

Definitif
[99NICE5300 bis]

UNIVERSITÉ DE NICE-SOPHIA ANTIPOLIS
U.F.R. FACULTÉ DES SCIENCES

Département de Mathématiques
Laboratoire J. A. Dieudonné U.M.R. CNRS N° 6621

THÈSE

présentée pour obtenir le titre de

DOCTEUR EN SCIENCES

spécialité Mathématiques et Applications des Mathématiques

**UNE VERSION MODIFIÉE DU MODÈLE DE
LIFSHITZ-SLYOZOV : EXISTENCE ET UNICITÉ DE LA
SOLUTION, SIMULATION NUMÉRIQUE.**

Sara Cécile HARIZ

Soutenue le 23 Juin 1999 à 14h devant le jury composé de :

Michel RASCLE
Ansgar JÜNGEL
Philippe LAURENÇOT
Jean-François COLLET
Frédéric POUPAUD
Thierry GOUDON

Professeur
Maître de conférence
CR CNRS
Maître de conférence
Professeur
Maître de conférence

Président
Rapporteur
Rapporteur
Directeur de Thèse
Directeur de Thèse
Examineur



UNIVERSITÉ DE NICE-SOPHIA ANTIPOLIS
U.F.R. FACULTÉ DES SCIENCES

Département de Mathématiques
Laboratoire J. A. Dieudonné U.M.R. CNRS N° 6621

THÈSE

présentée pour obtenir le titre de

DOCTEUR EN SCIENCES

spécialité Mathématiques et Applications des Mathématiques

**UNE VERSION MODIFIÉE DU MODÈLE DE
LIFSHITZ-SLYOZOV : EXISTENCE ET UNICITÉ DE LA
SOLUTION, SIMULATION NUMÉRIQUE.**

Sara Cécile HARIZ

Soutenue le 23 Juin 1999 devant le jury composé de :

Michel RASCLE	Professeur	Président
Ansgar JÜNGEL	Maître de conférence	Rapporteur
Philippe LAURENÇOT	CR CNRS	Rapporteur
Jean-François COLLET	Maître de conférence	Directeur de Thèse
Frédéric POUPAUD	Professeur	Directeur de Thèse
Thierry GOUDON	Maître de conférence	Examineur

NNB 10319028



Table des matières

1	Introduction générale	5
1.1	Des modèles cinétiques classiques de transition de phase	5
1.2	Les modèles de Becker-Döring et de Lifshitz-Slyozov	8
1.2.1	Le modèle de Becker-Döring	8
1.2.2	Le modèle de Lifshitz-Slyozov	12
1.3	Les équilibres en détails	14
1.3.1	Le modèle de Becker-Döring	14
1.3.2	Le modèle de Lifshitz-Slyozov classique	16
2	Le nouveau modèle	19
2.1	Le modèle de Lifshitz-Slyozov modifié	19
2.1.1	Les équilibres en détail	20
2.1.2	Remarques sur la donnée au bord	20
2.1.3	Concentration de saturation et densité de saturation	20
2.2	Comparaison entre les modèles	22
2.2.1	La densité de saturation	23
2.2.2	Les équilibres en détail	23
2.2.3	Conclusion	25
3	Le problème mathématique	27
3.1	Introduction	27
3.1.1	Les notations	28
3.1.2	Propriétés de W	28
3.1.3	Les équations	30
3.1.4	Les hypothèses	30
3.2	Définition d'une solution faible	31
3.3	Le théorème d'existence et d'unicité	31
4	Le problème linéaire	33
4.1	Existence pour le problème approché et estimations à priori	35
4.2	Unicité pour l'équation linéaire	37
4.3	Passage à la limite dans la forme faible des équations	38
4.4	Principe du maximum pour f	41

5 Propagation des moments	43
5.1 Propagation des moments de f	43
5.2 Propagation des moments de f^2	50
6 Le problème couplé : Existence	55
6.1 Existence d'un point fixe pour le schéma itératif Γ	55
6.2 Existence pour le système de Lifshitz-Slyozov modifié	61
7 Unicité pour le système couplé	63
7.1 Le théorème et le début de la preuve	63
7.2 Quelques lemmes	64
7.3 Fin de la preuve	67
8 Numérique : le système de Becker-Döring	71
8.1 Introduction	71
8.2 Les équilibres en détail	72
8.3 Le schéma numérique	73
8.4 Méthode implicite	74
8.4.1 Méthode de Newton-Raphson	75
8.4.2 Contrôle du pas de temps	76
8.4.3 Retour au problème particulier de Becker-Döring	78
8.5 L'entropie	79
8.5.1 Le système continu en temps	79
8.5.2 Le schéma numérique	80
8.6 Un exemple de noyau de coagulation et de fragmentation	81
8.6.1 Introduction	81
8.6.2 Effet des coefficients cinétiques sur les équilibres en détail	82
8.6.3 Résultats numériques	84
9 Numérique : le système de Lifshitz-Slyozov Modifié	91
9.1 Introduction	91
9.2 Les équations	91
9.3 La discrétisation	92
9.3.1 Méthode de Newton-Raphson	94
9.3.2 Résolution du problème linéaire	95
9.4 Un problème test	97
10 Conclusion	101
A Démonstration de lemmes	103
A.1 Le lemme de Cesaro modifié	103
A.2 Lemme A.2.24	103

Chapitre 1

Introduction générale

1.1 Des modèles cinétiques classiques de transition de phase

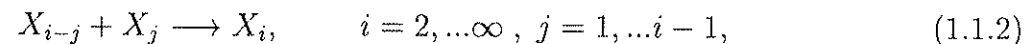
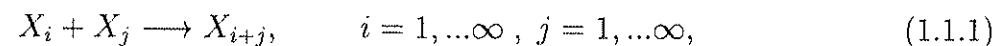
Les phénomènes de transition de phases sont fréquemment rencontrés dans la nature et sont à la base d'un grand nombre de procédés industriels. Certains exemples physiques dans lesquels apparaissent ces phénomènes sont :

- La polymérisation [1, 48].
- La condensation de gouttelettes liquides dans une vapeur saturée [38, 37, 36, 24].
- L'agglomération d'algues (ou de micro-organismes) dans l'océan.
- Les processus biologiques où interviennent l'agglomération de molécules et leur fragmentation.
- Physique et chimie des aérosols [45, 20].
- La production d'alumine (matériau qui sert à 90 % à la fabrication de l'aluminium), résultat de l'agglomération de particules d'hydrargillite [39].
- La germination : Etape de transition entre deux états d'organisation de la matière, elle aboutit à la création d'une nouvelle phase dispersée dans le volume ou à la surface de la phase mère [15].

Dans tous les cas, on est en présence d'un grand nombre de particules (de molécules, d'ions de soluté ...) de même nature, sous forme isolée (des *monomères*), ou rassemblés en clusters (agrégats, embryons ...) de taille i (groupes contenant i particules élémentaires). Les clusters se forment et se décomposent continuellement, ceci comme résultat de réactions bimoléculaires (l'aggrégation) et cassure spontanée de l'aggrégat en deux clusters de taille inférieure.

Historiquement, les premiers modèles apparus sont à taille discrète. Les premières équations sont dues à *Smoluchowski* [42] qui a modélisé le phénomène irréversible d'agglomération d'objets. Ces équations sont basées sur l'application de la loi d'action de masse à des réactions du

type :



où X_i représente les agrégats contenant i particules.

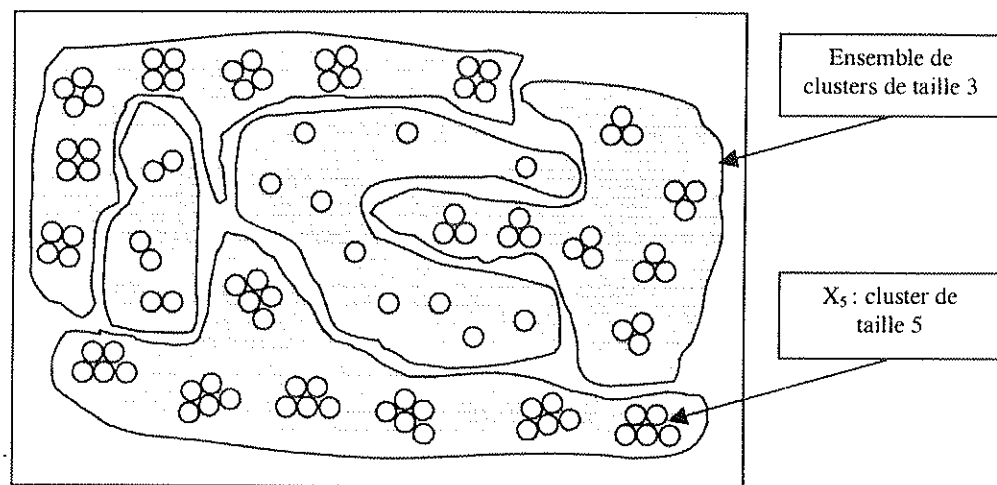


FIG. 1.1: Système d'agrégats

On désigne par $c_i(t)$ le nombre total de clusters X_i par unité de volume au temps t . Le système d'équations de *Smoluchowski* décrit l'évolution au cours du temps des concentrations $c_i(t)$:

$$\frac{dc_i}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} k_{j,i-j} c_j c_{i-j} - \sum_{j=1}^{\infty} k_{j,i} c_j c_i \quad i = 1, \dots, \infty, \quad t > 0. \quad (1.1.3)$$

La densité totale de particules $\rho(t)$ est donnée par :

$$\rho(t) = \sum_{i=1}^{\infty} i c_i(t) \quad (1.1.4)$$

$k_{i,j}$, le coefficient cinétique de coagulation est une quantité positive et ne dépend que de i et j , il représente la probabilité pour qu'un cluster X_i se coagule avec un cluster X_j pour donner un cluster X_{i+j} .

Le facteur $\frac{1}{2}$ dans (1.1.3) est dû au fait que à chaque i fixé, la réaction (1.1.2) est comptabilisée deux fois alors que la réaction (1.1.1) n'apparaît qu'une seule fois.

Une équation plus complète intégrant la coagulation et la fragmentation pour des réactions chimiques du type : (1.1.1)–(1.1.2) est donnée par Spouge [43] :

$$\frac{dc_i}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} k_{j,i-j} c_j c_{i-j} + \sum_{j=1}^{\infty} q_{j,i} c_{i+j} - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} q_{j,i-j} c_i - \sum_{j=1}^{\infty} k_{j,i} c_j c_i \quad i = 1, \dots, \infty, \quad t > 0. \quad (1.1.5)$$

l'équation pour la densité restant inchangée.

$q_{i,j}$ est le coefficient cinétique de fragmentation. Cette quantité est positive et ne dépend que des tailles i et j , c'est la probabilité qu'un cluster X_{i+j} se fragmente pour donner deux clusters, l'un de taille i et l'autre de taille j .

On a les relations de symétrie suivantes pour les coefficients cinétiques de coagulation et de fragmentation : $k_{i,j} = k_{j,i}$ et $q_{j,i} = q_{i,j}$.

Des résultats numériques, d'existence, d'unicité, de conservation de la masse et de comportement asymptotique sont donnés dans [43, 3, 22, 23, 21].

Le modèle de *Smoluchowski* est basé sur l'hypothèse que les clusters sont uniformément répartis en espace.

Récemment, plusieurs auteurs ont étudié l'existence, l'unicité et le comportement asymptotique pour des modèles de fragmentation-coagulation, avec diffusion spatiale [6, 14, 13, 47, 31, 41].

Les modèles décrits ci-dessus sont adaptés au cas où l'on décrit la dynamique de croissance de clusters formés d'un nombre fini de petites particules élémentaires.

En notant que de nombreuses substances sont formées de longues chaînes de polymères soumises au même type de réactions binaires décrite précédemment (1.1.1)–(1.1.2), il paraît naturel dans des cas où les petits clusters sont présents en petit nombre et n'interviennent que peu dans la dynamique du système, de considérer la taille discrète i comme une variable continue x , où x joue le rôle d'un volume.

$k(x)$ et $q(x)$ sont respectivement les noyaux continus de coagulation et de fragmentation. Ces modèles décrivent l'évolution en temps de la densité en taille $c(t, x)$.

Melzak [33] a proposé un modèle continu basé sur l'équation cinétique :

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t}(t, x) = & \frac{1}{2} \int_0^x k(y, x-y) c(t, y) c(t, x-y) dy + \int_x^\infty q(y-x, x) c(t, y) dy \\ & - \frac{1}{2} c(t, x) \int_0^x q(y, x-y) dy - c(t, x) \int_0^\infty k(x, y) c(t, y) dy, \end{aligned}$$

couplée à une équation continue pour la densité totale de particules :

$$\rho(t) = \int_0^\infty x c(t, x) dx.$$

De nombreux travaux ont été effectués sur le modèle continu, on peut se référer pour cela à [1, 48].

Un modèle cinétique simplifié peut être obtenu à partir des équations de coagulation-fragmentation (1.1.5).

En effet, si dans les équations (1.1.5) on pose :

$k_{j,1} = k_{1,j} = k_j$, $q_{j,1} = q_{1,j} = q_{j+1}$, et tous les autres $k_{j,i}$ et $q_{j,i}$ sont mis à zéro, on obtient le système de Becker-Döring.

On s'intéresse dans cette thèse au modèle de Becker-Döring et à ses liens avec son analogue continu, le système de Lifshitz-Slyozov.

1.2 Les modèles de Becker-Döring et de Lifshitz-Slyozov

1.2.1 Le modèle de Becker-Döring

Le système cinétique introduit par Becker-Döring en 1935 [5] peut être utilisé pour modéliser une grande variété de phénomènes en cinétique de transitions de phase.

A chaque instant, la configuration des atomes du soluté est décrite en les considérant selon un groupement en clusters et en suivant les échanges qui se produisent entre ces clusters.

Un cluster de taille i , X_i , dit aussi i -cluster est un groupe contenant i atomes à dissoudre.

Un 1-cluster est appelé *monomère*.

On définit $c_i(t)$ comme étant la concentration en i -clusters par unité de volume, au temps t .

Les clusters sont supposés distribués de manière uniforme dans l'espace, ce qui nous amène à manipuler des concentrations c_i ne dépendant pas de la variable d'espace.

On va étudier ici les équations de Becker-Döring (1935) dans leur forme modifiée par Burton en 1977 [8].

L'évolution du système, c'est-à-dire de la distribution en taille des clusters au cours du temps, est supposée être régie uniquement par les deux processus :

- La coagulation d'un cluster X_i de taille i avec un monomère pour donner un cluster grossi d'un atome.
- Le second processus est l'inverse du premier, c'est-à-dire : un cluster peut se fracturer en deux parties, l'une d'entre elle étant obligatoirement un monomère.

Le taux auquel un i -cluster est converti en un $(i+1)$ -cluster et inversement, comme

résultat des deux processus décrits précédemment est noté J_i (en unité de cluster, par unité de temps, par unité de volume). Si J_i est positif, ce processus tend à faire décroître la concentration en i -cluster c_i . Ceci est représenté par des réactions chimiques de la forme :



Ce phénomène de décroissance de la concentration c_i est contrebalancé par le processus d'interconversion entre des $(i-1)$ -clusters et des i -clusters avec un taux J_{i-1} . Si J_{i-1} est positif, ce processus tend alors à faire croître la concentration en i -clusters c_i .

