Un modèle de Cahn-Hilliard à deux flux pour les écoulements diphasiques incompressibles

Clément Cancès, Daniel Matthes, et Flore Nabet

Equipe RAPSODI, Inria Lille - Nord Europe

CANUM 2020 – Évian

Innia



Plan de l'exposé

Quelques généralités à propos des flots de gradient

- 2 Un modèle de Cahn-Hilliard non-local à deux flux
- 3 Comparaison avec le modèle de Cahn-Hilliard dégénéré local
- 4 Conclusion

Plan de l'exposé

Quelques généralités à propos des flots de gradient

Dun modèle de Cahn-Hilliard non-local à deux flux

3 Comparaison avec le modèle de Cahn-Hilliard dégénéré local

4 Conclusion

Interprétation variationnelle d'équations dissipatives

Flot de gradient $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathsf{u}(t) = -\nabla_{u}\mathcal{E}(\mathsf{u}(t))$



- Asymptotique temps long
- Géométrie sous-jacente

- Structure de nombreux modèles: chimie, thermodynamique, écoulements en milieux poreux... [Onsager '31], ...
- Géométrie du transport optimal si de la matière se déplace [McCann '97], [Otto '01], [Villani '04], [Ambrosio, Gigli & Savaré '05]
- Couplage multi-physique naturel [Mielke '11], [Peletier '14]
- Outil de modélisation puissant
- Méthodes numériques

Différentielle vs gradient : le cadre hilbertien

- *H* un espace de Hilbert
- $\mathcal{E}: H \to \mathbb{R}$ une application différentiable
- Differentielle $D\mathcal{E}: H \mapsto H^*$ telle que

$$\mathcal{E}(u+h) = \mathcal{E}(u) + D\mathcal{E}(u) \cdot h + o(||h||), \qquad u, h \in H.$$

• Identification au gradient $\nabla_u \mathcal{E} : H \to H$ via le théorème de Riesz

$$(\nabla_u \mathcal{E}(u), h)_H = D\mathcal{E}(u) \cdot h, \qquad u, h \in H.$$

Extension au cadre riemannien

- Soit \mathcal{M} une variété riemannienne
- En tout $u \in \mathcal{M}$, le plan tangent $T_u \mathcal{M}$ a une structure hilbertienne $(\cdot, \cdot)_{T_u \mathcal{M}}$
- $\Gamma(u_0, u_1)$: ensemble des courbes paramétrées

$$\begin{cases} [0,1] \to \mathcal{M} \\ t \mapsto \gamma(t) \end{cases} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \gamma(0) = u_0 \\ \gamma(1) = u_1 \end{cases}$$



Source: Wikipedia

• La distance entre u_0 et u_1

$$d^{2}(u_{0}, u_{1}) = \min_{\gamma \in \Gamma(u_{0}, u_{1})} \int_{0}^{1} (\gamma'(t), \gamma'(t))_{\mathcal{T}_{\gamma(t)}\mathcal{M}} dt$$

Extension au cadre riemannien

- Soit \mathcal{M} une variété riemannienne
- En tout $u \in \mathcal{M}$, le plan tangent $T_u \mathcal{M}$ a une structure hilbertienne $(\cdot, \cdot)_{T_u \mathcal{M}}$
- $\Gamma(u_0, u_1)$: ensemble des courbes paramétrées

$$\begin{cases} [0,1] \to \mathcal{M} \\ t \mapsto \gamma(t) \end{cases} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \gamma(0) = u_0 \\ \gamma(1) = u_1 \end{cases}$$



Source: Wikipedia

• La distance entre u_0 et u_1

$$d^{2}(u_{0}, u_{1}) = \min_{\gamma \in \Gamma(u_{0}, u_{1})} \int_{0}^{1} (\gamma'(t), \gamma'(t))_{T_{\gamma(t)} \mathcal{M}} dt$$

• $\mathcal{E} : \mathcal{M} \to \mathbb{R}$ differentiable, $D\mathcal{E}(u) \in T_u^*\mathcal{M}$ telle que $\mathcal{E}(u_1) = \mathcal{E}(u_0) + D\mathcal{E}(u_0) \cdot \gamma'(0) + o(d(u_0, u_1)), \qquad u_0, u_1 \in \mathcal{M}.$

Extension au cadre riemannien

- Soit ${\mathcal M}$ une variété riemannienne
- En tout $u \in \mathcal{M}$, le plan tangent $T_u \mathcal{M}$ a une structure hilbertienne $(\cdot, \cdot)_{T_u \mathcal{M}}$
- $\Gamma(u_0, u_1)$: ensemble des courbes paramétrées

$$egin{cases} [0,1] o \mathcal{M} \ t \mapsto \gamma(t) \ \end{pmatrix} ext{ avec } egin{cases} \gamma(0) = u_0 \ \gamma(1) = u_1 \ \end{pmatrix}$$



Source: Wikipedia

• La distance entre u_0 et u_1

$$d^{2}(u_{0}, u_{1}) = \min_{\gamma \in \Gamma(u_{0}, u_{1})} \int_{0}^{1} (\gamma'(t), \gamma'(t))_{T_{\gamma(t)} \mathcal{M}} dt$$

- $\mathcal{E} : \mathcal{M} \to \mathbb{R}$ differentiable, $D\mathcal{E}(u) \in T_u^*\mathcal{M}$ telle que $\mathcal{E}(u_1) = \mathcal{E}(u_0) + D\mathcal{E}(u_0) \cdot \gamma'(0) + o(d(u_0, u_1)), \qquad u_0, u_1 \in \mathcal{M}.$
- Identification au gradient $\nabla_u \mathcal{E} : \mathcal{M} \to T_u \mathcal{M}$ via le théorème de Riesz

$$(\nabla_u \mathcal{E}(u), \xi)_{T_u \mathcal{M}} = D\mathcal{E}(u) \cdot \xi, \qquad u \in \mathcal{M}, \xi \in T_u \mathcal{M}.$$

Du flot de gradient au flot de gradient généralisé

- ▶ Si $u(t) \in \mathcal{M}$ et $\mathcal{E} : \mathcal{M} \to \mathbb{R}$, alors $u' \in T_u \mathcal{M}$ et $D\mathcal{E}(u) \in T_u^* \mathcal{M}$
- ► L'application $G(u) : \begin{cases} T_u^* \mathcal{M} \to T_u \mathcal{M} \\ D\mathcal{E}(u) \to \nabla_u \mathcal{E}(u) \end{cases}$ est auto-adjointe définie positive.

