

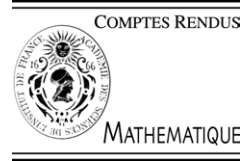


ELSEVIER

Available online at www.sciencedirect.com



C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 341 (2005) 195–200



<http://france.elsevier.com/direct/CRASSI/>

Problèmes mathématiques de la mécanique

Sur un problème d'évolution d'interface dans le cas axisymétrique

Mohammed Boutat ^a, Saïd Hilout ^b, Yves D'Angelo ^c, Véronique Lods ^a

^a *Laboratoire d'applications des mathématiques, université de Poitiers, boulevard Marie et Pierre Curie, BP 30179, 86962 Futuroscope, Poitiers, France*

^b *Laboratoire de mathématiques appliquées et informatique, faculté des sciences et techniques, Béni-Mellal, Maroc*

^c *CORIA-INSA, UMR 6614 CNRS, université de Rouen, 76801 St-Etienne du Rouvray, France*

Reçu le 25 mars 2005 ; accepté le 2 avril 2005

Disponible sur Internet le 18 juillet 2005

Présenté par Philippe G. Ciarlet

Résumé

Ce travail porte sur une étude mathématique et numérique d'un problème d'évolution de surface d'un pore à symétrie cylindrique contraint dans la direction axiale. Nous utilisons le modèle développé dans [J. Colin, J. Grilhé, N. Junqua, *Acta Mater.* 45 (9) (1997) 3835–3841]. Sous la contrainte, des instabilités de surface peuvent apparaître à l'interface vide/matière et le rayon $r(z, \tau)$ du pore cylindrique vérifie une équation d'évolution non linéaire. Sous des hypothèses asymptotiques formelles (comme dans [M. Boutat, Y. D'Angelo, S. Hilout, V. Lods, *Asymptotic Anal.* 38 (2) (2004) 93–128]), on obtient une EDP parabolique du 4-ième ordre. On établit l'existence locale et l'unicité de la solution et on montre des résultats numériques conduisant, selon le profil initial et la valeur du paramètre η , ou bien à une dissipation rapide des perturbations initiales, ou bien à un pincement. Ces résultats sont en accord qualitatif avec d'autres modèles de la littérature. *Pour citer cet article : M. Boutat et al., C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 341 (2005).*

© 2005 Académie des sciences. Publié par Elsevier SAS. Tous droits réservés.

Abstract

An interface evolution problem in the axisymmetric case. The paper is concerned with a surface evolution problem in the cylindrical case. The physical configuration consists in an axisymmetric stressed pore channel as described in [J. Colin, J. Grilhé, N. Junqua, *Morphological instabilities of a stressed pore channel*, *Acta Mater.* 45 (9) (1997) 3835–3841]. When axial stress is applied, morphological instabilities may appear at the vacuum/material interface. Under the axial symmetry envisaged, the radius $r(z, \tau)$ of the pore channel satisfies a nonlinear evolution equation. Under some formal asymptotic assumptions as in [M. Boutat, Y. D'Angelo, S. Hilout, V. Lods, *Existence and finite-time blow-up for the solution to a thin-film surface evolution problem*, *Asymptotic Anal.* 38 (2) (2004) 93–128], we obtain a parabolic 4th-order PDE. Local existence and uniqueness of the solution is established and numerical results showing either a dissipative behaviour or a pinch-off of the solution (depending on

Adresses e-mail : boutat@math.univ-poitiers.fr (M. Boutat), said_hilout@yahoo.fr (S. Hilout), dangelo@coria.fr (Y. D'Angelo), vlods@free.fr (V. Lods).

initial condition and value of the parameter η) are obtained. **To cite this article:** M. Boutat et al., C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 341 (2005).

© 2005 Académie des sciences. Publié par Elsevier SAS. Tous droits réservés.

Abridged English version

We consider here a stressed cylindrical pore (see Fig. 1, where σ_0 denotes an external axial constraint). We are interested in the morphological instabilities that may appear at the material/vacuum interface. As shown in [9], the evolution equation may be written as Eq. (3). In (3), r is the cylinder radius, function of time t , of polar angle θ and axial coordinate z ; ∇_s^2 is the surface Laplacian (see (4)), and $\mathcal{K} = \kappa_1 + \kappa_2$ is the total curvature; D is the atomic surface diffusion coefficient (depending on temperature); γ is the free energy of the surface; \mathcal{E} is the elastic energy of the structure. Assuming axial symmetry, $\kappa_1 \ll \kappa_2$, $r_\theta = 0$, one can obtain Eq. (5). By Hooke's law and introducing the scalings $R = r$, $Z = \alpha z$ and $t = D\gamma\alpha^4\tau$, where $\alpha = R_0/\ell$ is assumed $\ll 1$, Eq. (5) can then be rewritten as (6). By making the change of variable $h(t, z) = e^{1/\eta + \varphi(t, z)}$, (6) then becomes (7).

