



**HAL**  
open science

## Modélisation et étude numérique d'une expérience de croissance cristalline

Patrick Witomski

► **To cite this version:**

Patrick Witomski. Modélisation et étude numérique d'une expérience de croissance cristalline. Modélisation et simulation. Institut National Polytechnique de Grenoble - INPG; Université Joseph-Fourier - Grenoble I, 1977. Français. NNT : . tel-00287289

**HAL Id: tel-00287289**

**<https://theses.hal.science/tel-00287289>**

Submitted on 11 Jun 2008

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

**THESE**

*présentée à*

**Université Scientifique et Médicale de Grenoble**  
**Institut National Polytechnique de Grenoble**

*pour obtenir le grade de*

Docteur de 3ème cycle  
en MATHEMATIQUES APPLIQUEES  
option : Analyse Numérique

*par*

**Patrick WITOMSKI**



**MODELISATION ET ETUDE NUMERIQUE**  
**D'UNE EXPERIENCE DE CROISSANCE CRISTALLINE**



Thèse soutenue le 1er février 1977 devant la Commission d'Examen :

Président : Monsieur N. GASTINEL

Examineurs : Messieurs J.M. LASRY

P.J. LAURENT

J. MARESCHAL

R. ROBERT



Monsieur Gabriel CAU : Président  
Monsieur Pierre JULLIEN : Vice-Président

---

**MEMBRES DU CORPS ENSEIGNANT DE L'U.S.M.G.**

---

**PROFESSEURS TITULAIRES**

MM. ARNAUD Paul	Chimie
AUBERT Guy	Physique
AYANT Yves	Physique approfondie
Mme BARBIER Marie-Jeanne	Electrochimie
MM. BARBIER Jean-Claude	Physique Expérimentale
BARBIER Reynold	Géologie appliquée
BARJON Robert	Physique nucléaire
BARNOUD Fernand	Biosynthèse de la cellulose
BARRA Jean-René	Statistiques
BARRIE Joseph	Clinique chirurgicale
BEAUDOING André	Clinique de Pédiatrie et Puériculture
BERNARD Alain	Mathématiques Pures
Mme BERTRANDIAS Françoise	Mathématiques Pures
MM. BERTRANDIAS Jean-Paul	Mathématiques Pures
BEZES Henri	Pathologie chirurgicale
BLAMBERT Maurice	Mathématiques Pures
BOLLIET Louis	Informatique (IUT B)
BONNET Georges	Electrotechnique
BONNET Jean-Louis	Clinique ophtalmologique
BONNET-EYMARD Joseph	Clinique gastro-entérologique
Mme BONNIER Marie-Jeanne	Chimie générale
MM. BOUCHERLE André	Chimie et toxicologie
BOUCHEZ Robert	Physique nucléaire
BOUSSARD Jean-Claude	Mathématiques Appliquées
BOUTET DE MONTVEL Louis	Mathématiques Pures
BRAVARD Yves	Géographie
CABANEL Guy	Clinique rhumatologique et hydrologique
CALAS François	Anatomie
CARLIER Georges	Biologie végétale
CARRAZ Gilbert	Biologie animale et pharmacodynamie
CAU Gabriel	Médecine légale et toxicologie
CAUQUIS Georges	Chimie organique
CHABAUTY Claude	Mathématiques Pures
CHARACHON Robert	Clinique Oto-rhino-laryngologique
CHATEAU Robert	Clinique de neurologie
CHIBON Pierre	Biologie animale
COEUR André	Pharmacie chimique et chimie analytique
CONTAMIN Robert	Clinique gynécologique
COUDERC Pierre	Anatomie pathologique
Mme DEBELMAS Anne-Marie	Matière médicale
MM. DEBELMAS Jacques	Géologie générale
DEGRANGE Charles	Zoologie
DELORMAS Pierre	Pneumophtisiologie

MM. DEPORTES Charles	Chimie minérale
DESRE Pierre	Métallurgie
DESSAUX Georges	Physiologie animale
DODU Jacques	Mécanique appliquée (IUT A)
DOLIQUE Jean-Michel	Physique des plasmas
DREYFUS Bernard	Thermodynamique
DUCROS Pierre	Cristallographie
DUGOIS Pierre	Clinique de dermatologie et syphiligraphie
GAGNAIRE Didier	Chimie physique
GALLISSOT François	Mathématiques Pures
GALVANI Octave	Mathématiques Pures
GASTINEL Noël	Analyse numérique
GAVEND Michel	Pharmacologie
GEINDRE Michel	Electroradiologie
GERBER Robert	Mathématiques Pures
GERMAIN Jean-Pierre	Mécanique
GIRAUD Pierre	Géologie
JANIN Bernard	Géographie
KAHANE André	Physique générale
KLEIN Joseph	Mathématiques Pures
KOSZUL Jean-Louis	Mathématiques Pures
KRAVTCHENKO Julien	Mécanique
KUNTZMANN Jean	Mathématiques Appliquées
LACAZE Albert	Thermodynamique
LACHARME Jean	Biologie végétale
Mme LAJZEROWICZ Janine	Physique
MM. LAJZEROWICZ Joseph	Physique
LATREILLE René	Chirurgie générale
LATURAZE Jean	Biochimie pharmaceutique
LAURENT Pierre-Jean	Mathématiques Appliquées
LEDRU Jean	Clinique médicale B
LLIBOUTRY Louis	Géophysique
LOISEAUX Pierre	Sciences nucléaires
LONGFQUEUE Jean-Pierre	Physique nucléaire
LOUP Jean	Géographie
Mlle LUTZ Elisabeth	Mathématiques Pures
MM. MALGRANGE Bernard	Mathématiques Pures
MALINAS Yves	Clinique obstétricale
MARTIN-NOEL Pierre	Clinique cardiologique
MAZARE Yves	Clinique médicale A
MICHEL Robert	Minéralogie et Pétrographie
MICOUD Max	Clinique maladies infectieuses
MOURIQUAND Claude	Histologie
MOUSSA André	Chimie nucléaire
MULLER Jean-Michel	Thérapeutique (Néphrologie)
NEEL Louis	Physique du Solide
OZENDA Paul	Botanique
PAYAN Jean-Jacques	Mathématiques Pures
PEBAY-PEYROULA Jean-Claude	Physique
RASSAT André	Chimie systématique
RENARD Michel	Thermodynamique
REVOL Michel	Urologie
RINALDI Renaud	Physique
DE ROUGEMONT Jacques	Neuro-chirurgie
SEIGNEURIN Raymond	Microbiologie et Hygiène
SENGEL Philippe	Zoologie

MM. SIBILLE Robert	Construction mécanique (IUT A)
SOUTIF Michel	Physique générale
TANCHE Maurice	Physiologie
TRAYNARD Philippe	Chimie générale
VAILLANT François	Zoologie
VALENTIN Jacques	Physique nucléaire
VAUQUOIS Bernard	Calcul électronique
Mme VERAIN Alice	Pharmacie galénique
MM. VERAIN André	Physique
VEYRET Paul	Géographie
VIGNAIS Pierre	Biochimie médicale
YOCCOZ Jean	Physique nucléaire théorique

### PROFESSEURS ASSOCIES

MM. CLARK Gilbert	Spectrométrie physique
CRABBE Pierre	CERMO
ENGLMAN Robert	Spectrométrie physique
HOLTZBERG Frédéric	Basses températures
DEMBICKI Eugéniuz	Mécanique
MATSUSHIMA Yozo	Mathématiques Pures

### PROFESSEURS SANS CHAIRE

Mlle AGNIUS-DELORD Claudine	Physique pharmaceutique
ALARY Josette	Chimie analytique
MM. AMBROISE-THOMAS Pierre	Parasitologie
BELORIZKY Elie	Physique
BENZAKEN Claude	Mathématiques Appliquées
BIAREZ Jean-Pierre	Mécanique
BILLET Jean	Géographie
BOUCHET Yves	Anatomie
BRUGEL Lucien	Energétique (IUT A)
BUISSON René	Physique (IUT A)
BUTEL Jean	Orthopédie
COHEN ADDAD Pierre	Spectrométrie physique
COLOMB Maurice	Biochimie
CONTE René	Physique (IUT A)
DEPASSEL Roger	Mécanique des fluides
FONTAINE Jean-Marc	Mathématiques Pures
GAUTHIER Yves	Sciences Biologiques
GAUTRON René	Chimie
GIDON Paul	Géologie et Minéralogie
GLENAT René	Chimie organique
GROULADE Joseph	Biochimie médicale
HACQUES Gérard	Calcul numérique
HOLLARD Daniel	Hématologie
HUGONOT Robert	Hygiène et Médecine préventive
IDELMAN Simon	Physiologie animale
JOLY Jean-René	Mathématiques Pures
JULLIEN Pierre	Mathématiques Appliquées
Mme KAHANE Josette	Physique
MM. KRAKOWIAK Sacha	Mathématiques Appliquées
KUHN Gérard	Physique (IUT A)
LE ROY Philippe	Mécanique (IUT A)
LJU DUC Cuong	Chimie organique