Les applications

$$\Psi: \begin{cases} \bigcup_{u\in\mathcal{M}} \{u\} \times T_u\mathcal{M} \to \mathbb{R}_+\\ (u,\xi) \mapsto \frac{1}{2}G(u)^{-1}\xi \cdot \xi \end{cases} \quad \text{et} \quad \Psi^*: \begin{cases} \bigcup_{u\in\mathcal{M}} \{u\} \times T_u^*\mathcal{M} \to \mathbb{R}_+\\ (u,\varphi) \mapsto \frac{1}{2}\varphi \cdot G(u)\varphi \end{cases}$$

sont convexes conjuguées par rapport à leur deuxième variable

Du flot de gradient au flot de gradient généralisé

- ▶ Si $u(t) \in \mathcal{M}$ et $\mathcal{E} : \mathcal{M} \to \mathbb{R}$, alors $u' \in T_u \mathcal{M}$ et $D\mathcal{E}(u) \in T_u^* \mathcal{M}$
- ► L'application $G(u) : \begin{cases} T_u^* \mathcal{M} \to T_u \mathcal{M} \\ D\mathcal{E}(u) \to \nabla_u \mathcal{E}(u) \end{cases}$

est auto-adjointe définie positive.

Les applications

$$\Psi: \begin{cases} \bigcup_{u\in\mathcal{M}} \{u\} \times T_u\mathcal{M} \to \mathbb{R}_+\\ (u,\xi) \mapsto \frac{1}{2}G(u)^{-1}\xi \cdot \xi \end{cases} \quad \text{et} \quad \Psi^*: \begin{cases} \bigcup_{u\in\mathcal{M}} \{u\} \times T_u^*\mathcal{M} \to \mathbb{R}_+\\ (u,\varphi) \mapsto \frac{1}{2}\varphi \cdot G(u)\varphi \end{cases}$$

sont convexes conjuguées par rapport à leur deuxième variable

Flot de gradient généralisé [Mielke '11]

Étant donné $\mathcal{E} : \mathcal{M} \to \mathbb{R}$ différentiable et $\Psi : \bigcup_{u \in \mathcal{M}} \{u\} \times T_u \mathcal{M} \to \mathbb{R}_+$ convexe par rapport à sa deuxième variable et t.q. $\Psi(u, 0) = 0$

$$\boldsymbol{\nabla}_{\xi} \Psi(u,u') + D\mathcal{E}(u) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad u' \in \operatorname{argmin}_{\xi} \left(\Psi(u,\xi) + D\mathcal{E}(u) \cdot \xi \right)$$

On se place dans le cadre hilbertien: $H = L^2(\Omega)$

Énergie de Dirichlet

$$\mathcal{E}(u) = \begin{cases} \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\nabla u|^2 & \text{si } u \in H_0^1(\Omega) \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases} \qquad \nabla_u \mathcal{E}(u) = -\Delta u$$

► Condition de flot de gradient généralisé

$$\partial_t u \in \underset{\xi \in L^2}{\operatorname{argmin}} \left[\frac{1}{2} \|\xi\|_{L^2}^2 + (\nabla_u \mathcal{E}(u), \xi)_{L^2} \right] \implies \partial_t u - \Delta u = 0$$

Toujours dans le cadre hilbertien: $H = H^{-1}(\Omega)$

• produit scalaire H^{-1}

$$(p,q)_{H^{-1}} = \langle \varphi | q \rangle_{H^1_0, H^{-1}}$$
 où $-\Delta \varphi = p$

Toujours dans le cadre hilbertien: $H = H^{-1}(\Omega)$

▶ produit scalaire H^{-1}

$$(p,q)_{H^{-1}} = \langle \varphi | q \rangle_{H^{1}_{0},H^{-1}}$$
 où $-\Delta \varphi = p$

Énergie quadratique d'ordre 0:

$$\mathcal{E}(u) = \begin{cases} \frac{1}{2} \int_{\Omega} |u|^2 & \text{si } u \in L^2(\Omega) \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases}$$

Équation de la chaleur : 2ème point de vue

Toujours dans le cadre hilbertien: $H = H^{-1}(\Omega)$

• produit scalaire H^{-1}

$$(p,q)_{H^{-1}} = \langle \varphi | q \rangle_{H^{1}_{0},H^{-1}}$$
 où $-\Delta \varphi = p$

Énergie quadratique d'ordre 0:

$$\mathcal{E}(u) = egin{cases} rac{1}{2}\int_{\Omega}|u|^2 & ext{si } u \in L^2(\Omega) \ +\infty & ext{sinon} \end{cases}$$

► Gradient de l'énergie

 $(\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{u}}\mathcal{E}(\boldsymbol{u}),\xi)_{H^{-1}} = D\mathcal{E}(\boldsymbol{u})\cdot\xi = \langle \boldsymbol{u}|\xi\rangle_{H^{1}_{\mathbf{0}},H^{-1}} = (-\Delta\boldsymbol{u},\xi)_{H^{-1}}$

Toujours dans le cadre hilbertien: $H = H^{-1}(\Omega)$

• produit scalaire H^{-1}

$$(p,q)_{H^{-1}} = \langle \varphi | q \rangle_{H^{1}_{0},H^{-1}}$$
 où $-\Delta \varphi = p$

Énergie quadratique d'ordre 0:

$$\mathcal{E}(u) = egin{cases} rac{1}{2} \int_{\Omega} |u|^2 & ext{si } u \in L^2(\Omega) \ +\infty & ext{sinon} \end{cases}$$

