

et sa dérivée  $\eta'_{R,s}$  est donnée par :

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

$\eta_{R,s} \in C^0(\mathbb{R}^+) \cap H_0^1(\mathbb{R}^+)$  et  $f \in W$ , on a alors pour presque tout  $t$  dans  $[0, T]$ ,  $\eta_{R,s}f(t) \in V$ .

En fixant  $t \in [0, T]$ , on peut alors prendre pour fonction test  $g = \eta_{R,s}f(t) \in V$  dans l'équation (3.2.25) de la définition 3.2.2 :

$$\left\langle \frac{\partial f}{\partial t}(t), \eta_{R,s}f(t) \right\rangle_{V' \times V} + A(t, f(t), \eta_{R,s}f(t)) = 0.$$

En vertu du lemme (3.1.3), l'équation précédente devient :

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_0^\infty \eta_{R,s}(x) f^2(t, x) dx = - \int_0^\infty \frac{\partial}{\partial x} (\eta_{R,s}(x) f) \left( a f + \frac{\partial}{\partial x} (b f) \right) dx,$$

d'où :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_0^\infty \eta_{R,s}(x) f^2(t, x) dx &= - \int_0^\infty \eta'_{R,s}(x) \left( a + \frac{\partial b}{\partial x} \right) f^2 dx - \int_0^\infty \eta'_{R,s}(x) b f \frac{\partial f}{\partial x} dx \\ &\quad - \int_0^\infty \eta_{R,s}(x) \left( a + \frac{\partial b}{\partial x} \right) f \frac{\partial f}{\partial x} dx - \int_0^\infty \eta_{R,s}(x) b \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right|^2 dx. \end{aligned}$$

En remplaçant  $\eta'_{R,s}$  par sa valeur dans les différents intervalles, on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_0^\infty \eta_{R,s}(x) f^2(t, x) dx &= -s \int_0^R x^{s-1} \left( a + \frac{\partial b}{\partial x} \right) f^2 dx - s \int_0^R x^{s-1} b f \frac{\partial f}{\partial x} dx \\ &\quad + \int_R^{R+R^s} \left( a + \frac{\partial b}{\partial x} \right) f^2 dx + \int_R^{R+R^s} b f \frac{\partial f}{\partial x} dx \\ &\quad - \int_0^\infty \eta_{R,s}(x) \left( a + \frac{\partial b}{\partial x} \right) f \frac{\partial f}{\partial x} dx - \int_0^\infty \eta_{R,s}(x) b \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right|^2 dx. \end{aligned}$$

En appliquant l'inégalité de Young aux intégrales contenant le facteur  $f \frac{\partial f}{\partial x}$  :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_0^\infty \eta_{R,s}(x) f^2(t, x) dx &\leq sr \int_0^\infty x^{s-1} f^2 dx + \frac{sb^*}{\varepsilon} \int_0^\infty x^{s-1} f^2 dx \\ &\quad + sb^* \varepsilon \int_0^\infty x^{s-1} \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right|^2 dx + r \int_0^\infty f^2 dx + \frac{b^*}{\varepsilon} \int_0^\infty f^2 dx \\ &\quad + b^* \varepsilon \int_0^\infty \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right|^2 dx + \frac{r}{\varepsilon} \int_0^\infty \eta_{R,s}(x) f^2 dx \\ &\quad + r\varepsilon \int_0^\infty \eta_{R,s}(x) \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right|^2 dx - b_* \int_0^\infty \eta_{R,s}(x) \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right|^2 dx, \end{aligned}$$

d'où :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_0^\infty \eta_{R,s}(x) f^2(t, x) dx &\leq \left( sr + \frac{sb^*}{\varepsilon} \right) \int_0^\infty x^{s-1} f^2 dx + \left( r + \frac{b^*}{\varepsilon} \right) \int_0^\infty f^2 dx \\ &\quad + \frac{r}{\varepsilon} \int_0^\infty \eta_{R,s}(x) f^2 dx + sb^* \varepsilon \int_0^\infty x^{s-1} \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right|^2 dx \\ &\quad + b^* \varepsilon \int_0^\infty \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right|^2 dx - (b_* - r\varepsilon) \int_0^\infty \eta_{R,s}(x) \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right|^2 dx. \end{aligned}$$

On a alors :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_0^\infty \eta_{R,s}(x) f^2(t, x) dx + (b_* - r\varepsilon) \int_0^\infty \eta_{R,s}(x) \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right|^2 dx &\leq + \frac{r}{\varepsilon} \int_0^\infty \eta_{R,s}(x) f^2 dx \\ &\quad + (\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3), \end{aligned}$$

où on a posé :

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \left( sr + \frac{sb^*}{\varepsilon} \right) \int_0^\infty x^{s-1} f^2 dx, \\ \alpha_2 &= \left( r + \frac{b^*}{\varepsilon} \right) \int_0^\infty f^2 dx, \\ \alpha_3 &= sb^* \varepsilon \int_0^\infty x^{s-1} \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right|^2 dx + b^* \varepsilon \int_0^\infty \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right|^2 dx. \end{aligned}$$

En intégrant l'inégalité précédente sur  $(0, t)$ , et il vient :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \int_0^\infty \eta_{R,s}(x) f^2(t, x) dx + (b_* - r\varepsilon) \int_0^t \int_0^\infty \eta_{R,s}(x) \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right|^2 dx d\tau &\leq \frac{1}{2} \int_0^\infty \eta_{R,s}(x) f_0^2 dx + \\ &\quad + \frac{r}{\varepsilon} \int_0^t \int_0^\infty \eta_{R,s}(x) f^2 dx d\tau + \int_0^t (\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3) d\tau. \end{aligned}$$

En utilisant l'hypothèse de récurrence et l'estimation à priori (4.1.15), on obtient :

$$\int_0^\infty \eta_{R,s}(x) f^2(t, x) dx + C_1 \int_0^t \int_0^\infty \eta_{R,s}(x) \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right|^2 dx d\tau \leq C(T) + C_2 \int_0^t \int_0^\infty \eta_{R,s}(x) f^2 dx d\tau. \quad (5.2.9)$$

En appliquant le lemme de Gronwall à  $y(t) = \int_0^t \int_0^\infty \eta_{R,s}(x) f^2(t, x) dx d\tau$ , on obtient :

$$y(t) \leq \frac{C(T)}{C_2} \exp(tC_2) \leq C(T).$$

Le théorème de convergence monotone de Beppo Levi permet d'obtenir les résultats an-

noncés par le lemme 5.2.12, c'est-à-dire :

$$p.p. \ t \in [0, T] \quad \int_0^\infty x^s f^2(t, x) dx \leq C(T), \quad (5.2.10)$$

$$\int_0^T \int_0^\infty x^s \left| \frac{\partial f}{\partial x} \right|^2 dx dt \leq C(T). \quad (5.2.11)$$

□

## Chapitre 6

### Le problème couplé : Existence

Dans ce chapitre nous montrerons l'existence d'au moins une solution pour le système (3.1.16)–(3.1.21).

Pour cela, nous commencerons par montrer l'existence d'un point fixe pour l'application  $\Gamma$  définie en (3.3.27)–(3.3.28), en utilisant le théorème du point fixe de Schauder dans l'espace  $X$ . Ceci nécessite de vérifier les points suivants :

- $\mathcal{C}$  est un convexe fermé de  $X$ .
- l'application  $\Gamma$  est bien définie.
- $\mathcal{C}$  est invariant par l'application  $\Gamma$ .
- $\Gamma$  est continue de  $\mathcal{C}$  dans lui-même.
- $\Gamma\mathcal{C}$  est d'adhérence compacte.

La dernière étape consistera à montrer que ce couple solution  $(c, f)$  est en fait solution du problème couplé (3.1.16)–(3.1.21).

#### 6.1 Existence d'un point fixe pour le schéma itératif $\Gamma$

D'après le lemme 5.1.10, l'application  $\Gamma$  est bien définie.

Dans les trois prochains lemmes nous allons montrer que le schéma (3.3.27)–(3.3.28) possède au moins un point fixe  $c(t) \in \mathcal{C}$  : dans le lemme 6.1.13 on montre que  $\Gamma$  laisse  $\mathcal{C}$  invariant, la proposition 6.1.5 donne la continuité de l'application  $\Gamma$  et dans le lemme 6.1.15 on montre que  $\overline{\Gamma\mathcal{C}}$  est compact.

**Lemme 6.1.13.**  $\mathcal{C}$  est invariant par l'application  $\Gamma$ .

On suppose  $\int_0^\infty f_0(x) dx < \infty$ .

Soient  $c(t) \in \mathcal{C}$  et  $t_0 \in [0, T]$  fixés. Alors  $\forall t \in [0, T]$  on a :

$$|\Gamma c(t) - \Gamma c(t_0)| \leq C(T)(|t - t_0| + |t - t_0|^{\frac{1}{2}}), \quad (6.1.1)$$

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

**Preuve.** Fixons  $c(t) \in \mathcal{C}$ .

• Le lemme 4.4.8 et la définition (3.3.27) de  $\Gamma$  donnent  $0 \leq \Gamma c(t) \leq \rho$ ,  $\forall t \in [0, T]$ .

• Montrons maintenant que  $\Gamma c$  est continue en temps.

Soit  $t_0 \in [0, T]$  fixé, alors  $\forall t \in [0, T]$  on a :

$$\begin{aligned} |\Gamma c(t) - \Gamma c(t_0)| &\leq \left| \max \left( 0, \rho - \int_0^\infty x f(t, x) dx \right) - \max \left( 0, \rho - \int_0^\infty x f(t_0, x) dx \right) \right| \\ &\leq \left| \int_0^\infty x (f(t, x) - f(t_0, x)) dx \right|. \end{aligned}$$

En appliquant la relation (3.2.24) à la fonction test  $\eta_R$  définie dans la démonstration du lemme 5.1.10, on obtient :

$$\frac{d}{dt} \int_0^\infty \eta_R(x) f(t, x) dx + \int_0^\infty \eta'_R(x) \left( af + \frac{\partial}{\partial x} (bf) \right) dx = 0. \quad (6.1.2)$$

Intégrons (6.1.2) sur  $(t_0, t) \subset (0, T)$  :

$$\int_0^\infty \eta_R(x) (f(t, x) - f(t_0, x)) dx + \int_{t_0}^t \int_0^\infty \eta'_R(x) \left( af + \frac{\partial}{\partial x} (bf) \right) dx d\tau = 0.$$

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

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \eta_R(x) (f(t, x) - f(t_0, x)) dx &= - \int_{t_0}^t \int_0^R \left( af + \frac{\partial}{\partial x} (bf) \right) dx d\tau \\ &\quad + \int_{t_0}^t \int_R^{2R} \left( af + \frac{\partial}{\partial x} (bf) \right) dx d\tau. \end{aligned}$$

On a donc :

$$\begin{aligned} \left| \int_0^\infty \eta_R(x) (f(t, x) - f(t_0, x)) dx \right| &\leq \left| \int_{t_0}^t \int_0^R af dx d\tau \right| \\ &\quad + \left| \int_{t_0}^t b(\tau, R) f(\tau, R) d\tau \right| + \left| \int_{t_0}^t \int_R^{2R} af dx d\tau \right| \\ &\quad + \left| \int_{t_0}^t (b(\tau, 2R) f(\tau, 2R) - b(\tau, R) f(\tau, R)) d\tau \right|. \end{aligned}$$

En utilisant l'hypothèse (3.1.23) sur les coefficients  $k$  et  $q$  de coagulation et de fragmentation, il vient :

$$\begin{aligned} \left| \int_0^\infty \eta_R(x) (f(t, x) - f(t_0, x)) dx \right| &\leq 2(\bar{k}\rho + \bar{q})|t - t_0| \sup_{\tau \in (t_0, t)} \int_0^\infty f(\tau, x) dx \\ &\quad + 2b^* \int_{t_0}^t f(\tau, R) d\tau + b^* \int_{t_0}^t f(\tau, 2R) d\tau. \end{aligned}$$

Le lemme 5.1.9 nous permet d'écrire la majoration suivante :

$$\left| \int_0^\infty \eta_R(x) (f(t, x) - f(t_0, x)) dx \right| \leq C(T)|t - t_0| + 3b^* \int_{t_0}^t \|f(\tau, \cdot)\|_{L^\infty(\mathbb{R}^+)} d\tau,$$

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

D'après le lemme A.2.24 on a :

$$\begin{aligned} \left| \int_0^\infty \eta_R(x) (f(t, x) - f(t_0, x)) dx \right| &\leq C(T)|t - t_0| + 3b^* \int_{t_0}^t \|f(\tau, \cdot)\|_{L^2(\mathbb{R}^+)} d\tau + 3b^* \int_{t_0}^t \left\| \frac{\partial f}{\partial x}(\tau, \cdot) \right\|_{L^2(\mathbb{R}^+)} d\tau \\ &\leq C(T)|t - t_0| + 6b^*|t - t_0|^{\frac{1}{2}} \|f(\tau, \cdot)\|_{L^2((t_0, t); V)}. \end{aligned}$$

En utilisant le résultat du lemme 4.1.6, on a :

$$\left| \int_0^\infty \eta_R(x) (f(t, x) - f(t_0, x)) dx \right| \leq C(T) \left( |t - t_0| + |t - t_0|^{\frac{1}{2}} \right).$$

On a  $t_0, t$  fixés.

D'où, pour tout  $R$  :  $\left| \int_0^\infty \eta_R(x) (f(t, x) - f(t_0, x)) dx \right| \leq C(T)$ .

On a bien  $\lim_{R \rightarrow \infty} (\eta_R(x) (f(t, x) - f(t_0, x))) = x(f(t, x) - f(t_0, x))$  pour presque tout  $x$  dans  $\mathbb{R}^+$ , et une condition de domination est donnée par le lemme 5.1.10 :

$$\eta_R(x) (f(t, x) - f(t_0, x)) \leq |\eta_R(x) (f(t, x) - f(t_0, x))| \leq xf(t, x) + xf(t_0, x) \quad \forall R,$$

avec  $xf(t, x) + xf(t_0, x) \in L^1(\mathbb{R}^+)$ .

On a alors d'après le théorème de convergence dominée de Lebesgue :

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^\infty \eta_R(x) (f(t, x) - f(t_0, x)) dx = \int_0^\infty x(f(t, x) - f(t_0, x)) dx.$$

$$\text{D'où : } \left| \int_0^\infty x(f(t, x) - f(t_0, x)) dx \right| \leq C(T) \left( |t - t_0| + |t - t_0|^{\frac{1}{2}} \right),$$

on peut alors conclure à la continuité de  $\Gamma c$ .  $\square$

Dans le lemme suivant, on montre la convergence forte de la solution  $f^n$  vers  $f$  dans  $C^0([0, T]; H)$ .

**Lemme 6.1.14.** On suppose vérifiées les hypothèses (3.1.22)–(3.1.23).

Soit  $(c^n)$  une suite de  $\mathcal{C}$  telle que  $\lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{t \in [0, T]} |c_n(t) - c(t)| = 0$ , alors

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{0 \leq t \leq T} \int_0^\infty |f^n - f|^2 dx = 0.$$

**Preuve.** En soustrayant membre à membre les équations paraboliques (3.2.25) définissant  $f$  et  $f^n$ , on obtient :

$$\begin{aligned} & \left\langle \frac{\partial}{\partial t}(f^n - f)(t), g \right\rangle_{V' \times V} + \\ & \int_0^\infty \frac{\partial g(x)}{\partial x} \left( (kc^n - q)f^n - (kc - q)f - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} ((kc^n + q)f^n - (kc + q)f) \right) dx = 0. \end{aligned}$$

Pour presque tout  $t \in [0, T]$  :  $(f^n - f)(t) \in V$ .