MM. MAYNARD Roger	Physique du solide
Mme MINIER Colette	Physique (IUT A)
MM. PELMONT Jean	Biochimie
PERRIAUX Jean-Jacques	Géologie et Minéralogie
PFISTER Jean-Claude	Physique du solide
Mlle PIERY Yvette	Physiologie animale
MM. RAYNAUD Hervé	M.I.A.G.
REBECQ Jacques	Biologie (CUS)
REYMOND Jean-Charles	Chirurgie générale
RICHARD Lucien	Biologie végétale
Mme RINAUDO Marguerite	Chimie macromoléculaire
MM. ROBERT André	Chimie papetière
SARRAZIN Roger	Anatomie et chirurgie
SARROT-REYNAULD Jean	Géologie
SIROT Louis	Chirurgie générale
Mme SOUTIF Jeanne	Physique générale
MM. STREGLITZ Paul	Anesthésiologie
VIALON Pierre	Géologie
VAN CUTSEM Bernard	Mathématiques Appliquées

MATTRES DE CONFERENCES ET MATTRES DE CONFERENCES AGREGES

MM. AMBLARD Pierre	Dermatologie
ARMAND Gilbert	Géographie
ARMAND Yves	Chimie (IUT A)
BACHELOT Yvan	Endocrinologie
BARGE Michel	Neuro-chirurgie
BARJOLLE Michel	M.I.A.G.
BEGUIN Claude	Chimie organique
Mme BERIEL Hélène	Pharmacodynamie
MM. BOST Michel	Pédiatrie
BOUCHARLAT Jacques	Psychiatrie adultes
Mme BOUCHE Liane	Mathématiques (CUS)
MM. BRODEAU François	Mathématiques (IUT B)
CHAMBAZ Edmond	Biochimie médicale
CHAMPETIER Jean	Anatomie et organogénèse
CHARDON Michel	Géographie
CHERADAME Hervé	Chimie papetière
CHIAVERINA Jean	Biologie appliquée (EFP)
CONTAMIN Charles	Chirurgie thoracique et cardio-vasculaire
CORDONNIER Daniel	Néphrologie
COULOMB Max	Radiologie
CROUZET Guy	Radiologie
CYROT Michel	Physique du solide
DELOBEL Claude	M.I.A.G.
DENIS Bernard	Cardiologie
DOUCE Roland	Physiologie végétale
DUSSAUD René	Mathématiques (CUS)
Mme ETERRADOSSI Jacqueline	Physiologie
MM. FAURE Jacques	Médecine légale
FAURE Gilbert	Urologie
GAUTIER Robert	Chirurgie générale
GENSAC Pierre	Botanique
GIDON Maurice	Géologie
GROS Yves	Physique (IUT A)

MM. GUITTON Jacques	Chimie
HICTER Pierre	Chimie
IVANES Marcel	Electricité
JALBERT Pierre	Histologie
JUNIEN-LAVILLAVROY Claude	O.R.L.
KOLODIE Lucien	Hématologie
LE NOC Pierre	Bactériologie-virologie
LEROY Philippe	IUT A
MACHE Régis	Physiologie végétale
MAGNIN Robert	Hygiène et médecine préventive
MALLION Jean-Michel	Médecine du travail
MARECHAL Jean	Mécanique (IUT A)
MARTIN-BOUYER Michel	Chimie (CUS)
MICHOULIER Jean	Physique (IUT A)
NEGRE Robert	Mécanique (IUT A)
NEMOZ Alain	Thermodynamique
NOUGARET Marcel	Automatique (IUT A)
PARAMELLE Bernard	Pneumologie
PECCOUD François	Analyse (IUT B)
PEFFEN René	Métallurgie (IUT A)
PERRET Jean	Neurologie
PERRIER Guy	Géophysique - Glaciologie
PHELIP Xavier	Rhumatologie
RACHAIL Michel	Médecine interne
RACINET Claude	Gynécologie et obstétrique
RAMBAUD André	Hygiène et hydrologie
RAMBAUD Pierre	Pédiatrie
Mme RENAUDET Jacqueline	Bactériologie
MM. ROBERT Jean-Bernard	Chimie Physique
ROMIER Guy	Mathématiques (IUT B)
SHOM Jean-Claude	Chimie générale
STOEBNER Pierre	Anatomie pathologique
VROUSOS Constantin	Radiologie

#### MAITRE DE CONFERENCES ASSOCIES

M. COLE Antony

Sciences nucléaires

Fait à SAINT MARTIN D'HERES, AVRIL 1976.



INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE GRENOBLE

Président : M. Philippe TRAYNARD  
 Vice-Président : M. Pierre-Jean LAURENT

PROFESSEURS TITULAIRES

MM. BENOIT Jean	Radioélectricité
BESSON Jean	Electrochimie
BLOCH Daniel	Physique du solide
BONNETAIN Lucien	Chimie Minérale
BONNIER Etienne	Electrochimie et Electrometallurgie
BOUDOURIS Georges	Radioélectricité
BRISSONNEAU Pierre	Physique du solide
BUYLE-BODIN Maurice	Electronique
COUMES André	Radioélectricité
DURAND Francis	Métallurgie
FELICI Noël	Electrostatique
FOULARD Claude	Automatique
LESPINARD Georges	Mécanique
MOREAU René	Mécanique
PARIAUD Jean-Charles	Chimie-Physique
PAUTHENET René	Physique du solide
PERRET René	Servomécanismes
POLOUJADOFF Michel	Electrotechnique
SILBER Robert	Mécanique des Fluides

PROFESSEUR ASSOCIE

M. ROUXEL Roland	Automatique
------------------	-------------

PROFESSEURS SANS CHAIRE

MM. BLIMAN Samuel	Electronique
BOUVARD Maurice	Génie Mécanique
COHEN Joseph	Electrotechnique
LACOUME Jean-Louis	Géophysique
LANCIA Roland	Electronique
ROBERT François	Analyse numérique
VEILLON Gérard	Informatique Fondamentale et Appliquée
ZADWORNY François	Electronique

MATTRES DE CONFERENCES

MM. ANCEAU François	Mathématiques Appliquées
CHARTIER Germain	Electronique
GUYOT Pierre	Chimie Minérale
IVANES Marcel	Electrotechnique
JOUBERT Jean-Claude	Physique du solide
MORET Roger	Electrotechnique Nucléaire
PIERRARD Jean-Marie	Mécanique
SABONNADIÈRE Jean-Claude	Informatique Fondamentale et Appliquée
Mme SAUCIER Gabrièle	Informatique Fondamentale et Appliquée

MATRE DE CONFERENCES ASSOCIE

M. LANDAU Ioan

Automatique

CHERCHEURS DU C.N.R.S. (Directeur et Maître de Recherche)

MM. FRUCHART Robert

Directeur de Recherche

ANSARA Ibrahim

Maître de Recherche

CARRE René

Maître de Recherche

DRIOLE Jean

Maître de Recherche

MATHIEU Jean-Claude

Maître de Recherche

MUNIER Jacques

Maître de Recherche



## Introduction

<u>Chapitre I</u> :	Introduction à la croissance cristalline par tirage.....	1
§ 1.	Problèmes relatifs aux monocristaux.....	2
§ 2.	Fabrication d'un monocristal par la méthode Czochralski.....	6
§ 3.	Applications de la modélisation de la méthode.....	10
<u>Chapitre II</u> :	Formulation mathématique de la méthode Czochralski. Approche du problème de l'interface liquide solide.....	12
§ 1.	Les échanges thermiques.....	14
§ 2.	Les différents processus d'écoulement de la chaleur dans la méthode Czochralski.....	17
§ 3.	Le système d'équations gouvernant les échanges thermiques.....	21
§ 4.	Le problème de l'interface liquide-solide.....	23
§ 5.	Tableau des constantes physiques.....	25