► Gradient de l'énergie

$$(\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{u}}\mathcal{E}(\boldsymbol{u}),\xi)_{H^{-1}} = D\mathcal{E}(\boldsymbol{u})\cdot\xi = \langle \boldsymbol{u}|\xi\rangle_{H^{1}_{\boldsymbol{0}},H^{-1}} = (-\Delta\boldsymbol{u},\xi)_{H^{-1}}$$

► Condition de flot de gradient généralisé

$$\partial_t u \in \operatorname*{argmin}_{\xi \in H^{-1}} \left[\frac{1}{2} \|\xi\|_{H^{-1}}^2 + (\nabla_u \mathcal{E}(u), \xi)_{H^{-1}} \right] \implies \partial_t u - \Delta u = 0$$

[Jordan, Kinderlehrer & Otto '98, Otto '01, Ambrosio, Gigli & Savaré '05, Peletier '14]

Potentiel de dissipation

$$\Psi(u,\xi) = \inf_{\xi + \nabla \cdot J = 0} \frac{1}{2} \int_{\Omega} \frac{|J|^2}{u}$$

[Jordan, Kinderlehrer & Otto '98, Otto '01, Ambrosio, Gigli & Savaré '05, Peletier '14]

Potentiel de dissipation

$$\Psi(u,\xi) = \inf_{\xi + \nabla \cdot J = 0} \frac{1}{2} \int_{\Omega} \frac{|J|^2}{u}$$

▶ Énergie: entropie de Boltzmann

$$\mathcal{E}(u) = \int_{\Omega} u \log(u) \implies D\mathcal{E}(u) \cdot z = \int_{\Omega} (\log(u) - 1) z$$

[Jordan, Kinderlehrer & Otto '98, Otto '01, Ambrosio, Gigli & Savaré '05, Peletier '14]

Potentiel de dissipation

$$\Psi(u,\xi) = \inf_{\xi + \nabla \cdot J = 0} \frac{1}{2} \int_{\Omega} \frac{|J|^2}{u}$$

Énergie: entropie de Boltzmann

$$\mathcal{E}(u) = \int_{\Omega} u \log(u) \implies D\mathcal{E}(u) \cdot z = \int_{\Omega} (\log(u) - 1) z$$

Condition de flot de gradient généralisé

$$\partial_t u \in \operatorname*{argmin}_{\xi} \left[\Psi(u,\xi) + D\mathcal{E}(u) \cdot \xi \right]$$

revient à

$$\partial_t u + \nabla \cdot J = 0$$
 où $J \in \operatorname{argmin}_{\widetilde{J}} \left[\frac{1}{2} \int_{\Omega} \frac{|\widetilde{J}|^2}{u} + \int_{\Omega} \nabla \log(u) \cdot \widetilde{J} \right]$

d'où

$$J = -u \nabla \log(u) = -\nabla u \implies \partial_t u - \Delta u = 0.$$

C. Cancès (Inria RAPSODI)

Géométrie du transport optimal vs géométrie linéaire

[Gangbo & McCann '96], [McCann '97]

- ▶ 2 premières interprétations : flots de gradient dans des Hilbert
- ▶ troisième interprétation: flot de gradient Wasserstein

géométrie linéaire

géométrie OT

Géodésiques entre deux densités

▶ $u = (u_1, u_2)$ avec $u_i \ge 0$, et $u_1 + u_2 = 1$, $\xi = (\xi_1, \xi_2)$ avec $\xi_1 + \xi_2 = 0$

▶ $u = (u_1, u_2)$ avec $u_i \ge 0$, et $u_1 + u_2 = 1$, $\xi = (\xi_1, \xi_2)$ avec $\xi_1 + \xi_2 = 0$ ▶ Potentiel de dissipation

$$\Psi(\boldsymbol{u},\boldsymbol{\xi}) = \inf_{\substack{\boldsymbol{\xi}+\nabla\cdot J=0\\ J_1+J_2=0}} \sum_{i\in\{1,2\}} \int_{\Omega} \frac{|J_i|^2}{2u_i} = \int_{\Omega} \frac{|J_1|^2}{2u_1(1-u_1)}$$

▶ $u = (u_1, u_2)$ avec $u_i \ge 0$, et $u_1 + u_2 = 1$, $\xi = (\xi_1, \xi_2)$ avec $\xi_1 + \xi_2 = 0$ ▶ Potentiel de dissipation

$$\Psi(\boldsymbol{u},\boldsymbol{\xi}) = \inf_{\substack{\boldsymbol{\xi}+\nabla\cdot J=0\\ J_1+J_2=0}} \sum_{i\in\{1,2\}} \int_{\Omega} \frac{|J_i|^2}{2u_i} = \int_{\Omega} \frac{|J_1|^2}{2u_1(1-u_1)}$$

Énergie : entropie de mélange

$$\mathcal{E}(\boldsymbol{u}) = \int_{\Omega} \sum_{i} u_{i} \log(u_{i}) = \int_{\Omega} [u_{1} \log(u_{1}) + (1 - u_{1}) \log(1 - u_{1})]$$
$$\implies D\mathcal{E}(\boldsymbol{u}) \cdot \boldsymbol{\xi} = \sum_{i} \int_{\Omega} (\log(u_{i}) - 1)\xi_{i} = \int_{\Omega} \log\left(\frac{u_{1}}{1 - u_{1}}\right) \xi_{1}$$

▶ $u = (u_1, u_2)$ avec $u_i \ge 0$, et $u_1 + u_2 = 1$, $\xi = (\xi_1, \xi_2)$ avec $\xi_1 + \xi_2 = 0$ ▶ Potentiel de dissipation

$$\Psi(\boldsymbol{u},\boldsymbol{\xi}) = \inf_{\substack{\boldsymbol{\xi}+\nabla \cdot J=0\\ J_1+J_2=0}} \sum_{i \in \{1,2\}} \int_{\Omega} \frac{|J_i|^2}{2u_i} = \int_{\Omega} \frac{|J_1|^2}{2u_1(1-u_1)}$$

