# Méthode volumes finis pour des équations de Cahn-Hilliard avec surfactants CANUM 2024

Margherita Castellano<sup>1</sup>

<sup>1</sup>CMAP - école polytechnique

28 mai 2024

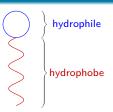
Directeurs de thèse : Ludovic Goudenège et Flore Nabet





Margherita Castellano

- Structure amphipathique
- Exemples de surfactants : savon, membrane cellulaire



CMAP - école polytechnique

- Structure amphipathique
- Exemples de surfactants : savon, membrane cellulaire

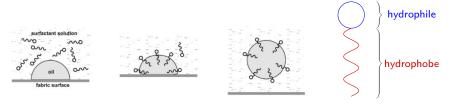


Figure: ESSENTIAL CHEMICAL INDUSTRY 2024



## Les surfactants

- Structure amphipathique
- Exemples de surfactants : savon, membrane cellulaire







Figure: ESSENTIAL CHEMICAL INDUSTRY 2024



Figure : NICOLSON et MATTOS 2021



hydrophile

hydrophobe

CMAP - école polytechnique

### Les surfactants

- Structure amphipathique
- Exemples de surfactants : savon, membrane cellulaire

Méthode volumes finis pour des équations de Cahn-Hilliard avec surfactants

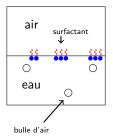




Figure : NICOLSON et MATTOS 2021



air

eau

bulle d'air

surfactant

#### Les surfactants

- Structure amphipathique
- Exemples de surfactants : savon, membrane cellulaire

Méthode volumes finis pour des équations de Cahn-Hilliard avec surfactants

#### Utilisation des surfactants :

- applications en micro fluidique ( LIU et ZHANG 2010)
  - imagerie micro cellulaire
  - administration de médicaments
  - libération contrôlée ou protection de certains ingrédients (probiotiques) (Zychowski 2015)
- modélisation de la propagation des cellules cancereuses (Cahn Hilliard + Navier Stokes) (ELBAR et POULAIN 2023)



Figure: NICOLSON et MATTOS 2021





On cherche  $\phi:(0,T)\times\Omega\to\mathbb{R}^N$  tel que

Méthode volumes finis pour des équations de Cahn-Hilliard avec surfactants

$$\begin{cases} \partial_t \phi = \Delta \mu \\ \mu = -\epsilon_{\phi} \Delta \phi + \frac{1}{\epsilon_{\phi}} f'_{\phi}(\phi) \\ \nabla \phi \cdot \vec{n} = \nabla \mu \cdot \vec{n} = 0, \quad B.C. \end{cases}$$

On cherche  $\phi:(0,T)\times\Omega\to\mathbb{R}$  et  $c:(0,T)\times\Omega\to\mathbb{R}$ , telles que

$$\begin{cases} \partial_t \phi = \Delta \mu \\ \mu = -\epsilon_{\phi} \Delta \phi + \frac{1}{\epsilon_{\phi}} f'_{\phi}(\phi) \\ \partial_t c = \Delta \eta \\ \eta = -\epsilon_c \Delta c + \frac{1}{\epsilon_c} f'_{c}(c) \\ \nabla \phi \cdot \vec{\boldsymbol{n}} = \nabla c \cdot \vec{\boldsymbol{n}} = \nabla \mu \cdot \vec{\boldsymbol{n}} = \nabla \eta \cdot \vec{\boldsymbol{n}} = 0, \quad B.C. \end{cases}$$

On cherche  $\phi:(0,T)\times\Omega\to\mathbb{R}$  et  $c:(0,T)\times\Omega\to\mathbb{R}$ , telles que

$$\begin{cases} \partial_t \phi = \Delta \mu \\ \mu = -\epsilon_{\phi} \Delta \phi + \frac{1}{\epsilon_{\phi}} f'_{\phi}(\phi) \\ \partial_t c = \Delta \eta \\ \eta = -\epsilon_c \Delta c + \frac{1}{\epsilon_c} f'_{c}(c) \\ \nabla \phi \cdot \vec{\boldsymbol{n}} = \nabla c \cdot \vec{\boldsymbol{n}} = \nabla \mu \cdot \vec{\boldsymbol{n}} = \nabla \eta \cdot \vec{\boldsymbol{n}} = 0, \quad B.C. \end{cases}$$

où  $f_{\phi}$  et  $f_{c}$  sont les potentiels double puits classiques de Cahn-Hilliard,

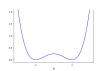
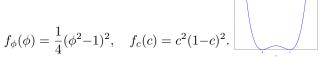


Figure : Potentiel  $\phi$ 



Margherita Castellano **CANUM 2024** CMAP - école polytechnique

#### On cherche $\phi:(0,T)\times\Omega\to\mathbb{R}$ et $c:(0,T)\times\Omega\to\mathbb{R}$ , telles que

$$\begin{cases} \partial_t \phi = \Delta \mu \\ \mu = -\epsilon_{\phi} \Delta \phi + \frac{1}{\epsilon_{\phi}} f'_{\phi}(\phi) + \partial_{\phi} F(\phi, c) \\ \partial_t c = \Delta \eta \\ \eta = -\epsilon_c \Delta c + \frac{1}{\epsilon_c} f'_{c}(c) + \partial_c F(\phi, c) \\ \nabla \phi \cdot \vec{n} = \nabla c \cdot \vec{n} = \nabla \mu \cdot \vec{n} = \nabla \eta \cdot \vec{n} = 0, \quad B.C. \end{cases}$$

où  $f_{\phi}$  et  $f_{c}$  sont les potentiels double puits classiques de Cahn-Hilliard,

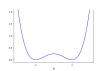
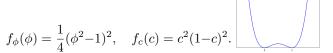


Figure : Potentiel  $\phi$ 



Margherita Castellano **CANUM 2024** CMAP - école polytechnique

On cherche  $\phi:(0,T)\times\Omega\to\mathbb{R}$  et  $c:(0,T)\times\Omega\to\mathbb{R}$ , telles que

$$\begin{cases} \partial_t \phi = \Delta \mu \\ \mu = -\epsilon_\phi \Delta \phi + \frac{1}{\epsilon_\phi} f'_\phi(\phi) + \partial_\phi F(\phi, c) \\ \partial_t c = \Delta \eta \\ \eta = -\epsilon_c \Delta c + \frac{1}{\epsilon_c} f'_c(c) + \partial_c F(\phi, c) \end{cases}$$

où F est le potentiel de couplage,

Méthode volumes finis pour des équations de Cahn-Hilliard avec surfactants

$$F(\phi, c) = \beta \phi^{2} c - \gamma \phi^{3} c - \alpha |\nabla \phi|^{2} c + \delta |\nabla \phi|^{4}.$$

$$\hookrightarrow \partial_{\phi} F(\phi, c) = 2\beta \phi c - 3\gamma \phi^{2} c + 2\alpha \nabla \cdot (c \nabla \phi) - \delta \nabla \cdot (\nabla \phi)^{3},$$

$$\hookrightarrow \partial_{c} F(\phi, c) = -\alpha |\nabla \phi|^{2} + \beta \phi^{2} - \gamma \phi^{3}.$$