<u>Chapitre III</u> :	Résolution du problème $P_I$ à interface donnée.....	26
§ 1.	Le cadre fonctionnel.....	29
§ 2.	Une nouvelle formulation pour le problème $P_I$ .....	33
§ 3.	Existence et unicité d'une solution au problème $P_I$ . Méthode de monotonie.....	37
§ 4.	Quelques résultats autour du principe du maximum.....	44
§ 5.	Comparaison entre la solution de $P_I$ et la solution physique.....	59
§ 6.	Une méthode constructive de résolution de $P_I$ par (dé-)croissance de (sur-)sous solutions.....	61
§ 7.	Méthodes de point-fixe et compacité. Extension de la classe des problèmes traités.....	73
<u>Chapitre IV</u> :	Résolution numérique du problème $P_I$ .....	78
§ 1.	Invariance par rotation du problème $P_I$ .....	80
§ 2.	Approximation du problème $P_I$ par des éléments finis de révolution.....	89
§ 3.	Algorithme de résolution de $P_I(h)$ .....	93
§ 4.	Conditions suffisantes sur la triangulation $\mathcal{T}_h$ .....	98
§ 5.	Majoration de l'erreur.....	108
§ 6.	Un théorème de convergence.....	112
§ 7.	Résultats numériques.....	116

<u>Chapitre V</u> :	Simulation dynamique de la croissance cristalline par tirage.....	121
§ 1.	Méthode de résolution.....	123
§ 2.	Résolution numérique.....	135
§ 3.	Résultats numériques.....	141
	Bibliographie.....	145



*Ce travail a été préparé au Laboratoire de Mathématiques Appliquées de l'Université Scientifique et Médicale de Grenoble en collaboration avec le Laboratoire de Cristallogénèse du Centre d'Etudes Nucléaires de Grenoble.*

*Je remercie Monsieur J. MARESCHAL de m'y avoir accueilli pendant une année et de m'avoir proposé le thème de cette recherche.*

*Je remercie Monsieur N. GASTINEL d'avoir accepté de présider le Jury et Monsieur P.J. LAURENT d'y participer.*

*Je remercie Monsieur R. ROBERT d'avoir dirigé et relu ce travail et Monsieur J.M. LASRY pour l'intérêt qu'il y a porté et les conseils qu'il m'a donnés.*

*Je remercie Monsieur H. LEGAL qui m'a permis de mieux comprendre les phénomènes physiques étudiés et Monsieur A. PONCET pour sa collaboration au niveau des résolutions numériques.*

*Je remercie enfin Madame Meyrieux pour le soin apporté à la dactylographie de ce document et le Service Reproduction pour la qualité de leur travail.*





## INTRODUCTION

---

Avec le développement de la technologie, en particulier la miniaturisation en électronique, le rôle des monocristaux a pris une importance croissante. La fabrication de ces monocristaux est délicate et demande une longue expérimentation.

Nous nous sommes intéressés aux méthodes de fabrication des monocristaux à partir de la phase fondue et particulièrement à la méthode Czochralski [11], utilisée au C.E.N.G. Ce travail est consacré à la modélisation de la méthode Czochralski puis au traitement numérique du modèle adopté.

Nous avons développé au chapitre I les problèmes de nature physique posés par la fabrication d'un monocristal et le principe de la méthode étudiée.

Le modèle mathématique est donné au chapitre II. Il s'agit d'un problème (P) non linéaire de surface libre dans lequel intervient un paramètre auxiliaire  $f$ , la vitesse de fabrication. Ce paramètre supplémentaire est déterminé par une condition sur la surface libre.

Pour résoudre le problème (P) nous avons employé un procédé itératif. Chaque itération demande la résolution d'un système (S) d'équations aux dérivées partielles elliptiques non linéaires. L'étude théorique de (S) est faite au chapitre III. Une méthode numérique de résolution de (S) en est déduite au chapitre IV. La convergence de cet algorithme est démontrée avec le principe du maximum.

On montre aussi la convergence de la méthode d'éléments finis utilisée.

Le traitement numérique de (P) — aboutissant au calcul de l'interface cristal-liquide et de la vitesse de tirage — est fait au chapitre V : il repose sur la simulation numérique de la croissance. On donne aussi au chapitre V les résultats d'un calcul numérique fait à partir des données physiques correspondant à la fabrication d'un cristal de germanium.

## CHAPITRE I

### INTRODUCTION A LA CROISSANCE CRISTALLINE PAR TIRAGE

---

- § 1. Problèmes relatifs aux monocristaux
- § 2. Fabrication d'un monocristal par la méthode Czochralski
- § 3. Applications de la modélisation de la méthode



Photo 1 : Monocristaux de Niobate de Lithium  
diamètre 5cm. - hauteur 10 cm.

La dimension et la forme des monocristaux à l'état naturel ne permet pas une exploitation industrielle directe. Leur fabrication est donc une nécessité.

Pour tenir compte de critères à la fois économiques et technologiques, les monocristaux fabriqués doivent être de grandes dimensions et de bonne qualité. L'élaboration d'un monocristal est très complexe en raison de ces critères et des nombreux paramètres dont dépend l'expérience. Les paramètres sont de nature mécanique (appareillage), thermodynamique ou chimique (réactions des éléments en présence). On constate expérimentalement la très grande sensibilité de la qualité du monocristal aux variations de ces paramètres. Ceci nécessite un contrôle par des régulations très précises. La mise au point de la fabrication d'un monocristal est donc longue et coûteuse.

Dans ce travail nous nous intéressons à une méthode basée sur une cristallisation après fusion, (méthode Czochralski [11] ). Nous allons modéliser cette méthode pour essayer d'améliorer la connaissance des paramètres de l'expérience (gradients thermiques, géométrie des fours, vitesse de tirage,...). Le traitement apporté à cette méthode doit permettre également de modéliser d'autres méthodes (fusion de zone, Bridgman).

## 1. PROBLEMES RELATIFS AUX MONOCRISTAUX

Un solide *monocristallin* est caractérisé par un empilement régulier des atomes suivant des plans et des directions particuliers. Cet ensemble est orienté sur une grande échelle.

### 1.1. UTILISATION DES MONOCRISTAUX

Un exemple bien connu est celui des semi-conducteurs. Le silicium pur est non conducteur. Lorsqu'il est dopé il le devient. Le dopage du silicium se fait par adjonction ou enlèvement d'un électron. On obtient du silicium type N (négatif) ou P (positif). On dépose un film de silicium type P sur une plaquette de silicium type N et sur cet ensemble sont implantés les éléments du circuit intégré.

Une grande *homogénéité* est demandée au matériau parce que la miniaturisation est à l'échelle des défauts. La présence de joints de grains (voir 1.2.) par exemple, nuit à la qualité du circuit car ce sont des lignes préférentielles pour la conduction du courant.

Sur cet exemple on peut déjà se rendre compte de l'intérêt de réaliser des monocristaux de bonne qualité.

Outre les semi-conducteurs (Silicium, Germanium,...) citons pour l'électronique les filtres d'ondes (télévision couleur), les substrats pour mémoires à bulles, le quartz (vibrations) ; pour l'optique, les rubis lasers ; citons aussi les diffracteurs de neutrons, ..., les pierres synthétiques, etc...

### 1.2. DEFANTS DES MONOCRISTAUX

Les défauts pouvant apparaître au cours de la formation des monocristaux se situent au niveau microscopique et résultent de la perturbation de l'empilement atomique. Citons :

#### \* les dislocations :

Il s'agit d'un décalage dans la direction des plans cristallins. Elles ont la propriété de se propager et de se multiplier.