Énergie : entropie de mélange

$$\mathcal{E}(\boldsymbol{u}) = \int_{\Omega} \sum_{i} u_{i} \log(u_{i}) = \int_{\Omega} [u_{1} \log(u_{1}) + (1 - u_{1}) \log(1 - u_{1})]$$
$$\implies D\mathcal{E}(\boldsymbol{u}) \cdot \boldsymbol{\xi} = \sum_{i} \int_{\Omega} (\log(u_{i}) - 1)\xi_{i} = \int_{\Omega} \log\left(\frac{u_{1}}{1 - u_{1}}\right) \xi_{1}$$

Condition de flot de gradient généralisé

$$\partial_t u_1 = \boldsymbol{\nabla} \cdot \left[u_1(1-u_1) \boldsymbol{\nabla} \log \left(\frac{u_1}{1-u_1} \right) \right] = \Delta u_1$$

Plan de l'exposé

Quelques généralités à propos des flots de gradient

2 Un modèle de Cahn-Hilliard non-local à deux flux

3 Comparaison avec le modèle de Cahn-Hilliard dégénéré local

4 Conclusion

Deux phases incompressibles et immiscibles

Fluide évoluant dans un domaine convexe $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ $(d \leq 3)$

Deux phases incompressibles et immiscibles

- ▶ Fluide évoluant dans un domaine convexe $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ $(d \leq 3)$
- Composition du fluide décrite par les fractions volumiques $c = (c_1, c_2)$

$$c_1+c_2=1$$
 $\Longrightarrow \ oldsymbol{c}\in \mathcal{X}=ig\{oldsymbol{c}:\Omega
ightarrow\mathbb{R}^2_+\ ig|\ c_1+c_2=1$

ł

Deux phases incompressibles et immiscibles

- Fluide évoluant dans un domaine convexe $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ $(d \leq 3)$
- Composition du fluide décrite par les fractions volumiques $c = (c_1, c_2)$

$$c_1 + c_2 = 1$$

$$\implies \boldsymbol{c} \in \boldsymbol{\mathcal{X}} = \left\{ \boldsymbol{c} : \Omega \to \mathbb{R}^2_+ \mid \boldsymbol{c}_1 + \boldsymbol{c}_2 = 1 \right\}$$

• Conservation de chaque phase avec flux $J = (J_1, J_2)$ (+flux nul au bord)

$$\partial_t c_i + \boldsymbol{\nabla} \cdot J_i = 0 \qquad \rightsquigarrow \quad \boldsymbol{\nabla} \cdot (J_1 + J_2) = 0$$

$$\implies \boldsymbol{c} \in \boldsymbol{\mathcal{A}} = \left\{ \boldsymbol{c}: \Omega \rightarrow \mathbb{R}^2_+ \; \middle| \; \int_\Omega c_i = \int_\Omega c_i^0 \right\}$$

L'énergie $\mathcal{E}(\boldsymbol{c})$ associée à une configuration \boldsymbol{c} comporte plusieurs contributions

$$\mathcal{E}(oldsymbol{c}) = \mathcal{E}_{oldsymbol{\Gamma}}^{\epsilon}(oldsymbol{c}) + \mathcal{E}_{ ext{pot}}(oldsymbol{c}) + \mathcal{E}_{ ext{therm}}(oldsymbol{c})$$

оù

$$egin{aligned} \mathcal{E}^{\epsilon}_{\Gamma}(oldsymbol{c}) =& rac{\epsilon}{2} \int_{\Omega} |oldsymbol{
aligned} c_1|^2 + rac{1}{\epsilon} \int_{\Omega} c_1 c_2 \ \mathcal{E}_{ ext{pot}}(oldsymbol{c}) =& \sum_i \int_{\Omega} c_i \Psi_i \ \mathcal{E}_{ ext{therm}}(oldsymbol{c}) =& \sum_i heta_i \int_{\Omega} c_i \log c_i \end{aligned}$$

L'énergie $\mathcal{E}(\boldsymbol{c})$ associée à une configuration \boldsymbol{c} comporte plusieurs contributions

 $\mathcal{E}(c_1) = \mathcal{E}_{\Gamma}^{\epsilon}(c_1)$

оù

$$\mathcal{E}^\epsilon_\Gamma(c_1) = rac{\epsilon}{2} \int_\Omega |oldsymbol{
abla} c_1|^2 + rac{1}{\epsilon} \int_\Omega c_1(1-c_1)$$

L'énergie $\mathcal{E}(\boldsymbol{c})$ associée à une configuration \boldsymbol{c} comporte plusieurs contributions

 $\mathcal{E}(c_1) = \mathcal{E}_{\Gamma}^{\epsilon}(c_1)$

où

$$\mathcal{E}^{\epsilon}_{\Gamma}(c_1) = rac{\epsilon}{2} \int_{\Omega} |oldsymbol{
abla} c_1|^2 + rac{1}{\epsilon} \int_{\Omega} c_1(1-c_1)$$

D'après [Modica '87], lorsque $\epsilon \rightarrow 0$:

• c_1 prend des valeurs dans $\{0,1\}$

• $\mathcal{E}_{\Gamma}^{\epsilon}(c_1)$ tend vers $\gamma \mathsf{Per}(\{c_1 = 1\})$ avec $\gamma > 0$

La dynamique vise à minimiser l'aire de contact entre les deux phases

L'énergie $\mathcal{E}(\boldsymbol{c})$ associée à une configuration \boldsymbol{c} comporte plusieurs contributions

 $\mathcal{E}(c_1) = \mathcal{E}_{\Gamma}^{\epsilon}(c_1)$

оù

$$\mathcal{E}^{\epsilon}_{\Gamma}(c_1) = rac{\epsilon}{2} \int_{\Omega} |oldsymbol{
abla} c_1|^2 + rac{1}{\epsilon} \int_{\Omega} c_1(1-c_1)$$