On cherche  $\phi:(0,T)\times\Omega\to\mathbb{R}$  et  $c:(0,T)\times\Omega\to\mathbb{R}$ , telles que

$$\begin{cases} \partial_t \phi = \Delta \mu \\ \mu = -\epsilon_\phi \Delta \phi + \frac{1}{\epsilon_\phi} f'_\phi(\phi) + \partial_\phi F(\phi, c) \\ \partial_t c = \Delta \eta \\ \eta = -\epsilon_c \Delta c + \frac{1}{\epsilon_c} f'_c(c) + \partial_c F(\phi, c) \end{cases}$$

où F est le potentiel de couplage.

$$F(\phi, c) = \frac{\beta \phi^2 c}{c} - \gamma \phi^3 c - \alpha |\nabla \phi|^2 c + \delta |\nabla \phi|^4.$$

$$\hookrightarrow \partial_{\phi} F(\phi, c) = 2\beta \phi c - 3\gamma \phi^2 c + 2\alpha \nabla \cdot (c \nabla \phi) - \delta \nabla \cdot (\nabla \phi)^3,$$

$$\hookrightarrow \partial_c F(\phi, c) = -\alpha |\nabla \phi|^2 + \beta \phi^2 - \gamma \phi^3.$$



On cherche  $\phi:(0,T)\times\Omega\to\mathbb{R}$  et  $c:(0,T)\times\Omega\to\mathbb{R}$ , telles que

$$\begin{cases} \partial_t \phi = \Delta \mu \\ \mu = -\epsilon_\phi \Delta \phi + \frac{1}{\epsilon_\phi} f'_\phi(\phi) + \partial_\phi F(\phi, c) \\ \partial_t c = \Delta \eta \\ \eta = -\epsilon_c \Delta c + \frac{1}{\epsilon_c} f'_c(c) + \partial_c F(\phi, c) \end{cases}$$

où F est le potentiel de couplage,

$$F(\phi, c) = \beta \phi^{2} c - \gamma \phi^{3} c - \alpha |\nabla \phi|^{2} c + \delta |\nabla \phi|^{4}.$$

$$\hookrightarrow \partial_{\phi} F(\phi, c) = 2\beta \phi c - 3\gamma \phi^{2} c + 2\alpha \nabla \cdot (c \nabla \phi) - \delta \nabla \cdot (\nabla \phi)^{3},$$

$$\hookrightarrow \partial_{c} F(\phi, c) = -\alpha |\nabla \phi|^{2} + \beta \phi^{2} - \gamma \phi^{3}.$$



#### Illouele

On cherche  $\phi:(0,T)\times\Omega\to\mathbb{R}$  et  $c:(0,T)\times\Omega\to\mathbb{R}$ , telles que

$$\begin{cases} \partial_t \phi = \Delta \mu \\ \mu = -\epsilon_\phi \Delta \phi + \frac{1}{\epsilon_\phi} f'_\phi(\phi) + \partial_\phi F(\phi, c) \\ \partial_t c = \Delta \eta \\ \eta = -\epsilon_c \Delta c + \frac{1}{\epsilon_c} f'_c(c) + \partial_c F(\phi, c) \end{cases}$$

où F est le potentiel de couplage,

$$F(\phi, c) = \beta \phi^{2} c - \gamma \phi^{3} c - \alpha |\nabla \phi|^{2} c + \delta |\nabla \phi|^{4}.$$

$$\hookrightarrow \partial_{\phi} F(\phi, c) = 2\beta \phi c - 3\gamma \phi^{2} c + 2\alpha \nabla \cdot (c\nabla \phi) - \delta \nabla \cdot (\nabla \phi)^{3},$$

$$\hookrightarrow \partial_{c} F(\phi, c) = -\alpha |\nabla \phi|^{2} + \beta \phi^{2} - \gamma \phi^{3}.$$



On cherche  $\phi:(0,T)\times\Omega\to\mathbb{R}$  et  $c:(0,T)\times\Omega\to\mathbb{R}$ , telles que

$$\begin{cases} \partial_t \phi = \Delta \mu \\ \mu = -\epsilon_{\phi} \Delta \phi + \frac{1}{\epsilon_{\phi}} f'_{\phi}(\phi) + \partial_{\phi} F(\phi, c) \\ \partial_t c = \Delta \eta \\ \eta = -\epsilon_c \Delta c + \frac{1}{\epsilon_c} f'_{c}(c) + \partial_c F(\phi, c) \end{cases}$$

où F est le potentiel de couplage.

$$F(\phi, c) = \beta \phi^{2} c - \gamma \phi^{3} c - \alpha |\nabla \phi|^{2} c + \delta |\nabla \phi|^{4}.$$

$$\hookrightarrow \partial_{\phi} F(\phi, c) = 2\beta \phi c - 3\gamma \phi^{2} c + 2\alpha \nabla \cdot (c \nabla \phi) - \delta \nabla \cdot (\nabla \phi)^{3},$$

$$\hookrightarrow \partial_{c} F(\phi, c) = -\alpha |\nabla \phi|^{2} + \beta \phi^{2} - \gamma \phi^{3}.$$



On définit l'énergie libre comme suit,

$$\mathcal{E}: H^{1}(\Omega) \times H^{1}(\Omega) \longrightarrow \mathbb{R}$$

$$(\phi, c) \longmapsto \int_{\Omega} \left( \frac{\epsilon_{\phi}}{2} |\nabla \phi|^{2} + \frac{\epsilon_{c}}{2} |\nabla c|^{2} \right) + \int_{\Omega} \left( \frac{1}{\epsilon_{\phi}} f_{\phi}(\phi) + \frac{1}{\epsilon_{c}} f_{c}(c) \right)$$

$$+ \int_{\Omega} F(\phi, c).$$

Dissipation en temps de l'énergie

$$\frac{d}{dt}\mathcal{E}(\phi,c) = -M_0 \int_{\Omega} |\nabla \mu|^2 - N_0 \int_{\Omega} |\nabla \eta|^2 \le 0$$



