



Ecole Graduée 631 MADIS

Sujet de thèse en Mathématique proposé en 2023

Titre : Analyse mathématique et numérique de problèmes dissipatifs à frontières libres

Directeur de thèse : Clément Cancès

E-mail : clement.cances@inria.fr

Co-directeur de thèse : Claire Chainais-Hillairet

E-mail : claire.chanais@univ-lille.fr

Laboratoire : Laboratoire Paul Painlevé

Equipe : ANEDP

Descriptif :

1) Le sujet de recherche choisi et son contexte scientifique et économique :

Dans des nombreux problèmes d'équations aux dérivées partielles issus de la physique ou de la biologie, la géométrie du domaine dans lequel ces équations sont posées est une inconnue qui varie au cours du temps. C'est par exemple le cas dans le domaine des sciences des matériaux : un métal peut se dégrader et disparaître progressivement sous l'action de la corrosion [1,3], ou un panneau solaire va progressivement croître lors de sa fabrication par dépôt de vapeur [10]. Bien que les deux problèmes présentent des fortes similitudes et qu'une meilleure compréhension de l'un éclaire l'autre, nous nous concentrerons plutôt sur la problématique de la corrosion d'un métal, et plus particulièrement sur l'évolution de la couche d'oxyde à sa surface. Cette problématique admet de nombreuses applications concernant le vieillissement des matériaux. Nos travaux sont motivés par une collaboration avec l'ANDRA et le CEA dans le contexte du stockage souterrain de déchets nucléaires, où la corrosion de l'acier génère du dihydrogène induisant un risque pour le site de stockage.

Dans les applications issues de la physique, le second principe de la thermodynamique assure qu'il doit exister une fonctionnelle de Lyapunov, c'est à dire une énergie décroissant au cours du temps. La dérivation de modèles dits thermodynamiquement consistants a fait l'objet de nombreux travaux ces dernières années. L'intérêt de tels modèles est qu'ils sont intrinsèquement stables du fait même de leur cohérence avec le second principe de la thermodynamique, même s'ils couplent de multiples phénomènes physiques [4]. Le modèle de référence [1] n'a pas été pensé en terme de thermodynamique et n'est pas consistant avec le second principe. Nous avons proposé récemment dans [4] une correction thermodynamiquement consistante d'un modèle simplifié où les interfaces sont fixes, et finalisons actuellement un nouveau modèle à interfaces mobiles, de complexité équivalente à celui proposé dans [1], et compatible avec le second principe de la thermodynamique. L'enjeu scientifique principal de cette thèse est de comprendre comment se comporte ce nouveau modèle à l'aide d'études mathématiques qualitatives.

L'orée des années 2000 a été le théâtre d'importants progrès mathématiques dans l'analyse de problèmes dissipatifs au sens ci-dessus pilotés par des équations aux dérivées partielles. Des outils mathématiques *ad hoc* ont permis d'étudier des modèles physiques en accord avec le second principe de la thermodynamique. Cette approche, parfois nommée *boundedness-by-entropy method* dans la littérature, a permis de démontrer que des systèmes complexes possédaient des



solutions [9], mais aussi d'étudier le comportement en temps grand ou en limite de paramètres de tels modèles. Cependant, les travaux existants sont essentiellement consacrés à des situations où les conditions aux limites (quand elles existent) sont à l'équilibre, permettant d'assurer l'existence d'un état stationnaire pour lequel plus rien ne bouge dans le système. Les quelques travaux portant sur des systèmes pourvus de conditions aux limites hors équilibre sont limités à ce jour à des problèmes posés sur des domaines fixes (voir par exemple [2]).