On fixe  $t$ , on peut alors prendre pour fonction test  $g := (f^n - f)(t) \in V$  dans la formulation faible précédente, on obtient :

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial}{\partial t}(f^n - f)(t), (f^n - f)(t) \right\rangle_{V' \times V} &= \int_0^\infty (kc^n - q)(f^n - f) \frac{\partial}{\partial x}(f^n - f) dx \\ &+ \int_0^\infty kf(c^n - c) \frac{\partial}{\partial x}(f^n - f) dx \\ &- \frac{1}{2} \int_0^\infty (f^n - f) \frac{\partial}{\partial x}(f^n - f) \frac{\partial}{\partial x}(kc^n + q) dx \\ &- \frac{1}{2} \int_0^\infty (kc^n + q) \left| \frac{\partial}{\partial x}(f^n - f) \right|^2 dx \\ &- \frac{1}{2} \int_0^\infty (c^n - c) \frac{\partial}{\partial x}(kf) \frac{\partial}{\partial x}(f^n - f) dx. \end{aligned}$$

En vertu du lemme 3.1.3, l'équation précédente devient :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_0^\infty |f^n - f|^2 dx &= \int_0^\infty (kc^n - q)(f^n - f) \frac{\partial}{\partial x}(f^n - f) dx \\ &+ \int_0^\infty kf(c^n - c) \frac{\partial}{\partial x}(f^n - f) dx \\ &- \frac{1}{2} \int_0^\infty (f^n - f) \frac{\partial}{\partial x}(f^n - f) \frac{\partial}{\partial x}(kc^n + q) dx \\ &- \frac{1}{2} \int_0^\infty (kc^n + q) \left| \frac{\partial}{\partial x}(f^n - f) \right|^2 dx \\ &- \frac{1}{2} \int_0^\infty (c^n - c) \frac{\partial}{\partial x}(kf) \frac{\partial}{\partial x}(f^n - f) dx. \end{aligned}$$

On intègre sur  $(0, t)$  :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \int_0^\infty |f^n - f|^2 dx &= \frac{1}{2} \int_0^t \int_0^\infty (kc^n - q) \frac{\partial}{\partial x} |f^n - f|^2 dx d\tau \\ &+ \int_0^t \int_0^\infty (c^n - c) kf \frac{\partial}{\partial x} (f^n - f) dx d\tau \\ &- \frac{1}{4} \int_0^t \int_0^\infty \frac{\partial}{\partial x} (kc^n + q) \frac{\partial}{\partial x} |f^n - f|^2 dx d\tau \\ &- \frac{1}{2} \int_0^t \int_0^\infty (kc^n + q) \left| \frac{\partial}{\partial x} (f^n - f) \right|^2 dx d\tau \\ &- \frac{1}{2} \int_0^t \int_0^\infty (c^n - c) \frac{\partial}{\partial x} (kf) \frac{\partial}{\partial x} (f^n - f) dx d\tau. \end{aligned}$$

Après intégration par parties, l'égalité précédente se réécrit :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \int_0^\infty |f^n - f|^2 dx &= -\frac{1}{2} \int_0^t \int_0^\infty |f^n - f|^2 \frac{\partial}{\partial x} (kc^n - q) dx d\tau \\ &+ \int_0^t \int_0^\infty (c^n - c) kf \frac{\partial}{\partial x} (f^n - f) dx d\tau \\ &+ \frac{1}{4} \int_0^t \int_0^\infty \frac{\partial^2}{\partial x^2} (kc^n + q) |f^n - f|^2 dx d\tau \\ &- \frac{1}{2} \int_0^t \int_0^\infty (kc^n + q) \left| \frac{\partial}{\partial x} (f^n - f) \right|^2 dx d\tau \\ &- \frac{1}{2} \int_0^t \int_0^\infty (c^n - c) \left( k \frac{\partial f}{\partial x} + k' f \right) \frac{\partial}{\partial x} (f^n - f) dx d\tau. \end{aligned}$$

Les hypothèses (3.1.22), (3.1.23) et (3.3.26) et le lemme 4.1.6 permettent d'écrire la majoration suivante, après application de l'inégalité de Cauchy-Schwarz :

$$\int_0^\infty |f^n - f|^2 dx \leq C_1(T) \int_0^t \int_0^\infty |f^n - f|^2 dx d\tau + C_2(T) \sup_{t \in [0, T]} |c^n(t) - c(t)|.$$

En appliquant le lemme de Gronwall on obtient :

$$\int_0^\infty |f^n - f|^2 dx \leq C_2(T) \sup_{t \in [0, T]} |c^n(t) - c(t)| \exp(C_1(T)),$$

$$\text{d'où : } \int_0^\infty |f^n - f|^2 dx \leq C_3(T) \|c^n - c\|_X.$$

Les hypothèses sur la suite  $(c^n)$  permettent de conclure.  $\square$

**Proposition 6.1.5.** On suppose vérifiées les hypothèses (3.1.22)–(3.1.23) sur les coefficients cinétiques  $k$  et  $q$ , ainsi que l'hypothèse (3.3.26) sur les moments de la donnée initiale  $f_0$ . Alors l'application  $\Gamma$  est continue de  $\mathcal{C}$  dans lui-même :

Soit  $(c^n)_{n \in \mathbb{N}} \in \mathcal{C}$ , si  $\lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{t \in [0, T]} |c^n(t) - c(t)| = 0$  alors  $\lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{t \in [0, T]} |\Gamma c^n(t) - \Gamma c(t)| = 0$ .

**Preuve.** Dans toute la suite  $C(T)$  est une constante ne dépendant que de  $T$ .

Soit  $(c^n)_{n \in \mathbb{N}} \in \mathcal{C}$ , telle que  $\lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{t \in [0, T]} |c^n(t) - c(t)| = 0$ .

Désignons par  $f \in W$  la fonction associée à  $c$  en résolvant le problème (3.3.27)–(3.3.28), et par  $f^n$  la fonction associée à  $c^n$ .

Les expressions de  $I(t) = \int_0^\infty x f(t, x) dx$  et de  $I^n(t) = \int_0^\infty x f^n(t, x) dx$  sont données par l'expression (5.1.4) dans le lemme 5.1.10.

On a alors, pour tout instant  $t \in [0, T]$  :

$$\begin{aligned} |\Gamma c^n(t) - \Gamma c(t)| &= |\max(0, \rho - I^n(t)) - \max(0, \rho - I(t))| \\ &\leq |I^n(t) - I(t)| \\ &= |I(0) + \int_0^t \int_0^\infty (k(x)c^n(\tau) - q(x))f^n(\tau, x) dx d\tau \\ &\quad - I(0) - \int_0^t \int_0^\infty (k(x)c(\tau) - q(x))f(\tau, x) dx d\tau| \\ &\leq \left| \int_0^t \int_0^\infty (kc^n - q)(f^n - f) dx d\tau + k \int_0^t \int_0^\infty f(c^n - c) dx d\tau \right| \\ &\leq (\bar{k}\rho + \bar{q}) \int_0^t \int_0^\infty |f^n - f| dx d\tau + \bar{k} \sup_{t \in [0, T]} |c^n - c| \int_0^t \int_0^\infty f dx d\tau \end{aligned}$$

D'après le lemme 5.1.9 il vient, pour tout  $t \in [0, T]$  :

$$|\Gamma c^n(t) - \Gamma c(t)| \leq (\bar{k}\rho + \bar{q}) \int_0^t \int_0^\infty |f^n - f| dx d\tau + \bar{k}C(T)\|c^n - c\|_X.$$

$$\begin{aligned} \text{Or, } \int_0^t \int_0^\infty |f^n - f| dx d\tau &= \int_0^t \int_0^L |f^n - f| dx d\tau + \int_0^t \int_L^\infty |f^n - f| dx d\tau \\ &\leq \sqrt{t}\sqrt{L} \left( \int_0^t \int_0^L |f^n - f|^2 dx d\tau \right)^{\frac{1}{2}} + \frac{1}{L} \int_0^t \int_L^\infty x |f^n - f| dx d\tau \end{aligned}$$

D'après le lemme 5.1.10, on a  $\sup_{t \in [0, T]} \int_0^\infty x |f^n - f| dx \leq C(T)$ .

On a alors pour tout  $t \in [0, T]$  :

$$|\Gamma c^n(t) - \Gamma c(t)| \leq (\bar{k}\rho + \bar{q})\sqrt{L}C(T)\|c^n - c\|_X + \frac{1}{L}(\bar{k}\rho + \bar{q})C(T) + \bar{k}C(T)\|c^n - c\|_X.$$

Cette dernière majoration est obtenue grâce au lemme 6.1.14.

On a donc :  $\|\Gamma c^n - \Gamma c\|_X \leq \frac{1}{L}(\bar{k}\rho + \bar{q})C(T) + C(T)(\bar{k} + \sqrt{L})\|c^n - c\|_X$ .

En choisissant  $L$  puis  $n$ , on obtient la conclusion.  $\square$

**Lemme 6.1.15.**  $\Gamma\mathcal{C}$  est d'adhérence compacte.

**Preuve.** Nous allons montrer que la famille  $\mathcal{B} = \{\Gamma c; c \in \mathcal{C}\}$  est équibornée et équicontinue.

•  $\mathcal{C}$  est borné dans  $X$ , d'où  $\mathcal{B}$  est équibornée.

•  $\mathcal{B}$  est équicontinue par le lemme 6.1.13.

Par le théorème d'Ascoli,  $\overline{\Gamma\mathcal{C}}$  est compact : de toute suite  $(\Gamma c^n)_n \subset \mathcal{C}$  on peut extraire une sous-suite qui converge dans  $\Gamma\mathcal{C}$  pour la norme de la convergence uniforme.  $\square$

## 6.2 Existence pour le système de Lifshitz-Slyozov modifié

Dans la section précédente, on a montré l'existence d'au moins un point fixe  $\Gamma c(t) = c(t) = \max(0, \rho - I(t))$  pour le schéma itératif (3.3.27)–(3.3.28).

Nous allons montrer que ce point fixe est en fait une solution du système (3.1.16)–(3.1.17), c'est-à-dire que  $c(t) = \rho - I(t)$  ou encore que  $\rho \geq I(t) \quad \forall t \in [0, T]$ .

Nous avons montré au lemme 5.1.10 que  $I(t) \in W^{1,\infty}(0, T)$  et son expression est donnée par (5.1.4).

Soit  $G : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$  une fonction  $C^1$  avec :

$G(S) = 0$  pour  $S \leq \rho$  et  $G$  strictement croissante sur  $[\rho, +\infty[$ .

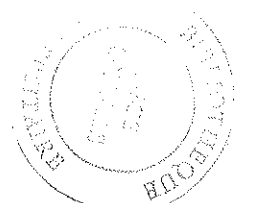
On a  $G(I(t)) \in W^{1,\infty}$  et dans les égalités suivantes les dérivées sont prises au sens des distributions :

$$\frac{d}{dt}G(I(t)) = G'(I(t)) \frac{dI(t)}{dt} = G'(I(t)) J(t) \quad p.p. \quad t \in [0, T],$$

$$\text{où } J(t) = \frac{dI(t)}{dt} = \int_0^\infty (k(x)c(t) - q(x))f(t, x) dx \quad p.p. \quad t \in [0, T].$$

• Si  $I(t) \leq \rho$  alors  $G'(I(t)) = 0$ , d'où :  $\frac{d}{dt}G(I(t)) = 0$  p.p. sur l'ensemble  $E = \{t \in [0, T]; I(t) \leq 0\}$ .

• Si  $I(t) > \rho$  alors



$$c(t) = \max(0, \rho - I(t)) = 0.$$

Donc sur l'ensemble  $[0, T] \setminus E$  :  $J(t) = - \int_0^\infty q(x) f(t, x) dx \leq 0$  p.p.  $t \in [0, T]$ ,

et donc  $\frac{d}{dt} G(I(t)) = G'(I(t)) J(t) \leq 0$  p.p.  $t \in [0, T]$ ,

ce qui implique que  $G(I)$  est décroissante sur  $[0, T]$ .

Or pour tout  $t \in [0, T]$   $G(I) \geq 0$  et  $G(I(0)) = 0$ ,

d'où  $G(I) \equiv 0$ .

On a alors le résultat :  $\forall t \in [0, T] \quad I(t) \leq \rho$ .

## Chapitre 7

### Unicité pour le système couplé

#### 7.1 Le théorème et le début de la preuve

**Théorème 7.1.6.** *Supposons vérifiées les hypothèses du théorème (3.3.4), et l'hypothèse supplémentaire :*

$$\int_0^\infty (1+x)^l f_0^2(x) dx < \infty \quad \text{pour tout les entier } l \quad 1 \leq l \leq s,$$

où  $s$  est un entier tel que  $s > 3$ .

*Alors la solution du problème couplé (3.1.16)–(3.1.21) est unique.*

*Dans tout ce qui suit, la notation  $C_s$  représentera une constante quelconque ne dépendant que de  $s$  et des quantités  $\|k\|_\infty$  et  $\|\frac{\partial k}{\partial x}\|_\infty$ .*

**Preuve.** On commencera par définir la fonction test  $\eta_{R,s}$  :

$$\eta_{R,s}(x) = \begin{cases} (1+x)^s & \text{pour } 0 \leq x \leq R, \\ -x + R + (1+R)^s & \text{pour } R \leq x \leq R + (1+R)^s, \\ 0 & \text{pour } x \geq R + (1+R)^s. \end{cases}$$

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

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

**Remarque 7.1.15.** *Dans la suite de la démonstration, on utilisera souvent les majorations suivantes sur  $\eta_{R,s}$  et  $\eta'_{R,s}$  :*

$$\forall x \in \mathbb{R}^+ \quad |\eta_{R,s}(x)| \leq (1+x)^s, \quad |\eta'_{R,s}(x)| \leq s(1+x)^s. \quad (7.1.1)$$

Afin de montrer l'unicité de la solution pour le système couplé (3.1.16)–(3.1.21), on suppose qu'il existe deux couples solutions  $(c_1, f_1)$  et  $(c_2, f_2)$  pour ce système :

$$\left\langle \frac{\partial f_i}{\partial t}(t), g \right\rangle_{V' \times V} + A_i(t; f_i(t), g) = 0, \quad \forall g \in V, \text{ p.p.t } t \in [0, T], \quad (7.1.2)$$

$$\text{où } A_i(t; f_i(t), g) = \int_0^\infty \frac{\partial g}{\partial x} \left( a_i f_i + \frac{\partial}{\partial x} (b_i f_i) \right) dx,$$

$$a_i(t, x) = -k(x)c_i(t) + q(x) \text{ et } b_i(t, x) = \frac{1}{2}(k(x)c_i(t) + q(x)).$$

On soustrait l'équation (7.1.2) pour  $i = 2$  de (7.1.2) pour  $i = 1$ , on obtient :

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial t} (f_2(t) - f_1(t)), g \right\rangle_{V' \times V} + A_2(t; f_2(t), g) - A_1(t; f_1(t), g) = 0 \quad \forall g \in V, \text{ p.p.t } t \in [0, T].$$

On pose  $w(t) = f_2(t) - f_1(t)$  et on fait apparaître la forme bilinéaire  $A_2(t; w(t), g)$  dans l'expression précédente :

$$\left\langle \frac{\partial w}{\partial t}(t), g \right\rangle_{V' \times V} + A_2(t; w(t), g) + A_2(t; f_1(t), g) - A_1(t; f_1(t), g) = 0 \quad \forall g \in V, \text{ p.p.t } t \in [0, T] \quad (7.1.3)$$

## 7.2 Quelques lemmes

Dans la suite de la démonstration, nous allons énoncer et démontrer 4 lemmes qui vont nous permettre de conclure à l'unicité de la solution pour le problème couplé.

**Lemme 7.2.16.** Posons  $w = f_2 - f_1 \in W$ . On a alors  $\forall g \in V, \text{ p.p.t } t \in [0, T]$

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial w}{\partial t}(t), g \right\rangle_{V' \times V} + A_2(t; w(t), g) \\ + (c_1(t) - c_2(t)) \int_0^\infty \left( k(x)f_1(t, x) - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} (k(x)f_1(t, x)) \right) \frac{\partial g}{\partial x} dx = 0. \end{aligned}$$

**Preuve.** On réécrit (7.1.3) :

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial w}{\partial t}(t), g \right\rangle_{V' \times V} + A_2(t; w(t), g) + \int_0^\infty \left( a_2 f_1 + \frac{\partial}{\partial x} (b_2 f_1) \right) \frac{\partial g}{\partial x} dx \\ - \int_0^\infty \left( a_1 f_1 + \frac{\partial}{\partial x} (b_1 f_1) \right) \frac{\partial g}{\partial x} dx = 0. \end{aligned}$$

D'où :

$$\left\langle \frac{\partial w}{\partial t}(t), g \right\rangle_{V' \times V} + A_2(t; w(t), g) + \int_0^\infty \left( f_1(a_2 - a_1) + \frac{\partial}{\partial x} (f_1(b_2 - b_1)) \right) \frac{\partial g}{\partial x} dx = 0.$$

## 7.2. QUELQUES LEMMES

En remplaçant  $a_i$  et  $b_i$ ,  $i = 1, 2$ , par leur expression dans l'expression précédente, on obtient :

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial w}{\partial t}(t), g \right\rangle_{V' \times V} + A_2(t; w(t), g) \\ + \int_0^\infty \left( (c_1 - c_2)k(x)f_1(t, x) + \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{2}k(x)(c_2 - c_1)f_1(t, x) \right) \right) \frac{\partial g}{\partial x} dx = 0, \end{aligned}$$

d'où le résultat du lemme.  $\square$

**Lemme 7.2.17.** Soient  $(c_1, f_1)$ ,  $(c_2, f_2)$  deux couples solution du problème (3.1.16)–(3.1.20), alors on a pour tout  $t \in [0, T]$  :

$$|c_1(t) - c_2(t)| \leq C_s \left( \int_0^\infty (1+x)^s (f_2(t, x) - f_1(t, x))^2 dx \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (7.2.4)$$

où  $C_s$  est une constante ne dépendant que de l'entier  $s$ , avec  $s > 3$ .