On définit l'énergie libre comme suit,

$$\mathcal{E}: H^{1}(\Omega) \times H^{1}(\Omega) \longrightarrow \mathbb{R}$$

$$(\phi, c) \longmapsto \int_{\Omega} \left( \frac{3\epsilon_{\phi}}{4} |\nabla \phi|^{2} + \frac{\theta \epsilon_{c}}{2} |\nabla c|^{2} \right) + \int_{\Omega} \left( \frac{12}{\epsilon_{\phi}} f_{\phi}(\phi) + \frac{1}{\epsilon_{c}} f_{c}(c) \right)$$

$$+ \int_{\Omega} (-\alpha |\nabla \phi|^{2} c + \beta \phi^{2} c - \gamma \phi^{3} c + \delta |\nabla \phi|^{4}).$$

On définit l'énergie libre comme suit,

$$\begin{split} \mathcal{E}: H^1(\Omega) \times H^1(\Omega) &\longrightarrow \mathbb{R} \\ (\phi, c) &\longmapsto \int_{\Omega} \left( \frac{3\epsilon_{\phi}}{4} |\nabla \phi|^2 + \frac{\theta \epsilon_c}{2} |\nabla c|^2 \right) + \int_{\Omega} \left( \frac{12}{\epsilon_{\phi}} f_{\phi}(\phi) + \frac{1}{\epsilon_c} f_c(c) \right) \\ &+ \int_{\Omega} (-\alpha |\nabla \phi|^2 c + \beta \phi^2 c - \gamma \phi^3 c + \delta |\nabla \phi|^4). \end{split}$$

Le terme de stabilisation permet de minorer l'énergie,

$$-\alpha |\nabla \phi|^2 c + \delta |\nabla \phi|^4 = \delta (|\nabla \phi|^2 - \frac{\alpha}{\delta} c)^2 - \frac{\alpha^2 c^2}{\delta}$$



Modélisation

On définit l'énergie libre comme suit,

$$\begin{split} \mathcal{E}: H^1(\Omega) \times H^1(\Omega) &\longrightarrow \mathbb{R} \\ (\phi, c) &\longmapsto \int_{\Omega} \left( \frac{3\epsilon_{\phi}}{4} |\nabla \phi|^2 + \frac{\theta \epsilon_c}{2} |\nabla c|^2 \right) + \int_{\Omega} \left( \frac{12}{\epsilon_{\phi}} f_{\phi}(\phi) + \frac{1}{\epsilon_c} f_c(c) \right) \\ &+ \int_{\Omega} (-\alpha |\nabla \phi|^2 c + \beta \phi^2 c - \gamma \phi^3 c + \delta |\nabla \phi|^4). \end{split}$$

Le terme de stabilisation permet de minorer l'énergie,

$$-\alpha |\nabla \phi|^2 c + \delta |\nabla \phi|^4 = \delta (|\nabla \phi|^2 - \frac{\alpha}{\delta} c)^2 - \frac{\alpha^2 c^2}{\delta}$$

Hypothèse de dissipativité :

$$f_c(c) \ge \tau_1 c^2 - \tau_2, \quad \tau_1 > 0, \tau_2 \ge 0.$$



## Les volumes finis VF4 en 2D

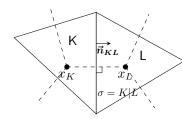
Nous considérons un maillage  $\mathcal{M}$  tel que la condition d'orthogonalité soit vérifiée :  $[x_K, x_L] \perp \sigma = K|L$ .

#### Notations:

- Ensemble d'arêtes intérieures de  $\Omega$ . appartenant au volume  $K: \mathcal{E}_{K}^{int}$
- Distance entre les centres de K et L:  $d_{K,L} = d(x_K, x_L)$
- Vecteur normal sortant à  $K: \vec{n}_{KL}$

Méthode volumes finis pour des équations de Cahn-Hilliard avec surfactants

- Longueur de  $\sigma$ :  $m_{\sigma}$
- Mesure de  $K:m_K$

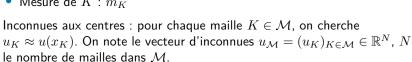


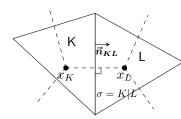
## Les volumes finis VF4 en 2D

Nous considérons un maillage  ${\mathcal M}$  tel que la condition d'orthogonalité soit vérifiée :  $[x_K, x_L] \perp \sigma = K|L$ .

#### Notations:

- Ensemble d'arêtes intérieures de  $\Omega$ . appartenant au volume  $K: \mathcal{E}_{K}^{int}$
- Distance entre les centres de K et L:  $d_{K,L} = d(x_K, x_L)$
- Vecteur normal sortant à  $K: \vec{n}_{KL}$
- Longueur de  $\sigma$ :  $m_{\sigma}$
- Mesure de  $K:m_K$





## Discrétisation du problème

$$\sigma = K|L \in \mathcal{E}^{int}.$$

$$\int_{K} \partial_{t} \phi = \int_{K} \Delta \mu = \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{K}^{int}} - \int_{\sigma} \nabla \mu \cdot \vec{n}_{KL} \quad \forall K \in \mathcal{M}$$

Méthode volumes finis pour des équations de Cahn-Hilliard avec surfactants

## Discrétisation du problème

$$\sigma = K|L \in \mathcal{E}^{int}.$$

$$\int_{K} \partial_{t} \phi = \int_{K} \Delta \mu = \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{K}^{int}} - \int_{\sigma} \nabla \mu \cdot \vec{n}_{KL} \quad \forall K \in \mathcal{M}$$

Condition d'orthogonalité :  $x_L - x_K = d_{K,L} \vec{n}_{KL}$ .

$$\text{Pour } x \in \sigma, \quad \nabla \mu(x) \cdot \vec{\boldsymbol{n}}_{KL} = \frac{\mu(x_L) - \mu(x_K)}{d_{K,L}} + \mathcal{O}(|x_L - x_K|)$$

## Discrétisation du problème

$$\sigma = K|L \in \mathcal{E}^{int}.$$

$$\int_{K} \partial_{t} \phi = \int_{K} \Delta \mu = \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{K}^{int}} - \int_{\sigma} \nabla \mu \cdot \vec{n}_{KL} \quad \forall K \in \mathcal{M}$$

Condition d'orthogonalité :  $x_L - x_K = d_{K,L} \vec{n}_{KL}$ .