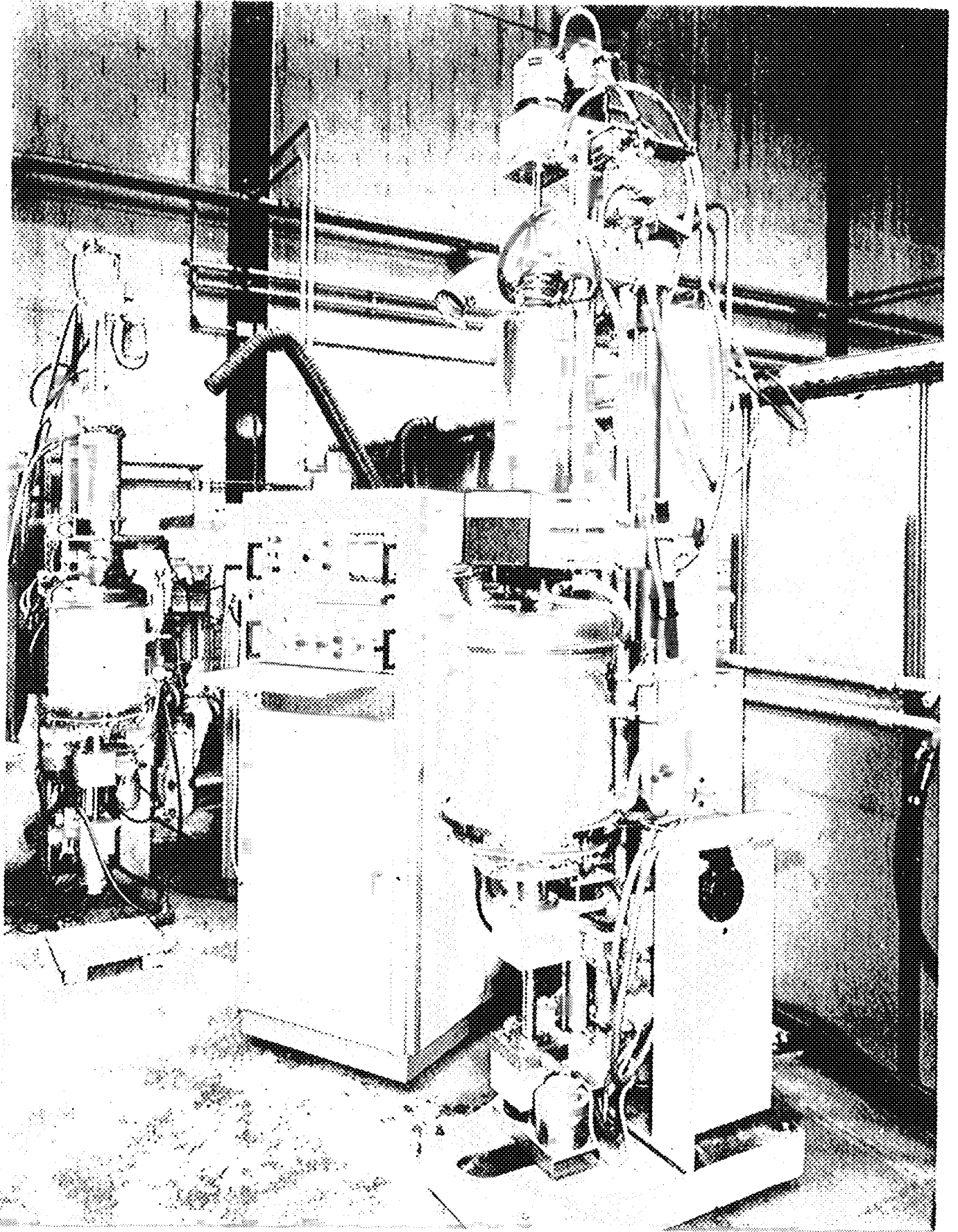


Photo 2 : Appareillage de la méthode Czochralski  
Four de tirage et régulation.



\* les grains et les joints de grains :

Ils sont dus à la multiplicité des dislocations qui finissent par isoler de petites régions cristallines. Les dislocations rapprochant les plans cristallins, le tensionnement du cristal est plus grand et il se forme des régions d'énergie minimum : les grains. Ils sont séparés par des joints de grains.

Citons aussi les macles, les contraintes. Nous renvoyons aux livres de J.C. Brice [2] et R.A. Laudise [11] pour le lecteur intéressé par ces questions.

La raison de ces défauts sont :

- a) les impuretés, les inclusions
- b) les mauvais contrôles thermiques ou mécaniques

La modélisation de la croissance que nous envisageons d'un point de vue macroscopique peut donc être utile pour le point b) . En fonction des qualités physiques demandées (exemple : pas de joints de grains pour un semi-conducteur, pas d'inclusions pour un rubis laser) on fabriquera donc un cristal approprié.

Les méthodes de fabrication sont multiples [11] . Nous nous intéressons à la technique de croissance à partir d'un bain fondu. Et plus précisément à :

## 2. FABRICATION D'UN MONOCRISTAL PAR LA METHODE CZOCHRALSKI

L'appareillage et la technique de l'expérience étant complexes nous donnons simplement :

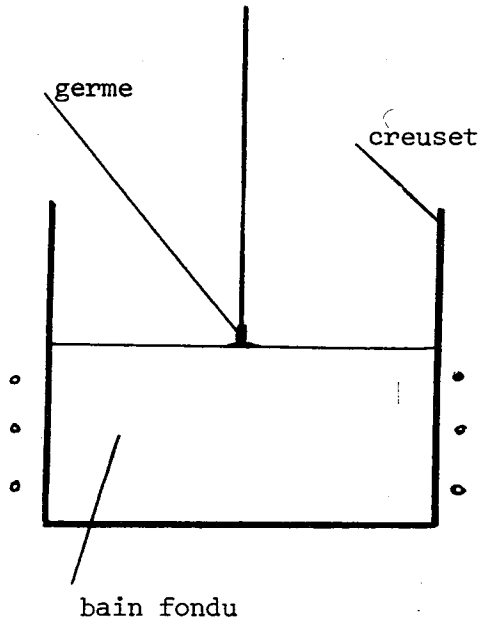


Figure 1

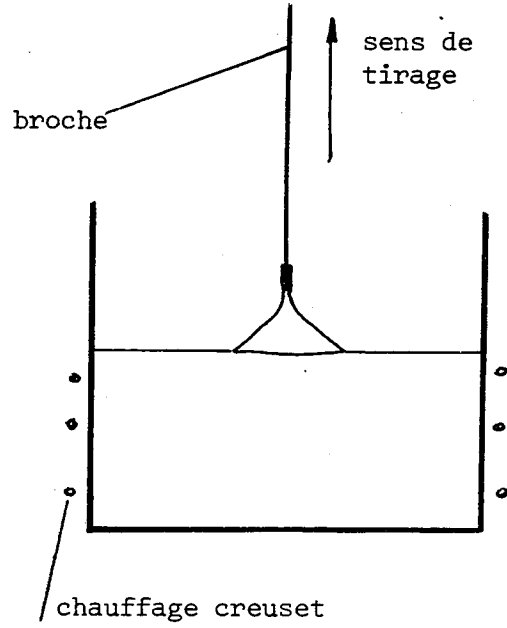


Figure 2

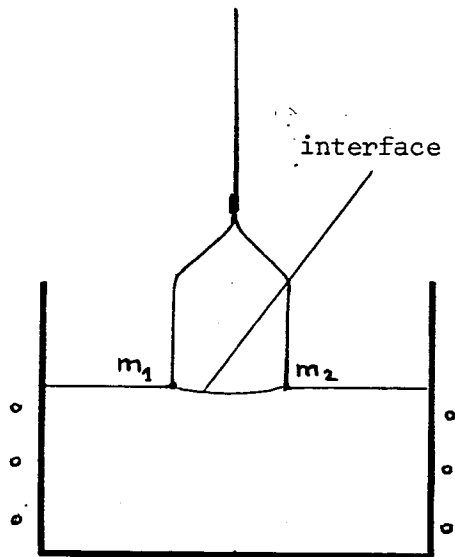


Figure 3

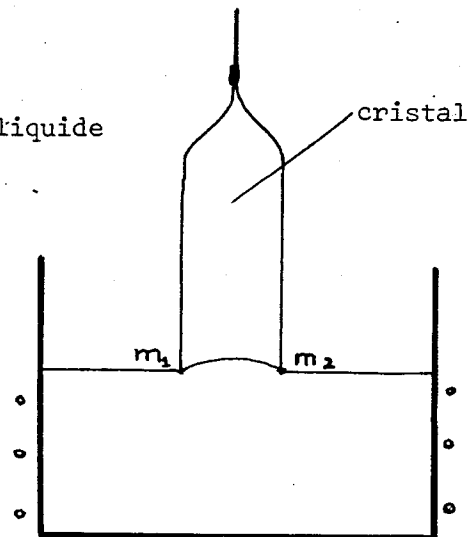


Figure 4

## 2.1. PRINCIPE DE LA METHODE :

Le matériau à cristalliser est déposé dans un creuset et porté à une température supérieure à son point de fusion. Un germe monocristallin est alors déposé au moyen d'une broche verticale à la surface du bain fondu ainsi formé. La température de ce bain étant bien ajustée, la cristallisation s'opère autour du germe (figure 1), et l'on retire le cristal au fur et à mesure de sa formation avec une vitesse de tirage  $f$  assez lente de façon à obtenir une forme évasée (figure 2). Dans les premières heures du tirage le cristal grossit comme un cône dont la base devient de plus en plus large. Lorsque la base de ce cône a été amenée à la taille désirée on s'efforce de faire un tirage à diamètre constant (figure 3 et 4), ce qui s'obtient par un réglage convenable de la vitesse de tirage. L'homogénéité de l'ensemble est assuré par une rotation du creuset et du cristal autour de l'axe vertical.