**Preuve.**

Pour tout  $t \in [0, T]$  on a :  $c_1(t) - c_2(t) = \int_0^\infty x(f_2(t, x) - f_1(t, x)) dx$ ,

$$\text{d'où : } |c_1(t) - c_2(t)| = \left| \int_0^\infty \frac{x}{(1+x)^{\frac{s}{2}}} (1+x)^{\frac{s}{2}} w(t, x) dx \right|.$$

On applique l'inégalité de Cauchy-Schwarz à l'expression précédente et il vient :

$$|c_1(t) - c_2(t)| \leq \left( \int_0^\infty \frac{x^2}{(1+x)^s} dx \right)^{\frac{1}{2}} \left( \int_0^\infty (1+x)^s w^2(t, x) dx \right)^{\frac{1}{2}},$$

d'où le résultat du lemme.  $\square$

**Remarque 7.2.16.** Sous les hypothèses du théorème 7.1.6, le majorant de (7.2.4) est fini en vertu du lemme 5.2.12.

**Lemme 7.2.18.** Soient  $u \in W$  et  $v$  dans  $V$ , alors pour tout  $t \in [0, T]$  :

$$|A_2(t; u(t), \eta_{R,s} v) - A_1(t; u(t), \eta_{R,s} v)| \leq C_s |c_1(t) - c_2(t)| \|u(t)\|_{H_s^1} \|v\|_{H_s^1},$$

$$\text{où } C_s = s \left( \|k\|_{L^\infty(\mathbb{R}^+)} + \left\| \frac{\partial k}{\partial x} \right\|_{L^\infty(\mathbb{R}^+)} \right).$$

**Preuve.** On a :

$$\begin{aligned} A_2(t; u(t), \eta_{R,s}v) - A_1(t; u(t), \eta_{R,s}v) \\ = (c_1(t) - c_2(t)) \int_0^\infty \left( k(x)u(t, x) - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x} (k(x)u(t, x)) \right) \frac{\partial \eta_{R,s}v}{\partial x} dx \\ = (c_1(t) - c_2(t)) \int_0^\infty \left( \left( k - \frac{1}{2} \frac{\partial k}{\partial x} \right) u - \frac{1}{2} k \frac{\partial u}{\partial x} \right) (\eta'_{R,s}(x)v(x) + \eta_{R,s}(x)v'(x)) dx. \end{aligned}$$

En utilisant les majorations données en (7.1.1), on obtient :

$$|A_2(t; u(t), \eta_{R,s}v) - A_1(t; u(t), \eta_{R,s}v)| \leq C_s |c_1(t) - c_2(t)| \int_0^\infty \left( |u| + \left| \frac{\partial u}{\partial x} \right| \right) (1+x)^s \left( |v| + \left| \frac{\partial v}{\partial x} \right| \right) dx,$$

$$\text{où } C_s = s \left( \|k\|_{L^\infty(\mathbb{R}^+)} + \left\| \frac{\partial k}{\partial x} \right\|_{L^\infty(\mathbb{R}^+)} \right).$$

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

$$\begin{aligned} |A_2(t; u(t), \eta_{R,s}v) - A_1(t; u(t), \eta_{R,s}v)| \\ \leq C_s |c_1(t) - c_2(t)| \left( \int_0^\infty \left( |u| + \left| \frac{\partial u}{\partial x} \right| \right)^2 (1+x)^s dx \right)^{\frac{1}{2}} \left( \int_0^\infty \left( |v| + \left| \frac{\partial v}{\partial x} \right| \right)^2 (1+x)^s dx \right)^{\frac{1}{2}} \\ \leq C_s |c_1(t) - c_2(t)| \left( \int_0^\infty \left( |u|^2 + \left| \frac{\partial u}{\partial x} \right|^2 \right) (1+x)^s dx \right)^{\frac{1}{2}} \left( \int_0^\infty \left( |v|^2 + \left| \frac{\partial v}{\partial x} \right|^2 \right) (1+x)^s dx \right)^{\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

d'où le résultat du lemme 7.2.18.  $\square$

**Lemme 7.2.19.**  $\forall v \in V, \text{ p.p.t } t \in [0, T] :$

$$A(t; v, \eta_{R,s}v) \geq -(r+b^*s) \int_0^\infty (1+x)^s \left| v \frac{\partial v}{\partial x} \right| dx - rs \int_0^\infty |v|^2 (1+x)^s dx + b_* \int_0^\infty \eta_{R,s} \left| \frac{\partial v}{\partial x} \right|^2 dx,$$

où  $r, b_*, b^*$  sont définis dans (4.0.5).

**Preuve.** Soit  $v \in V$ , alors p.p.t  $t \in [0, T]$  on a :

$$\begin{aligned} A(t; v, \eta_{R,s}v) &= \int_0^\infty \left( av + \frac{\partial}{\partial x} (bv) \right) \frac{\partial}{\partial x} (\eta_{R,s}v) dx \\ &= \int_0^\infty \left( ev + b \frac{\partial v}{\partial x} \right) \left( \eta'_{R,s}v + \eta_{R,s} \frac{\partial v}{\partial x} \right) dx \\ &= A(t; v, \eta_{R,s}v) = \int_0^\infty \left( e\eta'_{R,s}|v|^2 + (e\eta_{R,s} + b\eta'_{R,s})v \frac{\partial v}{\partial x} + b\eta_{R,s} \left| \frac{\partial v}{\partial x} \right|^2 \right) dx. \end{aligned}$$

En utilisant les majorations (7.1.1) et (4.0.5), on obtient la minoration suivante :

$$A(t; v, \eta_{R,s}v) \geq -rs \int_0^\infty (1+x)^s |v|^2 dx - (r+b^*s) \int_0^\infty (1+x)^s \left| v \frac{\partial v}{\partial x} \right| dx + b_* \int_0^\infty \left| \frac{\partial v}{\partial x} \right|^2 \eta_{R,s} dx.$$

$\square$

### 7.3 Fin de la preuve

Afin d'achever la démonstration du théorème 7.1.6, on revient à l'expression (7.1.3).

Pour presque tout  $t \in [0, T]$ , on a  $\eta_{R,s}w(t) \in V$ . On peut alors poser  $g := \eta_{R,s}w(t) \in V$  dans (7.1.3), il vient :

$$\begin{aligned} < \frac{\partial w}{\partial t}(t), \eta_{R,s}w(t) >_{V' \times V} + A_2(t; w(t), \eta_{R,s}w(t)) + A_2(t; f_1(t), \eta_{R,s}w(t)) \\ &\quad - A_1(t; f_1(t), \eta_{R,s}w(t)). \end{aligned}$$

En appliquant le lemme 3.1.3 à l'expression précédente, on obtient p.p.t  $t \in [0, T] :$

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} (w(t), \eta_{R,s}w(t))_H + A_2(t; w(t), \eta_{R,s}w(t)) + A_2(t; f_1(t), \eta_{R,s}w(t)) - A_1(t; f_1(t), \eta_{R,s}w(t)) = 0. \quad (7.3.5)$$

En appliquant le lemme 7.2.18 à l'égalité précédente on obtient :

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} (w(t), \eta_{R,s}w(t))_H + A_2(t; w(t), \eta_{R,s}w(t)) \leq C_s |c_1(t) - c_2(t)| \|f_1(t)\|_{H_s^1} \|w(t)\|_{H_s^1}.$$

Le lemme 7.2.17 permet d'écrire :

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} (w(t), \eta_{R,s}w(t))_H + A_2(t; w(t), \eta_{R,s}w(t)) \leq C_s \|w(t)\|_{L_s^2} \|f_1(t)\|_{H_s^1} \|w(t)\|_{H_s^1}.$$

On applique le lemme 7.2.19 avec  $v := w(t) \in V, t$  fixé :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_0^\infty \eta_{R,s}(x) |w(t, x)|^2 dx &\leq (r+b^*s) \int_0^\infty (1+x)^s \left| w \frac{\partial w}{\partial x} \right| dx + rs \int_0^\infty |w|^2 (1+x)^s dx \\ &\quad - b_* \int_0^\infty \eta_{R,s} \left| \frac{\partial w}{\partial x} \right|^2 dx + C_s \|w(t)\|_{L_s^2} \|f_1(t)\|_{H_s^1} \|w(t)\|_{H_s^1}. \end{aligned}$$

En appliquant l'inégalité de Young au premier et au dernier terme du membre de droite, il vient :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_0^\infty \eta_{R,s}(x) |w(t, x)|^2 dx &\leq \frac{(r+b^*s)}{\varepsilon} \int_0^\infty (1+x)^s |w|^2 dx + \varepsilon (r+b^*s) \int_0^\infty (1+x)^s \left| \frac{\partial w}{\partial x} \right|^2 dx \\ &\quad + rs \int_0^\infty |w|^2 (1+x)^s dx - b_* \int_0^\infty \eta_{R,s} \left| \frac{\partial w}{\partial x} \right|^2 dx \end{aligned}$$



$$+ \delta C_s \|w(t)\|_{H_s^1}^2 + \frac{C_s}{\delta} \|f_1(t)\|_{H_s^1}^2 \|w(t)\|_{L_s^2}^2.$$

Cette majoration se réécrit :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_0^\infty \eta_{R,s}(x) |w(t, x)|^2 dx + b_* \int_0^\infty \eta_{R,s} \left| \frac{\partial w}{\partial x} \right|^2 dx - (\varepsilon(r + b^*s) + \delta C_s) \|w(t)\|_{H_s^1}^2 \\ & \leq \left( \frac{(r + b^*s)}{\varepsilon} + rs + \frac{C_s}{\delta} \|f_1(t)\|_{H_s^1}^2 \right) \|w(t)\|_{L_s^2}^2. \end{aligned}$$

On intègre l'inégalité précédente sur  $[0, t]$  et on obtient :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \int_0^\infty \eta_{R,s}(x) |w(t, x)|^2 dx + b_* \int_0^t \int_0^\infty \eta_{R,s} \left| \frac{\partial w}{\partial x}(\tau, x) \right|^2 dx d\tau \\ & - (\varepsilon(r + b^*s) + \delta C_s) \int_0^t \|w(\tau)\|_{H_s^1}^2 d\tau \\ & \leq \int_0^t \left( \frac{(r + b^*s)}{\varepsilon} + rs + \frac{C_s}{\delta} \|f_1(\tau)\|_{H_s^1}^2 \right) \|w(\tau)\|_{L_s^2}^2 d\tau. \end{aligned}$$

Le lemme 5.2.12 permet d'appliquer le théorème de convergence dominée de Lebesgue et de passer à la limite lorsque  $R \rightarrow +\infty$ ; on obtient la majoration suivante :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \|w(t)\|_{L_s^2}^2 + b_* \int_0^t \int_0^\infty (1+x)^s \left| \frac{\partial w}{\partial x}(\tau, x) \right|^2 dx d\tau - (\varepsilon(r + b^*s) + \delta C_s) \int_0^t \|w(\tau)\|_{H_s^1}^2 d\tau \leq \\ & \int_0^t \left( \frac{(r + b^*s)}{\varepsilon} + rs + \frac{C_s}{\delta} \|f_1(\tau)\|_{H_s^1}^2 \right) \|w(\tau)\|_{L_s^2}^2 d\tau. \end{aligned}$$

On a alors :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \|w(t)\|_{L_s^2}^2 + (b_* - \varepsilon(r + b^*s) - \delta C_s) \int_0^t \|w(\tau)\|_{H_s^1}^2 d\tau \\ & \leq \int_0^t \left( \frac{(r + b^*s)}{\varepsilon} + rs + \frac{C_s}{\delta} \|f_1(\tau)\|_{H_s^1}^2 + b_* \right) \|w(\tau)\|_{L_s^2}^2 d\tau. \end{aligned}$$

On pose :

$$C_{1s} = b_* - \varepsilon(r + b^*s) - \delta C_s \geq 0, \quad C_{2s} = \frac{(r + b^*s)}{\varepsilon} + rs + b_*, \quad C_{3s} = \frac{C_s}{\delta}.$$

Ces constantes sont positives, moyennant un choix approprié de  $\varepsilon$  et  $\delta$ .

On obtient :

$$\frac{1}{2} \|w(t)\|_{L_s^2}^2 + C_{1s} \int_0^t \|w(\tau)\|_{H_s^1}^2 d\tau \leq \int_0^t (C_{2s} + C_{3s} \|f_1(\tau)\|_{H_s^1}^2) \|w(\tau)\|_{L_s^2}^2 d\tau. \quad (7.3.6)$$

La majoration (7.3.6) se réécrit :

$$\frac{1}{2} \|w(t)\|_{L_s^2}^2 \leq \int_0^t (C_{2s} + C_{3s} \|f_1(\tau)\|_{H_s^1}^2) \|w(\tau)\|_{L_s^2}^2 d\tau.$$

L'unicité provient immédiatement en appliquant le lemme de Gronwall à l'inégalité :

$$y'(t) \leq 2(C_{2s} + C_{3s} \|f_1(t)\|_{H_s^1}^2) y(t), \quad \text{avec} \quad y(t) = \int_0^t (C_{2s} + C_{3s} \|f_1(\tau)\|_{H_s^1}^2) \|w(\tau)\|_{L_s^2}^2 d\tau.$$

## Chapitre 8

### Numérique : le système de Becker–Döring

#### 8.1 Introduction

Dans le chapitre 1, on a présenté des éléments de théorie sur le système de Becker–Döring (1.2.7)–(1.2.9). Dans [4], on trouve des théorèmes d'existence, d'unicité et de comportement asymptotique de la solution.

On rappelle que ce système est constitué d'une infinité d'équations différentielles ordinaires du premier ordre en temps dont les inconnues sont les  $c_i$ .

Pour résoudre numériquement ce système, il faut considérer une approximation finie des équations de Becker–Döring. On suppose qu'à chaque instant, les clusters de plus grande taille en présence dans le système sont de taille  $L$ ,  $L \in \mathbb{N}^*$ . On obtient un système tronqué de  $L$  équations différentielles pour les  $L$  variables  $c_1, c_2, \dots, c_L$  :

$$\frac{dc_1}{dt} = -J_1(c) - \sum_{i=1}^{L-1} J_i(c), \quad (8.1.1)$$

$$\frac{dc_i}{dt} = J_{i-1}(c) - J_i(c), \quad 2 \leq i \leq L, \quad (8.1.2)$$

$$\frac{dc_L}{dt} = J_{L-1}(c), \quad (8.1.3)$$

où les flux  $J_i$ ,  $1 \leq i \leq L-1$  sont définis comme dans (1.2.9) :

$$J_i = k_i c_i c_1 - g_{i+1} c_{i+1}, \quad 1 \leq i \leq L-1. \quad (8.1.4)$$

La solution  $c$  est le vecteur des concentrations de tailles  $1 \leq i \leq L$  :

$${}^t c(t) = (c_1(t) \ c_2(t) \ \cdots \ c_L(t)).$$

La densité de ce système fini est constante au cours du temps [4] :

$$\rho(L) = \sum_{i=1}^L i c_i(t) = \sum_{i=1}^L i c_i(0). \quad (8.1.5)$$

On note que la condition  $J_L(c) = 0$  est celle qui permet de tronquer le système de Becker-Döring.

