposent dans [21] une étude détaillée d'un schéma aux différences finies dans le cas du potentiel double puits, et Paolini dans [88], qui présente une méthode de type éléments finis pour ce même potentiel. Dans le cas du potentiel double obstacle, des travaux originaux ont été entrepris, visant à utiliser avantageusement le fait que la solution ϕ ne prend des valeurs différentes de 0 et 1 que dans une région étroite autour de l'interface : nous pouvons citer la méthode DMA — pour *dynamic mesh algorithm* — de Nochetto, Paolini et Verdi [79], ainsi que la méthode « du masque », proposée par Elliott et Gardiner [36, 37].

L'approche que nous avons choisi d'adopter est plus classique, et consiste en une méthode d'éléments finis en espace, éventuellement avec maillages adaptatifs, couplée à une discrétisation aux différences finies en temps.

Notre but est de discrétiser l'équation d'Allen–Cahn

$$\varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial t} - \varepsilon \Delta \phi + \frac{1}{\varepsilon} W'(\phi) = 0,$$

posée dans un domaine Q ouvert de $\mathbb{R}^2$ pour $t > 0$, avec des conditions aux limites de Neumann homogènes

$$\nabla \phi \cdot \boldsymbol{n} = 0$$

sur ∂Q et la donnée initiale

$$\phi(t = 0) = \phi_0.$$

Pour appliquer notre méthode d'éléments finis, nous devons commencer par écrire la formulation variationnelle de ce problème aux limites.

1.3.1 Formulation variationnelle

Multiplions formellement l'équation par une fonction test ψ ne dépendant pas du temps, et intégrons en espace :

$$\varepsilon \int_Q \frac{\partial \phi}{\partial t} \psi \, dx + \varepsilon \int_Q \nabla \phi \cdot \nabla \psi \, dx + \frac{1}{\varepsilon} \int_Q W'(\phi) \psi \, dx = 0.$$

Il n'y a pas de terme de bord du fait de la condition de Neumann homogène sur tout ∂Q. Comme ni ψ ni Q ne dépendent du temps, nous pouvons récrire la première intégrale, en supposant que les hypothèses nécessaires sont vérifiées, de façon à obtenir, après division par ε,

$$\frac{d}{dt} \int_Q \phi \psi \, dx + \int_Q \nabla \phi \cdot \nabla \psi \, dx + \frac{1}{\varepsilon^2} \int_Q W'(\phi) \psi \, dx = 0.$$

Considérons alors la solution ϕ comme une fonction du temps t à valeurs dans un espace de fonctions définies sur Q, précisément

$$\begin{aligned} \phi \colon \ &]0, +\infty[\to H^1(Q) \\ & t \mapsto \phi(t). \end{aligned}$$

Définissons par ailleurs, pour ϕ et ψ dans $H^1(Q)$, la forme bilinéaire

$$a(\phi, \psi) = \int_Q \nabla \phi \cdot \nabla \psi \, dx,$$

et notons m le produit scalaire L^2 donné par

$$m(\phi, \psi) = \int_Q \phi \psi \, dx.$$

En choisissant la fonction test ψ dans l'espace $H^1(Q)$, nous obtenons la formulation variationnelle suivante de notre problème : trouver $\phi(t)$, fonction de $]0, +\infty[$ à valeurs dans $H^1(Q)$, telle que, pour tout ψ de $H^1(Q)$ et tout $t > 0$,

$$\begin{cases} \dfrac{d}{dt} m\big(\phi(t), \psi\big) + a\big(\phi(t), \psi\big) + \dfrac{1}{\varepsilon^2} m\big(W'(\phi(t)), \psi\big) = 0, \\ \phi(t = 0) = \phi_0. \end{cases}$$

À ε fixé, l'existence et l'unicité de la solution à cette formulation variationnelle peuvent être démontrées — voir par exemple [5].

Notre discrétisation en espace est basée sur une approximation interne de cette formulation variationnelle.

1.3.2 Semi-discrétisation en espace

Il s'agit de discrétiser en espace seulement la formulation variationnelle précédente. Pour $k \geq 1$, soit X_h l'espace d'approximation défini par

$$X_h = \left\{ \psi_h \in H^1(Q) \cap C^0(\bar{Q}) \;\middle|\; \psi_{h|K} \in P_k,\ \forall K \in T_h \right\},$$

où P_k désigne l'ensemble des polynômes de degré k, T_h un maillage du domaine Q, et K un élément de ce maillage. Soit $\phi_{0,h}$ dans X_h une approximation de la donnée initiale ϕ_0, obtenue par interpolation sur T_h. Notre semi-discrétisation en espace est donnée par l'approximation variationnelle interne suivante : trouver $\phi_h(t)$, fonction de $]0, +\infty[$ à valeurs dans X_h, telle que, pour tout ψ_h de X_h et tout $t > 0$,

$$\begin{cases} \dfrac{d}{dt} m\big(\phi_h(t), \psi_h\big) + a\big(\phi_h(t), \psi_h\big) + \dfrac{1}{\varepsilon^2} m\big(W'(\phi_h(t)), \psi_h\big) = 0, \\ \phi_h(t=0) = \phi_{0,h}. \end{cases}$$

Reste maintenant à effectuer la discrétisation en temps de cette formulation variationnelle approchée. Dans un souci de simplification des notations, nous omettrons la dépendance par rapport au paramètre h du maillage, notant encore ϕ et ψ plutôt que ϕ_h et ψ_h les fonctions approchées.

1.3.3 Semi-discrétisation en temps

Une discrétisation classique est donnée par le θ-schéma. Soit $\Delta t > 0$ et $t_n = n\Delta t$ pour $n \geq 0$, on calcule une approximation $\phi^n \in X_h$ de la solution ϕ au temps t_n avec le schéma

$$\begin{cases} \dfrac{1}{\Delta t} m\big(\phi^{n+1} - \phi^n, \psi\big) + a\big(\phi^{n+\theta}, \psi\big) + \dfrac{1}{\varepsilon^2} m\big(W'(\phi^{n+\theta}), \psi\big) = 0, \\ \phi^0 = \phi_0, \end{cases}$$

où $\phi^{n+\theta}$ est défini, pour θ dans $[0, 1]$, par

$$\phi^{n+\theta} = \theta\phi^{n+1} + (1-\theta)\phi^n.$$

Le schéma explicite, obtenu pour $\theta = 0$, est linéaire, mais ne converge que sous la condition classique pour les équations paraboliques,

$$\Delta t \leq Ch^2,$$

où la constante C dépend du domaine et de la norme L^∞ de la donnée initiale ϕ_0. Le schéma totalement implicite, obtenu pour $\theta = 1$, est également soumis à une contrainte sur le pas de temps, assurant que l'équation non linéaire qui permet de calculer ϕ^{n+1} admet une solution unique à chaque itération. Cette contrainte s'écrit

$$\Delta t \leq \alpha\varepsilon^2,$$

où α est le minimum de W'' — voir [41] et [21]. Cette seconde condition est bien sûr moins restrictive que la première puisque, pour assurer une discrétisation convenable de l'interface, nous verrons qu'il est nécessaire de choisir un paramètre ε suffisamment grand par rapport à h.

La convergence vers le mouvement par courbure moyenne ne peut se faire que si les trois paramètres ε, h et Δt tendent vers 0. Or, les relations précédentes montrent bien que ces paramètres sont intrinsèquement liés à travers le schéma, si bien que les analyses de convergence sont généralement délicates. Une étude récente due à Feng et Prohl [47] aboutit à une erreur d'ordre ε^2 entre la ligne de niveau zéro de la solution de l'équation d'Allen–Cahn et la surface évoluant par courbure moyenne, pour un schéma implicite sans intégration numérique.

Nous allons maintenant expliciter les schémas obtenus suivant le choix du potentiel bistable W.

Cas du potentiel double puits

La dérivée du potentiel double puits

$$W(r) = \tfrac{1}{4} r^2 (1-r)^2$$

est donnée par

$$W'(r) = r(1-r)(\tfrac{1}{2} - r),$$

si bien que pour θ différent de 0, il faut résoudre une équation non linéaire pour déterminer ϕ^{n+1} à chaque itération. Il est possible d'utiliser une méthode de Newton pour y parvenir, mais cette approche alourdit considérablement l'algorithme, et nous avons préféré ne pas l'utiliser en pratique. Nous avons choisi de linéariser l'équation en explicitant une partie du terme non linéaire. Ceci conduit au θ-schéma linéarisé

$$\frac{1}{\Delta t} m\Big(\phi^{n+1} - \phi^n, \psi\Big) + a\Big(\phi^{n+\theta}, \psi\Big) + \frac{1}{\varepsilon^2} m\Big(\phi^n(1-\phi^n)(\tfrac{1}{2} - \phi^{n+\theta}), \psi\Big) = 0.$$

On peut remplacer $\phi^{n+\theta}$ par son expression et isoler les termes en ϕ^{n+1} dans le membre de gauche, de façon à récrire le schéma sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} &m\Big((1 - \theta K F^n)\phi^{n+1}, \psi\Big) + \theta \Delta t\, a\Big(\phi^{n+1}, \psi\Big) \\ &\qquad = m\Big((1 + (1-\theta) K F^n)\phi^n, \psi\Big) - (1-\theta)\Delta t\, a\Big(\phi^n, \psi\Big) - \frac{1}{2} K m\Big(F^n, \psi\Big), \quad (\mathrm{S}^\theta_{\mathrm{dp}}) \end{aligned}$$

où l'on a posé

$$\begin{aligned} K &= \frac{\Delta t}{\varepsilon^2}, \\ F^n &= \phi^n(1-\phi^n). \end{aligned}$$

Sous cette forme, on découvre immédiatement un inconvénient majeur du schéma, au moins du point de vue calculatoire : la forme bilinéaire qui intervient dans le calcul de ϕ^{n+1} dépend de ϕ^n, de sorte qu'il est nécessaire de reconstruire, à chaque itération, la matrice du système. Dans le cas d'utilisation de méthodes directes, il faudra effectuer la factorisation de cette matrice à chaque itération, pour un coût de l'ordre de $\mathcal{N}^3$ en nombre d'opérations, où $\mathcal{N}$ désigne la taille du problème, c'est-à-dire la dimension de l'espace X_h.

Cet inconvénient peut être contourné en allant plus loin dans la linéarisation du θ-schéma initial, et en explicitant complètement le terme non linéaire, pour obtenir le θ-schéma semi-explicite, ou plus précisément « réaction explicite », suivant :

$$\begin{aligned} m\Big(\phi^{n+1},\psi\Big) + \theta\Delta t\, a\Big(\phi^{n+1},\psi\Big) \\ = m\Big(\phi^n,\psi\Big) - (1-\theta)\Delta t\, a\Big(\phi^n,\psi\Big) - Km\Big(W'(\phi^n),\psi\Big), \end{aligned} \quad (\mathrm{S}^{\theta}_{\mathrm{dp}'})$$

avec

$$W'(\phi^n) = \phi^n(1-\phi^n)(\tfrac{1}{2}-\phi^n).$$

On remarque cette fois que la forme bilinéaire intervenant dans le calcul de ϕ^{n+1} ne dépend plus de ϕ^n, si bien qu'il sera possible de factoriser la matrice du système une fois pour toutes. Ainsi, le coût en nombre d'opérations d'une itération sera ramené en $O(\mathcal{N}^2)$, le coût de la résolution de deux systèmes linéaires triangulaires.

Remarquons qu'en pratique, le gain en nombre d'opérations ne sera pas aussi marqué : les coûts énoncés ci-dessus sont naïfs, et correspondent à la résolution de systèmes linéaires denses. Dans le cas qui nous occupe, les systèmes sont creux et ont des structures bien particulières. On dispose dans ce cas d'algorithmes efficaces, dont le coût est largement inférieur à celui énoncé plus haut. Par exemple, si l'on s'en réfère au manuel de rheolef [96], le temps de factorisation par méthode multifrontale de la matrice creuse du Laplacien pour l'élément P_1 est estimée à $\mathcal{N}\log\mathcal{N}$ en dimension $N=2$ d'espace, et à $\mathcal{N}^2$ en dimension $N=3$. Pour ce qui est de la résolution des systèmes triangulaires (à l'intérieur de la boucle), c'est $\mathcal{N}\log\mathcal{N}$ dans les deux cas $N=2$ et $N=3$.

On pourra enfin remarquer que pour ce θ-schéma « réaction explicite », la forme bilinéaire qui intervient est la même que celle du θ-schéma pour l'équation de la chaleur, $c_\theta = m + \theta\Delta t\, a$.

Cas du potentiel double obstacle

Dans le cas du potentiel double obstacle

$$W(r) = \begin{cases} \frac{1}{2}r(1-r) & \text{si } r\in[0,1], \\ +\infty & \text{sinon,} \end{cases}$$

on doit interpréter la dérivée W' de la façon suivante :

$$W'(r) = \begin{cases}]-\infty, 1] & \text{si } r = -1, \\ \frac{1}{2} - r & \text{si } |r| < 1, \\ [-1, +\infty[& \text{si } r = 1. \end{cases}$$

Le calcul d'une itération du θ-schéma se fait alors généralement en deux étapes. On calcule, dans un premier temps, la solution du problème linéaire

$$\frac{1}{\Delta t} m\Big(\phi^{n+1} - \phi^n, \psi\Big) + a\Big(\phi^{n+\theta}, \psi\Big) + \frac{1}{\varepsilon^2} m\Big(\tfrac{1}{2} - \phi^{n+\theta}, \psi\Big) = 0,$$

puis on tronque le résultat obtenu de sorte à ce que ses valeurs restent comprises entre 0 et 1 :

$$\phi^{n+1} \coloneqq \mathrm{P}_{[0,1]}(\phi^{n+1}),$$

où $\mathrm{P}_{[0,1]}$ est la projection sur $[0, 1]$ définie pour ϕ dans $H^1(Q)$ par

$$\mathrm{P}_{[0,1]}(\phi) = \max\Big(0, \min(1, \phi)\Big).$$

L'avantage par rapport au cas du double puits est que, même dans le cas où θ est différent de 0 et où le schéma est implicite, on peut calculer ϕ^{n+1} sans avoir à résoudre une équation non linéaire.

Là encore, on peut récrire le schéma en remplaçant $\phi^{n+\theta}$ par son expression et en isolant dans le membre de gauche les termes en ϕ^{n+1}. On obtient le schéma

$$\begin{aligned} &(1 - \theta K) m\Big(\phi^{n+1}, \psi\Big) + \theta \Delta t\, a\Big(\phi^{n+1}, \psi\Big) \\ &\qquad = \Big(1 + (1-\theta)K\Big) m\Big(\phi^n, \psi\Big) - (1-\theta)\Delta t\, a\Big(\phi^n, \psi\Big) - \frac{1}{2} K m\Big(1, \psi\Big), \quad (\mathrm{S}^\theta_{\mathrm{do}}) \end{aligned}$$

où K est défini comme précédemment par

$$K = \frac{\Delta t}{\varepsilon^2}.$$

À noter que ce schéma est strictement le même que le schéma $(\mathrm{S}^\theta_{\mathrm{dp}})$ pour le double puits, sauf qu'on a désormais $F_n = 1$. On remarque par ailleurs que cette fois-ci, contrairement à ce qui se passe dans le cas du potentiel double puits, la forme bilinéaire qui intervient dans le calcul de ϕ^{n+1} ne dépend pas de n. On pourra donc former la matrice du système et la factoriser une fois pour toutes, pour obtenir un gain en temps de calcul non négligeable.

Même si l'inconvénient rencontré avec le schéma obtenu pour le potentiel double puits ne se présente pas ici, on peut encore définir une version « réaction explicite » du θ-schéma ci-dessus. Celle-ci s'écrit de façon tout à fait identique à $(\mathrm{S}^\theta_{\mathrm{dp}'})$:

$$\begin{aligned} &m\Big(\phi^{n+1}, \psi\Big) + \theta \Delta t\, a\Big(\phi^{n+1}, \psi\Big) \\ &\qquad = m\Big(\phi^n, \psi\Big) - (1-\theta)\Delta t\, a\Big(\phi^n, \psi\Big) - K m\Big(W'(\phi^n), \psi\Big), \quad (\mathrm{S}^\theta_{\mathrm{do}'}) \end{aligned}$$

sauf que cette fois, $W'(\phi^n)$ est simplement défini par

$$W'(\phi^n) = \tfrac{1}{2} - \phi^n.$$

La forme bilinéaire de ce θ-schéma est encore la même que celle du θ-schéma pour l'équation de la chaleur, $c_\theta = m + \theta \Delta t\, a$.

Nous disposons finalement de quatre schémas à tester : deux que nous qualifierons de « réaction implicite », ($\mathrm{S}^\theta_{\mathrm{dp}}$) et ($\mathrm{S}^\theta_{\mathrm{do}}$), et deux de « réaction explicite », ($\mathrm{S}^\theta_{\mathrm{dp}'}$) et ($\mathrm{S}^\theta_{\mathrm{do}'}$). La section qui suit présente des simulations qui ont permis de comparer les avantages et les inconvénients de ces quatre schémas, en vue de faire un choix pour les calculs plus élaborés présentés dans la suite de ce manuscrit.

1.4 Tests numériques préliminaires

Nous avons implémenté les schémas de la section précédente à l'aide de rheolef, un environnement de développement orienté éléments finis, essentiellement développé par Pierre Saramito [95]. Cet environnement fournit de nombreuses classes c++ facilitant grandement la mise en œuvre de codes éléments finis, tout en garantissant une grande efficacité : la résolution des systèmes linéaires creux s'appuie par exemple sur la librairie optimisée umfpack [24], qui a largement fait ses preuves dans ce domaine. Le mailleur utilisé est bamg [62], qui est maintenant intégré au logiciel freefem++ [91].

Nos premiers tests s'appuient sur un cas particulier pour lequel il existe une solution explicite au mouvement par courbure moyenne : il s'agit du cas où la forme initiale est une sphère — un cercle en dimension deux.

1.4.1 Description de notre test de convergence

Considérons un cercle, de rayon R_0 au temps $t = 0$, évoluant par courbure moyenne. Si l'on note $R(t)$ le rayon du cercle au temps t, la vitesse normale de la surface est donnée par $R'(t)$, et la courbure par $\frac{1}{R(t)}$. On est donc amené à considérer l'équation différentielle

$$\frac{dR}{dt} = -\frac{1}{R}$$

pour $t > 0$, avec la donnée initiale $R(0) = R_0$. La solution de cette équation est donnée par

$$R(t) = \sqrt{{R_0}^2 - 2t}$$

pour t dans $[0, t_f]$, où t_f est le temps d'extinction, donné par $t_f = \frac{1}{2}{R_0}^2$.

Nos quatre schémas donnent « visuellement » le comportement correct, à savoir que la forme qui évolue reste circulaire, et voit simplement son rayon diminuer au cours des itérations. La figure 1.4 donne un exemple de résultat obtenu. Le mouvement semble « s'accélérer » au fil du temps, puisque les lignes de niveau

successives semblent de plus en plus éloignées les unes des autres. Ceci s'explique simplement : le rayon du cercle varie comme une fonction racine, et décroît de plus en plus vite lorsque t augmente. Par ailleurs, la vitesse de l'interface étant donnée par l'inverse du rayon, on comprend bien que le mouvement est d'autant plus rapide que le rayon est petit.

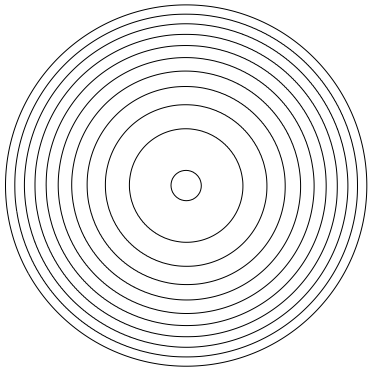


Figure 1.4 – Simulation numérique d'un cercle évoluant par courbure moyenne.

La première série de tests que nous allons effectuer consiste à mesurer l'erreur commise sur l'aire enfermée à l'intérieur du cercle au cours du temps.

1.4.2 Erreur sur l'aire au cours du temps

Dans le cas où la forme initiale est circulaire, nous pouvons, grâce à la solution explicite donnée ci-dessus, connaître l'aire théorique enfermée dans la courbe au cours du temps. Celle-ci est donnée par

$$A(t) = \pi R(t)^2 = \pi({R_0}^2 - 2t)$$

si R_0 est le rayon du cercle initial. Remarquons au passage que cette aire théorique va diminuer linéairement avec le temps.

L'aire de la solution approchée est très simple à calculer au temps t_n : puisque la solution ϕ^n doit valoir approximativement 1 à l'intérieur du cercle et 0 en dehors, l'aire approchée sera donnée par

$$A_n = \int_Q \phi^n \, dx.$$

Sur la figure 1.5, nous traçons l'évolution de l'aire au cours du temps pour les quatre différents schémas. Nous avons ici utilisé des éléments de type P_1, et nous avons volontairement choisi des valeurs grossières du paramètre ε et des paramètres

d'approximation h et Δt, de façon à amplifier les erreurs pour une visualisation plus aisée. ε est fixé à 0,03 pour les schémas double puits, et à 0,01 pour les schémas double obstacle, h est pris égal à 0,01, et Δt à $\frac{h^2}{2}$. La valeur de ε retenue pour les schémas avec potentiel double puits est supérieure à celle utilisée pour les schémas avec potentiel double obstacle. Il ne faut pas, en effet, oublier le rôle joué par la largeur de l'interface, qui est plus grande dans le cas du double puits que dans le cas du double obstacle — de l'ordre de $\varepsilon|\log\varepsilon|$ contre ε.

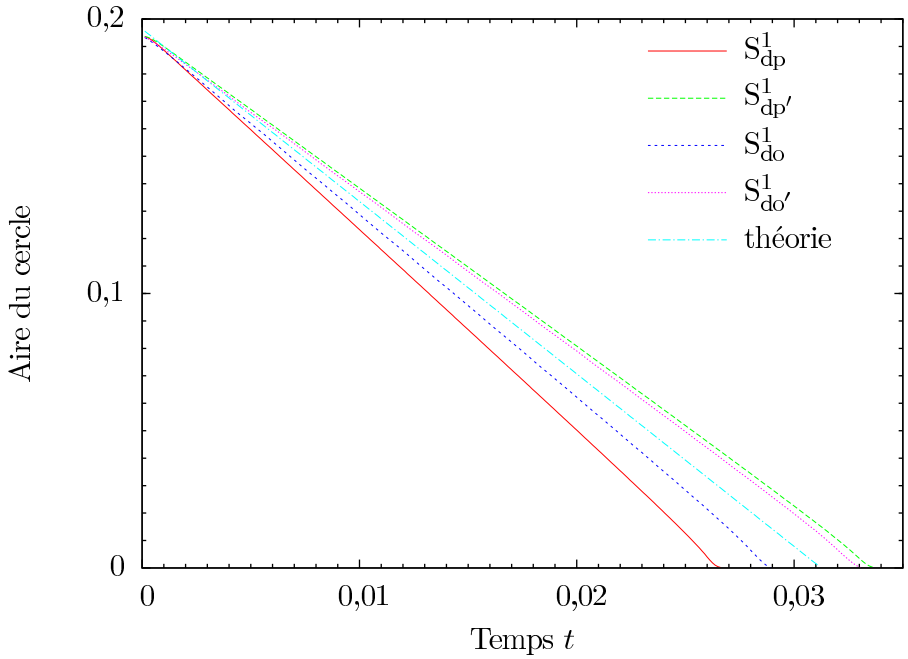


Figure 1.5 – Cercle évoluant par courbure moyenne : tracé de l'aire en fonction du temps pour les différents schémas.

Nous pouvons calculer, à chaque pas de temps, l'erreur d'aire donnée par la différence de A_n et de $A(t_n)$:

$$e_n = |A_n - A(t_n)|.$$

Nous pouvons également calculer, pour chaque schéma, une erreur d'aire moyennée en temps, ce qui, au vu de la définition de l'aire approchée, revient presque à calculer l'erreur en norme L^1 du schéma. Précisément, si nous désignons par n_f l'itération qui correspond à la première des deux extinctions — celle de la solution approchée ou celle de la solution théorique —, notre erreur moyenne sera donnée par

$$e = \frac{1}{n_f} \sum_{n=1}^{n_f} e_n.$$

Nous mesurerons plus loin l'influence des paramètres numériques sur cette erreur moyenne.

Comme dans tout modèle de champ de phase, l'erreur mesurée est en fait la somme de deux erreurs : l'erreur de discrétisation, liée aux paramètres Δt et h, et l'erreur d'approximation liée au paramètre ε — voir la figure 1.6. Nous allons essayer, dans la mesure du possible, d'étudier séparément ces deux erreurs.

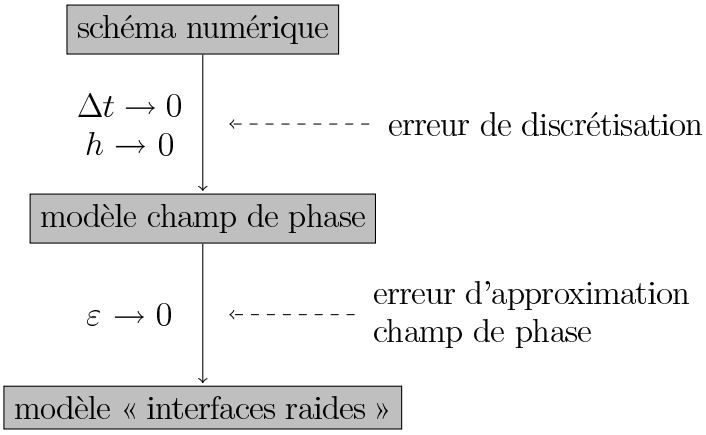


Figure 1.6 – Superposition des erreurs de discrétisation et d'approximation dans un modèle de champ de phase.

Erreur de discrétisation

Nous nous intéressons ici à l'erreur due aux paramètres de discrétisation Δt et h. Notre idée consiste à choisir une valeur de ε relativement grossière et à effectuer différents calculs, pour lesquels nous choisirons des valeurs de Δt et h de plus en plus petites. Nous pourrons ainsi étudier la convergence de nos schémas à ε fixé, dans la limite $\Delta t \to 0$ et $h \to 0$.

Nous avons reporté, sur la figure 1.7 l'erreur moyenne e pour différentes valeurs de h et pour les différents schémas. La valeur de ε, volontairement élevée rappelons-le, est choisie égale à 0,05 pour les schémas avec potentiel double obstacle, et à 0,02 pour les schémas avec potentiel double puits. Le pas de temps Δt est quant à lui systématiquement fixé à $\frac{h^2}{2}$, ce qui nous assure d'être dans le domaine de stabilité des schémas.

Il est clair que, quel que soit le schéma utilisé, l'erreur diminue lorsque l'on abaisse les pas de temps et d'espace. Cependant, et bien qu'elle diminue, elle ne tend pas vers 0 : elle tend vers une constante non nulle, qui n'est rien d'autre que l'erreur d'approximation due au paramètre ε.

La conclusion que nous pouvons tirer de ces observations est la suivante : il est inutile d'utiliser des pas de discrétisation fins lorsque la valeur de ε est grossière. Le gain en précision devient négligeable lorsque h et Δt deviennent trop petits devant ε — alors que l'augmentation du coût en temps de calcul n'a, elle, rien de négligeable !

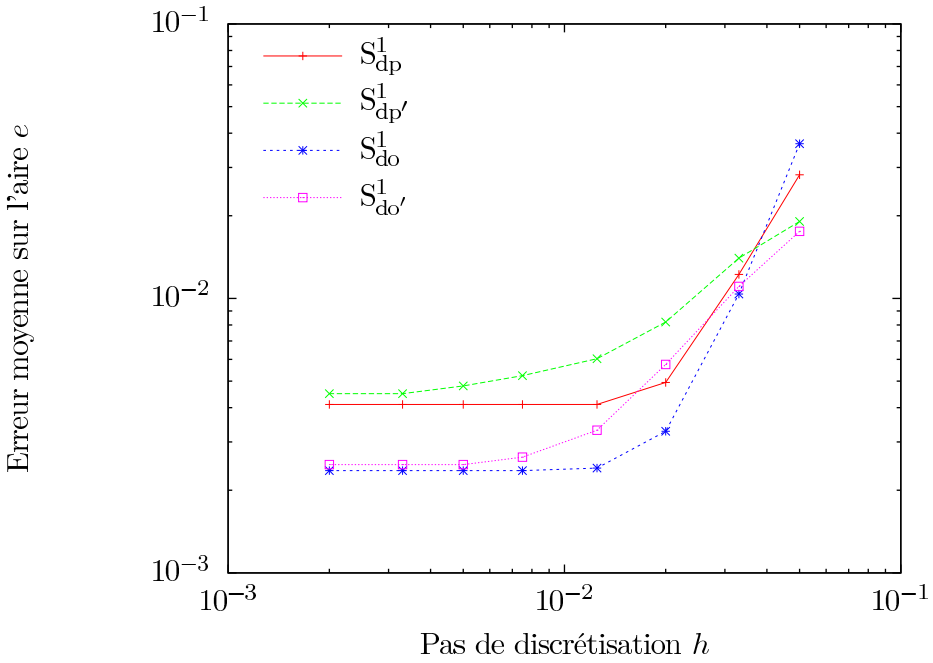


Figure 1.7 – Cercle évoluant par courbure moyenne : tracé de l'erreur moyenne sur l'aire en fonction de h pour les différents schémas, ε étant fixé.

Erreur d'approximation champ de phase

Nous allons maintenant tenter d'étudier le comportement de l'erreur en fonction du paramètre ε. Pour cela, nous nous donnons de petits pas de discrétisation h et Δt, et nous effectuons des calculs pour différentes valeurs de ε. Nous souhaitons ainsi observer la limite de l'erreur quand ε tend vers 0, à h et Δt fixés.

La figure 1.8 a été obtenue avec $h = 0{,}01$ et $\Delta t = \frac{h^2}{2}$. Nous y avons reporté, pour chacun de nos quatre schémas, l'erreur moyenne sur l'aire en fonction de ε.

Nous observons un comportement similaire pour tous les schémas : l'erreur décroît avec ε jusqu'à un certain seuil, mais explose une fois ce seuil passé. Ceci s'explique simplement : quand ε devient de l'ordre de h, l'interface devient trop étroite pour être correctement discrétisée par le maillage. C'est alors l'erreur de discrétisation qui fait remonter brutalement les tracés.

Cette fois, notre conclusion pourrait être la suivante : il faut faire attention à ne pas trop diminuer le paramètre ε, et toujours s'assurer qu'il est au moins de l'ordre de quelques h, sous peine de voir l'erreur exploser. Les données du tableau suggèrent d'ailleurs qu'il existe, à h et Δt fixés, une valeur optimale de ε du point de vue de l'erreur. Dans nos calculs à venir, nous essaierons autant que possible de choisir ε proche de cette valeur optimale.

Dans le paragraphe suivant, nous présentons une autre mesure d'erreur permettant de valider nos schémas : l'erreur sur le temps d'extinction.

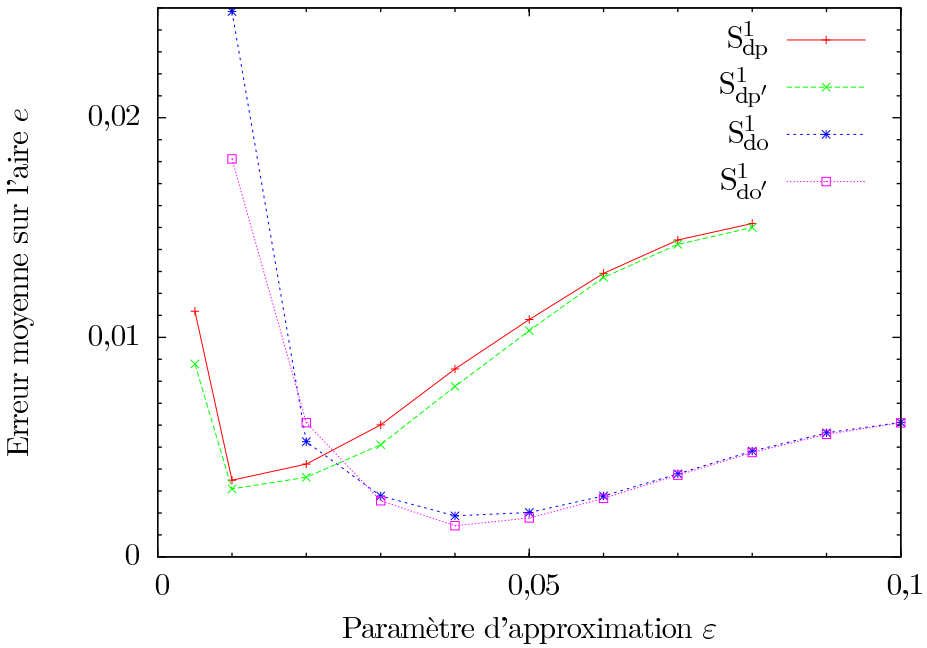


Figure 1.8 – Cercle évoluant par courbure moyenne : tracé de l'erreur moyenne sur l'aire en fonction de ε pour les différents schémas, h et Δt étant fixés.

1.4.3 Erreur sur le temps d'extinction

La mesure de l'erreur sur le temps d'extinction est un test souvent réalisé en pratique pour valider les algorithmes de simulation du mouvement par courbure moyenne. Il est plus simple que notre test précédent, dans la mesure où il n'impose de calculer aucune nouvelle grandeur au cours des itérations. Il suffit en effet de relever le temps d'extinction de la solution approchée — défini par exemple comme le temps discret t_n pour lequel toutes les valeurs de la solution ϕ^n sont strictement inférieures à $\frac{1}{2}$ — et de le comparer à la valeur théorique $t_f = \frac{1}{2}{R_0}^2$.

Ce test est bien évidemment moins robuste que notre test précédent, puisque ce dernier s'appuyait sur une erreur moyennée en temps, tandis que le test sur le temps d'extinction ne mesure finalement l'erreur qu'à un seul pas de temps.

Par ailleurs, les résultats obtenus sont fortement similaires à ceux présentés sur les figures 1.7 et 1.8. Ils s'interprètent en tout cas de manière strictement identique, et n'ajoutent rien aux conclusions que nous avons établies précédemment. Nous avons donc fait le choix de ne pas reproduire ces résultats ici.

Nous nous consacrons plutôt à l'étude du coût en temps de nos différents schémas. Celui-ci constituera en effet un critère de choix essentiel pour nous, dans la mesure où le mouvement par courbure moyenne ne sera qu'une brique de base des algorithmes présentés plus loin dans le manuscrit.

1.4.4 Comparaison des coûts en temps

Pour mesurer les coûts en temps, nous adoptons la démarche suivante : nous fixons ε à une valeur arbitraire, par exemple 0,03, et nous choisissons un pas de temps Δt petit, par exemple 10^{-5}, puis nous mesurons le temps mis par chaque schéma pour effectuer un millier d'itérations. En effectuant cette mesure pour des maillages de plus en plus fins, nous pouvons étudier les variations du coût en temps suivant h.

Le tableau 1.1 présente le résultat de cette expérience. Comme on pouvait s'y attendre, les deux schémas « réaction explicite » et le schéma implicite avec potentiel double obstacle ont des coûts en temps quasiment identiques. En effet, comme nous l'avons fait remarquer précédemment, la forme bilinéaire qui intervient dans ces trois schémas est la même — à un coefficient constant près pour le schéma implicite avec potentiel double obstacle. Cette forme bilinéaire est par ailleurs indépendante du temps, de sorte que la matrice des systèmes à résoudre pour ces trois schémas peut être factorisée une fois pour toutes. C'est ce qui explique les coûts en temps nettement inférieurs à ceux du schéma implicite avec potentiel double puits, pour lequel une nouvelle matrice doit être factorisée à chaque itération.

Tableau 1.1 – Coût en temps en fonction de h pour les différents schémas.

h	$5 \cdot 10^{-2}$	$3{,}3 \cdot 10^{-2}$	$2 \cdot 10^{-2}$	$1{,}25 \cdot 10^{-2}$	$7{,}5 \cdot 10^{-3}$	$5 \cdot 10^{-3}$
$(\mathrm{S}^1_{\mathrm{dp}})$	17,84	40,02	115,62	297,43	879,26	2 345,69
$(\mathrm{S}^1_{\mathrm{dp}'})$	0,71	1,67	6,05	17,42	48,69	126,79
$(\mathrm{S}^1_{\mathrm{do}})$	0,69	1,71	5,70	16,14	45,60	117,36
$(\mathrm{S}^1_{\mathrm{do}'})$	0,66	1,72	6,11	17,23	49,21	125,30

On peut chercher à évaluer le surcoût dû à cette factorisation, et à savoir comment celui-ci évolue avec la taille du problème. On calcule pour cela le rapport des coûts entre les schémas implicite et « réaction explicite » dans le cas du potentiel double puits, pour les différentes valeurs de h — voir le tableau 1.2. On constate ainsi que le schéma implicite avec potentiel double puits est approximativement 20 fois plus coûteux que les trois autres schémas, le rendant de fait inintéressant en pratique.

Tableau 1.2 – Rapport $r(h)$ entre le coût du schéma implicite et le coût du schéma « réaction explicite » en fonction de h, dans le cas du potentiel double puits.

h	$5 \cdot 10^{-2}$	$3{,}3 \cdot 10^{-2}$	$2 \cdot 10^{-2}$	$1{,}25 \cdot 10^{-2}$	$7{,}5 \cdot 10^{-3}$	$5 \cdot 10^{-3}$
$r(h)$	25,13	23,96	19,11	17,07	18,06	18,50

On notera toutefois que le rapport des coûts reste à peu près constant, ou en tout cas qu'il n'augmente pas avec $\mathcal{N}$, la taille du problème. Les deux schémas seront donc

du même ordre en temps. Ceci est cohérent avec les indications précédemment tirées du manuel de RHEOLEF [96] : en dimension deux, pour la matrice du Laplacien avec des éléments P_1, la factorisation et la résolution du système linéaire se font toutes les deux en $O(\mathcal{N}\log\mathcal{N})$. C'est de la constante devant cet ordre que va venir toute la différence entre les deux schémas.

1.4.5 Bilan : choix d'un schéma parmi les quatre

Nous avons vu que le schéma implicite avec potentiel double puits était clairement à éviter, en raison de son coût en temps démesuré face aux trois autres schémas. Reste donc à choisir entre les trois autres schémas présentés. Dans la littérature, on trouve des simulations réalisées avec chacun d'entre eux.

Comme nous l'avons déjà signalé, il est possible, dans le cas du potentiel double obstacle, de profiter du fait que la solution est strictement constante en dehors de la zone d'interface : voir à ce sujet la méthode DMA de Nochetto, Paolini et Verdi [79], utilisée dans plusieurs de leurs travaux ultérieurs, ainsi que la méthode « du masque » de Elliott et Gardiner [36, 37], également réutilisée par la suite. Nous n'avons implémenté aucune de ces deux méthodes, et dans notre cas, l'utilisation d'un potentiel ne présente pas de différences fondamentales par rapport à l'autre.

Il y a tout de même une nuance à mettre en avant : l'utilisation du potentiel double puits n'impose pas de tronquer la solution comme avec le double obstacle. Selon les situations, ce détail peut avoir son importance, par exemple dans les questions de conservation du volume — un sujet que nous abordons dans le chapitre 3.

À noter que selon les applications, d'autres potentiels peuvent être utilisés. Un exemple classique est le prototype

$$W(r) = \frac{\beta}{2}\Big((1+r)\ln(1+r) + (1-r)\ln(1-r)\Big) + \frac{1}{2}(1-r^2),$$

qui présente des asymptotes en -1 et 1, et deux puits dans $]-1,1[$ pour $\beta < 1$.

En conclusion, c'est, dans notre situation, le schéma « réaction explicite » avec potentiel double puits qui semble offrir le meilleur compromis parmi les quatre schémas testés. C'est en tout cas celui que nous utiliserons dans la suite de nos expérimentations, sauf mention contraire bien évidemment. C'est principalement le fait de ne pas avoir à tronquer la solution qui nous a fait pencher en faveur du double puits.

La question du choix du schéma étant tranchée, nous allons pouvoir nous consacrer à l'étude de l'influence des autres données du calcul, à commencer par celle du paramètre θ dans le θ-schéma.

1.4.6 Influence du paramètre θ

On s'attend bien sûr à ce que le choix $\theta = \frac{1}{2}$ soit favorable du point de vue de la précision du schéma. Pour le vérifier, nous avons réalisé, pour $\theta = \frac{1}{2}$ et $\theta = 1$, le test

de convergence suivant : nous avons fixé ε en fonction de h, et effectué différents calculs pour des valeurs de h de plus en plus petites. La figure 1.9 présente les résultats obtenus, pour $\varepsilon = 2h$ et $\Delta t = \frac{h^2}{2}$. Rappelons que nous n'utilisons plus désormais que le schéma « réaction explicite » avec potentiel double puits, et que le choix $\varepsilon = 2h$ permet tout à fait d'avoir une interface suffisamment large pour être correctement discrétisée.

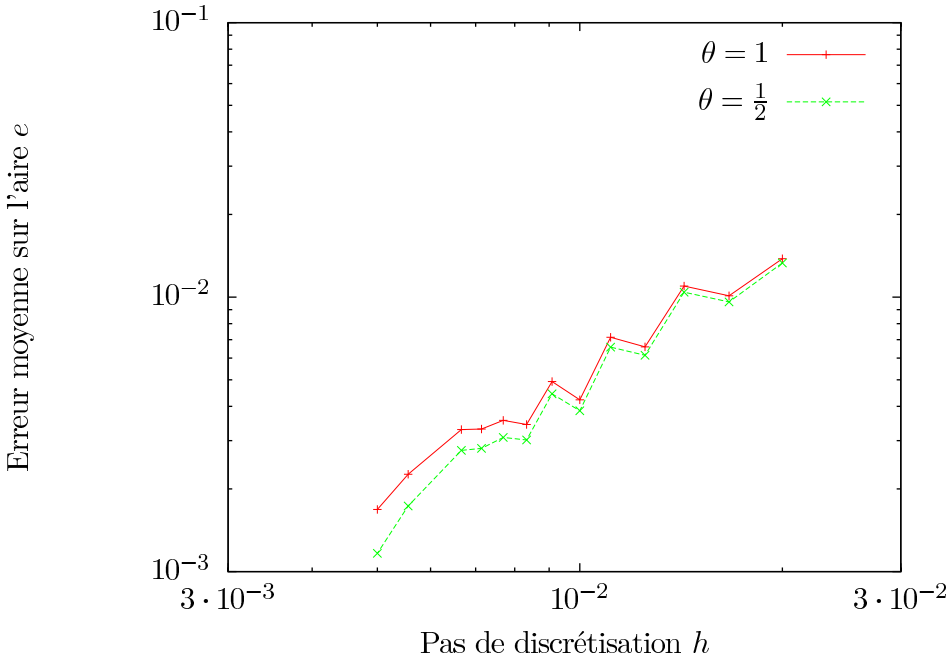


Figure 1.9 – Cercle évoluant par courbure moyenne : tracé de l'erreur moyenne sur l'aire en fonction de h pour deux valeurs de θ.

Le paramètre ε étant, pour ce test, fixé en fonction de h, nous obtenons maintenant de vraies courbes de convergence, dans le sens où l'erreur tend bien vers 0 quand h tend vers 0.

Les erreurs obtenues pour les deux choix de θ sont très similaires. Elles sont en particulier toutes les deux en $O(h)$. Le choix $\theta = \frac{1}{2}$ ne permet donc pas de gagner un ordre dans la convergence, comme c'est le cas par exemple pour l'équation de la chaleur avec le schéma de Crank–Nicholson. Il ne faut pas oublier, dans les méthodes de champ de phase, la présence du paramètre ε, qui va bien sûr avoir son influence sur l'erreur. On note malgré tout une certaine amélioration avec le choix $\theta = \frac{1}{2}$, puisque les erreurs semblent être systématiquement plus basses qu'avec $\theta = 1$.

En terme de coût en temps, ces deux choix sont par ailleurs strictement équivalents. En effet, en dehors du choix $\theta = 0$ qui permet d'obtenir un schéma totalement explicite mais rapidement instable, le paramètre θ n'influe pas sur la rapidité des calculs : pour le schéma « réaction explicite » que nous avons choisi d'utiliser, la

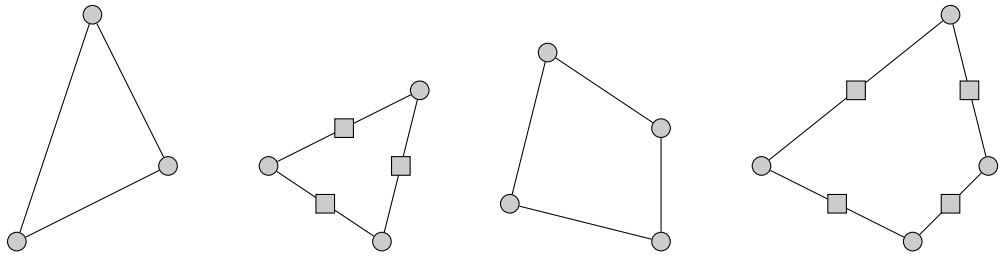
matrice des systèmes à résoudre peut être factorisée une fois pour toutes, indépendamment de la valeur de θ. Le coût d'une itération sera simplement liée à la taille du problème.

En conclusion, fixer $\theta = \frac{1}{2}$ semble apporter un léger avantage pour nos calculs à venir. C'est donc ce que nous ferons en pratique. Néanmoins, et c'est une remarque importante, les schémas présentés dans les chapitres qui suivent ne feront pas apparaître ce choix de θ. Nous avons en effet jugé qu'il était plus simple, en terme de notations, de les présenter en supposant $\theta = 1$. Il n'empêche que dans notre code de calcul, c'est systématiquement la valeur $\theta = \frac{1}{2}$ qui est sélectionnée.

1.4.7 Influence du type d'éléments

Un des grands atouts de RHEOLEF, et d'ailleurs aussi de FREEFEM++ ou de plusieurs autres bibliothèques d'éléments finis, et de pouvoir changer le degré des éléments sans avoir à modifier le code de calcul. Cette grande flexibilité constitue sans conteste l'un des avantages majeurs de la méthode des éléments finis face à ses concurrentes.

Nous allons ici utiliser cette flexibilité pour tester l'influence du type d'éléments sur la précision de notre schéma, et sur son coût en temps. Les éléments testés, P_1, P_2, Q_1 et Q_2, sont représentés sur la figure 1.10.



(a) P_1 (b) P_2 (c) Q_1 (d) Q_2

Figure 1.10 – Quatre type d'éléments implémentés dans RHEOLEF.

Nous utilisons le même test de convergence que pour mesurer l'influence de θ : pour chaque type d'éléments, nous définissons ε en fonction de h, et nous effectuons différents calculs en faisant tendre h vers 0. Les résultats sont donnés sur la figure 1.11, pour laquelle ε est fixé à $2h$ et Δt à $\frac{h^2}{2}$.

La première remarque saute aux yeux : les erreurs obtenues sont quasiment indépendantes du choix de l'élément. On pourrait pourtant s'attendre à ce que le fait de monter en degré améliore la précision du calcul, ou fasse même gagner un ordre à l'erreur. Là encore, c'est le paramètre ε qui doit être mis en cause : même si l'erreur de discrétisation diminue, l'erreur d'approximation due à ε reste bien présente, et elle « cache » en quelque sorte l'amélioration apportée par les degrés élevés.

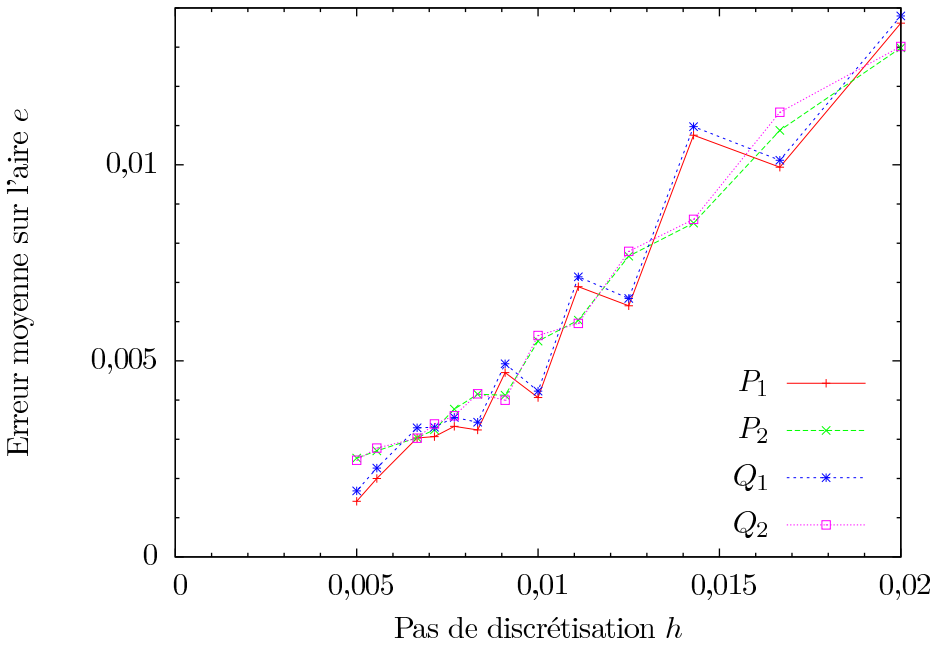


Figure 1.11 – Cercle évoluant par courbure moyenne : tracé de l'erreur moyenne sur l'aire en fonction de h pour différents types d'éléments finis.

Les analyses d'erreur sur les schémas de type éléments finis pour l'équation d'Allen–Cahn sont assez rares, et difficiles à mener en raison des interactions entre ε, h et Δt. Nous pouvons néanmoins citer les travaux de Nochetto et Verdi [81, 83] dans le cas du potentiel double obstacle. Ils arrivent à des estimations en $O(\varepsilon)$ ou $O(\varepsilon^2)$ sur la distance de Hausdorff à l'interface, mais doivent pour cela supposer que Δt et h^2 sont de l'ordre de ε^4 ou ε^5, ce qui est bien sûr quasiment impossible à réaliser en pratique.

Dans notre situation, le fait de monter en degré n'est clairement pas avantageux. Même si cela permet d'accéder à des valeurs de ε plus petites, puisque plus de degrés de liberté seront présents dans la zone d'interface, le surcoût engendré par rapport aux éléments de degré 1 est discriminatoire. Le gain en précision est presque inexistant et ne justifie pas ce surcoût. Nous utiliserons donc exclusivement des éléments de type P_1 pour la suite de nos simulations.

Nous pouvons maintenant présenter quelques résultats de simulations numériques, obtenus avec les choix que nous avons justifiés jusqu'ici.

1.5 Quelques exemples de résultats numériques

Les figures qui suivent permettent de clore ce premier chapitre en présentant quelques cas particuliers de formes évoluant par courbure moyenne. L'objectif ici est

de montrer la grande flexibilité de l'approche par champ de phase, notamment pour le traitement des changements de topologie. Ces exemples s'inspirent essentiellement de ceux trouvés dans la revue de Deckelnick, Dziuk et Elliott [30].

On trouve sur la figure 1.12, page 32, quatre exemples de courbes évoluant par courbure moyenne en dimension deux. Ces résultats ont été obtenus avec le jeu de paramètres suivant : $h = 5 \cdot 10^{-3}$, $\varepsilon = 2h$ et $\Delta t = \frac{h^2}{2}$.

Sur le premier de nos quatre exemples, un polygone convexe se transforme asymptotiquement en un cercle. On pourra remarquer que, dans ce cas, une forme au temps t contient toutes les formes suivantes. Cette propriété est toujours vérifiée lorsque la forme initiale est convexe — voir [64, 51]. Elle peut, par contre, tomber en défaut lorsque ce n'est pas le cas, comme avec notre deuxième exemple, une forme en étoile non convexe. On constate sur cet exemple qu'il n'y a plus inclusion des formes successives. Cependant, la forme asymptotique obtenue est encore un cercle. Gage montre en effet dans [50] qu'en dimension deux, toute courbe simple se transforme asymptotiquement en un cercle. Notre troisième exemple est celui d'une spirale dont la largeur décroît avec la distance à l'origine. La queue de la spirale est ainsi plus étroite que sa tête, et la courbure y est plus importante. De fait, on constate que la vitesse de l'interface est plus élevée au niveau de la queue qu'au niveau de la tête. Le dernier exemple de la figure 1.12 est celui d'un lemniscate, une courbe présentant un point double à l'origine. L'évolution fait cette fois apparaître un changement de topologie, puisque l'on passe d'une composante connexe à deux. Ce changement de topologie se produit au niveau du point double de la courbe : en ce point, le mouvement par courbure moyenne au sens « classique » n'est pas correctement défini, puisque la normale à la courbe n'est elle-même pas définie. Il faut avoir recours aux solutions de viscosité de la formulation *level set* pour donner un sens au mouvement en ce point. Précisons néanmoins que la présence d'un point double n'est absolument pas une condition suffisante à l'apparition d'un changement topologique.

Il est possible, avec RHEOLEF, d'effectuer des simulations sur des géométries complexes, générées à l'aide du mailleur BAMG, éventuellement via son interface dans FREEFEM++. La figure 1.13 donne un exemple d'une telle simulation. Le maillage utilisé est représenté sur la première image, et, sur les trois suivantes, on observe l'évolution par courbure moyenne d'une forme triangulaire sur ce maillage. Les conditions aux limites utilisées sont, de même que pour tous nos autres exemples, des conditions de Neumann homogènes. D'autres types de conditions aux limites peuvent bien sûr être envisagés — nous présenterons quelques exemples sur cette question dans le chapitre 3.

Pour achever cette série d'exemples, nous présentons sur la figure 1.14, page 33, quelques simulations en dimension trois. Notons que RHEOLEF permet d'effectuer ces simulations de manière transparente, en utilisant le même code de calcul qu'en dimension deux. Le maillage utilisé est de taille 50^3, avec des éléments tétraédriques.

Le premier exemple que nous présentons est simplement celui d'un cube se transformant asymptotiquement en une sphère. La propriété d'inclusion des formes successives est encore valable en dimension trois, dans le cas d'une forme initiale

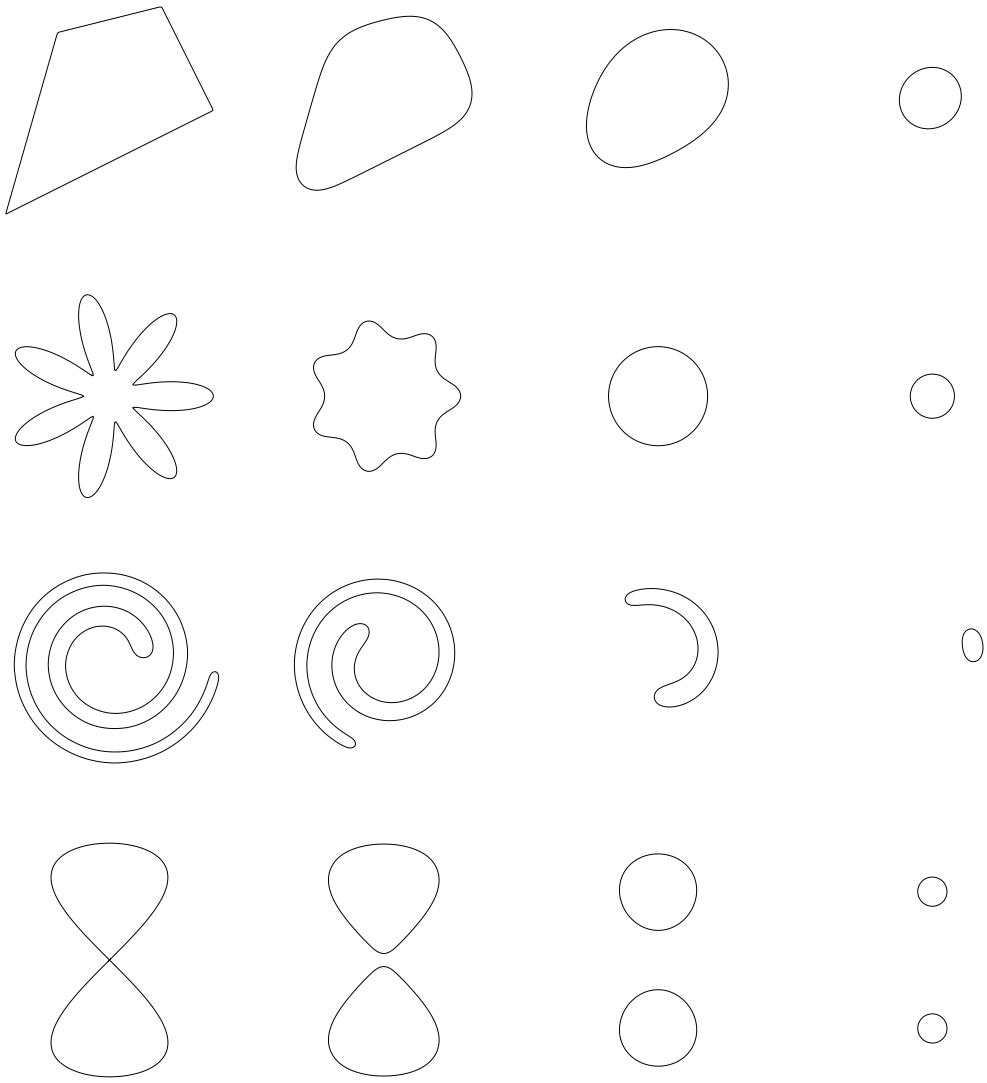
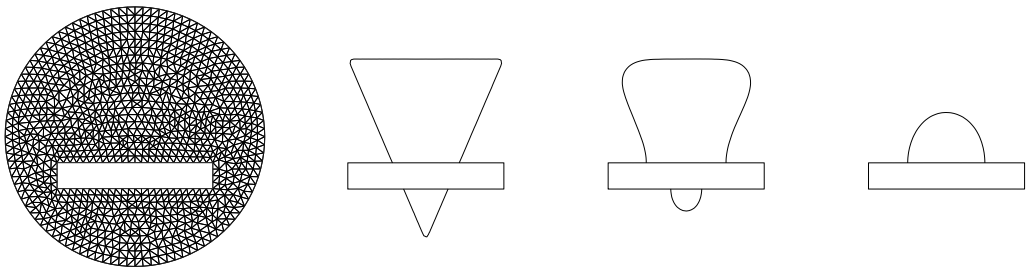


Figure 1.12 – Courbes évoluant par courbure moyenne en dimension deux.