## 2.2. CONTROLE DE LA QUALITE D'UN MONOCRISTAL TIRE PAR LA METHODE CZOCHRALSKI :

La forme de l'interface joue un rôle important dans la qualité cristalline. Ce qui intéresse donc les physiciens dans un premier temps, c'est le calcul de la forme de cette interface dans une situation de croissance stable du type de celle représentée sur les figures 3 et 4 (voir aussi photos 1 et 3).

Nous allons modéliser cette situation de croissance stable : diamètre constant, vitesse de tirage égale à la vitesse de cristallisation, évolution lente de la forme de l'interface et de la vitesse de tirage. On s'intéresse à la forme de l'interface à un instant donné dans des conditions d'expériences données.

Le modèle s'applique donc dans des cas comme la croissance du germanium (voir chapitre V). Dans d'autres fabrications on rencontre des

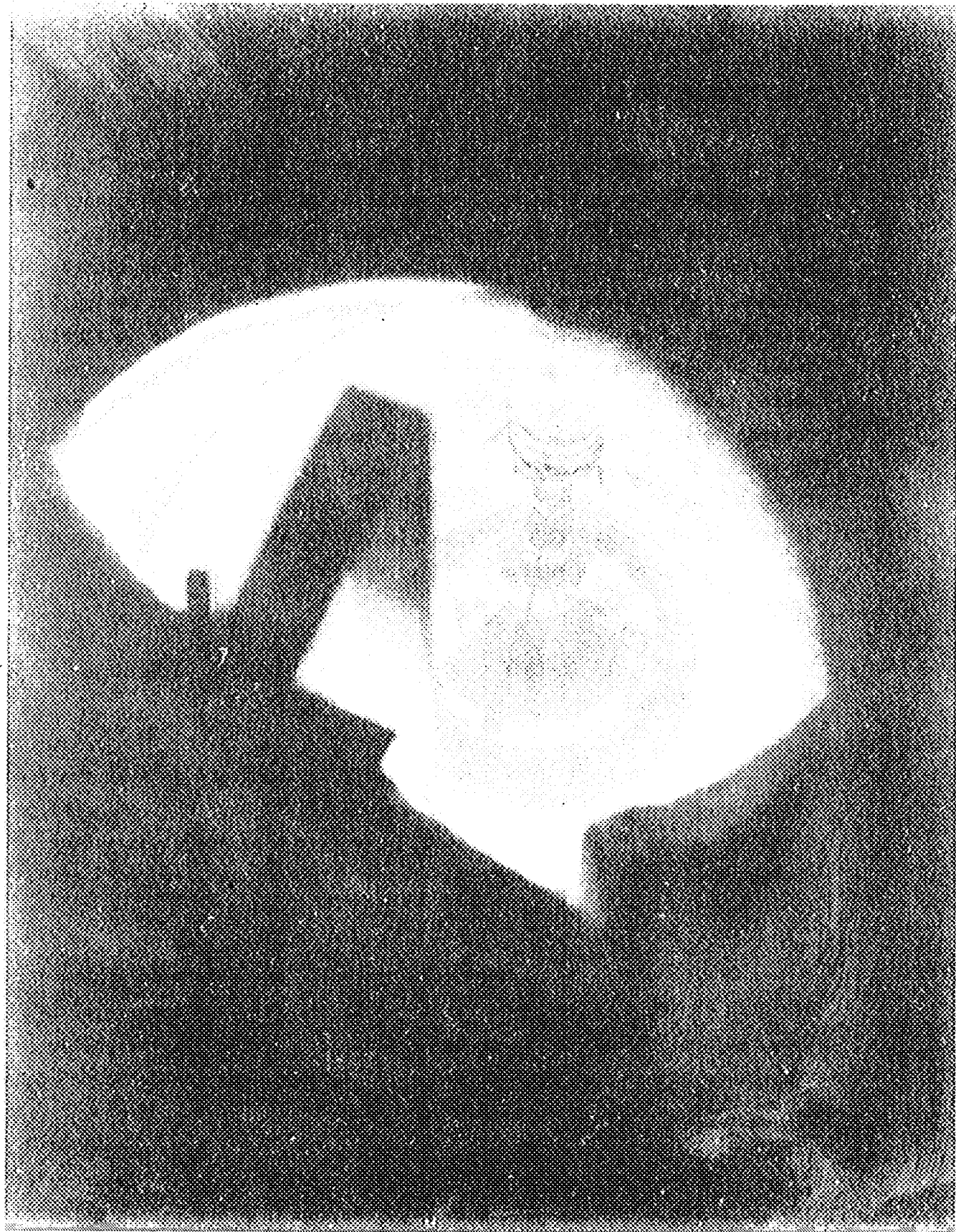


Photo 3 : Monocrystal de Niobate de Lithium  
en cours de croissance.

phénomènes de bifurcation entre deux situations de croissance stable. L'étude de cette bifurcation n'est pas envisagée ici.

### 3. APPLICATIONS DE LA MODELISATION DE LA METHODE :

Sous réserve du phénomène de bifurcation évoqué au paragraphe précédent, la modélisation de la méthode devrait être utile dans les cas suivants :

#### \* Amélioration d'un cristal déjà produit

Lorsque l'on sait fabriquer un cristal d'une certaine dimension, on essayera de le produire plus gros. Ceci pose le problème de revoir la géométrie du four et de recalculer les paramètres sur lesquels on peut caler les régulations. Notons que le passage en taille plus grande est difficile car il s'accompagne de problèmes quant à la qualité cristalline.

#### \* Elaboration d'un nouveau cristal

On peut extrapoler à partir d'un produit déjà connu mais la recherche des bonnes conditions devrait être accélérée par le programme.

#### \* Application à d'autres méthodes

L'étude faite pour la recherche de la forme de l'interface nécessite le traitement de la distribution de la température dans un solide avec des conditions aux limites variées : température donnée, rayonnement, etc... Ce travail peut donc s'adapter facilement à d'autres méthodes de croissance cristalline dérivant du principe de la solidification à partir de la fusion, (méthodes Bridgman, Kyropoulos, fusion de zone...).

\* Calcul de certaines constantes physiques

La mesure des constantes physiques comme l'émissivité, la conductivité thermique est souvent difficile à faire. Une modélisation en accord avec l'expérience peut permettre par itérations sur ces paramètres physiques d'en améliorer l'évaluation.



## CHAPITRE II

### FORMULATION MATHÉMATIQUE DE LA MÉTHODE CZOCHRALSKI APPROCHE DU PROBLÈME DE L'INTERFACE LIQUIDE-SOLIDE

---

- § 1. Les échanges thermiques
- § 2. Les différents processus d'écoulement de la chaleur dans la méthode Czochralski
- § 3. Le système d'équations gouvernant les échanges thermiques
- § 4. Le problème de l'interface liquide-solide
- § 5. Tableau des constantes physiques



Nous formulons dans ce chapitre le système d'équations aux dérivées partielles gouvernant les échanges thermiques dans la méthode Czochralski. Les conditions aux limites sont mixtes, de type Dirichlet (température donnée) et de type Neumann (échange de chaleur en surface). Ces dernières conditions sont non linéaires (rayonnement, convection).

Le problème global est complexe de par la variété des phénomènes interférant : convection naturelle et forcée dans le bain, convection gazeuse, rayonnement, surface libre liquide-solide, etc... Nous faisons donc des simplifications, en accord avec les expériences, et nous donnons un modèle de la méthode.