By using Picard's fixed-point theorem, one can show local existence and unicity to the following problem:

$$\begin{cases} \frac{1}{\eta} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \Lambda(\varphi, \varphi', \varphi'', \varphi^{(3)}, \varphi^{(4)}) & \text{on }]0, T[\times (0, 1) \quad (\Lambda \text{ is defined by Eq. (7)}), \\ \varphi(t, \cdot) \text{ is periodic on } (0, 1), \\ \varphi(0, \cdot) = \varphi_0 > 0 \text{ is a periodic function given on } (0, 1). \end{cases} \quad (1)$$

The space \mathcal{H} is defined by $\mathcal{H} = L^2(0, t_*; H_{\text{per}}^4(0, 1)) \cap L^\infty(0, t_*; H_{\text{per}}^2(0, 1))$ and is equipped with the following norm:

$$\|\varphi\|_{\mathcal{H}} = \left(\int_0^{t_*} \int_0^1 \varphi^{(4)2}(t, z) \, dz \, dt + \sup_{t \in (0, t_*)} \left[\int_0^1 \varphi''^2(t, z) \, dz + \int_0^1 \varphi^2(t, z) \, dz \right] \right)^{1/2}.$$

$B_{\mathcal{H}}(0, \xi)$ is the closed ball of \mathcal{H} , with centre 0 and radius ξ . Let then consider $\Gamma: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, defined for all $v \in \mathcal{H}$ by

$$\begin{cases} \frac{1}{\eta} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \Pi(\varphi, \varphi^{(4)}, v, v', v'', v^{(3)}, v^{(4)}) & \text{on }]0, T[\times (0, 1), \\ \varphi(t, \cdot) \text{ is periodic on } (0, 1), \\ \varphi(0, \cdot) = \varphi_0 > 0 \text{ is a periodic function given on } (0, 1) \end{cases} \quad (2)$$

where Π is defined by Eq. (10). The main result is the following:

Theorem 0.1. For any given strictly positive initial condition $\varphi_0 \in H_{\text{per}}^4(0, 1)$ verifying $\|\varphi_0\|_{H_{\text{per}}^4(0, 1)} \leq \xi$, problem (1) admits one and only one local solution $([0, t_*], \varphi)$ with:

$$\varphi \in L^2(0, t_*; H_{\text{per}}^4(0, 1)) \cap L^\infty(0, t_*; H_{\text{per}}^2(0, 1)).$$

This theorem relies on the two Lemmas 0.2 and 0.3.

Lemma 0.2. Under the same assumptions as in the above theorem, there exists a strictly positive constant c such as for $t_* > 0$ verifying:

$$\begin{cases} 1 - 19\eta(\xi^2 + \xi) - 2\xi - \eta\xi \geq \frac{1}{2}, \\ 4t_*c\eta[9\xi^9 + 12\xi^8 + 8\xi^7 + 3\xi^6 + 3\xi^4 + 11\xi^3 + 15\xi^2 + 3\xi] + 8t_*\xi + \|\varphi_0\|_{H_{\text{per}}^2(0, 1)}^2 \leq \xi^2, \end{cases}$$

the function Γ is well defined in $B_{\mathcal{H}}(0, \xi)$.

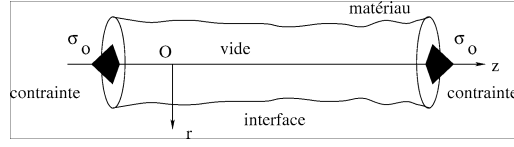


Fig. 1. Interface vide/matière d'un pore à symétrie cylindrique, soumis à une contrainte extérieure axiale σ_0 .

Lemma 0.3. *Under the same assumptions as in the above theorem, there exists a constant $0 < k < 1$ such as for all v_1, v_2 in $B_{\mathcal{H}}(0, \xi)$, Γ verifies*

$$\|\Gamma(v_1) - \Gamma(v_2)\| \leq k \|v_1 - v_2\|.$$

The details of the proofs can be found in [3].