$$\text{Pour } x \in \sigma, \quad \nabla \mu(x) \cdot \vec{\boldsymbol{n}}_{KL} = \frac{\mu(x_L) - \mu(x_K)}{d_{K,L}} + \mathcal{O}(|x_L - x_K|)$$

$$\implies -\int_{\sigma} \nabla \mu \cdot \vec{\boldsymbol{n}}_{\sigma} = -m_{\sigma} \frac{\mu(x_L) - \mu(x_K)}{d_{K,L}} + \mathcal{O}(|x_L - x_K|^2)$$

$$\approx -\frac{m_{\sigma}}{d_{K,L}} (\mu(x_L) - \mu(x_K))$$



## Le problème discret

 $\begin{array}{l} \text{Connaissant } (\phi^n_{\mathcal{M}}, c^n_{\mathcal{M}}) \in \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N \text{, trouver} \\ (\phi^{n+1}_{\mathcal{M}}, \mu^{n+1}_{\mathcal{M}}, c^{n+1}_{\mathcal{M}}, \eta^{n+1}_{\mathcal{M}}) \in \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N \text{, tels que, pour tout } K \in \mathcal{M} \text{, on} \end{array}$ 

$$\begin{cases} m_K \frac{(\phi_K^{n+1} - \phi_K^n)}{\Delta t} = -\sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K^{int}} \frac{m_\sigma}{d_{K,L}} (\mu_K^{n+1} - \mu_L^{n+1}), \\ m_K \mu_K^{n+1} = \epsilon_\phi \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K^{int}} \frac{m_\sigma}{d_{K,L}} (\phi_K^{n+1} - \phi_L^{n+1}) + \frac{1}{\epsilon_\phi} m_K d_\phi^{f_\phi} (\phi_K^n, \phi_K^{n+1}) \\ + m_K d_\phi^F (\phi_K^n, \phi_K^{n+1}, c_K^n, c_K^{n+1}), \\ m_K \frac{(c_K^{n+1} - c_K^n)}{\Delta t} = -\sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K^{int}} \frac{m_\sigma}{d_{K,L}} (\eta_K^{n+1} - \eta_L^{n+1}) \\ m_K \eta_K^{n+1} = \epsilon_c \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K^{int}} \frac{m_\sigma}{d_{K,L}} (c_K^{n+1} - c_L^{n+1}) + \frac{1}{\epsilon_c} m_K d_c^{f_c} (c_K^n, c_K^{n+1}) \\ + m_K d_c^F (\phi_K^n, \phi_K^{n+1}), \end{cases}$$

CMAP - école polytechnique

## Estimation d'énergie discrète

# Proposition (Estimation d'énergie discrète)

Soit  $\phi_{\Lambda_A}^n \in \mathbb{R}^N$ ,  $c_{\Lambda_A}^n \in \mathbb{R}^N$ . Supposons qu'il existe une solution  $(\phi_{\mathcal{M}}^{n+1},\mu_{\mathcal{M}}^{n+1},c_{\mathcal{M}}^{n+1},\eta_{\mathcal{M}}^{n+1}) \in \mathbb{R}^{N} \times \mathbb{R}^{N} \times \mathbb{R}^{N} \times \mathbb{R}^{N} \text{ au problème discret. L'égalité}$ suivante est alors verifiée, pour tout pas de temps  $\Delta t$ ,

$$\begin{split} \Delta t |\mu_{\mathcal{M}}^{n+1}|_{1,\mathcal{M}}^2 + \Delta t |\eta_{\mathcal{M}}^{n+1}|_{1,\mathcal{M}}^2 + \mathcal{F}(\phi_{\mathcal{M}}^{n+1},c_{\mathcal{M}}^{n+1}) - \mathcal{F}(\phi_{\mathcal{M}}^n,c_{\mathcal{M}}^n) \\ + \frac{\epsilon_{\phi}}{2} |\phi_{\mathcal{M}}^{n+1} - \phi_{\mathcal{M}}^n|_{1,\mathcal{M}}^2 + \frac{\epsilon_{c}}{2} |c_{\mathcal{M}}^{n+1} - c_{\mathcal{M}}^n|_{1,\mathcal{M}}^2 \\ + \sum_{K \in \mathcal{M}} m_K \left( \frac{1}{\epsilon_{\phi}} \left[ d_{\phi}^{f_{\phi}}(\phi_{K}^n,\phi_{K}^{n+1})(\phi_{K}^{n+1} - \phi_{K}^n) - f_{\phi}(\phi^{n+1}) + f_{\phi}(\phi^n) \right] \right. \\ + \frac{1}{\epsilon_{c}} \left[ d_{c}^{f_{c}}(c_{K}^n,c_{K}^{n+1})(c_{K}^{n+1} - c_{K}^n) - f_{c}(c^{n+1}) + f_{c}(c^n) \right] \\ + d_{\phi}^{F}(\phi_{K}^n,\phi_{K}^{n+1},c_{K}^n,c_{K}^{n+1})(\phi_{K}^{n+1} - \phi_{K}^n) \\ + d_{c}^{F}(\phi_{K}^n,\phi_{K}^{n+1})(c_{K}^{n+1} - c_{K}^n) - F(\phi^{n+1},c^{n+1}) + F(\phi^n,c^n) \right) = 0. \end{split}$$

# Proposition (Estimation d'énergie discrète)

Soit  $\phi^n_{\mathcal{M}} \in \mathbb{R}^N$ ,  $c^n_{\mathcal{M}} \in \mathbb{R}^N$ . Supposons qu'il existe une solution  $(\phi^{n+1}_{\mathcal{M}}, \mu^{n+1}_{\mathcal{M}}, c^{n+1}_{\mathcal{M}}, \eta^{n+1}_{\mathcal{M}}) \in \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N$  au problème discret. L'égalité suivante est alors verifiée, pour tout pas de temps  $\Delta t$ ,

$$\begin{split} \Delta t |\mu_{\mathcal{M}}^{n+1}|_{1,\mathcal{M}}^2 + \Delta t |\eta_{\mathcal{M}}^{n+1}|_{1,\mathcal{M}}^2 + \mathcal{F}(\phi_{\mathcal{M}}^{n+1},c_{\mathcal{M}}^{n+1}) - \mathcal{F}(\phi_{\mathcal{M}}^n,c_{\mathcal{M}}^n) \\ + \frac{\epsilon_{\phi}}{2} |\phi_{\mathcal{M}}^{n+1} - \phi_{\mathcal{M}}^n|_{1,\mathcal{M}}^2 + \frac{\epsilon_{c}}{2} |c_{\mathcal{M}}^{n+1} - c_{\mathcal{M}}^n|_{1,\mathcal{M}}^2 \\ + \sum_{K \in \mathcal{M}} m_K \left( \frac{1}{\epsilon_{\phi}} \left[ d_{\phi}^{f_{\phi}}(\phi_{K}^n,\phi_{K}^{n+1})(\phi_{K}^{n+1} - \phi_{K}^n) - f_{\phi}(\phi^{n+1}) + f_{\phi}(\phi^n) \right] \right. \\ + \frac{1}{\epsilon_{c}} \left[ d_{c}^{f_{c}}(c_{K}^n,c_{K}^{n+1})(c_{K}^{n+1} - c_{K}^n) - f_{c}(c^{n+1}) + f_{c}(c^n) \right] \\ + d_{\phi}^{F}(\phi_{K}^n,\phi_{K}^{n+1},c_{K}^n,c_{K}^{n+1})(\phi_{K}^{n+1} - \phi_{K}^n) \\ + d_{c}^{F}(\phi_{K}^n,\phi_{K}^{n+1})(c_{K}^{n+1} - c_{K}^n) - F(\phi^{n+1},c^{n+1}) + F(\phi^n,c^n) \right) = 0. \end{split}$$