## 1. LES ECHANGES THERMIQUES :

Nous rappelons tout d'abord la forme des échanges de chaleur à la surface d'un corps chaud. Les formules nous seront nécessaires pour établir les conditions aux limites.

### 1.1. RAYONNEMENT ET CONVECTION :

Formulons d'abord les lois du rayonnement dans le cas de deux surfaces quelconques. (cf. [20] ).

Etant donnés deux éléments de surface  $dS_1$  et  $dS_2$ , d'émissivité  $\epsilon_1$  et  $\epsilon_2$ , portés aux températures absolues  $T_1$  et  $T_2$ , la quantité de chaleur rayonnée par  $dS_1$  sur  $dS_2$  par unité de temps s'écrit :

$$d Q_{12} = \epsilon_1 \epsilon_2 \sigma T_1^4 \frac{\cos \beta_1 \cdot \cos \beta_2}{\pi r^2} dS_1 dS_2$$

où :

$\beta_1$ ,  $\beta_2$ ,  $r$  sont définies sur la figure 5

$\sigma$  est la constante de Stefan  $\sigma = 5.675 \times 10^{-12} \text{ W/cm}^2 \cdot \text{K}^4$

$T_1$  et  $T_2$  sont en degré Kelvin

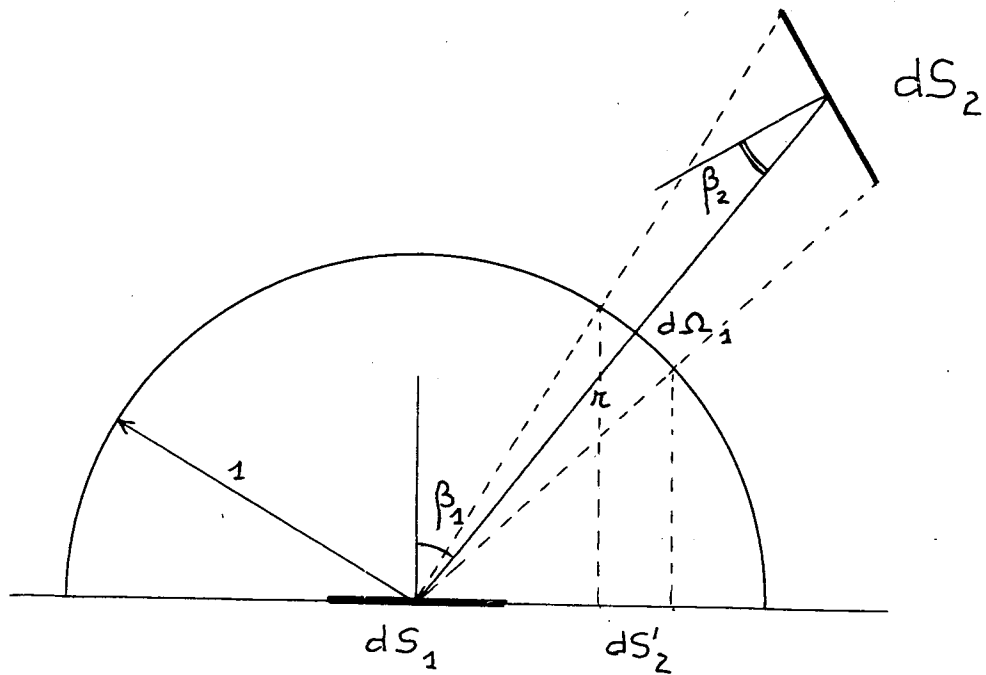


Figure 5

L'expression de  $dQ_{21}$  s'obtient par permutation et l'échange résultant sur  $dS_1$  s'écrit :

$$dQ = \epsilon_1 \epsilon_2 \sigma (T_1^4 - T_2^4) \frac{\cos \beta_1 \cos \beta_2}{\pi r^2} dS_1 dS_2$$

Pour un élément de surface  $dS_1$  en présence d'une surface finie  $S_2$  on fera évidemment la somme des échanges de chaleur. Précisons que pour le calcul de  $dQ$  il est commode d'introduire la quantité

$$dS'_2 = \frac{\cos \beta_1 \cos \beta_2}{r^2} dS_2$$

$dS'_2$  est représenté sur la figure 5.

La sommation sur les éléments  $dS_2$  est ainsi plus facile.

Pour la convection gazeuse, nous considérerons que les échanges sont de type convection *libre*. Si l'on désigne par  $T_a$  la température du gaz entourant l'objet chaud, on aura une quantité de chaleur dégagée par unité de temps :

$$dQ = \alpha(T - T_a)^{1.25} dS$$

où  $T$  est la température de l'élément  $dS$  et  $\alpha$  une constante positive connue.

Nous renvoyons au livre de L. Weil [20] pour un exposé détaillé des échanges thermiques par convection gazeuse.

## 1.2. CONDUCTION :

La propagation de la chaleur dans un milieu isotrope est régie par l'équation :

$$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \Delta T \quad (E)$$

où

$\rho$  masse spécifique

$C$  chaleur spécifique

$\lambda$  conductivité thermique.

Dans le cas d'un régime permanent l'équation (E) devient :

$$\Delta T = 0$$

## 2. LES DIFFERENTS PROCESSUS D'ECOULEMENT DE LA CHALEUR DANS LA METHODE CZOCHRALSKI :

Nous décrivons ici les différents écoulements de chaleur dans le cristal, dans le bain, et dans le gaz en mentionnant les hypothèses simplificatrices.

### 2.1. APPORT DE CHALEUR AU CREUSET :

Le creuset est chauffé par l'intermédiaire de résistances ou avec un montage haute-fréquence. *Sa température sera supposée ne pas varier.* Un système de régulation permet de la contrôler. La température du creuset sera donc donnée :

$$T = T_C$$

bien que l'on puisse envisager de prendre une répartition de température donnée sur le creuset.

### 2.2. TRANSPORT DE CHALEUR DANS LE BAIN :

Il dépend de la différence de température entre le creuset et la surface du bain. D'autre part nous avons vu (chapitre I, paragraphe 2 ) que le cristal et le creuset étaient animés de mouvements de rotation. Les mouvements dans le liquide sont donc de type convection naturelle et convection forcée. Néanmoins, dans une première approximation nous considérerons que l'écoulement de chaleur est seulement régi par la conduction. De plus les conditions d'expérience indiquent que l'on est en régime stationnaire. Enfin le bain est isotrope. L'équation d'état sera donc :

$$\Delta T = 0$$

### 2.3. DEGAGEMENT DE CHALEUR A LA SURFACE LIBRE DU BAIN :

Une partie du flux de chaleur atteignant la surface est cédée au milieu extérieur sous forme de rayonnement et de convection gazeuse. Par élément de surface et par unité de temps on aura :

$$dQ = dQ_{\text{ray}} + dQ_{\text{conv}}$$

Etant donnée la symétrie du problème on peut repérer l'élément de surface par sa distance  $r$  à l'axe  $Oz$ . En reprenant les formules exposées en 1.1. on obtient :

$$dQ_{\text{ray}}(r) = T^4(r) \mu_{\ell}(r) - \eta_{\ell}(r)$$

$\mu_{\ell}(r)$  et  $\eta_{\ell}(r)$  sont des fonctions positives obtenues en sommant sur tous les éléments  $dS_i$  que voit l'élément  $dS$  de la surface du bain. De même :

$$dQ_{\text{conv}}(r) = \alpha(T(r) - T_a)^{1.25}$$

Remarque :

Il est supposé que dans les conditions d'expériences la température des gaz ambiants est inférieure à celle du bain. Il en sera de même pour le cristal. Autrement dit le gaz refroidit l'ensemble liquide-solide.