Some numerical illustrations are given in Fig. 2. This show the solutions $h(z, t)$ to Eq. (6), obtained by a pseudo-spectral collocation method, coupled with a first order exponential scheme. The left figure is obtained with initial condition $h_0(z) = 1 + 0.1 \sin(z)$ and $\eta = 1$. The time step size is 0.001 and the number of collocation points is 8192. The solution is represented at times 0 (dotted line), 0.2, 1, 2, 3, 5. Notice the dissipative behaviour. The right figure shows the solution h for the initial condition $h_0(z) = 10 + \sin(z)$ and $\eta = 0.44$; the time step size is now 0.01. The solution is represented at times 0 (up), 2, 4, 6, 8, 12, 16, 24, 40, 60, 80, 120 and 150. The effective discontinuity of the shape derivative at long times is the signature of a pinch-off behaviour. These results are qualitatively similar to those of the literature, obtained with different approaches (see e.g. [7,8]).

1. Présentation du problème

On s'intéresse à la forme d'un pore cylindrique (cf. Fig. 1) et en particulier aux instabilités morphologiques susceptibles d'apparaître à l'interface vide/matière lorsque le cylindre est soumis à une contrainte extérieure à symétrie axiale.

L'équation d'évolution de la surface de pore (supposée de révolution) s'écrit [9] :

$$\frac{\partial r}{\partial \tau} = D(1 + r_z^2)^{1/2} \nabla_s^2 (\mathcal{E} + \gamma K) \tag{3}$$

où $r = r(\theta, z, t)$ est le rayon du cylindre, fonction du temps t , de l'angle polaire θ et de la coordonnée axiale z ; $r_X \equiv \partial r / \partial X$ avec $X \equiv \theta, z$ ou t ; ∇_s^2 désigne le Laplacien surfacique [1] défini par :

$$\nabla_s^2 = \frac{1}{q} \left[\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{r^2 + r_\theta^2}{q} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{r_z r_\theta}{q} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1 + r_z^2}{q} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{r_z r_\theta}{q} \frac{\partial}{\partial z} \right) \right], \text{ avec} \tag{4}$$

$$q = \sqrt{r^2(1 + r_z^2) + r_\theta^2}; \quad r_\theta = \frac{\partial r}{\partial \theta};$$

\mathcal{K} désigne la courbure totale $\mathcal{K} = \kappa_1 + \kappa_2$ somme des deux courbures $\kappa_1 = (r\sqrt{1 + r_z^2})^{-1}$ et $\kappa_2 = -r_{zz}(1 + r_z^2)^{-3/2}$; D est le coefficient de diffusion des atomes à la surface (qui dépend de la température) ; γ est l'énergie libre de la surface ; \mathcal{E} est l'énergie élastique de la structure définie en tout point de $\Omega_{r(\tau)}$ où $\Omega_{r(\tau)}$ est la partie occupée par le cylindre (vide) de rayon R_0 et de hauteur ℓ , et dont la frontière et les surfaces latérales sont données par :

$$\Gamma_r = \{(r, z) : r = \tilde{r}(z, \tau) \equiv r(z, \tau) \text{ (par abus de notation)}\};$$

$$\Gamma_0 = \{(r, z), z = 0\} \quad \text{et} \quad \Gamma_1 = \{(r, z), z = \ell\}.$$

Nous utilisons un système de coordonnées cylindriques (r, z, θ) avec (Oz) comme axe de révolution. L'axisymétrie nous permet d'écrire le rayon r comme fonction de z et de τ seulement : $r = r(z, \tau)$ et $r_\theta = 0$. Nous supposons en outre que κ_1 est négligeable devant κ_2 . L'Éq. (3) devient :

$$\frac{\partial r}{\partial \tau} = \frac{D}{r} \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{r}{\sqrt{1+r_z^2}} \frac{\partial}{\partial z} \left(\gamma \frac{-r_{zz}}{(1+r_z^2)^{3/2}} + \mathcal{E} \right) \right]. \quad (5)$$