## 8.2 Les équilibres en détail

A l'équilibre, pour le système fini (8.1.1)–(8.1.4), comme pour le cas de dimension infinie (1.2.7)–(1.2.9) on a  $J_i = 0$  pour  $1 \leq i \leq L$ , et les solutions d'équilibres en détail  $m_{(L)} = (m_{i,(L)})_{i=1,L}$  sont paramétrés par la concentration d'équilibre des monomères  $\bar{c}_{(L)}$  :

$$m_{i,(L)} = Q_i(\bar{c}_{(L)})^i \quad i = 1, L, \quad (8.2.6)$$

avec  $Q_i$  défini comme en (1.3.26) :

$$Q_1 = 1, \quad Q_i = \prod_{r=2}^i \left( \frac{k_{r-1}}{q_r} \right) \quad 2 \leq i \leq L. \quad (8.2.7)$$

Dans la suite on utilisera la notation :

$$\rho_L(x) := \sum_{i=1}^L i Q_i x^i.$$

Notons que à  $L$  fixé, cette quantité est une fonction croissante de  $x$ .

La densité d'une telle solution d'équilibre en détail est donnée par :

$$\rho = \rho_L(\bar{c}_{(L)}), \quad (8.2.8)$$

et cette quantité est finie pour tout  $L$  et  $\bar{c}_{(L)}$  finis.

Pour une densité  $\rho$  et une taille maximale  $L$  données, la solution d'équilibre en détail  $m_{(L)}$  pour le système tronqué est unique.

De même, pour une densité  $\rho$  donnée, le système infini de Becker-Döring possède une unique solution d'équilibre en détail  $m$  [4].

Il faut noter que généralement, pour une même densité  $\rho$ , ces deux systèmes ne tendent pas dans  $Y = \{y = (y_i) : \sup_{t \in [0, T]} \sum_{i=1}^{\infty} i |y_i(t)| < \infty\}$ , vers la même solution lorsque  $t \rightarrow \infty$ .

Sous des hypothèses techniques sur les coefficients cinétiques  $k_i$  et  $q_i$ , il est démontré dans [4] (théorème 3.9) que pour une même densité, la solution du système tronqué  $c_{(L)}$  avec une taille maximale  $L$  assez grande, converge dans  $Y$  vers la solution  $c_{(\infty)}$  du système infini.

Autrement dit :

## 8.3 LE SCHÉMA NUMÉRIQUE

$$\forall \varepsilon > 0, \forall T \in [0, \infty), \exists L_0 \in \mathbb{N} / \forall L \geq L_0, \forall t \in [0, T] : \sum_{i=1}^{\infty} i |c_{i,(L)}(t) - c_{i,(\infty)}(t)| \leq \varepsilon.$$

Les parenthèses en indice dans les expressions précédentes définissent la taille du système.

On en déduit alors que pour une taille  $L$  assez grande, le système tronqué est une bonne approximation du système infini.

## 8.3 Le schéma numérique

On s'intéresse à la résolution numérique des équations de Becker-Döring.

Le choix du schéma numérique pour le système tronqué (8.1.1)–(8.1.4) va se baser sur une étude des propriétés de la solution d'un tel système.

On commencera donc par énumérer les conditions sur le schéma pour que la solution obtenue par cette approximation numérique soit raisonnable en un sens que l'on va définir. Pour cela on souhaite obtenir un schéma :

1. qui conserve la densité,
2. qui utilise des pas de temps petits lorsque la solution évolue rapidement, et admet de grandes valeurs pour le pas de temps afin de passer à travers les longues périodes de métastabilité,
3. qui soit capable de résoudre des systèmes (8.1.1)–(8.1.4) de grande taille  $L$  afin d'approcher au mieux le système de taille infinie (1.2.7)–(1.2.9),
4. qui soit entropique.

On considère la première condition. On note que pour le système de Becker-Döring, la densité  $\rho$  est conservée au cours du temps [4].

Cependant, en résolvant le système (8.1.1)–(8.1.4) par une discrétisation de type Runge-Kutta, la densité  $\rho$  peut s'éloigner de manière significative de la densité initiale  $\rho_0$  au cours de l'évolution de la solution, cela pour des raisons d'erreurs d'arrondi, et aucun mécanisme ne permet de garder cette quantité constante [10].

On peut éviter ce problème en réécrivant le système (8.1.1)–(8.1.4) en incluant explicitement l'équation pour la conservation de la densité, en éliminant l'équation pour  $\frac{dc_1}{dt}$ . Pour cela, on effectue un calcul formel semblable à celui donné dans le paragraphe 1.2.1. On obtient le nouveau système tronqué :

$$\rho = \sum_{i=1}^L i c_i(t) \quad (8.3.9)$$

$$\frac{dc_i}{dt} = J_{i-1}(c) - J_i(c), \quad 2 \leq i \leq L-1, \quad (8.3.10)$$

$$\frac{dc_L}{dt} = J_{L-1}(c). \quad (8.3.11)$$

Le système (8.3.9)–(8.3.11) est alors formé de  $(L - 1)$  équations différentielles ordinaires couplées avec une contrainte algébrique.

Les méthodes standard de résolution d'équations différentielles ordinaires peuvent être appliquées à une formulation explicite du système (8.3.9)–(8.3.11) plutôt qu'au système (8.1.1)–(8.1.4) [7].

Afin de réaliser la seconde condition, nous avons choisi d'implémenter une méthode de résolution implicite, ces schémas étant stables et par ce fait les plus adaptés aux problèmes raides. Ils permettent l'utilisation de pas de temps petits dans les régions où la solution évolue rapidement, et grands lorsque la solution évolue peu au cours du temps, ces pas de temps étant contrôlés par une estimation locale de l'erreur [28].

Le schéma implicite utilisé requiert la résolution d'un système d'équations algébriques pour passer d'un temps à un autre; ceci peut être coûteux d'un point de vue numérique. Ces points sont discutés dans le paragraphe 8.4.

Résoudre des systèmes de grande taille avec un schéma implicite de résolution numérique d'E.D.O. implique qu'un temps de calcul considérable et beaucoup de place en mémoire seront nécessaires. Ceci peut être en partie évité si l'on tient compte de la structure particulière de la matrice jacobienne du système (8.3.9)–(8.3.11), ce point sera traité au paragraphe 8.4.

Dans la dernière étape, il s'agit de montrer que l'entropie du système tronqué de Becker-Döring (8.1.1)–(8.1.4) décroît au cours du temps, et que ce résultat est aussi vrai pour l'entropie discrète du schéma implicite. La décroissance de l'entropie au cours du temps permettant de décrire le comportement asymptotique de la solution, des détails sont donnés dans le paragraphe 8.5.

## 8.4 Méthode implicite

Pour résoudre numériquement le système tronqué de Becker-Döring (8.3.9)–(8.3.11), on discrétise ce système en utilisant le schéma d'Euler implicite.

Soient  $c_i^k$  l'approximation de la concentration  $c_i$  en clusters de taille  $i$ , au  $k^{\text{ième}}$  itéré en temps  $t^k$ , et  $J_i^k$  le flux donné par (8.1.4) au temps  $t^k$ .

Si on se donne la solution approchée au temps  $t^k$  et le pas de temps  $h^{k+1} = t^{k+1} - t^k$ , on obtient l'approximation de la solution  $c_i^{k+1}$   $i = 1, L$  au temps suivant  $t^{k+1}$  :

$$c_1^{k+1} = \rho - \sum_{i=2}^L i c_i^{k+1} \quad (8.4.12)$$

$$c_i^{k+1} = c_i^k + h^{k+1}(J_{i-1}^{k+1} - J_i^{k+1}), \quad 2 \leq i \leq L-1, \quad (8.4.13)$$

$$c_L^{k+1} = c_L^k + h^{k+1} J_{L-1}^{k+1}. \quad (8.4.14)$$

## 8.4. MÉTHODE IMPLICITE

En regroupant tous les termes de (8.4.12)–(8.4.14) dans le membre de gauche, on est ramené à résoudre à chaque pas de temps un problème du type :

$$F(c^{k+1}) = \begin{pmatrix} \left( \sum_{i=1}^L i c_i^{k+1} \right) - \rho \\ \vdots \\ c_i^{k+1} - c_i^k - h^{k+1}(J_{i-1}^{k+1} - J_i^{k+1}) \\ \vdots \\ c_L^{k+1} - c_L^k - h^{k+1} J_{L-1}^{k+1} \end{pmatrix} = 0, \quad (8.4.15)$$

où

$$c^{k+1} = \begin{pmatrix} c_1^{k+1} \\ c_2^{k+1} \\ \vdots \\ c_L^{k+1} \end{pmatrix}.$$

L'équation non linéaire (8.4.15) peut être résolue pour  $c^{k+1}$  en utilisant la méthode standard de Newton-Raphson.

### 8.4.1 Méthode de Newton-Raphson

On cherche à résoudre un système du type :  $F(c^{k+1}) = 0$ .

Rappelons le principe de la méthode de Newton-Raphson :

– Soit  $F : \Omega \subset \mathbb{R}^L \rightarrow \mathbb{R}^L$  une fonction de classe  $C^2$ .

On note  ${}^t F(c) = (F_1(c) \ F_2(c) \ \cdots \ F_L(c))$ ,  ${}^t c(t) = (c_1(t) \ c_2(t) \ \cdots \ c_L(t))$ .

– On suppose qu'il existe  $c^* \in \mathbb{R}^L$  tel que  $F(c^*) = 0$ .

– On suppose aussi que dans un voisinage de  $c^*$  la matrice jacobienne  $dF$  de  $F$  en  $c$  est inversible.

Soit  $c^{(s)}$  le  $s^{\text{ième}}$  itéré de Newton approchant  $c^*$ .

– On initialise avec  $c^{(s=0)} = c^k$ .

– On itère le processus  $c^{(s+1)} = c^{(s)} + \delta^{(s+1)}$ , où  $\delta^{(s+1)}$  est la solution de  $dF(c^{(s)}) \cdot \delta c^{(s+1)} = -F(c^{(s)})$ .

– Si  $\delta^{(s+1)}$  est assez petit, alors les itérés de Newton convergent vers la solution  $c^{k+1}$  de  $F(c^{k+1}) = 0$ .

– Si le processus diverge alors on réduit le pas de temps.

En choisissant un pas de temps suffisamment petit, sous les hypothèses citées précédemment, les itérés  $c^{(s)}$  de Newton-Raphson convergent vers la solution  $c^{k+1}$ , racine de  $F(c^{k+1}) = 0$ . De plus si  $c^{(s=0)} = c^k$  est assez proche de la solution  $c^*$ , alors la méthode converge de manière quadratique :  $\|c^{(s+1)} - c^*\| \leq Cte \|c^{(s)} - c^*\|^2$ .

### 8.4.2 Contrôle du pas de temps

On s'intéresse à des problèmes à la fois raides et à évolution très lente dans certaines régions.

Un petit pas de temps est nécessaire pour que la méthode de Newton-Raphson converge lorsque la solution varie très rapidement au cours du temps, cependant l'utilisation d'un pas de temps constant ne permet pas d'observer numériquement la métastabilité ni le comportement de la solution pour les grands temps.

On a donc utilisé la méthode de Newton-Raphson avec un pas de temps variable. Pour cela, nous nous sommes inspirés de l'algorithme à pas de temps variable de par *J. Carr, D.B. Duncan et C.H. Walshaw* dans [10], que l'on détail maintenant :

Le pas de temps est contrôlé en calculant l'erreur de troncature locale (ETL) pour le schéma d'Euler implicite.

Pour  $1 \leq i \leq L$ , on a :

$$c_i(t^k + h^{k+1}) = c_i(t^k) + h^{k+1} \frac{\partial c_i(t^k)}{\partial t} + \underbrace{\frac{(h^{k+1})^2}{2} \frac{\partial^2 c_i(t^k)}{\partial t^2}}_{\text{Erreur de troncature}} + o((h^{k+1})^2).$$

L'erreur de troncature locale estimée  $(ETL)_{est}$  se réécrit :

$$(ETL)_{est}(c_i) = \frac{h^{k+1}}{2} \left( \frac{c_i^{k+1} - c_i^k}{h^{k+1}} - \frac{c_i^k - c_i^{k-1}}{h^k} \right). \quad (8.4.16)$$

Cette expression peut encore s'écrire :

$$(ETL)_{est}(c_i) = \frac{h^{k+1}}{2} \left( \frac{\Delta_i^{k+1}}{h^{k+1}} - \frac{\Delta_i^k}{h^k} \right), \quad (8.4.17)$$

$$\text{en posant } \Delta_i^{k+1} = c_i^{k+1} - c_i^k. \quad (8.4.18)$$

Dans la suite on notera :

$$\Delta^k = \begin{pmatrix} \Delta_1^k & \Delta_2^k & \cdots & \Delta_L^k \end{pmatrix}, \quad \text{avec } \Delta^0 = \underline{0}.$$

Donnons maintenant la description de l'algorithme :

- On initialise les itérations de Newton avec :  $c^{(0)} = c^k$ ,  $\Delta^{(0)} = \underline{0}$ ,

### 8.4. MÉTHODE IMPLICITE

- on écrit les itérations de Newton :

$$\left[ \frac{\partial F(c^{(s)})}{\partial c} \right] \delta^{(s+1)} = -F(c^{(s)}) \quad (8.4.19)$$

où  $\delta^{(s+1)} = c^{(s+1)} - c^{(s)}$  et  $c^{(s)}$  représente le  $s^{ieme}$  itéré de Newton approchant  $c^{k+1}$ .

- La résolution du système linéaire (8.4.19) nous permet de calculer :

$$\Delta^{(s+1)} = \Delta^{(s)} + \delta^{(s+1)} \quad (8.4.20)$$

$$c^{(s+1)} = c^k + \Delta^{(s+1)}. \quad (8.4.21)$$

- Les itérations de Newton sont stoppées lorsque  $\delta^{(s+1)}$  est assez petit, on pose alors  $M = s + 1$  et on passe à l'étape en temps suivante :

$$\Delta^{k+1} = \Delta^{(M)}, \quad (8.4.22)$$

$$c^{k+1} = c^k + \Delta^{k+1}, \quad (8.4.23)$$

$$(ETL)_{est} = \sup_{1 \leq i \leq L} ((ELT)_{est}(c_i)). \quad (8.4.24)$$

Le nouveau pas de temps  $h^{k+1}$  peut alors être généré :  
Soit  $TOL$  la tolérance sur l'erreur.

- Si  $(ETL)_{est} \leq TOL$  alors
  - $h^k := h^{k+1}$ ,
  - $h^{k+1} := \min(0.9 h^k \sqrt{TOL/(ETL)_{est}}, 10 h^k)$ ,
  - $t^{k+1} = t^k + h^{k+1}$ .

On passe à l'itération en temps suivante avec un pas de temps  $h^{k+1}$  généralement plus grand que le précédent.

- Si  $(ETL)_{est} > TOL$  alors
  - $h^{k+1} = \max(0.9 h^{k+1} \sqrt{TOL/(ETL)_{est}}, \frac{h^{k+1}}{10})$ ,

et on recommence les itérations de Newton précédentes avec un pas de temps  $h^{k+1}$  plus petit.

Ces choix garantissent que si l'erreur de troncature locale estimée est suffisamment petite, le pas de temps peut être augmenté pour l'itération en temps suivante, sinon on retourne aux itérations de Newton avec un pas de temps inférieur.

Les erreurs d'arrondi lors du calcul de  $\Delta^{k+1}$  sont de l'ordre de  $\varepsilon \Delta^{k+1}$ , où  $\varepsilon$  est la précision machine. Si au contraire on soustrayait  $c^k$  de  $c^{k+1}$ , l'erreur serait de l'ordre de  $\varepsilon c^{k+1}$ . Or si la solution évolue lentement,  $\Delta^{k+1}$  est inférieur à  $c^{k+1}$  et donc l'expression (8.4.17) est plus précise que (8.4.16). Lorsque la solution change de manière significative, les erreurs d'arrondi sont du même ordre de grandeur et les deux formulations peuvent être utilisées.

### 8.4.3 Retour au problème particulier de Becker-Döring

La résolution des systèmes linéaires issus des itérations de Newton (8.4.19) pour  $\delta^{(s+1)}$  décrites ci-dessus, consomme la majeure partie du temps de calcul pour l'approximation de Becker-Döring. On peut réduire ce temps de manière significative en remarquant que la matrice jacobienne  $\frac{\partial F}{\partial c}$  est en partie tridiagonale.