(a) Maillage (b) Évolution d'une forme initiale triangulaire

Figure 1.13 – Mouvement par courbure moyenne sur géométrie complexe.

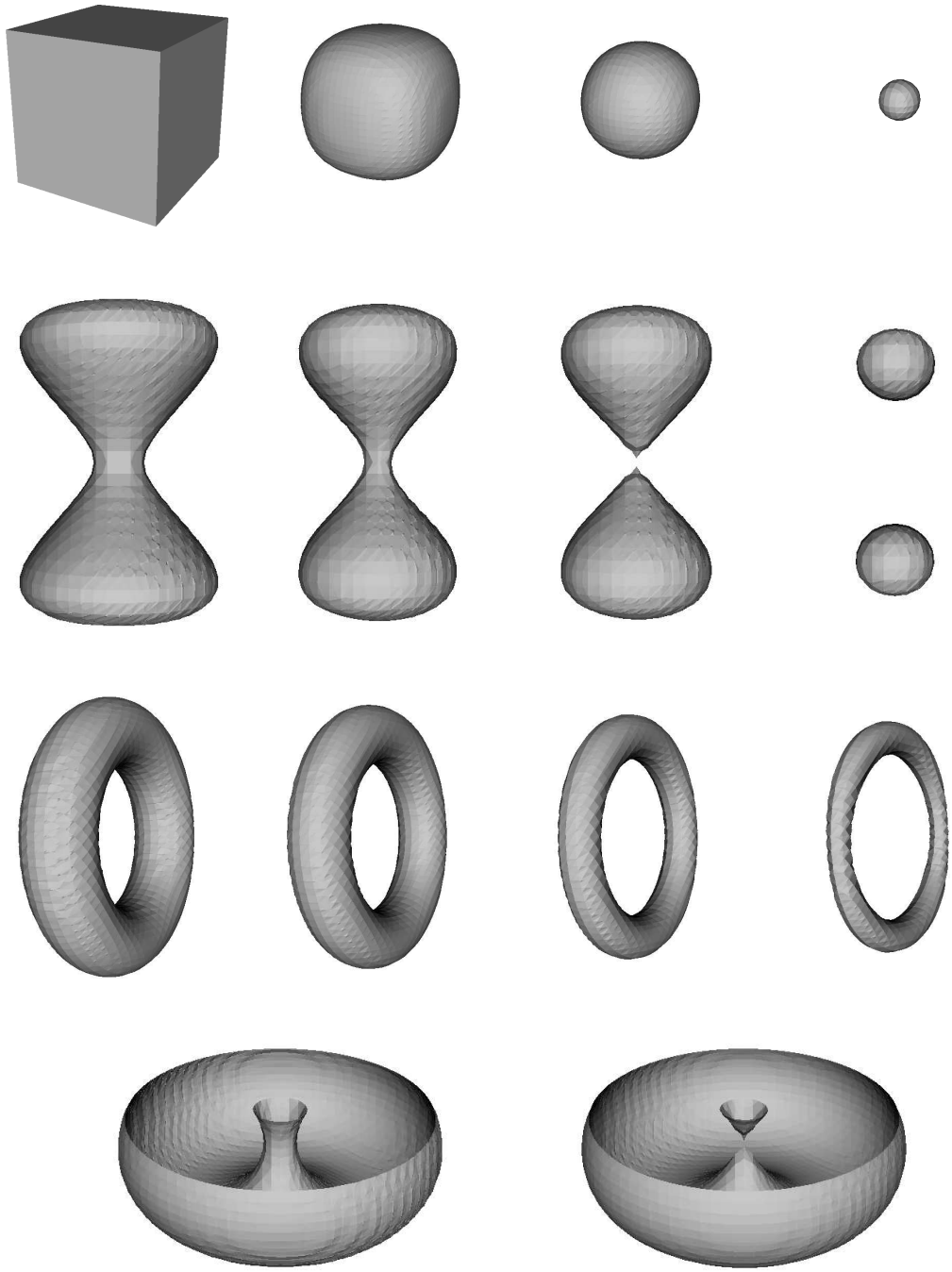


Figure 1.14 – Surfaces évoluant par courbure moyenne en dimension trois.

convexe. Le deuxième exemple est la forme « en haltère » introduite par Grayson [59], qui fait apparaître un changement de topologie. Contrairement au cas du lemniscate en dimension deux, la forme initiale est ici parfaitement régulière. En dimension trois, il peut donc se produire des changements de topologie même avec une forme initiale régulière, ce qui n'est pas possible en dimension deux. Notre troisième exemple est celui d'un tore, pour lequel deux situations peuvent se présenter : un tore fin évolue asymptotiquement vers un cercle, comme sur la troisième ligne de la figure 1.14, tandis qu'un tore épais évolue vers une sphère, en développant une singularité en son centre — voir la vue en coupe sur la dernière ligne de la figure 1.14.

Après ces quelques observations, nous pouvons nous consacrer, dans le chapitre 2, au lien entre mouvement par courbure moyenne et périmètre d'un ensemble.

Chapitre 2

Lien avec le périmètre

L'objectif de ce second chapitre est d'établir aussi concrètement que possible les liens existant entre le mouvement par courbure moyenne, l'équation d'Allen–Cahn, et la notion de périmètre d'un ensemble.

La situation peut grossièrement être résumée par le diagramme de la figure 2.1. Nous essaierons, au cours de ce chapitre, de préciser successivement le sens de chacune des flèches qui apparaissent sur ce diagramme.

$$\begin{array}{ccc} F_\varepsilon(\phi) = \displaystyle\int_Q \left(\frac{\varepsilon}{2}|\nabla\phi|^2 + \frac{1}{\varepsilon}W(\phi)\right) dx & \xrightarrow[\varepsilon \to 0]{\text{Modica–Mortola}} & P(\Omega) = \displaystyle\int_{\partial\Omega} ds \\ \downarrow & & \downarrow \\ \varepsilon\dfrac{\partial\phi}{\partial t} - \varepsilon\Delta\phi + \dfrac{1}{\varepsilon}W'(\phi) = 0 & \xrightarrow[\varepsilon \to 0]{\text{de Mottoni, Schatzmann Chen}} & V_n = -H \end{array}$$

Figure 2.1 – Liens entre le mouvement par courbure moyenne, l'équation d'Allen–Cahn et le périmètre d'un ensemble.

Dans ce qui suit, si Ω est un ensemble mesurable, nous noterons $|\Omega|$ sa mesure, et, selon les cas, nous y ferons référence sous le nom de « volume » ou « d'aire ». Nous noterons, par ailleurs, χ_Ω la fonction indicatrice de l'ensemble Ω.

2.1 Définition du périmètre d'un ensemble

Soit Q un ouvert de $\mathbb{R}^N$. Notons $\mathcal{D}(Q;\mathbb{R}^N)$ l'espace des fonctions de Q dans $\mathbb{R}^N$ qui sont C^∞ à support compact, c'est-à-dire que $\boldsymbol{\phi} = (\phi_1, \ldots, \phi_N)$ appartient à $\mathcal{D}(Q;\mathbb{R}^N)$ si ϕ_i appartient à $\mathcal{D}(Q)$, pour $i = 1, \ldots, N$. On munit $\mathcal{D}(Q;\mathbb{R}^N)$ de la

norme

$$\|\boldsymbol{\phi}\|_\infty = \sup_{x\in Q} |\boldsymbol{\phi}(x)| = \sup_{x\in Q} \left(\sum_{i=1}^{N} \phi_i(x)^2\right)^{1/2}.$$

Définition 1. Soit Ω un ensemble mesurable dans Q. On appelle périmètre de Ω relatif à Q, ou simplement périmètre si $Q = \mathbb{R}^N$, le nombre

$$P_Q(\Omega) = \sup\left\{ \int_\Omega \operatorname{div} \boldsymbol{\phi}\, dx \;\middle|\; \boldsymbol{\phi} \in \mathcal{D}(Q;\mathbb{R}^N),\ \|\boldsymbol{\phi}\|_\infty \le 1 \right\}.$$

Si $Q = \mathbb{R}^N$, on note simplement $P_{\mathbb{R}^N}(\Omega) = P(\Omega)$.

Lorsque Ω est régulier, on retrouve bien sûr la notion usuelle de périmètre, défini comme « surface latérale » du bord de Ω dans Q. C'est ce qu'affirme la proposition suivante, démontrée dans [63].

Proposition 1. *Si Ω est un ouvert borné de classe C^1, alors*

$$P_Q(\Omega) = \int_{\partial\Omega\cap Q} ds,$$

où ds est l'élément de surface sur $\partial\Omega$.

Dans tout ce qui suit, nous supposerons que l'ensemble Ω est strictement inclus dans Q, de sorte que $P_Q(\Omega) = P(\Omega)$ dans tous les cas que nous considérerons. Nous nous contenterons donc de noter $P(\Omega)$ pour désigner le périmètre.

Nous pouvons remarquer que

$$\begin{aligned}
\int_\Omega \operatorname{div} \boldsymbol{\phi}\, dx &= \int_Q \chi_\Omega \left(\sum_{i=1}^{N} \frac{\partial \phi_i}{\partial x_i}\right) dx \\
&= \left\langle \chi_\Omega\,,\ \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial \phi_i}{\partial x_i} \right\rangle_{\mathcal{D}'\times\mathcal{D}} \\
&= -\sum_{i=1}^{N} \left\langle \frac{\partial \chi_\Omega}{\partial x_i}\,,\ \phi_i \right\rangle_{\mathcal{D}'\times\mathcal{D}} \\
&= -\left\langle \nabla\chi_\Omega\,,\ \boldsymbol{\phi}\right\rangle_{\mathcal{D}'\times\mathcal{D}},
\end{aligned}$$

où l'on a noté $\mathcal{D}$ pour $\mathcal{D}(Q;\mathbb{R}^N)$ et $\mathcal{D}'$ pour $\mathcal{D}'(Q;\mathbb{R}^N) = \mathcal{D}'(Q)^N$, l'espace des distributions $(T_1,\dots,T_N)$ avec $T_i \in \mathcal{D}'(Q)$, $i = 1,\dots,N$. Ceci nous permet de donner la définition du périmètre qui suit.

Proposition 2. *Soit Ω un ensemble mesurable dans Q. Si $P(\Omega) < +\infty$, alors on a*

$$P(\Omega) = |D\chi_\Omega|(Q),$$

et le périmètre est donné par la variation totale du gradient de la fonction caractéristique, calculé au sens des distributions dans Q.

La notion de périmètre étant établie, nous nous intéressons, dans la section suivante, aux problèmes d'optimisation de formes dits « isopérimétriques », qui sont des problèmes posés avec des contraintes de conservation du périmètre de l'ensemble recherché.

2.2 Un problème isopérimétrique

Soit Q un ouvert de $\mathbb{R}^N$, et soit V_0 un réel. On considère le problème suivant, qui est l'exemple le plus simple de problème isopérimétrique :

$$\min \{P(\Omega) \mid \Omega \subset Q \text{ mesurable}, \ |\Omega| = V_0\}. \tag{2.1}$$

Notons que, sous cette forme, ce problème n'est pas, en tout cas du point de vue étymologique, un problème isopérimétrique. En effet, on est amené à considérer ici des ensembles de même volume, pas de même périmètre. Néanmoins, la version duale du problème, qui lui est essentiellement équivalente, apparaît bien, elle, comme un problème isopérimétrique :

$$\max \{|\Omega| \mid \Omega \subset Q \text{ mesurable}, \ P(\Omega) = P_0\}.$$

Nous nous intéresserons malgré tout à la formulation (2.1) du problème, qui fait intervenir le périmètre comme fonctionnelle à minimiser plutôt que comme contrainte.

L'existence de solution pour ce problème est donnée par le résultat ci-dessous.

Proposition 3. *Si $|Q| < +\infty$ et si $V_0 \in]0, |Q|[$, alors le problème (2.1) a une solution. Si, de plus, Q peut contenir une boule de mesure V_0, alors toute solution de (2.1) est justement une boule de mesure V_0.*

Remarquons qu'il n'y a pas unicité de la solution au sens propre du terme, puisque n'importe quelle boule de volume V_0 pouvant être contenue dans Q réalisera le minimum.

La démonstration de cette proposition figure dans [63], mais nous avons choisi de la retranscrire ici, puisqu'elle servira de modèle à plusieurs autres démonstrations qui suivent. Nous nous appuierons sur les deux résultats intermédiaires ci-dessous, eux aussi démontrés par Henrot et Pierre dans [63]. Le premier rappelle quelques résultats de continuité pour le volume et le périmètre, vis-à-vis de la convergence des fonctions caractéristiques. Le second porte sur la convergence des suites d'ensembles de périmètre borné.

Proposition 4. *Soit (Ω_n) et Ω des parties mesurables bornées de $\mathbb{R}^N$.*
Si $\chi_{\Omega_n} \to \chi_\Omega$ dans $L^1_{loc}(Q)$, alors $|\Omega| \leq \liminf |\Omega_n|$ et $P(\Omega) \leq \liminf P(\Omega_n)$.
Si $\chi_{\Omega_n} \to \chi_\Omega$ dans $L^1(Q)$, alors $|\Omega| = \lim |\Omega_n|$ et $P(\Omega) \leq \liminf P(\Omega_n)$.

Le périmètre est donc semi-continu inférieurement (s.c.i.) pour la convergence forte des fonctions caractéristiques.

Remarquons que si l'on a seulement la convergence faible $\chi_{\Omega_n} \rightharpoonup \chi_\Omega$ dans $L^1(\mathbb{R}^N)$, on peut montrer qu'alors χ_{Ω_n} converge fortement vers χ_Ω dans $L^1_{loc}(\mathbb{R}^N)$, et donc la première partie de la proposition s'applique.

Théorème 1. *Soit (Ω_n) une suite de parties mesurables d'un ouvert Q de $\mathbb{R}^N$. On suppose que*

$$|\Omega_n| + P(\Omega_n) \leq C,$$

où C est une constante indépendante de n. Il existe alors $\Omega \in Q$ mesurable et une suite extraite (Ω_{n_k}) tels que

$$\chi_{\Omega_{n_k}} \to \chi_\Omega \text{ dans } L^1_{loc}(Q)$$

et

$$\nabla\chi_{\Omega_{n_k}} \overset{*}{\rightharpoonup} \nabla\chi_\Omega \text{ dans } \sigma\Big(\mathcal{M}_b(Q)^N, C_0(Q)^N\Big),$$

où $\sigma\Big(\mathcal{M}_b(Q)^N, C_0(Q)^N\Big)$ désigne la topologie sur les mesures de Radon de masse totale finie $\mathcal{M}_b(Q)^N$, vues comme formes linéaires continues sur $C_0(Q)^N$, espace des fonctions continues sur Q à support compact. Si, de plus, Q est de mesure finie, la convergence de $\nabla\chi_{\Omega_{n_k}}$ vers $\nabla\chi_\Omega$ a lieu dans $L^1(Q)$.

Nous pouvons maintenant, à l'aide de ces deux résultats, donner la preuve de la proposition 3, reprise de [63].

Démonstration (de la proposition 3). Vérifions d'abord que la famille des Ω admissibles n'est pas vide, en construisant un ouvert de Q de périmètre fini et de mesure V_0. Puisque Q est ouvert, il est réunion dénombrable de boules, soit $Q = \cup_p B_p$. Pour k assez grand, la réunion des k premières boules $\omega_k = \cup_{p\leq k} B_p$ est de mesure supérieure ou égale à V_0, et c'est un ouvert de périmètre fini. Il existe alors $r \in]0, +\infty[$ tel que $\omega_k \cap B(0,r)$ soit exactement de mesure V_0, et c'est encore un ouvert de périmètre fini.

Soit maintenant (Ω_n) une suite minimisante pour le problème (2.1). Puisque $P(\Omega_n)$ est borné, il existe, d'après le théorème 1, $\Omega^* \subset Q$ mesurable et une suite extraite (Ω_{n_k}) tels que $\chi_{\Omega_{n_k}}$ converge dans $L^1(Q)$ vers χ_{Ω^*}. On a $|\Omega^*| = V_0$ et, par semi-continuité inférieure, $P(\Omega^*) \leq \lim P(\Omega_n)$. Il en résulte que Ω^* réalise le minimum dans (2.1).

On rappelle l'inégalité isopérimétrique, selon laquelle, pour tout ensemble A de mesure $|A| = V_0$, on a $P(A) \geq c_N |A|^{(N-1)/N}$ avec $c_N = N V_N^{1/N}$, où V_N est la mesure de la boule unité, et l'égalité n'a lieu que si A est une boule. Ainsi, si Q peut contenir une boule de mesure V_0, cette boule réalise le minimum cherché, et toute autre solution est nécessairement une boule. ∎

Notons que si Q n'est pas de mesure finie, il se peut que le problème (2.1) n'admette pas de solution — voir un exemple dans [63]. Bien sûr, si Q est de mesure infinie mais peut néanmoins contenir une boule de volume V_0, alors cette boule est solution de (2.1).

On pourra aussi noter que la contrainte de volume peut être remplacée par une contrainte plus générale, du type

$$\int_\Omega f\,dx = C,$$

où f est donnée dans $L^1(Q)$ et C dans $\mathbb{R}$. Les résultats sont similaires, sous réserve que la famille des ensembles admissibles soit non vide.

Le problème (2.1) étant posé, nous allons tenter d'en établir le lien avec le mouvement par courbure moyenne. Pour cela, nous aurons besoin des outils de dérivation de domaine décrits dans la section suivante.

2.3 Notion de dérivation par rapport au domaine

La question de la variation de domaines n'est pas une question récente, puisqu'on cite souvent comme article pionner celui de Hadamard en 1907 [61]. De nombreux travaux ont suivi — voir les ouvrages [90, 103, 63, 2] pour des références précises et nombreuses.

Nous reprenons ici l'approche de Murat et Simon [100, 101, 102], telle qu'elle est présentée dans [2]. Nous commençons par définir ce qu'est la différentiabilité par rapport au domaine, pour donner ensuite les formules de dérivation d'intégrales sur un domaine variable, puis sur un bord variable.

2.3.1 Définition

L'idée consiste à paramétrer les variations d'un domaine par un espace vectoriel, sur lequel on pourra utiliser la notion habituelle de dérivabilité. Précisément, soit Ω_0 un ouvert borné de $\mathbb{R}^N$, que l'on suppose régulier. On considère, pour $\boldsymbol{\theta}$ dans $W^{1,\infty}(\mathbb{R}^N;\mathbb{R}^N)$, l'ensemble $\Omega = (\mathrm{Id}+\boldsymbol{\theta})(\Omega_0)$ défini par

$$\Omega = \{x + \boldsymbol{\theta}(x) \mid x \in \Omega_0\}\,.$$

La notation Id désigne l'application identité de $\mathbb{R}^N$ dans $\mathbb{R}^N$. L'application $\boldsymbol{\theta}$ peut être vue comme un champ de vecteur qui déplace le domaine de référence Ω_0, comme sur la figure 2.2.

Nous pouvons dès lors nous donner un ensemble de formes admissibles $\mathcal{A}(\Omega_0)$: chaque forme admissible $\Omega \in \mathcal{A}(\Omega_0)$ sera représentée par un champ de vecteur $\boldsymbol{\theta}$ de $\mathbb{R}^N$ dans $\mathbb{R}^N$.

Pour dériver par rapport à $\boldsymbol{\theta}$, nous aurons besoin du lemme suivant, dont la démonstration est donnée par Allaire dans [2].

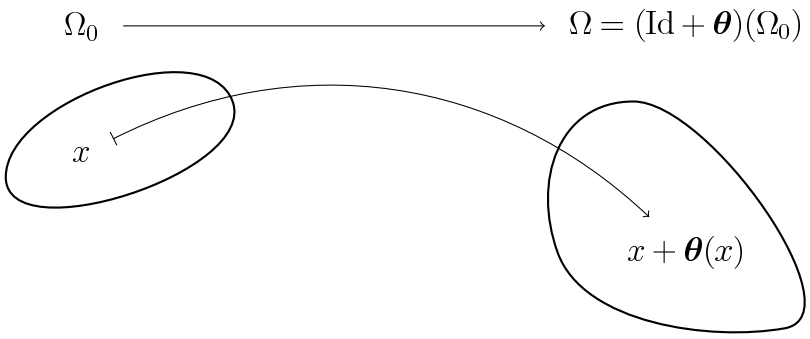


Figure 2.2 – Un domaine Ω_0 déplacé par un champ de vecteur $\boldsymbol{\theta}$.

Lemme 1. *Pour tout $\boldsymbol{\theta}$ de $W^{1,\infty}(\mathbb{R}^N;\mathbb{R}^N)$ vérifiant $\|\boldsymbol{\theta}\|_{W^{1,\infty}(\mathbb{R}^N;\mathbb{R}^N)} < 1$, l'application $T = \mathrm{Id} + \boldsymbol{\theta}$ est une bijection de $\mathbb{R}^N$ dans lui-même, et appartient à l'ensemble $\mathcal{T}$ défini par*

$$T \in \mathcal{T} \Longleftrightarrow \begin{cases} T \text{ difféomorphisme de } \mathbb{R}^N \text{ dans } \mathbb{R}^N, \\ (T - \mathrm{Id}) \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}^N;\mathbb{R}^N), \\ (T^{-1} - \mathrm{Id}) \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}^N;\mathbb{R}^N). \end{cases}$$

Nous faisons simplement remarquer que le choix de l'espace $W^{1,\infty}(\mathbb{R}^N;\mathbb{R}^N)$, s'il est naturel, n'est pas impératif : il est possible de reprendre la théorie avec des fonctions régulières, en choisissant l'espace $C^1_b(\mathbb{R}^N;\mathbb{R}^N)$ des champs de vecteur continûment différentiables et uniformément bornés comme leur gradient.

Nous pouvons maintenant définir la notion de différentiabilité par rapport au domaine.

Définition 2. Soit J une application de l'ensemble des formes $\mathcal{A}(\Omega_0)$ dans $\mathbb{R}$. On dit que J est différentiable par rapport au domaine en Ω_0 si la fonction

$$\boldsymbol{\theta} \mapsto J\Big((\mathrm{Id} + \boldsymbol{\theta})(\Omega_0)\Big)$$

est différentiable en 0 dans l'espace de Banach $W^{1,\infty}(\mathbb{R}^N;\mathbb{R}^N)$.

Remarquons que cette définition s'applique aussi dans le cas où J est une application de $\mathcal{A}(\Omega_0)$ dans un espace de Banach.

Une propriété surprenante de la dérivée par rapport au domaine $J'(\Omega_0)$ découle du fait que la représentation d'un domaine Ω de $\mathcal{A}(\Omega_0)$ par un difféomorphisme n'est pas unique. Autrement dit, il peut exister $\boldsymbol{\theta_1} \neq \boldsymbol{\theta_2}$ tels que $(\mathrm{Id} + \boldsymbol{\theta_1})(\Omega_0) = (\mathrm{Id} + \boldsymbol{\theta_2})(\Omega_0)$. Par exemple, si $\boldsymbol{\theta_1} = 0$ et si $\boldsymbol{\theta_2}$ est à support compact dans Ω_0 et de norme suffisamment petite, alors les difféomorphismes $(\mathrm{Id} + \boldsymbol{\theta_1})$ et $(\mathrm{Id} + \boldsymbol{\theta_2})$ laissent invariants tous les points du bord $\partial\Omega_0$ et ont la même image globale de l'intérieur Ω_0. Plus généralement, la proposition suivante, elle aussi démontrée dans [2], indique que la forme linéaire $\boldsymbol{\theta} \mapsto J'(\Omega_0)(\boldsymbol{\theta})$ ne dépend que de la composante normale de $\boldsymbol{\theta}$ sur le bord de Ω_0.

Proposition 5. *Soit Ω_0 un ouvert borné régulier de $\mathbb{R}^N$, et soit J une application différentiable en Ω_0. Si $\boldsymbol{\theta_1}$ et $\boldsymbol{\theta_2}$ dans $W^{1,\infty}(\mathbb{R}^N;\mathbb{R}^N)$ sont tels que $\boldsymbol{\theta_2}-\boldsymbol{\theta_1} \in C^1(\mathbb{R}^N;\mathbb{R}^N)$ et $\boldsymbol{\theta_1}\cdot\boldsymbol{n} = \boldsymbol{\theta_2}\cdot\boldsymbol{n}$ sur $\partial\Omega_0$, alors la dérivée $J'(\Omega_0)$ vérifie*

$$J'(\Omega_0)(\boldsymbol{\theta_1}) = J'(\Omega_0)(\boldsymbol{\theta_2}).$$

Ce résultat s'interprète géométriquement en disant que, si $\boldsymbol{\theta_1}$ et $\boldsymbol{\theta_2}$ sont petits, les domaines $(\mathrm{Id}+\boldsymbol{\theta_1})(\Omega_0)$ et $(\mathrm{Id}+\boldsymbol{\theta_2})(\Omega_0)$ sont égaux au second ordre près dès que $\boldsymbol{\theta_1}\cdot\boldsymbol{n} = \boldsymbol{\theta_2}\cdot\boldsymbol{n}$ sur $\partial\Omega_0$ — voir la figure 2.3.

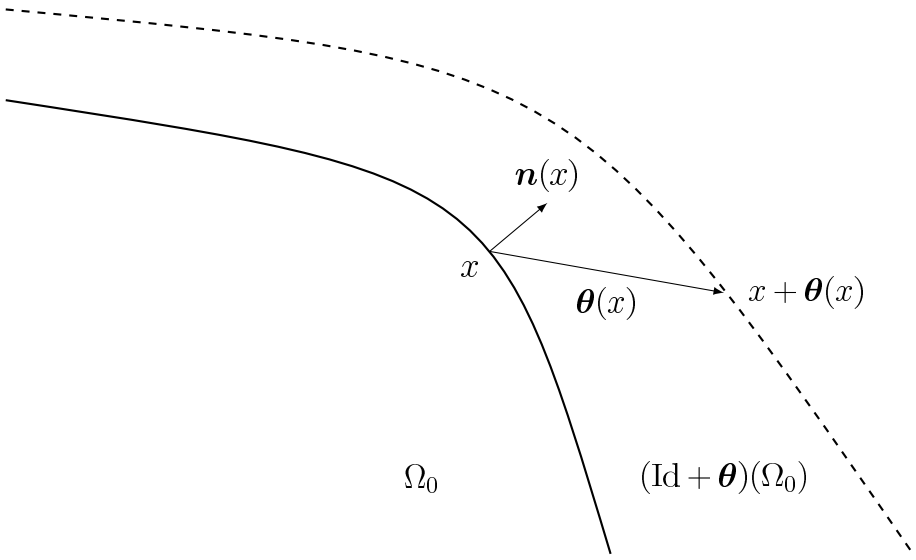


Figure 2.3 – Variation d'un domaine par un champ de vecteur $\boldsymbol{\theta}$.

Nous abordons, dans le paragraphe suivant, les cas particuliers où J est donnée par une intégrale sur le domaine ou par une intégrale sur le bord.

2.3.2 Dérivation d'intégrales

Nous continuons ici à suivre [2], et nous nous contenterons de donner, sans les démontrer, les deux propositions qui fournissent les formules de dérivation d'intégrales, respectivement sur un domaine variable et sur un bord variable. L'idée principale est la même à chaque fois : on se ramène au domaine de référence (fixe) Ω_0 par un changement de variable. Nous supposerons que les fonctions considérées sont suffisamment régulières pour pouvoir effectuer toutes les opérations nécessaires, c'est-à-dire toutes les dérivations et intégrations par parties.

Proposition 6 (Intégrale sur un domaine variable). *Soit Ω_0 un ouvert borné régulier de $\mathbb{R}^N$. Soit $f \in W^{1,1}(\mathbb{R}^N)$ et soit J l'application de $\mathcal{A}(\Omega_0)$ dans $\mathbb{R}$ définie par*

$$J(\Omega) = \int_\Omega f\,dx.$$

Alors J est différentiable en Ω_0, et, pour tout $\boldsymbol{\theta} \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}^N;\mathbb{R}^N)$, on a

$$\begin{aligned} J'(\Omega_0)(\boldsymbol{\theta}) &= \int_{\Omega_0} \operatorname{div}(\boldsymbol{\theta} f)\, dx \\ &= \int_{\partial\Omega_0} (\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{n}) f\, ds. \end{aligned}$$

Proposition 7 (Intégrale sur un bord variable). *Soit Ω_0 un ouvert borné régulier de $\mathbb{R}^N$. Soit $f \in W^{2,1}(\mathbb{R}^N)$ et soit J l'application de $\mathcal{A}(\Omega_0)$ dans $\mathbb{R}$ définie par*

$$J(\Omega) = \int_{\partial\Omega} f\, ds.$$

Alors J est différentiable en Ω_0, et, pour tout $\boldsymbol{\theta} \in C^1(\mathbb{R}^N;\mathbb{R}^N)$, on a

$$\begin{aligned} J'(\Omega_0)(\boldsymbol{\theta}) &= \int_{\partial\Omega_0} \Big(\nabla f\cdot\boldsymbol{\theta} + f\big(\operatorname{div}\boldsymbol{\theta} - (\nabla\boldsymbol{\theta})\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{n}\big)\Big)\, ds \\ &= \int_{\partial\Omega_0} (\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{n})\left(\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{n}} + Hf\right) ds, \end{aligned}$$

où H est la courbure moyenne de $\partial\Omega_0$, définie par $H = \operatorname{div}\boldsymbol{n}$.

Remarquons que pour ce second résultat, il faut considérer $\boldsymbol{\theta}$ de classe C^1 et non plus seulement dans $W^{1,\infty}(\mathbb{R}^N;\mathbb{R}^N)$, puisque l'on a besoin de définir la trace de $\nabla\boldsymbol{\theta}$ sur $\partial\Omega_0$. La différentiabilité par rapport au domaine se définit, dans ce cas, en remplaçant $W^{1,\infty}(\mathbb{R}^N;\mathbb{R}^N)$ par $C^1(\mathbb{R}^N;\mathbb{R}^N)$ dans la définition 2.

Nous nous contenterons, dans notre exposé, des deux formules précédentes, mais il est possible de calculer des dérivées d'intégrales plus compliquées, en particulier dans le cas où la fonction qui intervient dans l'intégrale dépend elle-même du domaine :

$$J(\Omega) = \int_{\Omega} u(\Omega)\, dx$$

ou

$$J(\Omega) = \int_{\partial\Omega} u(\Omega)\, ds.$$

La fonction u pourra, par exemple, être solution d'une équation aux dérivées partielles posée dans Ω. Dans cette situation, il existe en fait deux types de dérivées : une dérivée eulérienne, ou dérivée de forme, et une dérivée lagrangienne, ou dérivée matérielle. Leur calcul fait intervenir des points délicats, et nous renvoyons une fois de plus le lecteur intéressé aux ouvrages [2] et [63].

Notre objectif est simplement, dans le paragraphe qui suit, de calculer la dérivée par rapport au domaine de la fonctionnelle périmètre.

2.3.3 Exemple du périmètre

Soit Ω_0 un ouvert borné régulier de $\mathbb{R}^N$ et $\mathcal{A}(\Omega_0)$ l'ensemble de formes admissibles défini comme précédemment. Pour Ω dans $\mathcal{A}(\Omega_0)$, le périmètre de Ω est donné par

$$P(\Omega) = \int_{\partial\Omega} 1 \, ds.$$

On peut, très simplement, appliquer la formule de la proposition 7 pour calculer la dérivée par rapport au domaine du périmètre en Ω_0. On obtient, pour tout $\boldsymbol{\theta}$ de $C^1(\mathbb{R}^N;\mathbb{R}^N)$,

$$P'(\Omega_0)(\boldsymbol{\theta}) = \int_{\partial\Omega_0} (\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{n}) H \, ds,$$

où H est la courbure moyenne de $\partial\Omega_0$. On constate alors immédiatement que, si l'on choisit $\boldsymbol{\theta}$ tel que

$$\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{n} = -H,$$

la dérivée du périmètre par rapport au domaine sera toujours négative. En d'autres termes, si l'on fait évoluer la frontière d'un domaine dans la direction normale à une vitesse $-H$, on a la garantie de faire décroître son périmètre. Cela exprime le fait que le mouvement par courbure moyenne, défini par

$$V_n = -H,$$

où V_n est la vitesse normale de l'interface, peut s'interpréter comme un flot de gradient géométrique pour la fonctionnelle de périmètre. C'est le sens de la flèche verticale de droite sur la figure 2.1.

Nous allons maintenant étudier une version approchée, par la méthode de champ de phase, du problème isopérimétrique (2.1), posé page 37. Nous allons en particulier exposer le résultat de convergence des solutions du problème approché vers les solutions du problème initial.

2.4 Approximation du périmètre par champ de phase

Nous suivons principalement, dans cette section, les notes d'Ambrosio [4] et d'Alberti [1].

Soit Q un ouvert de $\mathbb{R}^N$. Pour ϕ dans $H^1(Q)$ et $\varepsilon > 0$, introduisons la fonctionnelle

$$F_\varepsilon(\phi) = \int_Q \left(\frac{\varepsilon}{2}|\nabla\phi|^2 + \frac{1}{\varepsilon} W(\phi) \right) dx, \tag{2.2}$$

où W est un potentiel bistable, de type double puits ou double obstacle. Nous allons nous intéresser particulièrement au problème de minimisation suivant :

$$\min \left\{ F_\varepsilon(\phi) \;\middle|\; \phi \in H^1(Q), \; \int_Q \phi \, dx = V_0 \right\}, \tag{2.3}$$

où V_0 est un réel donné dans $]0, |Q|[$. Notre but est de montrer que ce nouveau problème permet d'approcher le problème initial (2.1). Nous commencerons par montrer l'existence de solutions, puis nous étudierons la limite de ces solutions quand ε tend vers 0.

2.4.1 Existence de solutions pour le problème approché

Le problème (2.3) entre tout à fait dans le cadre du « calcul des variations », tel qu'il est par exemple présenté par Evans dans son ouvrage [44]. Ainsi, à ε fixé, l'existence de solutions va découler directement de la semi-continuité inférieure et de la coercivité de la fonctionnelle F_ε.

Nous allons reprendre brièvement le formalisme employé par Evans, et rappeler les définitions et les résultats qui permettent de conclure. Nous nous intéressons au cas d'une fonctionnelle G définie par une intégrale :

$$G(w) = \int_Q g\big(\nabla w(x), w(x), x\big)\, dx, \tag{2.4}$$

où Q est un ouvert borné de $\mathbb{R}^N$, et w une fonction définie sur Q à valeurs dans $\mathbb{R}$.

La coercivité de la fonctionnelle G sera essentielle par la suite. Dans tout ce qui suit, q désigne un entier tel que $1 < q < +\infty$.

Définition 3. Coercivité Soit Q un ouvert borné de $\mathbb{R}^N$, et soit G une fonction définie sur $W^{1,q}(Q)$ à valeurs dans $\mathbb{R}$. On dit que G est coercive s'il existe $\delta > 0$ et $\gamma \geq 0$ tels que

$$G(w) \geq \delta \|\nabla w\|^q_{L^q(Q)} - \gamma$$

pour tout w de $W^{1,q}(Q)$.

Dans le cas où G est définie par une intégrale comme en (2.4), sa coercivité pourra découler simplement de la coercivité de g en sa première variable. En effet, supposons qu'il existe $\alpha > 0$ et $\beta \geq 0$ tels que

$$g(p, z, x) \geq \alpha |p|^q - \beta$$

pour tout p de $\mathbb{R}^N$, z de $\mathbb{R}$ et x de Q, alors G est immédiatement coercive, avec $\gamma = \beta|Q|$ et $\delta = \alpha$ dans la définition 3.

Rappelons également la définition de la semi-continuité inférieure, qui est le deuxième ingrédient principal pour montrer que le problème (2.3) a une solution.

Définition 4 (Semi-continuité inférieure). On dit qu'une fonction G est (faiblement) semi-continue inférieurement (s.c.i.) si, pour toute suite (w_n) convergeant faiblement vers w dans $W^{1,q}(Q)$, on a

$$G(w) \leq \liminf_{n \to +\infty} G(w_n).$$

Si G est définie par une intégrale, une condition suffisante de semi-continuité inférieure est la convexité de la fonction g en sa première variable. C'est ce qu'affirme le résultat suivant, démontré dans [44].

Théorème 2. *Soit Q un ouvert borné de $\mathbb{R}^N$, et soit G définie sur $W^{1,q}(Q)$ par*

$$G(w) = \int_Q g\Big(\nabla w(x), w(x), x\Big)\, dx.$$

Si g est régulière, minorée, et si la fonction $p \mapsto g(p, z, x)$ est convexe pour tout z de $\mathbb{R}$ et tout x de Q, alors G est faiblement semi-continue inférieurement sur $W^{1,q}(Q)$.

Le résultat suivant assure l'existence d'un minimum sous des hypothèses de coercivité et de semi-continuité inférieure.

Théorème 3. *Existence d'un minimum Soit Q un ouvert borné de $\mathbb{R}^N$, et soit G définie sur $W^{1,q}(Q)$ par*

$$G(w) = \int_Q g\Big(\nabla w(x), w(x), x\Big)\, dx.$$

Supposons qu'il existe $\alpha > 0$ et $\beta \geq 0$ tels que

$$g(p, z, x) \geq \alpha |p|^q - \beta$$

pour tout p de $\mathbb{R}^N$, z de $\mathbb{R}$ et x de Q. Supposons également que g est convexe en sa variable p. Soit enfin X un sous-espace non vide de $W^{1,q}(Q)$. Alors il existe au moins une fonction u dans X telle que

$$G(u) = \min_{w \in X} G(w).$$

La démonstration de ce résultat se trouve également dans [44], et nous y renvoyons le lecteur.

Remarquons que s'il est question de l'existence d'un minimum, rien n'est dit dans le résultat précédent sur son unicité. C'est qu'il faut ajouter des conditions de convexité supplémentaires sur la fonction g pour espérer l'obtenir. Or, ces hypothèses ne sont pas vérifiées dans le cas (2.2) qui nous occupe.

Il nous reste maintenant à conclure, c'est-à-dire à énoncer le théorème d'existence de solutions pour le problème (2.3).

Proposition 8. *Soit Q un ouvert borné de $\mathbb{R}^N$, et soit V_0 dans $]0, |Q|[$. Soit X l'espace de fonctions défini par*

$$X = \left\{ \phi \in H^1(Q) \;\middle|\; \int_Q \phi\, dx = V_0 \right\}.$$

Pour $\varepsilon > 0$ et ϕ dans $H^1(Q)$, soit F_ε définie comme en (2.2) par

$$F_\varepsilon(\phi) = \int_Q \left(\frac{\varepsilon}{2} |\nabla \phi|^2 + \frac{1}{\varepsilon} W(\phi) \right) dx,$$

où W est un potentiel de type bistable. Alors le problème

$$\min \{ F_\varepsilon(\phi) \mid \phi \in X \}$$

a une solution.

Au vu de ce qui précède, la démonstration est immédiate, puisque les hypothèses de coercivité et de convexité de la fonction sous l'intégrale en sa variable $\nabla\phi$ sont clairement vérifiées. L'ensemble de fonctions admissibles est par ailleurs non vide : il suffit de choisir une partie de Q de mesure V_0 — il en existe puisque $V_0 \in]0, |Q|[$ —, et sa fonction indicatrice sera dans X.

Une remarque cependant : s'il y a existence de solutions, il n'y a sûrement pas unicité ! En effet, de par sa nature même, le potentiel W n'est pas convexe, et donc F_ε ne l'est pas non plus. On ne peut donc pas conclure.

Maintenant que nous sommes assurés de l'existence de solutions au problème que nous nous sommes posé, nous pouvons nous intéresser à la limite quand $\varepsilon \to 0$ de ces solutions.

2.4.2 Convergence : le théorème de Modica–Mortola

Le théorème de Modica–Mortola [75, 74] établit le lien entre la fonctionnelle F_ε définie en (2.2) et le périmètre d'un ensemble tel que nous l'avons défini au début de ce chapitre.

Outre la démonstration initiale donnée par Modica [74], on en trouve de nombreuses autres dans la littérature, par exemple par Ambrosio [4] et par Alberti [1], ou dans de nombreux ouvrages portant sur le calcul des variations, comme celui de Jost et Li-Jost [65].

L'énoncé du théorème fait intervenir la notion de Γ-convergence, dont nous donnons une définition ci-dessous. Pour une introduction plus complète, nous renvoyons le lecteur à l'ouvrage de Braides [12].

Définition 5. Soit X un espace métrique, et, pour $\varepsilon > 0$, soit $F_\varepsilon : X \to [0, +\infty]$. On dit que F_ε Γ-converge, quand ε tend vers 0, vers F sur X, si les deux conditions suivantes sont satisfaites :

1. (« semi-continuité inférieure »)
   pour tout u de X et toute suite (u_ε) telle que $u_\varepsilon \to u$ dans X, on a

$$\liminf_{\varepsilon \to 0} F_\varepsilon(u_\varepsilon) \geq F(u) \ ;$$

2. (critère de recouvrement)
pour tout u de X, il existe une suite (u_ε) telle que $u_\varepsilon \to u$ dans X, avec

$$\lim_{\varepsilon\to 0} F_\varepsilon(u_\varepsilon) = F(u).$$

Nous pouvons maintenant énoncer le théorème.

Théorème 4 (Modica–Mortola). *Soit Q un ouvert borné de $\mathbb{R}^N$, et soit V_0 dans $]0,|Q|[$. Soit X l'espace fonctionnel défini par*

$$X = \left\{ \phi \in H^1(Q) \;\middle|\; \int_Q \phi\, dx = V_0 \right\}.$$

Prolongeons la fonctionnelle F_ε définie en (2.2) à tout l'espace $L^2(Q)$ en posant

$$F_\varepsilon(\phi) = \begin{cases} \displaystyle\int_Q \left(\frac{\varepsilon}{2}|\nabla\phi|^2 + \frac{1}{\varepsilon} W(\phi) \right) dx & \text{si } \phi \in X, \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases}$$

Supposons que W est une fonction continue sur $\mathbb{R}$, positive, et qui ne s'annule qu'en 0 et 1. Alors les fonctionnelles F_ε Γ-convergent, quand ε tend vers 0, vers une limite $\lambda_W F$, où F est définie par

$$F(\phi) = \begin{cases} |D\chi_\Omega|(Q) & \text{si } \phi = \chi_\Omega, \\ +\infty & \text{sinon,} \end{cases}$$

et la constante λ_W est donnée par

$$\lambda_W = \int_0^1 \sqrt{2W(t)}\, dt.$$

La notation $|D\phi|(Q)$ pour ϕ dans $L^1(Q)$ désigne ici la quantité

$$\sup \left\{ \int_Q \phi \operatorname{div} \boldsymbol{g}\, dx \;\middle|\; \boldsymbol{g} \in \mathcal{D}(Q;\mathbb{R}^N) \right\},$$

qui coïncide avec la norme L^1 de $\nabla\phi$ si $\phi \in W^{1,1}(Q)$, et avec le périmètre de Ω dans Q si $\phi = \chi_\Omega$ et si Ω est un domaine de Cacciopoli [56] — revoir la définition du périmètre donnée page 36. Le lien avec le périmètre d'un ensemble est donc clairement établi, ce qui justifie la première flèche horizontale sur la figure 2.1.

Nous pouvons, pour clore ce chapitre, revenir à l'équation d'Allen–Cahn et à ses connexions avec ce que nous venons de présenter.

2.5 Retour à l'équation d'Allen–Cahn

Nous avons déjà mentionné, dans le chapitre précédent, les résultats de de Mottoni et Schatzman [25, 26], ainsi que ceux de Chen [20]. Ils établissent la convergence de l'équation d'Allen–Cahn vers le mouvement par courbure moyenne, au sens où la ligne de niveau $\frac{1}{2}$ de la solution de l'équation d'Allen–Cahn va converger, quand $\varepsilon \to 0$, vers une surface évoluant par courbure moyenne. Cette convergence est symbolisée, sur la figure 2.1, par la seconde flèche horizontale.

Il ne nous reste plus qu'à retrouver l'équation d'Allen–Cahn comme flot de gradient de la fonctionnelle F_ε définie en (2.2). Pour cela, calculons formellement la différentielle F'_ε :

$$\begin{aligned} F'_\varepsilon(\phi)(\psi) &= \varepsilon \int_Q \nabla\phi \cdot \nabla\psi \, dx + \frac{1}{\varepsilon} \int_Q W'(\phi)\psi \, dx \\ &= \int_Q \left(-\varepsilon\Delta\phi + \frac{1}{\varepsilon} W'(\phi) \right) \psi \, dx \\ &= \langle \nabla F_\varepsilon(\phi) \, , \, \psi \rangle_{L^2} \, . \end{aligned}$$

Le flot de gradient de F_ε, que nous écrivons

$$\varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\nabla F_\varepsilon(\phi),$$

n'est autre que l'équation d'Allen–Cahn

$$\varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial t} - \varepsilon\Delta\phi + \frac{1}{\varepsilon} W'(\phi) = 0.$$

C'est le sens de la flèche verticale de gauche sur la figure 2.1.

Nous avons ainsi établi toutes les connexions annoncées dans l'introduction de ce chapitre, et justifié le diagramme de la figure 2.1.

Dans le chapitre suivant, nous nous intéressons plus en détail à la contrainte de volume $|\Omega| = V_0$, ainsi qu'à sa version approchée,

$$\int_Q \phi \, dx = V_0.$$

Chapitre 3

La question de la conservation du volume

Nous nous intéressons, dans ce chapitre, aux différentes stratégies permettant d'imposer en pratique la contrainte de conservation du volume, dans le cas du mouvement par courbure moyenne. Notre démarche vise, comme précédemment, à choisir laquelle de ces stratégies est la plus avantageuse en vue de nos simulations à venir.

La conservation du volume est un élément essentiel dans de nombreux modèles. En physique et en mécanique, elle traduit généralement la loi fondamentale de conservation de la masse. C'est le cas dans les problèmes de mélanges de fluides, de séparation de phases, et dans bien d'autres applications. Il s'agit d'un aspect souvent difficile à gérer numériquement, et de nombreux codes de calcul peinent à conserver efficacement le volume.

Ici, nous présenterons essentiellement deux approches : une procédure de pénalisation de la contrainte, et une méthode de Lagrangien. Elles sont toutes les deux basées non pas sur le mouvement par courbure moyenne directement, mais sur le problème de minimisation étudié dans le chapitre précédent,

$$\min \{P(\Omega) \mid \Omega \subset Q \text{ mesurable}, \ |\Omega| = V_0\}, \tag{3.1}$$

et sur sa version approchée par champ de phase,

$$\min \left\{ \int_Q \left(\frac{\varepsilon}{2}|\nabla\phi|^2 + \frac{1}{\varepsilon}W(\phi) \right) dx \;\middle|\; \phi \in H^1(Q), \ \int_Q \phi\, dx = V_0 \right\}, \tag{3.2}$$

Q désignant un ouvert borné de $\mathbb{R}^N$, et V_0 un réel dans $]0, |Q|[$. Dans tout le chapitre, nous supposerons, sauf mention contraire, que ϕ vérifie des conditions aux limites de Neumann homogènes sur le bord de Q.

Nous étudierons tout d'abord la pénalisation de la contrainte. Nous introduirons les problèmes pénalisés associés à (3.1) et (3.2), et nous donnerons quelques résultats sur ces nouveaux problèmes. Nous présenterons alors les résultats numériques obtenus avec notre implémentation de la pénalisation.

Nous nous pencherons, dans un deuxième temps, sur la méthode du Lagrangien, en commençant par introduire les Lagrangiens associés aux deux problèmes (3.1) et (3.2), pour ensuite tester notre implémentation, basée sur l'algorithme d'Uzawa.

Pour clore ce chapitre, nous constaterons que le multiplicateur de Lagrange qui intervient dans la méthode du Lagrangien peut, dans le cas du mouvement par courbure moyenne, être déterminé de manière explicite. Nous verrons que ceci nous amène à considérer un nouveau mouvement géométrique d'interfaces, le mouvement par courbure moyenne « conservé » (*conserved mean curvature flow*). Nous présenterons également des simulations effectuées sur ce nouveau mouvement.

3.1 Pénalisation de la contrainte

La pénalisation des contraintes est une procédure permettant de remplacer la résolution d'un problème d'optimisation sous contraintes par une suite de problèmes d'optimisation sans contrainte. L'intérêt, du point de vue pratique, est alors de pouvoir utiliser toute la gamme d'algorithmes classiques d'optimisation sans contrainte.

Nous étudierons d'abord la pénalisation appliquée au problème géométrique (3.1), avant de nous pencher sur le problème approché (3.2).

3.1.1 Pénalisation pour le problème géométrique

Une façon de traiter la contrainte $|\Omega| = V_0$ dans le problème (3.1) consiste à introduire, pour $\eta > 0$, la fonctionnelle F_η suivante, où la contrainte est dite « pénalisée » :

$$F_\eta(\Omega) = P(\Omega) + \frac{1}{\eta}\big(|\Omega| - V_0\big)^2. \tag{3.3}$$

Nous pouvons alors considérer, à η fixé, le problème de minimisation sans contrainte

$$\min\left\{F_\eta(\Omega) \mid \Omega \subset Q \text{ mesurable}\right\}. \tag{3.4}$$

Nous disposons, comme pour le problème initial (3.1), d'un résultat d'existence, énoncé ci-dessous.

Proposition 9. *Si $|Q| < +\infty$ et si $V_0 \in]0, |Q|[$, alors pour tout $\eta > 0$, le problème (3.4) a une solution.*

La démonstration repose sur les mêmes arguments que pour la proposition 3 du chapitre 2, page 37.

Démonstration. Il est clair, cette fois, que l'ensemble des Ω admissibles n'est pas vide. Soit donc (Ω_n) une suite minimisante pour le problème (3.4). Si $F_\eta(\Omega_n)$ est bornée alors $P(\Omega_n)$ l'est aussi, et on peut à nouveau utiliser le théorème 1, page 38, pour affirmer qu'il existe $\Omega^* \subset Q$ mesurable et une suite extraite Ω_{n_k} telle que $\chi_{\Omega_{n_k}}$ converge dans $L^1(Q)$ vers χ_{Ω^*}. La fonction

$$\Omega \mapsto \frac{1}{\eta}\big(|\Omega| - V_0\big)^2$$

étant continue pour la convergence forte des fonctions caractéristiques, F_η est s.c.i. comme P, et on a

$$F_\eta(\Omega^*) \leq \liminf_{n\to+\infty} F_\eta(\Omega_n).$$

Ainsi, Ω^* réalise le minimum dans (3.4). ∎

On peut également montrer, et c'est là tout l'intérêt de la pénalisation, que les minima de F_η permettent d'approcher les solutions du problème sous contrainte initial.

Proposition 10. *Pour $\eta > 0$, soit Ω_η une solution du problème (3.4). Alors, quand η tend vers 0, la suite (Ω_η) admet une suite extraite qui converge, au sens des fonctions caractéristiques, vers une limite Ω^* solution du problème (3.1).*

La démonstration s'appuie là encore sur le résultat clé, le théorème 1.

Démonstration. On a $F_\eta(\Omega_\eta) \leq C$ et donc $P(\Omega_\eta) \leq C$, avec, par ailleurs, $|\Omega_\eta| \leq |Q|$. On peut donc appliquer une fois de plus le théorème 1, et obtenir l'existence de $\Omega^* \subset Q$ mesurable et d'une suite extraite encore notée Ω_η telle que $\chi_{\Omega_\eta} \to \chi_{\Omega^*}$ dans $L^1(Q)$. Nous allons montrer que Ω^* est solution de (3.1).

Vérifions d'abord que $|\Omega^*| = V_0$. Comme $F_\eta(\Omega_\eta) \leq C$, on a aussi

$$\frac{1}{\eta}\Big(|\Omega_\eta| - V_0\Big)^2 \leq C$$

et donc

$$\Big||\Omega_\eta| - V_0\Big| \leq C\sqrt{\eta}.$$

Ainsi, $|\Omega_\eta| \to V_0$, et par continuité, $|\Omega^*| = V_0$.

Soit maintenant Ω_0 une solution du problème (3.1), nous allons montrer que $P(\Omega^*) = P(\Omega_0)$. On a, par définition de Ω_η, $F_\eta(\Omega_\eta) \leq F_\eta(\Omega_0) = P(\Omega_0)$. Le terme

$$\frac{1}{\eta}\Big(|\Omega_\eta| - V_0\Big)^2$$

étant positif, on en déduit que $P(\Omega_\eta) \leq P(\Omega_0)$. Par semi-continuité inférieure, on a alors

$$P(\Omega^*) \leq \liminf_{\eta to 0} P(\Omega_\eta) \leq P(\Omega_0).$$

Comme $|\Omega^*| = V_0$, il vient, par définition de Ω_0, $P(\Omega^*) = P(\Omega_0)$, et Ω^* est bien solution de (3.1). ∎

Assurés de ces deux résultats sur le problème pénalisé géométrique, nous pouvons nous pencher sur le problème pénalisé approché par champ de phase.

3.1.2 Pénalisation pour le problème approché

Nous pouvons introduire, comme précédemment pour le périmètre, une approximation de type champ de phase de la fonctionnelle F_η définie en (3.3). Celle-ci sera donnée, pour $\varepsilon > 0$ et ϕ dans $H^1(Q)$, par

$$F_{\eta,\varepsilon}(\phi) = F_\varepsilon(\phi) + \frac{1}{\eta}\big(V(\phi) - V_0\big)^2, \tag{3.5}$$

où F_ε est l'approximation du périmètre déjà introduite,

$$F_\varepsilon(\phi) = \int_Q \left(\frac{\varepsilon}{2}|\nabla\phi|^2 + \frac{1}{\varepsilon}W(\phi)\right) dx,$$

et V le volume exprimé en fonction de ϕ,

$$V(\phi) = \int_Q \phi\, dx.$$

Dans le chapitre 2, la proposition 8 assurait l'existence d'un minimum pour le problème (3.2),

$$\min\left\{F_\varepsilon(\phi) \;\middle|\; \phi \in H^1(Q),\ V(\phi) = V_0\right\}.$$

Le résultat ci-dessous assure l'existence d'un minimum pour le problème pénalisé

$$\min\left\{F_{\eta,\varepsilon}(\phi) \;\middle|\; \phi \in H^1(Q)\right\}. \tag{3.6}$$

Proposition 11. *Soit Q un ouvert borné de $\mathbb{R}^N$, et soit V_0 dans $]0, |Q|[$. Pour $\varepsilon > 0$ et ϕ dans $H^1(Q)$, soit $F_{\eta,\varepsilon}$ définie comme en (3.5). Alors pour tout $\eta > 0$, le problème (3.6) a une solution.*

Comme dans le cas du problème avec contrainte, la démonstration du théorème est immédiate. En effet, cette fois encore, l'existence d'un minimum découle directement de la coercivité et de la semi-continuité inférieure de la fonctionnelle considérée. La coercivité de $F_{\eta,\varepsilon}$ se déduit de celle de F_ε, et il en va de même de la semi-continuité inférieure, puisque le terme de pénalisation est ici continu en $\phi \in H^1(Q)$.