L'hypothèse axisymétrique implique que le déplacement tangentiel u_θ est nul en tout point du cylindre. Pour les mêmes raisons, $\epsilon_{r\theta} = \epsilon_{z\theta} = 0$ et les contraintes de cisaillement $\sigma_{r\theta} = \sigma_{z\theta} = 0$. La loi de Hooke permet d'exprimer les contraintes en fonction des déformations. Nous introduisons ensuite les changements d'échelles suivants $R = r$; $Z = \alpha z$ et $t = D\gamma\alpha^4\tau$. Nous supposons que $\alpha = R_0/\ell$ est petit devant 1. Nous cherchons les déplacements u_z et u_r sous la forme $u_z(r, z) = \alpha U_3(R, Z)$; $u_r(r, z) = U_1(R, Z)$. Il s'agit donc d'étudier le comportement de $h(t, Z) \equiv r(\tau, z)$. Après calculs (voir [3,5]), l'Éq. (5) s'écrit sous la forme :

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -\frac{1}{h} \frac{\partial}{\partial Z} \left[h \frac{\partial}{\partial Z} \left((1 - \eta \ln(h)) h_{ZZ} - \frac{\eta}{2} h^{-2} h_Z^2 \right) \right] \quad (6)$$

avec $\eta \equiv \sigma_0^2/\mu\gamma$. Dans la suite, pour alléger les notations, nous considérons la variable spatiale z à la place de la variable Z et nous effectuons le changement de variable $h(t, z) = e^{1/\eta + \varphi(t, z)}$. L'Éq. (6) s'exprime selon :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\eta} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \Lambda(\varphi, \varphi', \varphi'', \varphi^{(3)}, \varphi^{(4)}) &\equiv \varphi\varphi^{(4)} + 2\varphi'\varphi^{(3)} + \varphi''^2 + 8\varphi'^2\varphi'' + 5\varphi\varphi'\varphi^{(3)} + 3\varphi\varphi''^2 \\ &+ 9\varphi\varphi'^2\varphi'' + 3\varphi'^4 + 2\varphi\varphi'^4 + e^{-(1/\eta + \varphi)} (\varphi'\varphi^{(3)} + \varphi'^2\varphi'' + \varphi''^2). \end{aligned} \quad (7)$$

Nous considérons alors le problème (avec $\varphi^{(k)}(t, z) = \frac{\partial^k \varphi}{\partial z^k}(t, z)$) :

$$\begin{cases} \frac{1}{\eta} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \Lambda(\varphi, \varphi', \varphi'', \varphi^{(3)}, \varphi^{(4)}) & \text{sur }]0, T[\times (0, 1), \\ \varphi(t, \cdot) \text{ est une fonction périodique sur } (0, 1), \\ \varphi(0, \cdot) = \varphi_0 > 0 \text{ est une fonction périodique donnée sur } (0, 1). \end{cases} \quad (8)$$

Considérons l'espace \mathcal{H} défini par $\mathcal{H} = L^2(0, t_*; H_{\text{per}}^4(0, 1)) \cap L^\infty(0, t_*; H_{\text{per}}^2(0, 1))$ et muni de la norme :

$$\|\varphi\|_{\mathcal{H}} = \left(\int_0^{t_*} \int_0^1 \varphi^{(4)2}(t, z) dz dt + \sup_{t \in (0, t_*)} \left[\int_0^1 \varphi''^2(t, z) dz + \int_0^1 \varphi^2(t, z) dz \right] \right)^{1/2}.$$

On note $B_{\mathcal{H}}(0, \xi)$ la boule fermée de \mathcal{H} de centre 0 et de rayon ξ .

2. Existence locale ; unicité

Dans cette section, nous donnons des résultats d'existence locale et d'unicité de la solution de (8). Pour cela, nous utilisons le théorème du point fixe de Picard [6] ; le rayon ξ , le temps t_* sont calculés en fonction de la donnée initiale φ_0 .

Nous considérons l'application Γ de \mathcal{H} dans \mathcal{H} , donnée, pour tout $v \in \mathcal{H}$ par : $\Gamma(v) = \varphi$ avec φ solution du problème :

$$\begin{cases} \frac{1}{\eta} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \Pi(\varphi, \varphi^{(4)}, v, v', v'', v^{(3)}, v^{(4)}) & \text{sur }]0, T[\times (0, 1), \\ \varphi(t, \cdot) \text{ est une fonction périodique sur } (0, 1), \\ \varphi(0, \cdot) = \varphi_0 > 0 \text{ est une fonction périodique donnée sur } (0, 1) \end{cases} \quad (9)$$