On réécrit (8.4.19) sous la forme suivante :

$$\begin{pmatrix} 1 & e^t \\ d^{(s)} & T^{(s)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta_1^{(s+1)} \\ \hat{\delta}^{(s+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho - \sum_{i=1}^L i c_i^{(s)} \\ \hat{F}(c^{(s)}) \end{pmatrix} \quad (8.4.25)$$

où  $\hat{\delta}$  et  $\hat{F}$  contiennent respectivement les  $(L-1)$  dernières composantes de  $\delta$  et  $F$ . La matrice  $T^{(s)}$  est de taille  $(L-1) \times (L-1)$ , tridiagonale, de la forme :

$$T^{(s)} = I + h^{k+1} A + h^{k+1} c_1^{(s)} B, \quad (8.4.26)$$

$e^t$  est un vecteur ligne de taille  $(L-1)$ , et  $d^{(s)}$  est un vecteur colonne de taille  $(L-1)$ .

On a posé ici :

$$A = \begin{pmatrix} k_2 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ -k_2 & k_3 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & -k_3 & k_4 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & -k_4 & k_5 & \ddots & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & 0 & \ddots & -k_{L-2} & k_{L-1} & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & -k_{L-1} & 0 \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} q_2 & -q_3 & 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & q_3 & -q_4 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & q_4 & -q_5 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & q_5 & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & 0 & \ddots & 0 & q_{L-1} & -q_L \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 & q_L \end{pmatrix}$$

$$e^t = (2 \ 3 \ \cdots \ L), \quad d^{(s)} = h^{k+1} \begin{pmatrix} k_2 c_2^{(s)} - 2k_1 c_1^{(s)} \\ \vdots \\ k_i c_i^{(s)} - k_{i-1} c_{i-1}^{(s)} \\ \vdots \\ -k_{L-1} c_{L-1}^{(s)} \end{pmatrix}.$$

La résolution de (8.4.25) se fait en deux étapes :

$$\delta_1^{(s+1)} = \left( \rho - \sum_{i=1}^L i c_i^{(s)} - e^t T^{-1} \hat{F}(c^{(s)}) \right) / (1 - e^t T^{-1} d^{(s)}), \quad (8.4.27)$$

$$\hat{\delta}^{(s+1)} = T^{-1} \hat{F}(c^{(s)}) - \delta_1^{(s+1)} T^{-1} d^{(s)}. \quad (8.4.28)$$

Pour résoudre (8.4.19) pour  $\delta^{(s+1)}$ , on applique la méthode de Newton décrite précédemment. On calcule :  $T^{-1} \hat{F}(c^{(s)})$  et  $T^{-1} d^{(s)}$ , à chaque itération de Newton. La matrice  $T^{-1}$  étant calculée à l'aide d'une procédure d'inversion de matrices tridiagonales.

## 8.5 L'entropie

On montre que l'entropie décroît au cours du temps, pour le système tronqué de Becker-Döring continu en temps (8.1.1)–(8.1.3), ainsi que pour le schéma numérique (8.4.12)–(8.4.14). Ce résultat sert à décrire le comportement asymptotique de la solution [4].

### 8.5.1 Le système continu en temps

**Lemme 8.5.20.** On définit la fonction entropie  $V_L(t) = \sum_{i=1}^L c_i(t) \left( \ln \frac{c_i(t)}{m_i} - 1 \right)$ , où  $(m_i)_{i=1,L}$  est la solution d'équilibre en détail introduite en (8.2.6).

Alors pour tout  $t \geq 0$  on a :  $\frac{dV_L(t)}{dt} \leq 0$ .

**Preuve.**

$$\begin{aligned} \frac{dV_L(t)}{dt} &= \sum_{i=1}^L \frac{dc_i(t)}{dt} \ln \frac{c_i(t)}{m_i} \\ &= \frac{dc_1(t)}{dt} \ln \frac{c_1(t)}{m_1} + \sum_{i=2}^L (J_{i-1} - J_i) \ln \frac{c_i(t)}{m_i} \\ &= \frac{dc_1(t)}{dt} \ln \frac{c_1(t)}{m_1} + J_1 \ln \frac{c_2(t)}{m_2} - J_L \ln \frac{c_L(t)}{m_L} + \sum_{i=2}^{L-1} J_i \left( \ln \frac{c_{i+1}(t)}{m_{i+1}} - \ln \frac{c_i(t)}{m_i} \right). \end{aligned}$$

On a utilisé la formule de sommation par parties :

$$\sum_{i=1}^L (a_{i-1} - a_i) b_i = (a_0 b_1 - a_L b_L) + \sum_{i=1}^{L-1} a_i (b_{i+1} - b_i).$$

On a  $J_L = 0$  par hypothèse, d'où :

$$\begin{aligned} \frac{dV_L(t)}{dt} &= \left( J_1 - \sum_{i=1}^L J_i \right) \ln \frac{c_1(t)}{m_1} + J_1 \ln \frac{c_2(t)}{m_2} + \sum_{i=2}^{L-1} J_i \ln \frac{c_{i+1}(t) m_i}{c_i(t) m_{i+1}} \\ &= J_1 \ln \frac{c_2(t) m_1}{c_1(t) m_2} - \sum_{i=1}^L J_i \ln \frac{c_1(t)}{m_1} + \sum_{i=2}^{L-1} J_i \ln \frac{c_{i+1}(t) m_i}{c_i(t) m_{i+1}} \\ &= \sum_{i=1}^{L-1} J_i \ln \frac{c_{i+1}(t) m_i}{c_i(t) m_{i+1}} - \sum_{i=1}^{L-1} J_i \ln \frac{c_1(t)}{m_1} \\ &= \sum_{i=1}^{L-1} J_i \ln \frac{c_{i+1}(t) m_i m_1}{c_i(t) m_{i+1} c_1(t)}. \end{aligned}$$

Or  $\frac{m_i}{m_{i+1}} m_1 = \frac{q_{i+1}}{k_i}$ , d'où :



$$\begin{aligned} \frac{dV_L(t)}{dt} &= \sum_{i=1}^{L-1} \ln \frac{c_{i+1}(t)q_{i+1}}{c_i(t)c_1(t)k_i} \\ &= (k_i c_i(t)c_1(t) - q_{i+1}c_{i+1}(t)) \ln \frac{c_{i+1}(t)q_{i+1}}{c_i(t)c_1(t)k_i} < 0. \quad \square \end{aligned}$$

### 8.5.2 Le schéma numérique

Nous allons montrer que le schéma implicite (8.4.12)–(8.4.14) est entropique.

**Lemme 8.5.21.** *On définit l'entropie discrète :  $V_L^k = \sum_{i=1}^L c_i^k \left( \ln \frac{c_i^k}{m_i} - 1 \right)$ .*

Alors

$$\forall k \in \mathbb{N} \quad V_L^{k+1} \leq V_L^k. \quad (8.5.29)$$

**Preuve.**

$$\begin{aligned} V_L^{k+1} - V_L^k &= \sum_{i=1}^L c_i^{k+1} \left( \ln \frac{c_i^{k+1}}{m_i} - 1 \right) - \sum_{i=1}^L c_i^k \left( \ln \frac{c_i^k}{m_i} - 1 \right) \\ &= \sum_{i=1}^L c_i^k \left( 1 - \frac{c_i^{k+1}}{c_i^k} + \ln \frac{c_i^{k+1}}{c_i^k} \right) + \sum_{i=1}^L (c_i^{k+1} - c_i^k) \ln \frac{c_i^{k+1}}{m_i}. \end{aligned}$$

Transformons la deuxième somme du second membre par sommation par parties :

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^L (c_i^{k+1} - c_i^k) \ln \frac{c_i^{k+1}}{m_i} &= \Delta t \left( -J_1^{k+1} - \sum_{i=1}^{L-1} J_i^{k+1} \right) \ln \frac{c_1^{k+1}}{m_1} + \Delta t \sum_{i=2}^L (J_{i-1}^{k+1} - J_i^{k+1}) \ln \frac{c_i^{k+1}}{m_i} \\ &= \Delta t \left( -J_1^{k+1} - \sum_{i=1}^{L-1} J_i^{k+1} \right) \ln \frac{c_1^{k+1}}{m_1} + \Delta t J_1^{k+1} \ln \frac{c_2^{k+1}}{m_2} \\ &\quad - \Delta t J_L^{k+1} \ln \frac{c_L^{k+1}}{m_L} + \Delta t \sum_{i=2}^{L-1} J_i^{k+1} \left( \ln \frac{c_{i+1}^{k+1}}{m_{i+1}} - \ln \frac{c_i^{k+1}}{m_i} \right). \end{aligned}$$

Or  $J_L^{k+1} = 0$  :

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^L (c_i^{k+1} - c_i^k) \ln \frac{c_i^{k+1}}{m_i} &= \Delta t J_1^{k+1} \ln \frac{c_2^{k+1} m_1}{c_1^{k+1} m_2} - \Delta t \sum_{i=1}^{L-1} J_i^{k+1} \ln \frac{c_1^{k+1}}{m_1} - \Delta t \sum_{i=2}^{L-1} J_i^{k+1} \ln \frac{c_{i+1}^{k+1} m_i}{c_i^{k+1} m_{i+1}} \\ &= \Delta t \sum_{i=1}^{L-1} J_i^{k+1} \ln \frac{c_{i+1}^{k+1} q_{i+1}}{c_i^{k+1} k_i} \\ &= \Delta t \sum_{i=1}^{L-1} (k_i c_i^{k+1} c_1^{k+1} - q_{i+1} c_{i+1}^{k+1}) \ln \frac{c_{i+1}^{k+1} q_{i+1}}{c_i^{k+1} k_i} \leq 0. \end{aligned}$$

Par ailleurs on remarque que :

### 8.6. UN EXEMPLE DE NOYAU DE COAGULATION ET DE FRAGMENTATION 81

$$\sum_{i=1}^L c_i^k \left( 1 - \frac{c_i^{k+1}}{c_i^k} + \ln \frac{c_i^{k+1}}{c_i^k} \right) \leq 0 \text{ en vertu de l'inégalité } f(x) = 1 - x + \ln x \leq 0, \text{ pour } x \geq 0.$$

D'où le résultat annoncé.  $\square$

## 8.6 Un exemple de noyau de coagulation et de fragmentation

### 8.6.1 Introduction

Après avoir décrit le modèle de Becker-Döring et un algorithme de résolution, on s'intéresse à l'évolution du système avec les coefficients de coagulation et de fragmentation donnés dans [10] :

$$k_i = 1 \quad i = 1, \infty, \quad (8.6.30)$$

$$q_{i+1} = \exp(i^{\frac{2}{3}} - (i-1)^{\frac{2}{3}}) \quad i \geq 1. \quad (8.6.31)$$

Dans ce cas,  $Q_i$  défini en (8.2.7) est donné par :

$$Q_i = \exp(-(i-1)^{\frac{2}{3}}) \quad i \geq 1. \quad (8.6.32)$$

La densité d'équilibre  $\rho = \sum_{i=1}^{\infty} i Q_i z^i$  est finie pour  $z \leq z_s$ , où  $z$  est la concentration d'équilibre des monomères et  $z_s$  la concentration de saturation.

Un calcul simple donne  $z_s = 1$  et une valeur approchée de la densité de saturation s'obtient numériquement :  $\rho_s \approx 4.898$ .

On rappelle que pour  $\rho \leq \rho_s$  il existe une unique solution d'équilibre en détail, et pour  $\rho > \rho_s$  il n'existe pas de solution d'équilibre en détail.

Le système tronqué de Becker-Döring possède une unique solution d'équilibre en détail définie en (8.2.6)–(8.2.7), pour tout  $\rho$  fixé et toute taille maximale  $L$  fixée.

Dans la suite, nous poserons dans (8.2.6) :  $\bar{c}_{(L)} = z_{(L)}$ .

On a alors l'écriture suivante pour la densité des solutions d'équilibre en détail :

$$\rho = \rho_L(z_{(L)}) = \sum_{i=1}^L i Q_i z_{(L)}^i. \quad (8.6.33)$$

**Lemme 8.6.22.** *Soient la série entière  $f(z) = \sum_{i=1}^{\infty} i Q_i z^i$ ,  $z_s$  son rayon de convergence, et  $\rho_s := f(z_s)$ .*

Soit  $\rho > \rho_s$ , et pour tout  $L \in \mathbb{N}$  notons  $z_L$  le nombre défini de manière unique par la relation  $P_L(z_L) = \sum_{i=1}^L iQ_i z_L^i = \rho$ .

Alors  $\lim_{L \rightarrow \infty} z_L = z_s$ .

**Preuve.** Pour tout  $i \in \mathbb{N}$ , on a  $Q_i > 0$ , donc pour toute densité  $\rho > \rho_s$  donnée et toute taille maximale  $L$  du système fixée, il existe un unique  $z_L > 0$  tel que :  $\rho = P_L(z_L) = \sum_{i=1}^L iQ_i z_L^i$ .

On a  $\rho = P_L(z_L) = P_{L+1}(z_{L+1}) \geq P_L(z_{L+1})$ . La fonction  $P_L$  étant croissante, il s'ensuit que la suite  $(z_L)_L$  est décroissante.

De plus, pour tout  $L \in \mathbb{N}$  fixé,  $\rho = P_L(z_L) > \rho_s = f(z_s) \geq P_L(z_s)$ . Il s'ensuit que  $z_L$  est une suite décroissante et minorée par  $z_s$ . La suite  $z_L$  possède donc une limite  $z_* \geq z_s$ .

Soit  $q$  un entier arbitraire, on a  $z_s \leq z_{L+q} \leq z_L$ ,

d'où  $P_L(z_{L+q}) = \sum_{i=1}^L iQ_i z_{L+q}^i \leq P_L(z_L)$ .

Dans l'expression précédente, on passe à la limite  $q \rightarrow +\infty$ , il vient :

$$\lim_{q \rightarrow \infty} P_L(z_{L+q}) = \sum_{i=1}^L iQ_i z_*^i \leq P_L(z_L) = \rho.$$

On a alors  $\forall L : \sum_{i=1}^L iQ_i z_*^i \leq \rho$ ,

d'où  $\sum_{i=1}^{\infty} iQ_i z_*^i \leq \rho < \infty$ .

Il s'ensuit :  $z_* \leq z_s$ ,

et le résultat  $z_* = z_s$ .  $\square$

### 8.6.2 Effet des coefficients cinétiques sur les équilibres en détail

On s'intéresse au cas où la densité initiale  $\rho_0$  est supérieure à la densité de saturation  $\rho_s$ . Pour le système tronqué, la solution d'équilibre pour les monomères  $z_L$ , racine de (8.6.33) sera forcément de la forme  $z_L > 1$ .

Ce qui nous a amené à examiner l'évolution des termes  $u_i = iQ_i z^i$  de la série  $S_L = \sum_{i=1}^L u_i$  en fonction de  $i$ . Pour cela, on trace dans la figure 8.1,  $\log_{10}(iQ_i z^i)$  en fonction de la taille  $i$  pour différentes valeurs de  $z$ ,  $1 \leq z \leq 1.1$  avec un pas 0.01.

### 8.6. UN EXEMPLE DE NOYAU DE COAGULATION ET DE FRAGMENTATION 83

Pour tout  $z \in ]1, 1.1]$  donné,  $\log_{10}(iQ_i z^i)$  possède un minimum en  $i_0 \simeq \left(\frac{8}{27}\right) (\ln z)^{-3}$ .

Pour  $z = 1$ ,  $\log_{10}(iQ_i z^i)$  est une fonction strictement décroissante de  $i$ .