En définitive, le taux total de changement pour c_i pour tout $i \neq 1$ est obtenu comme la somme algébrique des deux taux J_{i-1} et J_i définis précédemment :

$$\frac{dc_i}{dt} = J_{i-1}(c) - J_i(c), \quad i \geq 2. \quad (1.2.7)$$

En ce qui concerne le taux de changement en concentration des monomères c_1 , une équation particulière s'impose, du fait de la participation des monomères dans tous les processus.

L'interconversion des i - et $(i+1)$ -clusters utilise des monomères à un taux J_i , excepté dans le cas $i = 1$ où les monomères sont utilisés à un taux $2J_1$ car dans ce cas deux monomères participent dans chaque conversion.

Le taux total de changement de concentration en monomères c_1 est :

$$\frac{dc_1}{dt} = -J_1(c) - \sum_{i=1}^{\infty} J_i(c). \quad (1.2.8)$$

Afin de compléter le système d'équations (1.2.7) et (1.2.8) nous devons décrire plus en détail la dépendance des taux J_i en fonction des concentrations c_i .

Ceci provient de l'application de la loi d'action de masses à des réactions chimiques de la forme (1.2.6).

Le nombre de fois qu'un i -cluster réagit avec un monomère, par unité de temps par unité de volume, est proportionnel aux densités respectives c_i et c_1 des i -clusters et des monomères, donc pour former le taux J_i ce type de processus contribue alors avec un terme $k_i c_i c_1$, et le coefficient cinétique de coagulation k_i est indépendant du temps. Il peut aussi être interprété comme une probabilité.

De la même manière, le processus de fragmentation d'un $(i+1)$ -cluster pour donner un i -cluster et un monomère se fait de manière spontanée et le nombre de fois que ce phénomène se produit par unité de volume par unité de temps est proportionnel à c_{i+1} . Ce type de processus contribue avec un terme $-q_{i+1} c_{i+1}$ dans J_i , et q_{i+1} est le coefficient cinétique de fragmentation.

La relation complète pour le taux J_i qui est appelé aussi vitesse de la réaction est alors donnée par :

$$J_i = k_i c_i c_1 - q_{i+1} c_{i+1}, \quad i \geq 1. \quad (1.2.9)$$

Le système d'équations (1.2.7), (1.2.8) et (1.2.9) est le système de Becker-Döring.

Ce modèle a largement été exploré du point de vue physique et numérique [17, 18, 16, 38, 37, 36] et une abondante littérature sur l'aspect mathématique et numérique de ces équations est disponible [4, 2, 10, 40, 34].

Des résultats d'existence et de comportement asymptotique pour les équations de Becker-Döring avec diffusion en taille ont été donnés récemment dans [30, 29]. On rappelle brièvement certains des résultats démontrés dans [4] :

On commence par donner la définition d'une solution $c = (c_i)_{i \in \mathbb{N}^*}$:

Définition 1.2.1. [4] Soit $0 < T \leq \infty$. Une solution $c = (c_i)_{i \in \mathbb{N}^*}$ de (1.2.7)–(1.2.9) sur $[0, T)$ est une fonction $c : [0, T) \rightarrow Y = \{y = (y_i) : \sup_{t \in [0, T)} \sum_{i=1}^{\infty} i |y_i(t)| < \infty\}$ telle que :

- $c_i(t) \geq 0 \quad \forall i \in \mathbb{N}^* \quad \forall t \in [0, T)$,
- $\int_0^t \sum_{i=1}^{\infty} k_i c_i(s) ds < \infty, \quad \int_0^t \sum_{i=2}^{\infty} q_i c_i(s) ds < \infty \quad \forall t \in [0, T)$,
- $c_i(t) = c_i(0) + \int_0^t (J_{i-1}(c(s)) - J_i(c(s))) ds \quad i \geq 2$,
- $c_1(t) = c_1(0) - \int_0^t \left(J_1(c(s)) + \sum_{i=1}^{\infty} J_i(c(s)) \right) ds$,

où $J_i(c)$ est donné par (1.2.9).

Théorème 1.2.1. [4] On fait les hypothèses suivantes sur le coefficient cinétique de coagulation et sur la donnée initiale :

$$k_i = O(i) \quad (i \rightarrow \infty), \quad (1.2.10)$$

$$c_i(0) \geq 0 \quad i \geq 1, \quad (1.2.11)$$

$$\sum_{i=1}^{\infty} i c_i(0) < \infty. \quad (1.2.12)$$

Alors, pour tout temps t positif, le système de Becker-Döring possède au moins une solution.

Théorème 1.2.2. [4] Si en plus des hypothèses (1.2.10), (1.2.11) et (1.2.12) on suppose :

$$\sum_{i=1}^{\infty} i^2 c_i(0) < \infty, \quad (1.2.13)$$

alors la solution du système de Becker-Döring (1.2.7)–(1.2.9) est unique.

Remarque 1.2.1. Si les coefficients de coagulation k_i croissent plus vite que i lorsque $i \rightarrow \infty$, alors il n'existe pas de solution pour le système d'équations (1.2.7)–(1.2.9).

Le modèle de Becker-Döring est formulé de sorte à conserver la densité : au cours de l'évolution du système, le nombre total d'atomes reste inchangé.

On définit alors la densité $\rho(t)$ des atomes à dissoudre comme le nombre total d'atomes par unité de volume au temps t :

$$\rho(t) := \sum_{i=1}^{\infty} i c_i(t). \quad (1.2.14)$$

Ball, Carr et Penrose [4], montrent en utilisant les deux équations (1.2.7) et (1.2.8), que pour le modèle de Becker-Döring, la densité ρ est conservée au cours du temps :

Théorème 1.2.3. [4] Soit c une solution du système (1.2.7)–(1.2.9) sur un intervalle de temps $[0, T[$, $0 < T \leq \infty$, alors pour tout $t \in [0, T[$ on a :

$$\rho = \sum_{i=1}^{\infty} i c_i(t) = \sum_{i=1}^{\infty} i c_i(0) \quad (1.2.15)$$

Ce résultat peut aussi être obtenu en effectuant un calcul formel sur le système de Becker-Döring (1.2.7), (1.2.8) et (1.2.9) :

$$\begin{aligned} \frac{d\rho(t)}{dt} &= \frac{d}{dt} \sum_{i=1}^{\infty} i c_i(t) = \sum_{i=1}^{\infty} i \frac{dc_i(t)}{dt} \\ &= -2J_1 - \sum_{i=2}^{\infty} J_i + \sum_{i=2}^{\infty} i(J_{i-1} - J_i) \\ &= \sum_{i=2}^{\infty} (-1 + (i+1) - i) J_i \\ &= 0. \end{aligned}$$

Si la permutation entre le signe de différentiation et la somme infinie est justifiée, ainsi que les réarrangements dans la somme infinie, la densité $\rho(t)$ est indépendante du temps, et reste égale à la densité initiale : $\rho(t) = \rho(0)$.

Cependant, les sommes manipulées étant infinies, il n'est pas évident que les calculs formels précédents soient justifiés. Il existe des systèmes similaires à celui de Becker-Döring pour lesquels la densité n'est pas constante mais décroît au cours du temps, c'est notamment le cas pour les équations de coagulation-fragmentation, pour lesquelles il peut apparaître un phénomène de *gélification*, c'est-à-dire de perte de masse en temps fini.

Ce phénomène de décroissance temporelle de la densité totale des agrégats est décrit dans [25, 9, 27] pour les équations de Smoluchowski dans le cas d'exemples particuliers de

noyaux de coagulation k .

Par contre, pour les équations de Becker–Döring (1.2.7) et (1.2.8), la relation de conservation de la densité (1.2.15) est vraie sous les hypothèses (1.2.10) (1.2.11) (1.2.12) du théorème 1.2.1.

Remarque 1.2.2. *En d'autres termes, l'équation pour les monomères (1.2.8) peut se réécrire :*

$$c_1(t) + \sum_{i=2}^{\infty} i c_i(t) = \rho. \quad (1.2.16)$$

1.2.2 Le modèle de Lifshitz–Slyozov

La théorie de croissance dans des alliages développée par Lifshitz–Slyozov et Wagner [32, 46], utilise une description similaire à celle du modèle de Becker–Döring, par contre les équations d'évolution sont différentes.

Dans la pratique, la théorie de Becker–Döring est utilisée dans le cas d'une solution sursaturée dans laquelle toutes les tailles de particules, notamment les plus petites sont en présence et interagissent avec des monomères.

Par contre, les équations de Lifshitz–Slyozov–Wagner s'appliquent dans le cas où l'évolution du système est due essentiellement à des échanges entre particules de grandes tailles et des monomères, les clusters de petite taille étant présents en nombre négligeable.

On s'intéresse alors à des dynamiques dans lesquelles d'une part il ne se forme pas de dimère, trimère et autres petits clusters, et d'autre part les clusters sont distribués de manière uniforme de sorte à pouvoir négliger la dépendance spatiale.

Dans un tel contexte, il paraît naturel de traiter la variable discrète i comme une variable continue x qui prend alors le sens physique d'un volume.

En effet, si un cluster contenant i particules, où i est un entier suffisamment grand pour que le i -cluster soit considéré comme une boule de rayon r_i , on peut écrire la relation suivante :

$$\frac{4}{3}\pi r_i^3 = i \frac{V}{\mathcal{A}}, \quad (1.2.17)$$

où \mathcal{A} est le nombre d'Avogadro et V le volume de molaire.

On considère alors le volume $V_i = \frac{4}{3}\pi r_i^3$ comme une quantité continue x et on retrouve souvent l'écriture suivante (ou une écriture analogue) dans la littérature [17, 38, 36, 37, 35] :

$$x = i\varepsilon, \quad (1.2.18)$$

$$\text{où } x := \frac{4}{3}\pi r_i^3 \text{ et } \varepsilon := \frac{V}{\mathcal{A}}.$$

On note $f = f(t, x)$ la densité en taille au temps t , et $c_1(t)$ la concentration en monomères au temps t .

Le modèle de Lifshitz–Slyozov suscite un grand intérêt en mathématique et en physique [17, 18, 35]. L'existence et l'unicité d'une solution globale en temps a récemment été démontré dans [12], les auteurs ont aussi exhibé des solutions explicites dans le cas de noyaux de coagulation et de fragmentation particuliers.

Remarque 1.2.3. *Pour l'analogie continu du modèle discret de Becker–Döring, la concentration en monomères est aussi représentée par une fonction spécifique $c_1(t)$, car le système de Lifshitz–Slyozov tient compte aussi du rôle particulier que jouent les monomères dans le type de réactions chimiques (1.2.6) que l'on étudie.*

Par soucis de lisibilité, dans toute la suite, pour le système de Lifshitz–Slyozov, on écrira $c(t)$ au lieu de $c_1(t)$ pour désigner la concentration en monomères.

Le système de Becker–Döring formé des équations (1.2.7) et (1.2.16) est remplacé par le système de Lifshitz–Slyozov [32] :

$$\frac{\partial f}{\partial t}(t, x) + \frac{\partial G}{\partial x}(t, x) = 0, \quad (1.2.19)$$

$$c(t) + \int_0^{\infty} x f(t, x) dx = \rho. \quad (1.2.20)$$

G représente le taux de croissance des clusters de taille x . Une expression explicite pour G est obtenue dans [32] en faisant l'hypothèse que le processus est contrôlé par la diffusion des monomères. On aboutit à une expression de la forme :

$$G(t, x) = (k(x)c(t) - q(x)) f(t, x), \quad (1.2.21)$$

où les coefficients cinétiques respectifs k et q de coagulation et de fragmentation sont donnés de manière explicite.

En fait G peut être obtenu à partir de l'équation (1.2.9) en utilisant pour les clusters de grande taille les analogies formelles suivantes :

$$J_{i-1} - J_i = -\frac{J_i - J_{i-1}}{i - (i-1)} \rightarrow -\frac{\partial J}{\partial x}, \quad (1.2.22)$$

$$J_i \approx (k_i c_1 - q_{i+1}) c_i \rightarrow (kc - q)f. \quad (1.2.23)$$

Ceci donne l'équation (1.2.19). Le point clef dans cette analogie est que dans l'expression de J_i , la concentration c_{i+1} a été remplacée par la concentration c_i de même que q_{i+1} a été approximé par q_i .

Remarque 1.2.4. Dans [17, 18], B. Dadyburjor et E. Ruckenstein font remarquer que le modèle de Lifshitz–Slyozov [32] est un modèle simplifié qui ne tient pas compte du terme de diffusion en taille x , ce qui apparaît lorsque l'on effectue un développement de Taylor du second ordre dans les équations de Becker–Döring.

Ils notent que ce terme ne peut pas être toujours négligé. Cependant, aucun calcul précis n'est venu étayer cette suggestion.

C'est cette observation qui est à la base de notre modèle continu, constitué de deux équations couplées. La première modélise l'évolution de la densité en taille, elle est de type parabolique. La seconde représente la conservation de la masse, elle reste inchangée par rapport au modèle simplifié et est donnée par une équation intégrale.

1.3 Les équilibres en détails

Dans cette section, nous nous intéressons aux solutions les plus simples des systèmes de Becker–Döring (1.2.7), (1.2.16), (1.2.9) et de Lifshitz–Slyozov (1.2.19)–(1.2.20), c'est-à-dire aux solutions stationnaires.

La condition de masse finie pour ces deux modèles impose aux vitesses de réaction J_i pour Becker–Döring et $G(t, x)$ pour Lifshitz–Slyozov, d'être nulles et non pas seulement égales à des constantes quelconques.

Dans ce cas, chaque réaction chimique est à l'équilibre.

Les solutions stationnaires obtenues sont alors appelées équilibres en détails.

Nous allons les décrire avec plus de précision pour les deux modèles classiques.

1.3.1 Le modèle de Becker–Döring

On note $m = (m_i)_{i \in \mathbb{N}^*}$ la solution d'équilibre en détail pour le système (1.2.7)–(1.2.9). L'équation (1.2.7) donne $J_{i-1}(m) = J_i(m)$ pour tout $i \geq 2$.

Or, l'équation (1.2.8) n'a de sens que si la suite $J_i(m)$ est sommable. Cela impose alors :

$$J_i(m) = 0 \quad \forall i \geq 1. \quad (1.3.24)$$

Les équilibres en détail sont obtenus en résolvant le système (1.3.24) :

$$J_{i-1}(m) = 0, \quad i \geq 2 \implies k_{i-1}m_{i-1}m_1 - q_i m_i = 0, \quad i \geq 2$$

$$\implies m_i = \prod_{r=2}^i \left(\frac{k_{r-1}}{q_r} \right) (m_1)^i, \quad i \geq 2.$$

Une telle solution est entièrement déterminée par $\bar{c} = m_1$, la concentration d'équilibre des monomères.