On construit les discrétisations semi-implicites de sorte à avoir

$$\begin{split} d_{\phi}^{f_{\phi}}(\phi_{K}^{n},\phi_{K}^{n+1}) &= \frac{f_{\phi}(\phi_{K}^{n+1}) - f_{\phi}(\phi_{K}^{n})}{(\phi_{K}^{n+1} - \phi_{K}^{n})}, \quad d_{c}^{f_{c}}(c_{K}^{n},c_{K}^{n+1}) = \frac{f_{c}(c_{K}^{n+1}) - f_{c}(c_{K}^{n})}{(c_{K}^{n+1} - c_{K}^{n})}, \\ & \rightsquigarrow d_{\phi}^{f_{\phi}}(\phi_{K}^{n},\phi_{K}^{n+1})(\phi_{K}^{n+1} - \phi_{K}^{n}) - f_{\phi}(\phi_{K}^{n+1}) + f_{\phi}(\phi_{K}^{n}) = 0 \\ & \rightsquigarrow d_{c}^{f_{c}}(c_{K}^{n},c_{K}^{n+1})(c_{K}^{n+1} - c_{K}^{n}) - f_{c}(c_{K}^{n+1}) + f_{c}(c_{K}^{n}) = 0. \end{split}$$

On construit les discrétisations semi-implicites de sorte à avoir

$$d_{\phi}^{f_{\phi}}(\phi_{K}^{n},\phi_{K}^{n+1}) = \frac{f_{\phi}(\phi_{K}^{n+1}) - f_{\phi}(\phi_{K}^{n})}{(\phi_{K}^{n+1} - \phi_{K}^{n})}, \quad d_{c}^{f_{c}}(c_{K}^{n},c_{K}^{n+1}) = \frac{f_{c}(c_{K}^{n+1}) - f_{c}(c_{K}^{n})}{(c_{K}^{n+1} - c_{K}^{n})},$$

On rappelle 
$$F(\phi, c) = \beta \phi^2 c - \gamma \phi^3 c - \alpha |\nabla \phi|^2 c + \delta |\nabla \phi|^4$$

Méthode volumes finis pour des équations de Cahn-Hilliard avec surfactants

## On construit les discrétisations semi-implicites de sorte à avoir

$$d_{\phi}^{f_{\phi}}(\phi_{K}^{n},\phi_{K}^{n+1}) = \frac{f_{\phi}(\phi_{K}^{n+1}) - f_{\phi}(\phi_{K}^{n})}{(\phi_{K}^{n+1} - \phi_{K}^{n})}, \quad d_{c}^{f_{c}}(c_{K}^{n},c_{K}^{n+1}) = \frac{f_{c}(c_{K}^{n+1}) - f_{c}(c_{K}^{n})}{(c_{K}^{n+1} - c_{K}^{n})},$$

On rappelle 
$$F(\phi,c) = \underbrace{\beta\phi^2c - \gamma\phi^3c - \alpha|\nabla\phi|^2c}_{F_1}\underbrace{+\delta|\nabla\phi|^4}_{F_2},$$

On construit les discrétisations semi-implicites de sorte à avoir

$$d_{\phi}^{f_{\phi}}(\phi_{K}^{n},\phi_{K}^{n+1}) = \frac{f_{\phi}(\phi_{K}^{n+1}) - f_{\phi}(\phi_{K}^{n})}{(\phi_{K}^{n+1} - \phi_{K}^{n})}, \quad d_{c}^{f_{c}}(c_{K}^{n},c_{K}^{n+1}) = \frac{f_{c}(c_{K}^{n+1}) - f_{c}(c_{K}^{n})}{(c_{K}^{n+1} - c_{K}^{n})},$$

On rappelle 
$$F(\phi,c) = \underbrace{\beta\phi^2c - \gamma\phi^3c - \alpha|\nabla\phi|^2c}_{F_1}\underbrace{+\delta|\nabla\phi|^4}_{F_2},$$

$$\begin{split} d_{\phi}^{F_{1}}(\phi_{K}^{n},\phi_{K}^{n+1},c_{K}^{n},c_{K}^{n+1})(\phi_{K}^{n+1}-\phi_{K}^{n}) + d_{c}^{F_{1}}(\phi_{K}^{n},\phi_{K}^{n+1})(c_{K}^{n+1}-c_{K}^{n}) \\ &-F_{1}(\phi_{K}^{n+1},c_{K}^{n+1}) + F_{1}(\phi_{K}^{n},c_{K}^{n}) = 0. \end{split}$$



On construit les discrétisations semi-implicites de sorte à avoir

$$d_{\phi}^{f_{\phi}}(\phi_K^n,\phi_K^{n+1}) = \frac{f_{\phi}(\phi_K^{n+1}) - f_{\phi}(\phi_K^n)}{(\phi_K^{n+1} - \phi_K^n)}, \quad d_c^{f_c}(c_K^n,c_K^{n+1}) = \frac{f_c(c_K^{n+1}) - f_c(c_K^n)}{(c_K^{n+1} - c_K^n)},$$

On rappelle 
$$F(\phi,c) = \underbrace{\beta\phi^2c - \gamma\phi^3c - \alpha|\nabla\phi|^2c}_{F_1}\underbrace{+\delta|\nabla\phi|^4}_{F_2},$$

$$\begin{split} d_{\phi}^{F_1}(\phi_K^n,\phi_K^{n+1},c_K^n,c_K^{n+1})(\phi_K^{n+1}-\phi_K^n) + d_c^{F_1}(\phi_K^n,\phi_K^{n+1})(c_K^{n+1}-c_K^n) \\ &-F_1(\phi_K^{n+1},c_K^{n+1}) + F_1(\phi_K^n,c_K^n) = 0. \end{split}$$

$$\begin{split} d_{\phi}^{F_2}(\phi_K^{n+1})(\phi_K^{n+1} - \phi_K^n) - F_2(\phi_K^{n+1}) + F_2(\phi_K^n) \\ &= \frac{\delta}{4} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}^{int}} \frac{m_{\sigma}}{d_{K,L}^3} \left( (\phi_K^{n+1} - \phi_L^{n+1})^2 - (\phi_K^n - \phi_L^n)^2 \right)^2 \\ &+ \frac{\delta}{2} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}^{int}} \frac{m_{\sigma}}{d_{K,L}^3} (\phi_K^{n+1} - \phi_L^{n+1})^2 (\phi_K^{n+1} - \phi_L^{n+1} - \phi_K^n + \phi_L^n)^2. \end{split}$$