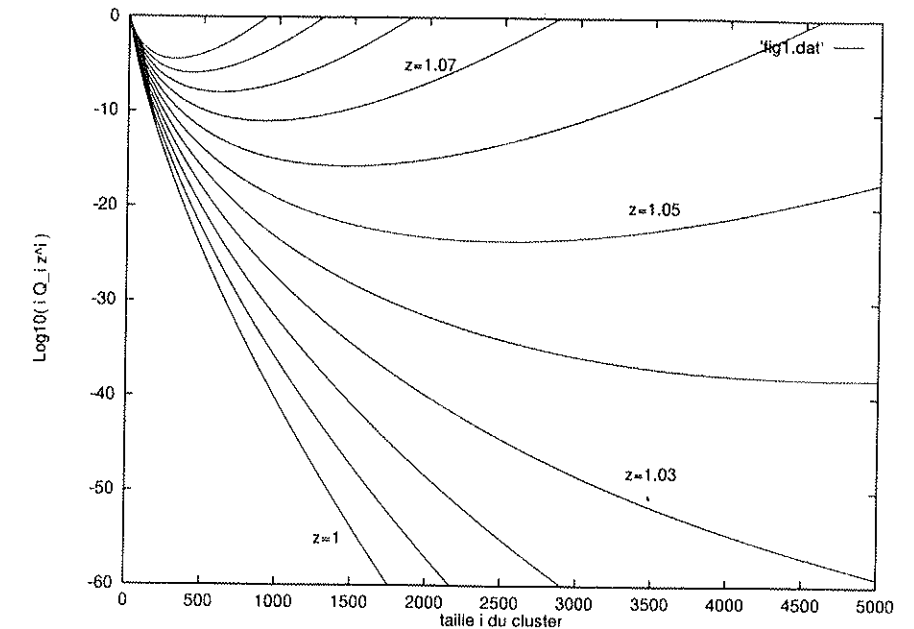


FIG. 8.1:  $\log_{10}(iQ_i z^i)$  en fonction de  $i$  pour des valeurs  $1 \leq z \leq 1.1$  avec des pas 0.01

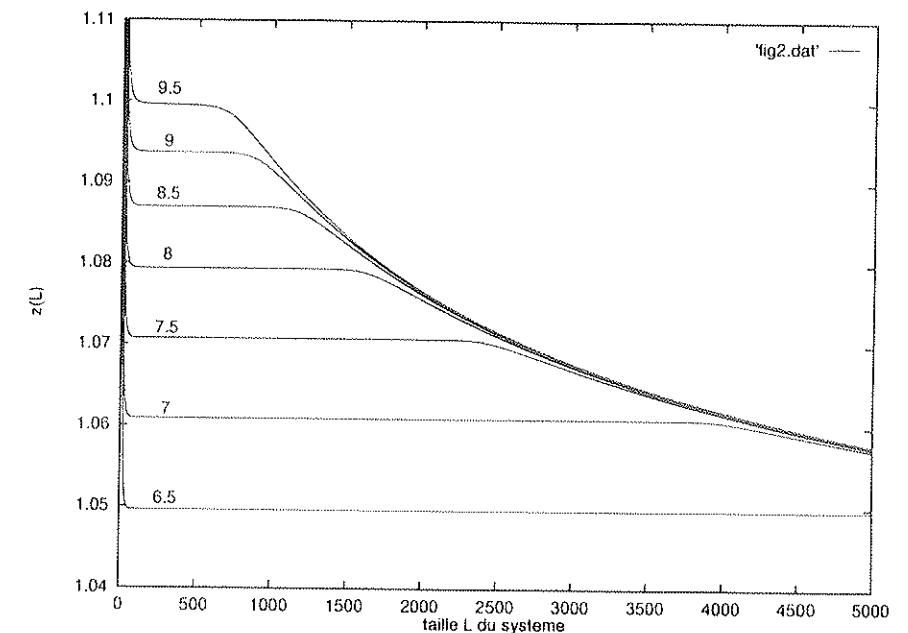


FIG. 8.2: Concentration d'équilibre des monomères  $z_L$  en fonction de la taille  $L$  du système pour des densités  $\rho = 6.5, \dots, 9.5$ . La courbe pour chaque densité est indiquée par le numéro correspondant.



Dans la figure 9.2, on montre la relation entre  $z_L$  et  $L$  (la taille du système), pour différentes valeurs de  $\rho$ .

La méthode de Newton permet de calculer numériquement l'unique racine  $z_L > 0$  de l'équation  $\rho = \sum_{i=1}^L i Q_i z_L^i$ , pour une taille maximale du système  $L$ , pour différentes valeurs de la densité  $\rho > \rho_s$ .

$Q_i > 0$  pour tout  $i \geq 1$ , donc à  $\rho$  fixé, lorsque  $L$  croît  $z_L$  décroît.  $z_L$  atteint un plateau puis décroît de nouveau.

Une estimation quantitative de la largeur de ce plateau est donnée dans [10]. De plus on observe que la taille correspondant au point le plus plat du plateau est égale à  $i_0$  calculé approximativement pour la figure 8.1, ceci étant dû à l'expression très particulière des noyaux de coagulation et de fragmentation.

### 8.6.3 Résultats numériques

On considère maintenant un cas test avec une donnée initiale :

$$c_1(0) = \rho, \quad (8.6.34)$$

$$c_i(0) = 0 \quad 2 \leq i \leq L, \quad (8.6.35)$$

où  $L$  est la taille de cluster maximale.

Lorsque  $L$  est assez grand et la densité  $\rho > \rho_s \simeq 4.898$  (densité de saturation), le système évolue dans un premier temps vers un état métastable puis pour chaque taille  $i$  fixée, vers un équilibre stable :  $m_{i,(L)} = Q_i z_{(L)}^i$ ,  $i \geq 1$  où  $z_{(L)}$  est obtenu en résolvant (8.6.33).

Ceci est illustré dans la figure suivante 8.3.

On remarque que la concentration des monomères décroît rapidement pour les petits temps puis atteint un plateau métastable pour décroître de nouveau vers sa valeur d'équilibre. La métastabilité est aussi observée pour les équations de réaction-diffusion [11].

Pour le modèle de Becker-Döring de dimension infinie, une étude théorique sur la durée de la métastabilité est donnée par Penrose dans [34]. Cette durée est déterminée par la quantité  $(\rho - \rho_s)$ , lorsque cette différence est petite, et est plus précisément proportionnelle à  $\exp\left(\frac{\alpha}{(\rho - \rho_s)^\beta}\right)$ , où  $\alpha$  et  $\beta$  sont des constantes  $O(1)$ .

La métastabilité n'est ni prédite ni observée lorsque l'on prend une densité  $\rho \leq \rho_s$ . On ne considérera alors que des densités  $\rho > \rho_s$ .

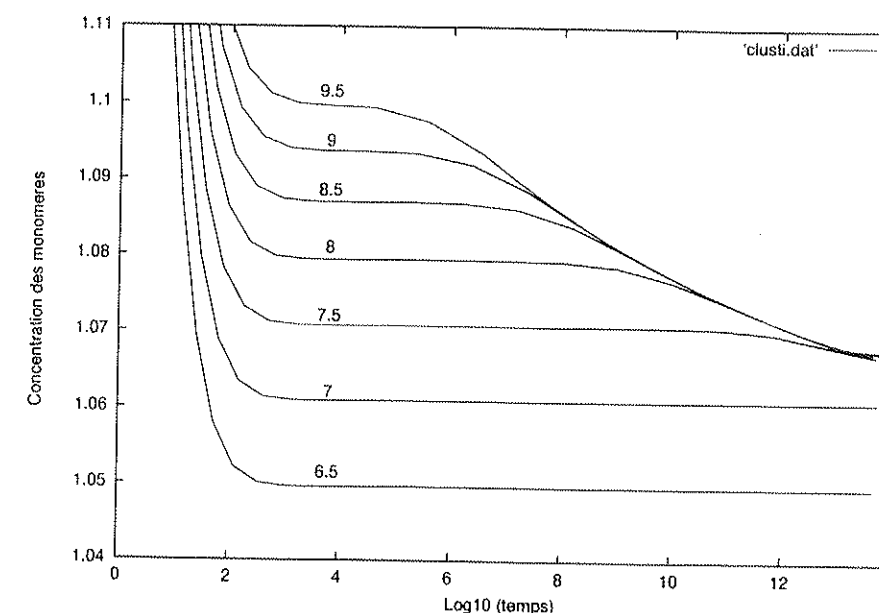


FIG. 8.3: Concentration des monomères  $c_1(t)$  en fonction de  $\log_{10}(t)$  pour un système de taille  $L = 3000$ , pour des densités  $\rho = 6.5, \dots, 9.5$ . La courbe pour chaque densité est indiquée par le numéro correspondant.

**Remarque 8.6.17.** Dans la figure 8.3,  $(\rho - \rho_s)$  n'est jamais une quantité petite, car prendre  $\rho \simeq \rho_s$  exigerait une troncature du système de Becker-Döring à des tailles maximales de système très élevées. Faute de quoi, on ne peut faire la différence entre la métastabilité et l'équilibre.

### Comparaisons

On s'est intéressé aux similarités observées entre les figures 9.2 et 8.3. Dans les deux cas, la densité  $\rho$  est fixée, on observe que respectivement la concentration des monomères (la concentration d'équilibre des monomères) chute fortement dans un premier temps et atteint rapidement un plateau alors que  $t(L)$  croît, avant de décroître à nouveau vers une solution d'équilibre.

Les particules s'étendent graduellement au cours du temps dans les clusters de tailles de plus en plus grandes  $L(t)$ .

$L(t)$  étant au cours du temps  $t$  le cluster de plus grande taille dont la concentration est non nulle.

C'est la taille apparente du système, elle croît avec le temps et lorsqu'elle passe par le plateau de la figure 9.2, un plateau similaire apparaît dans la figure 8.4.

En d'autres termes, les clusters de petite taille tendent vers un équilibre local qui correspond à une taille apparente  $L(t)$  du système.

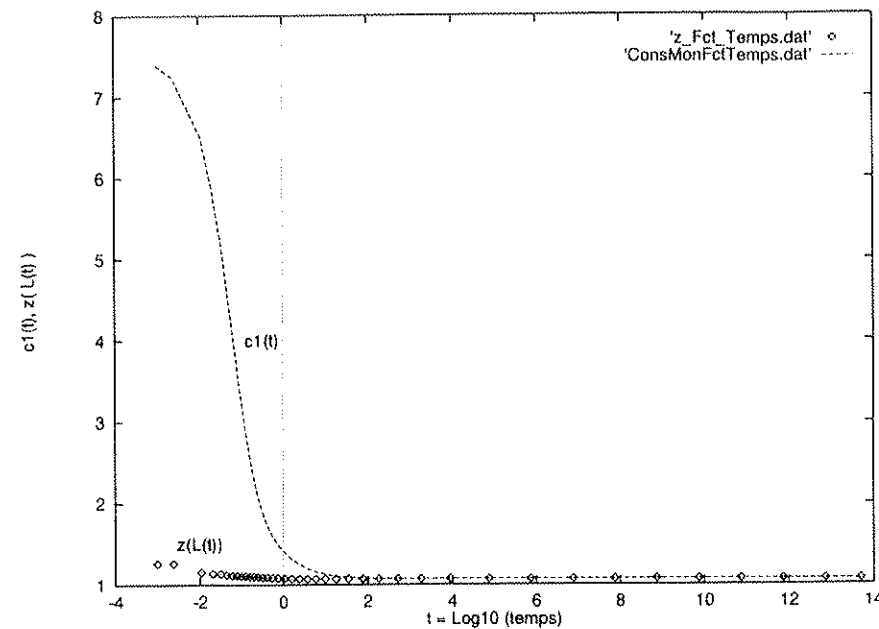


FIG. 8.4: Pour  $\rho = 7.5$ , tracé de la concentration des monomères et de la concentration d'équilibre des monomères en fonction de  $\log_{10}(t)$ .

Les clusters les plus petits ont alors une concentration  $c_i(t)$  qui se comporte comme  $c_i(t) = Q_i(c_1(t))^i$ , où  $c_1(t)$  est déterminé en résolvant (8.6.33) avec  $z_L = c_1(t)$  et  $L = L(t)$ , à  $\rho$  fixé.

La taille apparente  $L(t)$  croît avec le temps, et lorsque l'on passe par la région de plateau dans la figure 9.2, un plateau similaire apparaît dans la figure 8.3.

La comparaison est illustrée dans la figure 8.4 pour la concentration des monomères. A chaque instant  $t$  on calcule :

- $c_1(t)$ .
- $z(L(t))$ , où  $L(t)$  est la taille apparente du système.
- $c_1(t)$  et  $z(L(t))$  sont confondus lorsque  $t \geq t^*$ .

#### Importance de la taille maximale du système

Dans le cas de la figure 8.5, un même résultat est obtenu pour toutes les tailles dans la première période de forte décroissance de  $c_1(t)$  et dans la période de métastabilité. Cependant, on remarque que pour une troncature insuffisante du système de Becker-Döring, il est impossible de capter toute la région de métastabilité.

La convergence de la solution du système tronqué vers la solution du système de dimension infinie est intimement liée à la taille maximale du système. Ce résultat était attendu, compte tenu de l'étude théorique.

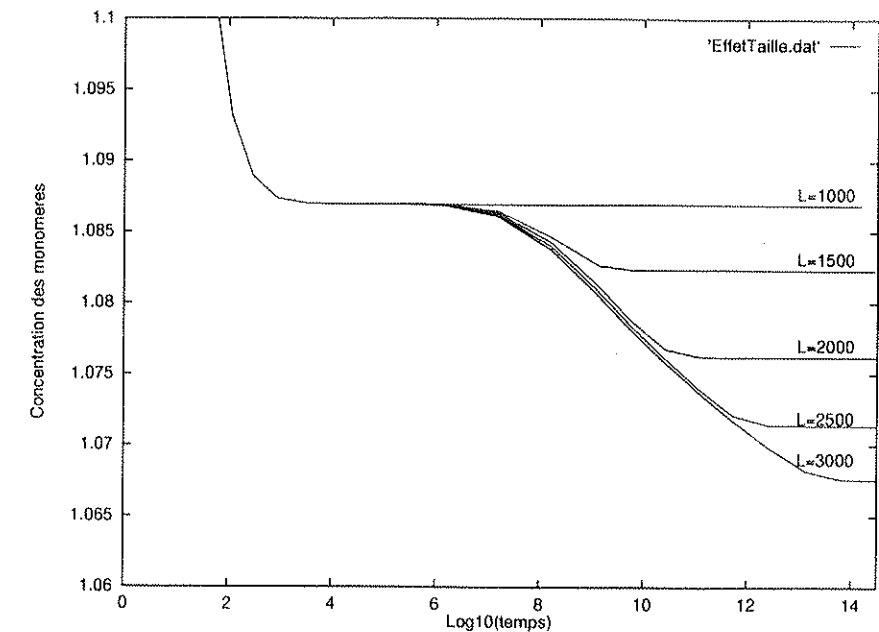


FIG. 8.5: Pour  $\rho = 7.5$ , tracé de la concentration des monomères en fonction de  $\log_{10}(t)$ , pour une densité totale  $\rho = 8.5$ , pour différentes tailles maximales de système

#### Evolution du système au cours du temps

Dans la période initiale, les particules sont graduellement distribuées dans des clusters de plus en plus large, ceci est illustré par la figure 8.6.

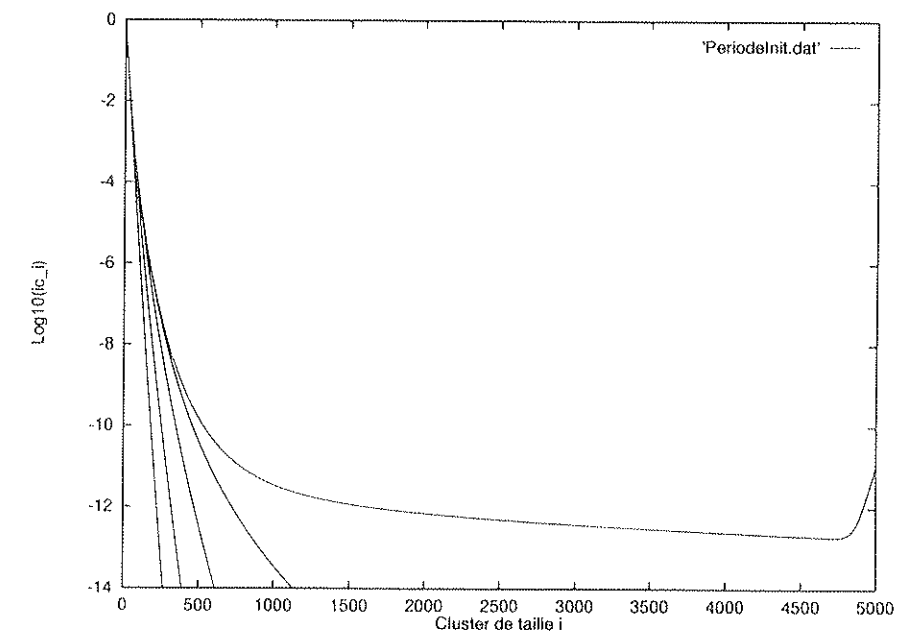


FIG. 8.6: Tracé de  $\log_{10}(ic_i(t))$  pour une densité fixe  $\rho = 7.5$  et une taille maximale  $L = 5000$ . Période initiale :  $t \in (100, 5 \times 10^5)$ .