Il est également aisé d'obtenir un résultat de Γ-convergence similaire au théorème de Modica–Mortola donné page 47, mais cette fois pour la fonctionnelle pénalisée $F_{\eta,\varepsilon}$. Nous aurons besoin du lemme ci-dessous, qu'on retrouve par exemple dans le livre de Braides [12].

Lemme 2. *Soit X un espace métrique, et, pour $\varepsilon > 0$, soit $F_\varepsilon : X \to [0, +\infty]$. Soit G une fonction continue sur X à valeurs dans $[0, +\infty]$. Si F_ε Γ-converge, quand ε tend vers 0, vers F sur X, alors $(F_\varepsilon + G)$ Γ-converge vers $(F + G)$.*

Notre proposition s'énonce alors comme suit.

Proposition 12. *Soit Q un ouvert borné de $\mathbb{R}^N$, et soit V_0 dans $]0,|Q|[$. Soit $\eta > 0$. Prolongeons la fonctionnelle $F_{\eta,\varepsilon}$ définie en (3.5) à tout l'espace $L^2(Q)$ en posant*

$$F_{\eta,\varepsilon}(\phi) = \begin{cases} \displaystyle\int_Q \left(\frac{\varepsilon}{2}|\nabla\phi|^2 + \frac{1}{\varepsilon}W(\phi)\right) dx + \frac{1}{\eta}\left(\int_Q \phi\, dx - V_0\right)^2 & \text{si } \phi \in H^1(Q), \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases}$$

Supposons que W est une fonction continue sur $\mathbb{R}$, positive, et qui ne s'annule qu'en 0 et 1. Alors les fonctionnelles $F_{\eta,\varepsilon}$ Γ-convergent, quand ε tend vers 0, vers une limite $\lambda_W F_\eta$, où F_η est définie par

$$F_\eta(\phi) = \begin{cases} |D\chi_\Omega|(Q) + \dfrac{1}{\eta}\big(|\Omega| - V_0\big)^2 & \text{si } \phi = \chi_\Omega, \\ +\infty & \text{sinon,} \end{cases}$$

et la constante λ_W est donnée par

$$\lambda_W = \int_0^1 \sqrt{2W(t)}\, dt.$$

La démonstration se déduit immédiatement de celle du théorème de Modica–Mortola, puisque le terme de pénalisation

$$\frac{1}{\eta}\left(\int_Q \phi\, dx - V_0\right)^2$$

est continu en ϕ pour la norme L^1 et ne dépend pas de ε, ce qui permet d'appliquer le lemme énoncé plus haut.

Cette proposition est essentielle d'un point de vue pratique, puisqu'elle assure que dans la limite $\varepsilon \to 0$, les solutions du problème pénalisé approché (3.6) fournissent de bonnes approximations des solutions du problème pénalisé (3.4). Ceci justifie les simulations numériques qui vont suivre, basées sur le problème approché.

Il nous reste à donner un dernier résultat, qui porte cette fois sur la convergence dans la limite $\eta \to 0$ des solutions de (3.6). Celui-ci assure que l'on retrouve bien des solutions du problème approché sous contrainte (3.2).

Proposition 13. *Pour $\eta > 0$, soit ϕ_η une solution du problème (3.6). Alors, quand η tend vers 0, on peut extraire de (ϕ_η) une sous-suite qui converge faiblement dans $H^1(Q)$ vers une limite ϕ^* solution du problème (3.2). En dimension deux et trois, si le potentiel W est donné par le double obstacle ou le double puits, la convergence a lieu fortement dans $H^1(Q)$.*

Démonstration. Nous travaillons ici à ε fixé, et nous omettrons donc les indices ε dans nos notations. Nous supposerons par ailleurs, sans perte de généralité, que $|Q| = 1$.

Soit ϕ_η une solution du problème pénalisé (3.6). Alors la quantité $F_\eta(\phi_\eta)$ est bornée indépendamment de η. On a en effet, pour ϕ_0 vérifiant la contrainte de volume,

$$F_\eta(\phi_\eta) \leq F_\eta(\phi_0) = F(\phi_0).$$

Étant donné l'expression de F_η, on en déduit que

$$\|\phi_\eta\|_{H^1(Q)} \leq C,$$

où C est une constante ne dépendant pas de η. La suite (ϕ_η) est donc bornée dans $H^1(Q)$. On peut en extraire une suite encore notée (ϕ_η) telle que ϕ_η converge faiblement vers ϕ^* dans $H^1(Q)$. Nous allons montrer que cette limite ϕ^* est solution du problème sous contrainte (3.2).

Commençons par montrer que ϕ^* vérifie la contrainte de volume. La quantité $F_\eta(\phi_\eta)$ étant bornée, on a

$$\frac{1}{\eta}\Big(V(\phi_\eta) - V_0\Big)^2 \leq C,$$

soit encore

$$\Big|V(\phi_\eta) - V_0\Big| \leq \sqrt{C\eta}.$$

On en déduit que $V(\phi_\eta) \to V_0$, et, par continuité, que $V(\phi^*) = V_0$. Vérifions maintenant que ϕ^* réalise le minimum de F sous cette contrainte. Pour cela, considérons une solution ϕ_0 du problème (3.2). On a

$$F_\eta(\phi_\eta) \leq F_\eta(\phi_0) = F(\phi_0),$$

c'est-à-dire

$$F(\phi_\eta) + \frac{1}{\eta}\Big(V(\phi_\eta) - V_0\Big)^2 \leq F(\phi_0).$$

On en déduit, en passant à la limite, que

$$\liminf_{\eta\to 0} F(\phi_\eta) \leq F(\phi_0).$$

Par semi-continuité inférieure de F, on obtient alors $F(\phi^*) \leq F(\phi_0)$, de sorte que ϕ^* réalise le minimum au même titre que ϕ_0.

Il nous reste à montrer, dans le cas des potentiels double puits et double obstacle, que la convergence de ϕ_η vers ϕ^* est en fait une convergence forte dans $H^1(Q)$. Nous allons séparer les deux cas à traiter.

Cas du potentiel double puits. Raisonnons sur les équations d'Euler–Lagrange vérifiées par ϕ_η et ϕ^*. En tant que solution du problème (3.6), ϕ_η doit vérifier

$$\varepsilon \int_Q \nabla\phi_\eta \cdot \nabla\psi \, dx + \frac{1}{\varepsilon}\int_Q W'(\phi_\eta)\psi \, dx + \frac{2}{\eta}\Big(V(\phi_\eta) - V_0\Big)\int_Q \psi \, dx = 0$$

pour tout ψ admissible, c'est-à-dire tout ψ de $H^1(Q)$. La fonction ϕ^* est, quant à elle, solution de (3.2), et doit vérifier $V(\phi^*) = V_0$, ainsi que l'équation

$$\varepsilon \int_Q \nabla\phi^* \cdot \nabla\psi \, dx + \frac{1}{\varepsilon} \int_Q W'(\phi^*)\psi \, dx = 0$$

pour tout ψ de $H^1(Q)$ tel que $V(\psi) = 0$. Soit α_η le réel défini par $\alpha_\eta = V(\phi_\eta) - V_0$. On a

$$V(\phi_\eta - \alpha_\eta) = V(\phi_\eta) - \alpha_\eta = V_0,$$

de sorte que $(\phi_\eta - \alpha_\eta) - \phi^*$ est admissible dans l'équation d'Euler–Lagrange vérifiée par ϕ^*. Choisissant $\psi = \phi_\eta - \phi^*$ dans l'équation d'Euler–Lagrange sur ϕ_η, on obtient

$$\varepsilon \int_Q \nabla\phi_\eta \cdot \nabla(\phi_\eta - \phi^*) \, dx + \frac{1}{\varepsilon} \int_Q W'(\phi_\eta)(\phi_\eta - \phi^*) \, dx + \frac{2}{\eta}{\alpha_\eta}^2 = 0.$$

Choisissant maintenant $(\phi_\eta - \phi^*) - \alpha_\eta$ dans l'équation d'Euler–Lagrange sur ϕ, on obtient

$$\varepsilon \int_Q \nabla\phi^* \cdot \nabla(\phi_\eta - \phi^*) \, dx + \frac{1}{\varepsilon} \int_Q W'(\phi^*)(\phi_\eta - \phi^* - \alpha_\eta) \, dx = 0.$$

Par soustraction, il vient, après division par ε,

$$\begin{aligned} &\int_Q \left|\nabla(\phi_\eta - \phi^*)\right|^2 dx + \frac{2}{\eta\varepsilon}{\alpha_\eta}^2 \\ &\qquad = -\frac{1}{\varepsilon^2} \int_Q \Big(W'(\phi_\eta) - W'(\phi^*)\Big)(\phi_\eta - \phi^*) \, dx - \frac{\alpha_\eta}{\varepsilon^2} \int_Q W'(\phi^*) \, dx. \end{aligned}$$

Le terme $\frac{2}{\eta\varepsilon}{\alpha_\eta}^2$ étant positif, on en déduit que

$$\begin{aligned} &\int_Q \left|\nabla(\phi_\eta - \phi^*)\right|^2 dx \\ &\qquad \le -\frac{1}{\varepsilon^2} \int_Q \Big(W'(\phi_\eta) - W'(\phi^*)\Big)(\phi_\eta - \phi^*) \, dx - \frac{\alpha_\eta}{\varepsilon^2} \int_Q W'(\phi^*) \, dx. \end{aligned}$$

Dans le cas du double puits, W' est donné par un polynôme de degré 3. Le premier terme dans le membre de droite fait donc intervenir des différences de ϕ_η et ψ^* à la puissance 4. On sait que ϕ_η converge faiblement vers ϕ^* dans $H^1(Q)$. L'injection de $H^1(Q)$ dans $L^4(Q)$ étant compacte en dimension deux et trois, on a également la convergence forte de ϕ_η vers ϕ^* dans $L^4(Q)$, ce qui assure que le premier terme du membre de droite tend vers 0 quand η tend vers 0. Le second terme de ce membre de droite tend lui aussi vers 0, puisque nous avons montré que

$$|\alpha_\eta| \le \sqrt{C\eta}.$$

On en déduit la convergence forte dans $H^1(Q)$ de ϕ_η vers ϕ^*.

Cas du potentiel double obstacle. Avec le potentiel double obstacle, les équations d'Euler–Lagrange deviennent des inéquations. Ainsi ϕ_η, solution du problème (3.6), devra vérifier $0 \leq \phi_\eta \leq 1$, ainsi que

$$\varepsilon \int_Q \nabla\phi_\eta \cdot \nabla(\psi - \phi_\eta)\, dx + \frac{1}{\varepsilon}\int_Q W'(\phi_\eta)(\psi - \phi_\eta)\, dx + \frac{2}{\eta}\big(V(\phi_\eta) - V_0\big)\int_Q (\psi - \phi_\eta)\, dx \geq 0$$

pour tout ψ de $H^1(Q)$. En tant que solution de (3.2), ϕ^* devra quant à elle vérifier $0 \leq \phi^* \leq 1$, ainsi que $V(\phi^*) = V_0$ et

$$\varepsilon \int_Q \nabla\phi^* \cdot \nabla(\psi - \phi^*)\, dx + \frac{1}{\varepsilon}\int_Q W'(\phi^*)(\psi - \phi^*)\, dx \geq 0$$

pour tout ψ de $H^1(Q)$ vérifiant $\int_Q \psi\, dx = V_0$. On obtient, en choisissant ϕ^* comme fonction test dans la première inéquation,

$$\varepsilon \int_Q \nabla\phi_\eta \cdot \nabla(\phi^* - \phi_\eta)\, dx + \frac{1}{\varepsilon}\int_Q W'(\phi_\eta)(\phi^* - \phi_\eta)\, dx - \frac{2}{\eta}{\alpha_\eta}^2 \geq 0,$$

où α_η désigne comme précédemment la quantité $V(\phi_\eta) - V_0$. En choisissant $\phi_\eta - \alpha_\eta$ comme fonction test dans la deuxième inéquation, on a

$$\varepsilon \int_Q \nabla\phi^* \cdot \nabla(\phi_\eta - \phi^*)\, dx + \frac{1}{\varepsilon}\int_Q W'(\phi^*)(\phi_\eta - \phi^* - \alpha_\eta)\, dx \geq 0.$$

On peut multiplier la première inégalité par -1, puis obtenir, par différence et après division par ε,

$$\begin{aligned}\int_Q \big|\nabla(\phi_\eta - \phi^*)\big|^2\, dx + \frac{2}{\eta\varepsilon}{\alpha_\eta}^2 \\ \leq -\frac{1}{\varepsilon^2}\int_Q \big(W'(\phi_\eta) - W'(\phi^*)\big)(\phi_\eta - \phi^*)\, dx - \frac{\alpha_\eta}{\varepsilon^2}\int_Q W'(\phi^*)\, dx.\end{aligned}$$

Le terme $\frac{2}{\eta\varepsilon}{\alpha_\eta}^2$ étant positif, on en déduit que

$$\begin{aligned}\int_Q \big|\nabla(\phi_\eta - \phi^*)\big|^2\, dx \\ \leq -\frac{1}{\varepsilon^2}\int_Q \big(W'(\phi_\eta) - W'(\phi^*)\big)(\phi_\eta - \phi^*)\, dx - \frac{\alpha_\eta}{\varepsilon^2}\int_Q W'(\phi^*)\, dx.\end{aligned}$$

C'est exactement la même inégalité que dans le cas du double puits. Nous n'allons cependant pas conclure de la même façon. Ici, nous savons, avec l'utilisation du double obstacle, que ϕ_η et ϕ^* sont compris entre 0 et 1, et que la différence $W'(\phi_\eta) - W'(\phi*)$ est bornée. On en déduit comme précédemment que le premier terme du membre de droite tend vers 0 quand η tend vers 0. Le deuxième terme tend également vers 0, comme α_η. On en déduit encore la convergence forte dans $H^1(Q)$ de ϕ_η vers ϕ^*, ce qui achève la démonstration. ∎

Les résultats qui précédent peuvent être résumés par le diagramme de la figure 3.1.

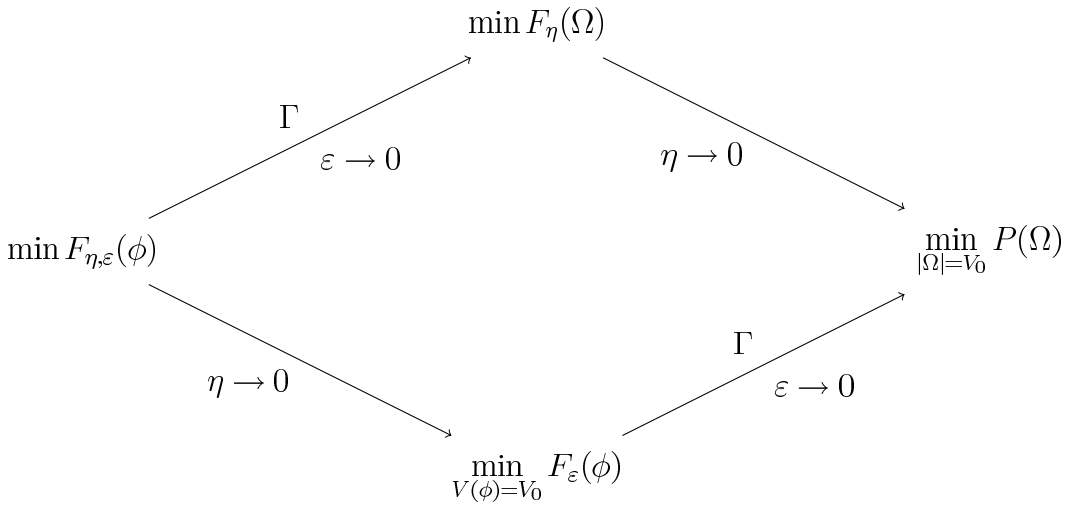


Figure 3.1 – Double convergence $\eta \to 0$ et $\varepsilon \to 0$ pour le problème pénalisé approché.

Maintenant que nous avons toutes les garanties nécessaires, nous pouvons nous attaquer à la pratique, à savoir la résolution numérique du problème pénalisé approché (3.6). Rappelons qu'il s'agit désormais, à η et ε fixés, d'un problème d'optimisation sans contrainte tout à fait classique.

3.1.3 Schéma numérique utilisé

Notre stratégie numérique sera ici des plus simples, puisqu'elle consistera à appliquer une méthode de flot de gradient à la fonctionnelle $F_{\eta,\varepsilon}$. Rappelons que nous avions, dans le chapitre 2, retrouvé l'équation d'Allen–Cahn comme flot de gradient de la fonctionnelle F_ε. Nous allons donc, comme dans le cas sans contrainte, ajouter une dépendance en temps au champ de phase ϕ, et résoudre numériquement l'équation

$$\varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\nabla F_{\eta,\varepsilon}(\phi),$$

de façon à obtenir, en temps long, une solution stationnaire vérifiant l'équation d'Euler–Lagrange

$$\nabla F_{\eta,\varepsilon}(\phi) = 0.$$

Nous avions, dans le cas sans contrainte,

$$\varepsilon \int_Q \frac{\partial \phi}{\partial t} \psi \, dx + \varepsilon \int_Q \nabla \phi \cdot \nabla \psi \, dx + \frac{1}{\varepsilon} \int_Q W'(\phi) \psi \, dx = 0$$

pour tout ψ de $H^1(Q)$. Ici, la pénalisation va ajouter un terme en ϕ, linéaire mais non local :

$$\varepsilon \int_Q \frac{\partial \phi}{\partial t} \psi \, dx + \varepsilon \int_Q \nabla \phi \cdot \nabla \psi \, dx + \frac{1}{\varepsilon} \int_Q W'(\phi) \psi \, dx + \frac{2}{\eta} \Big(V(\phi) - V_0 \Big) \int_Q \psi \, dx = 0.$$

On reconnaît ainsi, en supposant que ϕ vérifie des conditions de Neumann homogènes sur ∂Q, la formulation variationnelle de l'équation d'Allen–Cahn, à laquelle vient s'ajouter le terme intégral en $V(\phi)$:

$$\varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial t} - \varepsilon \Delta \phi + \frac{1}{\varepsilon} W'(\phi) + \frac{2}{\eta} \Big(V(\phi) - V_0 \Big) = 0.$$

Une façon simple de traiter numériquement ce terme intégral consiste à l'expliciter complètement, et à utiliser la discrétisation en temps suivante :

$$\frac{\varepsilon}{\Delta t} (\phi^{n+1} - \phi^n) - \varepsilon \Delta \phi^{n+1} + \frac{1}{\varepsilon} W'(\phi^n) + \frac{2}{\eta} \Big(V(\phi^n) - V_0 \Big) = 0.$$

Sous forme variationnelle, on a donc

$$\begin{aligned} \frac{\varepsilon}{\Delta t} \int_Q \phi^{n+1} \psi \, dx + \varepsilon \int_Q \nabla \phi^{n+1} \cdot \nabla \psi \, dx \\ = \frac{\varepsilon}{\Delta t} \int_Q \phi^n \psi \, dx - \frac{1}{\varepsilon} \int_Q W'(\phi^n) \psi \, dx - \frac{2}{\eta} \Big(V(\phi^n) - V_0 \Big) \int_Q \psi \, dx. \end{aligned}$$

En utilisant les formes bilinéaires a et m introduites dans le chapitre 1, on obtient finalement le schéma

$$m(\phi^{n+1}, \psi) + \Delta t \, a(\phi^{n+1}, \psi) = m(F^n, \psi),$$

où l'on a posé

$$F^n = \phi^n - \frac{\Delta t}{\varepsilon^2} W'(\phi^n) - \frac{\Delta t}{\varepsilon} \frac{2}{\eta} \Big(V(\phi^n) - V_0 \Big).$$

C'est sous cette dernière forme que nous avons implémenté notre algorithme de résolution, la discrétisation en espace étant assurée par une méthode d'éléments finis comme dans le chapitre 1.

Nous présentons dans la section suivante les tests qui nous ont permis de juger de l'efficacité de cette approche.

3.1.4 Tests numériques et bilan

Dans toutes les simulations présentées ici, nous avons utilisé le polygone convexe de la figure 1.12, chapitre 1, en guise de forme initiale. Nous avons néanmoins vérifié la généralité de nos conclusions sur tous les exemples de la fin du chapitre 1. Les résultats obtenus sont parfaitement similaires.

La figure 3.2 donne un exemple d'évolution pour le jeu de paramètres suivant : h est fixé à $5 \cdot 10^{-3}$, Δt à $\frac{h^2}{2}$ et ε à $2h$. Le paramètre de pénalisation η est quant à lui choisi égal à 100. Rappelons que nous utilisons désormais exclusivement le potentiel double puits dans notre code de calcul, et que le choix $\varepsilon = 2h$ permet une discrétisation de l'interface largement satisfaisante. Visuellement, le résultat semble tout à fait correct, puisque nous obtenons bien comme forme stationnaire un cercle de même aire que le polygone initial.

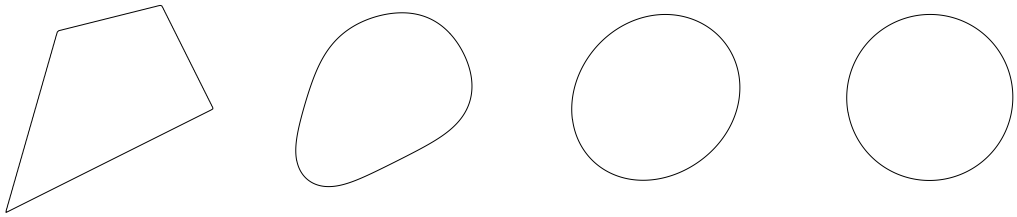


Figure 3.2 – Un polygone convexe évoluant par courbure moyenne avec conservation du volume assurée par pénalisation.

Pour être un peu plus précis sur le respect de la contrainte, nous représentons sur la figure 3.3 l'aire en fonction du temps pour différentes valeurs du paramètre η. L'aire initiale V_0 est, dans cet exemple, égale à 0,334. Il est clair sur ce tracé que l'erreur moyenne commise est d'autant plus faible que η est petit. Nous pouvons aussi remarquer que pour tous les choix de η, l'erreur ne fait qu'augmenter avec le temps. Ceci est évidemment fâcheux puisque l'erreur sera maximale pour la solution stationnaire, alors que celle-ci est justement notre principal intérêt. On pourrait plutôt espérer que l'erreur tende vers 0 en temps long, ce qui n'est visiblement pas le cas ici.

Pour poursuivre notre discussion, nous pouvons tracer l'erreur finale commise sur V_0 en fonction de η. C'est ce que propose la figure 3.4, et ce, pour différentes valeurs de ε. On remarque immédiatement que l'erreur ne tend pas vers 0 lorsque η tend vers 0. Bien au contraire, l'erreur explose lorsque η passe en dessous d'un certain seuil. Ceci est d'autant plus grave que la valeur de ce seuil augmente lorsque ε diminue. Ainsi, plus ε sera petit, et plus notre calcul risque d'être faux, ce qui est évidemment difficilement acceptable vu que le paramètre ε est destiné à tendre vers 0 dans notre modèle de champ de phase.

Pour espérer conserver le volume correctement par pénalisation, on comprend que des conditions doivent être imposées sur le rapport entre les paramètres η et ε. Or ε est déjà lié, dans les problèmes de champ de phase, aux paramètres numériques h et Δt. En pratique, l'ajout de η va donc encore compliquer le calibrage de nos jeux de paramètres. Nous allons voir que la méthode de Lagrangien permet de s'affranchir de cette difficulté supplémentaire.

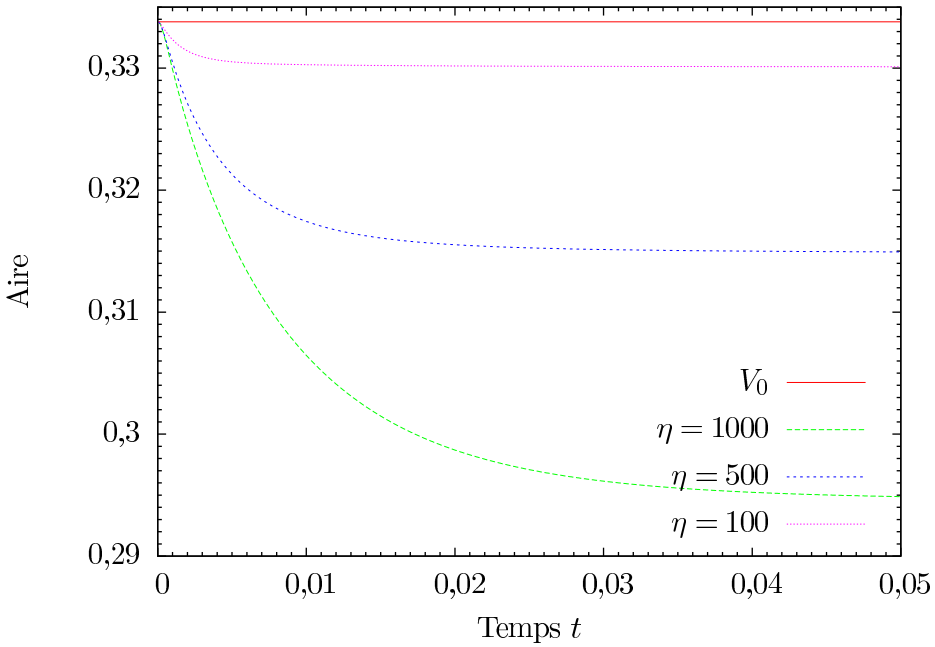


Figure 3.3 – Tracé de l'aire en fonction du temps pour différents η.

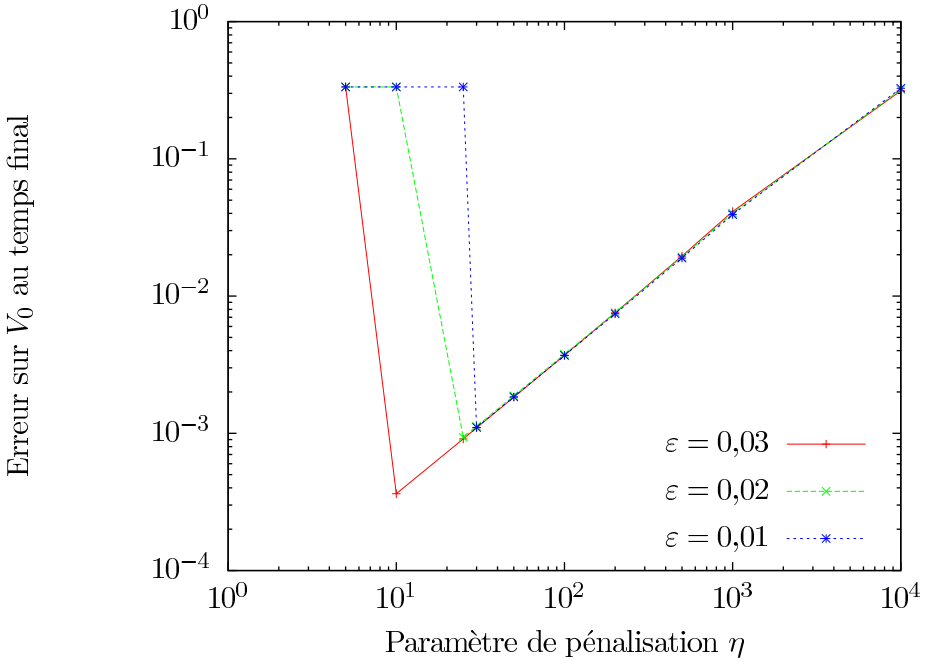


Figure 3.4 – Tracé de l'erreur maximale sur V_0 en fonction de η, pour différents ε.

3.2 Méthode de Lagrangien

La méthode de Lagrangien est, tout comme la procédure de pénalisation, très utilisée en pratique pour traiter les problèmes d'optimisation sous contraintes. Nous verrons qu'elle permet elle aussi, via l'algorithme d'Uzawa, de transformer la résolution d'un problème sous contraintes en une suite de résolutions de problèmes sans contrainte.

Comme dans la section précédente, nous nous consacrerons d'abord au cas du problème géométrique (3.1) avant d'étudier le problème approché (3.2).

3.2.1 Lagrangien pour le problème géométrique

Rappelons le problème (3.1) que nous considérons :

$$\min\{P(\Omega) \mid \Omega \subset Q \text{ mesurable}, \ |\Omega| = V_0\},$$

où Q est un ouvert borné de $\mathbb{R}^N$, et V_0 appartient à $]0, |Q|[$. Notons $\mathcal{O}$ l'ensemble des parties mesurables incluses dans Q, de façon à récrire le problème en

$$\min\{P(\Omega) \mid \Omega \in \mathcal{O}, \ |\Omega| = V_0\}.$$

Une façon naturelle d'appliquer la contrainte consiste à introduire le Lagrangien associé au problème, défini sur $\mathcal{O} \times \mathbb{R}$ par

$$L(\Omega, q) = P(\Omega) + q\Big(|\Omega| - V_0\Big), \tag{3.7}$$

où q est un multiplicateur de Lagrange. Un point-selle du Lagrangien est un élément (Ω^*, p) de $\mathcal{O} \times \mathbb{R}$ tel que

$$\forall q \in \mathbb{R}, \ L(\Omega^*, q) \leq L(\Omega^*, p) \leq L(\Omega, p), \ \forall \Omega \in \mathcal{O}. \tag{3.8}$$

Autrement dit, un point-selle (Ω^*, p) de L doit vérifier

$$L(\Omega^*, p) = \min_{\Omega \in \mathcal{O}} \max_{q \in \mathbb{R}} L(\Omega, q) = \max_{q \in \mathbb{R}} \min_{\Omega \in \mathcal{O}} L(\Omega, q).$$

Le résultat ci-dessous établit le lien entre point-selle du Lagrangien et solution du problème sous contrainte initial.

Proposition 14. *Si (Ω^*, p) est un point-selle du Lagrangien L défini en (3.7), alors on a $|\Omega^*| = V_0$, et Ω^* est solution du problème sous contrainte (3.1).*

Démonstration. Soit (Ω^*, p) un point-selle de L, la première inégalité de la définition (3.8) s'écrit :

$$\forall q \in \mathbb{R}, \ P(\Omega^*) + q\Big(|\Omega^*| - V_0\Big) \leq P(\Omega^*) + p\Big(|\Omega^*| - V_0\Big),$$

et implique donc $|\Omega^*| = V_0$. La seconde inégalité de (3.8) s'écrit alors

$$P(\Omega^*) \leq P(\Omega) + p\Big(|\Omega| - V_0\Big),\ \forall \Omega \in \mathcal{O},$$

ce qui implique $P(\Omega^*) \leq P(\Omega)$ pour tout Ω de $\mathcal{O}$ vérifiant la contrainte $|\Omega| = V_0$. Ainsi, Ω^* est bien solution du problème (3.1). ∎

Remarquons tout de même que nous n'avons pas prouvé l'existence de points-selles du Lagrangien. Cette question est souvent délicate, en particulier lorsque, comme ici, la variable du problème initial n'est pas dans un espace vectoriel. Nous pouvons, d'autre part, remarquer que la proposition ne donne qu'une condition suffisante de minimalité dans le problème (3.1). En effet, nous affirmons qu'un point-selle de L fournit une solution de (3.1), mais nous ne disons rien de la réciproque. Pour énoncer celle-ci simplement, il faudrait disposer de propriétés de convexité non vérifiées ici.

3.2.2 Lagrangien pour le problème approché

Nous nous penchons désormais sur le problème (3.2) :

$$\min\left\{\int_Q \left(\frac{\varepsilon}{2}|\nabla\phi|^2 + \frac{1}{\varepsilon}W(\phi)\right)dx \;\middle|\; \phi \in H^1(Q),\ \int_Q \phi\,dx = V_0\right\},$$

version approchée par champ de phase du problème précédent (3.1). C'est un problème d'optimisation sous contrainte, et nous pouvons encore définir le Lagrangien L_ε qui lui est associé. Celui-ci est défini sur $H^1(Q) \times \mathbb{R}$ par

$$L_\varepsilon(\phi, q) = F_\varepsilon(\phi) + q\Big(V(\phi) - V_0\Big), \tag{3.9}$$

où F_ε et V sont donnés comme précédemment par

$$F_\varepsilon(\phi) = \int_Q \left(\frac{\varepsilon}{2}|\nabla\phi|^2 + \frac{1}{\varepsilon}W(\phi)\right)dx,$$
$$V(\phi) = \int_Q \phi\,dx.$$

Un point-selle (ϕ^*, p) de L_ε sera cette fois un élément de $H^1(Q) \times \mathbb{R}$ défini par

$$\forall q \in \mathbb{R},\ L_\varepsilon(\phi^*, q) \leq L_\varepsilon(\phi^*, p) \leq L_\varepsilon(\phi, p),\ \forall \phi \in H^1(Q). \tag{3.10}$$

Avec les mêmes arguments que dans le cas géométrique, nous obtenons la proposition qui suit.

Proposition 15. *Si (ϕ^*, p) est un point-selle du Lagrangien L_ε défini en (3.9), alors on a $V(\phi^*) = V_0$, et ϕ^* est solution du problème sous contrainte (3.2).*

Nous disposons donc de l'essentiel du point de vue pratique : trouver un point-selle de L_ε nous fournira une solution au problème (3.2).

Il reste à montrer que les points-selles de L_ε forment de bonnes approximations de ceux de L dans la limite $\varepsilon \to 0$. C'est encore un résultat de Γ-convergence similaire à celui de Modica–Mortola qui va nous en convaincre.

Proposition 16. *Prolongeons le Lagrangien L_ε défini en (3.9) à tout $L^2(Q) \times \mathbb{R}$ en posant*

$$L_\varepsilon(\phi, q) = \begin{cases} \displaystyle\int_Q \frac{\varepsilon}{2}\left(|\nabla\phi|^2 + \frac{1}{\varepsilon}W(\phi)\right) dx + q\left(\int_Q \phi\, dx - V_0\right) & \text{si } \phi \in H^1(Q), \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases}$$

Supposons que W est une fonction continue sur $\mathbb{R}$, positive, et qui ne s'annule qu'en 0 et 1. Alors les Lagrangiens L_ε Γ-convergent, quand ε tend vers 0, vers une limite $\lambda_W L$, où L est défini par

$$L(\phi, q) = \begin{cases} |D\chi_\Omega|(Q) + q\big(|\Omega| - V_0\big) & \text{si } \phi = \chi_\Omega, \\ +\infty & \text{sinon,} \end{cases}$$

et la constante λ_W est donnée par

$$\lambda_W = \int_0^1 \sqrt{2W(t)}\, dt.$$

De même que pour la proposition 12 dans le cas de la pénalisation, la démonstration du résultat qui précède se déduit immédiatement de celle du théorème de Modica–Mortola, puisque le terme

$$q\left(\int \phi\, dx - V_0\right)$$

est continu en ϕ pour la norme L^1 et ne dépend pas de ε.

Nous pouvons encore résumer les résultats qui précèdent sur un diagramme, donné figure 3.5. Les flèches en pointillés symbolisent le fait que les points-selles des Lagrangiens fournissent des minima des problèmes sous contraintes.

Maintenant que ces résultats théoriques ont été énoncés, nous pouvons nous consacrer à la recherche pratique des points-selles du Lagrangien approché L_ε.

3.2.3 Recherche des points-selles du Lagrangien

Notre stratégie s'appuie sur l'algorithme 1, l'algorithme d'Uzawa. Celui-ci peut s'interpréter simplement comme une méthode du gradient appliquée au problème dual du problème sous contrainte (2.3). En effet, ce problème dual s'écrit

$$\max_{q \in \mathbb{R}} G(q),$$

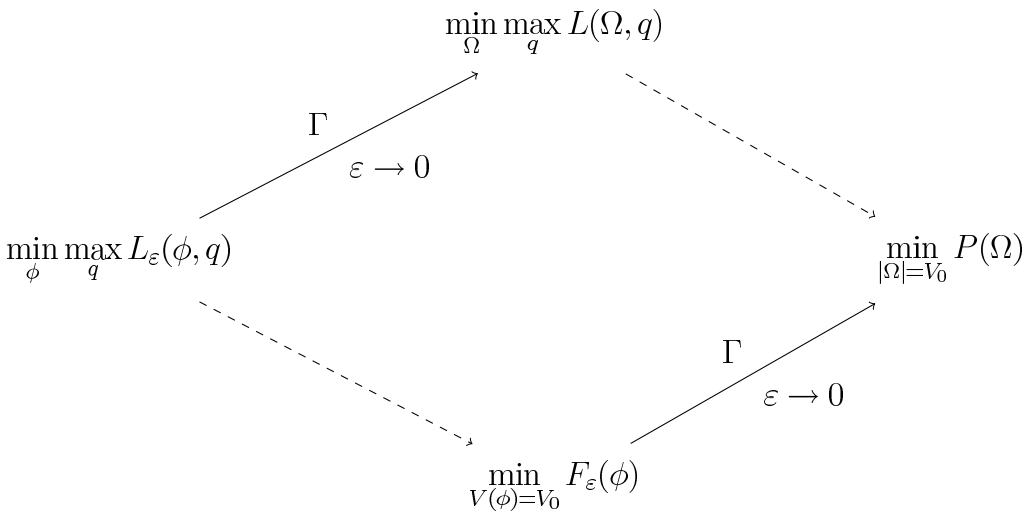


Figure 3.5 – Liens entre points-selles des Lagrangiens et solutions des problèmes sous contraintes.

où G est défini par

$$G(q) = \min_{\phi \in H^1(Q)} L_\varepsilon(\phi, q) = \min_{\phi \in H^1(Q)} F_\varepsilon(\phi) + q\Big(V(\phi) - V_0\Big),$$

de sorte que l'équation $G'(q) = 0$ redonne précisément la contrainte $V(\phi) = V_0$.

Algorithme 1 : Uzawa pour le problème (3.2).

Données : $q^0 \in \mathbb{R}$
Résultat : $(\phi^\infty, q^\infty) \in H^1(Q) \times \mathbb{R}$ point-selle de L_ε

pour $k \geq 0$
  Trouver ϕ^{k+1} tel que

$$L_\varepsilon(\phi^{k+1}, q^k) = \min\left\{L_\varepsilon(\phi, q^k) \;\middle|\; \phi \in H^1(Q)\right\}.$$

  Poser

$$q^{k+1} = q^k + \rho\left(\int_Q \phi^{k+1}\, dx - V_0\right).$$

fin

Le paramètre ρ est choisi constant, mais on peut également le faire dépendre de k comme dans la méthode du gradient à pas optimal. Le problème étant ici linéaire en q sur tout $\mathbb{R}$, il sera cependant difficile de déterminer une valeur optimale de ρ, puisque celle-ci sera donnée par $+\infty$ ou $-\infty$. Nous nous contenterons donc de fixer

ρ une fois pour toutes, et nous verrons que cela suffit à obtenir des résultats tout à fait satisfaisants.

On voit clairement apparaître, dans notre algorithme, la résolution d'un problème de minimisation sous contrainte à chaque itération :

$$\min \left\{ L_\varepsilon(\phi, q^k) \;\middle|\; \phi \in H^1(Q) \right\}.$$

Ce problème sera résolu par une méthode de flot de gradient : comme nous l'avons déjà fait auparavant, nous ajouterons une dépendance en temps à la fonction ϕ et nous résoudrons

$$\varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\partial L_\varepsilon}{\partial \phi}(\phi, q^k)$$

jusqu'à obtenir, en temps long, une solution stationnaire vérifiant l'équation d'Euler–Lagrange

$$\frac{\partial L_\varepsilon}{\partial \phi}(\phi, q^k) = 0.$$

Nous avions, dans le cas du mouvement par courbure moyenne sans contrainte de volume, à résoudre l'équation d'Allen–Cahn, qui s'écrit sous forme variationnelle

$$\varepsilon \int_Q \frac{\partial \phi}{\partial t} \psi \, dx + \varepsilon \int_Q \nabla \phi \cdot \nabla \psi \, dx + \frac{1}{\varepsilon} \int_Q W'(\phi) \psi \, dx = 0,$$

pour tout ψ de $H^1(Q)$. Nous aurons ici un terme supplémentaire faisant intervenir le multiplicateur de Lagrange q :

$$\varepsilon \int_Q \frac{\partial \phi}{\partial t} \psi \, dx + \varepsilon \int_Q \nabla \phi \cdot \nabla \psi \, dx + \frac{1}{\varepsilon} \int_Q W'(\phi) \psi \, dx + q \int_Q \psi \, dx = 0,$$

et l'on reconnaît, en supposant que ϕ vérifie des conditions aux limites de Neumann homogènes sur ∂Q, la formulation variationnelle de l'équation

$$\varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial t} - \varepsilon \Delta \phi + \frac{1}{\varepsilon} W'(\phi) + q = 0.$$

Nous utiliserons la discrétisation en temps suivante :

$$\frac{\varepsilon}{\Delta t} \int_Q \phi^{n+1} \psi \, dx + \varepsilon \int_Q \nabla \phi^{n+1} \cdot \nabla \psi \, dx \\ = \frac{\varepsilon}{\Delta t} \int_Q \phi^n \psi \, dx - \frac{1}{\varepsilon} \int_Q W'(\phi^n) \psi \, dx - q \int_Q \psi \, dx.$$

Avec les formes bilinéaires a et m désormais habituelles, ce schéma se récrit

$$m(\phi^{n+1}, \psi) + \Delta t \, a(\phi^{n+1}, \psi) = m(F^n, \psi),$$

où l'on a posé

$$F^n = \phi^n - \frac{\Delta t}{\varepsilon^2} W'(\phi^n) - \frac{\Delta t}{\varepsilon} q.$$

Par rapport au schéma obtenu avec pénalisation, seul le second membre change : il fait apparaître le multiplicateur q en lieu et place du terme de pénalisation $\frac{2}{\eta}\big(V(\phi^n) - V_0\big)$.

Nous allons reprendre notre algorithme d'Uzawa, pour y faire apparaître ce schéma. Nous avons désormais à traiter deux indices : l'indice k intrinsèque à l'algorithme, et l'indice n provenant de la discrétisation en temps. Nous obtenons l'algorithme 2.

Algorithme 2 : Uzawa avec schéma en temps.

Données : $\phi^{0,0} \in H^1(Q)$, $q^{0,0} \in \mathbb{R}$
Résultat : $(\phi^{\infty,\infty}, q^{\infty,\infty}) \in H^1(Q) \times \mathbb{R}$ point-selle de L_ε

pour $k \geq 0$
  pour $n \geq 0$
    Calculer $\phi^{k,n+1}$ solution de

$$m(\phi^{k,n+1}, \psi) + \Delta t\, a(\phi^{k,n+1}, \psi) = m\left(\phi^{k,n} - \frac{\Delta t}{\varepsilon^2} W'(\phi^{k,n}) - \frac{\Delta t}{\varepsilon} q^k, \psi\right).$$

  fin
  Poser

$$\phi^{k+1,0} = \phi^{k,\infty}.$$

  Poser

$$q^{k+1} = q^k + \rho\left(\int_Q \phi^{k+1,0}\, dx - V_0\right).$$

fin

On se rend vite compte que ce nouvel algorithme est loin d'être optimal. En effet, on voit bien que pour espérer une meilleure conservation du volume, il serait plus judicieux de mettre à jour le multiplicateur de Lagrange à chaque nouveau calcul de ϕ, c'est-à-dire à l'intérieur de la boucle en n. Ceci revient simplement à utiliser un multiplicateur de Lagrange $q(t)$ dépendant du temps dans l'équation d'évolution

$$\varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial t} - \varepsilon \Delta \phi + \frac{1}{\varepsilon} W'(\phi) + q(t) = 0.$$

Notre schéma de discrétisation s'écrira encore

$$m(\phi^{n+1}, \psi) + \Delta t\, a(\phi^{n+1}, \psi) = m(F^n, \psi),$$

mais, cette fois, q va dépendre de n dans l'expression du second membre F^n :

$$F^n = \phi^n - \frac{\Delta t}{\varepsilon^2} W'(\phi^n) - \frac{\Delta t}{\varepsilon} q^n.$$

Au final, notre algorithme 3 ne comporte plus qu'une seule boucle, puisque q est modifié aussi souvent que ϕ.

Algorithme 3 : Uzawa avec schéma en temps (une seule boucle).

Données : $\phi^0 \in H^1(Q)$, $q^0 \in \mathbb{R}$
Résultat : $(\phi^\infty, q^\infty) \in H^1(Q) \times \mathbb{R}$ point-selle de L_ε

pour $n \geq 0$
  Calculer ϕ^{n+1} solution de

$$m(\phi^{n+1}, \psi) + \Delta t\, a(\phi^{n+1}, \psi) = m\left(\phi^n - \frac{\Delta t}{\varepsilon^2} W'(\phi^n) - \frac{\Delta t}{\varepsilon} q^n, \psi\right).$$

  Poser

$$q^{n+1} = q^n + \rho\left(\int_Q \phi^{n+1}\, dx - V_0\right).$$

fin

C'est ce dernier algorithme que nous avons implémenté, toujours en utilisant RHEOLEF pour gérer facilement la discrétisation par éléments finis en espace. Nous pouvons maintenant présenter nos résultats, et les comparer à ceux obtenus dans le cas de la pénalisation.

3.2.4 Résultats numériques

Comme dans nos tests de la pénalisation, nous utiliserons ici le polygone convexe du chapitre 1 comme forme initiale, nos conclusions restant vraies en toute généralité.

Visuellement, nous observons des résultats parfaitement similaires à ceux obtenus par pénalisation sur la figure 3.2, avec un même choix des paramètres h, Δt et ε. La forme stationnaire est également un cercle, qui semble de même volume que la forme initiale. Nous avons jugé inutile de reproduire une seconde fois les formes obtenues.

La figure 3.6 représente l'évolution de l'aire en fonction du temps pour différentes valeurs de ε. Le multiplicateur de Lagrange initial q^0 est choisi nul, et le paramètre ρ est fixé à 10^{-2}. Les tracés montrent un avantage crucial par rapport à la pénalisation : cette fois, l'erreur tend bien vers 0 en temps long, si bien qu'elle sera minimale pour la solution stationnaire. De plus, l'erreur semble tendre vers 0 d'autant plus vite que ε est petit, ce qui est évidemment très intéressant pour nous. Il est bien sûr

possible de jouer sur la vitesse de convergence en modifiant le paramètre ρ, mais cela n'a pas beaucoup d'incidence en pratique, et nous n'avons pas jugé nécessaire de le faire. En effet, l'erreur maximale observée sur la figure 3.6 n'est même pas de l'ordre du millième. Et par ailleurs, les mesures que nous avons effectuées pour d'autres données initiales sont tout aussi bonnes.

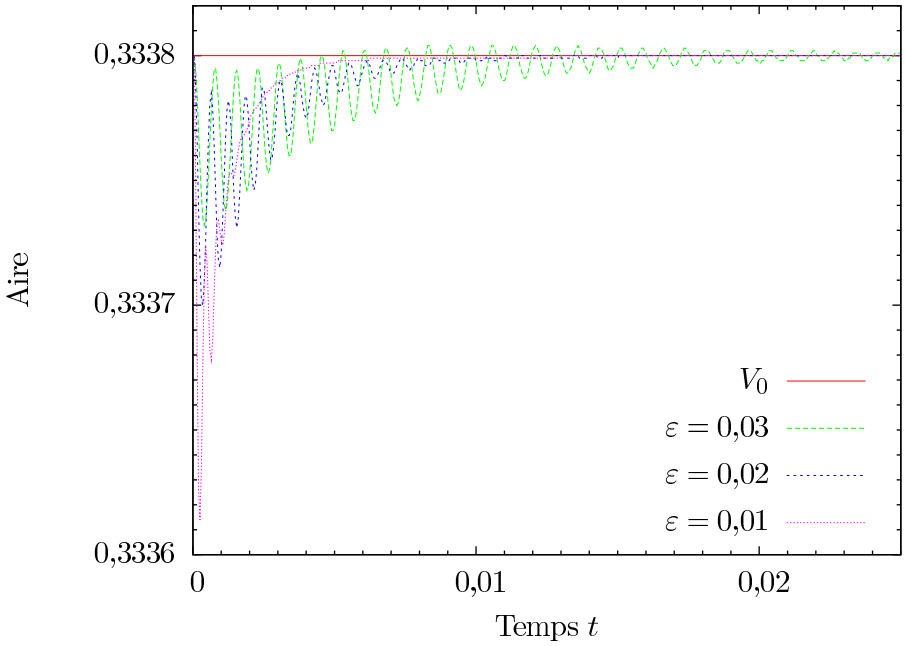


Figure 3.6 – Tracé de l'aire en fonction du temps pour différents ε.

Les résultats obtenus sont très largement en faveur de la méthode du Lagrangien face à la pénalisation. En terme de coût de calcul, les deux approches sont équivalentes, puisque la forme bilinéaire qui intervient dans les deux schémas est strictement la même : $c = m + \Delta t\, a$.

Nous allons voir qu'il est possible de faire encore mieux en terme d'erreur, puisque le multiplicateur de Lagrange peut ici être calculé explicitement, et la contrainte imposée de manière exacte.

3.3 Mouvement par courbure moyenne conservé

Nous abordons, dans cette section, un nouveau mouvement d'interfaces, le mouvement par courbure moyenne conservé. Nous nous pencherons, dans un premier temps, sur l'équation d'Allen–Cahn « non locale », obtenue à l'aide d'un calcul explicite du multiplicateur de Lagrange introduit précédemment. Nous évoquerons ensuite, pour cette équation, la question du traitement de conditions aux limites

qui ne soient pas de Neumann homogènes. Nous terminerons en présentant notre schéma de discrétisation.

3.3.1 L'équation d'Allen–Cahn non locale

Pour obtenir l'algorithme 3, nous avons été amené à considérer, dans la section précédente, l'équation d'Allen–Cahn avec un multiplicateur de Lagrange dépendant du temps :

$$\varepsilon\frac{\partial\phi}{\partial t} - \varepsilon\Delta\phi + \frac{1}{\varepsilon}W'(\phi) + q(t) = 0.$$

Nous allons voir que la fonction $t \mapsto q(t)$ peut être choisie de façon à imposer la contrainte de volume

$$V(\phi) = \int_Q \phi\,dx = V_0 \tag{3.11}$$

pour tout $t > 0$. Commençons par intégrer formellement l'équation en espace :

$$\varepsilon\int_Q \frac{\partial\phi}{\partial t}\,dx - \varepsilon\int_Q \Delta\phi\,dx + \frac{1}{\varepsilon}\int_Q W'(\phi)\,dx + q(t)|Q| = 0.$$

Du fait des conditions de Neumann homogènes sur ∂Q, le deuxième est nul, et on a, en sortant la dérivée en temps de la première intégrale,

$$\varepsilon\frac{d}{dt}\int_Q \phi\,dx + \frac{1}{\varepsilon}\int_Q W'(\phi)\,dx + q(t)|Q| = 0.$$

Ainsi, pour avoir la conservation du volume

$$\frac{d}{dt}\int_Q \phi\,dx = 0,$$

il suffit de choisir

$$q(t) = -\frac{1}{\varepsilon}⨍_Q W'(\phi)\,dx,$$

où le symbole $⨍_Q$ désigne l'intégrale ramenée à la mesure de Q,

$$⨍_Q dx = \frac{1}{|Q|}\int_Q dx.$$

Remarquons au passage que la fonction q ainsi définie dépend de ε. Nous la noterons désormais q_ε.

Nous voici finalement confrontés à l'équation suivante, qui n'est autre que l'équation d'Allen–Cahn « conservée » ou « non locale » :

$$\varepsilon\frac{\partial\phi}{\partial t} - \varepsilon\Delta\phi + \frac{1}{\varepsilon}W'(\phi) - \frac{1}{\varepsilon}⨍_Q W'(\phi)\,dx = 0. \tag{3.12}$$

Nous avions interprété l'équation d'Allen–Cahn comme un flot de gradient pour la fonctionnelle

$$F_\varepsilon(\phi) = \int_Q \left(\frac{\varepsilon}{2} |\nabla \phi|^2 + \frac{1}{\varepsilon} W(\phi) \right) dx.$$

L'équation d'Allen–Cahn non locale sera également un flot de gradient pour cette fonctionnelle, mais cette fois sous la contrainte de volume constant (3.11).

L'équation (3.12) a été introduite par Rubinstein et Sternberg [93] comme une alternative plus simple à l'équation de Cahn–Hilliard

$$\varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial t} - \Delta \left(-\varepsilon \Delta \phi + \frac{1}{\varepsilon} W'(\phi) \right) = 0. \tag{3.13}$$

Une des propriétés bien connues de cette équation est en effet de conserver la quantité $V(\phi)$ au cours du temps. Dans leur article [93], les auteurs comparent, avec un calcul explicite, la dynamique des deux équations dans le cas d'une condition initiale composée de plusieurs petits cercles. Ils effectuent également un développement asymptotique formel permettant de retrouver, à partir de l'équation d'Allen–Cahn non locale, le mouvement d'interfaces défini par

$$V_n = -H + \bar{H}, \tag{3.14}$$

où H est la courbure moyenne de l'interface Γ, et $\bar{H}$ la « moyenne de la courbure moyenne », c'est-à-dire

$$\bar{H} = \frac{1}{|\Gamma|} \int_\Gamma H \, ds.$$

C'est ce mouvement géométrique qui porte le nom de mouvement par courbure moyenne « conservé ». Il avait déjà été étudié par Gage et Hamilton [50, 51], qui avaient exhibé un certain nombre de propriétés : les cercles sont des formes stables sous l'action de (3.14) ; les formes convexes restent convexes et deviennent asymptotiquement circulaires ; les courbes simples restent simples.

Un résultat de convergence plus rigoureux de (3.12) vers (3.14) est dû à Bronsard et Stoth [14], mais seulement dans le cas d'une symétrie radiale. Une démonstration rigoureuse dans le cas général n'a pas encore été donnée à notre connaissance.

L'équation de Cahn–Hilliard a, quant à elle, fait l'objet d'un très grand nombre d'études, mais nous n'allons pas entrer dans le détail de ces études ici. Nous indiquerons simplement que la convergence vers le mouvement « par diffusion de surface »

$$V_n = \Delta_\Gamma H$$

est attendue, Δ_Γ désignant ici le Laplacien surfacique sur Γ — voir à ce sujet le travail de Cahn, Elliott et Novick-Cohen [19]. Nous renvoyons le lecteur à la revue [30] ainsi qu'à ses nombreuses références.

Nous nous consacrons maintenant à la question de la conservation du volume dans le cas de conditions aux limites générales.

3.3.2 Traitement des conditions aux limites

Nous avons toujours supposé, jusqu'ici, que le champ de phase ϕ vérifiait des conditions aux limites de Neumann homogènes sur la totalité du bord ∂Q. Une question se pose : la conservation du volume peut-elle être assurée lorsque ce n'est pas le cas ?

À partir de maintenant, ∂Q sera la réunion de deux parties, $\partial Q = \Gamma_d \cup \Gamma_n$, et nous supposerons que ϕ doit vérifier

$$\begin{cases} \phi = f & \text{sur } \Gamma_d, \\ \nabla\phi \cdot \boldsymbol{n} = g & \text{sur } \Gamma_n. \end{cases}$$

Reprenons notre équation d'Allen–Cahn avec un multiplicateur de Lagrange dépendant du temps :

$$\varepsilon\frac{\partial\phi}{\partial t} - \varepsilon\Delta\phi + \frac{1}{\varepsilon}W'(\phi) + q(t) = 0,$$

et cherchons encore à déterminer q de façon à conserver le volume. Comme précédemment, intégrons l'équation en espace :

$$\varepsilon\int_Q \frac{\partial\phi}{\partial t}\,dx - \varepsilon\int_Q \Delta\phi\,dx + \frac{1}{\varepsilon}\int_Q W'(\phi)\,dx + q(t)|Q| = 0.$$

La différence avec tout à l'heure est qu'ici, le terme en Laplacien va avoir une contribution non nulle. On a en effet

$$\begin{aligned}\int_Q \Delta\phi\,dx &= \int_{\partial Q} \nabla\phi\cdot\boldsymbol{n}\,ds \\ &= \int_{\Gamma_d} \nabla\phi\cdot\boldsymbol{n}\,ds + \int_{\Gamma_n} g\,ds.\end{aligned}$$

La deuxième intégrale dépend uniquement de la fonction g, qui est une donnée du problème. Nous la noterons simplement $I(g)$. En pratique, nous pourrons la calculer une fois pour toutes au début du calcul. Pour obtenir la conservation du volume, il nous faudra maintenant poser

$$q(t) = -\frac{1}{\varepsilon}\fint_Q W'(\phi)\,dx + \frac{\varepsilon}{|Q|}\left(\int_{\Gamma_d}\nabla\phi\cdot\boldsymbol{n}\,ds + I(g)\right).$$

L'équation correspondante s'écrit

$$\varepsilon\frac{\partial\phi}{\partial t} - \varepsilon\Delta\phi + \frac{1}{\varepsilon}W'(\phi) - \frac{1}{\varepsilon}\fint_Q W'(\phi)\,dx + \frac{\varepsilon}{|Q|}\int_{\Gamma_d}\nabla\phi\cdot\boldsymbol{n}\,ds = -\frac{\varepsilon}{|Q|}I(g).$$

Autrement dit, nous retrouvons l'équation d'Allen–Cahn non locale (3.12), à laquelle vient s'ajouter un terme de flux sortant sur le bord Γ_d, ainsi qu'un second membre calculé comme une intégrale sur Γ_n. Il est donc possible de préserver le volume de

manière exacte même avec des conditions aux limites de type Dirichlet ou Neumann non homogènes.