### 2.4. DEGAGEMENT DE CHALEUR A L'INTERFACE :

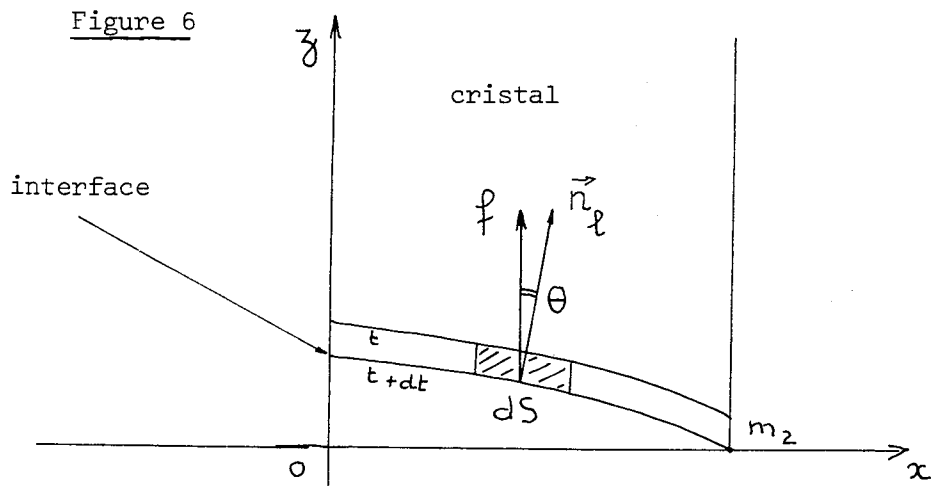
L'interface liquide-solide est une zone pâteuse de petite épaisseur ( $\sim 1\text{mm}$ ). La chaleur diffuse dans cette couche. Nous supposons que l'interface est l'isotherme de fusion. Nous ne prenons donc pas en compte des phénomènes de surfusion ou de croissance privilégiée qui

modifient la forme de l'interface par rapport à cet isotherme.

Le phénomène de solidification provoque un dégagement de chaleur à l'interface. Il est proportionnel à la chaleur latente de fusion  $L$  et au volume formé. Dans la croissance stable que l'on recherche la vitesse de cristallisation est égale en module à la vitesse de tirage  $f$ . Par unité de temps et pour un élément de surface  $dS$ , la chaleur dégagée par cristallisation est :

$$dQ_{\text{cristallisation}} = L \cdot f \cdot dS \cos \theta$$

où  $\theta$  est l'angle entre l'axe  $Oz$  et la normale à  $dS$ .



La quantité de chaleur reçue par le cristal sera donc égale à la quantité de chaleur perdue par le liquide augmentée de la chaleur de cristallisation.

**Remarque :**

Lorsque la croissance est stable, la vitesse de tirage est égale et opposée à la vitesse de cristallisation. Ceci suppose que le niveau du liquide reste à une hauteur constante par rapport au repère choisi. Le creuset est donc élevé pendant l'expérience ce qui modifie évidemment les échanges thermiques au bout de plusieurs heures.

**2.5. TRANSPORT DE CHALEUR DANS LE CRISTAL :**

Le cristal sera supposé isotrope. D'autre part, le cristal se déplaçant verticalement à la vitesse  $f$  il convient de modifier (E) donnée en 1.2. :

$$\rho_S C_S \frac{\partial T}{\partial t} + f \rho_S C_S \frac{\partial T}{\partial z} - \lambda_S \Delta T = 0$$

Cependant les résultats expérimentaux montrent que pour des vitesses de tirage moyennes de l'ordre de 5 à 10 cm/h et pour des diamètres de cristaux modérés (4 à 6 cm) on peut considérer simplement

$$\Delta T = 0$$

Pour de grandes vitesses de tirage et de gros diamètres il conviendrait de prendre en compte le terme  $f \rho_S C_S \frac{\partial T}{\partial z}$  ce qui numériquement ne pose pas de problème.

**2.6. DEGAGEMENT DE CHALEUR A LA SURFACE DU CRISTAL :**

Le processus est identique à 2.3. On peut repérer l'élément de surface  $dS$  par ses coordonnées  $(r, z)$  et écrire comme en 2.3. :

$$dQ_{\text{ray}}(r, z) = T^4(r, z) \mu_S(r, z) - \eta_S(r, z)$$

$$dQ_{\text{conv}}(r, z) = \alpha (T(r, z) - T_a)^{1.25}$$



Remarque :

Il est supposé que le rayonnement ne peut amener le cristal à une température supérieure au point de fusion. Ce sont des conditions d'expériences bien évidentes.

### 3. LE SYSTEME D'EQUATIONS GOUVERNANT LES ECHANGES THERMIQUES :

Le modèle est constitué par les conditions a), b), c), d) suivantes :

- a) Avec les hypothèses faites en 2.. l'équation d'état dans le liquide et le solide est :

$$\Delta T = 0$$

- b) Les conditions aux limites de type Dirichlet :

\* dans le liquide :

$$T = T_c \text{ sur les parois du creuset}$$

$$T = T_f \text{ à l'interface liquide-solide}$$

$T_f$  est la température de fusion.

\* dans le cristal :

$$T = T_f \text{ à l'interface liquide-solide.}$$

- c) Les conditions aux limites de type Neumann :

Elles seront obtenues en appliquant la loi de Fourier. La quantité de chaleur passant à travers l'élément de surface  $dS$  pendant l'unité de temps vaut :

$$dQ = - \lambda \frac{\partial T}{\partial n} dS \quad (\text{chaleur passant dans le sens de la normale}).$$

$\lambda$  est la conductivité thermique

$\frac{\partial T}{\partial n}$  le gradient thermique à la surface (la normale étant dirigée vers l'extérieur du volume considéré).

On obtient comme conditions :

\* dans le liquide :

$$-\lambda_{\ell} \frac{\partial T}{\partial n}(r) = \alpha(T(r)-T_a)^{1.25} + \mu_{\ell}(r)T^4(r) - \eta_{\ell}(r)$$

\* dans le cristal :

$$-\lambda_S \frac{\partial T}{\partial n}(r,z) = \alpha(T(r,z)-T_a)^{1.25} + \mu_S(r,z)T^4(z) - \eta_S(r,z)$$

d) Conditions d'interface :

L'interface étant l'isotherme de fusion on a :

$$T = T_f$$

$T_f$  = température de fusion

(f est relatif à fusion et non pas à la vitesse de tirage)

Mais il y a une discontinuité du gradient due au phénomène de cristallisation. En écrivant le bilan thermique expliqué en 2.4. nous obtenons une deuxième condition :

$$\lambda_S \frac{\partial T}{\partial n_S}(m) = -\lambda_{\ell} \frac{\partial T}{\partial n_{\ell}}(m) + f L \cos \theta(m)$$

m désigne le point courant de l'interface  $\theta(m)$  est représenté sur la figure 6 .  $\eta_S$  est la normale au cristal,  $\eta_{\ell}$  la normale au liquide.

e) Le système d'équations a), b), c), d) décrit ci-dessus est un problème de surface libre dépendant d'un paramètre f . Comme nous l'avons indiqué au chapitre I, la vitesse de tirage f au cours de la fabrication est telle que l'interface cristal-liquide passe par les points  $m_1$  et  $m_2$  comme indiqué sur les figures 3 et 4. Cette condition sur l'interface doit être incluse dans le modèle. Cette condition supplémentaire ferme le système. C'est la particularité du problème que d'avoir un paramètre auxiliaire f et une condition sur la surface libre.

#### 4. LE PROBLEME DE L'INTERFACE LIQUIDE-SOLIDE

La croissance que nous étudions est supposée stable. Nous simulons donc un régime quasi-stationnaire. L'interface évolue dans le temps à la vitesse  $f$  égale à la vitesse de tirage et ne subit pas de variations importantes. Nous cherchons quelle est la forme de cette interface. L'expérience se déroulant très lentement, la thermique de l'ensemble est supposée déterminée et indépendante du temps.

Pour résoudre a), b), c), d), e), nous avons été conduits (voir chapitre V) à un procédé itératif sur l'interface. Ce procédé exige à chaque étape la résolution d'un problème intermédiaire consistant en les équations a), b), c), d') ou d') est la condition suivante

$$d') \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{l'interface est donnée.} \\ \text{la température sur cette interface est donnée :} \\ T = T_f \end{array} \right.$$

Ce problème a), b), c), d') se décompose en deux problèmes aux limites :

- 1) le problème de la répartition de température dans le cristal
- 2) le problème de la répartition de température dans le bain.