- 4 ロ ト 4 御 ト 4 蓮 ト 4 蓮 ト 9 年 9 9 9 9

On construit les discrétisations semi-implicites de sorte à avoir

$$d_{\phi}^{f_{\phi}}(\phi_K^n,\phi_K^{n+1}) = \frac{f_{\phi}(\phi_K^{n+1}) - f_{\phi}(\phi_K^n)}{(\phi_K^{n+1} - \phi_K^n)}, \quad d_c^{f_c}(c_K^n,c_K^{n+1}) = \frac{f_c(c_K^{n+1}) - f_c(c_K^n)}{(c_K^{n+1} - c_K^n)},$$

On rappelle 
$$F(\phi,c) = \underbrace{\beta\phi^2c - \gamma\phi^3c - \alpha|\nabla\phi|^2c}_{F_1}\underbrace{+\delta|\nabla\phi|^4}_{F_2},$$

$$\begin{split} d_{\phi}^{F_1}(\phi_K^n,\phi_K^{n+1},c_K^n,c_K^{n+1})(\phi_K^{n+1}-\phi_K^n) + d_c^{F_1}(\phi_K^n,\phi_K^{n+1})(c_K^{n+1}-c_K^n) \\ &-F_1(\phi_K^{n+1},c_K^{n+1}) + F_1(\phi_K^n,c_K^n) = 0. \end{split}$$

$$\begin{split} d_{\phi}^{F_2}(\phi_K^{n+1})(\phi_K^{n+1} - \phi_K^n) - F_2(\phi_K^{n+1}) + F_2(\phi_K^n) \\ &= \frac{\delta}{4} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}^{int}} \frac{m_{\sigma}}{d_{K,L}^3} \left( (\phi_K^{n+1} - \phi_L^{n+1})^2 - (\phi_K^n - \phi_L^n)^2 \right)^2 \\ &+ \frac{\delta}{2} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}^{int}} \frac{m_{\sigma}}{d_{K,L}^3} (\phi_K^{n+1} - \phi_L^{n+1})^2 (\phi_K^{n+1} - \phi_L^{n+1} - \phi_K^n + \phi_L^n)^2 = \delta(T_1 + T_2). \end{split}$$

- 4 D ト 4 団 ト 4 珪 ト 4 珪 ト - 珪 - りへの

10 / 21

Margherita Castellano

## Estimation d'énergie discrète

## Proposition (Estimation d'énergie discrète)

Soit  $\phi_{\mathcal{M}}^n \in \mathbb{R}^N$ ,  $c_{\mathcal{M}}^n \in \mathbb{R}^N$ . Supposons qu'il existe une solution  $(\phi_{\mathcal{M}}^{n+1},\mu_{\mathcal{M}}^{n+1},c_{\mathcal{M}}^{n+1},\eta_{\mathcal{M}}^{n+1}) \in \mathbb{R}^{N} \times \mathbb{R}^{N} \times \mathbb{R}^{N} \times \mathbb{R}^{N} \text{ au problème discret. L'égalité}$ suivante est alors vérifiée, pour tout pas de temps  $\Delta t$ .

$$\begin{split} \Delta t |\mu_{\mathcal{M}}^{n+1}|_{1,\mathcal{M}}^{2} + \Delta t |\eta_{\mathcal{M}}^{n+1}|_{1,\mathcal{M}}^{2} + \mathcal{F}(\phi_{\mathcal{M}}^{n+1},c_{\mathcal{M}}^{n+1}) - \mathcal{F}(\phi_{\mathcal{M}}^{n},c_{\mathcal{M}}^{n}) \\ + \frac{\epsilon_{\phi}}{2} |\phi_{\mathcal{M}}^{n+1} - \phi_{\mathcal{M}}^{n}|_{1,\mathcal{M}}^{2} + \frac{\epsilon_{c}}{2} |c_{\mathcal{M}}^{n+1} - c_{\mathcal{M}}^{n}|_{1,\mathcal{M}}^{2} \\ + \sum_{K \in \mathcal{M}} m_{K} \left( \frac{1}{\epsilon_{\phi}} \left[ d_{\phi}^{f_{\phi}}(\phi_{K}^{n},\phi_{K}^{n+1})(\phi_{K}^{n+1} - \phi_{K}^{n}) - f_{\phi}(\phi^{n+1}) + f_{\phi}(\phi^{n}) \right] \right. \\ + \frac{1}{\epsilon_{c}} \left[ d_{c}^{f_{c}}(c_{K}^{n},c_{K}^{n+1})(c_{K}^{n+1} - c_{K}^{n}) - f_{c}(c^{n+1}) + f_{c}(c^{n}) \right] \\ + d_{\phi}^{F}(\phi_{K}^{n},\phi_{K}^{n+1},c_{K}^{n},c_{K}^{n+1})(\phi_{K}^{n+1} - \phi_{K}^{n}) \\ + d_{c}^{F}(\phi_{K}^{n},\phi_{K}^{n+1})(c_{K}^{n+1} - c_{K}^{n}) - F(\phi^{n+1},c^{n+1}) + F(\phi^{n},c^{n}) \right) = 0. \end{split}$$

**CANUM 2024** 

CMAP - école polytechnique

## Proposition (Estimation d'énergie discrète)

Soit  $\phi^n_{\mathcal{M}} \in \mathbb{R}^N$ ,  $c^n_{\mathcal{M}} \in \mathbb{R}^N$ . Supposons qu'il existe une solution  $(\phi^{n+1}_{\mathcal{M}}, \mu^{n+1}_{\mathcal{M}}, c^{n+1}_{\mathcal{M}}, \eta^{n+1}_{\mathcal{M}}) \in \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N$  au problème discret. L'égalité suivante est alors vérifiée, pour tout pas de temps  $\Delta t$ ,

$$\Delta t |\mu_{\mathcal{M}}^{n+1}|_{1,\mathcal{M}}^{2} + \Delta t |\eta_{\mathcal{M}}^{n+1}|_{1,\mathcal{M}}^{2} + \mathcal{F}(\phi_{\mathcal{M}}^{n+1}, c_{\mathcal{M}}^{n+1}) - \mathcal{F}(\phi_{\mathcal{M}}^{n}, c_{\mathcal{M}}^{n}) + \frac{\epsilon_{\phi}}{2} |\phi_{\mathcal{M}}^{n+1} - \phi_{\mathcal{M}}^{n}|_{1,\mathcal{M}}^{2} + \frac{\epsilon_{c}}{2} |c_{\mathcal{M}}^{n+1} - c_{\mathcal{M}}^{n}|_{1,\mathcal{M}}^{2} + \delta(T_{1} + T_{2}) = 0.$$

On a noté  $|.|_{1,\mathcal{M}}$  la semi-norme  $H^1$  discrète.