Remarquons que dans le cas de conditions aux limites périodiques, la question ne se pose même pas, et nous pouvons encore employer l'équation (3.12) sans avoir à la modifier.

Il ne nous reste plus qu'à présenter notre schéma numérique. Pour plus de lisibilité, nous omettrons les termes supplémentaires introduits ici, sachant qu'ils sont évidemment ajoutés dans notre code de calcul lorsque c'est nécessaire. Précisons simplement qu'en présence d'une condition de Dirichlet non homogène, nous traitons le terme de bord sur Γ_d de manière explicite, de sorte que la forme bilinéaire du schéma n'est pas modifiée.

3.3.3 Schéma numérique

Comme dans le cas de la pénalisation, nous traiterons le terme non local dans (3.12) de façon explicite, avec la discrétisation en temps suivante :

$$\frac{\varepsilon}{\Delta t}(\phi^{n+1}-\phi^n)-\varepsilon\Delta\phi^{n+1}+\frac{1}{\varepsilon}W'(\phi^n)-\frac{1}{\varepsilon}\fint_Q W'(\phi^n)\,dx=0,$$

soit, sous forme variationnelle,

$$\begin{aligned}\frac{\varepsilon}{\Delta t}\int_Q \phi^{n+1}\psi\,dx+\varepsilon\int_Q\nabla\phi^{n+1}\cdot\nabla\psi\,dx\\ =\frac{\varepsilon}{\Delta t}\int_Q\phi^n\psi\,dx-\frac{1}{\varepsilon}\int_Q W'(\phi^n)\psi\,dx+\frac{1}{\varepsilon}\left(\fint_Q W'(\phi^n)\,dx\right)\int_Q\psi\,dx.\end{aligned}$$

Avec nos formes bilinéaires a et m habituelles, on obtient finalement le schéma

$$m(\phi^{n+1},\psi)+\Delta t\,a(\phi^{n+1},\psi)=m(F^n,\psi),$$

où l'on a posé

$$F^n=\phi^n-\frac{\Delta t}{\varepsilon^2}W'(\phi^n)+\frac{\Delta t}{\varepsilon^2}\fint_Q W'(\phi^n)\,dx.$$

On retrouve bien entendu la même forme bilinéaire que pour la pénalisation ou la méthode de Lagrangien.

Nous avons testé ce schéma dans les mêmes conditions que celles de la figure 3.6, et sur bien d'autres exemples. Le résultat est bien celui attendu, à savoir que l'erreur sur V_0 est nulle — ou plutôt de l'ordre de l'erreur machine — en tout temps et pour tous les choix de ε.

Dans le cas où W est un potentiel double obstacle, nous avons vu qu'il était nécessaire de tronquer la solution à chaque pas de temps, via un opérateur de projection noté $\mathrm{P}_{[0,1]}$. Le schéma s'écrit alors en deux étapes :

$$\begin{cases}m(\phi^{n+1/2},\psi)+\Delta t\,a(\phi^{n+1/2},\psi)=m(F^n,\psi),\\ \phi^{n+1}=\mathrm{P}_{[0,1]}(\phi^{n+1/2}).\end{cases}$$

Cette troncature va introduire une difficulté pour ce qui est de la conservation du volume. En effet, la façon dont nous avons déterminé le second membre F^n va assurer l'égalité entre les intégrales de $\phi^{n+1/2}$ et de ϕ^n, mais l'intégrale de ϕ^{n+1} sera différente. Il nous faut donc modifier l'opérateur de projection $\mathrm{P}_{[0,1]}$, et faire en sorte que celui-ci conserve le volume. On peut par exemple poser

$$\tilde{\mathrm{P}}_{[0,1]}(\phi) = \frac{V(\phi)}{V\big(\mathrm{P}_{[0,1]}(\phi)\big)}\,\mathrm{P}_{[0,1]}(\phi).$$

Ce choix donne de très bons résultats en pratique, tout à fait comparables avec ceux obtenus pour le double puits. La démarche est cependant moins satisfaisante, et nous préférons généralement ne pas avoir à projeter la solution. Cette remarque justifie le choix annoncé au chapitre 1, à savoir celui de n'utiliser que le potentiel double puits.

Il va sans dire que cette approche est de loin la meilleure pour ce qui est de la conservation du volume, d'autant qu'avec notre choix de calculer explicitement le terme non local, son coût est tout à fait similaire à celui des deux autres stratégies. C'est donc naturellement ce schéma que nous emploierons dès qu'il faudra satisfaire une contrainte de volume dans la suite de ce manuscrit.

Nous pouvons maintenant clore ce chapitre, en présentant quelques résultats numériques.

3.4 Quelques exemples de résultats numériques

Les résultats montrés ici ont été obtenus avec le même jeu de paramètres qu'en fin du chapitre 1, à savoir $h = 5 \cdot 10^{-3}$, $\varepsilon = 2h$ et $\Delta t = \frac{h^2}{2}$.

Nous présentons tout d'abord, sur la figure 3.7, trois exemples d'évolution dans le cas où la forme initiale est composée de deux rectangles. L'aire totale, c'est-à-dire la somme des aires des deux rectangles, est strictement la même pour les trois exemples, et elle est conservée tout au long des calculs. Les tracés font cependant ressortir des différences très nettes dans les trois évolutions.

Dans la première situation, les deux rectangles commencent tout naturellement par s'arrondir, mais ils sont suffisamment près pour finalement se toucher. Il y a alors changement de topologie, et on passe de deux composantes connexes à une seule. La forme obtenue évolue ensuite vers un cercle, dont le centre se trouve exactement entre les deux rectangles initiaux.

Dans la deuxième situation, on retrouve les deux mêmes rectangles, mais cette fois suffisamment éloignés pour qu'ils ne se touchent pas. Chacun d'eux évolue alors vers un cercle, et la forme finale est maintenant composée de deux composantes connexes. En effet, les deux cercles étant strictement identiques, la courbure moyenne H est constante dans tout le domaine, et égale à sa moyenne $\bar{H}$. La vitesse des interfaces est donc nulle partout, et les deux cercles composent une forme d'équilibre. Il faut cependant noter que cette forme d'équilibre ne représente qu'un

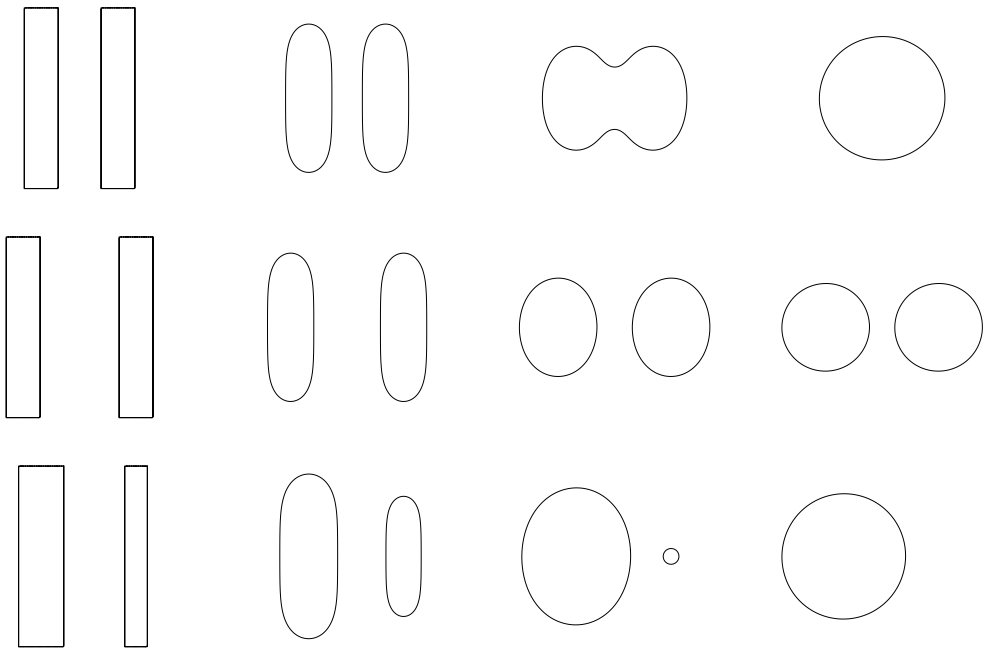


Figure 3.7 – Mouvement par courbure moyenne conservé : trois exemples d'évolution pour des formes initiales composées de rectangles.

minimum local de l'énergie à minimiser, le périmètre. Nous savons en effet, d'après les résultats du chapitre 2, que le minimum global n'est atteint qu'avec un cercle unique. C'est en fait une remarque très importante que nous devons faire ici : l'équation d'Allen–Cahn non locale — ou son équivalent géométrique le mouvement par courbure moyenne conservé — ne permet pas forcément d'obtenir la « vraie » solution du problème de minimisation du périmètre. Avec notre interprétation en termes de flot de gradient, on comprend bien que la méthode de descente peut rester « prisonnière » des minima locaux du problème. Certains exemples dans la suite de ce manuscrit, en particulier dans le chapitre 9, feront intervenir de très nombreux minima locaux — bien plus nombreux que pour le périmètre — et nous verrons qu'il est difficile de faire fonctionner notre algorithme correctement dans cette situation.

Dans la troisième situation de la figure 3.7, nous avons brisé la symétrie de la donnée initiale, en utilisant deux rectangles de tailles différentes. Là encore, les deux rectangles se transforment progressivement en cercles, mais cette fois, le plus petit des deux va tout simplement disparaître ! On obtient dès lors un cercle unique comme forme finale, et celui-ci est centré sur le plus gros des deux rectangles initiaux. Cette évolution s'explique simplement. La courbure moyenne du plus petit cercle est supérieure à la moyenne $\bar{H}$ sur le domaine. Ainsi, sa vitesse normale, donnée par $V_n = -H + \bar{H}$, est négative et tend à le faire rétrécir. À l'inverse, la vitesse normale du plus grand cercle sera positive, et tendra à le faire grossir. C'est une

autre propriété importante de l'équation d'Allen–Cahn non locale qui est ici mise en relief : elle peut amener des « disparitions spontanées de matière ». Ces disparitions peuvent être gênantes selon les applications envisagées.

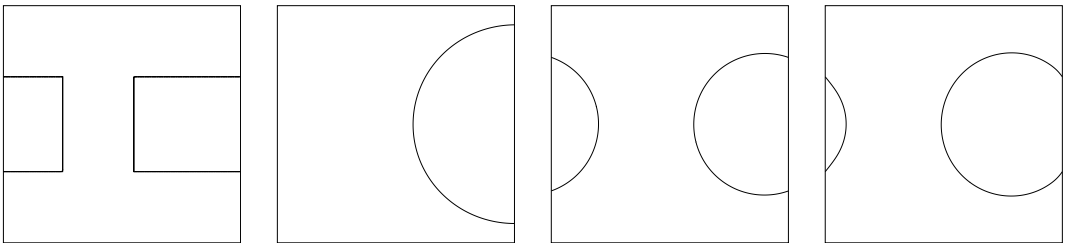
Ce troisième exemple nous donne l'occasion de mettre en avant une différence notoire entre la dynamique de l'équation d'Allen–Cahn non locale (3.12) et celle de l'équation de Cahn–Hilliard (3.13). En effet, la forme initiale composée des deux rectangles de tailles différentes n'aurait pas donné la même forme finale avec (3.13) : on aurait simplement obtenu deux cercles de tailles différentes, et d'aire égale à celle des rectangles de départ. Il n'y aurait pas eu de disparition comme avec (3.12). Cette différence est mise en évidence dans l'article [93] de Rubinstein et Sternberg. On peut la résumer en disant que l'équation de Cahn–Hilliard et le mouvement par diffusion de surface assurent une conservation « locale » du volume, tandis que l'équation d'Allen–Cahn non locale et le mouvement par courbure moyenne conservé assurent une conservation « globale » du volume. Selon les applications, on choisira donc l'une ou l'autre de ces deux équations.

Il faut noter qu'en pratique, l'équation de Cahn–Hilliard est légèrement plus difficile à mettre en œuvre numériquement, puisqu'elle fait apparaître un opérateur d'ordre 4. En éléments finis, on a généralement recours à une formulation mixte, qui conduit à la résolution de deux problèmes d'ordre 2. On pourra consulter les travaux d'Elliott et de ses collaborateurs à ce sujet [34, 35, 38].

Dans les applications de la partie II, nous utiliserons l'équation d'Allen–Cahn non locale. La raison principale de ce choix est liée à l'« historique » de nos travaux : le premier modèle que nous avons étudié est celui de Bonnetier et Chambolle [10] décrit dans le chapitre 6, et il fait justement intervenir une équation d'Allen–Cahn non locale avec second membre. Par la suite, nous avons poursuivi nos tests numériques avec la même implémentation. D'autre part, nous verrons que dans les modèles de la partie II, ce sont avant tout les formes finales obtenues qui nous intéresseront, et pas l'évolution cinétique. Hormis dans quelques cas pathologiques comme ceux illustrés par la figure 3.7, les formes finales pour les deux équations sont les mêmes. Nous ne serons pas confrontés, dans la partie II, aux limitations de la conservation globale mises en évidence sur cette figure 3.7. Néanmoins, l'implémentation d'un code d'éléments finis pour la résolution de l'équation de Cahn–Hilliard fait partie des perspectives évoquées dans la conclusion de ce manuscrit.

Passons maintenant à la figure 3.8, sur laquelle nous exposons les formes obtenues à partir d'une même condition initiale, mais pour trois types de conditions aux limites différents. La première image représente la forme initiale, composée de deux rectangles qui s'appuient sur les bords gauche et droit du domaine. La deuxième image représente la forme obtenue dans le cas de conditions aux limites de Neumann homogènes : il s'agit d'un demi-cercle s'appuyant sur le bord du domaine qui correspond au plus grand des deux rectangles de départ. L'obtention de cette forme finale s'explique de la même façon que pour le troisième exemple de la figure 3.7, où l'on utilisait déjà une donnée initiale composée de deux rectangles de tailles différentes. La troisième image de la figure 3.8 représente la forme obtenue dans le cas

des conditions aux limites périodiques. Si l'on tient compte de la périodicité du domaine, il est clair que cette forme finale est un cercle. Sur la dernière image figure la forme finale dans le cas de conditions aux limites de Dirichlet : la forme obtenue fait apparaître deux arcs d'un même cercle. Si l'on fait correspondre les bords gauche et droit du domaine, on se rend compte que le cercle obtenu est en fait le même que dans le cas des conditions périodiques. Il est simplement centré différemment, de façon à respecter les valeurs aux bords imposées par la condition initiale.



(a) Forme initiale (b) CL de Neumann homogènes (c) CL périodiques (d) CL de Dirichlet

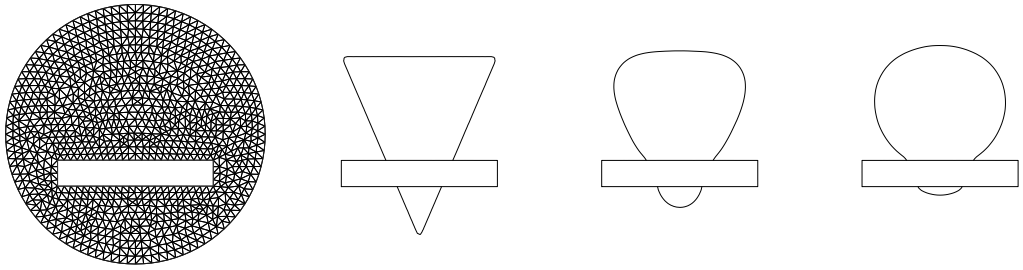
Figure 3.8 – Mouvement par courbure moyenne conservé : un exemple de l'influence des conditions aux limites sur la forme finale.

On peut raisonnablement se poser la question de savoir laquelle des trois formes obtenues sur la figure 3.8 est la meilleure du point de vue du périmètre — sachant que l'aire de ces trois formes est strictement la même, et qu'elle est égale à l'aire de la donnée initiale. Il est tout d'abord clair que les formes obtenues avec conditions aux limites périodiques et conditions aux limites de Dirichlet sont équivalentes en terme de périmètre : les deux cercles obtenus ayant la même aire, ils ont également le même rayon, noté R, et le même périmètre. Ils sont simplement décalés l'un par rapport à l'autre. Notons maintenant R_N le rayon du demi-cercle obtenu dans le cas des conditions aux limites de Neumann homogènes. Ce demi-cercle a la même aire que le cercle obtenu avec les autres conditions aux limites. On doit donc avoir $\frac{1}{2}\pi {R_N}^2 = \pi R^2$, de sorte que le rayon R_N est donné par $R_N = R\sqrt{2}$. Le périmètre du demi-cercle sera donc $\frac{1}{2}(2\pi R_N) = \pi R\sqrt{2}$. Ce périmètre est strictement inférieur au périmètre du cercle obtenu avec les autres conditions aux limites — il y a un rapport $\sqrt{2}$ entre les deux. Dans ce cas, le fait « d'adhérer » au bord du domaine est donc favorable.

Nous pouvons, pour en terminer avec cette série d'exemples, reprendre deux exemples du chapitre 1.

Le premier, sur la figure 3.9, réutilise la géométrie complexe que nous avions introduite page 32. Cette fois, en plus de la conservation du volume, des conditions aux limites de Dirichlet sont imposées sur le trou rectangulaire à l'intérieur du domaine. La forme finale obtenue fait apparaître deux arcs d'un même cercle.

Le second exemple, et le dernier de ce chapitre, se trouve sur la figure 3.10, et reprend la forme en haltère de la figure 1.14, page 33. On remarque que la conservation



(a) Maillage (b) Évolution d'une forme initiale triangulaire

Figure 3.9 – Un exemple de mouvement par courbure moyenne conservé sur géométrie complexe.

du volume va, dans ce cas, empêcher le changement de topologie que nous avions observé. La surface garde une seule composante connexe, et devient asymptotiquement sphérique.

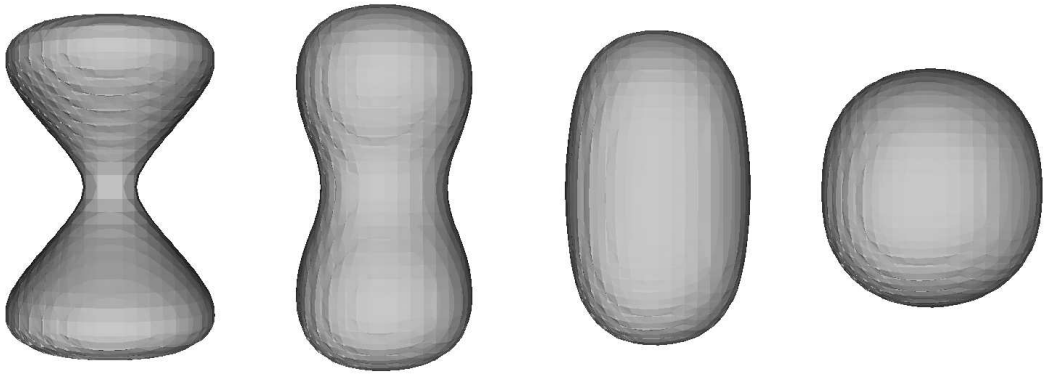


Figure 3.10 – Un exemple en dimension trois : la forme en haltère.

Le chapitre qui suit est consacré au mouvement par courbure moyenne « forcé », qui n'est autre que le mouvement par courbure moyenne auquel on ajoute un terme de forçage.

Chapitre 4

Mouvement par courbure moyenne forcé

Ce chapitre traite de l'ajout d'un terme de forçage dans l'équation du mouvement par courbure moyenne. Notre but ici est avant tout d'exposer les possibilités de notre code de calcul, sur quelques exemples caractéristiques d'utilisation.

Nous envisagerons deux situations. La première, la plus simple, traite d'un terme de forçage porté uniquement par la normale à l'interface. Dans ce cas, l'équation du mouvement est donnée par

$$V_n = -H + g, \tag{4.1}$$

où V_n est la vitesse normale de l'interface, H la courbure moyenne et g le terme de forçage scalaire. Dans le second cas, plus général, le terme de forçage n'est plus forcément porté par la normale. L'équation du mouvement devient

$$\boldsymbol{V} = -H\boldsymbol{n} + \boldsymbol{g}, \tag{4.2}$$

où $\boldsymbol{V}$ est le vecteur vitesse de l'interface, et $\boldsymbol{g}$ le terme de forçage, cette fois vectoriel.

Les mouvements (4.1) et (4.2) apparaissent tous deux dans de nombreuses applications. Nous renvoyons à la revue d'Elliott [33] pour une longue liste de références. Selon les cas, le terme de forçage peut dépendre de la température, de la concentration en certaines espèces chimiques, de la vitesse d'un fluide, etc. Le plus souvent, il est calculé comme solution d'une équation aux dérivées partielles, et on a donc affaire à un couplage avec le mouvement par courbure moyenne. Nous verrons que c'est le cas dans le modèle que nous étudions au chapitre 6.

Dans ce qui suit, les termes de forçage que nous aborderons seront fonction de l'espace et du temps — ce qui permet parfaitement de traiter les exemples cités ci-dessus —, mais nous supposerons qu'ils sont indépendants de la géométrie de la surface. Par exemple, le choix $g = \bar{H}$ qui permettrait de retrouver le mouvement par courbure moyenne conservé n'est pas considéré ici.

Pour chacune des deux situations (4.1) et (4.2), nous donnerons une formulation champ de phase de l'équation du mouvement, et nous présenterons le schéma numérique que nous avons implémenté. Suivront quelques exemples de simulations permettant de valider nos schémas.

4.1 Forçage normal à l'interface

Nous considérons dans cette partie le mouvement défini en (4.1). Nous allons, dans un premier temps, fournir l'approximation par champ de phase de cette équation. Nous essaierons, comme précédemment, de l'obtenir comme flot de gradient d'une fonctionnelle à déterminer.

4.1.1 Formulation champ de phase

Soit Q un ouvert borné de $\mathbb{R}^N$ et soit Ω un ensemble mesurable inclus dans Q. Nous avons vu, dans le chapitre 2, qu'avec le formalisme de la dérivation par rapport au domaine, il était possible d'interpréter le mouvement par courbure moyenne

$$V_n = -H$$

de l'interface $\partial\Omega$ comme un flot de gradient pour le périmètre $P(\Omega)$. Considérons maintenant la fonctionnelle G définie par

$$G(\Omega) = P(\Omega) - \int_\Omega g\,dx, \tag{4.3}$$

où g est une fonction mesurable sur Ω. Nous pouvons, comme pour le périmètre, calculer la dérivée de G par rapport au domaine, grâce aux formules des propositions 6 et 7 du chapitre 2, page 41. Rappelons que nous avons fait l'hypothèse que g ne dépend pas de la géométrie, c'est-à-dire que g ne dépend pas de Ω, et les formules citées s'appliquent bien. La dérivée de G est donnée, pour tout $\boldsymbol{\theta}$ de $C^1(\mathbb{R}^N;\mathbb{R}^N)$, par

$$\begin{aligned} G'(\Omega)(\boldsymbol{\theta}) &= P'(\Omega)(\boldsymbol{\theta}) - \int_{\partial\Omega} (\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{n}) g\,ds \\ &= \int_{\partial\Omega} (\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{n}) H\,ds - \int_{\partial\Omega} (\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{n}) g\,ds \\ &= \int_{\partial\Omega} (\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{n})(H-g)\,ds. \end{aligned}$$

Le choix

$$\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{n} = -H + g$$

fera toujours décroître $G(\Omega)$. La quantité $\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{n}$ n'est autre que la vitesse normale de l'interface V_n. Nous retrouvons ainsi le mouvement défini en (4.1), qui peut donc s'interpréter comme un flot de gradient pour la fonctionnelle G.

Il nous est maintenant facile de construire une approximation par champ de phase de G. En utilisant le théorème de Modica–Mortola pour les fonctionnelles

$$G_\varepsilon(\phi) = F_\varepsilon(\phi) - \lambda_W \int_Q g\phi\,dx, \tag{4.4}$$

où g est une fonction mesurable sur Q, on obtient la proposition qui suit.

Proposition 17. *Soit Q un ouvert borné de $\mathbb{R}^N$. Prolongeons la fonctionnelle G_ε définie en (4.4) à tout l'espace $L^2(Q)$ en posant*

$$G_\varepsilon(\phi) = \begin{cases} \displaystyle\int_Q \left(\frac{\varepsilon}{2}|\nabla\phi|^2 + \frac{1}{\varepsilon}W(\phi)\right) dx - \lambda_W \int_Q g\phi\, dx & \text{si } \phi \in H^1(Q), \\ +\infty & \text{sinon,} \end{cases}$$

avec

$$\lambda_W = \int_0^1 \sqrt{2W(t)}\, dt.$$

Supposons que W est une fonction continue sur $\mathbb{R}$, positive, et qui ne s'annule qu'en 0 et 1. Alors les fonctionnelles G_ε Γ-convergent, quand ε tend vers 0, vers une limite $\lambda_W G$, où G est définie par

$$G(\phi) = \begin{cases} |D\chi_\Omega|(Q) - \displaystyle\int_\Omega g\, dx & \text{si } \phi = \chi_\Omega, \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases}$$

La notation $|D\chi_\Omega|(Q)$ désigne comme précédemment la variation totale de χ_Ω dans Q — revoir la proposition 2, page 36. La démonstration est immédiate, puisque, comme dans le cas de la pénalisation ou du Lagrangien dans le chapitre 3, le terme

$$\lambda_W \int_Q g\phi\, dx$$

est continu en ϕ pour la norme L^1 et ne dépend pas de ε. Le lien entre entre G_ε et notre fonction G définie en (4.3) est donc clairement établi.

Nous pouvons maintenant, comme nous l'avons fait pour la fonctionnelle F_ε, écrire un flot de gradient pour G_ε :

$$\varepsilon\frac{\partial\phi}{\partial t} = -\nabla G_\varepsilon(\phi).$$

Nous retrouvons alors l'habituelle équation d'Allen–Cahn, mais cette fois avec un second membre :

$$\varepsilon\frac{\partial\phi}{\partial t} - \varepsilon\Delta\phi + \frac{1}{\varepsilon}W'(\phi) = \lambda_W g. \tag{4.5}$$

C'est cette équation avec second membre qui tiendra lieu d'approximation par champ de phase pour le mouvement forcé (4.1). Il est bien sûr possible d'obtenir un résultat de convergence similaire à celui du cas sans second membre : si ϕ est solution de (4.5), alors dans la limite $\varepsilon \to 0$, la ligne de niveau $\{\phi = \frac{1}{2}\}$ converge, au sens de Hausdorff, vers une interface évoluant suivant la loi (4.1). Pour plus de précisions sur cette question, nous renvoyons aux notes d'Ambrosio [4].

Nous présentons ci-dessous la méthode numérique que nous avons utilisée pour la résolution de (4.5).

4.1.2 Schéma numérique

Nous utiliserons bien sûr, pour discrétiser (4.5), la même approche numérique que pour l'équation d'Allen–Cahn sans second membre, à savoir une méthode d'éléments finis en espace, et, pour la discrétisation en temps, le schéma

$$\varepsilon\frac{\phi^{n+1}-\phi^n}{\Delta t}-\varepsilon\Delta\phi^{n+1}+\frac{1}{\varepsilon}W'(\phi^n)=\lambda_W g^{n+1}.$$

Sous forme variationnelle, nous aurons donc

$$\frac{\varepsilon}{\Delta t}\int_Q \phi^{n+1}\psi\,dx+\varepsilon\int_Q \nabla\phi^{n+1}\cdot\nabla\psi\,dx \\ =\frac{\varepsilon}{\Delta t}\int_Q \phi^n\psi\,dx-\frac{1}{\varepsilon}\int_Q W'(\phi^n)\psi\,dx+\lambda_W\int_Q g^{n+1}\psi\,dx,$$

ce qui conduit, en utilisant les habituelles formes bilinéaires a et m, au schéma

$$m(\phi^{n+1},\psi)+\Delta t\,a(\phi^{n+1},\psi)=m(F^n,\psi),$$

avec

$$F^n=\phi^n-\frac{\Delta t}{\varepsilon^2}W'(\phi^n)+\frac{\Delta t}{\varepsilon}\lambda_W g^{n+1}.$$

Nous obtenons bien sûr la même forme bilinéaire que d'habitude, et la seule modification à effectuer dans notre code de calcul, par rapport au cas sans second membre, consiste à ajouter le terme en g^{n+1} dans le calcul de F^n à chaque itération.

Nous présentons maintenant quelques exemples de résultats numériques.

4.1.3 Résultats de simulation

Les paramètres utilisés ici sont les mêmes que précédemment : $h=5\cdot10^{-3}$, $\varepsilon=2h$ et $\Delta t=\frac{h^2}{2}$.

La figure 4.1 représente plusieurs petits cercles évoluant suivant le mouvement par courbure moyenne forcé (4.1), avec un terme de forçage g choisi constant et suffisamment grand pour faire « grossir » les cercles, c'est-à-dire suffisamment grand pour que la vitesse normale V_n soit toujours positive. On voit apparaître un phénomène de « coalescence » : les cercles vont se réunir petit à petit, et le nombre de composantes connexes va diminuer tout au long du calcul. Si l'on avait poursuivi les tracés, on aurait vu la phase présente à l'intérieur des cercles occuper progressivement la totalité du domaine de calcul. Le forçage modifie la dynamique du mouvement : celle-ci devient plus complexe que dans le cas du mouvement par courbure moyenne non forcé, et peut faire apparaître des changements de topologie plus variés.

On peut également choisir un forçage g qui dépende de la variable d'espace, comme sur la figure 4.2. Sur cet exemple, g peut prendre deux valeurs : une valeur élevée dans les directions d'angle polaire $\theta=\frac{\pi}{6}$, $\theta=\frac{\pi}{2}$ et $\theta=\frac{5\pi}{6}$, et une valeur plus

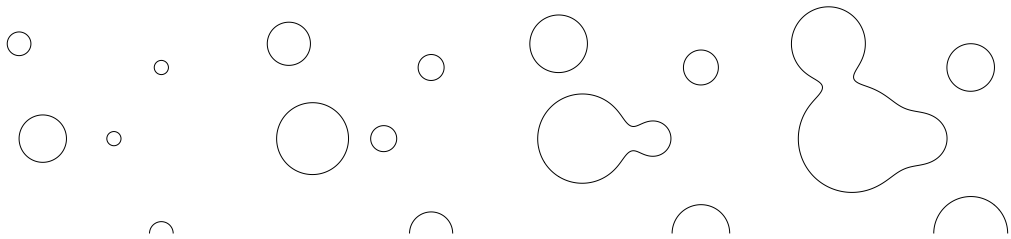


Figure 4.1 – Petits cercles évoluant par courbure moyenne, avec un terme de forçage constant.

faible dans les autres directions. On voit clairement apparaître de l'anisotropie dans le mouvement de l'interface. Attention cependant : il ne s'agit pas pour autant d'un mouvement par courbure moyenne anisotrope ! Ici, seul le terme de forçage dépend de la position. Nous résolvons toujours l'équation d'Allen–Cahn, avec son opérateur de diffusion isotrope. Dans le « vrai » mouvement par courbure moyenne anisotrope, le Laplacien est remplacé par un opérateur anisotrope — voir le chapitre 5.

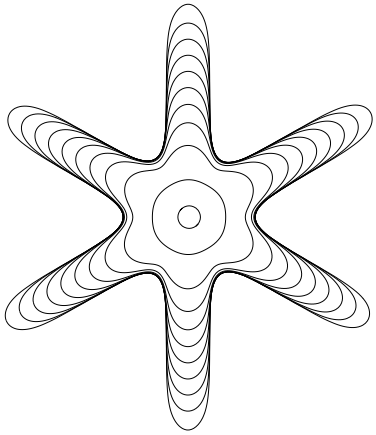


Figure 4.2 – Mouvement par courbure moyenne forcé : cas d'un terme de forçage dépendant de l'espace.

Le cas d'un terme de forçage anisotrope se retrouve dans de nombreuses applications, comme par exemple en croissance de dendrites, un domaine où la méthode de champ de phase est fréquemment employée. La littérature est extrêmement abondante sur le sujet, et nous nous contenterons de citer les travaux de Schmidt [97], ainsi que ceux plus récents de Burman et Picasso [16, 17]. Ces derniers articles présentent des simulations basées sur une méthode d'éléments finis adaptatifs, et proposent une liste de références assez riche. Dans ces problèmes, le terme de forçage provient la plupart du temps d'un couplage avec une équation de réaction–diffusion, équation qui permet de décrire la chimie du modèle. Nous évoquerons dans le chapitre 9 un modèle introduit par Pierre-Louis [89], qui comporte deux équations :

une sur le champ de phase ϕ et une sur la concentration c. Le terme de forçage est, dans cet exemple, un terme de retour à l'équilibre chimique, de la forme $g = c - c_{\text{eq}}$.

4.2 Forçage vectoriel

Nous étudions maintenant le cas où le forçage n'est plus simplement dirigé dans la direction normale à l'interface. Le terme de forçage n'est donc plus un simple scalaire. Il s'agit désormais d'un vecteur $\boldsymbol{g}$, et le mouvement est défini par l'équation vectorielle (4.2) :

$$\boldsymbol{V} = -H\boldsymbol{n} + \boldsymbol{g}.$$

On peut projeter cette équation sur la normale $\boldsymbol{n}$ à l'interface :

$$\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{n} = -H + \boldsymbol{g} \cdot \boldsymbol{n}.$$

On constate ainsi que pour se ramener au cas précédent (4.1) d'un forçage normal,

$$V_n = -H + g,$$

il nous suffit de poser

$$g = \boldsymbol{g} \cdot \boldsymbol{n}.$$

La question est de savoir comment se traduit cette définition dans le cas d'une approche par champ de phase.

4.2.1 Formulation champ de phase

Nous avons vu que l'approximation par champ de phase de (4.1) est donnée par l'équation d'Allen–Cahn avec second membre (4.5) :

$$\varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial t} - \varepsilon \Delta \phi + \frac{1}{\varepsilon} W'(\phi) = \lambda_W g.$$

Nous devons adapter cette équation au cas où g est défini par $\boldsymbol{g} \cdot \boldsymbol{n}$.

Nous savons que le vecteur $\nabla \phi$ est orthogonal à toutes les lignes de niveau de ϕ. Ceci provient de la définition même de ce qu'est une ligne de niveau. Le vecteur normalisé

$$\frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|}$$

sera, sur la ligne de niveau $\{\phi = \frac{1}{2}\}$, une bonne approximation de la normale à l'interface. Nous traduirons donc l'égalité

$$g = \boldsymbol{g} \cdot \boldsymbol{n}$$

en

$$g = \boldsymbol{g} \cdot \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|}.$$

Nous pouvons injecter cette définition dans l'équation (4.5) pour obtenir

$$\varepsilon\frac{\partial\phi}{\partial t} - \varepsilon\Delta\phi + \frac{1}{\varepsilon}W'(\phi) - \lambda_W \boldsymbol{g}\cdot\frac{\nabla\phi}{|\nabla\phi|} = 0. \tag{4.6}$$

Cette fois, c'est donc un terme de transport non linéaire qui s'ajoute à l'équation d'Allen–Cahn. Ceci est tout à fait naturel puisqu'intuitivement, le terme de forçage vectoriel que nous avons considéré a justement pour effet de transporter l'interface.

La question du transport d'interfaces se pose dans de nombreuses applications — voir à ce sujet le livre d'Osher et Fedkiw [86], qui fournit plusieurs exemples de telles applications, ainsi que de nombreuses simulations numériques basées sur la méthode de *level set*.

Nous présentons ci-dessous notre schéma de discrétisation pour l'équation (4.6).

4.2.2 Discrétisation

Nous n'allons pas nous pencher en détail sur le traitement numérique du terme de transport. Notre but n'est pas d'implémenter des schémas d'ordre élevé, comme il peut être indispensable de le faire avec la méthode de *level set* — voir à nouveau le livre d'Osher et Fedkiw [86]. Nous voulons simplement montrer que notre code de calcul permet de transporter les interfaces. Nous utiliserons pour cela la méthode des caractéristiques, telle qu'elle est implémentée dans RHEOLEF. Cette approche est, pour nous, la plus immédiate à mettre en œuvre. Elle permet par ailleurs d'obtenir des résultats largement meilleurs qu'avec une simple discrétisation explicite du terme de transport.

Notre schéma s'écrit

$$\varepsilon\frac{\phi^{n+1} - \phi^n\circ X^n}{\Delta t} - \varepsilon\Delta\phi^{n+1} + \frac{1}{\varepsilon}W'(\phi^n) = 0,$$

où le terme $X^n(x)$ désigne la position, au temps t_n, du point qui se trouve en x au temps t^{n+1}, et qui est transporté par le champ de vitesse

$$\boldsymbol{u}^n = -\frac{\lambda_W}{|\nabla\phi^n|}\boldsymbol{g}.$$

Dans RHEOLEF, $X^n(x)$ est approché avec un schéma d'Euler d'ordre un :

$$X^n(x) \approx x - \Delta t\boldsymbol{u}^n(x).$$

Nous avons dû, en pratique, régulariser le dénominateur dans l'expression de $\boldsymbol{u}^n$, et remplacer $|\nabla\phi^n|$ par $|\nabla\phi^n| + \eta$, avec $\eta = 10^{-10}$. Cette discrétisation nous a permis d'obtenir des résultats très corrects, dont nous exposons quelques exemples ci-après.

4.2.3 Quelques résultats numériques

Dans notre premier exemple, celui de la figure 4.3, nous avons voulu représenter très schématiquement la chute d'une goutte sur un plan horizontal. Les ingrédients du calcul consistent simplement en un terme de forçage constant dirigé suivant la verticale, des conditions de Dirichlet homogènes sur le bord inférieur du domaine, et une conservation du volume assurée par le terme non local introduit au chapitre 3.

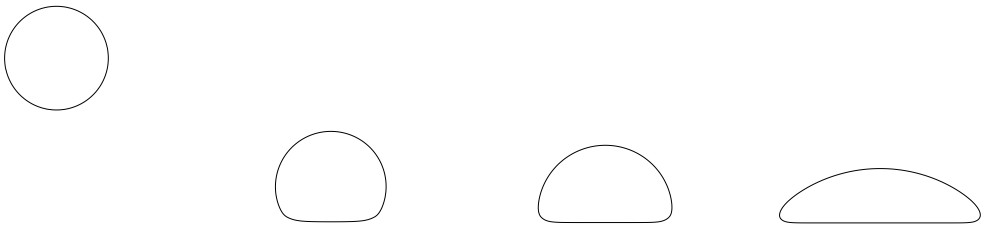


Figure 4.3 – Cas d'un forçage vertical : une goutte tombant sur un plan horizontal.

Dans notre deuxième exemple, sur la figure 4.4, nous avons placé une forme en croix dans un champ $\boldsymbol{g}$ en rotation. Nous n'imposons pas cette fois la conservation du volume. On voit clairement apparaître les deux effets de la dynamique : la croix tourne sur elle-même, et se transforme asymptotiquement en cercle.

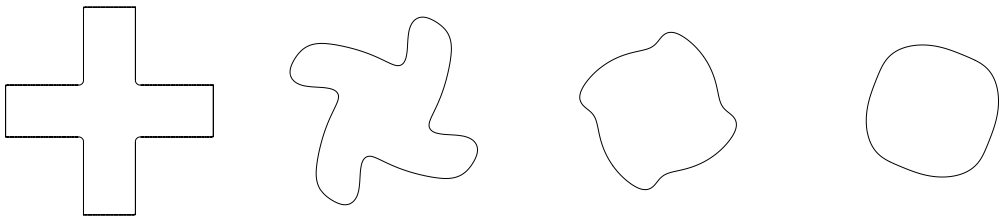


Figure 4.4 – Une croix placée dans un champ tournant.

Jusqu'ici, tous les exemples que nous avons présentés sont des exemples de mouvement par courbure moyenne isotrope. Nous abordons la question de l'anisotropie dans le chapitre qui suit.

Chapitre 5

Mouvement par courbure moyenne anisotrope

Ce chapitre est consacré à l'introduction de l'anisotropie dans le mouvement par courbure moyenne. L'anisotropie apparaît comme un ingrédient incontournable d'un grand nombre de phénomènes physiques. C'est en particulier vrai en croissance cristalline, comme nous aurons l'occasion de le découvrir dans la partie II. Le but de ce chapitre est pour l'instant de mettre en avant les possibilités de notre code de calcul pour ce qui est de la gestion de l'anisotropie.

Notre présentation s'inspire de celle écrite par Deckelnick, Dziuk et Elliott dans la revue [30] — voir également l'article de Bellettini et Paolini [9].

Notre démarche sera calquée sur celle que nous avons employée dans le cas isotrope. Nous allons, dans un premier temps, définir ce qu'est le mouvement par courbure moyenne anisotrope. Nous introduirons, pour ce faire, une version anisotrope de la fonction périmètre. Dans un deuxième temps, nous proposerons une approximation par champ de phase du périmètre anisotrope. Cette approximation nous permettra d'obtenir une version anisotrope de l'équation d'Allen–Cahn. Nous exposerons un schéma de discrétisation pour la résolution de cette équation. En fin de ce chapitre, nous donnerons quelques exemples de simulations effectuées, et nous aborderons très brièvement la question de l'anisotropie non convexe.

5.1 Quelques définitions

Nous introduisons, dans cette première section, les notions d'énergie de surface, de normale et de courbure anisotropes.

5.1.1 Énergie de surface anisotrope

Dans de nombreux problèmes à frontières libres, et en particulier dans les problèmes de transition de phase, il est nécessaire de traiter des interfaces qui évoluent de façon anisotrope selon leur courbure. Il faut pour cela introduire une énergie de surface anisotrope, qui va généraliser la notion de périmètre dans le cas isotrope.

Cette énergie a généralement la forme suivante :

$$P_\gamma(\Omega) = \int_{\partial\Omega} \gamma(\boldsymbol{n})\, ds, \tag{5.1}$$

où $\partial\Omega$ est une hypersurface fermée de $\mathbb{R}^N$, supposée être la frontière d'un ensemble Ω de normale sortante $\boldsymbol{n}$, et γ une fonction d'anisotropie donnée. Lorsque $\gamma(\boldsymbol{n}) = |\boldsymbol{n}|$, c'est-à-dire lorsque γ est donnée par la norme euclidienne, on retrouve le cas isotrope et la notion habituelle de périmètre. Par abus de langage, γ est souvent appelée « l'anisotropie » du problème.

La fonction γ doit vérifier un certain nombre de conditions pour être admissible dans notre étude. Ces conditions sont données par la définition qui suit.

Définition 6. Une fonction d'anisotropie $\gamma : \mathbb{R}^{n+1} \to \mathbb{R}$ est dite « admissible » si

i) $\gamma \in C^3(\mathbb{R}^N \setminus \{0\})$ avec $\gamma(\boldsymbol{p}) > 0$ pour tout $\boldsymbol{p}$ de $\mathbb{R}^N \setminus \{0\}$;

ii) γ est positivement homogène de degré un, c'est-à-dire qu'elle vérifie

$$\gamma(\lambda \boldsymbol{p}) = |\lambda| \gamma(\boldsymbol{p})$$

pour tout λ de $\mathbb{R}^*$ et tout $\boldsymbol{p}$ de $\mathbb{R}^N \setminus \{0\}$;

iii) il existe $\gamma_0 > 0$ tel que

$$\nabla^2 \gamma(\boldsymbol{p}) \boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{q} \geq \gamma_0 |\boldsymbol{q}|^2$$

pour tous $\boldsymbol{p}$ et $\boldsymbol{q}$ de $\mathbb{R}^N$ vérifiant $|\boldsymbol{p}| = 1$ et $\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{q} = 0$.

On dira que l'anisotropie est « convexe » si la fonction γ vérifie la troisième hypothèse de cette définition. C'est une hypothèse cruciale pour l'analyse du problème et, en pratique, pour le bon fonctionnement des méthodes numériques.

Pour une fonction γ admissible, on montre facilement que les propriétés suivantes sont vérifiées :

$$\begin{aligned}
&\nabla \gamma(\boldsymbol{p}) \cdot \boldsymbol{p} = \gamma(\boldsymbol{p}), \\
&\nabla \gamma(\lambda \boldsymbol{p}) = \frac{\lambda}{|\lambda|} \nabla \gamma(\boldsymbol{p}), \\
&\nabla^2 \gamma(\boldsymbol{p}) \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{q} = 0, \\
&\nabla^2 \gamma(\lambda \boldsymbol{p}) = \frac{1}{|\lambda|} \nabla^2 \gamma(\boldsymbol{p}),
\end{aligned}$$

pour tous $\boldsymbol{p} \in \mathbb{R}^N \setminus \{0\}$, $\boldsymbol{q} \in \mathbb{R}^N$ et $\lambda \in \mathbb{R}^*$.

L'anisotropie peut être visualisée en construisant le diagramme de Frank $\mathcal{F}$ et la forme de Wulff $\mathcal{W}$ associés à γ :

$$\begin{aligned}
\mathcal{F} &= \left\{ \boldsymbol{p} \in \mathbb{R}^N \;\middle|\; \gamma(\boldsymbol{p}) \leq 1 \right\}, \\
\mathcal{W} &= \left\{ \boldsymbol{q} \in \mathbb{R}^N \;\middle|\; \gamma^*(\boldsymbol{q}) \leq 1 \right\}.
\end{aligned}$$

Ici, γ^* désigne la fonction duale de γ, donnée par

$$\gamma^*(\boldsymbol{q}) = \sup_{\boldsymbol{p}\in\mathbb{R}^N\setminus\{0\}} \frac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{q}}{\gamma(\boldsymbol{q})}.$$

Remarquons que cette fonction duale n'est correctement définie que si la borne supérieure est atteinte. C'est évidemment le cas lorsque l'anisotropie est convexe, puisqu'alors la fonction à maximiser est concave. Dans ce cas, le diagramme de Frank et la forme de Wulff sont deux ensembles convexes. Lorsque l'anisotropie est convexe mais pas strictement convexe, les frontières du diagramme de Frank et de la forme de Wulff comportent des portions de droite. On parle alors d'anisotropie « cristalline ». Lorsqu'enfin l'anisotropie n'est pas convexe, le diagramme de Frank n'est pas convexe lui non plus, et la forme de Wulff ne peut pas être définie comme ci-dessus. Nous reparlerons de cette situation en fin de chapitre.

Nous pouvons donner quelques exemples de fonctions γ admissibles. Le choix $\gamma(\boldsymbol{p}) = |\boldsymbol{p}|$ permet de retrouver le cas isotrope. On a alors

$$\mathcal{F} = \mathcal{W} = \left\{\boldsymbol{p}\in\mathbb{R}^N \;\middle|\; |\boldsymbol{p}| \leq 1\right\},$$

de sorte que $\mathcal{F}$ et $\mathcal{W}$ sont tous les deux donnés par la boule unité de $\mathbb{R}^N$ pour la norme euclidienne. Un choix d'anisotropie naturel consiste à utiliser la norme discrète l^r :

$$\begin{cases} \gamma(\boldsymbol{p}) = |\boldsymbol{p}|_r = \left(\sum_{k=1}^{N} |p_k|^r\right)^{1/r} & \text{pour } 1 \leq r < +\infty, \\ \gamma(\boldsymbol{p}) = |\boldsymbol{p}|_\infty = \max_{k=1,\dots,N} |p_k| & \text{pour } r = +\infty. \end{cases}$$

Dans ce cas, $\mathcal{F}$ est la boule unité de $\mathbb{R}^N$ pour la norme l_r, et $\mathcal{W}$ la boule unité pour la norme duale $l_{r'}$, où $\frac{1}{r}+\frac{1}{r'} = 1$. En particulier, $\mathcal{F}$ et $\mathcal{W}$ sont convexes. Les cas $r = 1$ et $r = +\infty$ sont un peu à part, dans la mesure où les boules unité correspondantes ne sont pas strictement convexes, mais polygonales. C'est un exemple d'anisotropie cristalline. On peut définir une anisotropie liée à une métrique donnée : on pose pour cela

$$\gamma(\boldsymbol{p}) = \sqrt{G\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p}},$$

où G est une matrice $N \times N$ définie positive. Un exemple en dimension trois est donné par

$$\gamma(\boldsymbol{p}) = \sqrt{\big(5{,}5 + 4{,}5\,\mathrm{sign}(p_1)\big){p_1}^2 + {p_2}^2 + {p_3}^2}.$$

Cet exemple présente une particularité : avec ce choix de γ, le diagramme de Frank et la forme de Wulff ne sont pas symétriques par rapport à l'axe $\{p_1 = 0\}$. Cette particularité peut être utile en croissance de dendrites, où dans une direction donnée,

un sens doit être privilégié par rapport à l'autre. Un autre exemple pratique consiste à poser

$$\gamma(\boldsymbol{p}) = \left(1 - A\left(1 - \frac{|\boldsymbol{p}|_4^4}{|\boldsymbol{p}|^4}\right)\right)|\boldsymbol{p}|,$$

où A est un coefficient réel. Pour $A < 0{,}25$, le diagramme de Frank est convexe, et il est concave sinon. Achevons cette série d'exemples en précisant qu'en dimension deux, il est possible de définir la fonction γ en coordonnées polaires. On pose pour cela

$$\gamma(\boldsymbol{p}) = \rho\psi(\theta),$$

où ρ et θ sont les coordonnées polaires du point $\boldsymbol{p}$, et ψ une fonction donnée. C'est une formulation que l'on retrouve très souvent dans la littérature. Nous donnerons un exemple de choix de ψ plus loin dans ce chapitre, lorsque nous présenterons nos résultats de simulations numériques. Il est important de noter que dans le cas d'une formulation en coordonnées polaires, la convexité de l'anisotropie est équivalente à la condition

$$\psi + \psi'' \geq 0.$$

En effet, pour que l'anisotropie soit convexe, il faut que la matrice hessienne de γ soit définie positive. La trace de cette matrice doit donc être positive. Or elle est donnée par le Laplacien de γ, qui s'écrit, en coordonnées polaires,

$$\begin{aligned}\Delta\gamma &= \frac{\partial^2\gamma}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial\gamma}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2\gamma}{\partial\theta^2} \\ &= 0 + \frac{1}{\rho}\psi(\theta) + \frac{1}{\rho^2}\rho\psi''(\theta) \\ &= \frac{1}{\rho}\Big(\psi(\theta) + \psi''(\theta)\Big).\end{aligned}$$

On retrouve donc bien la condition énoncée plus haut.

Pour un exposé plus approfondi sur les fonctions d'anisotropie, et pour des exemples d'anisotropies dépendant de la variable d'espace, nous renvoyons aux travaux de Bellettini et Paolini [9].

5.1.2 Courbure moyenne anisotrope

Notre objectif est ici de généraliser la notion de courbure moyenne au cas anisotrope. Soit $\partial\Omega$ une surface fermée dans $\mathbb{R}^N$ de normale sortante $\boldsymbol{n}$, et soit γ une fonction d'anisotropie admissible au sens de la définition 6. On définit le vecteur de Cahn–Hoffmann $\boldsymbol{n}_\gamma$ sur $\partial\Omega$ par

$$\boldsymbol{n}_\gamma = \nabla\gamma(\boldsymbol{n}).$$

La courbure moyenne anisotrope est alors donnée par

$$H_\gamma = \operatorname{div}_{\partial\Omega}\boldsymbol{n}_\gamma.$$

La notation $\mathrm{div}_{\partial\Omega}$ désigne la divergence surfacique sur $\partial\Omega$. Dans le cas où $\gamma(\boldsymbol{p}) = |\boldsymbol{p}|$, cette définition de H_γ coïncide bien avec celle de la courbure moyenne H. Un calcul permet de montrer que H_γ est une généralisation naturelle de la courbure moyenne H, au sens où on la retrouve dans la dérivée par rapport au domaine de l'énergie de surface anisotrope P_γ, de même que l'on retrouvait H dans la dérivée du périmètre. Pour effectuer ce calcul de dérivation par rapport au domaine, nous aurons besoin de généraliser les formules des propositions 6 et 7, page 41, et de donner le résultat suivant, qui traite de la dérivation d'intégrales pour des fonctions dépendant du domaine. Nous reprenons les mêmes notations qu'en page 41.

Proposition 18. *Soit Ω_0 un ouvert borné régulier de $\mathbb{R}^N$. Soit $f(\Omega)$ une fonction de $\mathcal{A}(\Omega_0)$ dans $L^1(\mathbb{R}^N)$, que l'on suppose différentiable en Ω_0. Alors l'application J_1 de $\mathcal{A}(\Omega_0)$ dans $\mathbb{R}$ définie par*

$$J_1(\Omega) = \int_\Omega f(\Omega)\,dx$$

est différentiable en Ω_0, et, pour tout $\boldsymbol{\theta} \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}^N;\mathbb{R}^N)$, on a

$$J_1'(\Omega_0)(\boldsymbol{\theta}) = \int_{\Omega_0} \Big(f'(\Omega_0)(\boldsymbol{\theta}) + \mathrm{div}\big(\boldsymbol{\theta} f(\Omega_0)\big)\Big)\,dx.$$

De même, l'application J_2 définie par

$$J_2(\Omega) = \int_{\partial\Omega} f(\Omega)\,ds$$

est différentiable en Ω_0, et, pour tout $\boldsymbol{\theta} \in C^1(\mathbb{R}^N;\mathbb{R}^N)$, on a

$$J_2'(\Omega_0)(\boldsymbol{\theta}) = \int_{\partial\Omega_0} \left(f'(\Omega_0)(\boldsymbol{\theta}) + (\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{n})\left(\frac{\partial f(\Omega_0)}{\partial \boldsymbol{n}} + H f(\Omega_0)\right)\right) ds.$$

La démonstration de cette proposition se trouve dans [2].

Finalement, on dira qu'une surface $\partial\Omega$ évolue par courbure moyenne anisotrope si elle suit la loi d'évolution

$$V_{n_\gamma} = -H_\gamma, \tag{5.2}$$

où V_{n_γ} est maintenant la « vitesse normale anisotrope » de $\partial\Omega$, c'est-à-dire sa vitesse dans la direction $\boldsymbol{n}_\gamma$. Cette loi s'écrit également

$$V_n = -H_\gamma \gamma(\boldsymbol{n}),$$

où V_n est la vitesse de l'interface suivant la normale euclidienne $\boldsymbol{n}$. Le vecteur vitesse de l'interface est en effet donné par

$$\begin{aligned} \boldsymbol{V} &= V_{n_\gamma}\boldsymbol{n}_\gamma \\ &= V_{n_\gamma}\nabla\gamma(\boldsymbol{n}), \end{aligned}$$

de sorte qu'on obtient, dans la direction $\boldsymbol{n}$,

$$\begin{aligned} V_n &= \boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{n} \\ &= V_{n_\gamma}\nabla\gamma(\boldsymbol{n})\cdot\boldsymbol{n} \\ &= V_{n_\gamma}\gamma(\boldsymbol{n}), \end{aligned}$$

en utilisant les propriétés de γ pour la dernière égalité.

Ce nouveau mouvement d'interfaces a été, au même titre que le mouvement isotrope, largement étudié. Certains résultats sont d'ailleurs à mettre en parallèle avec les résultats connus dans le cas isotrope. Nous avions vu, par exemple, que les cercles restaient des cercles sous l'action du mouvement par courbure moyenne, et qu'ils voyaient simplement leur rayon diminuer. Dans le cas anisotrope, ce sont les formes de Wulff qui vont jouer le rôle de cercles, et qui vont évoluer de manière autosimilaire sous l'effet de (5.2). On peut citer les travaux de Gage [52, 53], qui montre qu'une forme convexe se transforme asymptotiquement en forme de Wulff, avant de disparaître. Pour plus de précisions sur les résultats connus pour le mouvement par courbure moyenne anisotrope, nous renvoyons aux références de [30].

Nous pouvons noter qu'en dimension deux, lorsque la fonction γ est donnée sous la forme polaire $\rho\psi(\theta)$, la loi (5.2) s'écrit simplement

$$V_{n_\gamma} = -H(\psi+\psi''),$$

soit encore

$$V_n = -H(\psi+\psi'')\psi,$$

où H désigne la courbure moyenne euclidienne, $H = \operatorname{div}_{\partial\Omega}\boldsymbol{n}$. Il suffit en effet de remarquer que

$$\begin{aligned} \operatorname{div}\boldsymbol{n}_\gamma &= \operatorname{div}\Big(\nabla\gamma(\boldsymbol{n})\Big) \\ &= (\operatorname{div}\boldsymbol{n})\Delta\gamma(\boldsymbol{n}), \end{aligned}$$

et d'utiliser le calcul déjà effectué de $\Delta\gamma$ en coordonnées polaires.