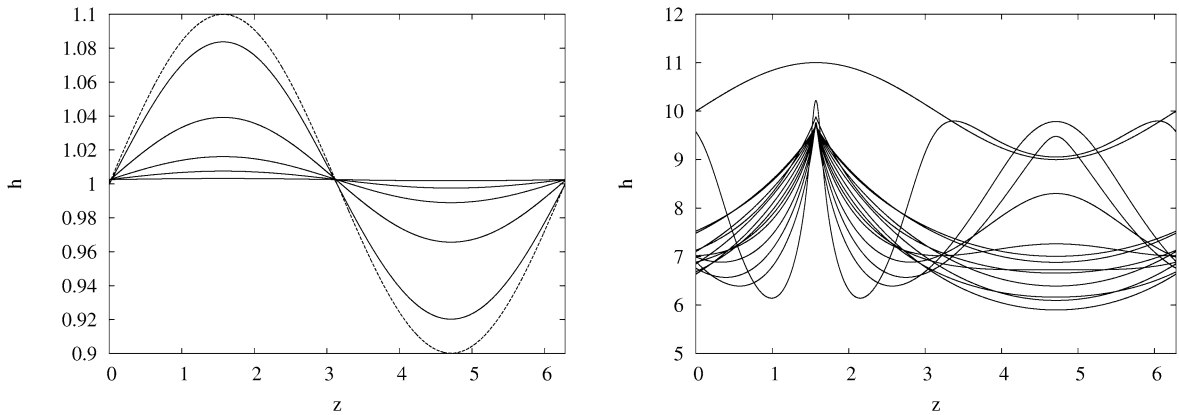


Fig. 2. A gauche : Solution $h(z, t)$ de l'Éq. (6), avec la condition initiale $h_0(z) = 1 + 0.1 \sin(z)$ et pour $\eta = 1$; le pas de temps utilisé pour la simulation vaut $\delta t = 10^{-3}$ et le nombre de points de collocation $N = 8192$. La solution est représentée aux instants 0 (condition initiale, en ligne pointillée), 0.2, 1, 2, 3, 5. Elle tend vers une constante aux temps longs. A droite : Solution $h(z, t)$ de l'Éq. (6), avec la condition initiale $h_0(z) = 10 + \sin(z)$ et pour $\eta = 0.44$; le pas de temps utilisé pour la simulation vaut $\delta t = 10^{-2}$ et le nombre de points de collocation $N = 8192$. La solution est représentée aux instants 0 (condition initiale, en ligne pointillée), 2, 4, 6, 8, 12, 16, 24, 40, 60, 80, 120 et 150. La discontinuité effective de la dérivée de la forme (aux temps longs) est signe d'un comportement en pincement.

où

$$\begin{aligned} \Pi(\varphi, \varphi^{(4)}, v, v', v'', v^{(3)}, v^{(4)}) = & v\varphi^{(4)} + 2v'v^{(3)} + v''^2 + 8v'^2v'' + 5vv'v^{(3)} + 3vv''^2 + 9vv'^2v'' + 3v'^4 \\ & + 2vv'^4 + e^{-(1/\eta+|\varphi|)}(v'v^{(3)} + v'^2v'' + v''^2) - \varphi^{(4)} + v^{(4)} - \varphi + v. \end{aligned} \quad (10)$$

Le résultat d'existence locale et d'unicité de la solution du problème (8) est le suivant :

Théorème 2.1. *Pour toute donnée initiale $\varphi_0 \in H_{\text{per}}^4(0, 1)$ strictement positive qui vérifie $\|\varphi_0\|_{H_{\text{per}}^4(0,1)} \leq \xi$, le problème (8) admet une et une seule solution locale $([0, t_*], \varphi)$ avec :*

$$\varphi \in L^2(0, t_*; H_{\text{per}}^4(0, 1)) \cap L^\infty(0, t_*; H_{\text{per}}^2(0, 1)).$$

Le Théorème 2.1 repose sur les deux lemmes suivants :

Lemme 2.2. *Sous les mêmes conditions du Théorème 2.1, il existe une constante $c > 0$ telle que pour $t_* > 0$ qui vérifie :*

$$\begin{cases} 1 - 19\eta(\xi^2 + \xi) - 2\xi - \eta\xi \geq \frac{1}{2}, \\ 4t_*c\eta[9\xi^9 + 12\xi^8 + 8\xi^7 + 3\xi^6 + 3\xi^4 + 11\xi^3 + 15\xi^2 + 3\xi] + 8t_*\xi + \|\varphi_0\|_{H_{\text{per}}^2(0,1)}^2 \leq \xi^2, \end{cases}$$

l'application Γ est bien définie de $B_{\mathcal{H}}(0, \xi)$ dans $B_{\mathcal{H}}(0, \xi)$.