Pression capillaire $p_c = rac{\delta \mathcal{E}}{\delta c_1} = -\epsilon \Delta c_1 + rac{1}{\epsilon}(1-2c_1)$

La dissipation

Une évolution $\boldsymbol{\xi}$ préservant la contrainte $c_1 + c_2 = 1$ induit la dissipation

$$\begin{split} \Psi(\boldsymbol{c},\boldsymbol{\xi}) &= \inf_{\substack{\boldsymbol{\xi}+\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{J}=0\\\xi_1+\xi_2=0}} \sum_i \frac{1}{2} \int_{\Omega} \frac{|J_i|^2}{c_i} \\ &= \inf_{\substack{\boldsymbol{\xi}+\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{J}=0}} \sum_i \frac{1}{2} \int_{\Omega} \frac{|J_i|^2}{c_i} + \sup_{\lambda} \int_{\Omega} (\xi_1 + \xi_2)\lambda \\ &= \inf_{\substack{\boldsymbol{\xi}+\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{J}=0}} \sum_i \frac{1}{2} \int_{\Omega} \frac{|J_i|^2}{c_i} + \sup_{\lambda} \int_{\Omega} (J_1 + J_2) \cdot \boldsymbol{\nabla}\lambda \end{split}$$

[Mielke '11], [Peletier '14], [C., Gallouët & Monsaingeon '15]

$$\partial_t \boldsymbol{c} \in \operatorname*{argmin}_{\xi_1+\xi_2=0} \left(\Psi(\boldsymbol{c},\boldsymbol{\xi}) + \int_{\Omega} \xi_1 \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta c_1} \right)$$

$$\begin{split} \inf_{\boldsymbol{\xi}} \left(\Psi(\boldsymbol{c}, \boldsymbol{\xi}) + \int_{\Omega} \xi_{1} p_{c} \right) \\ &= \inf_{\boldsymbol{\xi}} \inf_{\boldsymbol{\xi}+\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{J}=0} \sum_{i} \frac{1}{2} \int_{\Omega} \frac{|J_{i}|^{2}}{c_{i}} + \sup_{\lambda} \int_{\Omega} (J_{1} + J_{2}) \cdot \boldsymbol{\nabla} \lambda + \int_{\Omega} J_{1} \cdot \boldsymbol{\nabla} p_{c} \end{split}$$

[Mielke '11], [Peletier '14], [C., Gallouët & Monsaingeon '15]

$$\partial_t \boldsymbol{c} \in \operatorname*{argmin}_{\xi_1+\xi_2=0} \left(\Psi(\boldsymbol{c},\boldsymbol{\xi}) + \int_{\Omega} \xi_1 \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta c_1} \right)$$

$$\begin{split} \inf_{\boldsymbol{\xi}} \left(\Psi(\boldsymbol{c}, \boldsymbol{\xi}) + \int_{\Omega} \xi_{1} \boldsymbol{p}_{c} \right) \\ &= \inf_{\boldsymbol{J}} \sum_{i} \frac{1}{2} \int_{\Omega} \frac{|J_{i}|^{2}}{c_{i}} + \sup_{\lambda} \int_{\Omega} (J_{1} + J_{2}) \cdot \boldsymbol{\nabla} \lambda + \int_{\Omega} J_{1} \cdot \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{p}_{c} \end{split}$$

[Mielke '11], [Peletier '14], [C., Gallouët & Monsaingeon '15]

$$\partial_t \boldsymbol{c} \in \operatorname*{argmin}_{\xi_1 + \xi_2 = 0} \left(\Psi(\boldsymbol{c}, \boldsymbol{\xi}) + \int_{\Omega} \xi_1 \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta c_1} \right)$$

$$\begin{split} \inf_{\boldsymbol{\xi}} \left(\Psi(\boldsymbol{c}, \boldsymbol{\xi}) + \int_{\Omega} \xi_{1} \rho_{c} \right) \\ &= \inf_{J} \sum_{i} \frac{1}{2} \int_{\Omega} \frac{|J_{i}|^{2}}{c_{i}} + \sup_{\lambda} \int_{\Omega} (J_{1} + J_{2}) \cdot \boldsymbol{\nabla} \lambda + \int_{\Omega} J_{1} \cdot \boldsymbol{\nabla} \rho_{c} \end{split}$$

• On introduit $p_2 = \lambda$ et $p_1 = \lambda + p_c$

• On utilise $\inf_{J} \sup_{\lambda} = \sup_{\lambda} \inf_{J}$ (pas de saut de dualité)

 $\partial_t c_i + \boldsymbol{\nabla} \cdot J_i = 0, \quad J_i = -c_i \boldsymbol{\nabla} p_i, \quad c_1 + c_2 = 1, \quad p_1 - p_2 = p_c$

[Mielke '11], [Peletier '14], [C., Gallouët & Monsaingeon '15]

$$\partial_t \boldsymbol{c} \in \operatorname*{argmin}_{\xi_1+\xi_2=0} \left(\Psi(\boldsymbol{c}, \boldsymbol{\xi}) + \int_{\Omega} \xi_1 \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta c_1} \right)$$

$$\begin{split} \inf_{\boldsymbol{\xi}} \left(\Psi(\boldsymbol{c}, \boldsymbol{\xi}) + \int_{\Omega} \xi_{1} p_{c} \right) \\ &= \inf_{\boldsymbol{J}} \sum_{i} \frac{1}{2} \int_{\Omega} \frac{|J_{i}|^{2}}{c_{i}} + \sup_{\lambda} \int_{\Omega} (J_{1} + J_{2}) \cdot \boldsymbol{\nabla} \lambda + \int_{\Omega} J_{1} \cdot \boldsymbol{\nabla} p_{c} \end{split}$$

Sur l'aspect non-local du modèle L'application $c \mapsto p$ est non-locale. En effet, p_2 vérifie $-\Delta p_2 = \nabla \cdot (c_1 \nabla p_c) + \text{conditions limites}$