Notre prochaine étape consiste à donner une approximation par champ de phase du mouvement (5.2). Nous allons, comme nous l'avons fait systématiquement, partir d'une approximation de l'énergie. Il s'agit cette fois de l'énergie anisotrope P_γ définie en (5.1).

5.2 Modèle de champ de phase anisotrope

Soit Q un ouvert borné de $\mathbb{R}^N$, supposé contenir la surface $\partial\Omega$ déjà introduite. Une approximation par champ de phase de l'énergie de surface anisotrope P_γ est donnée, pour ϕ dans $H^1(Q)$ et $\varepsilon>0$, par

$$F_{\gamma,\varepsilon}(\phi) = \int_Q \left(\varepsilon A(\nabla\phi) + \frac{1}{\varepsilon}W(\phi)\right)dx, \tag{5.3}$$

où $A : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$ est une fonction régulière, convexe et positivement homogène de degré deux. On peut relier cette fonction A à la densité d'énergie anisotrope γ en posant, pour $\boldsymbol{p}$ dans $\mathbb{R}^N$,

$$A(\boldsymbol{p}) = \frac{1}{2}\gamma(\boldsymbol{p})^2.$$

Dans le cas où γ est donnée par la norme l_2, on retrouve ainsi la fonctionnelle habituelle F_ε, avec son terme en gradient au carré.

Sous les hypothèses sur γ données par la définition 6, on peut montrer un résultat d'existence de solutions pour le problème de la minimisation de $F_{\gamma,\varepsilon}$ à volume donné, résultat tout à fait similaire à celui de la proposition 8, page 45. La démonstration est immédiate, puisque la coercivité et la semi-continuité inférieure s'obtiennent directement des hypothèses sur γ.

Un résultat de Γ-convergence similaire au théorème de Modica–Mortola, donné page 47, peut également être démontré — voir l'article très général de Bellettini [7]. La Γ-limite des fonctionnelles $F_{\gamma,\varepsilon}$ est cette fois le périmètre anisotrope P_γ.

Nous allons, comme nous l'avions fait pour obtenir l'équation d'Allen–Cahn dans le cas isotrope, écrire un flot de gradient pour la fonctionnelle $F_{\gamma,\varepsilon}(\phi)$:

$$\varepsilon\frac{\partial\phi}{\partial t} = -\nabla F_{\gamma,\varepsilon}(\phi).$$

En supposant que γ est C^2 et que ϕ vérifie, comme d'habitude, des conditions aux limites de Neumann homogènes sur le bord de Q, la différentielle de $F_{\gamma,\varepsilon}$ s'écrit formellement

$$\begin{aligned} F'_{\gamma,\varepsilon}(\phi)(\psi) &= \varepsilon\int_Q \gamma(\nabla\phi)\,\nabla\gamma(\nabla\phi)\cdot\nabla\psi\,dx + \frac{1}{\varepsilon}\int_Q W'(\phi)\psi\,dx \\ &= \int_Q \left(-\varepsilon\,\mathrm{div}\Big(\gamma(\nabla\phi)\,\nabla\gamma(\nabla\phi)\Big) + \frac{1}{\varepsilon}W'(\phi)\right)\psi\,dx \\ &= \left\langle \nabla F_{\gamma,\varepsilon}(\phi)\,,\,\psi\right\rangle_{L^2}. \end{aligned}$$

Rappelons que $\gamma(\nabla\phi)$ est un scalaire, tandis que $\nabla\gamma(\nabla\phi)$ est un vecteur de $\mathbb{R}^N$. Notre flot de gradient s'écrit finalement

$$\varepsilon\frac{\partial\phi}{\partial t} - \varepsilon\,\mathrm{div}\Big(\gamma(\nabla\phi)\,\nabla\gamma(\nabla\phi)\Big) + \frac{1}{\varepsilon}W'(\phi) = 0. \tag{5.4}$$

Le Laplacien de l'équation d'Allen–Cahn est remplacé par un opérateur anisotrope faisant intervenir la fonction γ. Dans le cas $\gamma(\boldsymbol{p}) = |\boldsymbol{p}|$, le gradient de γ est donné par

$$\nabla\gamma(\boldsymbol{p}) = \frac{\boldsymbol{p}}{|\boldsymbol{p}|},$$

si bien que l'on retrouve tout naturellement le Laplacien. Dans le cas général, l'opérateur est par contre fortement non linéaire. Des résultats d'existence et d'unicité

ont néanmoins été démontrés, de même que la convergence vers le mouvement par courbure moyenne anisotrope (5.2), dans la limite $\varepsilon \to 0$ — voir les travaux de McFadden et Wheeler dans le cas du potentiel double puits [73, 109], ainsi que ceux de Elliott et Schätzle dans le cas du potentiel double obstacle [39, 40].

Nous allons maintenant présenter notre méthode numérique pour la discrétisation de (5.4).

5.3 Schéma de discrétisation

La résolution numérique de l'équation (5.4) est, bien entendu, plus problématique que celle de l'équation d'Allen–Cahn dans le cas isotrope. Nous avons maintenant affaire à un opérateur de diffusion non linéaire. Un traitement implicite de cet opérateur nécessiterait la résolution d'un problème non linéaire à chaque itération. Ce serait, d'une part, coûteux en temps de calcul. Il faudrait, d'autre part, dériver des termes qui sont déjà en $\nabla\phi$ pour appliquer une méthode de descente, et les dériver une seconde fois pour utiliser un algorithme de Newton. Il est clair qu'en termes de mise en œuvre, ces solutions sont plutôt rédhibitoires. Notre choix s'est donc porté sur l'utilisation d'un schéma totalement explicite :

$$\varepsilon\frac{\phi^{n+1}-\phi^n}{\Delta t} - \varepsilon\,\mathrm{div}\Big(\gamma(\nabla\phi^n)\,\nabla\gamma(\nabla\phi^n)\Big) + \frac{1}{\varepsilon}W'(\phi^n) = 0.$$

Sous forme variationnelle, ce schéma s'écrit

$$\begin{aligned}\frac{\varepsilon}{\Delta t}\int_Q \phi^{n+1}\psi\,dx \\ = \frac{\varepsilon}{\Delta t}\int_Q \phi^n\psi\,dx - \varepsilon\int_Q \gamma(\nabla\phi^n)\,\nabla\gamma(\nabla\phi^n)\cdot\nabla\psi\,dx - \frac{1}{\varepsilon}\int_Q W'(\phi^n)\psi\,dx.\end{aligned}$$

Nous pouvons introduire une nouvelle forme bilinéaire b définie par

$$b(\boldsymbol{u},\psi) = \int_Q \boldsymbol{u}\cdot\nabla\psi\,dx,$$

de façon à écrire notre schéma sous la forme

$$m(\phi^{n+1},\psi) = m(F^n,\psi) + b(\boldsymbol{u}^n,\psi),$$

avec

$$\begin{aligned}F^n &= \phi^n - \frac{\Delta t}{\varepsilon^2}W'(\phi^n)\\ \boldsymbol{u}^n &= -\Delta t\,\gamma(\nabla\phi^n)\,\nabla\gamma(\nabla\phi^n).\end{aligned}$$

C'est ce schéma que nous avons implémenté, en chargeant toujours RHEOLEF de la discrétisation par éléments finis en espace. Cette dernière forme présente un avantage notoire : elle ne fait apparaître aucune dérivée seconde de ϕ. Nous pourrons donc continuer à utiliser des éléments de type P_1 sans rencontrer de difficultés supplémentaires.

Il nous faut cependant faire une remarque importante : le fait d'utiliser un schéma totalement explicite va modifier la contrainte de stabilité à laquelle nous sommes soumis. Jusqu'à présent, nous devions avoir

$$\Delta t \leq \alpha \varepsilon^2,$$

avec une constante α fixée par le potentiel W. Nous allons maintenant devoir vérifier la contrainte classique

$$\Delta t \leq C h^2,$$

où C va dépendre de la géométrie du domaine et de la condition initiale. Comme nous choisissons en pratique ε de l'ordre de h, Δt va rester du même ordre que précédemment : $\Delta t \approx h^2 \approx \varepsilon^2$. Par contre, la constante va changer. Dans les faits, nous avons abouti, selon les cas, à des calculs de 5 à 30 fois plus longs que dans le cas isotrope. C'est le prix à payer pour pouvoir traiter l'opérateur anisotrope. Signalons au passage que ce schéma explicite est celui utilisé par Paolini et ses collaborateurs dans leur longue série d'articles sur l'anisotropie [48, 9, 57, 49]. Ils le combinent généralement à leur algorithme adaptatif DMA [79], qui permet de profiter de la localisation due à l'utilisation du potentiel double obstacle. Ce schéma explicite est également utilisé par Burman, Picasso et Rappaz dans plusieurs de leurs travaux sur la croissance des dendrites [16, 15, 17]. Ils utilisent, quant à eux, une technique de raffinement de maillages fortement anisotrope.

Un moyen de limiter la perte d'efficacité en temps est présenté par Elliott [33] : il propose d'utiliser une méthode de condensation de masse (*mass lumping*) pour rendre la matrice de la forme bilinéaire m diagonale. De cette façon, le calcul de ϕ^{n+1} ne nécessite même plus la résolution d'un système linéaire. Cette propriété est obtenue en utilisant la formule des trapèzes pour évaluer les intégrales dans m. On appelle alors m_h la nouvelle forme, et on remplace m par m_h dans le problème approché. On peut montrer que l'erreur d'approximation reste du même ordre — voir par exemple Raviart et Thomas [92]. La condensation de masse étant implémentée dans RHEOLEF, nous avons pu tester cette approche. L'amélioration en temps n'a pas été vraiment significative. Sans la condensation de masse, la matrice est factorisée au début du calcul, et la librairie UMFPACK permet ensuite une résolution des deux systèmes triangulaires à chaque itération en $O(\mathcal{N} \log \mathcal{N})$ (méthode multifrontale en P_1). Avec la condensation de masse, le coût d'un produit matrice vecteur creux est en $O(\mathcal{N})$ à chaque itération. Pour $\mathcal{N}$ de l'ordre de 10^4, on perçoit à peine la différence en pratique. Nous avons donc finalement préféré ne pas utiliser la condensation de masse, et conserver la forme m initiale.

Nous présentons maintenant quelques exemples de résultats numériques obtenus.

5.4 Résultats numériques

Les simulations exposées ici ont été réalisées avec le jeu de paramètres suivant : $h = 5 \cdot 10^{-3}$, $\varepsilon = 2h$ et $\Delta t = \frac{h^2}{50}$. Par rapport à nos choix habituels, nous avons uniquement modifié le pas de temps, que nous avons divisé par 25. Ce facteur est tout à fait arbitraire. Il nous a permis d'effectuer tous les calculs qui suivent sans être confrontés à des problèmes de stabilité, et nous l'avons donc conservé. Mais il n'est certainement pas optimal pour tous les exemples. À titre indicatif, précisons qu'aucun de nos calculs en dimension deux n'a duré plus d'une trentaine de minutes, sur une station de travail DELL équipée de deux processeurs INTEL XEON 2 GHz et de 2 Go de RAM.

Nous présentons tout d'abord, sur la figure 5.1, trois exemples d'évolution dans le cas d'une anisotropie γ strictement convexe. La forme initiale est circulaire, et identique pour les trois exemples. On observe un comportement similaire dans les trois cas : le cercle se transforme en la forme de Wulff correspondant à l'anisotropie choisie, et évolue ensuite de manière autosimilaire. Comme dans le cas isotrope, il semble que le mouvement s'accélère sur la fin. C'est que le « rayon anisotrope » de la forme de Wulff diminue comme une fonction racine du temps, exactement comme le rayon du cercle dans le cas isotrope. Sur la première image, c'est la norme l^4 qui est utilisée comme fonction d'anisotropie. La forme de Wulff à obtenir est donc la boule de la norme duale, la norme $l^{4/3}$. C'est effectivement ce que nous observons. Sur la deuxième image, c'est exactement l'inverse : la fonction d'anisotropie choisie est la norme $l^{4/3}$, et la forme de Wulff à obtenir est la boule de la norme l^4. Nous la retrouvons également. Pour la troisième image, la fonction d'anisotropie utilisée est définie par

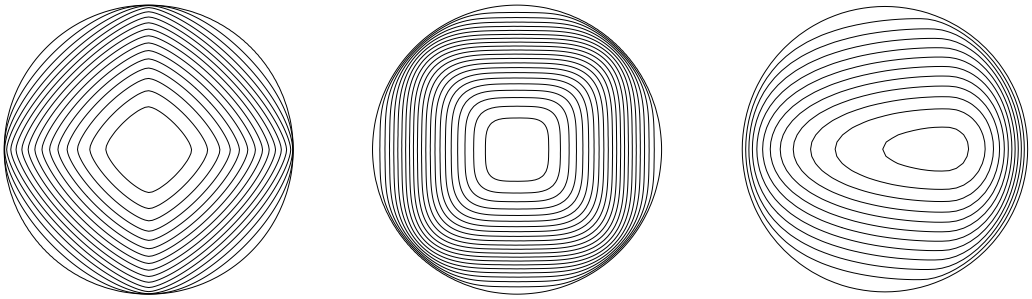
$$\gamma_{\text{asym}}(\boldsymbol{p}) = \sqrt{\big(5{,}5 + 4{,}5\,\text{sign}(p_1)\big){p_1}^2 + {p_2}^2}.$$

Elle présente une dissymétrie dans la direction p_1, dissymétrie qui se retrouve sur la forme de Wulff.

Sur la figure 5.2 se trouvent trois autres exemples d'évolution, cette fois pour des anisotropies cristallines. On retrouve sur les deux premières images les formes de Wulff attendues, à savoir les boules des normes l^1 et l^∞ respectivement. On peut comparer ces résultats à ceux obtenus sur les deux premières images de la figure 5.1. On constate que les angles des formes de Wulff sont bien marqués, ce qui n'est pas toujours le cas dans la littérature : certaines méthodes numériques ne permettent pas d'aborder directement le cas cristallin, et il faut alors approcher l'anisotropie cristalline par une anisotropie convexe, ce qui a pour effet d'arrondir les angles apparaissant sur la forme de Wulff. Pour la troisième image de la figure 5.2, nous avons utilisé une fonction γ définie en coordonnées polaires :

$$\gamma_{\text{hexagon}}(\boldsymbol{p}) = \rho \cos \hat{\theta},$$

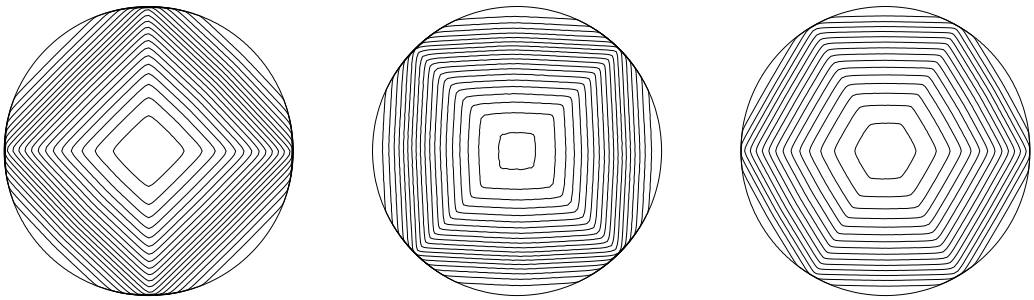
où $\hat{\theta}$ désigne l'angle polaire θ ramené modulo $\frac{\pi}{3}$ à l'intervalle $\left[\frac{\pi}{6}, \frac{\pi}{6}\right]$. Le diagramme de Frank obtenu est un hexagone, et la forme de Wulff correspondante est également



(a) $\gamma(\boldsymbol{p}) = |\boldsymbol{p}|_{l^4}$ (b) $\gamma(\boldsymbol{p}) = |\boldsymbol{p}|_{l^{4/3}}$ (c) $\gamma(\boldsymbol{p}) = \gamma_{\text{asym}}(\boldsymbol{p})$

Figure 5.1 – Mouvement par courbure moyenne anisotrope d'un cercle, pour trois anisotropies strictement convexes.

un hexagone, décalé par rapport à l'autre. Ceci concorde bien avec le résultat que nous observons.



(a) $\gamma(\boldsymbol{p}) = |\boldsymbol{p}|_{l^\infty}$ (b) $\gamma(\boldsymbol{p}) = |\boldsymbol{p}|_{l^1}$ (c) $\gamma(\boldsymbol{p}) = \gamma_{\text{hexagon}}(\boldsymbol{p})$

Figure 5.2 – Mouvement par courbure moyenne anisotrope d'un cercle, pour trois anisotropies cristallines.

Un aspect positif de nos simulations dans le cas cristallin concerne les parties du cercle qui restent bien immobiles tant que la forme de Wulff n'est pas en place. Nous allons tenter de fournir une explication intuitive à cette immobilité, en supposant γ donnée sous forme polaire. Une explication moins formelle nécessiterait de définir rigoureusement le mouvement par courbure moyenne cristallin, ce qui n'est pas notre objet ici. Encore une fois, nous renvoyons à la suite de travaux entamée par Bellettini et Paolini [9]. Dans le cas cristallin, le diagramme de Frank est un polygone. Nous désignerons par « directions anguleuses » les directions qui correspondent aux angles du diagramme, et par « directions plates » toutes les autres, qui correspondent aux

portions de droite. Rappelons que la vitesse normale anisotrope de l'interface est donnée par

$$V_{n_\gamma} = -H(\psi + \psi'').$$

Dans les directions anguleuses, la quantité $\psi + \psi''$ est infinie. En effet, ψ n'étant pas dérivable pour ces directions, ψ'' est une masse de Dirac. La vitesse V_{n_γ} ne peut rester finie que si la courbure H est nulle : on verra donc apparaître des portions de droite sur l'interface dans les directions anguleuses. Dans les directions plates, la quantité $\psi + \psi''$ est nulle. En effet, dans ces directions, ψ est donnée par une fonction trigonométrique solution de l'équation différentielle $\psi + \psi'' = 0$ — voir l'exemple de γ_{hexagon}, où ψ est simplement la fonction cosinus. Dans les directions plates, la vitesse V_{n_γ} restera donc nulle jusqu'à ce que la courbure H devienne infinie, c'est-à-dire jusqu'à ce qu'un angle apparaisse sur l'interface. On verra alors la forme de Wulff se mettre en place, et évoluer ensuite de manière autosimilaire, avec une vitesse V_{n_γ} constante.

Nous allons maintenant aborder brièvement le cas d'anisotropies non convexes.

5.5 Anisotropies non convexes

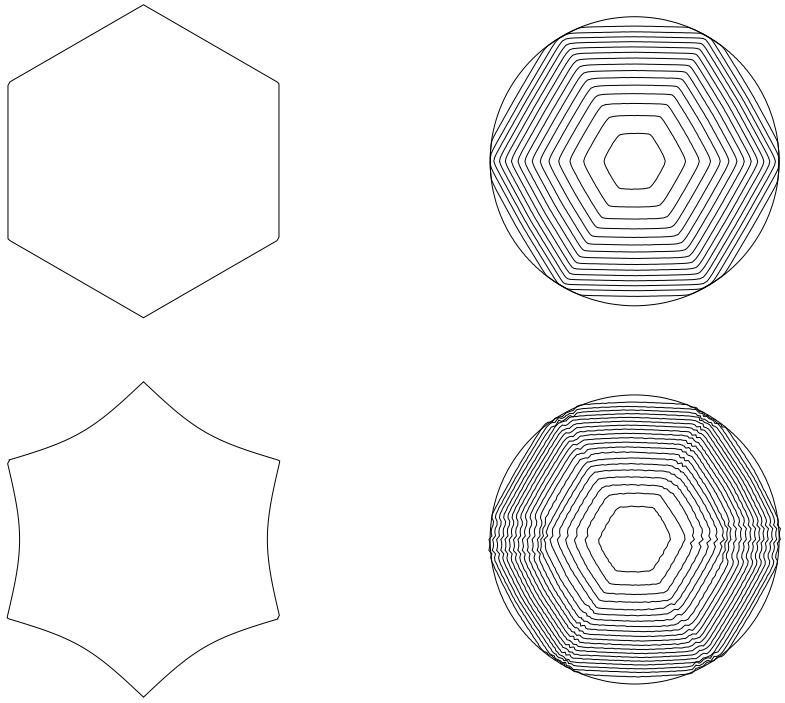
On parle d'anisotropie non convexe lorsque la fonction γ ne vérifie pas le troisième critère de la définition 6 donnée en début de chapitre. Un critère équivalent est la non convexité du diagramme de Frank $\mathcal{F}$.

La très grande majorité des résultats connus sur le mouvement par courbure moyenne anisotrope sont obtenus dans le cas d'une anisotropie convexe. Ils ne sont plus valables dès que celle-ci est non convexe. On ne sait, à vrai dire, presque rien sur le cas non convexe. Le plus étonnant est sans doute la constatation suivante : dans le cas non convexe, alors qu'on peut continuer à résoudre numériquement l'équation de champ de phase (5.4), on ne sait absolument pas décrire le mouvement d'interfaces que cette équation permet d'approcher.

Il n'empêche que plusieurs travaux traitent d'anisotropie non convexe. En particulier, Bellettini et Paolini ont proposé, avec leurs collaborateurs, de nombreuses simulations numériques sur la question [9, 57]. Nous avons ici choisi l'un de leurs cas tests, trouvé dans [57], et nous avons à notre tour effectué des simulations. Nos résultats sont présentés sur la figure 5.3. Dans la colonne de gauche se trouvent les diagrammes de Frank des deux fonctions γ utilisées, et dans la colonne de droite le mouvement correspondant pour une forme initiale circulaire. La première ligne correspond au cas déjà rencontré sur la troisième image de la figure 5.2. Il s'agit d'une anisotropie cristalline tout à fait classique. Sur la deuxième ligne, nous avons modifié la fonction γ de façon à rendre l'anisotropie non convexe :

$$\gamma(\boldsymbol{p}) = \rho\Big(\tfrac{3}{4} + \tfrac{9}{16}\cos(2\hat{\theta})\Big),$$

où $\hat{\theta}$ désigne comme précédemment l'angle polaire θ ramené modulo $\frac{\pi}{3}$ à l'intervalle $\left[\frac{\pi}{6}, \frac{\pi}{6}\right]$. Les coefficients sont choisis de façon à assurer que la condition de convexité $\psi + \psi'' \geq 0$ ne soit jamais satisfaite.



(a) Diagrammes de Frank (b) Évolutions

Figure 5.3 – Mouvement par courbure moyenne anisotrope : un exemple convexe et un autre non convexe.

Le résultat obtenu est surprenant : la non convexité fait apparaître des « rides » sur l'interface. Ces rides ont été également observées par Paolini et Bellettini. Ils obtiennent d'ailleurs des résultats très similaires à ceux de la figure 5.3.

L'apparition de ces rides est encore difficile à interpréter aujourd'hui. Il semblerait que d'un point de vue énergétique, la création d'oscillations soit favorable, dans le cas d'une anisotropie non convexe. En faisant des calculs sur différents maillages, on constate que les rides sont toujours exactement de la taille d'une maille. Ceci semble indiquer qu'elles seraient donc d'amplitude infiniment petite. Dans certaines situations, l'évolution dans le cas non convexe finit par faire apparaître la forme de Wulff correspondant à l'anisotropie « convexifiée ». Le fait d'utiliser une anisotropie non convexe fournirait donc un autre cheminement permettant d'arriver à la même forme d'équilibre.

Pour une discussion plus approfondie sur ces phénomènes de rides, nous renvoyons à l'article [57] d'où est tiré ce cas test, ainsi qu'à [9]. Notre objectif ici était

principalement de montrer que notre code de calcul permet de retrouver à l'identique les résultats obtenus dans ces travaux.

Nous espérons avoir fait la preuve, dans cette première partie du manuscrit, de la robustesse et de la richesse de notre mise en œuvre numérique. Celle-ci permet en effet de traiter à peu près toutes les variantes possibles du mouvement par courbure moyenne et de l'équation d'Allen–Cahn. Nous allons maintenant utiliser notre outil dans l'étude de modèles plus complets, à commencer, dans le chapitre 6, par un modèle variationnel du phénomène d'instabilité de Grinfeld.

Deuxième partie

Applications en croissance cristalline

Chapitre 6

Croissance hétéro-épitaxiale et instabilité de Grinfeld

Nous poursuivons, dans ce chapitre, un double objectif : d'une part présenter brièvement le phénomène physique d'instabilité de Grinfeld [60], et d'autre part introduire le modèle variationnel étudié par Bonnetier, Falk et Grinfeld [11], puis par Bonnetier et Chambolle [10].

La première moitié de ce chapitre sera ainsi consacrée au contexte dans lequel apparaît l'instabilité de Grinfeld. Il sera question de croissance cristalline, et plus précisément de croissance hétéro-épitaxiale. Nous nous contenterons d'une présentation rapide, et nous renvoyons, pour plus de détails, au livre de Villain et Pimpinelli [108], ou à celui de Markov [72]. Sur l'épitaxie en particulier, on pourra consulter la revue de Gao et Nix [54], ainsi que celle de Shchukin et Bimberg [99]. La *Materials Research Society* consacre également l'un de ses bulletins à l'hétéro-épitaxie [98].

Le modèle variationnel que nous présenterons dans la seconde moitié du chapitre porte sur l'étude des formes d'équilibre dans les films cristallins hétéro-épitaxiés. Il a d'abord été introduit dans un contexte simplifié à une dimension [11], avant d'être étudié dans le vrai cas à deux dimensions [10]. Nous rappellerons les résultats obtenus dans ces deux articles.

6.1 Rappels sur le contexte physique

Cristal. Réseau cristallin. Maille.

Le mot « cristal » désigne généralement un solide dont les atomes, molécules ou ions sont répartis de manière ordonnée dans l'espace. La structure d'un cristal est périodique : elle est constituée d'un motif répété dans l'espace selon un réseau. Le plus petit motif permettant de recomposer la structure est appelé la « maille » élémentaire du cristal. Selon les cristaux considérés, cette maille peut comporter plus ou moins d'atomes, et avoir une géométrie plus ou moins complexe. Parmi les exemples courants, on trouve les types de maille suivants : cubique, cubique centré, cubique à faces centrées, hexagonal. Le type de maille va bien sûr avoir une influence importante sur les propriétés physiques et chimiques du cristal.

Suivant les échelles, il existe différentes façons de représenter un cristal. Aux échelles les plus petites, on utilise la plupart du temps une description atomique : le cristal est défini par l'agencement de ses atomes dans l'espace à trois dimensions. Ceci conduit généralement à des modèles discrets et à des simulations numériques de type « dynamique moléculaire ». Les calculs *ab initio*, très coûteux en temps, permettent d'étudier des systèmes de l'ordre de la centaine ou du millier d'atomes, mais difficilement au-delà. On peut alors adopter une description plus mésoscopique du cristal, et le voir comme un empilement de couches atomiques. Cette description est très utilisée pour étudier l'évolution des surfaces vicinales, sujet que nous abordons dans le chapitre 9. Elle peut conduire à des modèles mixtes qui mélangent aspects discrets et continus. Aux échelles macroscopiques, on retrouve une description et des modèles complètement continus. Le cristal est alors vu comme un matériau élastique, qui peut être linéaire ou non selon les applications considérées.

Croissance cristalline. Épitaxie. Épitaxie par jet moléculaire.

Le processus de cristallisation, c'est-à-dire le processus de création d'un cristal, comporte deux étapes. La première est la germination, terme désignant l'apparition d'une phase cristalline solide, le « germe », à partir d'une phase liquide ou gazeuse. La seconde étape est l'étape de croissance cristalline, processus par lequel les cristaux vont croître après la germination. Cette croissance peut être naturelle ou artificielle.

Il existe plusieurs procédés industriels de croissance de cristaux. L'un d'entre eux, qui va particulièrement nous intéresser, est l'épitaxie par jet moléculaire, *Molecular Beam Epitaxy* (MBE) en anglais. Le mot « épitaxie », du grec *epi*, « sur », et *taxis*, « arrangement », regroupe l'ensemble des techniques dans lesquelles on fait croître un film cristallin sur un substrat préalablement formé. L'épitaxie par jet moléculaire est une technique de croissance en phase vapeur, qui consiste à envoyer un ou plusieurs jets de molécules sur le substrat. Elle nécessite un vide aussi proche de l'absolu que possible, la pureté du cristal que l'on fait croître dépendant directement de la qualité du vide utilisé. La figure 6.1 propose une représentation schématique d'une chambre d'épitaxie. Le mot « adatome » de la figure désigne les atomes qui sont en surface du film. On parle d'« adsorption » pour désigner le phénomène par lequel les molécules d'un gaz ou d'un liquide se fixent sur une surface solide. Il faut cependant comprendre que la surface du cristal n'est pas statique, mais dynamique : les adatomes ne restent pas immobiles, ils diffusent sur la surface, et interagissent entre eux. Ils pourront former, dans certains cas, des agrégats en surface du film.

On parle d'homo-épitaxie si le cristal déposé est le même que celui qui compose le substrat, et d'hétéro-épitaxie sinon. L'homo-épitaxie est généralement utilisée pour obtenir un film cristallin plus pur que ne l'est le substrat. Bien sûr, l'obtention d'une grande pureté aura un coût : elle nécessitera un vide très poussé et une croissance lente pour éviter les défauts à l'intérieur du film. L'hétéro-épitaxie permet quant à elle de créer des matériaux composés de plusieurs couches différentes superposées, ce qui peut également être très utile dans les applications.

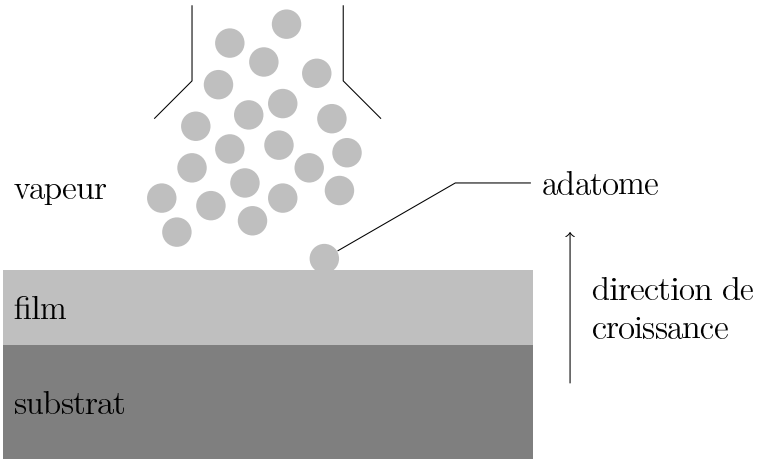
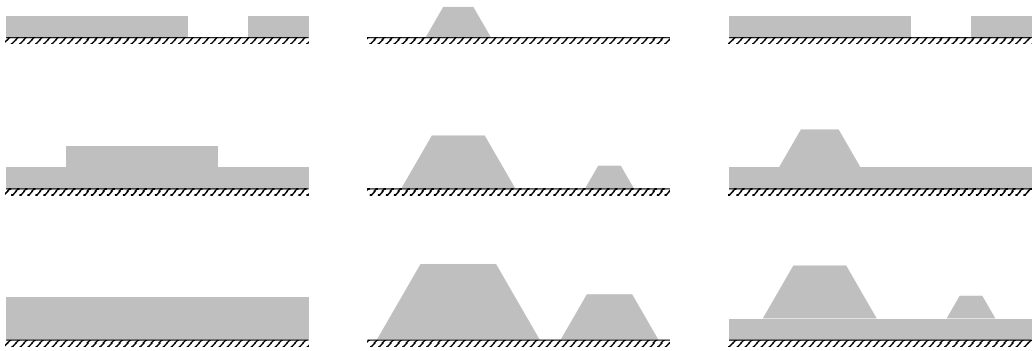


Figure 6.1 – Principe de l'épitaxie par jet moléculaire.

L'épitaxie par jet moléculaire est très utilisée dans le domaine des nanotechnologies, pour la fabrication de semi-conducteurs. Ces semi-conducteurs sont employés dans l'industrie pour la production des circuits intégrés. Parmi les cristaux les plus utilisés, on retrouve bien sûr le silicium, mais aussi les alliages silicium–germanium SiGe ou encore l'arséniure de gallium GaAs. Les enjeux technologiques et économiques autour de la croissance épitaxiale sont de première importance.

Modes de croissance. Îlots cristallins.

En épitaxie, différents modes de croissance peuvent être observés selon les cristaux que l'on essaie de faire pousser. Ces modes de croissance sont schématisés sur la figure 6.2.



(a) Croissance 2D ou Frank-van der Merwe

(b) Croissance 3D ou Volmer–Weber

(c) Croissance 2D/3D ou Stranski–Krastanov

Figure 6.2 – Les différents types de croissance épitaxiale.

Le premier mode est celui d'une croissance couche par couche : les adatomes

vont s'étaler de façon à recouvrir l'intégralité du substrat ou de la couche monoatomique précédente. La croissance est bidimensionnelle. On dit qu'elle est de type Frank-van der Merwe. Dans le deuxième cas, les adatomes vont se regrouper et former des agrégats ou « îlots ». Cette croissance tridimensionnelle est dite de type Volmer–Weber. Le troisième cas est un intermédiaire entre les deux précédents : le film commence par pousser selon le mode couche par couche Frank-van der Merwe, mais à partir d'une certaine épaisseur, la croissance devient de type Volmer–Weber et des îlots se forment. On passe donc d'un mode de croissance bidimensionnel à un mode tridimensionnel. L'épaisseur critique à laquelle se produit le basculement d'un type de croissance à l'autre dépend des propriétés physico-chimiques du film et du substrat. Le désaccord de maille entre les deux (*misfit*) va jouer un rôle important, tout comme l'écart entre les tensions de surface. On dit que cette croissance intermédiaire est de type Stranski–Krastanov.

Instabilité de Grinfeld (ou Asaro–Tiller–Grinfeld).

En hétéro-épitaxie, le désaccord de maille entre le film et le substrat induit une énergie élastique à l'intérieur du film : le réseau cristallin du film doit s'adapter à celui du substrat, ce qui a pour effet de créer un déplacement élastique dans le film — voir la figure 6.3. Deux mécanismes permettent de relaxer l'énergie élastique accumulée pendant la croissance : l'apparition de dislocations, et la formation d'îlots.

On parle de dislocation lorsqu'un défaut apparaît dans le réseau cristallin. Il existe de nombreux types de dislocations, et nous n'allons pas entrer dans le détail ici. Nous retiendrons simplement qu'au niveau de la dislocation, les atomes qui composent le film ne sont plus « solidaires » du réseau. Ils ne subissent donc plus la déformation due au désaccord de maille avec le substrat. L'énergie élastique est bien relaxée.

Une autre méthode de relaxation consiste, pour les adatomes, à diffuser sur la surface libre du film de façon à former des configurations plus avantageuses du point de vue énergétique — voir la figure 6.4. On parle de « réorganisation ». Le surface du film va généralement rester plane jusqu'à ce qu'une certaine hauteur critique h_c soit atteinte. Au-delà de cette hauteur h_c, on verra apparaître des ondulations, qui se transformeront petit à petit en îlots. Au sommet des îlots, le film est moins contraint que près du substrat, et retrouve une configuration plus proche de sa configuration naturelle. La figure 6.5 schématise ce phénomène.

L'instabilité morphologique qui se produit à la hauteur critique h_c porte le nom d'instabilité de Grinfeld. Elle est d'origine élastique. Grinfeld a été le premier à montrer, dans son article [60], qu'une perturbation de la surface d'un film plan permettait de faire baisser son énergie élastique. Asaro et Tiller avaient déjà fait cette observation en 1972 [6], si bien qu'on retrouve également le nom d'instabilité d'Asaro–Tiller–Grinfeld, ou instabilité ATG, dans la littérature.

Certains systèmes, comme les alliages silicium–germanium, peuvent former des îlots avant l'apparition des dislocations. Les îlots forment alors une structure sans dé-

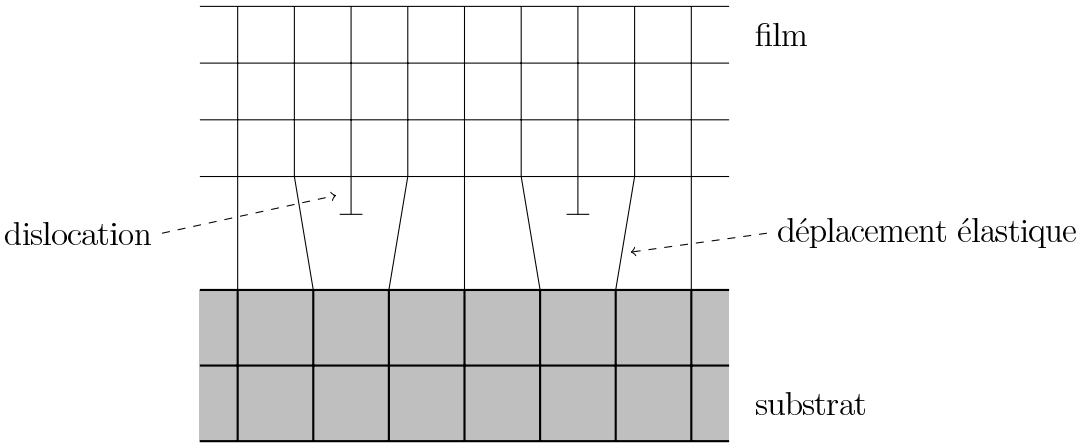


Figure 6.3 – Représentation schématique du désaccord entre film et substrat.

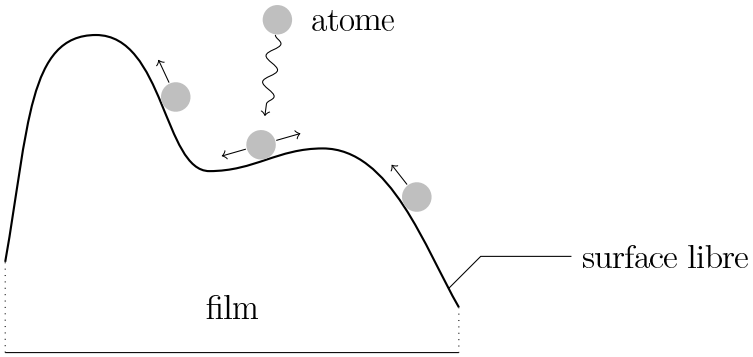


Figure 6.4 – Réorganisation en surface du film.

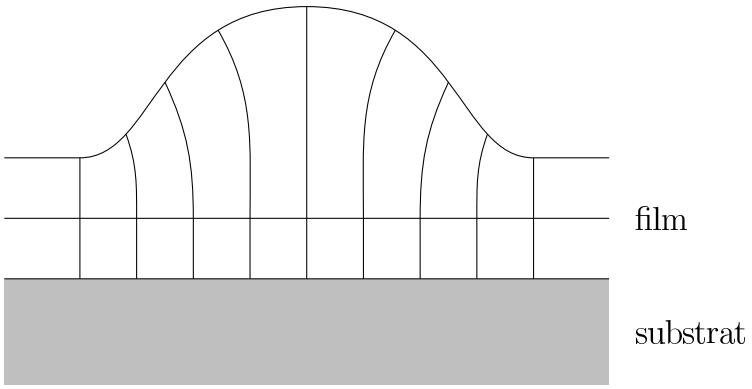


Figure 6.5 – Représentation schématique d'un îlot cristallin.

faut, périodique et parfaitement cohérente. On parle dans ce cas d'auto-assemblage ou d'auto-organisation. Cette structure peut être d'un immense intérêt dans les applications en nanotechnologie, et le contrôle de la croissance auto-organisée — de la taille des îlots, de leur forme, de l'espace qui les sépare — est un enjeu incontournable. En effet, de par leur taille nanométrique, les îlots permettent de créer des structures pouvant générer des effets quantiques, structures bien plus petites que celles produites par les techniques de gravure habituelles.

Le phénomène d'instabilité de Grinfeld a naturellement été très étudié. Après l'article d'Asaro et Tiller [6] puis celui de Grinfeld [60], on peut citer, parmi les premiers travaux, ceux de Nozières [84, 85], ainsi que ceux de Spencer, Voorhees et Davis [106, 107]. Kassner et Misbah proposent dans [66] les premières simulations numériques par éléments finis sur la question. Plus tard, ils introduisent, parallèlement à Müller et Grant [76], un modèle de champ de phase pour traiter les instabilités d'origine élastique dans les solides [67]. Ce travail se poursuit dans l'article [68], qui regroupe Kassner, Misbah et Müller, ainsi que leurs collaborateurs. Ils montrent, à l'aide de développements asymptotiques, que leur approche par champ de phase permet bien de retrouver, dans la limite « interface raide », les équations qui décrivent l'instabilité de Grinfeld. Ils présentent également des simulations numériques basées sur le modèle de champ de phase, et les valident en les comparant à celles effectuées sur le modèle à interface raide.

Pour plus de références sur ce sujet, on pourra consulter avec intérêt la revue de Gao et Nix [54], ainsi que celle de Shchukin et Bimberg [99].

Plusieurs mathématiciens, à commencer par Grinfeld lui-même, se sont également intéressés au problème. On peut par exemple citer la série de travaux de Kohn et ses collaborateurs sur la croissance épitaxiale [71, 69, 70], ou encore la longue liste de publications de Garcke sur le rôle et les effets de l'élasticité dans les problèmes de séparation de phase — consulter sa thèse d'habilitation [55] pour une introduction et une liste de références.

Dans la section qui suit, nous présentons le modèle étudié par Bonnetier, Falk et Grinfeld dans [11], puis par Bonnetier et Chambolle dans [10].

6.2 Un modèle variationnel

Le modèle que nous allons présenté se propose de définir et de déterminer les formes d'équilibre de films cristallins épitaxiés sous contrainte élastique. Les formes d'équilibre d'un cristal sont généralement définies — voir les chapitres 2 et 3 du livre de Villain et Pimpinelli [108] — comme les formes qui minimisent l'énergie de surface

$$E(\Omega) = \int_{\partial\Omega} \gamma(\boldsymbol{n})\, ds,$$

où la fonction γ est la tension de surface du cristal, dépendant de l'orientation $\boldsymbol{n}$. On remarque que cette énergie s'écrit de la même façon que le périmètre anisotrope

introduit au chapitre 5. Le périmètre anisotrope peut donc s'interpréter comme une énergie cristalline de surface, dont les minima sont les formes d'équilibre du cristal. La fonction d'anisotropie γ que nous utilisions joue alors le rôle de tension de surface cristalline. Les formes d'équilibre sont données par la forme de Wulff, telle que nous l'avions définie au chapitre 5. Dans le modèle de Bonnetier et Chambolle, nous retrouverons l'énergie E ci-dessus, et nous verrons qu'un terme d'énergie élastique viendra s'y ajouter.

Dans la majorité des articles portant sur la forme des îlots dans les films cristallins épitaxiés, le flux des atomes en surface du film est considéré proportionnel au gradient d'un certain potentiel chimique de diffusion, obtenu par des considérations thermodynamiques. Ce potentiel chimique est généralement défini comme la somme d'un terme d'énergie élastique locale et d'un terme de surface. Le terme de surface est donné, dans sa forme la plus simple, par la courbure moyenne de la frontière libre du cristal. Lorsque l'on veut faire intervenir l'anisotropie des formes d'équilibre, la courbure moyenne doit être remplacée par la courbure moyenne anisotrope rencontrée au chapitre 5.

Précisément, la plupart des modèles dans la littérature définissent la surface libre du film comme une courbe paramétrée $\Gamma(x,t)$, dont l'évolution est régie par une équation aux dérivées partielles du type

$$V_n = D\frac{\partial^2}{\partial s^2}\Big(\gamma H + \tfrac{1}{2}\,\boldsymbol{\sigma} : e(\boldsymbol{u})_{|\Gamma}\Big),$$

où V_n désigne la vitesse normale de Γ et H sa courbure. D est une constante de diffusion. γ est la tension de surface du film. $\boldsymbol{u}$, $e(\boldsymbol{u})$ et $\boldsymbol{\sigma}$ sont respectivement le déplacement élastique, le tenseur de déformation et le tenseur des contraintes du film. À l'équilibre, lorsque la surface n'évolue plus, cette équation se résume à

$$\gamma H + \tfrac{1}{2}\,\boldsymbol{\sigma} : e(\boldsymbol{u})_{|\Gamma} = \text{ constante.}$$

Ceci exprime le fait que le potentiel chimique de diffusion doit être constant le long de la surface du film.

Plutôt que de calculer les formes d'équilibre en résolvant l'équation précédente, Bonnetier et ses collaborateurs ont proposé et étudié un modèle variationnel, d'abord dans un cas simplifié à une dimension [11], puis dans le cas complet à deux dimensions [10]. Dans ce modèle, l'instabilité est gouvernée par la compétition de deux énergies antagonistes : une énergie de surface, qui favorise les configurations plates, et une énergie élastique volumique, qui, comme le montre Grinfeld avec ses développements asymptotiques dans [60], favorise les configurations perturbées.

Les formes d'équilibre du film sont définies comme les minima d'une énergie E dépendant du domaine Ω occupé par le film et du déplacement élastique $\boldsymbol{u}$ à l'intérieur. Le film est supposé être un matériau élastique linéaire. Si l'on note $\boldsymbol{A}$ le tenseur des coefficients de Lamé du film, cette énergie sera de la forme

$$E(\Omega,\boldsymbol{u}) = K\int_\Omega \boldsymbol{A}e(\boldsymbol{u}) : e(\boldsymbol{u})\,dx + L(\partial\Omega).$$

Le premier terme correspond à l'énergie élastique induite par le déplacement $\boldsymbol{u}$ dans le film, tandis que le deuxième, qui sera précisé dans la suite, désigne l'énergie de surface du film. Le paramètre K permet d'arbitrer la compétition entre ces deux termes d'énergie. Il s'interprète comme l'épaisseur moyenne du film.

Commençons par rappeler les résultats obtenus par Bonnetier, Falk et Grinfeld [11] sur le modèle simplifié à une dimension.

6.2.1 Étude d'un problème modèle à une dimension

Dans ce problème modèle, le film cristallin est supposé occuper un domaine Ω, ouvert et borné dans $\mathbb{R}^2$, défini par

$$\Omega = \left\{(x,y) \in \mathbb{R}^2 \;\middle|\; 0 < x < L,\ 0 < y < h(x)\right\},$$

où h est une fonction de $\mathbb{R}$ dans $\mathbb{R}$. Pour que le problème ne comporte qu'une seule dimension, on suppose que le déplacement élastique u ne dépend que de la coordonnée x d'espace, si bien que la fonctionnelle d'énergie à étudier peut s'écrire

$$E(h,u) = \int_0^L \frac{G}{2} h(x) u'(x)^2 \, dx + \sigma \int_0^L \sqrt{1 + h'(x)^2} \, dx,$$

où $G > 0$ désigne le module élastique du cristal et $\sigma > 0$ sa densité d'énergie de surface (ou tension de surface). L'énergie de surface du film est définie comme le produit de cette densité par la longueur totale du film, calculée par la deuxième intégrale dans la définition de E. On suppose que le déplacement u et l'épaisseur de film h sont fixés au bord du domaine : $u(0) = u_0$, $u(L) = u_L$, et $h(0) = h_0$, $h(L) = h_L$. De plus, le volume occupé par le film est supposé fixe :

$$\int_0^L h(x) \, dx = V_0.$$

Sans perte de généralité, on peut considérer le jeu de paramètres suivant :

$$L = 1,\ u_0 = 0,\ u_L = 1,\ h_0 = 0,\ h_L = 1,\ V_0 = 1,\ \sigma = 1,\ G = 2K.$$

Le problème à étudier est alors le problème de minimisation

$$\min \left\{ E(h,u) = K \int_0^1 h(x) u'(x)^2 \, dx + \int_0^1 \sqrt{1 + h'(x)^2} \, dx \;\middle|\; h \in H,\ u \in U \right\},$$

où l'espace des déplacements admissibles U est défini par

$$U = \left\{ u \in H^1(0,1) \;\middle|\; u(0) = 0,\ u(1) = 1 \right\},$$

et celui des hauteurs admissibles H par

$$H = \left\{ h \in C^1_m(0,1) \;\middle|\; h > 0 \text{ sur } [0,1],\ h(0) = h(1) = 1,\ \int_0^1 h(x) \, dx = 1 \right\}.$$

$C^1_m(0,1)$ désigne l'espace des fonctions C^1 par morceaux sur $[0,1]$. Pour h donné, on vérifie très simplement que

$$u'_h(x) = \left(\int_0^1 \frac{1}{h(x)}\,dx\right)^{-1} \frac{1}{h(x)}$$

minimise $E(u,h)$ sur U. Le déplacement u peut donc être éliminé dans notre problème, si bien que l'on se ramène à minimiser la fonctionnelle à une seule variable

$$I(h) = K\left(\int_0^1 \frac{1}{h(x)}\,dx\right)^{-1} + \int_0^1 \sqrt{1+h'(x)^2}\,dx,$$

pour h dans H. On peut noter que cette fonctionnelle n'est pas convexe. En effet, si le second terme est clairement convexe en h, le premier, lui, est concave. On peut remarquer, d'autre part, que la solution triviale $h_0 = 1$ vérifie l'équation d'Euler-Lagrange associée au problème.

Les résultats obtenus dans [11] sont résumés ci-dessous. Le premier consiste en une analyse de stabilité linéaire classique, qui montre que, pour des K en dessous d'une certaine valeur, la solution $h_0 = 1$ est stable vis-à-vis de perturbations régulières.

Théorème 5. *Si K est inférieur ou égal à $2\pi^2$, et si k est une fonction régulière d'intégrale nulle sur $[0,1]$, alors $\big(I''(h_0)(k)\big)(k) > 0$.*

Le deuxième résultat permet d'affirmer que pour K suffisamment petit, la solution $h_0 = 1$ réalise l'unique minimum de I.

Théorème 6. *La solution triviale $h_0 = 1$ est stable vis-à-vis de perturbations d'amplitude a sous réserve que K soit inférieur à*

$$\psi(a) = \big(\sqrt{1+4a^2} - 1\big)\frac{1-a+a^2}{a^2}.$$

De plus, h_0 est un minimum absolu dès que

$$K \leq K_0 = \inf_{0<a\leq 1} \psi(a) \approx 1{,}16.$$

Enfin, le troisième résultat montre que pour $K \geq 2$, le minimum de I n'est plus atteint pour la solution $h_0 = 1$, mais qu'elle correspond à la longueur d'une courbe paramétrée représentant une hauteur généralisée.

Théorème 7. *Si $K \geq 2$, alors on a*

$$\inf_{h\in H} I(h) \geq 2 + \frac{\pi}{4}.$$

De plus, si l'on note

$$x_* = \frac{4 - \sqrt{16 - \pi^2}}{8}$$

et H_* la courbe paramétrée composée du graphe de la fonction

$$h_*(x) = \begin{cases} 1 - \dfrac{\pi}{8} + \sqrt{(x + x_*)(1 - x - x_*)} & \text{si } 0 \leq x < 1 - x_*, \\ 1 - \dfrac{\pi}{8} + \sqrt{(x + x_* - 1)(2 - x - x_*)} & \text{si } 1 - x_* \leq x \leq 1, \end{cases}$$

et du segment

$$\begin{cases} x = 1 - x_*, \\ 0 < y < 1 - \dfrac{\pi}{8}, \end{cases}$$

le minimum de I est donné par la longueur de H_*, où l'on a compté deux fois la longueur de la partie verticale.

On notera que ce troisième théorème n'est pas en contradiction avec le premier, puisque celui-ci faisait intervenir uniquement des perturbations régulières. Bonnetier, Falk et Grinfeld montrent également, en construisant une suite minimisante, qu'on a en fait

$$\inf_{h \in H} I(h) = 2 + \frac{\pi}{4}$$

et pas seulement

$$\inf_{h \in H} I(h) \geq 2 + \frac{\pi}{4}.$$

S'il fallait résumer grossièrement ces trois théorèmes, nous pourrions dire que lorsque le paramètre K est petit, la forme d'équilibre du film est plane, tandis que lorsque K est élevé, celle-ci fait apparaître une sorte de fissure, comme sur la figure 6.6.

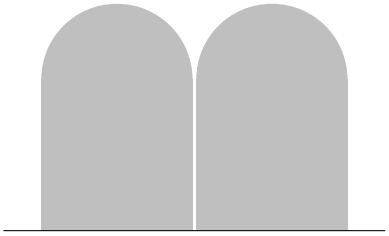


Figure 6.6 – Forme d'équilibre obtenue pour K grand dans le modèle 1D. Deux périodes sont représentées ici.

Le travail effectué par Bonnetier, Falk et Grinfeld trouve sa suite dans [10], où Bonnetier et Chambolle étudient un modèle qui est cette fois pleinement 2D.

6.2.2 Étude du modèle à deux dimensions

Le film est maintenant considéré comme un « vrai » solide élastique de dimension deux : le déplacement $\boldsymbol{u}$ n'est plus un scalaire, mais un vecteur de $\mathbb{R}^2$ dépendant des deux variables d'espace x et y. La modélisation de l'interaction entre le film et le substrat est également modifiée. Dans le modèle simple à une dimension, la contrainte dans le film était obtenue par l'intermédiaire des conditions aux limites de Dirichlet sur u aux bords latéraux du domaine. Ici, une condition de Dirichlet $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}_s$ est imposée à l'interface entre le film et le substrat. Cette condition modélise la croissance d'un film sur un substrat infiniment rigide. C'est elle qui crée désormais de l'énergie élastique dans le système.

Le film est encore considéré comme un matériau élastique linéaire, et on note $\boldsymbol{A}$ le tenseur de la loi de Hooke, de coefficients de Lamé λ et μ. Le film est supposé périodique dans la direction x, de période 1. Le déplacement $\boldsymbol{u}$ est périodique lui aussi, au déplacement linéaire $\boldsymbol{u}_s$ près.

La forme du film est supposée être le sous-graphe d'une fonction semi-continue inférieurement. L'intérêt de ce choix est que l'espace de ces fonctions est muni d'une topologie naturelle pour laquelle les suites d'éléments dont la longueur est bornée uniformément sont compactes. Pour reprendre les notations de [10], on désigne par Q l'espace à deux dimensions $S^1 \times \mathbb{R}$, où S^1 est le tore $\mathbb{R}/\mathbb{Z}$. On définit également $Q^+ = S^1 \times]0, +\infty[$, et pour $a > 0$, $Q^a = S^1 \times]0, a[$. On note $\mathcal{O}$ l'ensemble des sous-graphes de fonctions s.c.i. :

$$\Omega \in \mathcal{O} \iff \exists h \colon S^1 \to [0, +\infty[\text{ s.c.i.}, \ \Omega = \{(x, y) \in Q \mid y < h(x)\}.$$

On note par ailleurs $\mathcal{O}_L$ l'ensemble des sous-graphes de fonctions lipschitziennes.

Soit σ_f et σ_s les densités d'énergie de surface du film et du substrat. On définit l'énergie de surface d'un domaine régulier Ω de $\mathcal{O}_L$ par

$$L^0(\Omega) = \sigma_f \, \mathcal{H}^1(\partial\Omega \cap Q^+) + \sigma_s \, \mathcal{H}^1(\partial\Omega \setminus Q^+).$$

La partie $\partial\Omega \cap Q^+$ représente la surface libre du film, tandis que la partie $\partial\Omega \setminus Q^+ = \partial\Omega \cap (S^1 \times \{0\})$ correspond à la portion de substrat non recouverte par le film. On peut étendre L^0 à l'ensemble $\mathcal{O}$ en posant $L^0(\Omega) = +\infty$ si $\Omega \in \mathcal{O} \setminus \mathcal{O}_L$, et définir ensuite l'énergie de surface relaxée $L \colon \mathcal{O} \to [0, +\infty]$ comme l'enveloppe s.c.i. de L^0. On a alors le résultat suivant, démontré dans [10].