On pose :

$$m_i = Q_i(\bar{c})^i \quad i \geq 1, \quad (1.3.25)$$

$$Q_1 = 1, \quad Q_i = \prod_{r=2}^i \left(\frac{k_{r-1}}{q_r} \right) \quad i \geq 2. \quad (1.3.26)$$

1.3. LES ÉQUILIBRES EN DÉTAILS

Les \bar{c} admissibles sont ceux pour lesquels les équilibres en détail $(m_i)_{i \in \mathbb{N}^*}$ vérifient la loi de conservation de la masse :

$$\rho = \sum_{i=1}^{\infty} i m_i = \sum_{i=1}^{\infty} i Q_i(\bar{c})^i = \bar{c} + \sum_{i=2}^{\infty} i Q_i(\bar{c})^i. \quad (1.3.27)$$

On a alors : $0 \leq \bar{c} \leq \rho$. De plus la condition de masse finie impose : $\bar{c} \leq c_s$,

où c_s est le rayon de convergence de la série entière $F(\bar{c}) = \sum_{i=1}^{\infty} i Q_i(\bar{c})^i$, et représente la

concentration de saturation :

$$c_s = \left(\overline{\lim}_i (Q_i)^{1/i} \right)^{-1}. \quad (1.3.28)$$

Remarque 1.3.5. Généralement, dans les cas physiques étudiés on a $\limsup_{i \rightarrow \infty} (Q_i)^{1/i} < \infty$, de sorte que $0 < c_s \leq \infty$.

Les $Q_i \geq 0$, $i \geq 1$ sont non tous nuls, donc la fonction F est strictement croissante de $\bar{c} \in [0, c_s)$ dans $[0, \sup_{0 \leq \bar{c} < c_s} F(\bar{c})]$.

On définit ρ_s par : $\rho_s = \sup_{0 \leq \bar{c} < c_s} F(\bar{c})$.

Cette valeur maximale de F représente la densité de saturation.

– Si $c_s = \infty$ alors, $\rho_s = \infty$, et les solutions d'équilibres en détail peuvent être indexés par $\rho \in [0, \rho_s)$.

– Si $0 < c_s < \infty$ alors $0 < \rho_s \leq \infty$, et dans ce cas, lorsque $0 < \rho_s < \infty$, on a $\rho_s = F(c_s)$. Les solutions d'équilibres peuvent être indexées par $\rho \in [0, \rho_s]$.

Remarque 1.3.6. Le choix de la donnée initiale $\rho(t=0)$ est très important, notamment il détermine le comportement du système pour les grands temps.

• Pour $\rho_0 = \rho(t=0) \leq \rho_s$, il existe une unique solution d'équilibre m^{ρ_0} avec la densité $\rho^{(0)}$ donnée par le système (1.3.25)–(1.3.26), et la solution $c(t)$ du système de Becker–Döring converge fortement vers m^{ρ_0} dans Y lorsque t tend vers l'infini. Il y a conservation asymptotique de la masse [4, 10].

• Si $\rho(t=0) > \rho_s$, alors il n'y aura pas de solution d'équilibre, et la solution c converge faible * dans Y vers c_s [4]. L'excès de densité $\rho - \rho_s$ correspond à la formation de clusters de plus en plus larges, i.e. la condensation. Il y aura des solutions qui conservent la masse mais non stationnaire.

Dans ce cas il peut apparaître des phénomènes de métastabilité [10, 34] c'est-à-dire, un intervalle de temps pendant lequel la solution du système de Becker–Döring évolue de

manière non significative.

Dans la proposition suivante nous allons donner un encadrement pour la concentration de saturation c_s [26]. La preuve utilise une version modifiée du lemme de Césaro, qui est donné en annexe, lemme A.1.23.

Proposition 1.3.1. $\liminf \left(\frac{q_{i+1}}{k_i} \right) \leq c_s \leq \limsup \left(\frac{q_{i+1}}{k_i} \right).$

Preuve. On pose $u_n = \ln(Q_n) - \ln(Q_{n+1}) = \ln \left(\frac{Q_n}{Q_{n+1}} \right) = \ln \left(\frac{q_{n+1}}{k_n} \right),$

d'où $\limsup_n (u_n) = \limsup_n \left(\ln \left(\frac{q_{n+1}}{k_n} \right) \right) = \ln \left(\limsup_n \left(\frac{q_{n+1}}{k_n} \right) \right).$

Définissons S_n par :

$$S_n = \frac{u_1 + \dots + u_n}{n} = \frac{-1}{n} (\ln(Q_{n+1})).$$

$$\begin{aligned} \liminf(S_n) &= \liminf \left(\frac{-1}{n} \ln(Q_{n+1}) \right) = - \limsup \left(\frac{n+1}{n} \ln \left(Q_{n+1}^{\frac{1}{n+1}} \right) \right) = - \limsup \left(\ln(Q_n^{\frac{1}{n}}) \right) \\ &= \liminf \left(\ln(Q_n^{\frac{1}{n}}) \right), \end{aligned}$$

$$\text{d'où } \liminf(S_n) = \ln \left(\liminf(Q_n^{\frac{1}{n}}) \right) = \ln \left(\limsup(Q_n^{\frac{1}{n}}) \right)^{-1}.$$

On a alors $\liminf(S_n) = \ln(c_s).$

D'après le lemme A.1.23, on a :

$$\liminf u_n = \ln \liminf \left(\frac{q_{n+1}}{k_n} \right) \leq \liminf S_n = \ln c_s \leq \limsup S_n \leq \limsup u_n = \ln \limsup \left(\frac{q_{n+1}}{k_n} \right),$$

d'où le résultat. \square

Corollaire 1.3.1. Si $\lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{q_{n+1}}{k_n} \right)$ existe et est non nulle, alors $c_s = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{q_{n+1}}{k_n} \right).$

1.3.2 Le modèle de Lifshitz-Slyozov classique

On cherche les solutions stationnaires pour le système de Lifshitz-Slyozov (1.2.19), (1.2.20) et (1.2.21) qui annulent le flux G .

Notons $m(x)$ une telle solution d'équilibre pour (1.2.19) associée à la concentration d'équilibre des monomères \bar{c} .

1.3. LES ÉQUILIBRES EN DÉTAILS

On résoud alors l'équation :

$$(k(x)\bar{c} - q(x))m(x) = 0, \text{ pour tout } x \in]0, \infty[. \quad (1.3.29)$$

L'existence et la nature des équilibres en détails dépend de la fonction $u(x) := \frac{q(x)}{k(x)}$.

Remarque 1.3.7. Le cas du murissement d'Ostwald [17] correspond à $u := \frac{q}{k}$ strictement décroissante :

En effet, $\frac{dx}{dt} = k(x)c(t) - q(x) := V(t, x),$
où $V(t, x)$ est la vitesse de croissance d'un grain de taille x au temps t .

On a $\frac{\partial V(t, x)}{\partial x} = k'(x)c(t) - q'(x) \geq 0 \quad \forall c \geq 0.$

D'où $\left(\frac{q}{k} \right)' = \frac{q'k - qk'}{k^2} = \frac{1}{k} \left(q' - \left(\frac{q}{k} \right) k' \right) \leq 0,$

ce qui implique $u := \frac{q}{k}$ strictement décroissante.

Un exemple d'une telle vitesse de croissance est donné par Lifshitz-Slyozov [32] :

$\frac{dx}{dt} = \frac{D}{x} \left(c(t) - c_\infty - \frac{\alpha}{x} \right),$ où D, α, c_∞ sont des quantités positives.

Dans ce cas : $k(x) = \frac{D}{x}, \quad q(x) = \frac{D}{x} \left(c_\infty + \frac{\alpha}{x} \right),$ et $u := \frac{q}{k}$ est bien strictement décroissante.

Dans la suite, on supposera que u est une fonction monotone sur $\mathbb{R}^+.$
De plus, on fait l'hypothèse suivante :

$$k(x) \geq k_* > 0, \quad q(x) \geq 0, \quad u \in C^0(\mathbb{R}^+). \quad (1.3.30)$$

$(\bar{c} = \rho, m(x) \equiv 0)$ est toujours solution de (1.3.29). Il n'existe pas d'équilibre en détail continu non trivialement nul.

On remarque alors que l'espace des fonctions continues n'est pas l'espace naturel dans lequel il faut chercher les équilibres en détail.

On cherche ces solutions dans l'espace des mesures positives, on obtient alors la caractérisation suivante des équilibres en détail [26] :

Lemme 1.3.1. On suppose u continue et monotone. Alors les équilibres en détail avec la densité ρ sont monodisperses, c'est-à-dire : $m(x) = a\delta_{x_c},$ où a et x_c vérifient : $u(x_c) = \bar{c}$ et $\bar{c} + au^{-1}(\bar{c}) = \rho.$

Preuve. D'après l'équation (1.3.29) et les hypothèses du lemme 1.3.1 on a :

$\exists! x = x_c$: le rayon critique tel que $k(x_c)\bar{c} - q(x_c) = 0$.

D'où $m(x) = 0 \quad \forall x \neq x_c := u^{-1}(\bar{c})$. Le support de la mesure m se réduit alors à un point x_c .

m admet une décomposition unique comme combinaison linéaire finie de dérivées de la mesure de Dirac, c'est-à-dire : $m = \sum_{|p| \leq n} a_p D^p \delta_{x_c}$

Or, m est une mesure positive, donc $m(x) = a \delta_{x_c}$ avec $a \geq 0$.

L'équation de conservation de la masse (1.2.20) donne : $\rho = \bar{c} + \langle x, m(x) \rangle_{C^0 \times \mathcal{M}}$,
d'où $\rho = \bar{c} + a x_c = \bar{c} + a u^{-1}(\bar{c})$. \square

Remarque 1.3.8. – Si la fonction u est strictement croissante et possède une limite finie $\alpha := \lim_{x \rightarrow \infty} u(x)$ (comme c'est le cas pour le modèle discret de Becker–Döring), alors la concentration de saturation c_s , c'est-à-dire la valeur maximale que peut prendre \bar{c} est égale à cette limite α .

– Si la fonction u est strictement décroissante, alors la concentration de saturation $c_s = u(0)$.

Par contre, dans ces deux cas, on n'associe pas de densité de saturation ρ_s à cette concentration c_s . La densité totale ρ peut prendre des valeurs arbitraires.

La nature physique des équilibres en détail est ici radicalement différente du cas discret de Becker–Döring, du fait de leur caractère monodisperse.

Remarque 1.3.9. Une autre différence importante entre le modèle discret et le modèle continu classique est que pour le modèle de Lifshitz–Slyozov la densité totale ρ ne détermine pas les équilibres en détail de manière unique.

Ces remarques 1.3.8, 1.3.9 plus la remarque 1.2.4 nous ont mené à considérer le développement de Taylor au second ordre en taille pour les équations de Becker–Döring.

Chapitre 2

Le nouveau modèle

L'absence de densité de saturation et le caractère monodisperse de la solution d'équilibre pour le système de Lifshitz–Slyozov, nous ont amené à exploiter les remarques faites dans les articles [17, 18].

Les résultats de ce chapitre peuvent être retrouvés dans [26].

2.1 Le modèle de Lifshitz–Slyozov modifié

Soit G le taux de croissance des clusters de taille continue x .

Pour l'obtention de l'expression explicite de G , on effectue dans l'équation (1.2.9) un développement de Taylor au second ordre pour les clusters de grande taille, on obtient les analogies formelles suivantes :

$$J_{i-1} - J_i = -\frac{J_i - J_{i-1}}{i - (i-1)} \rightarrow -\frac{\partial J}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 J}{\partial x^2}, \quad (2.1.1)$$

$$J_i = k_i c_i c_1 - q_{i+1} c_{i+1} \rightarrow (kc - q)f - \frac{\partial}{\partial x}(qf) - \frac{\partial q}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial x}. \quad (2.1.2)$$

On aboutit à une expression de la forme :

$$G(t, x) = (k(x)c(t) - q(x))f(t, x) - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} ((k(x)c(t) + q(x))f(t, x)), \quad (2.1.3)$$

où k et q sont respectivement les coefficients cinétiques de coagulation et de fragmentation.

Le système de Becker–Döring formé des équations (1.2.7) et (1.2.16) est alors remplacé par le système de Lifshitz–Slyozov Modifié, formé d'une équation de type parabolique pour la cinétique chimique couplée avec une équation intégrale pour la conservation de la densité totale de particules :

$$\frac{\partial f}{\partial t}(t, x) + \frac{\partial G}{\partial x}(t, x) = 0, \quad (2.1.4)$$

$$c(t) + \int_0^\infty x f(t, x) dx = \rho, \quad (2.1.5)$$

avec les conditions initiales et au bord suivantes :

$$c(0) = c_0 \geq 0, \quad f(0, x) = f_0(x) \geq 0, \quad x \in (0, \infty) \quad (2.1.6)$$

$$f(t, 0) = r(t) \geq 0, \quad t > 0. \quad (2.1.7)$$

2.1.1 Les équilibres en détail

Pour le système modifié (2.1.4)-(2.1.5), on calcule les équilibres en détail, que l'on note encore $(c(t) = \bar{c}, f(t, x) = m(x))$.

On résoud alors l'équation de flux G nul :

$$(k(x)\bar{c} - q(x))m(x) - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} ((k(x)\bar{c} + q(x))m(x)) = 0. \quad (2.1.8)$$

Après résolution de cette équation différentielle du premier ordre on obtient :

$$\begin{aligned} m(x) &= m(0) \exp \left(\int_0^x \frac{2(k(y)\bar{c} - q(y)) - (k'(y)\bar{c} + q'(y))}{k(y)\bar{c} + q(y)} dy \right) \\ &= m(0) \left(\frac{k(0)\bar{c} + q(0)}{k(x)\bar{c} + q(x)} \right) \exp \left(2 \int_0^x \frac{k(y)\bar{c} - q(y)}{k(y)\bar{c} + q(y)} dy \right). \end{aligned} \quad (2.1.9)$$

2.1.2 Remarques sur la donnée au bord

Les équilibres en détail pour le système (2.1.4)-(2.1.5) sont donnés par le couple $(\bar{c}, m(x))$, les \bar{c} admissibles étant ceux pour lesquels $xm(x) \in L^1(\mathbb{R}^+)$.

On remarque que $m(0)$ dépend de la valeur au bord (2.1.7). Dans la suite, nous nous placerons dans des cas où la condition au bord $r(t)$ dépend de $c(t)$, ce qui donnera la dépendance de $m(0)$ en fonction de \bar{c} .

Dans toute la suite nous considérerons les conditions au bord de la forme

$$r(t) = ac(t) + b G(t, 0) \quad a \geq 0, \quad b \geq 0. \quad (2.1.10)$$

2.1.3 Concentration de saturation et densité de saturation

La concentration de saturation est calculée dans un cas simple :

Proposition 2.1.2. *On suppose que les coefficients cinétiques de coagulation et de fragmentation vérifient l'hypothèse suivante :*

$$q(x) \geq q_* > 0; \quad k(x) \geq k_* > 0; \quad k(x) \leq xk^*, \quad x \geq x_0; \quad \alpha := \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{q(x)}{k(x)} \text{ existe.} \quad (2.1.11)$$

Alors la concentration de saturation pour le système (2.1.4)-(2.1.5) est égale à α .