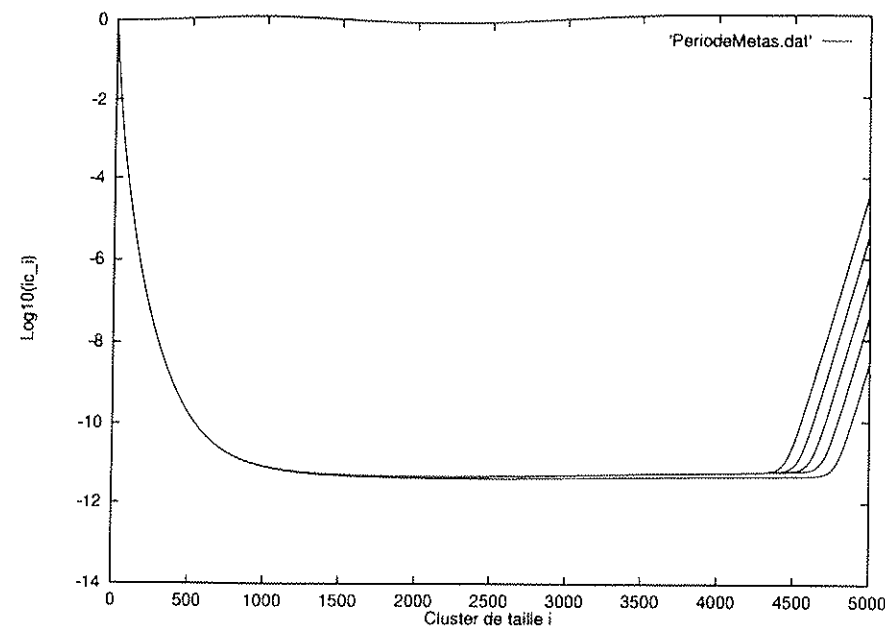


FIG. 8.7: Tracé de  $\log_{10}(ic_i(t))$  pour une densité fixe  $\rho = 7.5$  et une taille maximale  $L = 5000$ . Période métastable :  $t \in (5 \times 10^5, 5 \times 10^{10})$ .

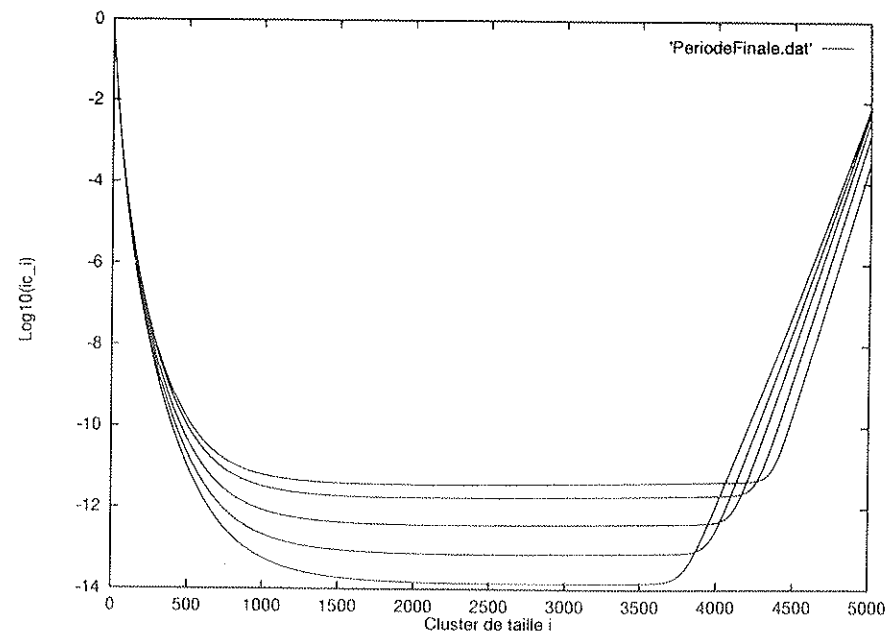


FIG. 8.8: Tracé de  $\log_{10}(ic_i(t))$  pour une densité fixe  $\rho = 7.5$  et une taille maximale  $L = 5000$ . Période finale :  $t \in (5 \times 10^{10}, 10^{15})$ .

Dans la période métastable, le nombre de particules  $ic_i$  dans les clusters de tailles  $i$  comprises entre 1000 et 4000 reste quasiment constant, ceci est expliqué par le fait que la solution du système tend à chaque instant, pour les temps suffisamment grands vers la solution d'équilibre, et cette dernière passe par une période de métastabilité. Par contre

on remarque un écart assez grand entre les courbes pour deux temps différents. Cet écart est compensé par les plus petits clusters, afin que la densité totale reste conservée. Ceci est illustré dans la figure 8.7.

La figure 8.8 représente la période finale, celle pour laquelle la solution converge vers l'équilibre correspondant à la densité donnée et à la taille de système donné.

#### Cas $\rho < \rho_s$

Dans la figure 8.9 on trace la concentration des monomères en fonction du temps. On remarque que très rapidement, cette concentration tend vers l'équilibre en détail pour les monomères  $z_L < c_s = 1$  associé à la densité totale  $\rho < \rho_s$  et à la taille maximale  $L$  du système. Ce résultat est en accord avec les prédictions théoriques.

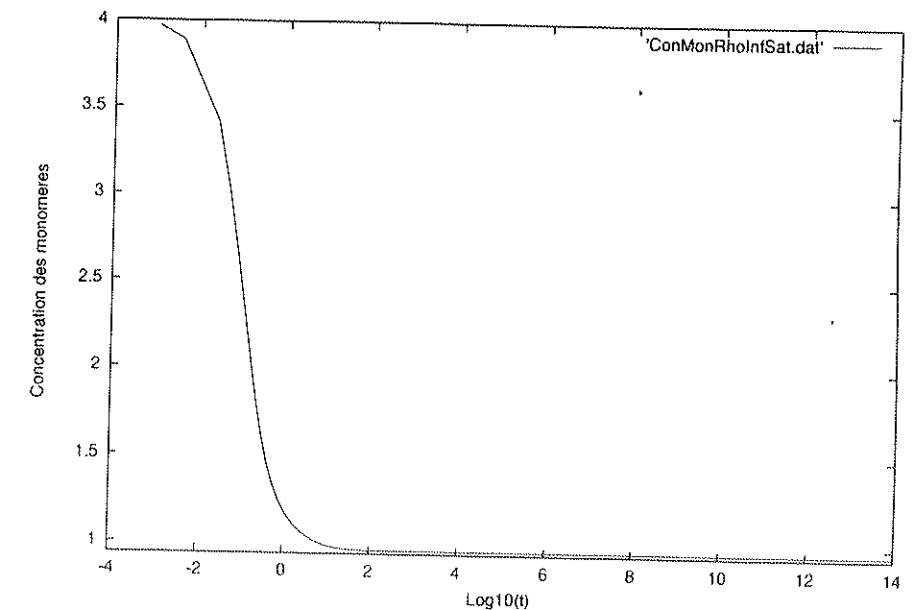


FIG. 8.9: Concentration des monomères  $c_1(t)$  en fonction de  $\log_{10}(t)$  pour un système de taille  $L = 3000$  et une densité  $\rho = 4 < \rho_s$ .

## Chapitre 9

### Numérique : le système de Lifshitz-Slyozov Modifié

#### 9.1 Introduction

L'étude numérique de l'évolution des solutions du système de Becker-Döring ayant été faite dans le chapitre précédent, il paraît naturel d'effectuer des comparaisons avec l'implémentation numérique du système de Lifshitz-Slyozov Modifié, au vu des deux premiers chapitres de modélisation.

#### 9.2 Les équations

On rappelle le système de Lifshitz-Slyozov Modifié :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left( (K(x)c(t) - Q(x))f(t, x) - \frac{\varepsilon}{2} \frac{\partial}{\partial x} ((K(x)c(t) + Q(x))f(t, x)) \right) = 0 \quad (9.2.1)$$

pour  $t \in (0, T)$ ,  $x \in (0, \infty)$

$$c(t) = \rho - \int_0^\infty x f(t, x) dx \quad \text{dans } (0, T). \quad (9.2.2)$$

On complète le système (9.2.1)–(9.2.2) avec les conditions initiale et au bord suivantes :

$$c(0) = c_0 \geq 0, \quad (9.2.3)$$

$$f(0, x) = f_0(x) \geq 0 \quad \text{dans } (0, \infty), \quad (9.2.4)$$

$$f(t, 0) = r(t) \geq 0 \quad \text{pour } t \in (0, T), \quad (9.2.5)$$

**Remarque 9.2.18.** Dans l'équation (9.2.1), le paramètre  $\varepsilon$  joue le rôle d'une grandeur d'adimensionnement, l'équivalent du nombre de Reynolds  $Re$  pour les équations de Navier-Stokes.

### 9.3 La discrétisation

Pour la première équation (9.2.1), on utilise la discrétisation d'Euler implicite pour la variable de temps, une discrétisation centrée pour le terme du premier ordre en taille et une discrétisation classique à trois points pour le terme du second ordre.

On approxime l'équation intégrale (9.2.2) par un schéma implicite en temps et la méthode des rectangles.

Soient :

- $K_i$   $i \geq 0$ , l'approximation du noyau de coagulation  $K$  au point  $x_i = i\Delta x$ ,  $\Delta x$  étant le pas de taille.
- $Q_i$   $i \geq 1$ , l'approximation du coefficient de fragmentation  $Q$  au point  $x_i = i\Delta x$ .
- $c^n$  l'approximation de la concentration des monomères  $c(t)$ , au  $n^{\text{ième}}$  itéré en temps  $t^n$ .
- $f_i^n$   $i \geq 0$ ,  $n \geq 0$ , l'approximation de la densité en taille  $f(t, x)$  au temps  $t^n$ , au point  $x_i$ .
- $r^n$  l'approximation de  $r(t)$  au temps  $t^n$   $n \geq 0$ .

Si on se donne la solution approchée  $(c^n, f_0^n, f_1^n, \dots, f_{L-1}^n)$  au temps  $t^n$  et le pas de temps  $h^{n+1} = t^{n+1} - t^n$ , on obtient l'approximation de la solution  $(c^{n+1}, f_0^{n+1}, f_1^{n+1}, \dots, f_{L-1}^{n+1})$  au temps suivant  $h^{n+1}$ .

On pose  $\mu^{n+1} = \frac{h^{n+1}}{2\Delta x}$ .

Pour la résolution numérique du système (9.2.1)–(9.2.5), nous avons choisi de tronquer le système à une taille maximale  $x_{L-1}$ , en utilisant un procédé semblable à celui présenté pour les équations de Becker–Döring.

C'est-à-dire en supposant que la taille maximale de cluster en présence dans le système est  $x_{L-1}$ , ce qui revient à poser :

$$K_i = 0 \quad i \geq L-1 \quad \text{et} \quad Q_i = 0 \quad i \geq L.$$

La discrétisation du système (9.2.1)–(9.2.5) s'écrit alors :

- Conservation de la densité totale

$$c^{n+1} + \Delta x \sum_{i=1}^{L-1} x_{i+1} f_i^{n+1} - \rho = 0.$$

- $i = 1, L-2$  :

### 9.3. LA DISCRÉTISATION

$$f_i^{n+1} - f_i^n + \mu^{n+1} \left( J_{1,i}^{n+1} - \frac{\varepsilon}{\Delta x} J_{2,i}^{n+1} \right) = 0,$$

où

$$\begin{cases} J_{1,i}^{n+1} = (K_{i+1}c^{n+1} - Q_{i+1})f_{i+1}^{n+1} - (K_{i-1}c^{n+1} - Q_{i-1})f_{i-1}^{n+1}, \\ J_{2,i}^{n+1} = (K_{i+1}c^{n+1} + Q_{i+1})f_{i+1}^{n+1} - 2(K_i c^{n+1} + Q_i)f_i^{n+1} + (K_{i-1}c^{n+1} + Q_{i-1})f_{i-1}^{n+1}. \end{cases}$$

- $i = L-1$  :

$$f_{L-1}^{n+1} - f_{L-1}^n + \mu^{n+1} \left( J_{1,(L-1)}^{n+1} - \frac{\varepsilon}{\Delta x} J_{2,(L-1)}^{n+1} \right) = 0,$$

où

$$\begin{cases} J_{1,(L-1)}^{n+1} = -(K_{L-2}c^{n+1} - Q_{L-2})f_{L-2}^{n+1}, \\ J_{2,(L-1)}^{n+1} = -2Q_{L-1}f_{L-1}^{n+1} + (K_{L-2}c^{n+1} + Q_{L-2})f_{L-2}^{n+1}. \end{cases}$$

- Condition initiale :  $c^0, f_0^0, f_1^0, f_2^0, \dots, f_{L-1}^0$
- Condition au bord :  $f_0^n = r^n \quad \forall n \geq 0$ .
- Conditions de compatibilité :  $f_0^0 = r^0$ .

A chaque pas de temps, on est alors ramené à résoudre un problème non linéaire du type :

$$F(c^{n+1}; f^{n+1}) = \begin{pmatrix} c^{n+1} + \Delta x \sum_{i=1}^{L-1} x_{i+1} f_i^{n+1} - \rho \\ \vdots \\ f_i^{n+1} - f_i^n + \mu^{n+1} \left( J_{1,i}^{n+1} - \frac{\varepsilon}{\Delta x} J_{2,i}^{n+1} \right) \\ \vdots \\ f_{L-1}^{n+1} - f_{L-1}^n + \mu^{n+1} \left( J_{1,(L-1)}^{n+1} - \frac{\varepsilon}{\Delta x} J_{2,(L-1)}^{n+1} \right) \end{pmatrix} = 0, \quad (9.3.6)$$

où

$${}^t(c^{n+1}; f^{n+1}) = \begin{pmatrix} c^{n+1} \\ f_1^{n+1} \\ \vdots \\ f_i^{n+1} \\ \vdots \\ f_{L-1}^{n+1} \end{pmatrix},$$

$$\text{avec } c^{n+1} \in \mathbb{R}^+ \text{ et } f^{n+1} = \begin{pmatrix} f_1^{n+1} \\ \vdots \\ f_i^{n+1} \\ \vdots \\ f_{L-1}^{n+1} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}_+^{L-1}.$$

### 9.3.1 Méthode de Newton-Raphson

Ainsi que pour l'équation (8.4.15), l'équation non linéaire (9.3.6) peut être résolue pour  $(c^{n+1}, f^{n+1})$  en utilisant la méthode standard de Newton-Raphson avec pas variable.

Soit  $F : \Omega \subset \mathbb{R}^L \rightarrow \mathbb{R}^L$  une fonction de classe  $C^2$  notée :

$${}^tF(c^{n+1}; f^{n+1}) = (F_0(c^{n+1}; f^{n+1}), F_1(c^{n+1}; f^{n+1}), \dots, F_{L-1}(c^{n+1}; f^{n+1})).$$

Les hypothèses sont les mêmes que celles données dans la section 8.4, et le pas de temps est contrôlé en calculant l'erreur de troncature locale (ETL) pour le schéma d'Euler implicite :

Pour  $0 \leq i \leq L-1$ , on a :

$$w_i(t^n + h^{n+1}) = w_i(t^n) + h^{n+1} \frac{\partial w_i(t^n)}{\partial t} + \underbrace{\frac{(h^{n+1})^2}{2} \frac{\partial^2 w_i(t^n)}{\partial t^2}}_{\text{Erreur de troncature}} + o((h^{n+1})^2).$$

$$c^n \simeq c(t^n), \quad f_i^n \simeq f(x_{i+1}, t^n) \quad i = 1, L-1; \quad n \geq 0.$$

On pose :

$$w^n = \begin{pmatrix} w_0^n \\ w_1^n \\ \vdots \\ w_i^n \\ \vdots \\ w_{L-1}^n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c^n \\ f_1^n \\ \vdots \\ f_i^n \\ \vdots \\ f_{L-1}^n \end{pmatrix}.$$

L'erreur de troncature locale estimée  $(ETL)_{est}$  donnée en (8.4.17)-(8.4.18) se réécrit dans le cadre des équations de Lifshitz-Slyozov modifiées :

$$(ETL)_{est}(w_i) = \frac{h^{n+1}}{2} \left( \frac{\Delta_i^{n+1}}{h^{n+1}} - \frac{\Delta_i^n}{h^n} \right) \quad i = 0, L-1, \quad (9.3.7)$$

$$\Delta_i^{n+1} = w_i^{n+1} - w_i^n \quad i = 0, L-1. \quad (9.3.8)$$

On pose :

$$\Delta^n = (\Delta_0^n \quad \Delta_1^n \quad \Delta_2^n \quad \dots \quad \Delta_{L-1}^n).$$

$$\delta^n = (\delta_0^n \quad \delta_1^n \quad \delta_2^n \quad \dots \quad \delta_{L-1}^n).$$

#### Algorithme

- Données initiales :  $f_0^{(0)} = r^0$ ,  $w^{(0)} = w^n$ ,  $\Delta^{(0)} = 0$ .
- On écrit les itérations de Newton :

$$\left[ \frac{\partial F(w^{(s)})}{\partial w} \right] \delta^{(s+1)} = -F(w^{(s)}) \quad (9.3.9)$$

où  $\delta^{(s+1)} = w^{(s+1)} - w^{(s)}$  et  $w^{(s)}$  représente le  $s^{ieme}$  itéré de Newton approchant  $w^{n+1}$ .