Théorème 8. *Soit Ω dans $\mathcal{O}$, et soit h et $\bar{h}$ des fonctions s.c.i. telles que*

$$\Omega = \{(x, y) \in Q \mid y < h(x)\},$$
$$\mathring{\bar{\Omega}} = \left\{(x, y) \in Q \;\middle|\; y < \bar{h}(x)\right\}.$$

Alors L est donnée par

$$L(\Omega) = \sigma_f \left(\mathcal{H}^1(\partial\bar{\Omega} \cap Q^+) + 2 \sum_{x \in S^1} \left(\bar{h}(x) - h(x)\right) \right) + \min(\sigma_f, \sigma_s) \, \mathcal{H}^1(\partial\bar{\Omega} \setminus Q^+).$$

La figure 6.7 permet de mieux comprendre cette définition de $L(\Omega)$. Le premier terme désigne la contribution du film. Aux endroits où celui-ci est régulier, on retrouve la même expression que pour L^0, à savoir le produit de la densité σ_f par la longueur. La somme de termes en $\bar{h}-h$ correspond aux endroits où le film forme des « fissures » verticales. On doit alors compter deux fois la longueur de la fissure dans l'énergie de surface. Ceci est cohérent avec le théorème 7 obtenu sur le modèle 1D simplifié. Le second terme de $L(\Omega)$ représente la contribution de la zone d'interface avec le substrat. Si la densité σ_s du substrat est plus petite que celle du film σ_f, alors le substrat sera « à découvert », et la contribution en énergie de surface sera donnée par le produit de σ_s et de la longueur découverte. Si au contraire c'est la densité du film qui est plus petite, il sera plus avantageux de recouvrir cette zone d'une épaisseur infinitésimale de film, et la contribution en énergie de surface sera donnée par le produit de σ_f par la longueur de la zone.

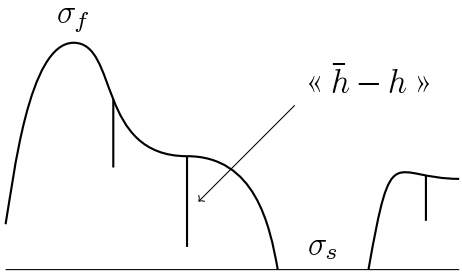


Figure 6.7 – Représentation du film pour l'interprétation de la quantité $L(\Omega)$.

L'énergie de surface L étant définie, on peut introduire l'énergie totale

$$E(\Omega, \boldsymbol{u}) = K \int_{\Omega \cap Q^+} \boldsymbol{A} e(\boldsymbol{u}) : e(\boldsymbol{u})\, dx + L(\Omega) \tag{6.1}$$

pour tout Ω de $\mathcal{O}$ et tout $\boldsymbol{u}$ de l'espace U_Ω défini par

$$\boldsymbol{u} \in U_\Omega \iff \begin{cases} \boldsymbol{u} \in L^2_{loc}(\Omega; \mathbb{R}^2), \\ \boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}_s \text{ sur } Q \setminus Q^+, \\ \boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_s \text{ est 1-périodique en } x, \\ e(\boldsymbol{u}) \in L^2(\Omega \cap Q^+; \mathbb{R}^4), \end{cases}$$

où le déplacement $\boldsymbol{u}_s$ est défini par $\boldsymbol{u}_s(x, y) = (x, 0)$. Le résultat d'existence suivant est démontré dans [10].

Théorème 9. *Soit E définie comme en (6.1). Le problème de minimisation*

$$\min \{E(\Omega, \boldsymbol{u}) \mid \Omega \in \mathcal{O},\ \boldsymbol{u} \in U_\Omega\} \tag{6.2}$$

sous la contrainte $|\Omega \cap Q^+| = 1$ admet une solution.

La contrainte de volume traduit en fait une conservation de la masse : on suppose ici que la relaxation du film — et la diffusion des atomes à sa surface — se fait en un temps négligeable par rapport au taux de déposition des atomes.

Nous pouvons à présent nous pencher sur l'approximation du problème (6.2) par champ de phase.

6.2.3 Approximation par champ de phase

Soit $\varepsilon > 0$ un (petit) paramètre donné. On définit l'énergie approchée E_ε par

$$E_\varepsilon(\phi, \boldsymbol{u}) = K \int_{Q^+} (\phi + \eta_\varepsilon) \boldsymbol{A} e(\boldsymbol{u}) : e(\boldsymbol{u})\, dx + L_\varepsilon(\phi), \tag{6.3}$$

où l'on a posé

$$L_\varepsilon(\phi) = \frac{\sigma_f}{\lambda_W} \int_{Q^+} \left(\frac{\varepsilon}{2} |\nabla \phi|^2 + \frac{1}{\varepsilon} W(\phi) \right) dx$$

pour ϕ dans l'espace

$$X = \left\{ \phi \in H^1(Q^+) \;\middle|\; 0 \leq \phi \leq 1,\ \partial_y \phi \leq 0,\ \phi \geq \phi_s \text{ sur } S^1 \times \{0\} \right\}$$

et $\boldsymbol{u}$ dans

$$U = \left\{ \boldsymbol{u} \in H^1_{loc}(Q^+) \;\middle|\; \boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}_s \text{ sur } S^1 \times \{0\},\ \boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_s \text{ est 1-périodique en } x \right\}.$$

On reconnaît dans L_ε l'expression de la fonctionnelle permettant d'approcher le périmètre par le théorème de Modica–Mortola, page 47. La constante λ_W est donnée par :

$$\lambda_W = \int_0^1 \sqrt{2W(t)}\, dt.$$

En divisant par cette constante, on a l'assurance que L_ε va Γ-converger, dans la limite $\varepsilon \to 0$, vers le produit de σ_f et de la longueur de la surface libre du film. La constante ϕ_s est, quant à elle, liée aux densités d'énergie de surface du film et du substrat, σ_f et σ_s, par la relation

$$\int_0^{\phi_s} \sqrt{2W(t)}\, dt = \frac{\min(\sigma_f, \sigma_s)}{\sigma_f} \int_0^1 \sqrt{2W(t)}\, dt = \frac{\min(\sigma_f, \sigma_s)}{\sigma_f} \lambda_W.$$

Nous verrons que ϕ_s permet de prendre en compte le coût lié au fait de laisser une partie du substrat découverte. Si ϕ et $\boldsymbol{u}$ ne vérifient pas les conditions énoncées, on pose $E_\varepsilon(\phi, \boldsymbol{u}) = +\infty$.

Bonnetier et Chambolle démontrent dans [10] le résultat suivant, qui porte sur la limite de l'énergie E_ε quand ε tend vers 0.

Théorème 10. *Soit $(\varepsilon_n)_{n\geq 1}$ une suite de réels strictement positifs tels que $\varepsilon_n \searrow 0$ quand n tend vers $+\infty$.*

1. *Soit ϕ_n et $\boldsymbol{u}_n$ telles que*

$$\sup_{n\geq 1} E_{\varepsilon_n}(\phi_n, \boldsymbol{u}_n) < +\infty$$

et

$$\sup_{n\geq 1} \int_{Q^+} \phi_n \, dx < +\infty.$$

Alors il existe $\Omega \in \mathcal{O}$, $\boldsymbol{u} \in U_\Omega$ et une sous-suite de $(\phi_n, \boldsymbol{u}_n)_{n\geq 1}$ encore notée $(\phi_n, \boldsymbol{u}_n)_{n\geq 1}$ tels que, dans la limite $n \to +\infty$,

$$\begin{cases} \phi_n \to \chi_\Omega & \text{p.p. dans } Q^+, \\ \boldsymbol{u}_n \to \boldsymbol{u} & \text{dans } L^2_{loc}(\Omega; \mathbb{R}^2), \end{cases}$$

avec

$$E(\Omega, \boldsymbol{u}) \leq \liminf_{n\to+\infty} E_{\varepsilon_n}(\phi_n, \boldsymbol{u}_n).$$

2. *Soit Ω dans $\mathcal{O}$ et $\boldsymbol{u}$ dans U_Ω. Il existe une suite $(\phi_n, \boldsymbol{u}_n)$ telle que, dans la limite $n \to +\infty$,*

$$\begin{cases} \phi_n \to \chi_\Omega & \text{p.p. dans } Q^+, \\ \boldsymbol{u}_n \to \boldsymbol{u} & \text{dans } L^2_{loc}(\Omega \cap Q^+; \mathbb{R}^2), \end{cases}$$

avec

$$\limsup_{n\to+\infty} E_{\varepsilon_n}(\phi_n, \boldsymbol{u}_n) \leq E(\Omega, \boldsymbol{u}).$$

On peut de plus supposer que

$$\int_{Q^+} \phi_n \, dx = |\Omega \cap Q^+|.$$

Ce théorème montre qu'à une suite $(\phi_\varepsilon, \boldsymbol{u}_\varepsilon)$ de minimiseurs de E_ε tels que

$$\int_{Q^+} \phi_\varepsilon \, dx = 1,$$

on peut faire correspondre un ensemble Ω vérifiant $|\Omega \cap Q^+| = 1$, tel que le couple $(\Omega, \boldsymbol{u})$, où $\boldsymbol{u}$ est la limite de la suite $(\boldsymbol{u}_\varepsilon)$, soit solution du problème (6.2). Nous pourrons donc effectuer, dans le chapitre qui suit, des simulations numériques sur le problème de champ de phase, avec la garantie que les résultats obtenus approcheront bien les formes d'équilibre du problème initial.

Chapitre 7

Simulation numérique de l'instabilité de Grinfeld

Nous cherchons, dans ce chapitre, à obtenir numériquement des solutions du problème

$$\min \{E_\varepsilon(\phi, \boldsymbol{u}) \mid \phi \in X,\ \boldsymbol{u} \in U,\ V(\phi) = V_0\}, \tag{7.1}$$

où l'énergie E_ε est définie par

$$E_\varepsilon(\phi, \boldsymbol{u}) = K \int_Q (\phi + \eta_\varepsilon) \boldsymbol{A} e(\boldsymbol{u}) : e(\boldsymbol{u})\, dx + \int_Q \left(\frac{\varepsilon}{2} |\nabla \phi|^2 + \frac{1}{\varepsilon} W(\phi) \right) dx.$$

Ici, ε est un réel strictement positif, et η_ε un paramètre de régularisation tel que $\eta_\varepsilon = O(\varepsilon)$ quand ε tend vers 0. Le tenseur $\boldsymbol{A}$ est la loi de Hooke du film. W désigne comme d'habitude un potentiel bistable s'annulant en 0 et en 1. Nous supposerons qu'il est choisi de façon à ce que la constante λ_W soit égale à σ_f, la tension de surface du film. Ainsi, le coefficient σ_f / λ_W qui apparaissait dans l'expression de E en (6.3) est désormais égal à 1. K est une constante issue de l'adimensionnement du problème, qu'on peut interpréter comme la hauteur moyenne du film. Les espaces fonctionnels X et U sont donnés par

$$X = \left\{ \phi \in H^1(Q) \;\middle|\; \phi(x, 0) = \phi_s,\ \phi \text{ est } L\text{-périodique en } x \right\}$$

et

$$U = \left\{ \boldsymbol{u} \in H^1(Q; \mathbb{R}^2) \;\middle|\; \boldsymbol{u}(x, 0) = \boldsymbol{u}_s(x, 0),\ \boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_s \text{ est } L\text{-périodique en } x \right\}.$$

Q désigne le rectangle $]0, L[\times]0, l[$ représenté sur la figure 7.1. ϕ_s est une constante liée au rapport σ_s / σ_f entre les tensions de surface du substrat et du film. $\boldsymbol{u}_s$ est le déplacement élastique imposé à l'interface film/substrat, et nous poserons $\boldsymbol{u}_s(x, y) = (x, 0)$. La quantité $V(\phi)$ désigne comme précédemment le volume associé à la fonction ϕ, c'est-à-dire

$$V(\phi) = \int_Q \phi\, dx.$$

V_0 est une constante choisie dans $]0, |Q|[$.

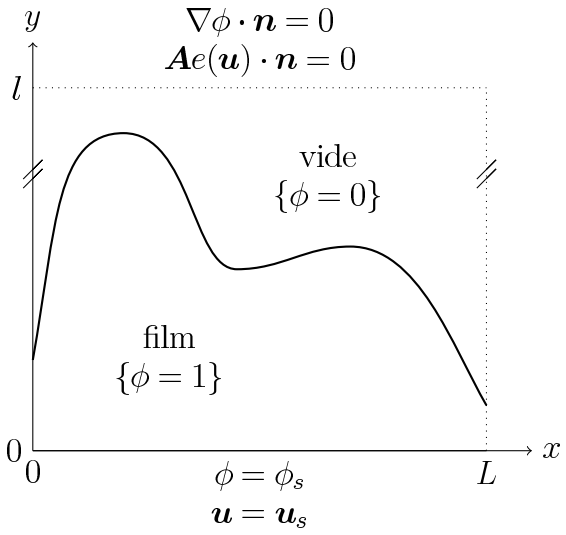


Figure 7.1 – Le domaine de calcul considéré.

7.1 Méthode numérique et algorithme de résolution

Le problème (7.1) est un problème d'optimisation à deux variables. Nous utiliserons la stratégie qui consiste à résoudre alternativement deux problèmes de minimisation à une seule variable. Cette stratégie fait l'objet de l'algorithme 4.

Algorithme 4 : Résolution du problème (7.1).

Données : $\phi^0 \in X$, $V_0 = V(\phi_0)$
Résultat : $(\phi^\infty, \boldsymbol{u}^\infty)$ solution de (7.1)

pour $k \geq 0$
  Trouver $\boldsymbol{u}^{k+1}$ tel que

$$E_\varepsilon(\phi^k, \boldsymbol{u}^{k+1}) = \min \left\{ E_\varepsilon(\phi^k, \boldsymbol{u}) \;\middle|\; \boldsymbol{u} \in U \right\}.$$

  Trouver ϕ^{k+1} tel que

$$E_\varepsilon(\phi^{k+1}, \boldsymbol{u}^{k+1}) = \min \left\{ E_\varepsilon(\phi, \boldsymbol{u}^{k+1}) \;\middle|\; \phi \in X,\ V(\phi) = V_0 \right\}.$$

fin

Le premier des deux problèmes de minimisation, celui qui porte sur le champ élastique $\boldsymbol{u}$, est quadratique. La solution est donc unique, et donnée par la solution de l'équation d'Euler–Lagrange associée à $\boldsymbol{u}$. Nous allons chercher à résoudre cette équation. Commençons par dériver l'énergie E_ε par rapport à sa variable $\boldsymbol{u}$. Pour

tout $\boldsymbol{v}$ dans l'espace vectoriel

$$V = \left\{ \boldsymbol{v} \in H^1(Q;\mathbb{R}^2) \;\middle|\; \boldsymbol{v}(x,0) = 0,\ \boldsymbol{v} \text{ est } L\text{-périodique en } x \right\},$$

on a

$$\frac{\partial E_\varepsilon}{\partial \boldsymbol{u}}(\phi,\boldsymbol{u})(\boldsymbol{v}) = 2K \int_Q (\phi+\eta_\varepsilon)\boldsymbol{A}e(\boldsymbol{u}) : e(\boldsymbol{v})\,dx.$$

Résoudre l'équation d'Euler–Lagrange revient donc à trouver $\boldsymbol{u}$ dans U tel que

$$\int_Q (\phi+\eta_\varepsilon)\boldsymbol{A}e(\boldsymbol{u}) : e(\boldsymbol{v})\,dx = 0$$

pour tout $\boldsymbol{v}$ de V. On reconnaît la formulation variationnelle du problème aux limites

$$\begin{cases} -\operatorname{\mathbf{div}}\Big((\phi+\eta_\varepsilon)\boldsymbol{A}e(\boldsymbol{u})\Big) = 0 & \text{dans } Q, \\ \boldsymbol{u}(x,0) = \boldsymbol{u}_s(x,0) & \text{pour } x \in [0,L], \\ \boldsymbol{A}e\Big(\boldsymbol{u}(x,l)\Big)\cdot \boldsymbol{n} = 0 & \text{pour } x \in [0,L], \\ (\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}_s)(0,y) = (\boldsymbol{u}-\boldsymbol{u}_s)(L,y) & \text{pour } y \in [0,l]. \end{cases}$$

C'est un problème d'élasticité classique, avec coefficient non constant. L'ajout du petit paramètre $\eta_\varepsilon > 0$ assure l'ellipticité, et le problème est bien posé.

Pour résoudre le second problème d'optimisation, celui portant sur le champ de phase ϕ, nous allons avoir recours à la même méthode de flot de gradient que dans le chapitre 2 et les suivants. Nous allons ajouter une dépendance en temps à ϕ, et nous résoudrons l'équation d'évolution

$$\varepsilon\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\partial E_\varepsilon}{\partial \phi}(\phi,\boldsymbol{u}) - q(t).$$

Le multiplicateur de Lagrange q permettra d'imposer la contrainte de volume. De même que dans le chapitre 3, nous pourrons le déterminer explicitement, et faire en sorte que la contrainte soit appliquée de manière exacte. Pour ψ dans l'espace vectoriel

$$Y = \left\{ \psi \in H^1(Q) \;\middle|\; \psi(x,0) = 0,\ \psi \text{ est } L\text{-périodique en } x \right\},$$

la dérivée partielle de E_ε par rapport à ϕ est donnée par

$$\frac{\partial E_\varepsilon}{\partial \phi}(\phi,\boldsymbol{u})(\psi) = K\int_Q \Big(\boldsymbol{A}e(\boldsymbol{u}) : e(\boldsymbol{u})\Big)\psi\,dx + \varepsilon\int_Q \nabla\phi\cdot\nabla\psi\,dx + \frac{1}{\varepsilon}\int_Q W'(\phi)\psi\,dx.$$

Notre équation d'évolution s'écrit

$$\varepsilon\int_Q \frac{\partial\phi}{\partial t}\psi\,dx + \varepsilon\int_Q \nabla\phi\cdot\nabla\psi\,dx + \frac{1}{\varepsilon}\int_Q W'(\phi)\psi\,dx + q(t)\int_Q \psi\,dx \\ = -K\int_Q \Big(\boldsymbol{A}e(\boldsymbol{u}) : e(\boldsymbol{u})\Big)\psi\,dx.$$

On reconnaît la formulation variationnelle de l'équation d'Allen–Cahn avec second membre

$$\varepsilon\frac{\partial\phi}{\partial t} - \varepsilon\Delta\phi + \frac{1}{\varepsilon}W'(\phi) + q(t) = -K\boldsymbol{A}e(\boldsymbol{u}) : e(\boldsymbol{u}).$$

Dans la limite $\varepsilon \to 0$, cette équation permet d'approcher le mouvement d'interfaces défini par

$$V_n = -H - K\boldsymbol{A}e(\boldsymbol{u}) : e(\boldsymbol{u})_{|\Gamma},$$

où V_n est la vitesse normale et H la courbure moyenne de Γ. Il s'agit d'un mouvement par courbure moyenne forcé, et le terme de forçage n'est autre que l'énergie élastique locale $K\boldsymbol{A}e(\boldsymbol{u}) : e(\boldsymbol{u})$ à l'interface. À l'équilibre, on doit avoir $V_n = 0$, ce qui permet de retrouver la condition

$$H + K\boldsymbol{A}e(\boldsymbol{u}) : e(\boldsymbol{u})_{|\Gamma} = \text{ constante}$$

sur l'interface. Cette condition s'interprète en termes de potentiel chimique, et permet de faire le lien avec la modélisation proposée par Spencer et ses collaborateurs [107, 104, 105] — voir l'article de Bonnetier et Chambolle [10] pour plus de précisions.

Il nous reste à déterminer le multiplicateur de Lagrange q permettant de conserver le volume. Pour cela, nous commençons par intégrer en espace l'équation d'Allen–Cahn obtenue plus haut :

$$\varepsilon\int_Q \frac{\partial\phi}{\partial t}\,dx - \varepsilon\int_Q \Delta\phi\,dx + \frac{1}{\varepsilon}\int_Q W'(\phi)\,dx + q(t)|Q| = -K\int_Q \boldsymbol{A}e(\boldsymbol{u}) : e(\boldsymbol{u})\,dx.$$

La conservation du volume se traduit par la nullité de la première intégrale. Du fait des conditions aux limites vérifiées par ϕ, la deuxième intégrale n'aura qu'une contribution sur le bord inférieur de Q, que nous noterons Γ_{bas} :

$$\int_Q \Delta\phi\,dx = \int_{\Gamma_{bas}} \nabla\phi\cdot\boldsymbol{n}\,ds.$$

Au final, le multiplicateur q sera donc donné par

$$q(t) = -\frac{1}{\varepsilon}\fint_Q W'(\phi)\,dx + \frac{\varepsilon}{|Q|}\int_{\Gamma_{bas}} \nabla\phi\cdot\boldsymbol{n}\,ds - K\fint_Q \boldsymbol{A}e(\boldsymbol{u}) : e(\boldsymbol{u})\,dx,$$

avec la notation déjà introduite

$$\fint_Q dx = \frac{1}{|Q|}\int_Q dx.$$

Nous avons fini d'expliciter la façon dont nous traiterons les problèmes de minimisation apparaissant dans l'algorithme 4. Nous aurons deux équations à résoudre à chaque itération : une équation d'élasticité, et une équation de type Allen–Cahn

dont nous chercherons la solution stationnaire. Nous utiliserons bien sûr RHEOLEF pour la discrétisation par éléments finis en espace. Les deux inconnues $\boldsymbol{u}$ et ϕ seront approchées par des éléments de type P_1. Pour l'équation sur ϕ, nous utiliserons la discrétisation en temps « réaction explicite » suivante :

$$\frac{\varepsilon}{\Delta t}\int_Q \phi^{n+1}\psi\,dx + \varepsilon\int_Q \nabla\phi^{n+1}\cdot\nabla\psi\,dx + \frac{1}{\varepsilon}\int_Q W'(\phi^n)\psi\,dx + q^n\int_Q \psi\,dx \\ = \frac{\varepsilon}{\Delta t}\int_Q \phi^n\psi\,dx - K\int_Q \Big(\boldsymbol{A}e(\boldsymbol{u}) : e(\boldsymbol{u})\Big)\psi\,dx,$$

avec

$$q^n = -\frac{1}{\varepsilon}\fint_Q W'(\phi^n)\,dx + \frac{\varepsilon}{|Q|}\int_{\Gamma_{bas}} \nabla\phi^n\cdot\boldsymbol{n}\,ds - K\fint_Q \boldsymbol{A}e(\boldsymbol{u}) : e(\boldsymbol{u})\,dx.$$

Avec les formes bilinéaires a et m définies par

$$a(\phi,\psi) = \int_Q \nabla\phi\cdot\nabla\psi\,dx$$

et

$$m(\phi,\psi) = \int_Q \phi\psi\,dx,$$

nous pouvons récrire ce schéma en temps sous la forme utilisée dans toute la partie I :

$$m(\phi^{n+1},\psi) + \Delta t\, a(\phi^{n+1},\psi) = m(F^n,\psi),$$

avec cette fois

$$F^n = \phi^n - \frac{\Delta t}{\varepsilon^2}W'(\phi^n) - \frac{\Delta t}{\varepsilon}q^n - K\frac{\Delta t}{\varepsilon}\boldsymbol{A}e(\boldsymbol{u}) : e(\boldsymbol{u}).$$

Nous pouvons maintenant détailler notre algorithme de résolution, et y intégrer le schéma en temps ci-dessus. Nous obtenons l'algorithme 5. Celui-ci comporte désormais deux boucles imbriquées : la boucle en k de l'algorithme initial, et la boucle en n du schéma en temps. Le champ de phase ϕ dépend des deux indices k et n, et sera recalculé bien plus souvent que le déplacement élastique $\boldsymbol{u}$. Heureusement, le coût du calcul de ϕ est pratiquement négligeable par rapport à celui de $\boldsymbol{u}$. En effet, le calcul de $\boldsymbol{u}$ nécessite la résolution d'un problème vectoriel, dont il faut reconstruire la matrice à chaque itération en k, puisque la forme bilinéaire dépend de $\phi^{k,0}$. À l'inverse, le problème en ϕ est scalaire et ne nécessite pas de refactorisation.

La convergence de l'algorithme est démontrée dans [10]. Une propriété très intéressante y est également mise en avant : l'énergie E_ε ne peut que décroître au cours du calcul. Précisément, on aura

$$E_\varepsilon(\phi^{k+1,0},\boldsymbol{u}^{k+1}) \le E_\varepsilon(\phi^{k,0},\boldsymbol{u}^k)$$

Algorithme 5 : Résolution du problème (7.1) (version détaillée).

Données : $\phi^{0,0} \in X$
Résultat : $(\phi^{\infty,\infty}, \boldsymbol{u}^{\infty})$ solution de (7.1)

pour $k \geq 0$
  Calculer $\boldsymbol{u}^k \in U$ solution de

$$\forall \boldsymbol{v} \in V,\ \int_Q (\phi^{k,0} + \eta_\varepsilon) \boldsymbol{A} e(\boldsymbol{u}^{\boldsymbol{k}}) : e(\boldsymbol{v})\, dx = 0.$$

  pour $n \geq 0$
    Poser

$$q^{k,n} = -\frac{1}{\varepsilon} \fint_Q W'(\phi^{k,n})\, dx + \frac{\varepsilon}{|Q|} \int_{\Gamma_{bas}} \nabla \phi^{k,n} \cdot \boldsymbol{n}\, ds - K \fint_Q \boldsymbol{A} e(\boldsymbol{u}^{\boldsymbol{k}}) : e(\boldsymbol{u}^{\boldsymbol{k}})\, dx.$$

    Poser

$$F^{k,n} = \phi^{k,n} - \frac{\Delta t}{\varepsilon^2} W'(\phi^{k,n}) - \frac{\Delta t}{\varepsilon} q^{k,n} - K \frac{\Delta t}{\varepsilon} \boldsymbol{A} e(\boldsymbol{u}^{\boldsymbol{k}}) : e(\boldsymbol{u}^{\boldsymbol{k}}).$$

    Calculer $\phi^{k,n+1} \in X$ solution de

$$\forall \psi \in Y,\ m(\phi^{k,n+1}, \psi) + \Delta t\, a(\phi^{k,n+1}, \psi) = m(F^{k,n}, \psi).$$

  fin
  Poser

$$\phi^{k+1,0} = \phi^{k,\infty}.$$

fin

pour tout $k \geq 0$. On a donc l'assurance de converger vers un minimum de l'énergie. Rappelons cependant, une fois encore, que cette énergie n'est pas convexe. Le minimum n'est donc pas unique, et de nombreux minima locaux peuvent exister.

En pratique, nous utiliserons les critères d'arrêt suivants :

$$\left\|\phi^{k,n+1} - \phi^{k,n}\right\|_{H^1(Q)} \leq 10^{-6}$$

pour la boucle interne en n, et

$$\begin{cases} \left\|\phi^{k+1,0} - \phi^{k+1,0}\right\|_{H^1(Q)} \leq 10^{-6} \\ \left\|\boldsymbol{u}^{k+1} - \boldsymbol{u}^{k+1}\right\|_{H^1(Q;\mathbb{R}^2)} \leq 10^{-4} \end{cases}$$

pour la boucle principale en k. Comme nous l'avons déjà dit, les calculs à l'intérieur de la boucle en n sont peu coûteux. Nous pouvons donc nous permettre de faire beaucoup d'itérations, et utiliser des critères d'arrêt allant jusqu'à 10^{-10}. Cela n'a cependant pas d'influence en pratique sur notre principal intérêt, à savoir la forme finale obtenue. C'est pourquoi nous nous contenterons d'utiliser 10^{-6} comme valeur seuil. Concernant le critère d'arrêt pour la boucle principale, il faut faire attention à ne pas le choisir trop haut, sous peine de voir l'algorithme s'arrêter dans un minimum local de l'énergie. Nous avons pu constater, dans nos expériences, que la valeur 10^{-4} était suffisamment basse pour la norme $H^1(Q;\mathbb{R}^2)$ de $\boldsymbol{u}$, qui met longtemps à se stabiliser.

7.2 Résultats de simulations

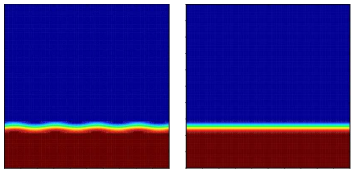
Nous détaillons, dans cette section, les nombreuses simulations numériques que nous avons effectuées. Un de nos objectifs principaux est de déterminer si ces simulations font apparaître une valeur critique K_c du paramètre K en dessous de laquelle la forme d'équilibre est systématiquement plate. Rappelons que K peut s'interpréter comme la hauteur moyenne du film. L'existence d'un seuil K_c serait cohérente avec l'étude de Bonnetier, Falk et Grinfeld [11] sur le modèle 1D présenté dans le chapitre 6.

Dans tous nos calculs, les coefficients élastiques du film λ et μ sont choisis égaux à 1 et 2 respectivement. La tension de surface du film σ_f est supposée égale à 1, et le potentiel W est un double puits normalisé de façon à ce que $\lambda_W = 1$. Le petit paramètre η_ε est fixé à ε. Sauf mention contraire, le domaine Q utilisé est le carré $]0,1[\times]0,1[$, ce qui correspond au choix $L = l = 1$. Lorsqu'elle n'est pas précisée explicitement, la condition de Dirichlet ϕ_s imposée sur le bord inférieur de Q est choisie égale à 1.

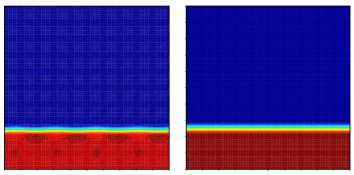
7.2.1 Premières observations

Évolution de la forme du film et de l'énergie élastique locale

Pour obtenir les résultats de ce paragraphe, nous avons utilisé le jeu de paramètres numériques suivant : $h = 5 \cdot 10^{-3}$, $\varepsilon = 2h$ et $\Delta t = \frac{h^2}{2}$. La forme initiale est un film plat de hauteur 0,3, que l'on perturbe par un mode sinusoïdal d'amplitude 10^{-2}. Les figures 7.2 et 7.3 présentent, pour deux choix de K, la forme du film et l'énergie élastique locale $(\phi+\eta_\varepsilon)\boldsymbol{A}e(\boldsymbol{u}) : e(\boldsymbol{u})$ au fur et à mesure des itérations en k. Rappelons que cet indice k correspond à la boucle principale de notre algorithme : il est incrémenté à chaque nouvelle résolution du problème élastique. On voit sur la figure 7.2 que pour le choix $K = 0{,}1$, le film devient plat très rapidement et ne bouge plus par la suite. Pour le choix $K = 3$, la figure 7.3 fait apparaître plusieurs phases d'évolution. Les perturbations sont tout d'abord amplifiées jusqu'à former des « bosses », les îlots cristallins que nous évoquions au chapitre 6. Certains de ces îlots vont ensuite voir leur taille diminuer au profit des autres dont la taille augmente. Au final, le film ne comporte plus qu'un îlot unique. Quant à l'énergie élastique locale, elle est naturellement plus importante près du substrat, au pied des îlots.



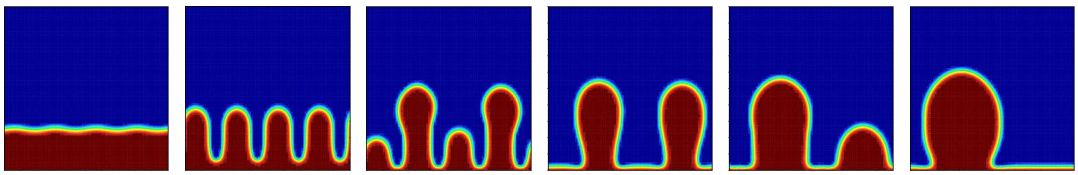
(a) Champ de phase



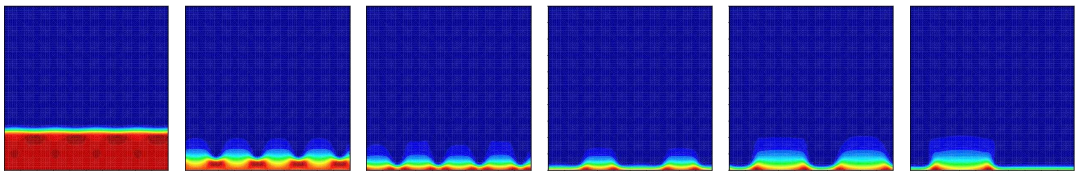
(b) Énergie élastique locale

Figure 7.2 – Évolution de la forme du film et de l'énergie élastique pour $K = 0{,}1$.

Nous ne prétendons pas interpréter cette évolution des formes comme une vraie cinétique du phénomène. Rappelons en effet que notre modèle initial est statique. Les itérations sont celles d'un algorithme d'optimisation, et l'introduction d'un schéma en temps doit être vue comme une stratégie permettant de résoudre l'équation d'Euler–Lagrange en ϕ. Par ailleurs, le problème d'élasticité que nous résolvons à chaque nouveau k est un problème statique (elliptique), et pas un problème d'élastodynamique (hyperbolique). Dans la littérature physique, l'équation qui régit l'évo-



(a) Champ de phase



(b) Énergie élastique locale

Figure 7.3 – Évolution de la forme du film et de l'énergie élastique pour $K = 3$.

lution de ϕ est généralement une équation de Cahn–Hilliard, modélisant un flot par diffusion de surface — revoir la fin du chapitre 3.

Nous pouvons faire remarquer que les formes finales obtenues ne dépendent pas de la donnée initiale. À K fixé, nous avons fait varier cette dernière — film plat avec plusieurs types de perturbations, film demi-circulaire, etc. —, et nous avons toujours obtenu une forme finale plate pour $K = 0{,}1$, et un îlot unique pour $K = 3$, éventuellement translaté par rapport à celui de la figure 7.3.

Tracé des énergies globales

Pour interpréter plus facilement les résultats obtenus, nous pouvons tracer, pour les deux choix de K, l'évolution des énergies au cours des itérations : l'énergie élastique E_e définie par

$$E_e(\phi, \boldsymbol{u}) = K \int_Q (\phi + \eta_\varepsilon) \boldsymbol{A} e(\boldsymbol{u}) : e(\boldsymbol{u})\, dx,$$

l'énergie de surface E_s définie par

$$E_s(\phi) = \int_Q \left(\frac{\varepsilon}{2} |\nabla \phi|^2 + \frac{1}{\varepsilon} W(\phi) \right) dx,$$

et l'énergie totale E donnée par la somme des deux. C'est l'objet de la figure 7.4.

Pour $K = 0{,}1$, l'aplatissement du film permet un gain en énergie de surface plus important que le coût en énergie élastique. L'énergie globale va donc diminuer lorsque le film s'aplatit. Pour $K = 3$, l'amplification des perturbations va permettre de faire décroître l'énergie élastique, pour un coût mesuré en énergie de surface. L'énergie totale va donc décroître rapidement dans un premier temps. La forme

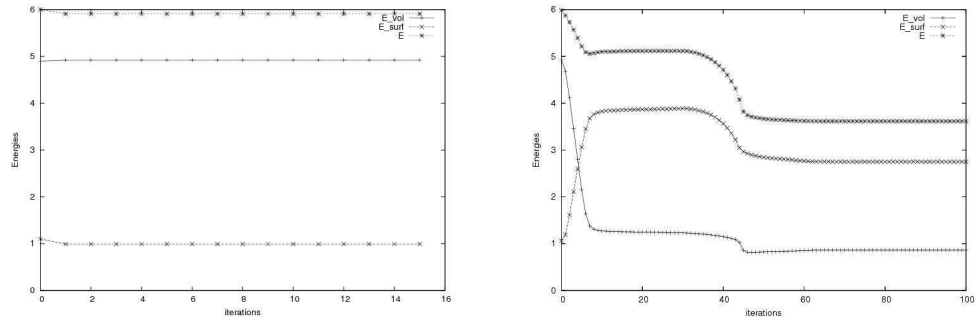


Figure 7.4 – Tracés des énergies E_e, E_s et E en fonction des itérations k. K vaut 0,1 pour le tracé de gauche et 3 pour celui de droite.

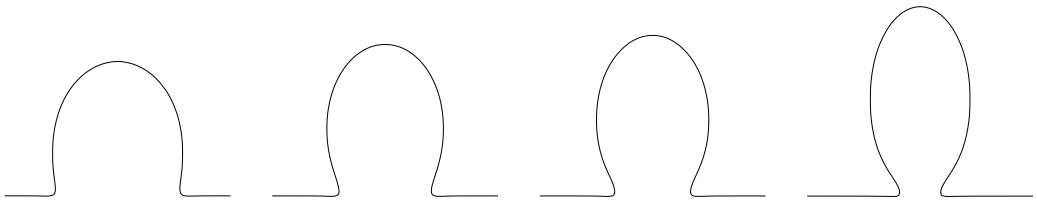
obtenue avec plusieurs îlots identiques est alors un exemple typique de minimum local de l'énergie. Cette forme va très peu évoluer pendant un certain temps, jusqu'à ce que le bruit numérique « sélectionne » certains des îlots, qui vont alors croître rapidement tandis que les autres rétrécissent. Ce phénomène va permettre de faire décroître simultanément les deux énergies : la disparition d'un îlot permet clairement de faire décroître l'énergie de surface (le périmètre), mais va aussi entraîner une diminution de l'énergie élastique, puisque les deux endroits au pied de l'îlot où l'énergie élastique locale est concentrée vont disparaître eux aussi. La forme de plus basse énergie est donc atteinte pour un îlot unique.

Influence de la condition de Dirichlet sur ϕ

La condition aux limites $\phi = \phi_s$ imposée à l'interface film/substrat permet de faire intervenir la différence entre les tensions de surface σ_f et σ_s du film et du substrat. Le choix $\phi_s = 1$, que nous utilisons par défaut, correspond au cas où la tension de surface du film est inférieure à celle du substrat. Il est alors avantageux de toujours recouvrir le substrat par une couche de film. À l'inverse, le choix $\phi_s < 1$ correspond à une tension de surface plus importante pour le film que pour le substrat. Il est alors plus avantageux de laisser le substrat découvert plutôt que de le recouvrir de film. Nous avons voulu vérifier que nos simulations permettaient de retrouver ce comportement. La figure 7.5 présente les formes d'équilibre obtenues pour différentes valeurs de ϕ_s.

On constate, comme on pouvait s'y attendre, que la largeur de la base des îlots dépend de la valeur de ϕ_s : plus ϕ_s est petit, et plus les îlots sont étroits, puisqu'il est alors plus avantageux de laisser un maximum de film découvert. Le paramètre ϕ_s va donc mesurer ce que coûte le fait de découvrir le substrat. La couche infinitésimale qui apparaît sur nos figures peut être interprétée comme une « couche de mouillage », que l'on observe effectivement dans les expériences physiques [107].

Nous pouvons maintenant nous pencher sur la question qui nous intéresse en priorité, à savoir celle de l'existence d'un seuil d'instabilité K_c en dessous duquel le



(a) $\phi_s = 1$ (b) $\phi_s = 0{,}8$ (c) $\phi_s = 0{,}6$ (d) $\phi_s = 0{,}4$

Figure 7.5 – Forme optimale obtenue pour $K = 2$, avec différentes valeurs de la condition aux limites ϕ_s.

film plat est la seule forme optimale.

7.2.2 Recherche d'une épaisseur moyenne critique

Notre démarche a été la suivante : avec les mêmes paramètres h, Δt et ε que précédemment, nous avons effectué des calculs pour différentes valeurs de K. Nous avons alors relevé la hauteur de la forme d'équilibre obtenue pour chaque K. La figure 7.6 récapitule nos résultats, pour différentes valeurs de ε. La forme initiale utilisée est ici un film plat de hauteur 0,3 perturbé par une sinusoïde d'amplitude 10^{-2} et de fréquence 1.

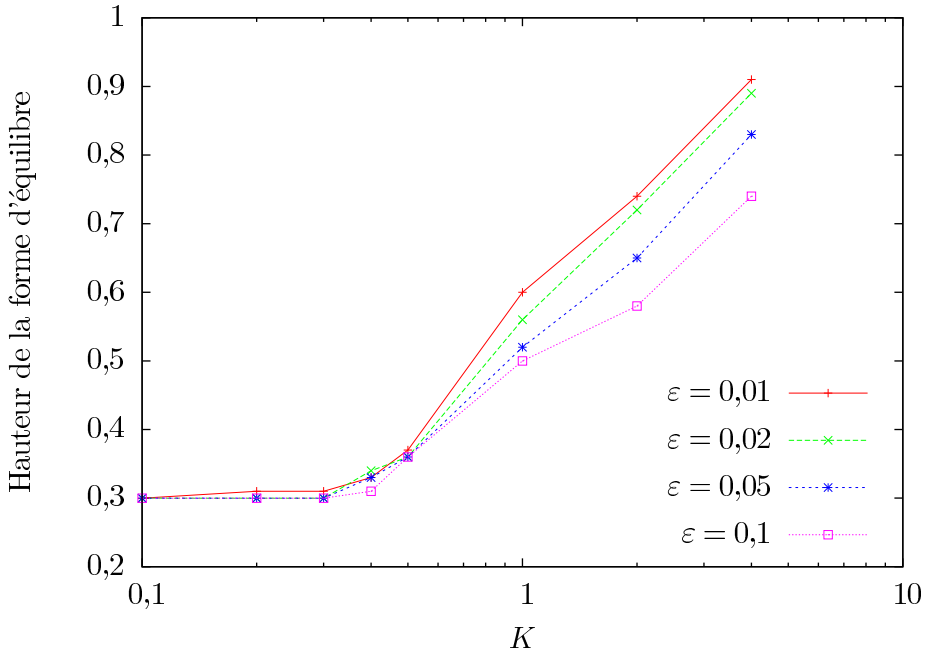


Figure 7.6 – Hauteur de la forme d'équilibre en fonction de K pour différents ε.

On remarque immédiatement l'existence d'un seuil : pour les petites valeurs de K, la forme optimale est comme attendu le film plat de hauteur 0,3, tandis que pour les grandes, on obtient une bosse, dont la hauteur augmente avec K. On note également l'influence du paramètre ε. Elle ne se fait pas trop sentir pour K petit, mais pour $K = 4$, on en arrive à une erreur de l'ordre de ε sur la hauteur du film. C'est le calcul le plus précis, avec $\varepsilon = 0{,}01$, qui donne systématiquement la bosse la plus haute.

On constate d'autre part que la valeur critique K_c dépend de ε. Par exemple, pour $K = 0{,}2$, le choix $\varepsilon = 0{,}01$ fait apparaître une ondulation d'amplitude 10^{-2}, alors que les autres formes d'équilibre obtenues sont plates. Nous avons tenté de représenter, sur la figure 7.7, la courbe $K_c(\varepsilon)$. Celle-ci est assez délicate à obtenir, pour plusieurs raisons. La première est le nombre de simulations à effectuer : pour chaque valeur de ε, il faut lancer au moins quatre ou cinq calculs pour espérer encadrer la valeur de K_c avec un minimum de précision par dichotomie. La seconde est la courte plage de valeurs possibles pour ε : de 0,1 à 0,01 avec les maillages que nous utilisons. La dernière concerne la mesure numérique de la hauteur du film : notre précision sera au mieux donnée par la taille h d'une maille, soit $5 \cdot 10^{-3}$. En dessous de cette valeur, nous ne distinguerons pas un film plat d'un film légèrement perturbé. Au final, nous avons placé dix points sur la courbe, et nous avons calculé K_c avec une précision de trois décimales pour chacun des points. Ceci représente plusieurs jours de calcul en cumulé, et surtout de très nombreux tâtonnements.

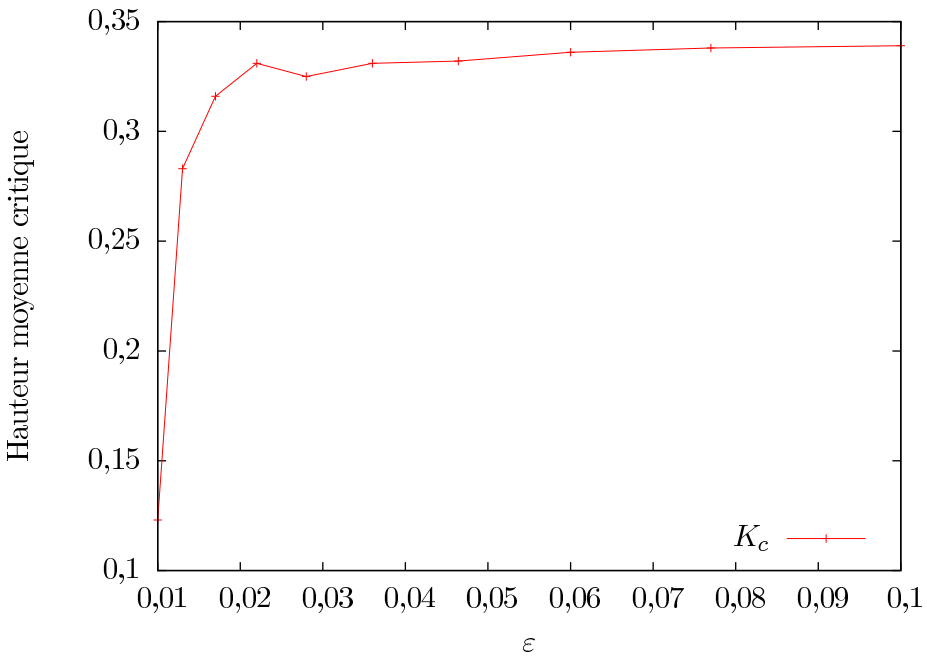


Figure 7.7 – Évolution du seuil critique K_c avec ε.

Le résultat obtenu peut surprendre : il semblerait en effet que la fonction $\varepsilon \to$

$K_c(\varepsilon)$ ne soit pas continue en 0. Ceci constitue bien sûr un inconvénient du modèle pour ce qui est de l'étude de l'instabilité. En effet, si comme dans le modèle 1D du chapitre 6, notre problème géométrique initial admet un seuil d'instabilité, notre méthode de champ de phase ne semble pas en mesure de l'approcher. Cette remarque nécessiterait bien sûr d'être étudiée plus précisément.

Avant de clore ce chapitre, nous étudions un dernier aspect du modèle : l'influence de la période sur les formes d'équilibre.

7.2.3 Recherche d'une période optimale

En croissance hétéro-épitaxiale, la période des structures auto-organisées est généralement dictée par la relaxation des contraintes élastiques, et donc par le décalage de maille entre film et substrat. La période observée est d'une certaine façon une période optimale, puisque c'est celle qui va maximiser le gain en énergie par rapport au film plat. Dans notre modèle, la période est une donnée du problème, et nous l'imposons arbitrairement. On peut malgré tout se demander s'il n'existe pas, là aussi, une période optimale. Autrement dit, est-il possible de faire baisser l'énergie des formes optimales en modifiant la condition de périodicité que nous imposons à ϕ et à $\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_s$?

Pour répondre à cette question, nous avons effectué des simulations sur le domaine de calcul $Q_L =]0, L[\times]0, 1[$, pour plusieurs valeurs de L. La figure 7.8 présente deux exemples de forme optimale obtenue. La donnée initiale est comme précédemment un film plat de hauteur 0,3, que nous perturbons par un mode sinusoïdal d'amplitude 10^{-2}, et de période L. Le paramètre K est choisi égal à 1. h est toujours fixé à $5 \cdot 10^{-3}$, si bien que le maillage de Q_3 que nous utilisons comporte environ $2 \cdot 10^5$ éléments. Les calculs commencent à devenir plus lourds, et il faut attendre jusqu'à quelques heures pour obtenir les formes stationnaires.

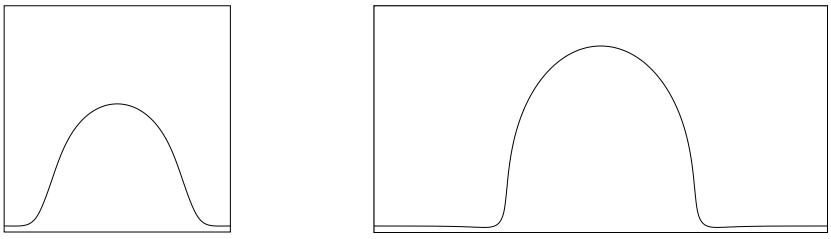


Figure 7.8 – Les formes optimales obtenues pour $L = 1$ (à gauche) et $L = 2$ (à droite).

On constate que les formes d'équilibre sont encore composées d'une bosse unique. Celle-ci sera d'autant plus grosse que L est grand, puisque le volume est ici une fonction linéaire de L. En effet, nous choisissons toujours la même épaisseur moyenne pour la donnée initiale.

La figure 7.9 représente le rapport E_ε/L en fonction de L. ε est ici égal à $2h$, c'est-à-dire 10^{-2}. On constate qu'il n'y a pas de période optimale : la quantité E_ε/L est une fonction strictement décroissante de L. On pouvait s'y attendre en observant la figure 7.8 plus attentivement : si l'on met côte à côte deux formes optimales obtenues pour $L = 1$, on voit clairement que le résultat a une énergie de surface supérieure à celle de la forme optimale obtenue pour $L = 2$. L'énergie élastique est également supérieure, puisque les deux petites bosses ont une surface de contact avec le film plus grande que la grosse bosse seule.

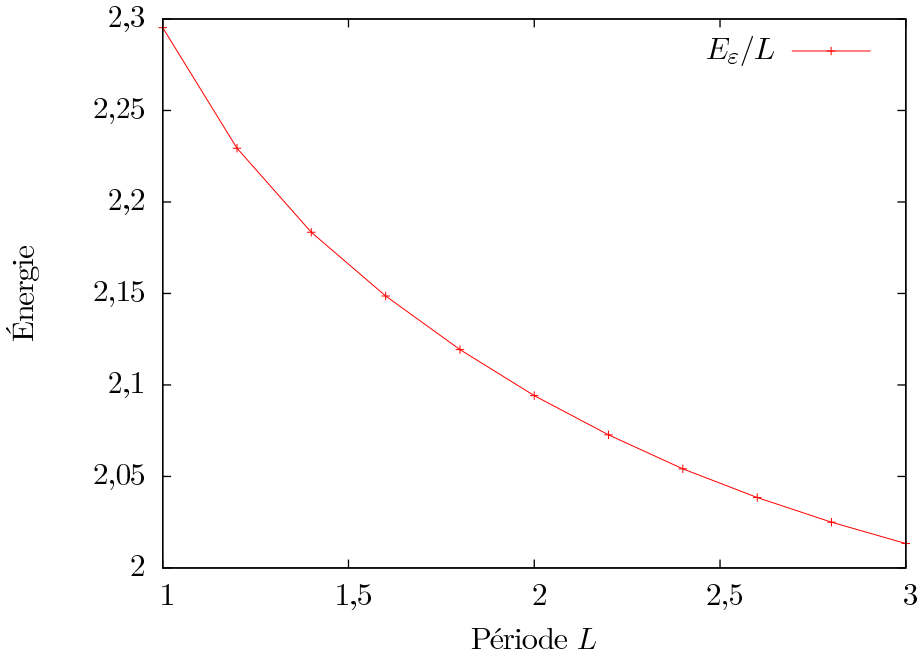


Figure 7.9 – Énergie de la forme d'équilibre en fonction de la période.

Le prochain chapitre est consacré à une extension du modèle que nous venons d'étudier ici. Le but est de faire intervenir l'élasticité du substrat.

Chapitre 8

Un modèle incluant le substrat

Dans la très grande majorité des articles portant sur l'instabilité de Grinfeld, le substrat n'intervient qu'au travers des conditions aux limites imposées au bord du domaine occupé par le film. On suppose souvent, par exemple, que le film occupe un demi-plan infini $]0, L[\times]-\infty, l[$, et on impose des conditions de Neumann non homogènes sur le tenseur des contraintes élastiques $\boldsymbol{\sigma}$ aux bords $\{x = 0\}$ et $\{x = L\}$. On peut aussi procéder comme dans le modèle que nous avons étudié jusque-là : supposer que le film occupe un domaine fini, et imposer une condition de Dirichlet non homogène sur le déplacement élastique $\boldsymbol{u}$ à l'interface avec le substrat. Ces deux situations sont schématisées sur la figure 8.1. Elles reviennent à faire l'hypothèse d'un substrat infiniment rigide.

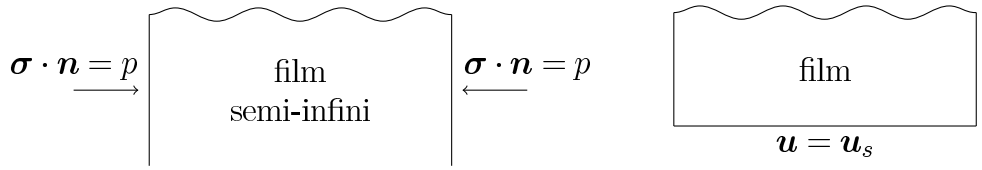


Figure 8.1 – Les deux situations les plus rencontrées pour l'étude de l'instabilité de Grinfeld.

Nous allons, dans ce chapitre, proposer un modèle qui fait intervenir l'élasticité du substrat. Nous présenterons quelques simulations numériques sur ce modèle, mais celles-ci constituent pour l'instant un travail en cours. Elles reposent sur un code de calcul FREEFEM++ implémenté rapidement, et nécessiteraient une étude plus approfondie pour livrer des conclusions tout à fait pertinentes.

8.1 Présentation du modèle

Nous proposons ici une approche alternative à celle adoptée jusqu'ici. Plutôt que de partir d'une énergie à minimiser, nous commencerons par écrire les équations

du problème, avant de proposer une formulation variationnelle sur laquelle nous baserons nos simulations.

8.1.1 Les équations du problème

Nous considérons une portion L du système film/substrat, représentée sur la figure 8.2, et nous faisons l'hypothèse que celle-ci se répète de façon périodique dans la direction x.

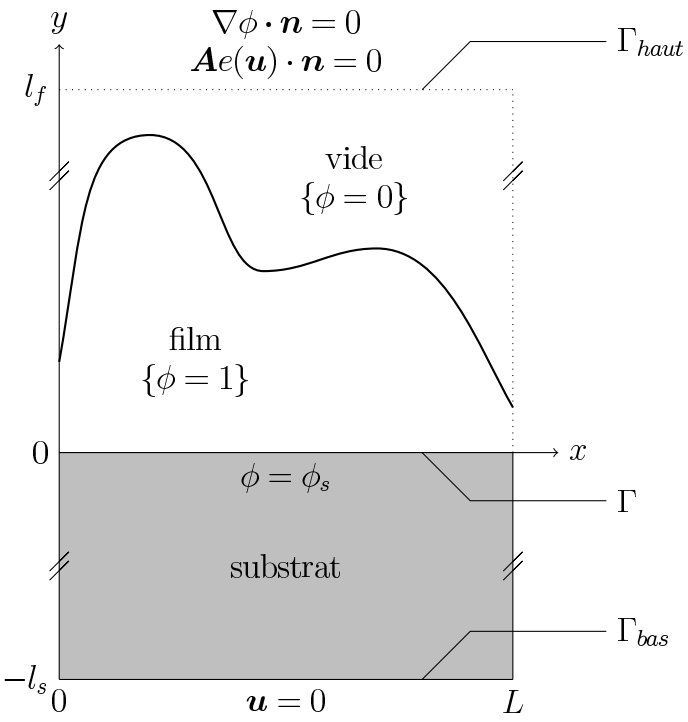


Figure 8.2 – Le système film/substrat considéré.

Le substrat et le film sont supposés être des matériaux élastiques linéaires, de lois de Hooke homogènes $\boldsymbol{A}_s$ et $\boldsymbol{A}_f$ respectivement. Dans tout ce qui suit, les indices « s » indiqueront des grandeurs liées au substrat, tandis que les indices « f » feront référence au film.

Nous supposons que le substrat occupe un domaine fixe de hauteur l_s, et nous notons $Q_s =]0, L[\times]-l_s, 0[$ ce domaine. L'interface entre le substrat et le film est donc supposée fixe, elle aussi. Nous la notons Γ, comme sur la figure 8.2. Elle est simplement définie par $\Gamma =]0, L[\times \{0\}$. En réalité, il se peut que le substrat se déforme sous l'effet des contraintes élastiques. En toute rigueur, l'interface film/substrat n'est donc pas figée. Néanmoins, nous pouvons raisonnablement supposer, comme Spencer, Voorhees et Davis [106, 107], que la déformation du substrat s'effectue selon une échelle de temps bien supérieure à celle de la déformation du film.

Le domaine occupé par le film, lui, n'est pas fixe : sa surface supérieure, c'est-à-dire l'interface avec le vide, est supposée libre. Si l'on note $h(x)$ la hauteur de film déposée, le film occupe le domaine $\Omega = \{(x, y) \mid 0 < x < L,\ 0 < y < h(x)\}$.

Comme précédemment, le modèle que nous considérons est statique. Les aspects cinétiques de la déposition des atomes ne sont pas pris en compte, et nous supposerons que le volume de film est constant, c'est-à-dire $|\Omega| = V_0$. Nous noterons $Q_f =]0, L[\times]0, l_f[$ la boîte à l'intérieur de laquelle le film peut évoluer. Dans nos simulations, le domaine Ω occupé par le film dans Q_f sera bien sûr repéré par un champ de phase.