Preuve. On pose $u(y) = \frac{q(y)}{k(y)}$, $y \in [0, +\infty[$. Alors :

La conservation de la densité s'écrit :

$$\begin{aligned} \rho &= \bar{c} + \int_0^\infty xm(x) dx \\ &= \bar{c} + m(0) \int_0^\infty x \left(\frac{k(0)\bar{c} + q(0)}{k(x)\bar{c} + q(x)} \right) \exp \left(\int_0^x \frac{2(k(y)\bar{c} - q(y))}{k(y)\bar{c} + q(y)} dy \right) dx \\ &= \bar{c} + m(0)k(0) \int_0^\infty \left(\frac{x}{k(x)} \right) \left(\frac{\bar{c} + u(0)}{\bar{c} + u(x)} \right) \exp \left(2 \int_0^x \frac{\bar{c} - u(y)}{\bar{c} + u(y)} dy \right) dx. \end{aligned}$$

On pose

$$F(x) = \left(\frac{x}{k(x)} \right) \left(\frac{\bar{c} + u(0)}{\bar{c} + u(x)} \right) \exp \left(2 \int_0^x \frac{\bar{c} - u(y)}{\bar{c} + u(y)} dy \right).$$

On étudie la convergence de l'intégrale $\int_0^\infty F(x) dx$ en considérant le comportement de F à l'infini :

$$F(x) \sim_\infty \frac{\bar{c} + u(0)}{\bar{c} + \alpha} \frac{x}{k(x)} \exp \left(2 \int_0^x \frac{\bar{c} - u(y)}{\bar{c} + u(y)} dy \right).$$

L'intégrant apparaissant dans l'expression précédente est équivalent à $\beta := \frac{\bar{c} - \alpha}{\bar{c} + \alpha}$ pour $y \rightarrow \infty$:

$$\forall \varepsilon > 0, \quad \exists x_0 \geq 0 \quad / \quad y \geq x_0 \implies \left| \frac{\bar{c} - u(y)}{\bar{c} + u(y)} - \beta \right| \leq \varepsilon.$$

• Si $\beta > 0$, c'est-à-dire : $\bar{c} > \alpha$, on a :

$$F(x) \geq Cte \exp \left(2 \int_0^{x_0} \frac{\bar{c} - u(y)}{\bar{c} + u(y)} dy \right) \exp (2(x - x_0)(\beta - \varepsilon)),$$

et donc,

l'intégrale $\int_0^\infty F(x) dx$ diverge.

• Si $\beta < 0$, c'est-à-dire : $\bar{c} < \alpha$, on a :

$$F(x) \leq x Cte \exp \left(2 \int_0^{x_0} \frac{\bar{c} - u(y)}{\bar{c} + u(y)} dy \right) \exp (2(x - x_0)(\beta + \varepsilon)).$$

En prenant ε assez petit on voit que l'intégrale $\int_0^\infty F(x) dx$ converge.

• Si $\beta = 0$, c'est-à-dire : $\bar{c} = \alpha$, on a :

$\forall \varepsilon > 0, \exists x_0 \geq 0 / x \geq x_0 \implies |u(x) - \alpha| \leq \varepsilon.$

$$F(x) \geq Cte \exp \left(2 \int_0^{x_0} \frac{\alpha - u(y)}{\alpha + u(y)} dy \right) \exp \left(2(x - x_0) \frac{-\varepsilon}{2\alpha + \varepsilon} \right),$$

en prenant ε assez petit, le terme de droite dans l'inégalité précédente est dans $L^1([0, \infty[)$.

$$F(x) \leq x Cte \exp \left(2 \int_0^{x_0} \frac{\alpha - u(y)}{\alpha + u(y)} dy \right) \exp \left(2(x - x_0) \frac{\varepsilon}{2\alpha - \varepsilon} \right),$$

en prenant ε assez petit, l'intégrale sur $(0, \infty)$ du terme de droite de l'inégalité précédente diverge.

On ne peut donner aucune conclusion quant à la convergence de l'intégrale : $\int_0^\infty F(x) dx$.

La condition de masse finie impose donc : $\bar{c} < c_s$ avec $c_s = \alpha$. \square

A la concentration d'équilibre en monomères $\bar{c} \in [0, c_s = \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{q(x)}{k(x)})$, on associe la densité $\rho(\bar{c}) \in [0, \infty)$.

On définit la concentration de saturation par $\rho_s := \rho(c_s)$. Cette quantité peut être finie ou infinie.

2.2 Comparaison entre les modèles

Dans le cas du modèle discret de Becker-Döring, la densité totale d'un équilibre en détail est donnée par une série entière (1.3.27) : $\rho(\bar{c}) = \sum_{i=1}^\infty i Q_i(\bar{c})^i$, où \bar{c} est la concentration d'équilibre des monomères. La densité est une fonction croissante de \bar{c} et détermine cette quantité de manière unique, contrairement au cas du modèle de Lifshitz-Slyozov classique (voir remarque 1.3.9).

Il est alors naturel de se demander s'il existe pour le modèle de Lifshitz-Slyozov modifié des équilibres en détail lorsque l'on se donne une densité $\rho < \rho_s$.

Nous allons montrer dans le prochain sous-paragraphe que pour notre modèle la densité est aussi une fonction strictement croissante de la concentration d'équilibre \bar{c} .

Aussi, les équilibres en détail pour le modèle de Lifshitz-Slyozov modifié ne sont plus monodisperses, et du fait de la totale analogie entre les expressions de la densité de saturation pour le modèle discret de Becker-Döring et le modèle continu de Lifshitz-Slyozov modifié, il paraît intéressant de comparer les équilibres en détail (1.3.25) et (2.1.9). Ceci fera l'objet du second sous-paragraphe de ce chapitre.

2.2.1 La densité de saturation

Proposition 2.2.3. *On se donne la condition au bord (2.1.10). Alors ρ est une fonction strictement croissante de \bar{c} .*

Preuve. On s'est donné la condition au bord $r(t) = ac(t) + b G(t, 0)$ $a \geq 0, b \geq 0$.

• Si $a = 0$ et $b \geq 0$ quelconque alors $m(0) = 0$ et il est clair que ρ est une fonction strictement croissante de \bar{c} .

• Si $a > 0$ et $b \geq 0$ quelconque alors $m(0) = a\bar{c}$, et la conservation de la densité est donnée par l'expression suivante :

$$\rho(\bar{c}) = \bar{c} \left(1 + ak(0) \int_0^\infty \left(\frac{x}{k(x)} \right) \left(\frac{\bar{c} + u(0)}{\bar{c} + u(x)} \right) \exp \left(2 \int_0^x \frac{\bar{c} - u(y)}{\bar{c} + u(y)} dy \right) dx \right).$$

Pour simplifier les écritures, on pose $I(x) = \int_0^x \frac{4u(y)}{(\bar{c} + u(y))^2} dy$ et $E(x) = \exp \left(2 \int_0^x \frac{\bar{c} - u(y)}{\bar{c} + u(y)} dy \right)$.

On obtient alors :

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{d\bar{c}}(\bar{c}) &= 1 + a\bar{c}k(0) \int_0^\infty \frac{x}{k(x)} \left(\frac{u(x) - u(0)}{(\bar{c} + u(x))^2} + \frac{\bar{c} + u(0)}{\bar{c} + u(x)} I(x) \right) E(x) dx \\ &\quad + ak(0) \int_0^\infty \left(\frac{x}{k(x)} \right) \left(\frac{\bar{c} + u(0)}{\bar{c} + u(x)} \right) E(x) dx \\ &= 1 + ak(0) \int_0^\infty \frac{x}{k(x)} \left(\frac{\bar{c} + u(0)}{\bar{c} + u(x)} + \bar{c} \left(\frac{u(x) - u(0)}{(\bar{c} + u(x))^2} + \frac{\bar{c} + u(0)}{\bar{c} + u(x)} I(x) \right) \right) E(x) dx. \end{aligned}$$

Le résultat attendu est obtenu en remarquant que :

$$\frac{\bar{c} + u(0)}{\bar{c} + u(x)} + \bar{c} \left(\frac{u(x) - u(0)}{(\bar{c} + u(x))^2} + \frac{\bar{c} + u(0)}{\bar{c} + u(x)} I(x) \right) = \frac{(1 + \bar{c}I(x))(\bar{c} + u(0))(\bar{c} + u(x)) + \bar{c}(u(x) - u(0))}{(\bar{c} + u(x))^2} \geq 0. \quad \square$$

2.2.2 Les équilibres en détail

Proposition 2.2.4. *Supposons les coefficients discrets k_i, q_i et les fonctions k, q constants. On considère les équilibres en détail (1.3.25) pour le modèle de Becker-Döring et (2.1.9) pour le modèle de Lifshitz-Slyozov modifié, pour une densité totale donnée ρ proche de ρ_s . Alors on obtient les expressions suivantes :*

$$m(c_s - h) = m(0) \left(1 - \frac{k}{q} hx \right) + o(h) \quad (2.2.12)$$

$$m_i(c_s - h) = \frac{q}{k} \left(1 - \frac{k}{q} hi \right) + o(h), \quad i \geq 1 \quad (2.2.13)$$

Preuve.

• Le cas continu : Sous les hypothèses de la proposition 2.2.4, la solution d'équilibre en

détails (2.1.9) s'écrit :

$$m(\bar{c}) = m(0) \exp \left(2x \frac{k\bar{c} - q}{k\bar{c} + q} \right). \quad (2.2.14)$$

En faisant un développement limité de (2.1.9) au premier ordre en \bar{c} au voisinage de la concentration de saturation $c_s = \frac{q}{k}$, on obtient :

$$m(c_s - h) = m(0) \left(1 - \frac{k}{q} h x \right) + o(h).$$

• Le cas discret : On réécrit (1.3.25) :

$$m_i(\bar{c}) = \frac{q}{k} \left(\frac{k\bar{c}}{q} \right)^i, \quad i \geq 1 \quad (2.2.15)$$

$$m_i = \frac{q}{k} \exp \left(i \ln \left(\frac{k\bar{c}}{q} - 1 + 1 \right) \right), \quad i \geq 1$$

En faisant un développement limité au premier ordre, au voisinage de $c_s = \frac{q}{k}$, on obtient :

$$m_i(c_s - h) = \frac{q}{k} \left(1 - \frac{k}{q} h i \right) + o(h), \quad i \geq 1. \quad \square$$

Remarque 2.2.10. On se place dans les hypothèses de la proposition 2.2.4.

• Dans le cas continu, les \bar{c} admissibles sont ceux pour lesquels $xm(x) \in L^1(0, \infty)$, c'est-à-dire : $0 \leq \bar{c} < c_s = \frac{q}{k}$.

Le cas limite $\bar{c} = c_s$ donne : $m(c_s) = m(0)$ et l'intégrale $\int_0^\infty xm(0) dx$ diverge.

D'où $\rho_s = \infty$ dans le cas des coefficients constants.

• Dans le cas discret de Becker-Döring, le résultat est analogue :

Les \bar{c} admissibles sont ceux pour lesquels la série $\sum_{i=1}^\infty i m_i$ est sommable, c'est-à-dire :

$0 \leq \bar{c} < c_s = \frac{q}{k}$. Par contre cette série entière diverge dans le cas particulier $\bar{c} = c_s$.
Il n'y a pas de densité de saturation.

Remarque 2.2.11. En posant $\frac{q}{k} = \bar{c} + h$ dans les relations (2.2.12) et (2.2.13), on obtient :

$$\begin{aligned} m(c_s - h) &= \frac{m(0)}{\bar{c}} (\bar{c} - h x) + O(h), \\ m_i(c_s - h) &= \bar{c} - h i + O(h) \end{aligned}$$

Ces deux relations sont en parfaite analogie si on prend la donnée au bord $m(0) = \bar{c}$.

Il est alors souhaitable de choisir une condition $f(t, 0) = r(t)$ $t \in [0, T]$ qui réalise cette condition pour les équilibres en détail.

Nous allons présenter trois choix possibles pour la condition au bord en donnant des valeurs particulières aux paramètres a et b dans l'expression (2.1.10)

1. $f(t, 0) = 0 \quad \forall t \in [0, T]$. Ceci correspond à $m(0) = 0$, qui fournit des équilibres en détail triviaux : $(\bar{c} = \rho, m(x) \equiv 0)$.

2. $f(t, 0) = c(t) \quad \forall t \in [0, T]$.

Cette condition au bord réalise l'analogie entre (2.2.12) et (2.2.13). Cependant, le changement d'échelle qui permet le passage du système de Becker-Döring au système de Lifshitz-Slyozov modifié respecte le fait que les fonctions c et f sont dissociées. Un aperçu de ce passage vers les équations de Lifshitz-Slyozov classiques est donné dans [35].

3. Une condition au bord qui réalise à la fois $f(t, 0) \neq 0$ et $m(0) = \bar{c}$ est donnée par l'analogue de la condition de Fourier en thermique : $f(t, 0) = c(t) + G(t, 0)$.

2.2.3 Conclusion

• Nous avons montré, sous les hypothèses de la proposition 2.2.3, que comme pour le modèle discret de Becker-Döring, le modèle de Lifshitz-Slyozov modifié possède des équilibres en détail qui sont solution des équations si la densité initiale est inférieure à une densité de saturation ρ_s , c'est-à-dire si la concentration d'équilibre des monomères \bar{c} est inférieure à la valeur de saturation.

Cette concentration de saturation c_s est donnée par : $c_s = \lim_{x \rightarrow \infty} \left(\frac{q(x)}{k(x)} \right)$ pour le modèle

de Lifshitz-Slyozov parabolique, et $c_s = \lim_{i \rightarrow \infty} \left(\frac{q_{i+1}}{k_i} \right)$ pour le modèle discret de Becker-Döring, dans le cas où ces limites existent.

• Les équilibres en détail pour les modèles de Becker-Döring et de Lifshitz-Slyozov modifié ne sont pas monodisperses.

• Sous les hypothèses de la proposition 2.2.3, on obtient que dans les deux cas, la densité ρ est une fonction croissante de \bar{c} , pour $0 \leq \bar{c} < c_s$.

• Pour les modèles de Becker-Döring et Lifshitz-Slyozov modifié, la densité ρ détermine totalement la concentration d'équilibre des monomères m_1 et \bar{c} .

D'un point de vue physique, l'existence d'un seuil de saturation fait du système de Lifshitz-Slyozov modifié un modèle plus adapté à l'étude des transitions de phase.

Chapitre 3

Le problème mathématique

3.1 Introduction

Dans le chapitre précédent nous nous sommes intéressés aux équations de Becker-Döring en mettant l'accent sur le seuil de saturation, c'est-à-dire sur la modélisation des phénomènes de transitions de phase.

Nous avons écrit une forme modifiée du modèle de Lifshitz-Slyozov classique, constituée d'une équation parabolique représentant la cinétique chimique, couplée avec une équation intégrale traduisant la conservation de la masse.

A l'instant initial $t = 0$, la concentration en monomères c et la fonction densité en taille f sont données, la masse totale ρ est donc une donnée du problème.

Nous avons alors montré les propriétés physiques satisfaisantes de cette nouvelle version du modèle de Lifshitz-Slyozov, notamment en retrouvant les solutions d'équilibre en détail dans l'espace des fonctions et non plus dans l'espace des mesures comme c'est le cas pour le modèle de Lifshitz-Slyozov classique. De plus nous avons retrouvé la notion essentielle de densité de saturation qui est perdue lorsque l'on considère le modèle de Lifshitz-Slyozov classique.

La justification physique du choix du modèle parabolique étant faite, nous allons présenter les équations, définir une notion de solution et énoncer le théorème d'existence et d'unicité de solution globale en temps pour ce système d'équations.

La démonstration est faite dans les quatre chapitres suivants.