Lemme 2.3. *Sous les mêmes conditions du Théorème 2.1, il existe une constante $0 < k < 1$ telle que pour tout v_1, v_2 dans $B_{\mathcal{H}}(0, \xi)$, l'application Γ vérifie :*

$$\|\Gamma(v_1) - \Gamma(v_2)\| \leq k\|v_1 - v_2\|.$$

Les détails des démonstrations sont donnés dans [3].

3. Illustrations numériques

L'Éq. (6) peut se mettre sous la forme $\frac{\partial h}{\partial t} + \mathcal{L}(h) = \mathcal{N}(h)$. Ce type d'équation peut être approchée numériquement par une méthode pseudo-spectrale, couplée à un schéma temporel de type exponentiel (*ETD schemes*, cf. [11,2,10]) Bien que ces schémas — de type Runge–Kutta — aient été développés jusqu'au 4-ième ordre, nous nous limiterons au premier ordre en temps, dans la présente étude qualitative.

Nous montrons d'abord un exemple de dissipation (Fig. 2, gauche), puis un exemple de comportement en pincement (Fig. 2, droite), suivant la condition initiale h_0 et la valeur du paramètre η . Les résultats de ce modèle asymptotique sont qualitativement similaires à ceux de la littérature, obtenus avec d'autres approches (cf. e.g. [7,8]). D'autres comparaisons peuvent être trouvées dans [3]. Par rapport au cas plan [4,5], si l'on peut aussi, grâce à cette approche asymptotique, observer un comportement dissipatif, on ne semble pas observer une « explosion » (i.e. $|h| \rightarrow +\infty$) en temps fini, mais plutôt un pincement (i.e. une discontinuité des dérivées en espace) en temps fini.

Références

- [1] A.J. Bernoff, A.L. Bertozzi, T.P. Witelski, Axisymmetric surface diffusion: dynamics and stability of self-similar pinch-off, *J. Statist. Phys.* 93 (1998) 725–776.
- [2] G. Beylkin, J.M. Keiser, L. Vozovoi, A new class of time discretization schemes for the solution of nonlinear PDEs, *J. Comput. Phys.* 147 (2) (1998) 362–387.
- [3] M. Boutat, Y. D'Angelo, S. Hilout, V. Lods, An interface evolution problem for axisymmetric stressed pore channels: existence, unicity and pinch-off, accepté pour publication dans *Asymptotic Anal.* (2005).
- [4] M. Boutat, Y. D'Angelo, S. Hilout, V. Lods, Explosion en temps fini de la solution d'un problème d'évolution de surface de film mince, *C. R. Math. Paris, Ser. I* 337 (2003) 549–552.
- [5] M. Boutat, Y. D'Angelo, S. Hilout, V. Lods, Existence and finite-time blow-up for the solution to a thin-film surface evolution problem, *Asymptotic Anal.* 38 (2) (2004) 93–128.
- [6] H. Brézis, *Analyse fonctionnelle, Théorie et applications*, Masson, Paris, 1983.
- [7] B.D. Coleman, R.S. Falk, M. Moakher, Stability of cylindrical bodies in the theory of surface diffusion, *Physica D* 89 (1995) 123–135.
- [8] B.D. Coleman, R.S. Falk, M. Moakher, Space–time finite element methods for surface diffusion with applications to the theory of the stability of cylinders, *SIAM J. Sci. Comput.* 17 (6) (1996) 1434–1448.
- [9] J. Colin, J. Grilhé, N. Junqua, Morphological instabilities of a stressed pore channel, *Acta Mater.* 45 (9) (1997) 3835–3841.
- [10] M. Cox, P.C. Matthews, Exponential time differencing for stiff systems, *J. Comput. Phys.* 176 (2002) 430–455.
- [11] Y. D'Angelo, G. Joulin, G. Boury, On model evolution equation for the whole surface of 3D expanding wrinkled premixed flames, *Combustion Theory Modelling* 4 (2000) 317–338.