Écrivons maintenant les équations qui décrivent l'équilibre du système. Nous noterons $\boldsymbol{u}_s$ et $\boldsymbol{u}_f$ les déplacements élastiques respectivement dans le substrat et dans le film. À l'équilibre, $\boldsymbol{u}_s$ doit vérifier l'équation

$$-\mathbf{div}\Big(\boldsymbol{A}_s e(\boldsymbol{u}_s)\Big) = 0 \text{ dans } Q_s. \tag{8.1}$$

$\boldsymbol{u}_f$ doit quant à lui vérifier

$$-\mathbf{div}\Big(\boldsymbol{A}_f e(\boldsymbol{u}_f)\Big) = 0 \text{ dans } \Omega. \tag{8.2}$$

Le déplacement élastique doit être continu à l'interface film/substrat. Cette condition s'écrit

$$\boldsymbol{u}_s = \boldsymbol{u}_f \text{ sur } \Gamma. \tag{8.3}$$

Par contre, le décalage entre le réseau atomique du film et celui du substrat induit un saut dans les contraintes normales au travers de l'interface. Cela donne la condition suivante (voir Gao et Nix [54]) :

$$\boldsymbol{A}_f\Big(e(\boldsymbol{u}_f) - e_0\Big) \cdot \boldsymbol{n} = \boldsymbol{A}_s e(\boldsymbol{u}_s) \cdot \boldsymbol{n} \text{ sur } \Gamma, \tag{8.4}$$

où e_0 est la déformation liée au défaut de maille entre le film et le substrat. Le vecteur $\boldsymbol{n}$ désigne indifféremment la normale sortante du film, $\boldsymbol{n}_f$, ou celle du substrat, $\boldsymbol{n}_s$. En effet, à l'interface film/substrat, ces deux normales sont simplement l'opposée l'une de l'autre. Comme on les retrouve des deux côtés de l'égalité, on peut choisir d'utiliser l'une comme l'autre. Enfin, outre la condition de L-périodicité en x, nous imposons une condition de Neumann homogène sur le bord supérieur du film :

$$\boldsymbol{A}_f e(\boldsymbol{u}_f) \cdot \boldsymbol{n}_f = 0 \text{ sur } \partial\Omega \setminus \Gamma, \tag{8.5}$$

et une condition de Dirichlet homogène sur le bord inférieur du substrat :

$$\boldsymbol{u}_s = 0 \text{ sur } \Gamma_{bas} =]0, L[\times \{-l_s\}. \tag{8.6}$$

Le problème que nous considérons consiste finalement à trouver $\boldsymbol{u}_s$ et $\boldsymbol{u}_f$ vérifiant (8.1)–(8.6). Nous allons récrire ce système d'équations en introduisant un champ de phase ϕ permettant de repérer le domaine Ω occupé par le film.

8.1.2 Introduction du champ de phase

Comme dans les chapitres précédents, nous considérerons le vide comme un matériau élastique arbitrairement mou, de manière à pouvoir définir une loi de Hooke $(\phi+\eta_\varepsilon)\boldsymbol{A}_f$ sur toute la boîte Q_f. ϕ est supposée être une fonction de type champ de phase définie sur Q_f, valant 1 dans Ω, 0 dans $Q\setminus\Omega$, et variant entre ces deux valeurs sur une interface de taille $\varepsilon>0$. η_ε est un petit paramètre tel que $\eta_\varepsilon=O(\varepsilon)$. L'équation d'équilibre pour le film (8.2) doit être récrite de façon à faire apparaître le champ de phase ϕ :

$$-\operatorname{\mathbf{div}}\Big((\phi+\eta_\varepsilon)\boldsymbol{A}_f e(\boldsymbol{u}_f)\Big)=0 \text{ dans } Q_f.$$

Le paramètre η_ε étant strictement positif, cette équation est elliptique. Notre système d'équations pour les déplacements $\boldsymbol{u}_f$ et $\boldsymbol{u}_s$ est finalement donné par

$$\begin{cases} -\operatorname{\mathbf{div}}\Big((\phi+\eta_\varepsilon)\boldsymbol{A}_f e(\boldsymbol{u}_f)\Big)=0 & \text{dans } Q_f,\\ -\operatorname{\mathbf{div}}\Big(\boldsymbol{A}_s e(\boldsymbol{u}_s)\Big)=0 & \text{dans } Q_s,\\ \boldsymbol{u}_s=\boldsymbol{u}_f & \text{sur } \Gamma=]0,L[\times\{0\},\\ (\phi+\eta_\varepsilon)\boldsymbol{A}_f\Big(e(\boldsymbol{u}_f)-e_0\Big)\cdot\boldsymbol{n}=\boldsymbol{A}_s e(\boldsymbol{u}_s)\cdot\boldsymbol{n} & \text{sur } \Gamma,\\ \boldsymbol{A}_f e(\boldsymbol{u}_f)\cdot\boldsymbol{n}=0 & \text{sur } \Gamma_{haut}=]0,L[\times\{l_f\},\\ \boldsymbol{u}_s=0 & \text{sur } \Gamma_{bas}=]0,L[\times\{-l_s\}, \end{cases} \tag{8.7}$$

où $\boldsymbol{n}$ désigne la normale sortante de Q_f.

La section qui suit est consacrée à la mise sous forme variationnelle de ce système.

8.1.3 Formulation variationnelle

Soit $Q=Q_f\cup Q_s$, et soit $\boldsymbol{A}$ le tenseur défini pour x dans Q par

$$\boldsymbol{A}=\begin{cases}(\phi+\eta_\varepsilon)\boldsymbol{A}_f & \text{si } x\in Q_f,\\ \boldsymbol{A}_s & \text{si } x\in Q_s.\end{cases}$$

Soit U l'espace de fonctions défini par

$$U=\Big\{\boldsymbol{u}\in H^1_{loc}(Q;R^2)\;\Big|\;\boldsymbol{u}=0 \text{ sur } \Gamma_{bas},\ \boldsymbol{u} \text{ est } L\text{-périodique en } x\Big\}.$$

Nous allons montrer qu'il existe une fonction $\boldsymbol{g}$ telle que la formulation variationnelle du système (8.7) s'écrive : trouver $\boldsymbol{u}$ dans U tel que, pour tout $\boldsymbol{v}$ de U,

$$\int_Q \boldsymbol{A}e(\boldsymbol{u}):e(\boldsymbol{v})\,dx=\int_\Gamma \boldsymbol{g}\cdot\boldsymbol{v}\,ds.$$

Pour déterminer $\boldsymbol{g}$, considérons une fonction $\boldsymbol{v}$ à support compact dans Q, et dont le support D contient une partie de l'interface Γ, comme sur la figure 8.3.

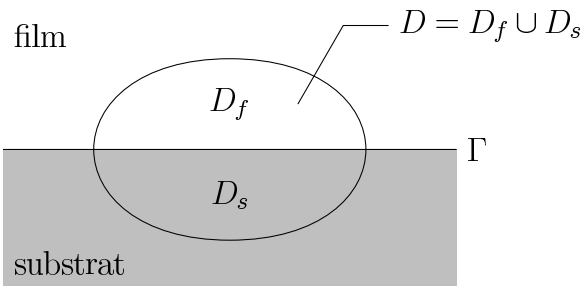


Figure 8.3 – Support de la fonction test $\boldsymbol{v}$ choisie.

Utilisons $\boldsymbol{v}$ comme fonction test dans la formulation variationnelle. Cela donne

$$\begin{aligned}
0 &= \int_D \boldsymbol{A} e(\boldsymbol{u}) : e(\boldsymbol{v})\, dx - \int_{\Gamma\cap D} \boldsymbol{g}\cdot\boldsymbol{v}\, ds \\
&= \int_{D_f} (\phi+\eta_\varepsilon)\boldsymbol{A}_f e(\boldsymbol{u}_f) : e(\boldsymbol{v})\, dx + \int_{D_s} \boldsymbol{A}_s e(\boldsymbol{u}_s) : e(\boldsymbol{v})\, dx - \int_{\Gamma\cap D} \boldsymbol{g}\cdot\boldsymbol{v}\, ds \\
&= -\int_{D_f} \mathbf{div}\Big((\phi+\eta_\varepsilon)\boldsymbol{A}_f e(\boldsymbol{u}_f)\Big)\cdot\boldsymbol{v}\, dx - \int_{D_s} \mathbf{div}\Big(\boldsymbol{A}_s e(\boldsymbol{u}_s)\Big)\cdot\boldsymbol{v}\, dx \\
&\quad + \int_{\partial D_f} (\phi+\eta_\varepsilon)\Big(\boldsymbol{A}_f e(\boldsymbol{u}_f)\cdot\boldsymbol{n}_f\Big)\cdot\boldsymbol{v}\, ds + \int_{\partial D_s} \Big(\boldsymbol{A}_s e(\boldsymbol{u}_s)\cdot\boldsymbol{n}_s\Big)\cdot\boldsymbol{v}\, ds \\
&\quad - \int_{\Gamma\cap D} \boldsymbol{g}\cdot\boldsymbol{v}\, ds.
\end{aligned}$$

Du fait des équations vérifiées par $\boldsymbol{u}_f$ et $\boldsymbol{u}_s$, les deux premiers termes de cette dernière expression sont nuls. Comme $\boldsymbol{v}$ est à support compact, les intégrales de bord se résument à des intégrales sur l'interface $\Gamma\cap D$. Ainsi, nous obtenons

$$\int_{\Gamma\cap D} \boldsymbol{g}\cdot\boldsymbol{v}\, ds = \int_{\Gamma\cap D} \Big((\phi+\eta_\varepsilon)\boldsymbol{A}_f e(\boldsymbol{u}_f)\cdot\boldsymbol{n}_f + \boldsymbol{A}_s e(\boldsymbol{u}_s)\cdot\boldsymbol{n}_s\Big)\cdot\boldsymbol{v}\, ds,$$

ce qui correspond à la condition de transmission

$$(\phi+\eta_\varepsilon)\boldsymbol{A}_f e(\boldsymbol{u}_f)\cdot\boldsymbol{n}_f + \boldsymbol{A}_s e(\boldsymbol{u}_s)\cdot\boldsymbol{n}_s = \boldsymbol{g} \text{ sur } \Gamma\cap D.$$

En posant $\boldsymbol{n} = \boldsymbol{n}_f = -\boldsymbol{n}_s$ et en définissant $\boldsymbol{g}$ par

$$\boldsymbol{g} = (\phi+\eta_\varepsilon)\boldsymbol{A}_f e_0\cdot\boldsymbol{n},$$

nous retrouvons la condition de saut des contraintes normales présente dans (8.7) :

$$(\phi+\eta_\varepsilon)\boldsymbol{A}_f\Big(e(\boldsymbol{u}_f) - e_0\Big)\cdot\boldsymbol{n} = \boldsymbol{A}_s e(\boldsymbol{u}_s)\cdot\boldsymbol{n} \text{ sur } \Gamma\cap D.$$

Finalement, la formulation variationnelle de notre problème sera donc : trouver $\boldsymbol{u}$ dans U tel que, pour tout $\boldsymbol{v}$ de U,

$$\int_Q \boldsymbol{A}e(\boldsymbol{u}) : e(\boldsymbol{v})\,dx = \int_\Gamma \big((\phi+\eta_\varepsilon)\boldsymbol{A}_f e_0 \cdot \boldsymbol{n}\big)\cdot \boldsymbol{v}\,ds.$$

En pratique, nous retrouvons un problème d'élasticité assez similaire à celui que nous résolvions dans le chapitre 7. L'énergie n'est plus amenée dans le système par une condition de Dirichlet non homogène, mais par un second membre linéique à l'intérieur du domaine.

Précisons maintenant l'équation dont ϕ doit être solution.

8.1.4 Équation sur le champ de phase

Dans notre modèle, le champ de phase ϕ n'est pas défini sur tout Q, mais seulement sur la boîte Q_f contenant le film. La situation est donc parfaitement similaire à celle du chapitre 7, et ϕ vérifiera la même équation, à savoir une équation d'Allen–Cahn avec un second membre donné par l'énergie élastique locale dans le film :

$$\varepsilon\frac{\partial\phi}{\partial t} - \varepsilon\Delta\phi + \frac{1}{\varepsilon}W'(\phi) + q(t) = -K\boldsymbol{A}_f e(\boldsymbol{u}_f) : e(\boldsymbol{u}_f).$$

Le paramètre K mesure comme précédemment la hauteur moyenne du film, et le multiplicateur de Lagrange permettant d'imposer la contrainte de volume sera donné par

$$q(t) = -\frac{1}{\varepsilon}\fint_Q W'(\phi)\,dx + \frac{\varepsilon}{|Q|}\int_\Gamma \nabla\phi\cdot\boldsymbol{n}\,ds - K\fint_Q \boldsymbol{A}_f e(\boldsymbol{u}_f) : e(\boldsymbol{u}_f)\,dx.$$

Outre la condition de périodicité en x, ϕ devra vérifier la condition de Dirichlet

$$\phi = \phi_s \text{ sur } \Gamma,$$

et la condition de Neumann homogène

$$\nabla\phi\cdot\boldsymbol{n} = 0 \text{ sur } \Gamma_{haut}.$$

Comme dans le chapitre 7, la constante ϕ_s est liée au rapport σ_s/σ_f entre les tensions de surface du substrat et du film.

8.2 Méthode numérique et simulations

Notre algorithme de résolution est quasiment identique à l'algorithme 5 du chapitre 7, page 122, et nous n'allons pas le reproduire ici. La différence principale vient du fait que, désormais, le déplacement élastique $\boldsymbol{u}$ et le champ de phase ϕ ne seront

plus calculés sur le même domaine. En effet, $\boldsymbol{u}$ est défini sur tout $Q = Q_f \cup Q_s$, tandis que ϕ n'est défini que sur Q_f. Nous envisageons toujours une discrétisation en espace par éléments finis, et en pratique, il nous faudra donc deux maillages, notés Q^h et Q_f^h. Pour éviter d'avoir à effectuer des interpolations, nous ferons en sorte que Q_f^h soit un sous-maillage de Q^h. Ceci paraît naturel puisque l'interface Γ doit de toute façon être discrétisée dans notre maillage Q^h pour la résolution du problème élastique.

Nous représentons sur la figure 8.4 un exemple de maillage Q^h utilisé. Celui-ci est volontairement choisi grossier pour faciliter la visualisation. Sur cet exemple, le pas h est trois fois plus petit en bas du substrat que dans le film.

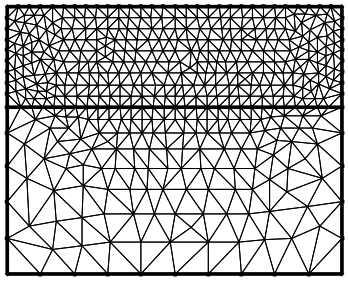


Figure 8.4 – Un exemple de maillage Q_h. L'interface film/substrat fait bien partie du maillage.

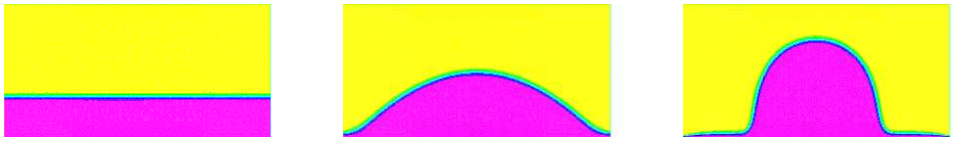
8.2.1 Un premier test

Sur la figure 8.5 se trouvent les formes finales obtenues pour trois choix différents du saut de contrainte e_0. Pour ces trois choix, seule la composante $e_{0_{11}}$ est non nulle. Elle vaut respectivement 0,1, 2 et 5. On a donc

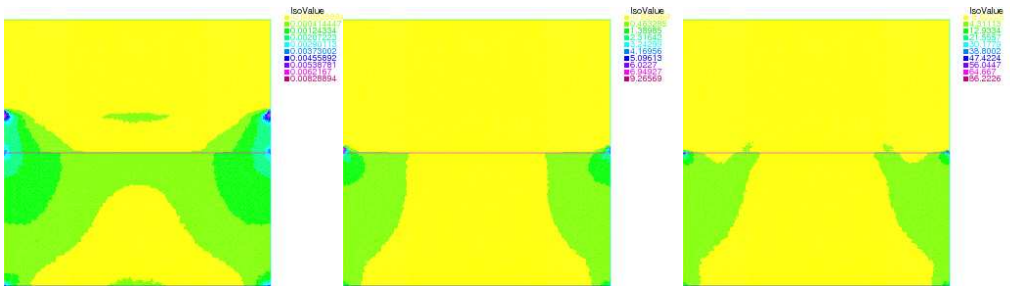
$$e_0 = \begin{pmatrix} 0{,}1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \; e_0 = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ et } e_0 = \begin{pmatrix} 5 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

respectivement. Les longueurs l_s et l_f valent toutes les deux 0,5. Le plus petit pas de maillage h est choisi égal à $5 \cdot 10^{-3}$ dans le film et 10^{-2} dans le substrat. On fixe comme d'habitude $\varepsilon = 2h$ et $\Delta t = \frac{h^2}{2}$, h désignant ici la valeur du pas dans le film. Les éléments utilisés sont de type P_1 à la fois pour $\boldsymbol{u}$ et pour ϕ. La forme initiale est un film plat de hauteur 0,15 perturbé par une sinusoïde de fréquence 6 et d'amplitude 0,02. Les coefficients élastiques sont choisis identiques pour le film et le substrat : $\lambda_f = \lambda_s = 1$ et $\mu_f = \mu_s = 1$.

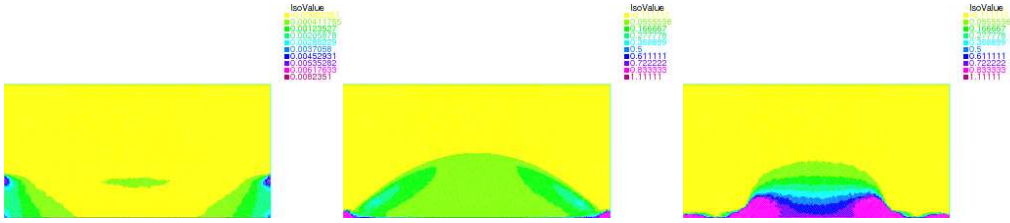
Pour $e_{0_{11}}$ petit, on constate que la forme d'équilibre obtenue est le film plat de hauteur 0,15, tandis que pour $e_{0_{11}}$ grand, c'est une bosse. Celle-ci est d'autant plus haute que $e_{0_{11}}$ est élevé. Le paramètre $e_{0_{11}}$ joue ici le même rôle que le paramètre K dans le modèle du chapitre 6. Il arbitre la compétition entre les effets élastiques et



(a) Champ de phase



(b) Énergie élastique locale



(c) Énergie élastique locale dans le film (tronquée)

Figure 8.5 – Formes et énergies élastiques finales pour différentes valeurs de $e_{0_{11}}$. De gauche à droite, $e_{0_{11}}$ vaut 0,1, 2 et 5.

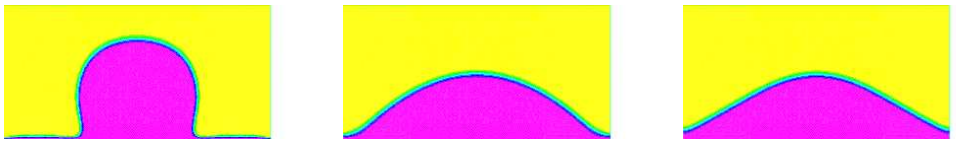
les effets de surface. On se doute qu'il existe une valeur seuil en dessous de laquelle le film plat est la seule forme optimale.

Les pics d'énergie élastique les plus marqués se situent sur l'interface, aux bords du domaine. Bien sûr, l'énergie élastique moyenne sera d'autant plus élevée que $e_{0_{11}}$ est grand. Pour mieux visualiser la répartition de l'énergie dans le film, nous avons tronqué ses valeurs entre 0 et 1. C'est ce qui nous a permis d'obtenir la troisième ligne de la figure 8.5. On constate, comme dans le chapitre précédent, que l'énergie élastique est essentiellement concentrée au pied des îlots, sur leurs bords.

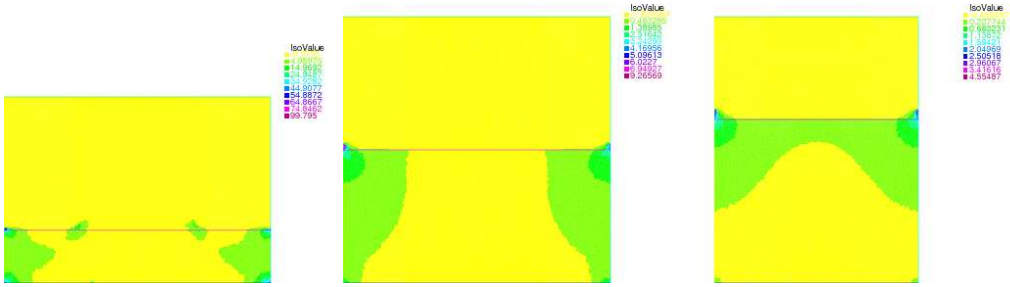
8.2.2 Influence de la taille du substrat

Dans ce paragraphe, nous cherchons à déterminer l'impact de la hauteur du substrat sur les formes finales. Nous reprenons le cas test de la colonne du milieu sur la figure 8.5, et nous effectuons deux nouveaux calculs, l'un avec $l_s = 0{,}2$ et l'autre avec $l_s = 0{,}8$. Les résultats obtenus sont présentés sur la figure 8.6. Ils sont assez prévisibles : plus le substrat est petit, et plus l'énergie élastique se fera sentir à l'interface avec le film. Ainsi les bosses finales sont d'autant plus hautes

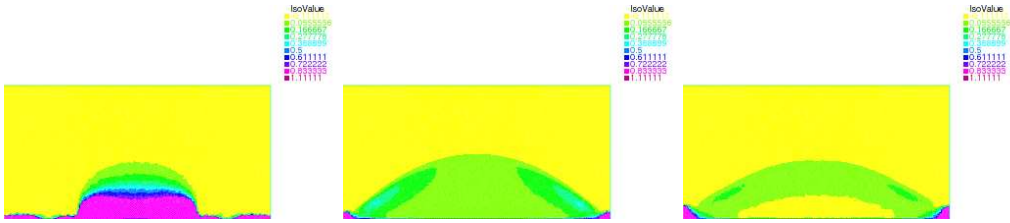
que le substrat est petit. De même, l'énergie emmagasinée dans le film est bien plus importante lorsque le substrat est petit que lorsqu'il est grand.



(a) Champ de phase



(b) Énergie élastique locale

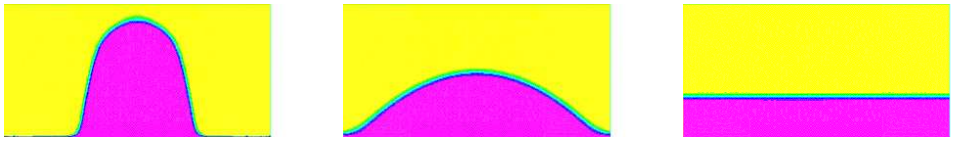


(c) Énergie élastique locale dans le film (tronquée)

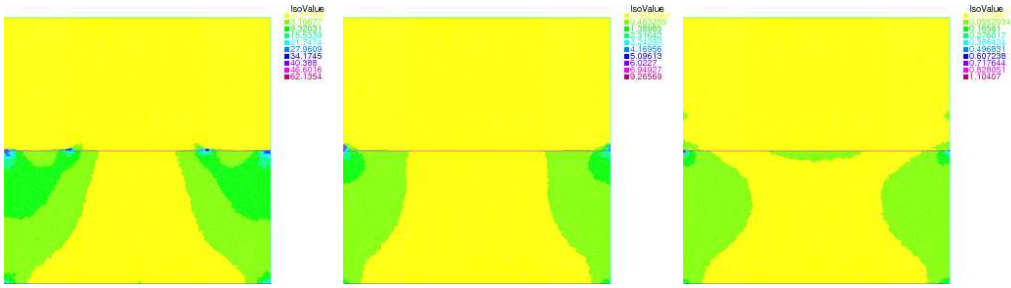
Figure 8.6 – Formes et énergies élastiques finales pour différentes hauteurs de substrat. De gauche à droite, l_s vaut 0,2, 0,5 et 0,8.

8.2.3 Influence des coefficients élastiques

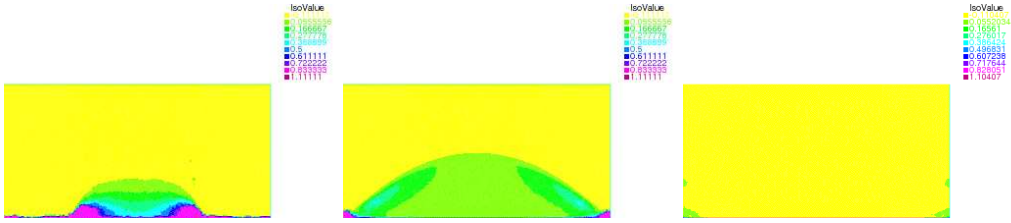
Dans les exemples qui précèdent, nous avions défini les mêmes coefficients élastiques pour le film et pour le substrat : $\lambda_f = \lambda_s = 1$ et $\mu_f = \mu_s = 2$. Ici, nous reprenons une nouvelle fois le cas test de la colonne du milieu sur la figure 8.5, et nous effectuons plusieurs calculs en modifiant les valeurs de λ_s et μ_s. La figure 8.7 présente les résultats obtenus pour trois couples de coefficients différents. Là encore, les résultats sont ceux attendus. Les petites valeurs de λ_s et μ_s correspondent à un substrat très déformable. L'énergie élastique transmise au film est alors importante, et celui-ci va former une bosse tout en hauteur. Pour les grandes valeurs de λ_s et μ_s, le substrat est très rigide, et l'énergie élastique presque nulle dans tout le film. La forme d'équilibre est alors le film plat.



(a) Champ de phase



(b) Énergie élastique locale



(c) Énergie élastique locale dans le film (tronquée)

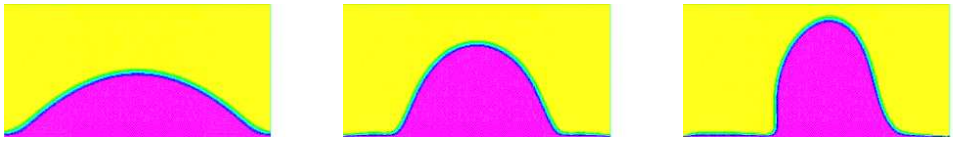
Figure 8.7 – Formes et énergies élastiques finales pour différentes valeurs de λ_s et μ_s. De gauche à droite, le couple (λ_s, μ_s) vaut $(0{,}1; 0{,}2)$, $(1; 2)$ et $(10; 20)$.

8.2.4 Influence du saut des contraintes

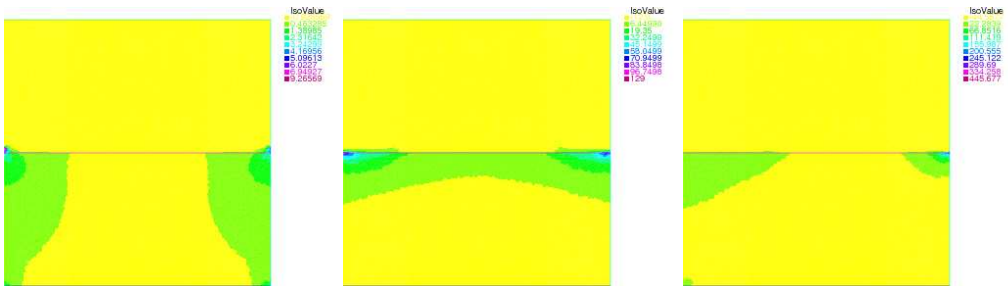
Pour cette série des tests, nous avons effectué plusieurs calculs en faisant varier uniquement la déformation e_0 qui apparaît dans la condition aux limites à l'interface film/substrat. Les résultats de la figure 8.8 ont été obtenus avec, de gauche à droite,

$$e_0 = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \; e_0 = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} \text{ et } e_0 = \begin{pmatrix} 0{,}5 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}. \tag{8.8}$$

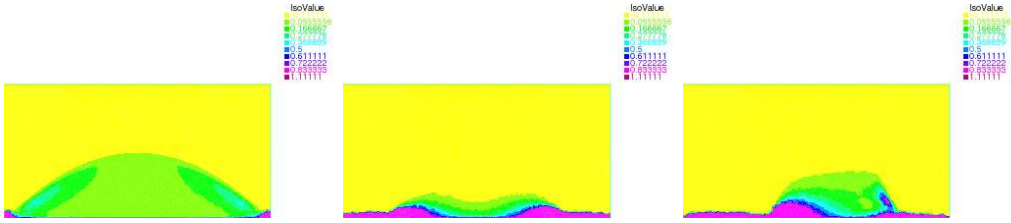
On constate que le choix de e_0 influence fortement la forme optimale. Rappelons que, dans notre modèle, c'est par e_0 que l'énergie est introduite dans le système. La répartition de l'énergie élastique locale va donc être directement liée au choix de e_0. Dans les deux premières colonnes de la figure 8.8, cette répartition est symétrique par rapport à la droite $x = 0{,}5$. La forme finale est donc elle aussi symétrique. La concentration d'énergie près de l'interface est plus importante dans la deuxième colonne que dans la première, et, par conséquent, la bosse finale est plus haute. Dans la troisième colonne, nous avons choisi e_0 de façon à dissymétriser la répartition de l'énergie élastique. La forme finale est alors elle aussi dissymétrique. Le film va



(a) Champ de phase



(b) Énergie élastique locale



(c) Énergie élastique locale dans le film (tronquée)

Figure 8.8 – Formes et énergies élastiques finales pour les choix de e_0 donnés en (8.8).

avoir tendance à s'étirer du côté où l'énergie est la plus basse. On constate que le choix de e_0 influence fortement la forme optimale. Rappelons que, dans notre modèle, c'est par e_0 que l'énergie est introduite dans le système. La répartition de l'énergie élastique locale va donc être directement liée au choix de e_0. Dans les deux premières colonnes de la figure 8.8, cette répartition est symétrique par rapport à la droite $x = 0{,}5$. La forme finale est donc elle aussi symétrique. La concentration d'énergie près de l'interface est plus importante dans la deuxième colonne que dans la première, et, par conséquent, la bosse finale est plus haute. Dans la troisième colonne, nous avons choisi e_0 de façon à dissymétriser la répartition de l'énergie élastique. La forme finale est alors elle aussi dissymétrique. Le film va avoir tendance à s'étirer du côté où l'énergie est la plus basse.

Il est clair, sur cette dernière figure, que l'éventail des formes d'équilibre est bien plus large qu'avec le modèle du chapitre 6. Cette richesse est la conséquence d'une modélisation plus proche de la physique du problème initial. Elle fait de notre nouveau modèle un candidat idéal pour des tests numériques plus poussés.

Mais, dans l'immédiat, nous nous consacrons à une autre problèmatique de la croissance cristalline, celle de l'évolution des surfaces vicinales.

Chapitre 9

Un modèle pour l'évolution des surfaces vicinales

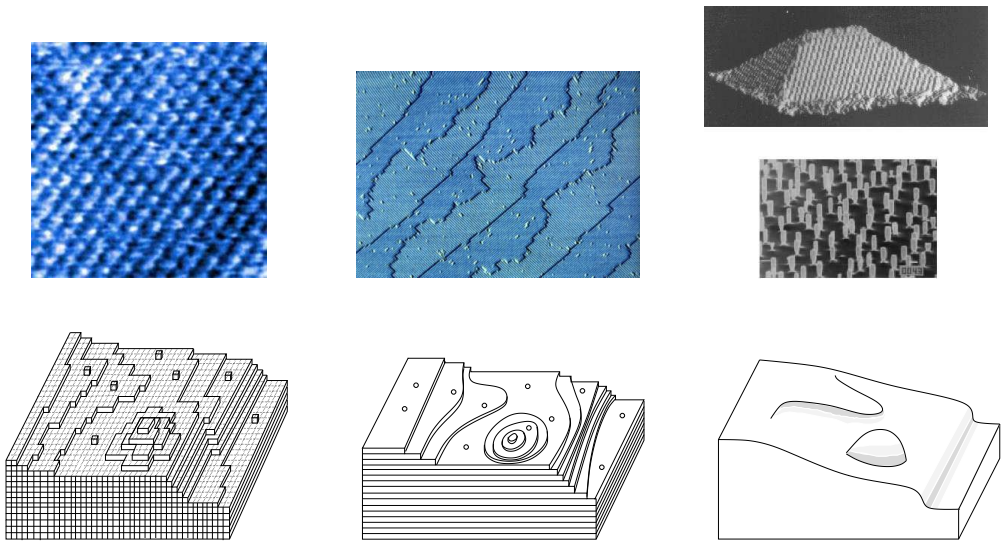
Ce chapitre a fait l'objet d'une collaboration avec Olivier Pierre-Louis, chercheur au Laboratoire de Spectrométrie Physique de Grenoble. Notre objectif était de proposer un modèle de champ de phase permettant d'étudier les interactions entre les différentes échelles pendant la création et l'évolution des surfaces vicinales.

Pour décrire ce qu'est une surface vicinale, nous aurons besoin de présenter le phénomène de croissance par avancée de marches. Nous rappellerons les principaux modèles permettant d'étudier ce phénomène. Nous en viendrons ensuite à la description de notre problème modèle, et nous verrons que celui-ci nous amène à considérer une équation d'Allen–Cahn légèrement modifiée. Nous présenterons notre schéma numérique de résolution de cette équation, ainsi que quelques résultats de simulations.

9.1 Contexte physique

Marches. Terrasses.

Comme nous l'avons mentionné dans le chapitre 6, la description de la surface d'un cristal dépend de l'échelle considérée. Aux échelles les plus petites, le cristal sera vu comme la somme de ses atomes. Les adatomes qui diffusent en surface seront considérés indépendamment les uns des autres. On parle de description ou de modèle « solide sur solide » (*solid on solid*). En pratique, cette description discrète conduit à des simulations de type dynamique moléculaire : on calcule le mouvement de chaque adatome sur la surface. Aux échelles macroscopiques, on adopte une description continue, comme dans le modèle du chapitre 6. Le cristal est vu comme un matériau élastique, en surface duquel des îlots peuvent se former. Aux échelles intermédiaires mésoscopiques, une représentation fréquemment utilisée décrit la surface du cristal comme une succession de terrasses et de marches — voir la figure 9.1.



(a) *solid on solid* (b) *marches et terrasses* (c) *solide élastique avec îlots*

Figure 9.1 – Différentes façons de représenter la surface d'un cristal. (Sources des photos : *Omicron NanoTechnology* et *Lagally Research Group*. Source des schémas : O. Pierre-Louis.)

Croissance par avancée de marches.

Nous l'avons déjà dit, la surface d'un cristal en épitaxie n'est pas statique, mais dynamique. Dans notre représentation mésoscopique, la diffusion des adatomes et leur adsorption va faire évoluer la géométrie des marches et des terrasses. D'un point de vue énergétique, l'adsorption est généralement favorisée au niveau des marches : c'est l'effet Schwoebel, ou Ehrlich–Schwoebel. Les marches vont donc avancer progressivement sur la surface du film. On parle de croissance par avancée de marches, ou *step flow growth* en anglais.

Le modèle classique pour étudier ce phénomène est le modèles BCF, pour Burton, Cabrera, Frank [18]. Il consiste en une équation de diffusion sur la concentration d'adatomes, posée sur chaque terrasse :

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\Delta c + F - \frac{c}{\tau}.$$

D est le coefficient de diffusion des adatomes, F le taux d'adsorption sur les terrasses, et τ un temps caractéristique de « désorption ». La désorption désigne le phénomène par lequel les adatomes vont se détacher du film et retourner dans la phase vapeur — voir la figure 9.2. Des conditions aux limites de couplage entre les terrasses sont imposées au niveau des marches. Il en existe de plusieurs types, et selon celles utilisées, différentes cinétiques d'avancée des marches peuvent être modélisées. Nous renvoyons à l'article de Pierre-Louis [89] pour plus de détails.

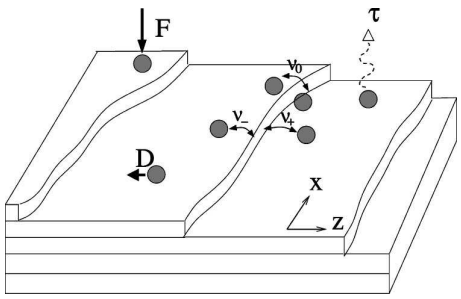


Figure 9.2 – Diffusion des adatomes sur une surface avec marches et terrasses. (Source : [89].)

Dans son article, Pierre-Louis présente un modèle de champ de phase pour la croissance par avancée de marches, et montre que celui-ci permet de retrouver les différentes cinétiques du modèle BCF. Dans sa nouvelle approche, on ne recherche plus des concentrations sur chaque terrasse, mais un champ de concentration global θ, continu au travers des marches. La figure 9.3 permet de visualiser cette distinction. θ doit vérifier

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \operatorname{div}\big(M(\phi)\nabla\theta\big) + F - \frac{\theta}{\tau},$$

où M est un coefficient de diffusion non constant, dépendant du champ de phase ϕ. Ce champ de phase est calculé comme solution de l'équation

$$\tau_p \frac{\partial \phi}{\partial t} = \varepsilon^2 \Delta\phi - W'(\phi) + \lambda(\theta - \theta_{eq}).$$

Ici, τ_p est une échelle de temps caractéristique, ε un petit paramètre strictement positif et W un potentiel de type bistable. Le terme $\lambda(\theta - \theta_{eq})$ est un terme de pénalisation pour le retour à l'équilibre chimique.

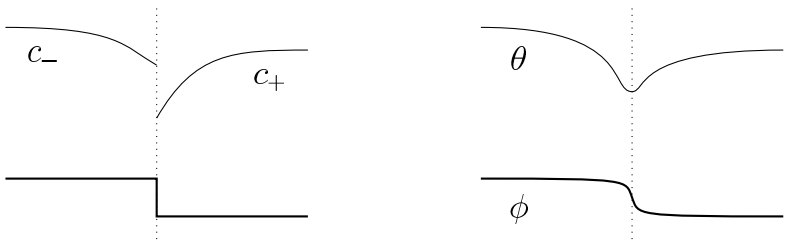


Figure 9.3 – Différence entre modèle BCF (à gauche) et modèle de champ de phase (à droite).

Surfaces vicinales. Mise en paquet de marches. Facettage.

Une surface vicinale est une surface en escalier sur laquelle toutes les marches ont la même orientation — voir la figure 9.4. Ce type de surface apparaît naturellement

pendant la croissance. Il existe généralement un régime d'équilibre pour lequel toutes les marches ont la même hauteur, sont séparées par des terrasses de même taille, et avancent à la même vitesse. Ce régime peut cependant devenir instable, principalement sous l'effet de contraintes élastiques, et on peut alors observer un phénomène de relaxation qui consiste en la mise en paquet de marches (*step bunching*). On peut également voir apparaître de nouvelles orientations de croissance, dans la direction orthogonale aux surfaces vicinales — voir les schémas de la figure 9.5. De nombreuses instabilités sont donc susceptibles d'intervenir, et modéliser la croissance au-delà de l'apparition des premières d'entre elles reste un défi. C'est dans cette optique que nous avons proposé le modèle décrit dans la section suivante. Il s'agit pour l'instant d'un modèle simplifié, qui demandera à être progressivement complété.

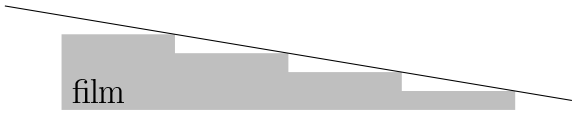


Figure 9.4 – Représentation schématique d'une surface vicinale.

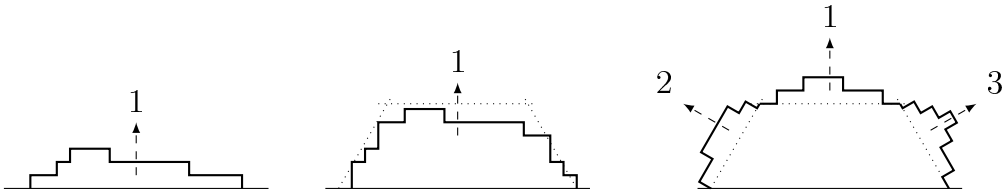


Figure 9.5 – Apparition de nouvelles directions de croissance.

9.2 Description du modèle

Comme nous l'avons déjà indiqué, un modèle classique en croissance cristalline consiste à minimiser une énergie

$$E(\Omega) = \int_{\partial\Omega} \gamma(\boldsymbol{n})\, ds,$$

où Ω désigne le domaine occupé par le cristal, $\partial\Omega$ sa surface, et γ une densité d'énergie fonction de la normale $\boldsymbol{n}$, associée à une forme de Wulff. Cette approche est essentiellement macroscopique. Notre idée est de modifier l'énergie E de façon à faire intervenir des effets microscopiques, liés au réseau cristallin, ou aux marches et terrasses. Nous allons pour cela considérer une énergie E_α définie par

$$E_\alpha(\Omega) = \int_{\partial\Omega} \Big((1-\alpha)\gamma(\boldsymbol{n}) + \alpha f \Big)\, ds,$$

où $f\colon \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}_+$ est une densité « en boîte à œufs » liée à l'implantation des marches et des terrasses, et α un réel de $[0,1[$. Dans notre étude, f dépendra uniquement de la position x. On choisira par exemple, en dimension deux,

$$f(x) = \sin^2(\omega x_1)\sin^2(\omega x_2),$$

de façon à ce que la ligne de niveau $\{f = 0\}$ forme un quadrillage, dont on pourra régler le pas en ajustant ω — voir la figure 9.6. Le paramètre α permettra d'arbitrer la compétition entre les effets macroscopiques et microscopiques. Pour $\alpha = 0$, on retrouve l'énergie E, purement macroscopique. Pour $\alpha \to 1$, l'énergie ne fait plus intervenir que les effets microscopiques. La fonction f pouvant s'annuler, nous interdisons la valeur $\alpha = 1$, puisque celle-ci conduirait à une densité d'énergie non strictement positive. Pour $\alpha < 1$, on a bien par contre

$$(1-\alpha)\gamma(\boldsymbol{n}) + \alpha f > 0,$$

puisque $\gamma(\boldsymbol{n})$ doit être un terme strictement positif.

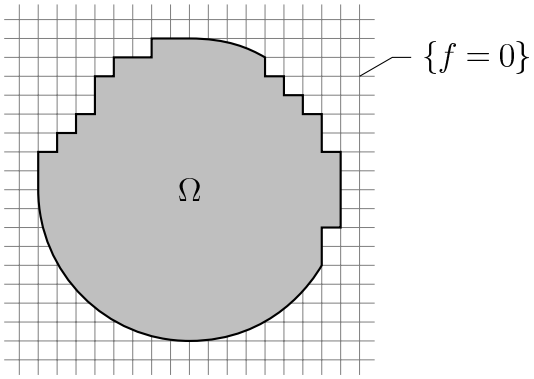


Figure 9.6 – Le domaine Ω sur le quadrillage $\{f = 0\}$.

Pour Q ouvert borné de $\mathbb{R}^N$, nous nous intéresserons au problème de minimisation suivant :

$$\min\left\{E_\alpha(\Omega) \mid \Omega \subset Q,\ |\Omega| = V_0\right\}, \tag{9.1}$$

où V_0 est un réel de $]0, |Q|[$. Étant donné sa définition, l'énergie E_α vérifiera les mêmes propriétés de semi-continuité inférieure que E. Cette dernière n'est autre que le périmètre anisotrope P_γ qui a fait l'objet du chapitre 5. Sous réserve que γ soit une anisotropie admissible au sens de la définition 6, page 88, l'existence de solutions pour le problème (9.1) s'obtient donc immédiatement.

On s'attend bien sûr à ce que, pour α proche de 0, les formes d'équilibre qui minimisent E_α soient proches de la forme de Wulff, tandis que pour α proche de 1, elles s'alignent sur le quadrillage $\{f = 0\}$. Une des questions que nous nous poserons est de savoir si pour les valeurs de α intermédiaires, les formes d'équilibre font apparaître une séparation des échelles, comme par exemple sur la figure 9.6 où

l'influence du quadrillage fait apparaître des perturbations « microscopiques » sur la forme de Wulff circulaire. Nous chercherons également à étudier la transition dans les formes optimales arbitrée par α.

9.3 Méthode de résolution numérique

Nous allons, comme d'habitude, baser nos simulations sur une approximation par champ de phase. Dans un souci de simplification, nous limiterons notre présentation au cas isotrope $\gamma(\boldsymbol{n}) = 1$.

Nous poserons, pour toute cette section, $f_\alpha = (1-\alpha) + \alpha f$, de façon à récrire l'énergie E_α en

$$E_\alpha(\Omega) = \int_{\partial\Omega} f_\alpha \, ds.$$

Pour α dans $[0,1[$, on a bien $f_\alpha > 0$. Définissons, pour $\varepsilon > 0$ et ϕ dans $H^1(Q)$, l'énergie approchée $E_{\alpha,\varepsilon}$ par

$$E_{\alpha,\varepsilon}(\phi) = \int_Q f_\alpha \left(\frac{\varepsilon}{2} |\nabla\phi|^2 + \frac{1}{\varepsilon} W(\phi) \right) dx,$$

où W est, comme précédemment, un potentiel bistable de type double puits. Notre problème de minimisation approché s'écrit

$$\min \left\{ E_{\alpha,\varepsilon}(\phi) \;\middle|\; \phi \in H^1(Q),\ V(\phi) = V_0 \right\}, \tag{9.2}$$

avec

$$V(\phi) = \int_Q \phi \, dx.$$

La fonction f_α étant strictement positive et bornée, l'existence de solutions se déduit immédiatement du cas $f_\alpha = 1$ étudié dans le chapitre 2. Les conditions de coercivité et de semi-continuité inférieure sur E_α sont en effet encore vérifiées. Pour ce qui est de la limite $\varepsilon \to 0$, la fonctionnelle $E_{\alpha,\varepsilon}$ rentre dans le cadre général étudié par Belletini dans [7]. Ceci nous assure de la Γ-convergence vers la limite $\lambda_W E_\alpha$, où la constante λ_W est celle définie dans le théorème de Modica–Mortola, page 47.

Nous effectuerons la résolution du problème (9.2) avec notre méthode de flot de gradient habituelle :

$$\varepsilon \frac{\partial\phi}{\partial t} = -\nabla E_{\alpha,\varepsilon}(\phi) - q(t),$$

où nous déterminerons q de façon à assurer la conservation du volume. En supposant que ϕ vérifie des conditions de Neumann homogènes sur le bord de Q, nous aurons, pour ψ dans $H^1(Q)$, la forme variationnelle

$$\varepsilon \int_Q \frac{\partial\phi}{\partial t} \psi \, dx + \varepsilon \int_Q f_\alpha \nabla\phi \cdot \nabla\psi \, dx + \frac{1}{\varepsilon} \int_Q f_\alpha W'(\phi) \psi \, dx + q(t) \int_Q \psi \, dx = 0.$$

Le choix $\psi = 1$ comme fonction test permet de voir que q doit être défini par

$$q(t) = -\frac{1}{\varepsilon}\frac{1}{|Q|}\int_Q f_\alpha W'(\phi)\,dx = -\frac{1}{\varepsilon}\fint_Q f_\alpha W'(\phi)\,dx.$$

Sous forme directe, l'équation à résoudre s'écrit donc

$$\varepsilon\frac{\partial\phi}{\partial t} - \varepsilon\,\mathrm{div}(f_\alpha\nabla\phi) + \frac{1}{\varepsilon}f_\alpha W'(\phi) - \frac{1}{\varepsilon}\fint_Q f_\alpha W'(\phi)\,dx = 0.$$

On reconnaît l'équation d'Allen–Cahn non locale avec un coefficient de diffusion non constant, et un potentiel double puits modifié $f_\alpha W$. Notre schéma numérique sera très similaire à celui donné au chapitre 3 pour l'équation d'Allen–Cahn non locale classique :

$$m(\phi^{n+1},\psi) + \Delta t\, a_\alpha(\phi^{n+1},\psi) = m(F^n,\psi),$$

avec

$$F^n = \phi^n - \frac{\Delta t}{\varepsilon^2}f_\alpha W'(\phi^n) + \frac{\Delta t}{\varepsilon^2}\fint_Q f_\alpha W'(\phi^n)\,dx.$$

La forme bilinéaire a_α est définie, pour ϕ et ψ dans $H^1(Q)$, par

$$a_\alpha(\phi,\psi) = \int_Q f_\alpha\nabla\phi\cdot\nabla\psi\,dx.$$

La fonction f_α étant strictement positive, a_α est coercive et le problème est bien posé. Comme de plus f_α ne dépend pas du temps, nous pourrons, en pratique, factoriser la matrice du système une fois pour toutes, si bien que le coût en temps du schéma sera le même que pour l'équation d'Allen–Cahn non locale.

9.4 Résultat et analyse des simulations

9.4.1 Un premier exemple

Pour cette première série de tests, la forme initiale choisie est le carré représenté sur la figure 9.7. Il s'agit du carré $[0{,}2;0{,}8]^2$ que nous avons tourné d'un angle $\frac{\pi}{4}$, afin que ses bords ne s'alignent pas sur le quadrillage utilisé. Ce quadrillage est défini par une fonction f de fréquence 20 :

$$f(x) = \tfrac{1}{2}\min\Big(1-\cos(40\pi x_1), 1-\cos(40\pi x_2)\Big).$$

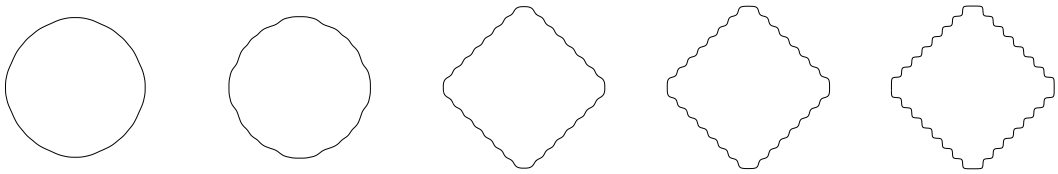
Le coefficient $\frac{1}{2}$ permet de faire varier f entre 0 et 1, de façon à ce que f_α prenne ses valeurs dans $]0,1]$. Rappelons que la fonction f_α est définie, pour α dans $[0,1[$, par $f_\alpha = (1-\alpha)+\alpha f$. Avec notre choix de f, elle variera en fait dans $[(1-\alpha),1]$.

Le jeu de paramètres est donné par notre choix habituel : $h = 5\cdot10^{-3}$, $\varepsilon = 2h$ et $\Delta t = \frac{h^2}{2}$. Nous utilisons comme toujours des éléments finis de type P_1. La figure 9.8

Figure 9.7 – La forme initiale et le quadrillage utilisés.

présente les formes d'équilibre obtenues pour différentes valeurs du paramètre α. Le critère d'arrêt de l'algorithme est choisi suffisamment bas pour être sûr que ces formes n'évoluent plus :

$$\left\|\phi^{n+1} - \phi^{n}\right\|_{H^1(Q)} \leq 10^{-8}.$$



(a) $\alpha = 0{,}1$ (b) $\alpha = 0{,}3$ (c) $\alpha = 0{,}5$ (d) $\alpha = 0{,}7$ (e) $\alpha = 0{,}9$

Figure 9.8 – Formes finales obtenues pour différentes valeurs de α.

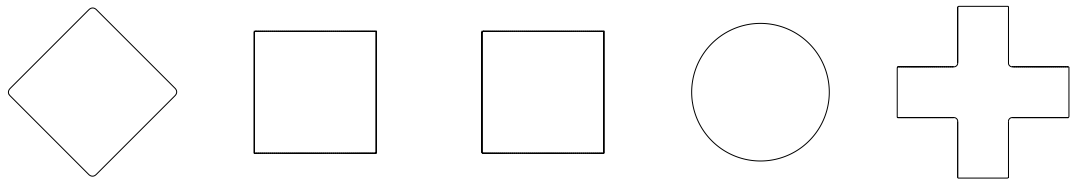
Comme on pouvait s'y attendre, les formes obtenues pour α petit sont dictées par la forme de Wulff, à savoir un cercle puisque nous sommes ici dans le cas isotrope. Pour $\alpha = 0{,}3$, on commence à observer assez nettement l'influence du quadrillage, puisque des perturbations sont visibles sur le cercle obtenu. Pour les valeurs de α suivantes, les formes d'équilibre sont plus proches du carré initial que de la forme de Wulff circulaire. On voit apparaître des marches sur la surface, et ces marches sont d'autant plus prononcées que α est grand.

On peut être surpris par l'influence de la forme initiale sur le résultat du calcul. En effet, pour l'équation d'Allen–Cahn non locale et le mouvement par courbure moyenne conservé, on sait depuis l'étude de Gage [50] que les courbes convexes fermées deviennent asymptotiquement des cercles. La forme finale est donc indépendante du choix de la forme initiale. Nous allons voir que ce n'est absolument pas le cas ici.

9.4.2 Influence de la donnée initiale

Effectuons de nouvelles séries de tests, en utilisant maintenant les formes initiales représentées sur la figure 9.9. Ces formes sont toutes de même volume $V_0 = 0{,}36$. Avec notre choix de f, ce volume correspond à un nombre entier de « cases » du

quadrillage : le volume d'une case est donné par $0{,}05^2 = 2{,}5 \cdot 10^{-3}$, si bien que V_0 représente précisément 144 cases.



(a) (b) (c) (d) (e)

Figure 9.9 – Différentes formes initiales de même volume.

La forme (a) est le carré de la figure 9.7 précédente. La forme (b) est le carré $[0{,}2; 0{,}8]^2$, non tourné. Avec notre choix de f, son bord repose sur la ligne de niveau $\{f = 0\}$. La forme (c) est ce même carré, décalé de 0,025 dans la direction x. Ses bords verticaux tombent maintenant au milieu des cases du quadrillage. La forme (d) est le cercle de volume V_0 centré en $(0{,}5; 0{,}5)$. La forme en croix (e) est également centrée en $(0{,}5; 0{,}5)$, et ses bords ne reposent pas sur le quadrillage.

On représente sur la figure 9.10 les formes finales obtenues pour chacune de ces données initiales, et pour différentes valeurs de α.

Le premier constat est immédiat : quelle que soit la valeur de α, la forme finale dépend du choix de la donnée initiale. Cette dépendance semble d'autant plus marquée que α est grand.

Rappelons qu'à une isométrie près, les trois formes (a), (b) et (c) désignent le même carré. Pourtant, les formes d'équilibre correspondantes sont très différentes. La comparaison des deux premières lignes met en avant le rôle joué par l'orientation de la forme initiale par rapport au quadrillage. Pour la forme (a), on voit des marches se former sur la surface. Ces marches sont toutes de même hauteur. Elles rappellent les marches monoatomiques évoquées au début de ce chapitre. La forme (b) reste quant à elle figée pour les grandes valeurs de α. En effet, puisqu'elle repose sur la ligne de niveau $\{f = 0\}$, elle constitue un minimum local de l'énergie $E_{\alpha,\varepsilon}$. Cette grande différence entre les formes d'équilibre en (a) et (b) n'est pas sans rappeler l'influence de l'orientation des réseaux cristallins en croissance épitaxiale. Celle-ci joue un rôle fondamental dans le processus de formation des marches et des terrasses.