3.1.1 Les notations

Dans le but de simplifier l'écriture, nous utiliserons souvent les notations suivantes :

$$a(t, x) = -k(x)c(t) + q(x), \quad (3.1.1)$$

$$b(t, x) = \frac{1}{2}(k(x)c(t) + q(x)), \quad (3.1.2)$$

$$e(t, x) = a(t, x) + \frac{\partial b}{\partial x}(t, x), \quad (3.1.3)$$

$$I(t) = \int_0^\infty x f(t, x) dx. \quad (3.1.4)$$

Ici, k représente le coefficient cinétique de coagulation et q le coefficient de fragmentation.

On introduit en outre les espaces fonctionnels suivants :

$$H = L^2(]0, +\infty[), \quad V = H_0^1(]0, +\infty[), \quad (3.1.5)$$

$$X = C^0([0, T]; [0, \infty[), \quad (3.1.6)$$

$$\mathcal{C} = \{c(t) \in X / 0 \leq c(t) \leq \rho\}, \quad (3.1.7)$$

$$W = W(]0, T[, V, V') := \{f \in L^2(]0, T[, V) / f' \in L^2(]0, T[, V')\}. \quad (3.1.8)$$

On a la relation suivante entre les espaces H et V :

$$V \subset H \equiv H' \subset V', \quad (3.1.9)$$

ces injections étant continues et chaque espace étant dense dans le suivant.

Dans ce qui suit, nous utiliserons les normes $\|\cdot\|_V$ et $\|\cdot\|_H$, où :

$$\|f(t, \cdot)\|_V^2 = \int_0^\infty \left(|f|^2 + \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right|^2 \right) dx, \quad \|f(t, \cdot)\|_H^2 = \int_0^\infty |f|^2 dx. \quad (3.1.10)$$

Pour des fonctions f et g dans H , nous utiliserons la notation :

$$(f, g)_H = \int_0^\infty f g dx. \quad (3.1.11)$$

3.1.2 Propriétés de W

1. Si $f \in W(]0, T[, V, V')$, alors presque partout sur $]0, T[, f$ est égale à une fonction continue à valeurs dans $H : W(]0, T[, V, V') \subset C^0([0, T]; H)$.

Ceci est illustré dans le lemme suivant [44] :

Lemme 3.1.2. Soient V, H, V' trois espaces de Hilbert, chaque espace inclu dans le suivant, V' le dual de V . Si une fonction $f \in L^2(0, T; V)$ et sa dérivée

3.1. INTRODUCTION

$f' \in L^2(0, T, V')$ alors f est p.p. égale à une fonction continue de $[0, T]$ dans H , et nous avons l'égalité :

$$\frac{d}{dt} \|f\|_H^2 = 2 \langle f', f \rangle_{V' \times V} \quad \text{au sens de } \mathcal{D}'(]0, T[). \quad (3.1.12)$$

2. Plus généralement, pour $f, g \in W(]0, T[, V, V')$, on a la formule d'intégration par parties suivante [19] :

$$\int_0^T \langle f'(t), g(t) \rangle_{V' \times V} dt + \int_0^T \langle g'(t), f(t) \rangle_{V' \times V} dt = [(f(t), g(t))_H]_0^T. \quad (3.1.13)$$

3. Citons un cas particulier de la formule (3.1.13) que l'on rencontrera souvent par la suite.

Soit $f \in W(]0, T[, V, V')$, et $g \in V$; alors

$$p.p. t \in [0, T] \quad \langle f'(t), g \rangle_{V' \times V} = \frac{d}{dt} (f(t), g)_H. \quad (3.1.14)$$

4. **Lemme 3.1.3.** Soient $u \in W$ et $\eta \in V$ telles que $\eta u \in W$. Alors on a d'après (3.1.14) :

$$p.p. t \in [0, T] : \langle u', \eta u \rangle_{V' \times V} = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} (u, \eta u)_H. \quad (3.1.15)$$

Preuve. Soient $v \in V$ et $\phi \in \mathcal{D}(]0, T[)$ arbitraires. On a :

$$\begin{aligned} \langle \langle (\eta u)', v \rangle_{V' \times V}, \phi \rangle_{\mathcal{D}' \times \mathcal{D}} &= \langle \frac{d}{dt} (\eta u, v)_H, \phi \rangle_{\mathcal{D}' \times \mathcal{D}} \\ &= - \langle (\eta u, v)_H, \phi' \rangle_{\mathcal{D}' \times \mathcal{D}} \\ &= - \langle (u, \eta v)_H, \phi' \rangle_{\mathcal{D}' \times \mathcal{D}} \\ &= \langle \frac{d}{dt} (u, \eta v)_H, \phi \rangle_{\mathcal{D}' \times \mathcal{D}} \\ &= \langle \langle u', \eta v \rangle_{V' \times V}, \phi \rangle_{\mathcal{D}' \times \mathcal{D}}. \end{aligned}$$

On a donc, $\langle (\eta u)', v \rangle_{V' \times V} = \langle u', \eta v \rangle_{V' \times V} \quad \forall v \in V$ au sens de $\mathcal{D}'(]0, T[)$.

Ces quantités étant intégrables en temps, l'égalité ci-dessus est vraie pour presque tout $t \in [0, T]$.

Fixons $t \in]0, T[$, et posons $v = u(t)$. On obtient alors :

$$\langle (\eta u)', u \rangle_{V' \times V} = \langle u', \eta u \rangle_{V' \times V} \quad p.p. \ t \in [0, T].$$

En utilisant (3.1.13) sur l'intervalle $[0, t]$ on obtient :

$$\int_0^t (\langle (\eta u)', u \rangle_{V' \times V} + \langle u', \eta u \rangle_{V' \times V}) \, d\tau = [(\eta u, u)_H]_0^t,$$

et donc :

$$2 \int_0^t \langle u', \eta u \rangle_{V' \times V} \, d\tau = [(\eta u, u)_H]_0^t.$$

Comme les fonctions $u' \in L^2(0, T; V')$ et $\eta u \in L^2(0, T; V)$, la quantité $\langle u', \eta u \rangle_{V' \times V}$ est un élément de $L^1([0, T])$.

Le lemme de différentiation de Lebesgue fournit alors le résultat.

3.1.3 Les équations

Notons $f \equiv f(t, x)$ la fonction densité en taille et c la concentration des monomères.

Le système est donné par :

$$\frac{\partial f}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(a(t, x) f + \frac{\partial}{\partial x} (b(t, x) f) \right) = 0 \quad \text{pour } t \in (0, T), x \in (0, \infty) \quad (3.1.16)$$

$$c(t) = \rho - I(t) \quad \text{dans } (0, T). \quad (3.1.17)$$

On complète le système (3.1.16)–(3.1.17) avec les conditions initiale et au bord suivantes :

$$c(0) = c_0 \geq 0, \quad (3.1.18)$$

$$f(0, x) = f_0(x) \geq 0 \quad \text{dans } (0, \infty), \quad (3.1.19)$$

$$f(t, 0) = r(t) \quad \text{pour } t \in (0, T), \quad (3.1.20)$$

et on écrit la condition de compatibilité en $t = 0$:

$$c_0 + I(0) = \rho. \quad (3.1.21)$$

Remarque 3.1.12. Pour la clarté de l'exposé, nous avons choisi dans toute la suite sur les résultats mathématiques, de travailler avec la condition $r(t) = 0 \, \forall t \in [0, T]$.

3.1.4 Les hypothèses

Dans toute la suite, les coefficients cinétiques k et q vérifieront les hypothèses (3.1.22)–(3.1.23) suivantes :

$$k, q \in C_b^2([0, +\infty[), \quad (3.1.22)$$

3.2 DÉFINITION D'UNE SOLUTION FAIBLE

où $C_b^2([0, +\infty[)$ représente l'espace des fonctions deux fois continûment dérivables sur \mathbb{R}^+ , bornées et à dérivées première et seconde bornées.

$$0 < q_* \leq q(x) \leq \bar{q}, \quad 0 \leq k(x) \leq \bar{k} \quad \text{pour tout } x \geq 0. \quad (3.1.23)$$

3.2 Définition d'une solution faible

Pour le système (3.1.16)–(3.1.20), on considère les solutions faibles au sens de la définition suivante :

Définition 3.2.2. Soit $f_0 \in H$ et $c \in X$ données.

Une fonction $f \in W$ est dite solution faible du problème (3.1.16)–(3.1.19)–(3.1.20) si et seulement si on a $f(0) = f_0$, et pour tout g dans V , pour presque tout $t \in [0, T]$:

$$\frac{d}{dt} \int_0^\infty f(t, x) g(x) \, dx + \int_0^\infty \left(e(t, x) f(t, x) + b(t, x) \frac{\partial f}{\partial x}(t, x) \right) \frac{\partial g}{\partial x}(x) \, dx = 0. \quad (3.2.24)$$

En vertu de la propriété (3.1.14), (3.2.24) s'écrit aussi :

$$\left\langle \frac{\partial f}{\partial t}(t), g \right\rangle_{V' \times V} + \int_0^\infty \left(e(t, x) f(t, x) + b(t, x) \frac{\partial f}{\partial x}(t, x) \right) \frac{\partial g}{\partial x}(x) \, dx = 0. \quad (3.2.25)$$

3.3 Le théorème d'existence et d'unicité

On énonce le théorème d'existence pour le problème couplé (3.1.16)–(3.1.20) :

Théorème 3.3.4. Les hypothèses (3.1.22)–(3.1.23) sur les coefficients cinétiques de coagulation et de fragmentation sont supposées vérifiées. La donnée initiale $f_0 \in H$ est supposée et ses moments d'ordre zéro et un sont supposés finis :

$$\int_0^\infty f_0(x) \, dx < \infty, \quad \int_0^\infty x f_0(x) \, dx \leq \rho. \quad (3.3.26)$$

Alors, le système (3.1.16)–(3.1.20) possède au moins un couple solution (c, f) avec : $c \in C$ et $f \in W$.

De plus on a : $f(t, x) \geq 0$ sur $[0, T] \times \mathbb{R}^+$.

Si de plus, tous les moments de f_0^2 jusqu'à un certain ordre s supérieur à trois sont finis, alors il y a unicité de la solution pour le système (3.1.16)–(3.1.17).

Pour montrer l'existence globale en temps de solutions pour le système (3.1.16)–(3.1.20), on le reformule comme un problème de point fixe pour $c(t)$ dans l'espace X .

Pour cela on définit une application Γ pour laquelle on commencera par montrer qu'il existe au moins un point fixe, avant de montrer que les points fixes pour ce schéma sont en fait solutions du système (3.1.16)–(3.1.20).

On définit l'application Γ comme suit :

$$\begin{aligned} \mathcal{C} &\longrightarrow W \longrightarrow \Gamma \mathcal{C} \\ c &\longmapsto f \longmapsto \Gamma c = \max(0, \rho - I(f)). \end{aligned} \quad (3.3.27)$$

Ici f est définie comme la solution du problème parabolique :

$$\frac{\partial f(t, x)}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(a(t, x) f(t, x) + \frac{\partial}{\partial x} (b(t, x) f(t, x)) \right) = 0, \quad (3.3.28)$$

avec les conditions initiales et au bord (3.1.19) et (3.1.20).

La démonstration du théorème se fait en trois étapes :

La première étape consiste à montrer l'existence et l'unicité de la solution f de l'équation (3.3.28), équation de type parabolique linéaire à coefficients non constants.

Ceci garantit que l'application Γ est bien définie.

Dans la seconde étape on montre l'existence d'au moins un point fixe pour l'opérateur Γ en appliquant le théorème de Schauder, puis on montre que le couple (c, f) obtenu est aussi solution du système (3.1.16)–(3.1.20).

La troisième étape est consacrée à montrer que moyennant l'hypothèse supplémentaire sur les moments du carré de la donnée initiale f_0 , il y a unicité de la solution pour le problème couplé (3.1.16)–(3.1.20).

Ce travail fait l'objet des quatre chapitres suivants.

Chapitre 4

Le problème linéaire

Le but de ce chapitre est de montrer l'existence et l'unicité de la solution de l'équation parabolique :

$$\frac{\partial f}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(a(t, x) f + \frac{\partial}{\partial x} (b(t, x) f) \right) = 0 \quad \text{dans } (0, T) \times (0, +\infty), \quad (4.0.1)$$

avec les conditions initiale et au bord :

$$f(0, x) = f_0(x) \quad \text{sur } (0, +\infty), \quad (4.0.2)$$

$$f(t, 0) = 0 \quad \text{sur } (0, T). \quad (4.0.3)$$

Ici a et b sont définis par (3.1.1)–(3.1.2), et $c(t)$ est une fonction donnée, continue sur $[0, T]$, vérifiant $0 \leq c(t) \leq \rho$, $\forall t \in [0, T]$.

On définit la forme bilinéaire A naturellement associée au problème (4.0.1)–(4.0.3) :

$$A(t; f, g) = \int_0^\infty \left(e(t, x) f(x) + b(t, x) \frac{\partial f}{\partial x}(x) \right) \frac{\partial g}{\partial x}(x) dx \quad (4.0.4)$$

pour tout f, g dans V , $t \in [0, T]$.

On énonce le théorème d'existence et d'unicité pour ce problème aux limites :

Théorème 4.0.5. *On suppose les hypothèses (3.1.22)–(3.1.23) vérifiées et $f_0 \geq 0$ donnée dans H , alors il existe une solution unique f au problème (4.0.1)–(4.0.3) au sens de la définition 3.2.2. De plus $f(t, x) \geq 0$ pour tout $t \in [0, T]$.*

La démonstration de ce théorème est faite dans la suite de ce chapitre. On commencera par montrer un lemme donnant les propriétés de continuité et de coercivité de la forme

bilinéaire A . En utilisant la méthode de Faedo-Galerkin, nous définirons une suite de solutions approchées $(f_m)_{m \in \mathbb{N}}$, pour laquelle nous donnerons des estimations à priori. Puis en passant à la limite dans la forme faible, en utilisant un critère de densité et le fait que A soit une forme bilinéaire coercive, nous montrerons que cette suite converge vers l'unique solution du problème parabolique linéaire.

Lemme 4.0.4. • Soient $f, g \in V$, alors $t \mapsto A(t; f, g)$ est une fonction continue; A est continue sur V , c'est-à-dire : $\exists M_T < \infty$ tel que $|A(t; f, g)| \leq 2M_T \|f\|_V \|g\|_V \forall f, g \in V$, p.p.t. $t \in [0, T]$, où M_T ne dépend que de $\|b\|_{L^\infty([0, T] \times [0, \infty])}$ et de $\|e\|_{L^\infty([0, T] \times [0, \infty])}$.

• La forme bilinéaire A est coercive sur V , c'est-à-dire : $\exists \alpha, \beta > 0$ tels que $A(t; f, f) \geq \alpha \|f\|_V^2 - \beta \|f\|_H^2 \forall f \in V$, p.p.t. $t \in [0, T]$.

Preuve. D'après les hypothèses (3.1.22) et l'inégalité $0 \leq c(t) \leq \rho \forall t \in [0, T]$, les constantes r, b^* et b_* définies par :

$$b^* = \sup_{(t,x) \in (0,T) \times \mathbb{R}^+} b, \quad b_* = \inf_{(t,x) \in (0,T) \times \mathbb{R}^+} b, \quad r = \sup_{(t,x) \in (0,T) \times \mathbb{R}^+} \left| a + \frac{\partial b}{\partial x} \right| \quad (4.0.5)$$

sont finies. D'après (3.1.23) on a $b_* > 0$.

• On montre la continuité de la forme bilinéaire A .