C. Cancès (Inria RAPSODI)

Cahn-Hiiliard non-local

Récapitulatif du système obtenu

► Convection pilotée par les pressions de phase

$$\partial_t c_i - \boldsymbol{\nabla} \cdot (c_i \boldsymbol{\nabla} p_i) = 0$$

► Contrainte sur les fractions volumiques

$$c_1+c_2=1$$

• Équation sur la pression capillaire p_c

$$p_{\mathsf{c}} = p_1 - p_2 = -\epsilon \Delta c_1 + rac{1}{\epsilon} (1 - 2c_1)$$

Normalisation des pressions de phase

$$\overline{p} = c_1 p_1 + c_2 p_2, \qquad \int_{\Omega} \overline{p} = 0$$

C. Cancès (Inria RAPSODI)

Existence d'une solution globale en temps

Schéma JKO [Jordan, Kinderlehrer & Otto '98]

Étant donné un pas de temps au > 0,

$$\boldsymbol{c}^n \in \operatorname{argmin}_{\boldsymbol{c}} \left[\mathcal{E}(\boldsymbol{c}) + \chi_{\{\boldsymbol{c_1} + \boldsymbol{c_2} = 1\}}(\boldsymbol{c}) + \frac{1}{2\tau} \boldsymbol{W}^2(\boldsymbol{c}, \boldsymbol{c}^{n-1}) \right]$$

où $\boldsymbol{W}^2(\boldsymbol{c}, \boldsymbol{c}^{n-1}) = \sum_i W^2(c_i, c_i^{n-1})$ est la distance de Wasserstein tensorisée

Existence d'une solution globale en temps

Schéma JKO [Jordan, Kinderlehrer & Otto '98]

Étant donné un pas de temps au > 0,

$$\boldsymbol{c}^{n} \in \operatorname{argmin}_{\boldsymbol{c}}\left[\mathcal{E}(\boldsymbol{c}) + \chi_{\{\boldsymbol{c_{1}+c_{2}=1}\}}(\boldsymbol{c}) + \frac{1}{2\tau}\boldsymbol{W}^{2}(\boldsymbol{c},\boldsymbol{c}^{n-1})\right]$$

où $\boldsymbol{W}^2(\boldsymbol{c}, \boldsymbol{c}^{n-1}) = \sum_i W^2(c_i, c_i^{n-1})$ est la distance de Wasserstein tensorisée

Convergence du schéma JKO [C., Matthes & Nabet '19]

À l'extraction d'une sous-suite près,

$$oldsymbol{c}_{ au} \mathop{\longrightarrow}\limits_{ au
ightarrow 0} oldsymbol{c} \quad ext{in } L^2_{\mathsf{loc}}(\mathbb{R}_+; \mathcal{W}^{1,d}(\Omega))$$

où c est une solution du problème continu

$$\partial_t c_i - \nabla \cdot (c_i \nabla p_i) = 0 \tag{1}$$

$$c_1 + c_2 = 1 \tag{2}$$

$$p_1 - p_2 = -\epsilon \Delta c_1 + \frac{1}{\epsilon} (1 - 2c_1) = \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta c_1} \tag{3}$$

$$\int_{\Omega} \overline{p} = 0 \quad \text{avec} \quad \overline{p} = c_1 p_1 + c_2 p_2 \tag{4}$$

Dissipation de l'énergie. On teste (1) par *p_i* et on somme sur *i*

$$\sum_{i} \int_{\Omega} \partial_{t} c_{i} p_{i} + \sum_{i} \int_{\Omega} c_{i} |\nabla p_{i}|^{2} = 0$$

$$\stackrel{(2)}{\Longrightarrow} \int_{\Omega} \partial_{t} c_{1} (p_{1} - p_{2}) + \sum_{i} \int_{\Omega} c_{i} |\nabla p_{i}|^{2} = 0$$

$$\stackrel{(3)}{\Longrightarrow} \int_{\Omega} \partial_{t} c_{1} \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta c_{1}} + \sum_{i} \int_{\Omega} c_{i} |\nabla p_{i}|^{2} = 0$$

$$\partial_t c_i - \nabla \cdot (c_i \nabla p_i) = 0 \tag{1}$$

$$c_1 + c_2 = 1 \tag{2}$$

$$p_1 - p_2 = -\epsilon \Delta c_1 + \frac{1}{\epsilon} (1 - 2c_1) = \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta c_1} \tag{3}$$

$$\int_{\Omega} \overline{p} = 0 \quad \text{avec} \quad \overline{p} = c_1 p_1 + c_2 p_2 \tag{4}$$

Dissipation de l'énergie.

$$\mathcal{E}(\boldsymbol{c}(\mathcal{T})) + \int_0^{\mathcal{T}} \sum_i \int_{\Omega} c_i |\boldsymbol{\nabla} p_i|^2 \leq \mathcal{E}(\boldsymbol{c}^0) < +\infty$$

$$\partial_t c_i - \nabla \cdot (c_i \nabla p_i) = 0 \tag{1}$$

$$c_1 + c_2 = 1 \tag{2}$$

$$p_1 - p_2 = -\epsilon \Delta c_1 + \frac{1}{\epsilon} (1 - 2c_1) = \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta c_1} \tag{3}$$

$$\int_{\Omega} \overline{p} = 0 \quad \text{avec} \quad \overline{p} = c_1 p_1 + c_2 p_2 \tag{4}$$

Production d'entropie. On teste (1) par $log(c_i)$ et on somme sur *i*

$$\sum_{i} \int_{\Omega} \partial_{t} c_{i} \log(c_{i}) + \sum_{i} \int_{\Omega} \nabla p_{i} \cdot \nabla c_{i} = 0$$

$$\stackrel{(2)}{\Longrightarrow} \int_{\Omega} \partial_{t} h(c_{1}) + \int_{\Omega} \nabla c_{1} \cdot \nabla (p_{1} - p_{2}) = 0$$

$$\stackrel{(3)}{\Longrightarrow} \frac{d}{dt} \mathcal{H}(\mathbf{c}) + \int_{\Omega} \nabla c_{1} \cdot \nabla (-\epsilon \Delta c_{1} - \frac{2}{\epsilon} c_{1}) = 0$$

$$\partial_t c_i - \nabla \cdot (c_i \nabla p_i) = 0 \tag{1}$$

$$c_1 + c_2 = 1 \tag{2}$$

$$p_1 - p_2 = -\epsilon \Delta c_1 + \frac{1}{\epsilon} (1 - 2c_1) = \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta c_1} \tag{3}$$

$$\int_{\Omega} \overline{p} = 0 \quad \text{avec} \quad \overline{p} = c_1 p_1 + c_2 p_2 \tag{4}$$