#### Existence de solutions discrètes

## Proposition (Existence de solutions discrètes)

Soit  $(\phi_{\mathcal{M}}^n, c_{\mathcal{M}}^n) \in \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N$ . Supposons que  $f_{\phi}(\phi)$  et  $f_c(c)$  satisfont l'hypothèse de dissipativité suivante

$$\lim_{|\phi|\to\infty}\inf f''_{\phi}(\phi)>0,\quad \lim_{|c|\to\infty}\inf f''_{c}(c)>0$$

et que les discrétisations semi-implicites  $d_\phi^{f_\phi}$ ,  $d_c^{f_c}$ ,  $d_\phi^F$  et  $d_c^F$  satisfont l'hypothèse de croissance polynomiale. De plus, supposons que la condition suivante est aussi vérifiée,

$$\frac{\tau_1 \rho}{\epsilon_c} - \frac{\alpha^2 \rho}{\delta} \left( 1 + \max_{\sigma \in \mathcal{E}^{int}} \left( \frac{d(x_L, \sigma)}{d(x_K, \sigma)}, \frac{d(x_K, \sigma)}{d(x_L, \sigma)} \right) \right) \ge 0.$$

Alors, il existe au moins une solution  $(\phi_{\mathcal{M}}^{n+1}, \mu_{\mathcal{M}}^{n+1}, c_{\mathcal{M}}^{n+1}, \eta_{\mathcal{M}}^{n+1}) \in \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N$  au problème discret.

## Degré topologique

$$\mathcal{P}$$
: Trouver  $\mathbf{u} \in \mathcal{W}$  tel que  $\mathcal{F}(\mathbf{u}) = 0$ .

Pour tout  $\rho \in [0,1]$ , soit  $\mathcal{P}_{\rho}$  tel que

- 2 pour  $\rho=0$  le problème  $\mathcal{P}_0$  admet une solution dans  $\mathcal{W}$ ;
- 3  $\exists R>0$  tel que, pour tout  $\rho\in[0,1]$ ,

$$\mathbf{w}$$
 solution de  $\mathcal{P}_{\rho}$  et  $\|\mathbf{w}\|_{\mathcal{W}} < R \Rightarrow \|\mathbf{w}\|_{W} \neq R$ .

→ Estimations a priori.

Alors, il existe au moins une solution au problème  $\mathcal{P}_1$ .



#### Pour borner les solutions, on a besoin du terme de stabilisation,

$$-\alpha\rho \sum_{\sigma \in \mathcal{E}^{int}} \frac{m_{\sigma}}{d_{K,L}} c_{\sigma}^{n+1} |\phi_{K}^{n+1} - \phi_{L}^{n+1}|^{2} + \frac{\delta\rho}{4} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}^{int}} \frac{m_{\sigma}}{d_{K,L}^{3}} |\phi_{K}^{n+1} - \phi_{L}^{n+1}|^{4}$$

$$= \frac{\delta\rho}{4} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}^{int}} m_{\sigma} d_{K,L} \left[ \left( \frac{|\phi_{K}^{n+1} - \phi_{L}^{n+1}|^{2}}{d_{K,L}^{2}} - \frac{2\alpha c_{\sigma}^{n+1}}{\delta} \right)^{2} - \frac{4\alpha^{2} (c_{\sigma}^{n+1})^{2}}{\delta^{2}} \right],$$

et on utilise le fait que  $\exists \tau_1>0,\ \tau_2\geq 0$ , tels que  $f_c(c)\geq \tau_1c^2-\tau_2$  pour borner le deuxième terme quadratique. Ce qui donne la condition

$$\frac{\tau_1 \rho}{\epsilon_c} - \frac{\alpha^2 \rho}{\delta} \left( 1 + \max_{\sigma \in \mathcal{E}^{int}} \left( \frac{d(x_L, \sigma)}{d(x_K, \sigma)}, \frac{d(x_K, \sigma)}{d(x_L, \sigma)} \right) \right) \ge 0.$$



Méthode volumes finis pour des équations de Cahn-Hilliard avec surfactants

### Proposition (Existence des limites)

- 1 Il existe des fonctions  $\phi$ ,  $\mu$ , c,  $\eta \in L^2(\Omega)$  telles que (à sous-suite près) on a  $\phi_{\mathcal{M}} \to \phi$ ,  $\mu_{\mathcal{M}} \rightharpoonup \mu$ ,  $c_{\mathcal{M}} \to c$  et  $\eta_{\mathcal{M}} \rightharpoonup \eta$ .
- **2** De plus, ces fonctions sont  $H^1(\Omega)$  et on a convergence faible pour les gradients,  $\nabla \phi_{\mathcal{M}} \rightharpoonup \nabla \phi$ ,  $\nabla \mu_{\mathcal{M}} \rightharpoonup \nabla \mu$ ,  $\nabla c_{\mathcal{M}} \rightharpoonup \nabla c$ ,  $\nabla \eta_{\mathcal{M}} \rightharpoonup \nabla \eta$ , dans  $(L^2(\Omega))^d$ .

#### Convergence

#### Proposition (Existence des limites)

- 1 Il existe des fonctions  $\phi$ ,  $\mu$ , c,  $\eta \in L^2(\Omega)$  telles que (à sous-suite près) on a  $\phi_{\mathcal{M}} \to \phi$ ,  $\mu_{\mathcal{M}} \rightharpoonup \mu$ ,  $c_{\mathcal{M}} \to c$  et  $\eta_{\mathcal{M}} \rightharpoonup \eta$ .
- 2 De plus, ces fonctions sont  $H^1(\Omega)$  et on a convergence faible pour les gradients,  $\nabla \phi_{\mathcal{M}} \rightharpoonup \nabla \phi$ ,  $\nabla \mu_{\mathcal{M}} \rightharpoonup \nabla \mu$ ,  $\nabla c_{\mathcal{M}} \rightharpoonup \nabla c$ ,  $\nabla \eta_{\mathcal{M}} \rightharpoonup \nabla \eta$ , dans  $(L^2(\Omega))^d$ .