Soient $f, g \in V$, alors pour presque tout t dans $[0, T]$ on a :

$$\begin{aligned} |A(t; f, g)| &= \left| \int_0^\infty \left(a + \frac{\partial b}{\partial x} \right) f \frac{\partial g}{\partial x} + b \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial g}{\partial x} dx \right| \\ &\leq r \int_0^\infty |f| \left| \frac{\partial g}{\partial x} \right| dx + b^* \int_0^\infty \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right| \left| \frac{\partial g}{\partial x} \right| dx \\ &\leq M_T \int_0^\infty \left(|f| + \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right| \right) \left| \frac{\partial g}{\partial x} \right| dx, \end{aligned}$$

avec $M_T = \max(r, b^*)$.

En appliquant l'inégalité de Cauchy-Schwarz, on obtient immédiatement :

$$|A(t; f, g)| \leq 2M_T \|f\|_V \|g\|_V. \quad (4.0.6)$$

• On montre maintenant la coercivité de la forme bilinéaire A .

Soit $f \in V$. Alors p.p.t. $t \in [0, T]$ on a :

4.1. EXISTENCE POUR LE PROBLÈME APPROCHÉ ET ESTIMATIONS À PRIORI 35

$$\begin{aligned} A(t; f, f) &= \int_0^\infty \left(a + \frac{\partial b}{\partial x} \right) f \frac{\partial f}{\partial x} dx + b \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right|^2 dx \\ A(t; f, f) &\geq - \left| \int_0^\infty \left(a + \frac{\partial b}{\partial x} \right) f \frac{\partial f}{\partial x} dx \right| + \int_0^\infty b \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right|^2 dx \\ &\geq - \int_0^\infty \left| a + \frac{\partial b}{\partial x} \right| |f| \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right| dx + b_* \int_0^\infty \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right|^2 dx \\ &\geq -r \int_0^\infty |f| \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right| dx + b_* \int_0^\infty \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right|^2 dx \end{aligned}$$

En appliquant l'inégalité de Young on obtient :

$$\begin{aligned} A(t; f, f) &\geq -r \left(\int_0^\infty \varepsilon \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right|^2 dx + \frac{1}{\varepsilon} \int_0^\infty |f|^2 dx \right) + b_* \int_0^\infty \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right|^2 dx \\ &= (-r\varepsilon + b_*) \int_0^\infty \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right|^2 dx - \frac{r}{\varepsilon} \int_0^\infty |f|^2 dx, \end{aligned}$$

En choisissant ε assez petit, on obtient la relation de coercivité :

$$A(t; f, f) \geq \alpha \|f\|_V^2 - \beta \|f\|_H^2. \quad (4.0.7)$$

4.1 Existence pour le problème approché et estimations à priori

On utilise la méthode de Faedo-Galerkin. V est un espace de Hilbert séparable, il existe donc une suite d'éléments linéairement indépendants w_1, \dots, w_m, \dots qui est dense dans V . (on peut par exemple, prendre les w_j dans $\mathcal{D}(\mathbb{R}^+)$).

Pour tout $m \in \mathbb{N}$, on peut définir une solution approchée f_m :

$$f_m(t) = \sum_{i=1}^m \zeta_{im}(t) w_i \quad (4.1.8)$$

solution du problème :

$$\int_0^\infty \frac{\partial f_m}{\partial t}(t, x) w_j(x) dx + A(t, f_m, w_j) = 0 \quad j = 1, \dots, m. \quad (4.1.9)$$

$$f_m(0) = f_m^0. \quad (4.1.10)$$

Ici f_m^0 désigne la projection orthogonale dans H de f_0 sur l'espace engendré par w_1, \dots, w_m , et donc $f_{0m} \rightarrow f_0$ dans H lorsque $m \rightarrow +\infty$.

Les ζ_{im} , $1 \leq i \leq m$ sont des fonctions scalaires, définies sur $[0, T]$ et (4.1.9) est un système différentiel linéaire pour ces fonctions :

$$\sum_{i=1}^m (w_i, w_j) \zeta'_{im}(t) + \sum_{i=1}^m A(t; w_i, w_j) \zeta_{im}(t) = 0 \quad j = 1, m, \quad (4.1.11)$$

où $(w_i, w_j) = \int_0^\infty w_i(x) w_j(x) dx$.

La matrice $B_1 = (w_i, w_j)_{ij}$, $(1 \leq i, j \leq m)$ est non singulière. Par inversion de cette matrice, on réduit (4.1.9) à un système linéaire à coefficients non constants :

$$\zeta'_m(t) + B(t) \zeta_m(t) = 0. \quad (4.1.12)$$

Ici on a posé $\zeta_m(t) = (\zeta_{1m}(t), \zeta_{2m}(t), \dots, \zeta_{mm}(t))^t$,

$$B(t) = (b_{ij}(t))_{ij} = B_1^{-1} B_2(t), \quad 1 \leq i, j \leq m \text{ et } B_2(t) = (A(t, w_i, w_j))_{i,j}.$$

On va maintenant présenter des estimations à priori indépendantes de m pour les fonctions f_m afin de passer à la limite dans la forme faible (4.1.9) des équations.

Pour simplifier les écritures, dans toute la suite $C(T)$ désignera une constante qui ne dépend que de T , et C une constante réelle quelconque.

Lemme 4.1.5. Les hypothèses (3.1.22)–(3.1.23) sont supposées vérifiées, et $f_0 \in H$. La suite $(f_m)_m$ est définie globalement en temps et est bornée dans $L^\infty(0, T; H)$:

$$p.p. \ t \in [0, T] \quad \int_0^\infty |f_m(t, x)|^2 dx \leq C(T) \quad (4.1.13)$$

où $C(T)$ est une constante qui ne dépend que de $\bar{k}, \bar{q}, \rho, T$ et de $\int_0^\infty f_0^2(x) dx$.

Preuve. D'après le lemme 4.0.4, la norme de la matrice B est bornée indépendamment de $t \in [0, T]$, donc le système différentiel (4.1.12) et la condition initiale (4.1.10) définissent les $\zeta_m(t)$, et donc f_m de manière unique.

On multiplie l'équation (4.1.9) par $\zeta_{jm}(t)$, et on somme pour $j = 1, m$.

On obtient : $\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|f_m(t)\|_H^2 + A(t; f_m, f_m) = 0$.

Or, d'après le lemme 4.0.4, on a :

4.2. UNICITÉ POUR L'ÉQUATION LINÉAIRE

$$A(t; f_m, f_m) \geq \alpha \int_0^\infty \left| \frac{\partial f_m}{\partial x} \right|^2 dx - \beta \int_0^\infty |f_m|^2 dx$$

d'où

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_0^\infty |f_m|^2 dx + \alpha \int_0^\infty \left| \frac{\partial f_m}{\partial x} \right|^2 dx \leq \beta \int_0^\infty |f_m|^2 dx \quad (4.1.14)$$

En appliquant le Lemme de Gronwall on obtient :

$$\|f_m(t)\|_H^2 \leq \|f_0\|_H^2 \exp(\beta T), \text{ ce qui achève la démonstration. } \square$$

Lemme 4.1.6. La suite $(f_m)_m$ est bornée dans $L^2(0, T; V)$:

$$\int_0^T \int_0^\infty \left(|f_m|^2 + \left| \frac{\partial f_m}{\partial x} \right|^2 \right) dx dt \leq C(T), \quad (4.1.15)$$

où $C(T)$ ne dépend que de $\bar{k}, \bar{q}, \rho, T$ et de $\int_0^\infty f_0^2(x) dx$.

Preuve. En intégrant (4.1.14) sur $(0, T)$ et en utilisant le lemme 4.1.5, on obtient :

$$\begin{aligned} \|f_m(T)\|_H^2 + 2\alpha \int_0^T \int_0^\infty \left| \frac{\partial f_m}{\partial x} \right|^2 dx dt &\leq \|f_m^0\|_H^2 + 2\beta \int_0^T \int_0^\infty |f_m|^2 dx dt \\ &\leq \|f_m^0\|_H^2 + 2T\beta \|f_0\|_H^2 \exp(\beta T) \\ &\leq (1 + 2T\beta \exp(\beta T)) \|f_0\|_H^2, \end{aligned}$$

ce qui donne le résultat. \square

Dans les trois prochains paragraphes nous allons montrer l'unicité, l'existence et la positivité de la solution faible pour le système (4.0.1)–(4.0.3), ces résultats sont obtenus comme une conséquence des lemmes 4.0.4, 4.1.5 et 4.1.6.

On commence par montrer l'unicité de la solution pour le problème linéaire.

4.2 Unicité pour l'équation linéaire

Supposons f_1, f_2 deux solutions du système (4.0.1)–(4.0.3), et $h = f_1 - f_2$. Pour tout $g \in V$, on a pour $i = 1, 2$, pour presque tout t dans $[0, T]$:

$$\begin{aligned} &< \frac{\partial f_i}{\partial t}(t), g >_{V' \times V} + A(t; f_i(t), g) = 0, \\ &f_i(0, x) = f_0(x), \quad x > 0. \end{aligned}$$

D'après la linéarité de l'équation on a,

$$\begin{aligned} & \left\langle \frac{\partial h}{\partial t}(t), g \right\rangle_{V' \times V} + A(t; h(t), g) = 0, \quad p.p.t \in [0, T], \\ & h(0, x) = 0, \quad x > 0. \end{aligned}$$

Pour presque tout $t \in [0, T]$, $h(t) \in V$, on peut alors poser $g = h(t) \in V$, d'où :

$$\left\langle \frac{\partial h}{\partial t}(t), h(t) \right\rangle + A(t; h(t), h(t)) = 0, \quad p.p.t \in [0, T] \quad (4.2.16)$$

$$h(0, x) = 0, \quad x > 0. \quad (4.2.17)$$

D'après le lemme 3.1.2, on a : $\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|h(t)\|_H^2 + A(t; h(t), h(t)) = 0$.

Or, d'après la propriété de coercivité (lemme 4.0.4) on a :

$$A(t; h(t), h(t)) \geq \alpha \|h(t)\|_V^2 - \beta \|h(t)\|_H^2,$$

$$\text{d'où } \frac{d}{dt} \|h(t)\|_H^2 + 2\alpha \|h(t)\|_V^2 - 2\beta \|h(t)\|_H^2 \leq 0.$$

Le lemme de Gronwall montre alors immédiatement que $h(t) \equiv 0$, ce qui prouve l'unicité.

4.3 Passage à la limite dans la forme faible des équations

On énonce le résultat dans le lemme suivant :

Lemme 4.3.7. *La suite $(f_m)_{m \in \mathbb{N}}$ converge faiblement $*$ dans $L^\infty([0, T]; H)$ et faiblement dans $L^2([0, T]; V)$ vers l'unique solution f du problème (4.0.1)-(4.0.3).*

Preuve

• L'estimation à priori (4.1.13) montre l'existence d'un élément $f^* \in L^\infty(0, T, H)$ et d'une sous-suite $(f_{m'})_{m' \in \mathbb{N}}$ de $(f_m)_{m \in \mathbb{N}}$ tels que :

$$f_{m'} \rightharpoonup f^* \quad \text{lorsque } m' \rightarrow \infty \text{ pour la topologie faible } * \text{ de } L^\infty(0, T, H). \quad (4.3.18)$$

• L'estimation (4.1.15) montre que la suite $(f_{m'})$ est dans un ensemble borné de $L^2(0, T; V)$; donc il existe une sous-suite de $(f_{m'})$ encore notée avec l'indice m' , et une fonction $f \in L^2(0, T; V)$ telles que :

$$f_{m'} \rightharpoonup f \quad \text{lorsque } m' \rightarrow \infty \text{ pour la topologie faible de } L^2(0, T; V) \quad (4.3.19)$$

$$f(t) = f^*(t) \in L^\infty(0, T; H) \cap L^2(0, T; V) \quad (4.3.20)$$

En termes de fonctions tests, les deux convergences ci-dessus (4.3.18) et (4.3.19) s'écrivent :

$\forall g \in L^1([0, T]; L^2(\mathbb{R}^+)) :$

$$\int_0^T \int_0^\infty f_{m'}(t, x) g(t, x) dx dt \rightarrow \int_0^T \int_0^\infty f(t, x) g(t, x) dx dt \quad (4.3.21)$$

et $\forall g \in L^2([0, T]; H^1(\mathbb{R}^+)) :$

$$\int_0^T \int_0^\infty \left(f_{m'} g + \frac{\partial f_{m'}}{\partial x} \frac{\partial g}{\partial x} \right) dx dt \rightarrow \int_0^T \int_0^\infty \left(f g + \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial g}{\partial x} \right) dx dt \quad (4.3.22)$$

D'après (4.1.9), on a pour presque tout t dans $]0, T[$:

$$\int_0^\infty \frac{\partial f_{m'}}{\partial t}(t, x) w_j(x) dx + \int_0^\infty \frac{\partial w_j}{\partial x} \left(a f_{m'} + \frac{\partial}{\partial x} (b f_{m'}) \right) dx = 0, \quad j = 1, m'.$$

On multiplie par la fonction scalaire $\psi \in C^1([0, T]; \mathbb{R})$ telle que $\psi(T) = 0$ et on intègre sur $(0, T)$, cela donne :

$$\begin{aligned} & - \int_0^\infty f_{m'}(0, x) w_j(x) \psi(0) dx - \int_0^T \int_0^\infty f_{m'}(t, x) w_j(x) \psi'(t) dx dt + \\ & \int_0^T \int_0^\infty \left(a f_{m'} + \frac{\partial}{\partial x} (b f_{m'}) \right) \frac{\partial}{\partial x} (\psi(t) w_j(x)) dx dt = 0. \end{aligned}$$

Les convergences (4.3.21) et (4.3.22) suffisent pour montrer que f est solution faible.

En effet, la limite lorsque $m' \rightarrow +\infty$ est alors donnée par :

$$- \int_0^T (f(t), \psi'(t) w_j) dt + \int_0^T A(t; f(t), \psi(t) w_j) dt = \psi(0) (f_0, w_j). \quad (4.3.23)$$

En utilisant la linéarité de l'équation et la densité dans V des combinaisons linéaires finies des w_j , on obtient que f vérifie (3.2.24).

Il reste à obtenir la condition initiale. Le lemme 3.1.2 permet de montrer ce résultat, c'est-à-dire que $f(0)$ a un sens et appartient à H :

Nous allons montrer que les hypothèses du lemme sont bien vérifiées :

– $f \in L^2(0, T; V)$ car f est limite faible d'une suite f_m bornée dans $L^2(0, T; V)$.

– Il reste à montrer l'hypothèse $\frac{df}{dt} \in L^2([0, T]; H^{-1}(\mathbb{R}^+))$.

La fonction $f \in L^2(0, T; V) \cap L^\infty(0, T; H)$ est solution faible du système (4.0.1)(4.0.2)(4.0.3).