L'extension de ces techniques à des problématiques où la géométrie est une des inconnues du problème est un défi actuel à fort impact. On peut alors séparer les modèles en deux grandes catégories : les modèles dit de champs de phases, où la géométrie du problème est pour ainsi dire floutée, et les modèles où l'interface est localisée précisément. Dans cette thèse, nous nous concentrerons sur cette deuxième famille de modèles. Pour des modèles uni-dimensionnels inspirés des problématiques en corrosion et dont les deux bords peuvent bouger, des solutions pseudo-stationnaires sous forme d'ondes progressives ont été exhibées numériquement dans [1] et étudiées mathématiquement dans [7].

Quant au numérique, l'approche par *boundedness-by-entropy method* a été étendue au cadre discret au cours des dernières années, que ce soit pour des problèmes essentiellement scalaires [6] ou des systèmes avec diffusion croisée. Mais là encore, peu de travaux considèrent des systèmes hors-équilibre [8,5]. L'extension à des modèles avec frontières mobiles est encore embryonnaire et d'importantes contributions sont encore à effectuer même dans le cas unidimensionnel.

2) L'état du sujet dans le laboratoire d'accueil.

Depuis 2010 et le recrutement de Claire Chainais-Hillairet comme professeure, des membres du laboratoire Paul Painlevé travaillent activement sur l'analyse mathématique et numérique de problèmes dissipatifs, ainsi que sur des problèmes à frontière libre. Depuis 2011, deux thèses soutenues et 2 post-docs ont travaillé sur la modélisation mathématique et numérique de la corrosion, alimentant de nombreuses collaborations internes à l'équipe. Le recrutement de Clément Cancès au laboratoire Paul Painlevé en 2015 en tant que chargé de recherche Inria (puis directeur de recherche depuis 2021) a permis de développer significativement cette thématique, structurée sous forme d'une équipe projet Inria nommée RAPSODI (<https://team.inria.fr/rapsodi/fr/>). Le laboratoire Paul Painlevé est devenu en quelques années une référence internationale sur les questions liées à la modélisation mathématique et numérique de phénomènes dissipatifs, avec par exemple l'organisation du cycle de conférences *Asymptotic Behaviors of systems of PDEs arising in physics and biology* (ABPDE, voir <https://indico.math.cnrs.fr/event/6588/> pour la 4^{ème} édition, la 5^{ème} édition étant prévue en juin 2023).

3) Les objectifs visés, les résultats escomptés.

L'objectif de cette thèse est de contribuer à l'analyse mathématique rigoureuse de modèles continus et numériques où un ou plusieurs composants chimiques évoluent dans un domaine dont la géométrie est une des inconnues du problème. Vu la grande complexité physique et mathématique des modèles complets proposés par exemple dans [1] pour la corrosion, nous prévoyons de nous concentrer dans une large partie de la thèse sur des modèles simplifiés permettant d'isoler des caractéristiques des modèles complets sans en contenir toute la complexité. La compréhension fine du modèle simplifié est une étape indispensable dans l'objectif de comprendre les modèles complets.

Les tâches à accomplir pendant cette thèse sont les suivantes :

1. **Caractère bien posé d'un modèle simplifié.** Dans un premier temps, on s'intéressera au caractère bien posé (existence et unicité de solution, stabilité par rapport aux données) d'un problème scalaire et unidimensionnel relativement simple (mais hors-équilibre !). On considèrera que les flux à l'intérieur du domaine sont pilotés par les gradients d'un potentiel chimique et que les flux à travers les interfaces dépendent du saut de potentiel chimique entre l'intérieur du domaine et l'extérieur. Les déplacements des interfaces seront prescrits par les sauts d'une

pression étroitement liée aux potentiels chimiques et aux concentrations. Ce modèle “jouet” contient de nombreuses difficultés originales contenues dans les modèles réalistes pour la corrosion du fer [1] tout en s’affranchissant du couplage entre plusieurs espèces mobiles.