Production d'entropie.

$$\int_0^T \int_\Omega |\Delta c_1|^2 \leq C_\epsilon (1+T) < +\infty$$

$$\begin{split} \Omega \text{ convexe } & \Longrightarrow \ \|c_1\|_{L^2((0,T);H^2(\Omega))} \leq C_{\epsilon,T} \\ d \leq 3 & \Longrightarrow \ \|c_1\|_{L^2((0,T);W^{1,d}(\Omega))} \leq C_{\epsilon,T} \end{split}$$

$$(3) \implies \|p_1 - p_2\|_{L^2((0,T);L^2(\Omega))} \leq C_{\epsilon,T}$$

$$\partial_t c_i - \nabla \cdot (c_i \nabla p_i) = 0 \tag{1}$$

$$c_1 + c_2 = 1 \tag{2}$$

$$p_1 - p_2 = -\epsilon \Delta c_1 + \frac{1}{\epsilon} (1 - 2c_1) = \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta c_1} \tag{3}$$

$$\int_{\Omega} \overline{p} = 0 \quad \text{avec} \quad \overline{p} = c_1 p_1 + c_2 p_2 \tag{4}$$

Contrôle des pressions de phase.

$$egin{aligned} oldsymbol{
aligned} oldsymbol{
aligned} oldsymbol{
aligned} \overline{p} &= \sum_i c_i oldsymbol{
aligned} p_i + \sum_i p_i oldsymbol{
aligned} c_i \ &= \sum_i c_i oldsymbol{
aligned} p_i + oldsymbol{
aligned} c_1 (p_1 - p_2) \end{aligned}$$

$$\partial_t c_i - \nabla \cdot (c_i \nabla p_i) = 0 \tag{1}$$

$$c_1 + c_2 = 1 \tag{2}$$

$$p_1 - p_2 = -\epsilon \Delta c_1 + \frac{1}{\epsilon} (1 - 2c_1) = \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta c_1} \tag{3}$$

$$\int_{\Omega} \overline{p} = 0 \quad \text{avec} \quad \overline{p} = c_1 p_1 + c_2 p_2 \tag{4}$$

Contrôle des pressions de phase.

$$\boldsymbol{\nabla} \overline{p} = \sum_{i} c_{i} \boldsymbol{\nabla} p_{i} + \sum_{i} p_{i} \boldsymbol{\nabla} c_{i}$$

$$\stackrel{(2)}{=} \sum_{i} c_{i} \boldsymbol{\nabla} p_{i} + \boldsymbol{\nabla} c_{1} (p_{1} - p_{2}) \in L^{2} ((0, T); L^{1}(\Omega)^{d})$$

$$\partial_t c_i - \nabla \cdot (c_i \nabla p_i) = 0 \tag{1}$$

$$c_1 + c_2 = 1 \tag{2}$$

$$p_1 - p_2 = -\epsilon \Delta c_1 + \frac{1}{\epsilon} (1 - 2c_1) = \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta c_1} \tag{3}$$

$$\int_{\Omega} \overline{p} = 0 \quad \text{avec} \quad \overline{p} = c_1 p_1 + c_2 p_2 \tag{4}$$

Contrôle des pressions de phase.

$$\nabla \overline{p} = \sum_{i} c_{i} \nabla p_{i} + \sum_{i} p_{i} \nabla c_{i}$$

$$\stackrel{(2)}{=} \sum_{i} c_{i} \nabla p_{i} + \nabla c_{1} (p_{1} - p_{2}) \in L^{2}((0, T); L^{1}(\Omega)^{d})$$

(4) + injection de Sobolev $\implies \|\overline{p}\|_{L^2((0,T);L^{\frac{d}{d-1}}(\Omega))} \leq C_{\epsilon,T}$

$$\partial_t c_i - \nabla \cdot (c_i \nabla p_i) = 0 \tag{1}$$

$$c_1 + c_2 = 1 \tag{2}$$

$$p_1 - p_2 = -\epsilon \Delta c_1 + \frac{1}{\epsilon} (1 - 2c_1) = \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta c_1} \tag{3}$$

$$\int_{\Omega} \overline{p} = 0 \quad \text{avec} \quad \overline{p} = c_1 p_1 + c_2 p_2 \tag{4}$$

Contrôle des pressions de phase.

$$p_1 \stackrel{(2)}{=} (c_1 + c_2) p_1 \stackrel{(4)}{=} \overline{p} + c_2(p_1 - p_2) \in L^2((0, T); L^{\frac{d}{d-1}}(\Omega))$$

En particulier,

$$c_i \in L^2((0,T); W^{1,d}(\Omega))$$
 et $p_i \in L^2((0,T); L^{\frac{d}{d-1}}(\Omega))$

 $\implies c_i \nabla p_i$ est une distribution \implies (1) a un sens

Approximation volumes finis

[C. & Nabet '21]

- Maillage admissible (Delaunay)
- Flux numériques à deux points
- Agitation thermique numérique

- Moyenne log pour les mobilités
- Décomposition convexe / concave de *E* (implicite / explicite)
- ► Résolution avec Newton

Convergence

Il existe (au moins) une solution $(\boldsymbol{c}_{h\tau}, \boldsymbol{p}_{h\tau})$ au schéma, et

 $\mathcal{E}(\boldsymbol{c}_h^{n+1}) \leq \mathcal{E}(\boldsymbol{c}_h^n).$

De plus, en dimension d = 2, on a les convergences suivantes (à sous-suite près)

$$egin{aligned} m{c}_{h au} & \longrightarrow \\ h, au o 0 \end{aligned} m{c} \quad \text{p.p. dans } \mathbb{R}_+ imes \Omega \end{aligned}$$
 $m{p}_{h au} & \longrightarrow \\ m{p}_{h au} & \longrightarrow \\ h, au o 0 \end{array} m{p} \quad \text{faiblement dans } L^2(\mathbb{R}_+ imes \Omega)^2 \end{aligned}$

où (*c*, *p*) est une solution du problème continu.