Avec la forme (c), on constate qu'en plus de l'orientation, la position de la donnée initiale va avoir de l'influence. En effet, il a suffi de décaler notre carré d'une demi-case pour briser la symétrie de la forme d'équilibre : les bords horizontaux reposent encore sur la grille, mais des marches se sont formées sur les bords verticaux. Pour $\alpha = 0{,}1$, la forme obtenue se démarque nettement de celles en (a) et (b). Ceci n'est pas dû à un nombre insuffisant d'itérations. Pour en être tout à fait convaincu, nous avons repris cet exemple en laissant tourner l'algorithme jusqu'à ce que la précision machine soit atteinte pour l'erreur H^1. La forme finale est bien celle représentée sur

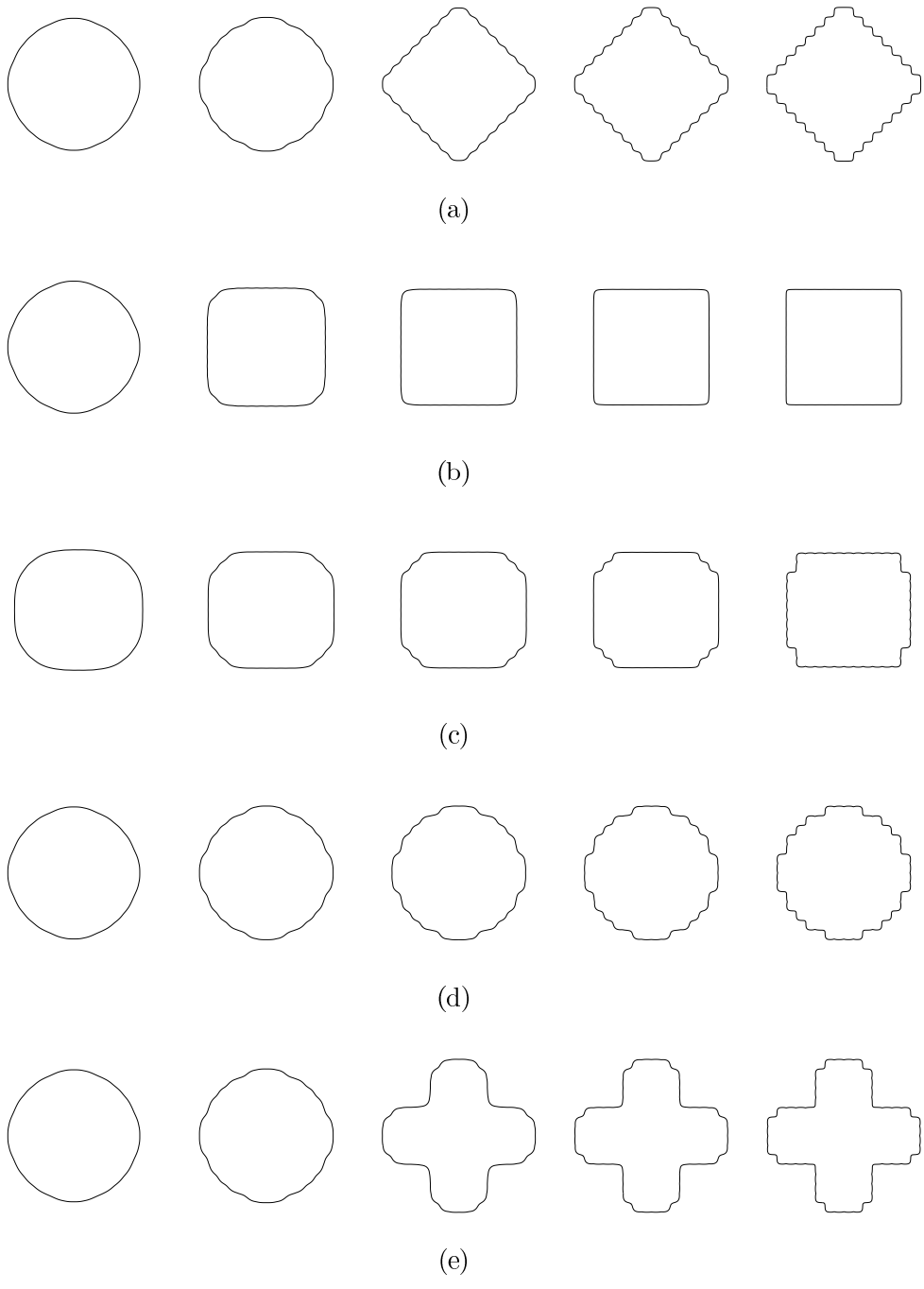


Figure 9.10 – Formes finales obtenues pour les cinq données initiales de la figure 9.9. De gauche à droite, α prend les valeurs 0,1, 0,3, 0,5, 0,7 et 0,9.

la figure 9.10. Ainsi, même pour les petites valeurs de α, la dépendance à la forme initiale est bien présente.

Les formes d'équilibre obtenues pour le cercle (d) se rapprochent de celles obtenues avec la forme (a). Elles semblent même confondues pour $\alpha = 0{,}1$ et $\alpha = 0{,}3$. Pour les valeurs de α plus grandes, on voit également apparaître des marches, mais elles ne sont, cette fois-ci, pas toutes de la même hauteur. On parvient encore à deviner la forme initiale circulaire.

Pour la croix (e) non convexe, les formes d'équilibre à α petit semblent identiques à celles du cercle. En particulier, elles sont convexes. Par contre, pour les valeurs plus élevées de α, les formes d'équilibre restent concaves. Elles font là encore apparaître des marches.

On se doute que ces nombreuses formes d'équilibre différentes correspondent en fait à des minima locaux de l'énergie $E_{\alpha,\varepsilon}$. Notre algorithme pouvant s'interpréter comme une méthode de descente de gradient, on comprend qu'il puisse rester piégé dans ces minima locaux. On peut naturellement chercher à comparer les énergies des différentes formes finales. Nous les avons calculées numériquement, et reportées dans le tableau 9.1.

Tableau 9.1 – Énergies des formes représentées sur la figure 9.10.

	$\alpha = 0{,}1$	$\alpha = 0{,}3$	$\alpha = 0{,}5$	$\alpha = 0{,}7$	$\alpha = 0{,}9$
forme (a)	13,677	11,567	9,543	7,462	5,363
forme (b)	13,678	11,677	9,545	7,452	5,339
forme (c)	13,689	11,680	9,519	7,435	5,116
forme (d)	13,677	11,567	9,446	7,301	5,029
forme (e)	13,677	11,568	9,501	7,331	5,135

On constate tout d'abord que les énergies sont plus basses lorsque α est proche de 1. Ceci est lié à l'expression de $E_{\alpha,\varepsilon}$:

$$E_{\alpha,\varepsilon}(\phi) = \int_Q \Big((1-\alpha) + \alpha f\Big)\left(\frac{\varepsilon}{2}|\nabla\phi|^2 + \frac{1}{\varepsilon}W(\phi)\right) dx.$$

La fonction f que nous utilisons étant de moyenne inférieure à $\frac{1}{2}$, on voit immédiatement qu'à ε et ϕ fixés, la fonction $\alpha \to E_{\alpha,\varepsilon}(\phi)$ est décroissante.

La deuxième remarque que nous pouvons faire est que l'écart entre les énergies augmente avec α. Pour $\alpha = 0{,}1$, elles sont quasiment toutes égales, à 10^{-3} près. Seule celle de la forme (c) est légèrement supérieure. La différence maximale, d'environ 0,33, est atteinte pour $\alpha = 0{,}9$ entre les formes (a) et (d).

Ce sont les énergies obtenues pour la forme initiale circulaire qui sont systématiquement les plus basses. Pour les grandes valeurs de α, on aurait pu s'attendre à ce que le carré de la forme (b) soit le plus avantageux, du fait qu'il ne présente aucune marche et qu'il est calé sur le quadrillage. Ce n'est pourtant pas le cas. On constate

d'ailleurs que la forme en croix (e), bien que largement non convexe, a une énergie plus basse. Les formes les plus proches du cercle sont bien les plus avantageuses, y compris pour les grandes valeurs de α. On se rend donc compte que le terme macroscopique en $(1-\alpha)$ de l'énergie se fait toujours sentir. Il y a bien un compromis à trouver entre la formation des marches et la forme de Wulff.

Nous pouvons chercher à savoir s'il est possible, en dépit de la présence des nombreux minima locaux, d'accéder au minimum global de l'énergie $E_{\alpha,\varepsilon}$. Nous présentons, dans cette optique, une approche inspirée de la méthode de « recuit simulé », qui est une des techniques d'optimisation globale utilisées en pratique.

9.4.3 Une stratégie d'optimisation globale

Notre idée consiste à faire varier le paramètre ε au cours du calcul : nous partirons d'une valeur élevée, que nous ferons progressivement décroître avec les itérations. Pour faire l'analogie avec le recuit simulé, nous pouvons interpréter ε comme une température fictive du système. En pratique, nous la ferons varier par paliers : nous effectuerons des itérations à ε constant jusqu'à obtenir un état quasi-stationnaire, puis nous poserons $\varepsilon := \rho\varepsilon$, où ρ sera un taux de décroissance fixé. Nous nous arrêterons une fois l'état stationnaire atteint pour une valeur ε_{min} définie à l'avance. Ceci permet d'écrire l'algorithme 6. Remarquons que cet algorithme est déterministe, contrairement aux méthodes de recuit simulé, généralement probabilistes.

Algorithme 6 : Recherche du minimum global.

Données : $\phi^0 \in H^1(Q)$, $\varepsilon_0 > 0$
Résultat : ϕ^∞ réalisant le minimum global de $E_{\alpha,\varepsilon}$

pour $n \geq 0$
  Calculer ϕ^{n+1} solution de

$$m(\phi^{n+1},\psi) + \Delta t\, a_\alpha(\phi^{n+1},\psi) = m\left(\phi^n - \frac{\Delta t}{\varepsilon_n^2} f_\alpha W'(\phi^n) + \frac{\Delta t}{\varepsilon_n^2} \fint_Q f_\alpha W'(\phi^n)\,dx, \psi\right).$$

  si $\varepsilon_n > \varepsilon_{min}$ **et** $\left\|\phi^{n+1} - \phi^n\right\|_{H^1(Q)} \leq tol$
    Poser

$$\varepsilon_{n+1} = \rho\,\varepsilon_n.$$

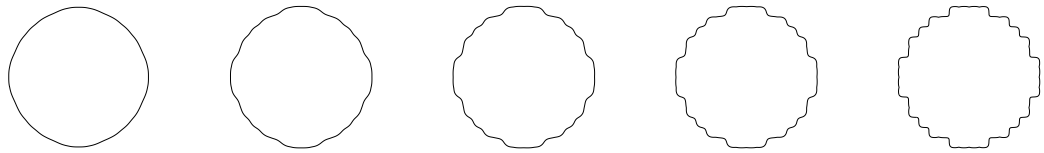
  sinon
    Poser

$$\varepsilon_{n+1} = \varepsilon_n.$$

  fin
fin

En recuit simulé, on sait, dans certains cas particuliers, donner des conditions sur la façon dont il faut faire décroître la température pour être sûr d'obtenir le minimum global. La plupart du temps, il faut cependant procéder de manière totalement empirique. C'est ce que nous avons fait ici en fixant le taux de décroissance ρ à 0,99, et la tolérance *tol* à 10^{-5}. Rien ne permet toutefois d'affirmer avec certitude que le résultat fourni par l'algorithme sera bien un minimum global.

Nous avons effectué des tests en reprenant les formes initiales de la figure 9.9, avec les mêmes paramètres $h = 5 \cdot 10^{-3}$ et $\Delta t = \frac{h^2}{2}$. Nous avons fixé ε_{min} à $2h$, et ε_0 à 0,1, soit un facteur 10 entre ces deux valeurs. Les calculs sont légèrement plus longs que précédemment, puisqu'il faut effectuer un nombre total d'itérations plus important. Néanmoins, l'ordre de grandeur reste le même, à savoir, selon les cas, quelques minutes ou dizaines de minutes sur notre poste de travail. Nos résultats semblent concluants, puisque nous obtenons strictement les mêmes formes finales pour nos cinq données initiales. Nous avons reporté ces formes finales sur la figure 9.11.



(a) $\alpha = 0{,}1$ (b) $\alpha = 0{,}3$ (c) $\alpha = 0{,}5$ (d) $\alpha = 0{,}7$ (e) $\alpha = 0{,}9$

Figure 9.11 – Formes finales obtenues avec l'algorithme 6 pour différents α.

Visuellement, nous obtenons les mêmes résultats que sur la figure 9.10 pour la donnée initiale circulaire. Nous pouvons faire une comparaison des énergies pour voir ce qu'il en est vraiment. C'est l'objet du tableau 9.2.

Tableau 9.2 – Énergies des formes représentées sur les figures 9.11 et 9.10 (d).

	$\alpha = 0{,}1$	$\alpha = 0{,}3$	$\alpha = 0{,}5$	$\alpha = 0{,}7$	$\alpha = 0{,}9$
9.11	13,677	11,568	9,441	7,304	5,021
9.10 (d)	13,677	11,567	9,446	7,301	5,029

Les valeurs calculées sont quasiment identiques dans les deux cas, et ce pour toutes les valeurs de α. L'écart maximal est atteint en $\alpha = 0{,}9$, mais il n'est même pas de 10^{-2}, c'est-à-dire de l'ordre de ε. On en conclut que sur cet exemple, l'algorithme 6 a effectivement convergé vers les formes d'équilibre correspondant à une donnée initiale circulaire.

Nous aurions pu prévoir ce résultat de manière intuitive. Avec une valeur de ε égale à 0,1 au début du calcul, l'interface diffuse de la solution ϕ aura une largeur supérieure à la taille des cases du quadrillage défini par f. Le champ de phase ne

« verra » donc pas le quadrillage, et l'interface pourra franchir des cases de manière transparente. L'évolution sera dictée, au cours des premières itérations de l'algorithme, par le terme macroscopique de l'énergie uniquement. On convergera ainsi, dans un premier temps, vers la forme de Wulff. Par la suite, lorsque ε aura suffisamment diminué pour repasser en dessous de la taille caractéristique du quadrillage, les effets microscopiques commenceront à se faire sentir, et nous retrouverons les résultats observés sur la figure 9.10 (d).

À titre d'exemple, nous représentons sur la figure 9.12 les lignes de niveau 0,05, 0,5 et 0,95 de la fonction ϕ au début du calcul, dans le cas de la forme initiale en croix. On pourra comparer la largeur de l'interface à la taille des cases de la grille utilisée.

Figure 9.12 – Largeur de l'interface face à la taille des cases du quadrillage.

Une question qu'il est naturel de se poser concerne les valeurs optimales à donner à ε_0 et à ρ pour que l'algorithme converge vers les formes données figure 9.11. Notre choix $\varepsilon_0 = 0{,}1$ convient, mais on imagine bien qu'il doit suffire de prendre une valeur de ε juste assez grande pour que l'interface soit plus large que la taille des cases. De même, notre choix $\rho = 0{,}99$ doit pouvoir être abaissé, sachant qu'en le prenant trop bas, on risque encore de se retrouver piégé dans des minima locaux.

Dans le chapitre suivant, nous essayons de mieux comprendre, sur un problème simple à une dimension, le rôle joué par la relaxation en ε .

Chapitre 10

Le champ de phase comme outil d'optimisation globale

Les modèles de champ de phase permettent de définir la dynamique d'interfaces d'épaisseur finie ε. Ils sont généralement employés comme approximation de modèles faisant intervenir des frontières, c'est-à-dire des interfaces d'épaisseur nulle. Leur validité repose alors sur l'existence d'un comportement asymptotique bien défini dans la limite $\varepsilon \to 0$, qui reproduise correctement le comportement de la frontière dans le modèle initial.

Dans ce chapitre, nous étudions une autre utilisation de la méthode de champ de phase, qui utilise plus largement l'épaisseur d'interface ε. Nous pensons en effet que le champ de phase peut être un outil efficace d'optimisation globale, dans le cadre de problèmes à frontières libres qui présentent de nombreux minima locaux.

Nous avons introduit, dans le chapitre 9, une stratégie numérique consistant à initialiser les calculs avec une grande valeur de ε, puis à diminuer progressivement cette valeur au cours des itérations. Comme nous l'avons fait remarquer, cette stratégie présente une analogie forte avec les techniques de recuit simulé, bien que restant parfaitement déterministe. Les résultats obtenus sur le modèle du chapitre 9 semblaient concluants, puisque notre algorithme fournissait effectivement des formes d'énergie plus basse que toutes celles que nous avons pu étudier par ailleurs.

Le but de ce chapitre est maintenant de chercher à mieux comprendre le rôle joué par le paramètre ε dans cette stratégie. Notre approche est essentiellement expérimentale. Nous nous appuierons sur un problème modèle en dimension un, et nous présenterons quelques tests numériques devant nous aider à déterminer comment utiliser efficacement les valeurs élevées de ε.

Ce chapitre fait encore l'objet d'un travail en cours. Les tests que nous y présentons ne sont qu'une introduction à une étude plus conséquente, devant être menée sous peu.

10.1 Présentation du problème modèle

Soit $f\colon [0,1] \to \mathbb{R}_+^*$ une fonction régulière, et soit W le potentiel double puits défini par

$$W(r) = \tfrac{1}{4} r^2 (1-r)^2.$$

Nous nous intéressons, pour $\varepsilon > 0$, au problème de minimisation

$$\min \left\{ E_\varepsilon(\phi) = \int_0^1 f\left(\frac{\varepsilon}{2} (\phi')^2 + \frac{1}{\varepsilon} W(\phi) \right) dx \;\middle|\; \phi \in X \right\}, \tag{10.1}$$

où l'espace de fonctions X est défini par

$$X = \left\{ \phi \in H^1(0,1) \;\middle|\; \phi(0) = 1,\ \phi(1) = 0 \right\}.$$

L'existence de solutions est assurée, comme pour le modèle du chapitre 9, par la coercivité et la semi-continuité inférieure de E_ε. La Γ-convergence dans la limite $\varepsilon \to 0$ se déduit encore de l'article de Bellettini [7]. La Γ-limite est la fonction $\lambda_W f$, où λ_W est la constante habituelle :

$$\lambda_W = \int_0^1 \sqrt{2W(t)}\, dt.$$

La fonctionnelle E_ε est clairement différentiable sur X, et on a, pour tout ψ de $H_0^1(0,1)$,

$$\begin{aligned} E_\varepsilon'(\phi)(\psi) &= \int_0^1 f\left(\varepsilon \phi' \psi' + \frac{1}{\varepsilon} W'(\phi) \psi \right) dx \\ &= \int_0^1 \left(-\varepsilon (f\phi')' + \frac{1}{\varepsilon} f W'(\phi) \right) \psi \, dx. \end{aligned}$$

Nous allons comme d'habitude ajouter une dépendance en temps à la fonction ϕ, et considérer le flot de gradient

$$\varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\nabla E_\varepsilon(\phi).$$

Ceci nous conduit au problème aux limites suivant :

$$\begin{cases} \varepsilon \dfrac{\partial \phi}{\partial t} - \varepsilon \dfrac{\partial}{\partial x}\left(f \dfrac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \dfrac{1}{\varepsilon} f \phi (1-\phi)(\tfrac{1}{2} - \phi) = 0, & (x,t) \in \,]0,1[\times \mathbb{R}_+^*, \\ \phi = \phi_0, & (x,t) \in [0,1] \times \{0\}, \\ \phi = 1, & (x,t) \in \{0\} \times \mathbb{R}_+^*, \\ \phi = 0, & (x,t) \in \{1\} \times \mathbb{R}_+^*, \end{cases} \tag{10.2}$$

où l'on a remplacé $W'(\phi)$ par son expression. C'est sur ce problème que nous nous appuierons pour effectuer les tests numériques présentés plus loin. Nous allons, dans un premier temps, tenter de définir une fonction f_ε relaxée de f.

10.2 Construction d'une fonction relaxée

Pour x_0 dans $[0,1]$, notons H_{x_0} la fonction échelon définie de $[0,1]$ dans $\mathbb{R}$ par

$$H_{x_0}(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x < x_0, \\ 0 & \text{si } x \geq x_0. \end{cases}$$

Soit alors ϕ_{x_0} la solution du problème (10.2) obtenue avec la donnée initiale $\phi_0 = H_{x_0}$. Nous noterons $\phi_{x_0}^\infty$ la solution stationnaire :

$$\phi_{x_0}^\infty(.) = \lim_{t \to +\infty} \phi_{x_0}(.,t).$$

$\phi_{x_0}^\infty$ sera notre solution de l'équation d'Euler–Lagrange associée au problème de minimisation (10.1). Notre idée est de l'utiliser pour définir la fonction

$$f_\varepsilon \colon x_0 \to f_\varepsilon(x_0) = E_\varepsilon(\phi_{x_0}^\infty).$$

f_ε est ainsi définie, comme f, sur l'intervalle $[0,1]$, et à valeurs strictement positives.

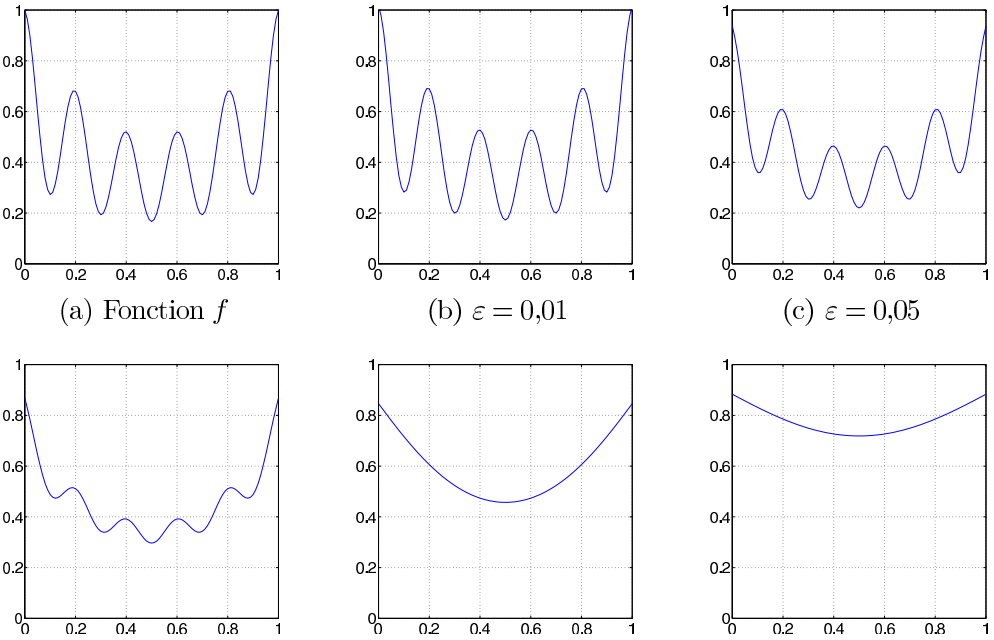
À ε fixé, on peut faire varier x_0 et calculer numériquement, pour chaque valeur, l'intégrale définissant $f_\varepsilon(x_0)$. Ceci nous permet, avec suffisamment de valeurs, de représenter graphiquement la fonction f_ε pour la comparer à f. Les tracés de la figure 10.1 donnent les résultats obtenus pour différentes valeurs de ε. En pratique, la résolution du problème aux limites (10.2) est effectuée avec la fonction `pdepe` de MATLAB. Le potentiel W est choisi de façon à ce que la constante λ_W soit égale à 1.

Pour les petites valeurs de ε, les fonctions f_ε restent proches de la fonction f, et leurs minima coïncident. Pour $\varepsilon = 0{,}01$, f_ε est même quasiment confondue avec f. Par contre, pour les grandes valeurs de ε, on observe un « lissage » des oscillations de f, et f_ε ne présente finalement plus qu'un seul minimum. Celui-ci semble bien être obtenu au même point que le minimum global de f.

On peut, pour chaque valeur de ε, relever les coordonnées des minima de f_ε. Ceci permet de tracer les courbes de la figure 10.2, où ε est porté en ordonnées, et les coordonnées des minima en abscisses.

Le tracé des abscisses permet de vérifier que pour les petites valeurs de ε, f_ε présente bien les mêmes minima locaux que f. Pour ε grand, au contraire, une seule valeur subsiste, et celle-ci correspond effectivement à l'abscisse du minimum global de f. Les ordonnées des minima ne font qu'augmenter avec ε. Pour ε petit, les valeurs obtenues correspondent à celles de la fonction f. Ensuite, l'erreur commise augmente avec ε, si bien que pour ε grand, la valeur du minimum global de f_ε n'a plus rien à voir avec celle de f.

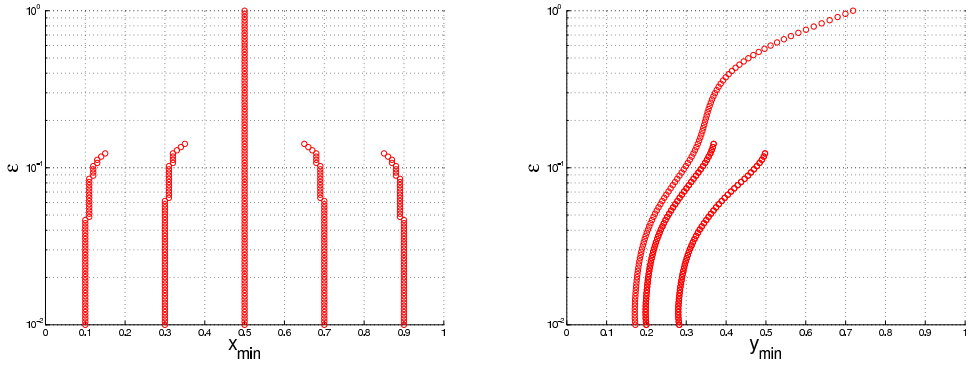
Au final, les fonctions f_ε permettent de comprendre comment f est « vue » par la méthode de champ de phase. Pour ε suffisamment petit, toutes les échelles de variation de f se retrouvent dans f_ε. Par contre, pour ε grand, f_ε ne fait plus apparaître que les variations de f de grande échelle. C'est en ce sens que nous parlons de fonction « relaxée ».



(a) Fonction f (b) $\varepsilon = 0{,}01$ (c) $\varepsilon = 0{,}05$

(d) $\varepsilon = 0{,}1$ (e) $\varepsilon = 0{,}5$ (f) $\varepsilon = 1$

Figure 10.1 – Tracé de f_ε pour différentes valeurs de ε.



(a) Abscisses des minima (b) Ordonnées des minima

Figure 10.2 – Coordonnées des minima de f_ε suivant les valeurs de ε.

10.3 Relevé de la position de l'interface

Considérons à nouveau la donnée initiale $\phi_0 = H_{x_0}$, ainsi que la solution stationnaire de (10.2) associée, $\phi^\infty_{x_0}$. À ε fixé, nous pouvons faire varier x_0 dans l'intervalle $[0,1]$, et, pour chaque valeur de x_0, relever l'abscisse x_∞ de l'interface définie par $\phi^\infty_{x_0}$. Autrement dit, x_∞ est simplement l'abscisse pour laquelle $\phi^\infty_{x_0}$ vaut $\frac{1}{2}$. Une représentation schématique est donnée sur la figure 10.3. On s'attend à ce que la position x_∞ corresponde à un minimum de la fonction f.

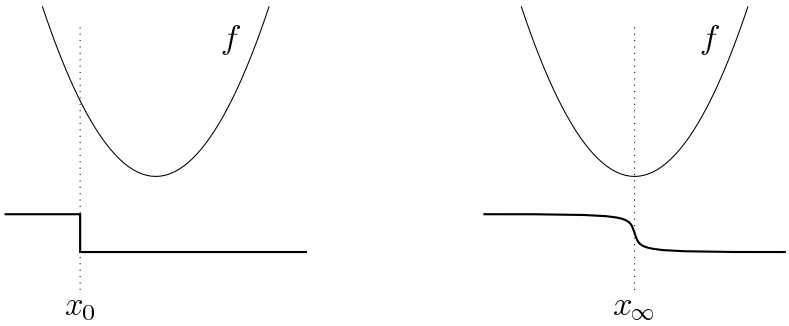


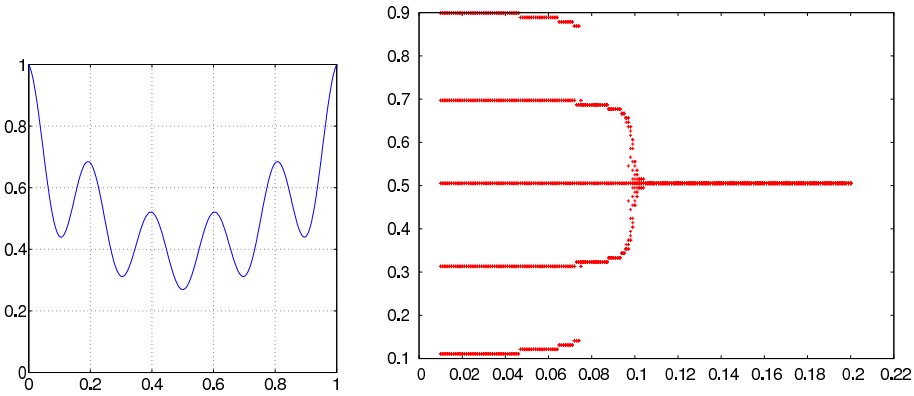
Figure 10.3 – Position de l'interface pour la donnée initiale H_{x_0} (à gauche) et pour la solution stationnaire $\phi^\infty_{x_0}$ (à droite).

La figure 10.4 présente les courbes $x_\infty(\varepsilon)$ obtenues pour différents choix de f.

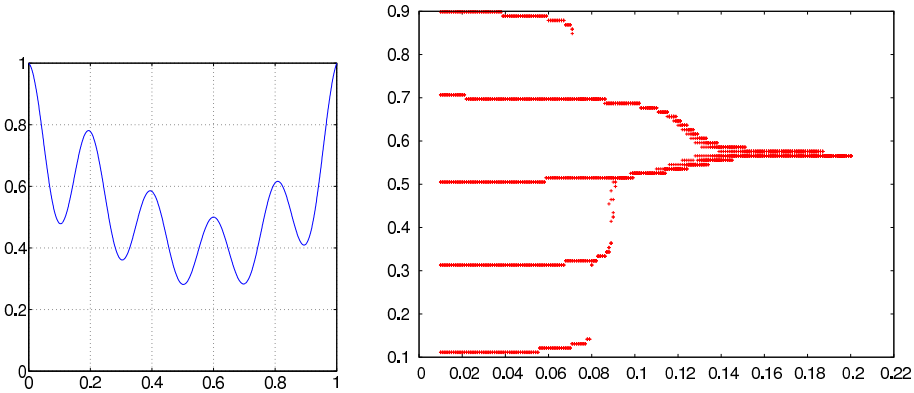
Le premier choix de f est, à une constante multiplicative près, le même que celui de la figure 10.1. Il est donc normal de retrouver une courbe $x_\infty(\varepsilon)$ similaire à la courbe des abscisses sur la figure 10.2. En effet, la fonction $\phi^\infty_{x_0}$ devant rendre E_ε minimale, elle va naturellement « placer » sa transition à l'endroit où f est minimale, comme sur la figure 10.3. Quand ε est petit, $\phi^\infty_{x_0}$ ne « voit » que le minimum de f le plus proche de x_0. C'est pourquoi cinq valeurs différentes de x_∞ sont d'abord observées. Ensuite, quand ε augmente, le nombre de valeurs possibles pour x_∞ diminue : on passe à trois valeurs pour $\varepsilon > 0{,}08$, puis à une seule pour $\varepsilon > 0{,}1$. Cette dernière valeur correspond effectivement au minimum global de f.

Pour la fonction f choisie en (b), deux abscisses réalisent le minimum global : 0,5 et 0,7. Pour ε grand, $\phi^\infty_{x_0}$ n'arrive pas à « choisir » entre ces deux valeurs, et sa transition x_∞ se situe aux alentours de 0,6, c'est-à-dire entre les deux minima. Le fait que x_∞ s'approche de 0,5 pour ε vraiment grand est un effet dû à la taille du domaine : la zone d'interface étant très étalée, l'abscisse de transition va forcément se rapprocher du milieu de la boîte de calcul. En pratique, nous avons effectué nos simulations sur le domaine $[-1,2]$, de sorte à « laisser de la place » à la zone d'interface en dehors de $[0,1]$. Pour les plus grandes valeurs de ε, il aurait fallu choisir un domaine encore plus étendu pour éviter les effets du bord.

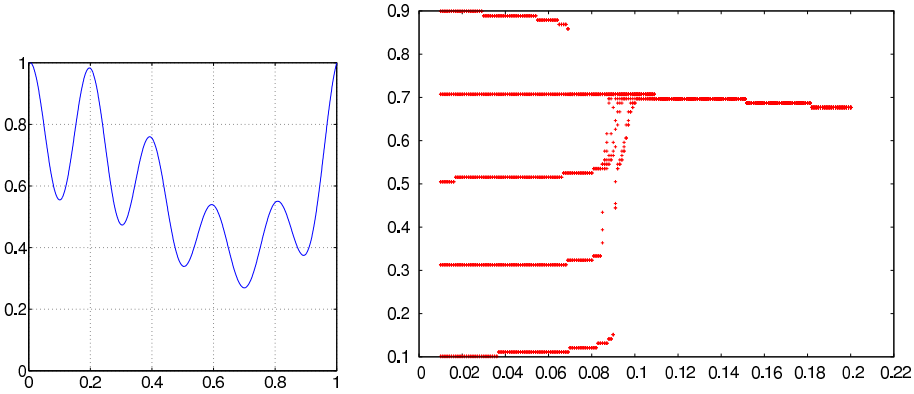
Pour la troisième fonction f, le minimum global est atteint uniquement en 0,7. C'est effectivement la seule valeur de x_∞ observée pour $\varepsilon > 0{,}1$. Là encore, cette



(a) Minimum global de f en 0,5



(b) Minimum global de f en 0,5 et 0,7



(c) Minimum global de f en 0,7

Figure 10.4 – Tracé de x_∞ en fonction de ε, pour différentes fonctions f.

valeur va descendre vers 0,5 à cause des effets du bord du domaine.

En résumé, pour des oscillations de l'ordre de celles présentes sur la figure 10.4, il semble qu'une valeur de ε d'environ 0,1 permette d'isoler le minimum global, lorsque celui-ci est atteint en un point unique.

Un objectif intéressant serait de réussir à déterminer la plus petite valeur de ε permettant de trouver le minimum global, en fonction des caractéristiques connues sur la fonction f — par exemple l'amplitude et la fréquence des oscillations dans le cas modèle d'une perturbation sinusoïdale. Cet objectif fait partie des perspectives que nous évoquons dans la conclusion de ce manuscrit.

Conclusion et perspectives

Les sujets abordés dans ce travail de thèse concernent essentiellement les aspects de modélisation et de simulation numérique.

Dans la première partie, nous démontrons les possibilités de notre code de calcul pour le déplacement d'interfaces. Les difficultés pratiques qui peuvent se poser dans ce domaine sont ici gérées simplement. La méthode de champ de phase permet, avec sa description implicite des surfaces, de traiter les changements de topologie de manière transparente. La conservation du volume est assurée par l'ajout d'un terme non local dans l'équation, et ne nécessite pas de paramètre supplémentaire, contrairement par exemple à la pénalisation. Le transport par un champ extérieur est effectué à l'aide d'une méthode des caractéristiques donnant de bons résultats en pratique. Son implémentation dans RHEOLEF a permis d'effectuer, entre autres, des simulations numériques d'avalanches [43, 42]. Le mouvement par courbure moyenne anisotrope est simulé grâce à un schéma totalement explicite. Celui-ci a permis de retrouver les résultats de Bellettini et ses collaborateurs dans le cas difficile d'anisotropies non convexes [9, 57].

Des travaux sur l'anisotropie sont actuellement en cours. Nous cherchons à comparer notre approche à celle développée par Elie Bretin dans la thèse qu'il effectue actuellement sous la direction d'Éric Bonnetier et Valérie Perrier. Sa méthode repose sur un *splitting* d'opérateur pour l'équation d'Allen–Cahn anisotrope : l'opérateur de diffusion est linéarisé et traité dans le domaine de Fourier, tandis que l'opérateur de réaction est, comme pour nous, géré de manière explicite.

Dans le domaine des perspectives, l'implémentation d'un schéma pour la résolution de l'équation de Cahn–Hilliard complèterait le panel des mouvements d'interfaces que notre code permet de traiter. Cette équation est utilisée pour simuler le mouvement par diffusion de surface, et elle assure en particulier une conservation locale du volume. Il serait intéressant, dans nos applications, de comparer cette conservation locale à la conservation globale de l'équation d'Allen–Cahn non locale. Du point de vue de la modélisation, le mouvement par diffusion de surface est sans doute plus proche de la physique que le mouvement par courbure moyenne conservé. C'est en tout cas lui que l'on retrouve dans la majorité des travaux en croissance cristalline. Il est par exemple utilisé par Dornel, Barbé et leurs collaborateurs dans un modèle de démouillage des films solides [31]. Nous pourrions comparer nos résultats avec les leurs, et ensuite envisager d'étendre leurs simulations au cas tridimensionnel, cas actuellement rendu difficile par leur gestion explicite de la surface.

Concernant l'instabilité de Grinfeld, nos résultats numériques ont permis d'étudier plus en détail le modèle introduit par Bonnetier et Chambolle [10]. Nous avons pu vérifier en pratique l'existence, pour ce modèle, d'une épaisseur critique de film K_c à partir de laquelle l'instabilité apparaît. Nous avons également étudié la dépendance de cette épaisseur critique au paramètre ε de l'approximation par champ de phase. Un de nos objectifs à court terme est de réussir à démontrer rigoureusement un résultat de stabilité de la forme plate pour les épaisseurs inférieures à K_c.

Le modèle que nous introduisons au chapitre 8 ouvre de nouvelles perspectives intéressantes. Du point de vue physique, l'ajout de l'élasticité du substrat permet une modélisation plus réaliste de l'interaction avec le film. Nous avons pu constater la richesse des formes d'équilibre obtenues. Il devrait être possible de faire intervenir, en plus de la différence de maille, la différence d'orientation entre le réseau du film et celui du substrat. Il est clair, en tout cas, que ce nouveau modèle peut être encore largement exploité.

Dans l'objectif de proposer un modèle dynamique, l'équation de Cahn–Hilliard apporterait indéniablement un plus, puisque, comme nous l'avons dit plus haut, le mouvement par diffusion de surface est celui qui correspond le mieux à la physique du problème.

Pour ce qui du modèle sur la croissance de marches et l'évolution des surfaces vicinales, nous devons poursuivre notre travail avec Olivier Pierre-Louis. Nous comptons proposer un modèle permettant de faire intervenir l'orientation des marches par rapport à celle des surfaces vicinales. Nous pourrions ainsi améliorer la modélisation actuelle, dans laquelle nous avons recours à un quadrillage artificiel, dirigé uniquement suivant Ox et Oy.

Bien que très succinte, la présentation faite au chapitre 10 sur la question de l'optimisation globale par champ de phase permet d'entrevoir de nombreuses possibilités. Il va sans dire que l'optimisation globale est un sujet très difficile. Les quelques méthodes pratiques dont nous disposons doivent, la plupart du temps, être utilisées de façon heuristique. Les premiers tests effectués, dans le chapitre 9, sur notre algorithme inspiré du recuit simulé semblent encourageants. Parvenir à donner des conditions assurant la convergence vers le minimum global, même dans des cas très particuliers, serait une grande satisfaction. Nous avons commencé à essayer d'étudier, par des calculs explicites, le cas d'une fonction à minimiser constante par morceaux.

Nous terminons cette conclusion par une remarque sur le code de calcul. Un soin tout particulier a été apporté à cet aspect. Nous avons systématiquement fait en sorte de créer des outils aussi clairs, flexibles et facilement modifiables que possible. Nous avons, bien évidemment, profité des avantages apportés par RHEOLEF : les fichiers de programme sont courts et très compréhensibles. Ils sont tous documentés. Le même code est utilisé pour les calculs 2D et 3D, ainsi que pour les différents types

d'éléments. Il est possible de traiter des géométries complexes, générées par exemple par le mailleur BAMG de FREEFEM++.

Des exemples minimaux de programmes pour les mouvements d'interfaces seront prochainement intégrés à la documentation de RHEOLEF [95].

Bibliographie

[1] G. Alberti. Variational models for phase transitions, an approach via γ-convergence. In *Calculus of variations and partial differential equations*. Springer, 2000.

[2] G. Allaire. *Conception optimale de structures*. Springer, 2007.

[3] S. M. Allen and J. W. Cahn. A microscopic theory for antiphase boundary motion and its application to antiphase domain coarsening. *Acta Metall.*, 27:1085–1095, 1979.

[4] L. Ambrosio. Geometric evolution problems, distance function and viscosity solutions. In *Calculus of variations and partial differential equations*. Springer, 2000.

[5] L. Ambrosio and N. Dancer. *Calculus of variations and partial differential equations*. Springer, 2000.

[6] R. J. Asaro and W. A. Tiller. Interface morphology development during stress corrosion cracking: Part i. via surface diffusion. *Metall. Trans.*, 3:1789–1796, 1972.

[7] G. Bellettini. Variational approximation of functionals with curvatures and related properties. *J. Convex Anal.*, 4(1):91–108, 1997.

[8] G. Bellettini and M. Paolini. Quasi-optimal error estimates for the mean curvature flow with a forcing term. *Differential Integral Equations*, 8:735–752, 1995.

[9] G. Bellettini and M. Paolini. Anisotropic motion by mean curvature in the context of Finsler geometry. *Hokkaido Math. J.*, 25(3):537–566, 1996.

[10] E. Bonnetier and A. Chambolle. Computing the equilibrium configuration of epitaxially strained crystalline films. *SIAM J. Appl. Math.*, 62:1093–1121, 2002.

[11] E. Bonnetier, R. S. Falk, and M. A. Grinfeld. Analysis of a one-dimensional variational model of the equilibrium shape of a deformable crystal. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 33:573–591, 1999.

[12] A. Braides. Γ-*convergence for beginners*. Oxford University Press, 2002.

[13] 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.

[14] L. Bronsard and B. Stoth. Volume-preserving mean curvature flow as a limit of a nonlocal ginzburg–landau equation. *SIAM J. Math. Anal.*, 28(4):769–807, 1997.

[15] E. Burman, D. Kessler, and J. Rappaz. Convergence of the finite element method applied to an anisotropic phase-field model. *Ann. Math. Blaise Pascal*, 11(1):67–94, 2004.

[16] E. Burman and M. Picasso. Anisotropic, adaptive finite elements for the computation of a solutal dendrite. *Interfaces Free Bound.*, 5(2):103–127, 2003.

[17] E. Burman, M. Picasso, and J. Rappaz. Analysis and computation of dendritic growth in binary alloys using a phase-field model. In *Numerical mathematics and advanced applications*, pages 204–220. Springer, 2004.

[18] W. K. Burton, N. Cabrera, and F. C. Frank. The growth of crystals and the equilibrium structure of their surfaces. *Philos. Trans. R. Soc. London, Ser. A*, 243:299–358, 1951.

[19] J. W. Cahn, C. M. Elliott, and A. Novick-Cohen. The Cahn–Hilliard equation with a concentration dependent mobility: motion by minus the Laplacian of the mean curvature. *European J. Appl. Math.*, 7(3):287–301, 1996.

[20] X. Chen. Generation and propagation of interfaces for reaction-diffusion equations. *J. Differential Equations*, 96:116–141, 1992.

[21] X. Chen, C. M. Elliott, A. Gardiner, and J. J. Zhao. Convergence of numerical solutions to the allen–cahn equation. *Appl. Anal.*, 69:47–56, 1998.

[22] Y.-G. Chen, Y. Giga, and S. Goto. Uniqueness and existence of viscosity solutions of generalized mean curvature flow equations. *J. Differential Geom.*, 33(3):749–786, 1991.

[23] Z. M. Chen and K.-H. Hoffmann. An error estimate for a finite-element scheme for a phase field model. *IMA J. Numer. Anal.*, 14(2):243–255, 1994.

[24] T. A. Davis. Algorithm 832: Umfpack v4.3 — an unsymmetric-pattern multifrontal method. *ACM Trans. Math. Software*, 30:196–199, 2004.

[25] P. de Mottoni and M. Schatzman. Évolution géométrique d'interfaces. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 309(7):453–458, 1989.

[26] P. de Mottoni and M. Schatzman. Geometrical evolution of developed interfaces. *Trans. Amer. Math. Soc.*, 347:1533–1589, 1995.

[27] K. Deckelnick and G. Dziuk. On the approximation of the curve shortening flow. In *Calculus of variations, applications and computations (Pont-à-Mousson, 1994)*. Longman Sci. Tech., 1995.

[28] K. Deckelnick and G. Dziuk. Discrete anisotropic curvature flow of graphs. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 33:1203–1222, 1999.

[29] K. Deckelnick and G. Dziuk. Error estimates for a semi implicit fully discrete finite element scheme for the mean curvature flow of graphs. *Interfaces Free Bound.*, 2:341–359, 2000.

[30] K. Deckelnick, G. Dziuk, and C. M. Elliott. Computation of geometric partial differential equations and mean curvature flow. *Acta Numer.*, 14:139–232, 2005.

[31] E. Dornel, J.-C. Barbé, F. de Crécy, G. Lacolle, and J. Eymery. Surface diffusion dewetting of thin solid films: Numerical method and application to Si/SiO_2. *Phys. Rev. B*, 73:115427, 2006.

[32] G. Dziuk. Convergence of semi-discrete scheme for the curve shortening flow. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 4:589–606, 1994.

[33] C. M. Elliott. Approximation of curvature dependent interface motion. In *State of the art in numerical analysis*. Oxford University Press, 1997.

[34] C. M. Elliott and D. A. French. Numerical studies of the cahn–hilliard equation for phase separation. *IMA J. Appl. Math.*, 38(2):97–128, 1987.

[35] C. M. Elliott, D. A. French, and F. A. Milner. A second order splitting method for the cahn–hilliard equation. *Numer. Math.*, 54:575–590, 1989.

[36] C. M. Elliott and A. R. Gardiner. Double obstacle phase field computations of dendritic growth. Technical report, University of Sussex CMAIA Research report, 1996.

[37] C. M. Elliott, A. R. Gardiner, and T. Kuhn. Generalized double obstacle phase field approximation of the anisotropic mean curvature flow. Technical report, University of Sussex CMAIA Research report, 1996.

[38] C. M. Elliott and S. Larsson. Error estimates with smooth and nonsmooth data for a finite element method for the Cahn–Hilliard equation. *Mathematics of Computation*, 58:603–630, 1992.

[39] C. M. Elliott, M. Paolini, and R. Schätzle. Interface estimates for the fully anisotropic Allen-Cahn equation and anisotropic mean-curvature flow. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 6(8):1103–1118, 1996.

[40] C. M. Elliott and R. Schätzle. The limit of the fully anisotropic double-obstacle Allen-Cahn equation in the nonsmooth case. *SIAM J. Math. Anal.*, 28(2):274–303, 1997.

[41] C. M. Elliott and A. M. Stuart. The global dynamics of discrete semilinear parabolic equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 30:1622–1663, 1993.

[42] J. Etienne, E. J. Hopfinger, and P. Saramito. Numerical simulations of high density ratio lock-exchange flows. *Phys. Fluids*, 17:036601, 2005.

[43] J. Etienne, P. Saramito, and E. J. Hopfinger. Numerical simulation of dense clouds on steep slopes: application to the powder-snow avalanches. *Annals Glaciol.*, 28:379–383, 2004.

[44] L. C. Evans. *Partial differential equations*. Graduate Studies in Mathematics 19, 1998.

[45] L. C. Evans, H. M. Soner, and P. E. Souganidis. Phase transitions and generalized motion by mean curvature. *Commun. Pure Appl. Math.*, 45:1097–1123, 1992.

[46] L. C. Evans and J. Spruck. Motion of level sets by mean curvature I. *J. Differential Geom.*, 33:635–681, 1991.

[47] X. Feng and A. Prohl. Numerical analysis of the Allen–Cahn equation and approximation for mean curvature flows. *Numer. Math.*, 94:33–65, 2003.

[48] F. Fierro, R. Goglione, and M. Paolini. Finite element minimization of curvature functionals with anisotropy. *Calcolo*, 31(3-4):191–210 (1996), 1994.

[49] F. Fierro, R. Goglione, and M. Paolini. Numerical simulations of mean curvature flow in the presence of a nonconvex anisotropy. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 8(4):573–601, 1998.

[50] M. Gage. On an area-preserving evolution equation for plane curves. *Contemporary Mathematics*, 51:51–62, 1986.

[51] M. Gage and R. S. Hamilton. The heat equation shrinking convex plane curves. *J. Differential Geom.*, 23:69–96, 1986.

[52] M. E. Gage. Evolving plane curves by curvature in relative geometries. *Duke Math. J.*, 72(2):441–466, 1993.

[53] M. E. Gage and Y. Li. Evolving plane curves by curvature in relative geometries. II. *Duke Math. J.*, 75(1):79–98, 1994.

[54] H. Gao and W. D. Nix. Surface roughening of heteroepitaxial thin films. *Ann. Rev. Mater. Sci.*, 29:173–209, 1999.

[55] H. Garcke. *On mathematical models for phase separation in elastically stressed solids*. PhD thesis, University of Bonn, 2000.

[56] E. Giusti. *Minimal surfaces and functions of bounded variation*. Birkhäuser, Boston, 1984.

[57] R. Goglione and M. Paolini. Numerical simulations of crystalline motion by mean curvature with Allen–Cahn relaxation. In *Free boundary problems, theory and applications (Zakopane, 1995)*, volume 363 of *Pitman Res. Notes Math. Ser.*, pages 203–216. Longman, Harlow, 1996.

[58] M. A. Grayson. The heat equation shrinks embedded plane curves to round points. *J. Differential Geom.*, 26:285–314, 1987.

[59] M. A. Grayson. A short note on the evolution of a surface by its mean curvature. *Duke Math. J.*, 58:555–558, 1989.

[60] M. A. Grinfeld. The stress driven instability in elastic crystals: Mathematical models and physical manifestations. *Journal of Nonlinear Science*, 3:35–83, 1993.

[61] J. Hadamard. *Mémoire sur le problème d'analyse relatif à l'équilibre des plaques élastiques encastrées*. Mém. Sav. étrang. (2) 33, Nr. 4, 128 S, 1907.

[62] F. Hecht. Bamg: Bidimensional anisotropic mesh generator. http://www-c.inria.fr/gamma/cdrom/www/bamg/fra.htm.

[63] A. Henrot and M. Pierre. *Variation et optimisation de formes*. Springer, 2005.

[64] E. Huisken. Flow by mean curvature of convex surfaces into spheres. *J. Differential Geom.*, 20:237–266, 1984.

[65] J. Jost and X. Li-Jost. *Calculus of Variations*. Cambridge University Press, 1999.

[66] K. Kassner and C. Misbah. Non-linear evolution of a uniaxially stressed solid: a route to fracture ? *Europhys. Lett.*, 28:245–250, 1994.

[67] K. Kassner and C. Misbah. A phase-field approach for stress-induced instabilities. *Europhys. Lett.*, 46:217–223, 1999.

[68] K. Kassner, C. Misbah, J. Müller, J. Kappey, and P. Kohlert. Phase-field modeling of stress-induced instabilities. *Phys. Rev. E*, 63(3):036117, Feb 2001.

[69] R. V. Kohn and X. Yan. Upper bound on the coarsening rate for an epitaxial growth model. *Comm. Pure Appl. Math.*, 56(11):1549–1564, 2003.

[70] R. V. Kohn and X. Yan. Coarsening rates for models of multicomponent phase separation. *Interfaces Free Bound.*, 6(1):135–149, 2004.

[71] T. S. Lo and R. V. Kohn. A new approach to the continuum modeling of epitaxial growth: slope selection, coarsening, and the role of the uphill current. *Phys. D*, 161(3-4):237–257, 2002.

[72] I. V. Markov. *Crystal Growth for Beginners: Fundamentals of Nucleation, Crystal Growth and Epitaxy*. World Scientific, 2004.

[73] G. B. McFadden, A. A. Wheeler, R. J. Braun, S. R. Coriell, and R. F. Sekerka. Phase-field models for anisotropic interfaces. *Phys. Rev. E (3)*, 48(3):2016–2024, 1993.

[74] L. Modica. The gradient theory of phase transitions and the minimal interface criterion. *Arch. Ration. Mech. Anal.*, 98:123–142, 1987.

[75] L. Modica and S. Mortola. Il limite nella Γ-convergenza di una famiglia di funzionali ellittici. *Boll. Un. Mat. Ital. A (5)*, 14:526–529, 1977.

[76] J. Müller and M. Grant. Model of surface instabilities induced by stress. *Phys. Rev. Lett.*, 82:1736–1739, 1999.

[77] R. H. Nochetto, M. Paolini, and C. Verdi. Sharp error analysis for curvature dependent evolving front. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 3:711–723, 1993.

[78] R. H. Nochetto, M. Paolini, and C. Verdi. Optimal interface error estimates for the mean curvature flow. *Ann. Sc. Norm. Super. Pisa Cl. Sci.*, 21:193–212, 1994.

[79] R. H. Nochetto, M. Paolini, and C. Verdi. A dynamic mesh algorithm for curvature dependent evolving interfaces. *J. Comput. Phys.*, 123:296–310, 1996.

[80] R. H. Nochetto, S. Rovida, M. Paolini, and C. Verdi. Variational approximation of the geometric motion of fronts. In *Motion by mean curvature and related topics*, pages 124–149, Berlin, 1994. de Gruyter.

[81] R. H. Nochetto and C. Verdi. Combined effect of explicit time-stepping and quadrature for curvature driven flows. *Numer. Math.*, 74(1):105–136, 1996.

[82] R. H. Nochetto and C. Verdi. Convergence of double obstacle problems to the geometric motions of fronts. *SIAM J. Math. Anal.*, 26:1514–1526, 1996.

[83] R. H. Nochetto and C. Verdi. Convergence past singularities for a fully discrete approximation of curvature-driven interfaces. *SIAM J. Numer. Anal.*, 34(2):490–512, 1997.

[84] P. Nozières. Shape and growth of crystals. In *Solids far from equilibrium*. Cambridge University Press, 1991.

[85] P. Nozières. Amplitude expansion for the grinfeld instability due to uniaxial stress at a solid surface. *Journal de Physique I*, 3:681–686, 1993.

[86] S. Osher and R. Fedkiw. *Level set methods and dynamic implicit surfaces*, volume 153 of *Applied Mathematical Sciences*. Springer-Verlag, New York, 2003.

[87] S. Osher and J. A. Sethian. Fronts propagating with curvature-dependent speed: algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. *J. Comput. Phys.*, 79(1):12–49, 1988.

[88] M. Paolini. A quasi-optimal error estimate for a discrete singularly perturbed approximation to the prescribed curvature problem. *Math. Comp.*, 66:45–67, 1997.

[89] O. Pierre-Louis. Phase field models for step flow. *Physical Review E (Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics)*, 68(2):021604, 2003.

[90] O. Pironneau. *Optimal shape design for elliptic systems*. Springer-Verlag, 1984.

[91] O. Pironneau, F. Hecht, and A. L. Hyaric. Freefem++. http://www.freefem.org/ff++/.

[92] P.-A. Raviart and J.-M. Thomas. *Introduction à l'analyse numérique des équations aux dérivées partielles*. Masson, 1983.

[93] J. Rubinstein and P. Sternberg. Nonlocal reaction-diffusion equations and nucleation. *IMA Journal of Applied Mathematics*, 48:249–264, 1992.

[94] J. Rubinstein, P. Sternberg, and J. Keller. Fast reaction, slow diffusion and curve shortening. *SIAM J. Appl. Math.*, 49:116–133, 1989.

[95] P. Saramito, N. Roquet, and J. Etienne. Rheolef home page. http://ljk.imag.fr/membres/Pierre.Saramito/rheolef/.

[96] P. Saramito, N. Roquet, and J. Etienne. Rheolef reference manual. Technical report, LMC-IMAG, 2002. http://ljk.imag.fr/membres/Pierre.Saramito/rheolef/rheolef.pdf.

[97] A. Schmidt. Computation of three dimensional dendrites with finite elements. *J. Comput. Phys.*, 125(2):293–312, 1996.

[98] L. J. Schowalter. Heteroepitaxy and strain: Applications to electronic and optoelectronic materials. *MRS Bulletin*, 21:18–20, 1996.

[99] V. A. Shchukin and D. Bimberg. Spontaneous ordering of nanostructures on crystal surfaces. *Rev. Mod. Phys.*, 71:1125–1171, 1999.

[100] J. Simon. Differentiation with respect to the domain in boundary value problems. *Numer. Funct. Anal. Optim.*, 2(7-8):649–687, 1980.

[101] J. Simon. Variations with respect to domain for neumann condition. In *Proceedings of the 4th IFAC Symposium "Control of distributed parameter systems"*, 1986.

[102] J. Simon. Différentiation de problèmes aux limites par rapport au domaine. Technical report, Université de Séville, 1991.

[103] J. Sokołowski and J.-P. Zolésio. *Introduction to shape optimization*, volume 16 of *Springer Series in Computational Mathematics*. Springer-Verlag, 1992.

[104] B. J. Spencer and D. L. Meiron. Nonlinear evolution of stress–driven morphologicalinstability in a two-dimensional semi–infinite solid. *Acta metall. mater.*, 42(11):3629–3641, 1994.

[105] B. J. Spencer and J. Tersoff. Equilibrium shapes of islands in epitaxially strained solid films. In K. G. et al., editor, *Mathematics of Multiscale laterials*, IMA Proceedings, pages 255–269. Springer, 1998.

[106] B. J. Spencer, P. W. Voorhees, and S. H. Davis. Morphological instability in epitaxially strained dislocation-free solid films. *Phys. Rev. Lett.*, 67:3696–3699, 1991.

[107] B. J. Spencer, P. W. Voorhees, and S. H. Davis. Morphological instability in epitaxially strained dislocation-free solid films: Linear stability theory. *J. Appl. Phys.*, 73:4955–4970, 1993.

[108] J. Villain and A. Pimpinelli. *Physique de la croissance cristalline*. Eyrolles, 1999.

[109] A. A. Wheeler and G. B. McFadden. A ξ-vector formulation of anisotropic phase-field models: 3D asymptotics. *European J. Appl. Math.*, 7(4):367–381, 1996.