Donc pour tout $g \in V$ on a :

$$\frac{d}{dt} \int_0^\infty f(t) g dx + A(t; f(t), g) = 0, \quad p.p.t \in [0, T]. \quad (4.3.24)$$

D'après la formulation (4.3.24), on a :

$$\left\langle \frac{df(t)}{dt}, g \right\rangle_{V' \times V} = -A(t; f(t), g), \quad p.p.t \in [0, T].$$

$$\text{D'où : } \left| \left\langle \frac{df(t)}{dt}, g \right\rangle_{V' \times V} \right| \leq |A(t; f(t), g)|.$$

Or d'après le lemme 4.0.4 on a : $|A(t; f(t), g)| \leq C(T) \|f(t)\|_V \|g\|_V$,

d'où :

$$\left| \left\langle \frac{df(t)}{dt}, g \right\rangle_{V' \times V} \right| \leq C(T) \|f(t)\|_V \|g\|_V. \quad (4.3.25)$$

On intègre (4.3.25) sur $(0, T)$. D'après l'inégalité (4.1.15) du lemme 4.1.6 appliquée à la limite faible f , il vient :

$$\int_0^T \left| \left\langle \frac{df(t)}{dt}, g \right\rangle_{V' \times V} \right| dt \leq C(T) \|g\|_V.$$

Ce qui donne le résultat attendu :

$$\frac{df(t)}{dt} \in L^2(0, T, H^{-1}(\mathbb{R}^+)). \quad (4.3.26)$$

On conclut alors à la continuité de f en temps à valeurs dans H .

Il reste à montrer que $f_0 = f(0)$. Ceci est une conséquence directe de la formulation faible des équations :

On écrit la relation (3.2.24) dans le cas particulier : $\psi = \phi \in \mathcal{D}([0, T])$, et on trouve l'égalité :

$$-\int_0^T (f(t), g) \phi'(t) dt + \int_0^T A(t; f(t), g) \phi(t) dt = 0 \quad \text{pour tout } g \in V, \text{ pour tout } \phi \in \mathcal{D}([0, T]).$$

On a alors :

$$\frac{d}{dt} (f(t), g) + A(t; f(t), g) = 0 \quad \forall g \in V, \text{ au sens des distributions sur }]0, T[. \quad (4.3.27)$$

Par densité on peut appliquer (4.3.27) à des fonctions test $\psi(t) \in C^1([0, T])$ telles que $\psi(0) \neq 0$, et $\psi(T) = 0$. On obtient :

$$-\int_0^T (f(t), g) \psi'(t) dt + \int_0^T \psi(t) A(t; f(t), g) dt = \psi(0) (f(0), g). \quad (4.3.28)$$

En comparant (4.3.23) et (4.3.28), il vient :

$$\psi(0) (f(0) - f_0, g) = 0, \quad \forall g \in V$$

On peut choisir ψ telle que $\psi(0) \neq 0$, alors $(f_0 - f(0), g) = 0 \quad \forall g \in V$,

d'où

$$f_0 = f(0). \quad (4.3.29)$$

Ceci termine la démonstration du lemme 4.3.7. \square

L'unicité de la solution au sens de la définition 3.2.2 pour le problème linéaire limite (4.3.27) et les estimations (4.1.15) et (4.1.13) pour la suite de solutions approchés (f_m) définie en (4.1.8), permettent de montrer que toute la suite (f_m) converge vers l'unique solution du système linéaire (4.0.1)-(4.0.3).

4.4 Principe du maximum pour f

f étant la fonction densité en taille, il est important que cette quantité reste positive au cours du temps.

Lemme 4.4.8. Si $f_0 \geq 0$ dans \mathbb{R}^+ alors $f \geq 0$ dans $[0, T] \times \mathbb{R}^+$.

Preuve. On a :

$$\left\langle \frac{\partial f}{\partial t}(t), g \right\rangle_{V' \times V} + A(t; f(t), g) = 0, \quad \forall g \in V, \quad p.p.t \in [0, T]. \quad (4.4.30)$$

On pose : $f = f_+ - f_-$ avec $f_+ = \max(0, f)$ et $f_- = \max(0, -f)$.

On a $p.p.t \in [0, T]$ $f_-(t) \in V$. On peut alors prendre pour fonction test $g = f_-(t) \in V$, t fixé.

L'équation (4.4.30) devient :

$$\left\langle \frac{\partial f_-}{\partial t}(t), f_-(t) \right\rangle_{V' \times V} = -A(t; f_-(t), f_-(t)), \quad \forall g \in V, \quad p.p.t \in [0, T].$$

D'après le lemme 3.1.2, on a :

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} (f_-(t), f_-(t))_H = -A(t; f_-(t), f_-(t)),$$

Or d'après la coercivité de A , on a p.p.t. $t \in [0, T]$:

$$-A(t; f_-(t), f_-(t)) \leq -\alpha \left\| \frac{\partial f_-(t)}{\partial x} \right\|_H^2 + \beta \|f_-(t)\|_H^2, \text{ d'où :}$$

$$\frac{d}{dt} \int_0^\infty |f_-(t, x)|^2 dx \leq 2\beta \|f_-(t)\|_H^2.$$

En remarquant que $f_-(0) \equiv 0$, le lemme de Gronwall fournit alors la conclusion.

Chapitre 5

Propagation des moments

Dans le chapitre précédent nous avons montré l'existence et l'unicité de la solution pour l'équations (4.0.1) complétée par (4.0.2) et (4.0.3).

Il en résulte que l'application Γ donnée par (3.3.27) est bien définie, que l'intégrale

$\int_0^\infty xf(t, x) dx$ soit finie ou non. La difficulté principale que l'on rencontre lors de la recherche d'une solution au problème de Lifshitz-Slyozov modifié est de montrer que $I(f)$ reste borné. Nous allons alors commencer par montrer que sous les hypothèses (3.1.22)–(3.1.23) sur les coefficients cinétiques de coagulation et de fragmentation, et des hypothèses sur un certain nombre de moments successifs de la donnée initiale f_0 , les moments respectifs de f restent finis pour tout temps t ultérieur dans $[0, T]$ $0 \leq T < \infty$.

On montre un résultat analogue pour les moments de f^2 . Ce résultat est suffisant pour montrer l'unicité de la solution pour le système (3.1.16)–(3.1.17).

5.1 Propagation des moments de f

Dans ce paragraphe nous allons montrer que si les moments de f sont finis à l'instant initial $t = 0$, alors pour tout temps t ultérieur dans $[0, T]$ $T > 0$, les moments de f restent finis.

Lemme 5.1.9. *On suppose les hypothèses (3.1.22)–(3.1.23) et $\int_0^\infty f_0(x) dx < \infty$ vérifiées, on a alors p.p. $t \in [0, T]$ $\int_0^\infty f(t, x) dx \leq C(T)$, où $C(T)$ est une constante ne dépendant que de $\bar{k}, \bar{q}, \rho, T$, du moment d'ordre zéro de la donnée initiale f_0 et de $\int_0^\infty f_0^2(x) dx$.*

Preuve. Afin de montrer que le premier moment de f est fini, on revient à la formulation faible (3.2.24) de la définition 3.2.2 et on utilise pour fonctions tests une suite de fonctions de $C^0(\mathbb{R}^+) \cap H_0^1(\mathbb{R}^+)$ qui tronquent la fonction 1.

Considérons alors la suite de fonctions $(\chi_R)_{R \in \mathbb{N}^*}$ de $C^0(\mathbb{R}^+) \cap H_0^1(\mathbb{R}^+)$, définie par :

$$\chi_R(x) = \begin{cases} x & \text{pour } 0 \leq x \leq 1 \\ 1 & \text{pour } 1 \leq x \leq R \\ 2 - \frac{x}{R} & \text{pour } R \leq x \leq 2R \\ 0 & \text{pour } x \geq 2R. \end{cases}$$

La dérivée de χ_R est donnée par :

$$\chi'_R(x) = \begin{cases} 1 & \text{pour } 0 < x < 1 \\ 0 & \text{pour } 1 < x < R \\ -\frac{1}{R} & \text{pour } R < x < 2R \\ 0 & \text{pour } x > 2R. \end{cases}$$

Soit f une solution du système (4.0.1)–(4.0.3) au sens de la définition 3.2.2, on a alors :

$$\frac{d}{dt} \int_0^\infty f(t, x) \chi_R(x) dx + \int_0^\infty \chi'_R(x) \left(af + \frac{\partial}{\partial x} (bf) \right) dx = 0. \quad (5.1.1)$$

On intègre l'équation (5.1.1) sur $(0, t)$ et on obtient :

$$\int_0^\infty f(t, x) \chi_R(x) dx = \int_0^\infty f_0(x) \chi_R(x) dx - \int_0^t \int_0^\infty \chi'_R(x) \left(af + \frac{\partial}{\partial x} (bf) \right) dx d\tau.$$

En remplaçant $\chi'_R(x)$ par sa valeur dans les différents intervalles, on obtient :

$$\begin{aligned} \int_0^\infty f(t, x) \chi_R(x) dx &= \int_0^\infty f_0(x) \chi_R(x) dx - \int_0^t \int_0^1 \left(af + \frac{\partial}{\partial x} (bf) \right) dx d\tau \\ &\quad + \frac{1}{R} \int_0^t \int_R^{2R} \left(af + \frac{\partial}{\partial x} (bf) \right) dx d\tau \end{aligned}$$

d'où,

$$\begin{aligned} \int_0^\infty f(t, x) \chi_R(x) dx &= \int_0^\infty \chi_R(x) f_0(x) dx - \int_0^t \int_0^1 af dx d\tau - \int_0^t (bf) |_{x=1} d\tau \\ &\quad + \frac{1}{R} \int_0^t \int_R^{2R} af dx d\tau + \frac{1}{R} \int_0^t (bf) |_{x=2R} d\tau - \frac{1}{R} \int_0^t (bf) |_{x=R} d\tau. \end{aligned}$$

On a alors la majoration suivante :

$$\begin{aligned} \int_1^R f(t, x) dx &\leq \int_0^\infty f_0(x) dx - \int_0^t \int_0^1 af dx d\tau + \frac{1}{R} \int_0^t \int_R^{2R} af dx d\tau \\ &\quad + \frac{1}{R} \int_0^t (bf) |_{x=2R} d\tau. \end{aligned}$$

En considérant l'expression de a en (3.1.1) il vient :

5.1. PROPAGATION DES MOMENTS DE F

$$\begin{aligned} \int_1^R f(t, x) dx &\leq \int_0^\infty f_0(x) dx + \int_0^t \int_0^1 kcf dx d\tau + \frac{1}{R} \int_0^t \int_R^{2R} qf dx d\tau \\ &\quad + \frac{1}{R} \int_0^t (bf) |_{x=2R} d\tau. \end{aligned}$$

Les fonctions k, q et c étant continues et bornées, il vient :

$$\int_1^R f(t, x) dx \leq \int_0^\infty f_0(x) dx + \bar{k}\rho \int_0^t \int_0^1 f(\tau, x) dx d\tau + \frac{\bar{q}}{R} \int_0^t \int_R^{2R} f(\tau, x) dx d\tau + \frac{b^*}{R} \int_0^t f(\tau, 2R) d\tau,$$

où b^*, \bar{k} et \bar{q} sont définies dans (4.0.5) et (3.1.23).

En appliquant l'inégalité de Cauchy-Schwarz on obtient :

$$\begin{aligned} \int_1^R f(t, x) dx &\leq \int_0^\infty f_0(x) dx + \bar{k}\rho\sqrt{t} \left(\int_0^t \int_0^1 f^2(\tau, x) dx d\tau \right)^{\frac{1}{2}} \\ &\quad + \frac{\bar{q}\sqrt{t}}{\sqrt{R}} \left(\int_0^t \int_R^{2R} f^2(\tau, x) dx d\tau \right)^{\frac{1}{2}} + \frac{b^*}{R} \int_0^t f(\tau, 2R) d\tau. \end{aligned}$$

Or, $f(\tau, 2R) = \int_0^{2R} \frac{\partial f}{\partial x}(\tau, x) dx$, d'où

$$\begin{aligned} \int_0^t f(\tau, 2R) d\tau &\leq \int_0^t \int_0^{2R} \left| \frac{\partial f}{\partial x}(\tau, x) \right| dx d\tau \\ &\leq \sqrt{2Rt} \left(\int_0^t \int_0^{2R} \left| \frac{\partial f}{\partial x}(\tau, x) \right|^2 dx d\tau \right)^{\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

On obtient alors la majoration suivante pour $\int_1^R f(t, x) dx$:

$$\begin{aligned} \int_1^R f(t, x) dx &\leq \int_0^\infty f_0(x) dx + \bar{k}\rho\sqrt{T} \left(\int_0^t \int_0^\infty f^2(\tau, x) dx d\tau \right)^{\frac{1}{2}} \\ &\quad + \frac{\bar{q}\sqrt{T}}{\sqrt{R}} \left(\int_0^t \int_0^\infty f^2(\tau, x) dx d\tau \right)^{\frac{1}{2}} + \frac{b^*\sqrt{2T}}{\sqrt{R}} \left(\int_0^t \int_0^\infty \left| \frac{\partial f}{\partial x}(\tau, x) \right|^2 dx d\tau \right)^{\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

En vertu de la convergence faible $f_m \rightharpoonup f$ dans $L^2(0, T; V)$, l'estimation (4.1.15) est aussi vérifiée pour f et on obtient une majoration de $\int_1^R f(t, x) dx$ indépendante de R :

$$\forall R \geq 1, \quad \int_1^R f(t, x) dx \leq C(T),$$

où $C(T)$ est une constante qui dépend uniquement de $\bar{k}, \bar{q}, \rho, T, \int_0^\infty f_0(x) dx$ et de $\int_0^\infty f_0^2(x) dx$.

On peut encore écrire : $\int_1^R f(t, x) dx = \int_1^\infty F_R(t, x) dx \leq C(T)$,

où,

$$F_R(t, x) = \begin{cases} f(t, x) & \text{pour } 1 \leq x \leq R \\ 0 & \text{pour } x > R \end{cases}$$

On a $\lim_{R \rightarrow \infty} F_R(t, x) = f(t, x)$ $x \geq 1$.

D'après le lemme 4.4.8, f est une fonction positive presque partout, donc $(F_R)_{R \in \mathbb{N}^*}$ est une suite croissante de fonctions positives et mesurables sur $[0, T] \times \mathbb{R}^+$.

D'après le théorème de convergence monotone de Beppo-Levi, il vient :

$$\int_1^\infty f(t, x) dx \leq C(T). \quad (5.1.2)$$

En utilisant l'inégalité de Cauchy-Schwarz puis l'estimation (4.1.13) on a :

$$\int_0^1 f(t, x) dx \leq \left(\int_0^\infty f^2(t, x) dx \right)^{\frac{1}{2}} \leq C(T), \quad (5.1.3)$$

où $C(T)$ dépend de $\bar{k}, \bar{q}, T, \rho$ et de $\int_0^\infty f_0^2(x) dx$.

(5.1.2) et (5.1.3) donnent la majoration recherchée. \square

Lemme 5.1.10. Supposons que $f_0 \in H$ vérifie : $\int_0^\infty (1+x)f_0(x) dx < \infty$. Alors sous les hypothèses (3.1.22)–(3.1.23) on a p.p. $t \in [0, T]$ $\int_0^\infty xf(t, x) dx \leq C(T)$, où $C(T)$ est une constante ne dépendant que de $\bar{k}, \bar{q}, \rho, T, \int_0^\infty (1+x)f_0(x) dx$ et $\int_0^\infty f_0^2(x) dx$.