- La résolution du système linéaire (9.3.9), nous permet de calculer :

$$\Delta^{(s+1)} = \Delta^{(s)} + \delta^{(s+1)} \quad (9.3.10)$$

$$w^{(s+1)} = w^n + \Delta^{(s+1)} \quad (9.3.11)$$

$$f_0^{(s+1)} = r^{(s+1)} \quad (9.3.12)$$

- Les itérations de Newton sont stoppées lorsque  $\delta^{(s+1)}$  est assez petit, on pose alors  $M = s + 1$  et on passe à l'étape en temps suivante :

$$\Delta^{n+1} = \Delta^{(M)}, \quad (9.3.13)$$

$$w^{n+1} = w^n + \Delta^{n+1}, \quad (9.3.14)$$

$$ETL = \sup_{0 \leq i \leq L-1} ((ETL)_{est}(w_i)). \quad (9.3.15)$$

Le nouveau pas de temps  $h^{n+1}$  peut alors être généré :

Soit  $TOL$  la tolérance sur l'erreur.

- Si  $(ETL) \leq TOL$  alors  $h^n := h^{n+1}$ ,  $h^{n+1} := \min \left( 0.9 h^n \sqrt{TOL/(ETL)}, 10 h^n \right)$  et  $t^{n+1} = t^n + h^{n+1}$ .

On passe à l'itération en temps suivante avec un pas de temps  $h^{n+1}$  généralement plus grand que le précédent.

- Sinon  $((ETL) > TOL)$  on a  $h^{n+1} := \max \left( 0.9 h^{n+1} \sqrt{TOL/(ETL)}, \frac{h^{n+1}}{10} \right)$  et on recommence les itérations de Newton précédentes avec un pas de temps  $h^{n+1}$  plus petit.

### 9.3.2 Résolution du problème linéaire

La résolution du système linéaire issu des itérations de Newton (9.3.9) pour  $\delta^{(s+1)}$  décrites ci-dessus consomme la majeure partie du temps de calcul pour l'approximation de Lifshitz-Slyozov modifié. On peut réduire ce temps de manière significative en remarquant

que comme dans le cas des équations de Becker-Döring, la matrice jacobienne  $\frac{\partial F}{\partial w}$  possède une structure simple : elle est en partie tridiagonale.

$$dF(w) = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_0}{\partial c}(w) & \frac{\partial F_0}{\partial f_1}(w) & \cdots & \frac{\partial F_0}{\partial f_{L-1}}(w) \\ \frac{\partial F_1}{\partial c}(w) & \frac{\partial F_1}{\partial f_1}(w) & \cdots & \frac{\partial F_1}{\partial f_{L-1}}(w) \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial F_{L-1}}{\partial c}(w) & \frac{\partial F_{L-1}}{\partial f_1}(w) & \cdots & \frac{\partial F_{L-1}}{\partial f_{L-1}}(w) \end{pmatrix}$$

On réécrit (9.3.9) sous la forme suivante :

$$\begin{pmatrix} 1 & e^t \\ d^{(s)} & T^{(s)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta_0^{(s+1)} \\ \hat{\delta}^{(s+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho - c^{(s)} - \Delta x \sum_{i=1}^{L-1} x_{i+1} f_i^{(s)} \\ \hat{F}(w^{(s)}) \end{pmatrix} \quad (9.3.16)$$

où  $\hat{\delta}$  et  $\hat{F}$  contiennent respectivement les  $(L-1)$  dernières composantes de  $\delta$  et  $F$ . La matrice  $T^{(s)}$  est de taille  $(L-1) \times (L-1)$ , tridiagonale. On donne l'expression de la diagonale  $D$ , de la diagonale supérieure  $DU$  et de la diagonale inférieure  $DL$ .

- $D_{i,i}^{(s)} = \frac{\partial F_i}{\partial f_i^{(s)}} = 1 + \frac{\varepsilon h^{n+1}}{\Delta x^2} K_i c^{(s)} + \frac{\varepsilon h^{n+1}}{\Delta x^2} Q_i \quad i = 1, L-1$
- $DU_{i,i+1}^{(s)} = \frac{\partial F_i}{\partial f_{i+1}^{(s)}} = \mu^{n+1} K_{i+1} c^{(s)} \left(1 - \frac{\varepsilon}{\Delta x}\right) - \mu^{n+1} Q_{i+1} \left(1 + \frac{\varepsilon}{\Delta x}\right) \quad i = 1, L-2$
- $DL_{i+1,i}^{(s)} = \frac{\partial F_{i+1}}{\partial f_i^{(s)}} = -\mu^{n+1} K_i c^{(s)} \left(1 + \frac{\varepsilon}{\Delta x}\right) + \mu^{n+1} Q_i \left(1 - \frac{\varepsilon}{\Delta x}\right) \quad i = 1, L-2$

$$T^{(s)} = I + h^{n+1} A + h^{n+1} c^{(s)} B, \quad (9.3.17)$$

où  $A$  et  $B$  sont des matrices tridiagonales de taille  $(L-1) \times (L-1)$  et se déduisent immédiatement de ce qui précède.

Dans (9.3.16),  $e^t$  est un vecteur ligne de taille  $(L-1)$ , et  $d^{(s)}$  est un vecteur colonne de taille  $(L-1)$ . Avec :

$$e^t = \Delta x \begin{pmatrix} x_2 & x_3 & \cdots & x_L \end{pmatrix}.$$

$$d^{(s)} = \mu^{n+1} \begin{pmatrix} \left(K_2 f_2^{(s)} - K_0 p_0^{(s)}\right) - \frac{\varepsilon}{\Delta x} \left(K_2 f_2^{(s)} - 2K_1 f_1^{(s)} + K_0 p_0^{(s)}\right) \\ \left(K_3 f_3^{(s)} - K_1 f_1^{(s)}\right) - \frac{\varepsilon}{\Delta x} \left(K_3 f_3^{(s)} - 2K_2 f_2^{(s)} + K_1 f_1^{(s)}\right) \\ \vdots \\ \left(K_{i+1} f_{i+1}^{(s)} - K_{i-1} f_{i-1}^{(s)}\right) - \frac{\varepsilon}{\Delta x} \left(K_{i+1} f_{i+1}^{(s)} - 2K_i f_i^{(s)} + K_{i-1} f_{i-1}^{(s)}\right) \\ \vdots \\ -K_{L-2} f_{L-2}^{(s)} - \frac{\varepsilon}{\Delta x} k_{L-2} f_{L-2}^{(s)} \end{pmatrix},$$

$$\text{où } p_0^{(s)} = f_0^{(s)} + \frac{\partial f_0^{(s)}}{\partial c^{(s)}} c^{(s)}.$$

De même que pour (8.4.25), la résolution de (9.3.16) se fait en deux étapes :

$$\delta_0^{(s+1)} = \left( \rho - c^{(s)} - \Delta x \sum_{i=1}^{L-1} x_{i+1} f_i^{(s)} - e^t T^{-1} \hat{F}(w^{(s)}) \right) / (1 - e^t T^{-1} d^{(s)}) \quad (9.3.18)$$

$$\hat{\delta}^{(s+1)} = T^{-1} \hat{F}(w^{(s)}) - \delta_0^{(s+1)} T^{-1} d^{(s)} \quad (9.3.19)$$

Pour résoudre (9.3.9) pour  $\delta^{(s+1)}$ , on applique la méthode de Newton décrite précédemment. On calcule :  $T^{-1} \hat{F}(c^{(s)})$  et  $T^{-1} d^{(s)}$ , à chaque itération de Newton. La matrice  $T^{-1}$  étant calculée à l'aide d'une procédure d'inversion de matrices tridiagonales.

## 9.4 Un problème test

On se donne l'équivalent continu des noyaux de coagulation et de fragmentation (8.6.30)-(8.6.31) :

$$K(x) = 1 \quad x \geq 0, \quad (9.4.20)$$

$$Q(x) = \exp \left( (x+1)^{\frac{2}{3}} - x^{\frac{2}{3}} \right) \quad x \geq 0. \quad (9.4.21)$$

De sorte à avoir l'analogie suivante :

$$K(i\Delta x) := k_{i\Delta x+1} \quad i \geq 0, \quad (9.4.22)$$

$$Q(i\Delta x) := q_{i\Delta x+1} \quad i \geq 0. \quad (9.4.23)$$

Où  $k_{i\Delta x+1}$  et  $q_{i\Delta x+1}$  se calculent à l'aide des expressions (8.6.30) et (8.6.31).

Pour cela on prendra :

$$q_{i\Delta x+1} = \exp\left((i\Delta x)^{\frac{2}{3}} - (i\Delta x - 1)^{\frac{2}{3}}\right) \quad i \geq 0, \quad (9.4.24)$$

$$Q(i\Delta x) = \exp\left(((i+1)\Delta x)^{\frac{2}{3}} - ((i+1)\Delta x - 1)^{\frac{2}{3}}\right) \quad i \geq 0. \quad (9.4.25)$$

Nous avons effectué l'implémentation numérique en prenant les conditions initiale et au bord suivantes

$$c^0 = \rho \quad (9.4.26)$$

$$f_i^0 = 0 \quad i = 1, L-1 \quad (9.4.27)$$

$$f_0^n = r^n = c^n \quad n \geq 0. \quad (9.4.28)$$

**Remarque 9.4.19.** Avec la discrétisation décrite précédemment pour le système de Lifshitz-Slyozov modifié, et dans le cas particulier  $\varepsilon = \Delta x = 1$ , on obtient une parfaite analogie entre la résolution numérique du système de Becker-Döring et celui de Lifshitz-Slyozov modifié.

L'équation pour  $f(i) \simeq f_i \quad i \geq 0$  dans le système de Lifshitz-Slyozov modifié correspond à l'équation pour  $c_{i+1} \quad i \geq 0$  dans le système de Becker-Döring.

Nous remarquons aussi que dans la discrétisation des équations de Lifshitz-Slyozov modifiées il apparaît un terme  $Q(0) = q_1$  auquel on ne sait donner un sens physique. Or ce terme se simplifie et n'apparaît donc pas dans le cas  $\varepsilon = \Delta x = 1$ . Cependant ce terme est présent dans le cas où  $\varepsilon$  et  $\Delta x$  sont quelconques, et nous l'avons pris égal à  $Q(0) := \exp\left((\Delta x)^{\frac{2}{3}} - (\Delta x - 1)^{\frac{2}{3}}\right)$ .

### Comparaison

Nous avons effectué deux calculs pour un même temps  $t = 10^{10}$  :

1.  $\Delta x = \varepsilon = 1, L = 1000, \rho = 7.5$ .
2.  $\Delta x = 10, \varepsilon = 1, L = 100, \rho = 7.5$ .

**Remarque 9.4.20.** Au vue des courbes obtenues, on remarque que le modèle de Lifshitz-Slyozov modifié est une bonne approximation du modèle de Becker-Döring pour les grandes tailles et les temps grands, ce qui est une confirmation des résultats théoriques.

Pour un même temps final et une même taille maximale, un résultat analogue est obtenu pour les deux modèles (pour les grandes tailles). Cependant le temps de calcul est beaucoup moins important pour le système de Lifshitz-Slyozov modifié.

### 9.4. UN PROBLÈME TEST

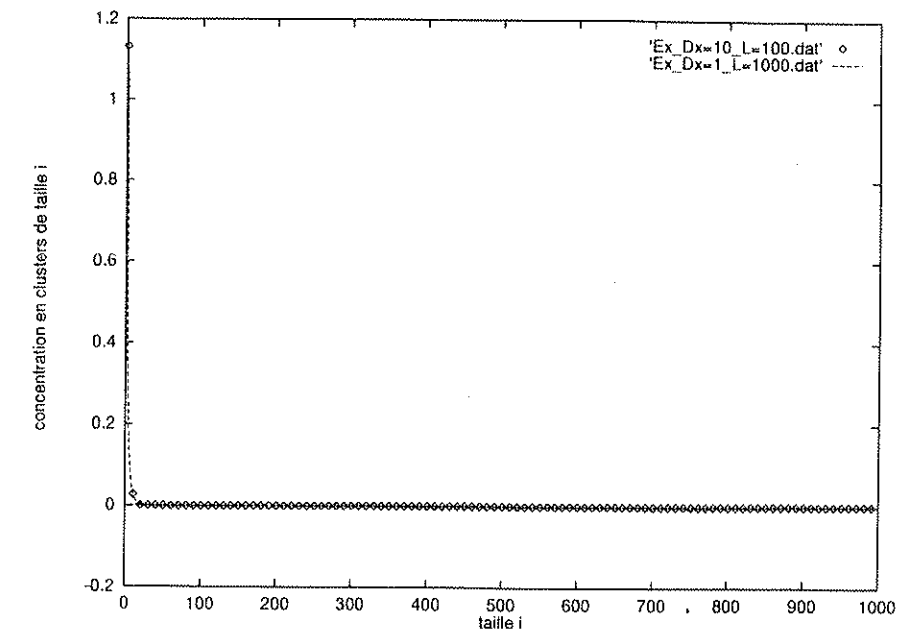


FIG. 9.1: Tracé de la concentration en cluster de taille  $i$  à un temps  $t = 10^{10}$  et une densité  $\rho = 7.5$ , dans le cas  $\Delta x = \varepsilon = 1$  et dans le cas  $\Delta x = 10, \varepsilon = 1$ .

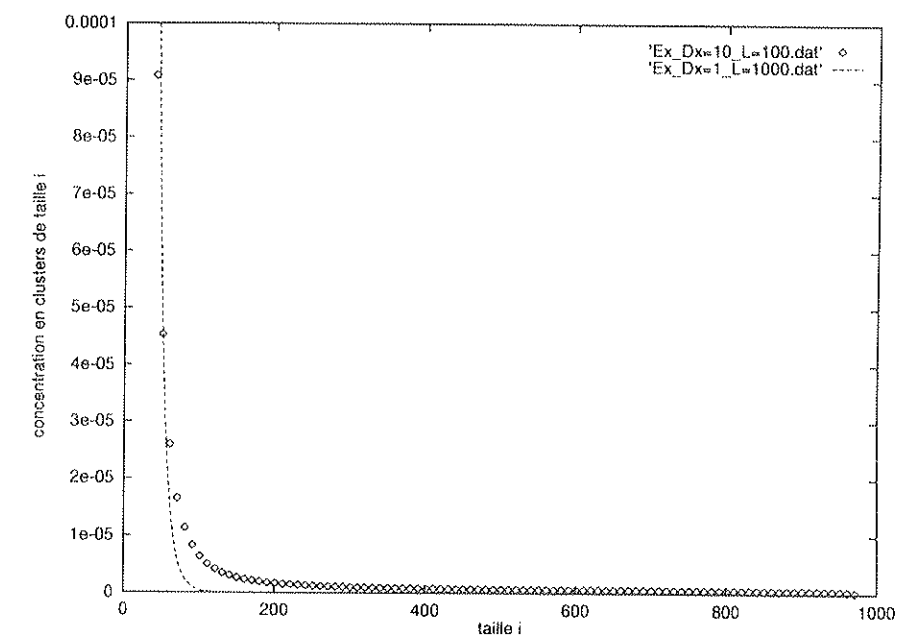


FIG. 9.2: Un zoom de la figure précédente.