#### Passage à la limite :

- → Pour les termes du Cahn-Hilliard classique (NABET 2016).
- → Difficulté : termes de couplage



Passage à la limite pour les termes de couplage :

$$\begin{split} \partial_{\phi} F(\phi,c) &= 2\beta \phi c - 3\gamma \phi^2 c + 2\alpha \nabla \cdot (c \nabla \phi) - \delta \nabla \cdot (\nabla \phi |\nabla \phi|^2), \\ \partial_c F(\phi,c) &= -\alpha |\nabla \phi|^2 + \beta \phi^2 - \gamma \phi^3. \end{split}$$

Passage à la limite pour les termes de couplage :

$$\begin{split} \partial_{\phi}F(\phi,c) &= 2\beta\phi c - 3\gamma\phi^2 c + \boxed{2\alpha\nabla\cdot(c\nabla\phi)} - \delta\nabla\cdot(\nabla\phi|\nabla\phi|^2), \\ \partial_{c}F(\phi,c) &= -\alpha|\nabla\phi|^2 + \beta\phi^2 - \gamma\phi^3. \end{split}$$

Pour  $\psi \in \mathcal{C}_c^\infty$ 

$$\int_{\Omega} 2\alpha \nabla \cdot (c_{\mathcal{M}} \nabla \phi_{\mathcal{M}}) \psi = -\int_{\Omega} 2\alpha c_{\mathcal{M}} \nabla \phi_{\mathcal{M}} \cdot \nabla \psi.$$



Passage à la limite pour les termes de couplage :

$$\partial_{\phi} F(\phi, c) = 2\beta \phi c - 3\gamma \phi^{2} c + 2\alpha \nabla \cdot (c \nabla \phi) - \delta \nabla \cdot (\nabla \phi |\nabla \phi|^{2}),$$
  
$$\partial_{c} F(\phi, c) = \boxed{-\alpha |\nabla \phi|^{2}} + \beta \phi^{2} - \gamma \phi^{3}.$$

Pour  $\psi \in \mathcal{C}_c^\infty$ 

$$\int_{\Omega} -\alpha \nabla \phi_{\mathcal{M}} \cdot \nabla \phi_{\mathcal{M}} \psi = \int_{\Omega} 2\alpha \phi_{\mathcal{M}} \nabla \cdot (\nabla \phi_{\mathcal{M}} \psi).$$



Passage à la limite pour les termes de couplage :

$$\partial_{\phi} F(\phi, c) = 2\beta \phi c - 3\gamma \phi^{2} c + 2\alpha \nabla \cdot (c \nabla \phi) \left[ -\delta \nabla \cdot (\nabla \phi |\nabla \phi|^{2}) \right],$$
  
$$\partial_{c} F(\phi, c) = -\alpha |\nabla \phi|^{2} + \beta \phi^{2} - \gamma \phi^{3}.$$

Pour  $\psi \in \mathcal{C}_c^\infty$ 

$$\int_{\Omega} -\delta \nabla \cdot (\nabla \phi_{\mathcal{M}} |\nabla \phi_{\mathcal{M}}|^{2}) \psi = \int_{\Omega} \delta |\nabla \phi_{\mathcal{M}}|^{2} \nabla \phi_{\mathcal{M}} \cdot \nabla \psi.$$

## Convergence faible du gradient pour VF4

#### Définition du gradient discret

$$\nabla^{\sigma} u_{\mathcal{M}} := \begin{cases} \frac{d}{d} \frac{u_{L} - u_{K}}{d_{K,L}} & \text{pour } \sigma \in \mathcal{E}^{int} \\ 0 & \text{pour } \sigma \in \mathcal{E}^{ext}. \end{cases}$$

$$\nabla^{\sigma}u_{\mathcal{M}} \rightharpoonup \nabla u \quad \text{dans } (L^2(\Omega))^d.$$

$$\left[\lim_{N\to\infty} \|\nabla^{\sigma} u_{\mathcal{M}}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} \neq \|\nabla u\|_{L^{2}(\Omega)}^{2}.\right]$$

## Convergence faible du gradient pour VF4

#### Définition du gradient discret

$$\nabla^{\sigma}u_{\mathcal{M}} := \begin{cases} \frac{d}{d} \frac{u_{L} - u_{K}}{d_{K,L}} & \text{pour } \sigma \in \mathcal{E}^{int} \\ 0 & \text{pour } \sigma \in \mathcal{E}^{ext}. \end{cases}$$

$$\nabla^{\sigma}u_{\mathcal{M}} \rightharpoonup \nabla u \quad \text{dans } (L^{2}(\Omega))^{d}.$$

$$\lim_{N \to \infty} \|\nabla^{\sigma}u_{\mathcal{M}}\|_{L^{2}(\Omega)}^{2} \neq \|\nabla u\|_{L^{2}(\Omega)}^{2}.$$

Pour le problème de Poisson :

$$\lim_{N\to\infty} \lVert \nabla^\sigma u_{\mathcal{M}}\rVert_{L^2(\Omega)}^2 = d \int_{\Omega} f(x) u(x) = -d \int_{\Omega} \Delta u(x) u(x) = \frac{\mathbf{d}}{\lVert \nabla u\rVert_{L^2(\Omega)}^2}$$





## Potentielles approches alternatives pour prouver la convergence

**1** (Bradji et Herbin 2008) convergence de  $\int_{\Omega} |\nabla \phi_{\mathcal{M}}|^2$ 



#### Potentielles approches alternatives pour prouver la convergence

- 1 (Bradji et Herbin 2008) convergence de  $\int_{\Omega} |\nabla \phi_{\mathcal{M}}|^2$
- 2 Discrétisation en DDFV
  - reconstruction totale du gradient
  - maillages non conformes

Méthode volumes finis pour des équations de Cahn-Hilliard avec surfactants

- plus de condition d'orthogonalité
- utile pour le couplage avec Navier Stokes plus tard



## Simulations numériques - décomposition spinodale



Figure : Séparation eau - air, modèle sans surfactants



Figure : Séparation eau - air, modèle avec surfactants



Figure : Séparation eau - air, modèle avec surfactants



Figure : Distribution des surfactants

Margherita Castellano CANUM 2024

#### Simulations numériques - une bulle d'air dans l'eau



Figure : Dynamique des surfactants autour d'une bulle d'air



Figure : Une bulle d'air dans l'eau

CMAP - école polytechnique

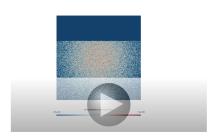


Figure : Dynamique des surfactants dans de l'eau avec des bulles



Figure : Séparation de phases, eau avec des bulles

CMAP - école polytechnique