De plus, $I \in W^{1,\infty}(0, T)$ et

$$I(t) = I(0) + \int_0^t \int_0^\infty (k(x)c(\tau) - q(x))f(\tau, x) dx d\tau. \quad (5.1.4)$$

Preuve. Pour montrer que p.p. $t \in [0, T]$ $\int_0^\infty xf(t, x) dx \leq C(T)$ on utilise une technique comparable à celle du lemme précédent. Soit la fonction test η_R définie par :

$$\eta_R(x) = \begin{cases} x & \text{pour } 0 \leq x \leq R, \\ 2R - x & \text{pour } R \leq x \leq 2R, \\ 0 & \text{pour } x \geq 2R. \end{cases}$$

On a $\eta_R \in C^0(\mathbb{R}^+) \cap H_0^1(\mathbb{R}^+)$, et sa dérivée η'_R est donnée par :

$$\eta'_R(x) = \begin{cases} 1 & \text{pour } 0 < x < R, \\ -1 & \text{pour } R < x < 2R, \\ 0 & \text{pour } x > 2R. \end{cases}$$

5.1. PROPAGATION DES MOMENTS DE F

Soit f une solution du système d'équations (4.0.1)–(4.0.3) au sens de la définition 3.2.2, on a :

$$\int_0^\infty f(t, x)\eta_R(x) dx = \int_0^\infty f_0(x)\eta_R(x) dx - \int_0^t \int_0^\infty \eta'_R(x) \left(af + \frac{\partial}{\partial x}(bf) \right) dx d\tau.$$

En remplaçant $\eta'_R(x)$ par sa valeur dans les différents intervalles, on obtient :

$$\begin{aligned} \int_0^\infty f(t, x)\eta_R(x) dx &= \int_0^\infty f_0(x)\eta_R(x) dx - \int_0^t \int_0^R \left(af + \frac{\partial}{\partial x}(bf) \right) dx d\tau \\ &\quad + \int_0^t \int_R^{2R} \left(af + \frac{\partial}{\partial x}(bf) \right) dx d\tau, \end{aligned}$$

d'où :

$$\begin{aligned} \int_0^\infty f(t, x)\eta_R(x) dx &= \int_0^\infty \eta_R(x)f_0(x) dx - \int_0^t \int_0^R af dx d\tau - \int_0^t (bf)|_{x=R} d\tau \\ &\quad + \int_0^t \int_R^{2R} af dx d\tau + \int_0^t (bf)|_{x=2R} d\tau - \int_0^t (bf)|_{x=R} d\tau. \end{aligned}$$

On a donc la majoration suivante :

$$\int_0^R xf(t, x) dx \leq \int_0^\infty xf_0(x) dx + \rho\bar{k} \int_0^t \int_0^R f(\tau, x) dx d\tau + \bar{q} \int_0^t \int_R^{2R} f dx d\tau + b^* \int_0^t f(\tau, 2R) d\tau.$$

D'après les hypothèses du lemme 5.1.10 et en utilisant le lemme 5.1.9 on a :

$$\int_0^R xf(t, x) dx \leq C(T) + b^* \int_0^t \|f(\tau, \cdot)\|_{L^\infty(\mathbb{R}^+)} d\tau,$$

où $C(T)$ est une constante qui dépend uniquement de $\bar{k}, \bar{q}, \rho, T, \int_0^\infty f_0(x) dx$ et de

$$\int_0^\infty xf_0(x) dx.$$

En utilisant le lemme A.2.24 énoncé et démontré en annexe, on a la majoration suivante :

$$\begin{aligned} \int_0^R xf(t, x) dx &\leq C(T) + b^* \int_0^t \|f(\tau, \cdot)\|_{L^2(\mathbb{R}^+)} d\tau + b^* \int_0^t \left\| \frac{\partial f}{\partial x}(\tau, \cdot) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^+)} d\tau \\ &\leq C(T) + b^* \sqrt{t} \left(\int_0^t \|f(\tau, \cdot)\|_{L^2(\mathbb{R}^+)}^2 d\tau \right)^{\frac{1}{2}} + b^* \sqrt{t} \left(\int_0^t \left\| \frac{\partial f}{\partial x}(\tau, \cdot) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^+)}^2 d\tau \right)^{\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

En utilisant l'estimation (4.1.15) (aussi vérifiée pour la limite f), on a :

$$\int_0^R xf(t, x) dx \leq C(T), \text{ où } C(T) \text{ dépend des constantes précédentes et de } \int_0^\infty f_0^2(x) dx.$$

Par le théorème de la convergence monotone de Beppo-Levi on obtient le résultat attendu :

$$\int_0^\infty x f(t, x) dx \leq C(T). \quad (5.1.5)$$

On montre maintenant que $I(t) = I(0) + \int_0^t \int_0^\infty (k(x)c(\tau) - q(x))f(\tau, x) dx d\tau$.

On choisit une fonction test $\eta_R \in C^1(\mathbb{R}^+) \cap H_0^1(\mathbb{R}^+)$ avec $\eta_R(x) = R \eta(\frac{x}{R})$, où

$$\eta(x) = \begin{cases} x & \text{pour } 0 \leq x \leq 1, \\ 3x^3 - 14x + 20x - 8 & \text{pour } 1 \leq x \leq 2, \\ 0 & \text{pour } x \geq 2. \end{cases}$$

La fonction test η_R est alors donnée par :

$$\eta_R(x) = R \eta(\frac{x}{R}) = \begin{cases} x & \text{pour } 0 \leq x \leq R, \\ \frac{3}{R^2}x^3 - \frac{14}{R}x^2 + 20x - 8R & \text{pour } R \leq x \leq 2R, \\ 0 & \text{pour } x \geq 2R, \end{cases}$$

et sa dérivée η'_R est donnée par :

$$\eta'_R(x) = \eta'(\frac{x}{R}) = \begin{cases} 1 & \text{pour } 0 \leq x \leq R, \\ \frac{9}{R^2}x^2 - \frac{28}{R}x + 20 & \text{pour } R \leq x \leq 2R, \\ 0 & \text{pour } x \geq 2R. \end{cases}$$

La dérivée seconde η''_R est donnée par :

$$\eta''_R(x) = \frac{1}{R} \eta''(\frac{x}{R}) = \begin{cases} 0 & \text{pour } 0 < x < R, \\ \frac{18}{R^2}x - \frac{28}{R} & \text{pour } R < x < 2R, \\ 0 & \text{pour } x > 2R. \end{cases}$$

Soit f une solution du système d'équations (4.0.1)-(4.0.3) au sens de la définition 3.2.2, on a :

$$\begin{aligned} \int_0^\infty f(t, x) \eta_R(x) dx &= \int_0^\infty f_0(x) \eta_R(x) dx - \int_0^t \int_0^\infty \eta'_R(x) \left(af + \frac{\partial}{\partial x} (bf) \right) dx d\tau \\ &= \int_0^\infty f_0(x) \eta_R(x) dx - \int_0^t \int_0^\infty \eta'_R(x) af dx d\tau + \int_0^t \int_0^\infty \eta''_R(x) bf dx d\tau. \end{aligned}$$

En utilisant le fait que η'_R , η''_R , a et b sont bornés, la convergence dominée de Lebesgue permet de passer à la limite dans les deux membres de l'égalité précédente et on obtient le résultat. \square

Lemme 5.1.11. Soit $s \geq 1$ un entier fixé, et $T > 0$ fixé.

Si $\int_0^\infty x^k f_0(x) dx < \infty$ pour tout entier k , $0 \leq k \leq s$, alors le moment d'ordre s de f est fini pour presque tout temps $t \in [0, T]$:

$$\int_0^\infty x^s f(t, x) dx \leq C(T), \text{ où } C(T) \text{ dépend uniquement de } \bar{k}, \bar{q}, \rho, T, \left\{ \int_0^\infty x^l f_0(x) dx, \text{ pour } 0 \leq l \leq s \right\} \text{ et de } \int_0^\infty f_0^2(x) dx.$$

Preuve. La démonstration du lemme 5.1.11 se fait par récurrence sur l'entier s .

Pour $s = 1$, le résultat est fourni par le lemme 5.1.10.

Fixons alors $s \geq 2$.

On suppose la propriété établie jusqu'à l'ordre $s - 1$, c'est-à-dire :

Si $\int_0^\infty x^k f_0(x) dx < \infty$ pour $1 \leq k \leq s - 1$ alors p.p. $t \in [0, T]$ $\int_0^\infty x^k f(t, x) dx < \infty$ pour $1 \leq k \leq s - 1$.

Il reste à estimer le moment d'ordre s de f

On définit la fonction test $\eta_{R,s}$:

$$\eta_{R,s}(x) = \begin{cases} x^s & \text{pour } 0 \leq x \leq R, \\ -x + R^s + R & \text{pour } R \leq x \leq R + R^s, \\ 0 & \text{pour } x \geq R + R^s. \end{cases}$$

On a $\eta_{R,s} \in C^0(\mathbb{R}^+) \cap H_0^1(\mathbb{R}^+)$, et sa dérivée $\eta'_{R,s}$ est donnée par :

$$\eta'_{R,s}(x) = \begin{cases} sx^{s-1} & \text{pour } 0 < x < R, \\ -1 & \text{pour } R < x < R + R^s, \\ 0 & \text{pour } x > R + R^s. \end{cases}$$

Comme dans les lemmes précédents, on obtient :

$$\frac{d}{dt} \int_0^\infty \eta_{R,s}(x) f(t, x) dx + \int_0^\infty \eta'_{R,s}(x) \left(af + \frac{\partial}{\partial x} (bf) \right) dx = 0.$$

En intégrant sur $(0, t)$, en utilisant l'expression de $\eta'_{R,s}$ dans les intervalles $[0, R]$ et $[R, R + R^s]$, il vient :

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \eta_{R,s}(x) f(t, x) dx &= \int_0^\infty \eta_{R,s}(x) f_0(x) dx - \int_0^t \int_0^R sx^{s-1} af dx d\tau \\ &\quad - \int_0^t \int_R^{R+R^s} sx^{s-1} \frac{\partial}{\partial x} (bf) dx d\tau + \int_0^t \int_R^{R+R^s} af dx d\tau \end{aligned}$$

$$+ \int_0^t \int_R^{R+R^s} \frac{\partial}{\partial x} (bf) dx d\tau.$$

En intégrant par parties la troisième intégrale du membre de droite, on obtient la majoration suivante :

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \eta_{R,s}(x) f(t, x) dx &\leq \int_0^\infty x^s f_0(x) dx + s \bar{k} \rho \int_0^t \int_0^\infty x^{s-1} f dx d\tau + s(s-1) \int_0^t \int_0^R x^{s-2} b f dx d\tau \\ &\quad + \bar{q} \int_0^t \int_0^\infty f(\tau, x) dx d\tau + \int_0^t (bf)|_{x=R+R^s} d\tau. \end{aligned}$$

$$\text{On a } \int_0^t ((kc + q)f)|_{x=R+R^s} d\tau \leq (\bar{k}\rho + \bar{q}) \int_0^t f(\tau, R + R^s) d\tau.$$

D'après le lemme A.2.24, on a la majoration suivante :

$$\begin{aligned} \int_0^t (bf)|_{x=R+R^s} d\tau &\leq b^* \int_0^t \|f(\tau)\|_{L^\infty([0, \infty])} d\tau \\ &\leq b^* \int_0^t \left(\|f(\tau)\|_{L^2([0, \infty])} + \left\| \frac{\partial f}{\partial x}(\tau) \right\|_{L^2([0, \infty])} \right) d\tau \\ &\leq b^* \sqrt{t} \left(\int_0^t \|f(\tau)\|_{L^2([0, \infty])}^2 d\tau \right)^{\frac{1}{2}} + b^* \sqrt{t} \left(\int_0^t \left\| \frac{\partial f}{\partial x}(\tau) \right\|_{L^2([0, \infty])}^2 d\tau \right)^{\frac{1}{2}} \\ &\leq C(T), \end{aligned}$$

cette dernière majoration étant une conséquence directe de l'estimation à priori (4.1.15) du lemme 4.1.6.

En utilisant cette dernière majoration, l'hypothèse de récurrence et les lemmes 5.1.9 et 5.1.10, on obtient :

$$\forall R \in \mathbb{N}^* \quad p.p. \quad t \in [0, T] \quad \int_0^\infty \eta_{R,s}(x) f(t, x) dx \leq C(T).$$

L'application du théorème de convergence monotone achève la démonstration :

$$p.p. \quad t \in [0, T] \quad \int_0^\infty x^s f(t, x) dx \leq C(T). \quad \square$$

5.2 Propagation des moments de f^2

Nous allons montrer le même type de résultats que ceux obtenus dans la section précédente, mais cette fois sur les moments de f^2 : si les moments de f^2 sont finis à l'instant initial $t = 0$ alors pour presque tout temps t ultérieur dans $[0, T]$, les moments de f^2 restent finis.

Remarque 5.2.13. On introduit les notations suivantes :

$$\|f\|_{L_s^2(\mathbb{R}^+)}^2 = \int_0^\infty (1+x)^s |f|^2 dx, \quad (5.2.6)$$

$$\|f\|_{H_s^1(\mathbb{R}^+)}^2 = \int_0^\infty (1+x)^s \left(|f|^2 + \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right|^2 \right) dx. \quad (5.2.7)$$

$$(5.2.8)$$

Lemme 5.2.12. Soit $s \geq 0$ un entier fixé. Si $\int_0^\infty x^l f_0^2(x) dx < \infty$ pour $0 \leq l \leq s$ alors $\|f\|_{L^\infty([0, T]; L_s^2)} \leq C(T)$ et $\|f\|_{L^2([0, T]; H_s^1)} \leq C(T)$,

où $C(T)$ dépend uniquement de $\bar{k}, \bar{q}, \rho, T$ et de $\left\{ \int_0^\infty x^p f_0^2(x) dx \quad 0 \leq p \leq s \right\}$.

Preuve.

Remarque 5.2.14. Afin de montrer que $\int_0^\infty (1+x)^s f^2(t, x) dx \leq C(T)$ il suffira de montrer que $\int_0^\infty x^s f^2(t, x) dx \leq C(T)$ car

$$\begin{aligned} \int_0^\infty (1+x)^s f^2(t, x) dx &\leq \int_0^\infty 2^{s-1} (1+x^s) f^2(t, x) dx \\ &= \int_0^\infty 2^{s-1} f^2(t, x) dx + 2^{s-1} \int_0^\infty x^s f^2(t, x) dx \\ &\leq C_s(T) + 2^{s-1} \int_0^\infty x^s f^2(t, x) dx. \quad \square \end{aligned}$$

La démonstration se fait par récurrence sur l'entier s .

Pour $s = 0$, le résultat est fourni par hypothèse.

Fixons maintenant $s \geq 1$, et supposons la propriété établie jusqu'à l'ordre $s-1$, c'est-à-dire :

$$\text{Si } \int_0^\infty x^l f_0^2(x) dx < \infty \quad 1 \leq l \leq s-1 \quad \text{alors } \int_0^\infty x^l f^2(t, x) dx < \infty \quad \text{et}$$

$$\int_0^T \int_0^\infty x^l \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right|^2 < \infty \quad 1 \leq l \leq s-1.$$

Pour cela on définit la fonction test $\eta_{R,s}$:

$$\eta_{R,s}(x) = \begin{cases} x^s & \text{pour } 0 \leq x \leq R, \\ -x + R^s + R & \text{pour } R \leq x \leq R + R^s, \\ 0 & \text{pour } x \geq R + R^s, \end{cases}$$