2. **Asymptotique en temps grand du modèle simplifié.** Dans un deuxième temps, nous nous intéresserons au comportement en temps grand du système hors-équilibre. L’objectif est de mettre en évidence l’existence de solutions dites pseudo-stationnaires de type ondes progressives [8] et la convergence en temps grand des solutions instationnaires vers ces solutions ondes progressives comme cela est observé numériquement dans des cas réalistes [1].
3. **Approximation numérique du modèle simplifié.** En parallèle du point précédent, nous étudierons l’approximation numérique thermodynamiquement consistante du modèle simplifié. L’objectif est de concevoir des méthodes numériques capitalisant sur le second principe de la thermodynamique pour assurer leur stabilité. Si l’on dispose aujourd’hui de schémas performants et certifiés mathématiquement pour traiter le cas de domaines fixes [4,5], le cas de domaines mobiles est encore largement ouvert. Concevoir des schémas numériques permettant de transposer aux contextes discrets les résultats obtenus dans des cas continus (caractère bien posé, convergence lorsque l’on raffine le maillage, asymptotique en temps grand, . . .) dans le contexte de domaines mobiles est un des défis centraux de cette thèse.
4. **Extension au modèle complet de corrosion du fer.** Toute cette thèse se fait en gardant en ligne de mire des applications à fort impact, à savoir la corrosion du fer voire la fabrication de panneaux solaires par dépôt de vapeur. Les modèles intervenant dans ces contextes sont nettement plus complexes : ce sont des systèmes car plusieurs composants (électro)-chimiques sont à considérer, et ces porteurs de charges induisent un champ électrique auto-consistant contribuant aux forces en présence et induisant un couplage entre les différents composants chimiques. Cette étape sera probablement essentiellement formelle et numérique vue la complexité mathématique liée aux couplages intervenant dans les modèles réalistes.

Les résultats seront publiés dans des journaux spécialisés, présentés dans des conférences nationales et internationales, et confrontés à des collègues d’autres disciplines (électro-chimistes, sciences de matériaux) en prise avec des applications industrielles.

4) Bibliographie

- [1] C. Bataillon, F. Bouchon, C. Chainais-Hillairet, C. Desgranges, E. Hoarau, F. Martin, S. Perrin, M. Tupin, and J. Talandier. Corrosion modelling of iron based alloy in nuclear waste repository. *Electrochimica Acta*, 55(15) :4451–4467, 2010.
- [2] T. Bodineau, J. Lebowitz, C. Mouhot, and C. Villani. Lyapunov functionals for boundary- driven nonlinear drift-diffusion equations. *Nonlinearity*, 27 :2111–2132, 2014.
- [3] M. Bouguezzi. Modélisation et simulation numérique de la vitesse de propagation d’une piqûre de corrosion. PhD thesis, Université Paris-Saclay, 2021
- [4] C. Cancès, C. Chainais-Hillairet, B. Merlet, F. Raimondi, and J. Venel. Mathematical analysis of a thermodynamically consistent reduced model for iron corrosion. arXiv :2201.13193, 2022.
- [5] C. Cancès and J. Venel. On the square-root approximation finite volume scheme for nonlinear drift-diffusion equations. Accepté pour publication dans *Comptes Rendus Mathématiques*.



- [6] C. Cancès, C. Chainais-Hillairet, J. Fuhrmann, and B. Gaudeul. A numerical analysis focused comparison of several finite volume schemes for a unipolar degenerated drift-diffusion model. IMA J. Numer. Anal., 41(1) :271–314, 2021.
- [7] C. Chainais-Hillairet and T. O. Gallouët. Study of a pseudo-stationary state for a corrosion model: Existence and numerical approximation. Nonlinear Anal. Real World Appl., 31 :38–56, 2016.
- [8] C. Chainais-Hillairet and M. Herda. Large-time behavior of a family of finite volume schemes for boundary-driven convection-diffusion equations. IMA J. Numer. Anal., 40(4) :2473–2504, 2020.
- [9] A. Jüngel. The boundedness-by-entropy method for cross-diffusion systems. Nonlinearity, 28(6) :1963–2001, 2015. `
- [10] D. M. Mattox. Handbook of physical vapor deposition (PVD) processing. William Andrew, 2010.