Croix vers cercle

Avec gravité

Décomposition spinodale : mélange équilibré

Décomposition spinodale : mélange déséquilibré

Décomposition spinodale : mélange déséquilibré avec gravité

Plan de l'exposé

Quelques généralités à propos des flots de gradient

Dun modèle de Cahn-Hilliard non-local à deux flux

3 Comparaison avec le modèle de Cahn-Hilliard dégénéré local

4 Conclusion

Le système de Cahn-Hilliard dégénéré local «classique»

[Cahn '61], [De Gennes '80], [Cahn, Elliott & Novick-Cohen '96], [Elliott & Garcke '96], ...

 Évolution pilotée par le gradient de la pression capillaire avec mobilité non-linéaire

$$\partial_t c_1 - \boldsymbol{\nabla} \cdot (c_1(1-c_1)\boldsymbol{\nabla} p_c) = 0$$

Même équation que précédemment pour la pression capillaire p_c

$$p_{\mathsf{c}} = -\epsilon \Delta c_1 + rac{1}{\epsilon} \; (1-2c_1)$$

Remarque : p_c et donc l'évolution dépend de manière locale de c

Le modèle classique comme flot de gradient généralisé

[Lisini-Matthes-Savaré '12]

• Même «variété» que le modèle non-local

$$\mathcal{M} = \left\{ oldsymbol{c} = (c_1, c_2) : \Omega
ightarrow \mathbb{R}^2_+ \ \Big| \ c_1 + c_2 = 1 \ ext{et} \ \int_\Omega c_1 = \int_\Omega c_1^0
ight\}$$

• Énergie identique aussi

$$\mathcal{E}(\boldsymbol{c}) = rac{\epsilon}{2} \int_{\Omega} |\boldsymbol{\nabla} c_1|^2 + rac{1}{\epsilon} \int_{\Omega} c_1(1-c_1) \, .$$

Dissipation différente

$$\Psi(\boldsymbol{c},\boldsymbol{\xi}) = \inf_{\substack{\boldsymbol{\xi}+\nabla \cdot J=0\\ J_{1}+J_{2}=0}} \frac{1}{2} \int_{\Omega} \sum_{i} \frac{|J_{i}|^{2}}{c_{i}} = \inf_{\boldsymbol{\xi}_{1}+\nabla \cdot J_{1}=0} \frac{1}{2} \int_{\Omega} \frac{|J_{1}|^{2}}{c_{1}(1-c_{1})}$$
$$\Psi^{*}(\boldsymbol{c},\boldsymbol{p}) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} c_{1}(1-c_{1}) |\nabla p_{c}|^{2}$$

Dissipation d'énergie du modèle local

$$egin{aligned} &\partial_t c_1 - oldsymbol{
abla} \cdot (c_1(1-c_1)oldsymbol{
abla} p_c) = 0 \ &p_c = -\epsilon\Delta c_1 + rac{1}{\epsilon}(1-2c_1) \end{aligned}$$

En testant (5) par p_c on obtient

$$rac{d}{dt}\mathcal{E}(oldsymbol{c})+\int_{\Omega}c_1(1-c_1)|oldsymbol{
abla}oldsymbol{p}_c|^2=0$$

(5) (6)

Retour au modèle non-local

► Flux de chaque phase

$$\partial_t c_i + \boldsymbol{\nabla} \cdot J_i = 0, \qquad J_i = -c_i \boldsymbol{\nabla} p_i$$

Flux total

$$\mathbf{\nabla} \cdot J_{ ext{tot}} = 0$$
 avec $J_{ ext{tot}} = J_1 + J_2$

▶ Réécriture des flux sous forme convection + diffusion

$$\begin{aligned} J_1 &= -c_1 \nabla p_1 = -c_1 (c_1 + c_2) \nabla p_1 \\ &= c_1 (-c_1 \nabla p_1 - c_2 \nabla p_2) - c_1 c_2 \nabla p_c = c_1 J_{\text{tot}} - c_1 (1 - c_1) \nabla p_c \end{aligned}$$

Dissipation de l'énergie plus rapide que le modèle local

$$rac{d}{dt}\mathcal{E}(oldsymbol{c})+\int_{\Omega}\left(|J_{ ext{tot}}|^2+c_1(1-c_1)|oldsymbol{
abla}
ho_c|^2
ight)=0$$

▶ Même modèle en 1D $(J_{tot} = 0)$! Et si $d \ge 2$?

Comparaison numérique des modèles 'Non-local' (haut) vs 'Local' (bas)



Comparaison numérique des modèles 'Non-local' (haut) vs 'Local' (bas)













t = 1



 $t = 5.10^{-2}$

Évolution temporelle de l'énergie $\mathcal{E}(\boldsymbol{c})$



Plan de l'exposé

Quelques généralités à propos des flots de gradient

2 Un modèle de Cahn-Hilliard non-local à deux flux

3 Comparaison avec le modèle de Cahn-Hilliard dégénéré local



Conclusions et perspectives

Conclusions

- «Nouveau» modèle obtenu comme flot de gradient Wasserstein contraint [E & Palffy-Muhoray '97, Otto & E '97]
- ► Existence d'une solution globale : convergence du schéma JKO (d ≤ 3) et volumes finis (d ≤ 2)

Perspectives

...

- Extensions naturelles à des physiques plus complexes (triphasique, compositionnel, ...)
- Analyse numérique pour d = 3
- Dissipation liée à Stokes plutôt qu'à Darcy