Ces deux problèmes sont analogues et nous traiterons en détail la distribution de température dans le cristal. Ce problème peut se formuler de façon plus abstraite comme suit :

Soit  $\Omega$  un domaine borné régulier de  $\mathbb{R}^3$ ,  $\Gamma$  sa frontière,  $\Gamma_1$  une partie de la frontière (interface) et  $\Gamma_2 = \Gamma \setminus \Gamma_1$ . On cherche  $T$  tel que :

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta T = 0 \quad \text{sur} \quad \Omega \\ T|_{\Gamma_1} = T_f \\ -\lambda_S \frac{\partial T}{\partial n}|_{\Gamma_2} = \alpha(T-T_a)^{1.25} + \mu_S T^4 - \eta_S \end{array} \right.$$

où  $\mu_S$  et  $\eta_S$  sont des fonctions positives définies sur  $\Gamma_2$ .

En posant  $U = T - T_f$  nous nous ramenons à

$$P_I \left\{ \begin{array}{l} \Delta U = 0 \quad \text{sur} \quad \Omega \\ U|_{\Gamma_1} = 0 \\ -\lambda_S \frac{\partial U}{\partial n}|_{\Gamma_2} = \alpha(U+T_f-T_a)^{1.25} + \mu_S (U+T_f)^4 - \eta_S \end{array} \right.$$

L'étude théorique et numérique de ce problème fait l'objet des deux chapitres suivants.

Nous appellerons  $P_I$  ce problème pour rappeler qu'il dépend de l'interface  $I$  qui est donnée.

Tableau des constantes physiques

Symbole	Signification	Unité
$\epsilon$	émissivité	—
T	température	$^{\circ}\text{K}$
$\sigma$	constante de Stefan	$\text{W}/\text{cm}^2 \times ^{\circ}\text{K}$
$\rho$	masse spécifique	$\text{g}/\text{cm}^3$
C	chaleur spécifique	$\text{J}/\text{g} \times ^{\circ}\text{K}$
$\lambda$	conductivité thermique	$\text{W}/\text{cm} \times ^{\circ}\text{K}$
L	chaleur Latente	$\text{J}/\text{cm}^3$
f	vitesse de tirage	$\text{cm}/\text{s}$
$\alpha$	constante de convection	$\text{W}/\text{cm} \times ^{\circ}\text{K}^{5/4}$

### CHAPITRE III

#### RESOLUTION DU PROBLEME $P_I$ A INTERFACE DONNEE

---

- § 1. Le cadre fonctionnel
- § 2. Une nouvelle formulation pour le problème  $P_I$ .
- § 3. Existence et unicité d'une solution au problème  $P_I$ .  
Méthode de monotonie.
- § 4. Quelques résultats autour du principe du maximum.
- § 5. Comparaison entre la solution de  $P_I$  et la solution physique.
- § 6. Une méthode constructive de résolution de  $P_I$  par (dé)-croissance de (sur)-sous-solutions.
- § 7. Méthodes de point fixe et compacité.  
Extension de la classe des problèmes traités.

Nous étudions dans ce chapitre l'existence et l'unicité de la solution du problème  $P_I$  de la distribution de température dans le cristal et dans le bain, l'interface étant donnée.

Après avoir modifié au paragraphe 2 les conditions aux limites non linéaires, nous écrivons le problème  $P_I$  sous la forme :

$$\left\{ \begin{array}{l} -\Delta u = 0 \quad \text{sur } \Omega \\ u|_{\Gamma_1} = 0 \\ \frac{\partial u}{\partial n} + \varphi(u)|_{\Gamma_2} = 0 \end{array} \right. \quad \Gamma = \Gamma_1 \cup \Gamma_2$$

Le cas  $-\Delta u + \mu u$  avec  $\mu > 0$  est étudié dans R. Glowinski, J.L. Lions et R. Trémolières [9] par des techniques d'optimisation. On trouvera dans G. Duvaut-J.L. Lions [8] une démonstration de l'existence dans le cas  $\mu = 0$ . Nous traitons ce dernier cas par d'autres méthodes.

Nous donnons au paragraphe 3 un premier résultat d'existence et d'unicité par une méthode de monotonie. La comparaison avec la solution du problème physique initial est établie au paragraphe 5 par le principe du maximum.

Pour cela nous avons développé au paragraphe 4 quelques propriétés relatives au principe du maximum. Certains résultats dus à G. Stampacchia [18] sont repris avec toutefois des variantes dans les démonstrations. Le résultat essentiel concerne la dérivation des fonctions  $\alpha_\circ u$  avec  $u \in H^1(\Omega)$  et  $\alpha$  Lipschitzienne dans  $\mathbb{R}$ .

Au paragraphe 6 nous donnons un deuxième résultat d'existence et d'unicité utilisant la notion de sous-solution et de sur-solution et la croissance de l'opérateur d'itération. Un algorithme de calcul numérique en

sera déduit au chapitre IV. La démonstration de la convergence de cette méthode itérative permet de justifier la linéarisation du rayonnement faite habituellement par les physiciens.

Enfin, nous étendons au paragraphe 7 la classe des problèmes non linéaires traités, nous donnons deux autres théorèmes d'existence utilisant les théorèmes de point fixe de J. Schauder [17] et H. Schaefer [16] .



## 1. LE CADRE FONCTIONNEL :

### 1.1. ESPACES DE SOBOLEV. NOTATIONS

Soit  $\Omega$  un ouvert borné de  $\mathbb{R}^n$ . Etant donné un multi-indice  $\alpha = [\alpha_1, \dots, \alpha_n] \in \mathbb{N}^n$  on pose :

$$|\alpha| = \sum_{i=1}^n \alpha_i \qquad D_\alpha = \frac{\partial^{|\alpha|}}{\partial x_1^{\alpha_1} \dots \partial x_n^{\alpha_n}}$$

L'espace de Sobolev  $H^m(\Omega)$  est l'ensemble de toutes les fonctions  $\varphi \in L^2(\Omega)$  dont les dérivées partielles au sens des distributions  $D_\alpha \varphi$  sont dans  $L^2(\Omega)$ , ( $|\alpha| \leq m$ ).

Le produit scalaire dans  $L^2(\Omega)$  sera noté  $(\cdot, \cdot)_{L^2(\Omega)}$   
Muni de la norme

$$\|\varphi\|_{H^m(\Omega)} = \left( \sum_{|\alpha| \leq m} (D_\alpha \varphi, D_\alpha \varphi)_{L^2(\Omega)} \right)^{1/2}$$

l'espace  $H^m(\Omega)$  est un espace de Hilbert.

$\mathcal{D}(\bar{\Omega})$  est l'espace des fonctions de  $\mathcal{C}^\infty(\Omega)$  qui se prolongent continument ainsi que leurs dérivées de tous ordres à  $\bar{\Omega}$ .

Nous supposerons l'ouvert  $\Omega$  suffisamment régulier pour assurer la validité des résultats classiques que nous utiliserons (densité de  $\mathcal{D}(\bar{\Omega})$  dans  $H^1(\Omega)$ , théorèmes des traces...)

La frontière de  $\Omega$  sera notée  $\Gamma$  et munie de la mesure superficielle  $d\sigma$ .

### 1.2. TRACE SUR $\Gamma$ . FORMULE DE GREEN :

Pour tout  $u \in \mathcal{C}^1(\bar{\Omega})$  la trace sur  $\Gamma$  est la restriction de  $u$  à  $\Gamma$  . Soit  $\gamma_0$  l'opérateur

$$u \rightarrow u|_{\Gamma}$$

Cet opérateur s'étend à  $H^1(\Omega)$  en un opérateur linéaire continu et surjectif sur  $H^{1/2}(\Gamma)$ . (voir [12] , pour la définition des espaces  $H^s(\Gamma)$ ).

Pour  $u \in \mathcal{C}^2(\bar{\Omega})$  l'opérateur  $\gamma_1 : u \rightarrow \frac{\partial u}{\partial n}$  associe à  $u$  sa dérivée normale à  $\Gamma$  .

On montre que  $\gamma_1$  peut être étendu en un opérateur linéaire et continu de l'espace  $H^1(\Omega, \Delta) = \{v \in H^1(\Omega) \mid \Delta v \in L^2(\Omega)\}$  dans  $H^{-1/2}(\Gamma)$ .

La formule de Green pour  $u \in \mathcal{C}^1(\bar{\Omega})$  et  $v \in \mathcal{C}^2(\bar{\Omega})$  s'écrit :

$$\int_{\Omega} \sum_{i=1}^n \frac{\partial v}{\partial x_i} \frac{\partial u}{\partial x_i} = - \int_{\Omega} \Delta v u \, dx + \int_{\Gamma} \frac{\partial v}{\partial n} u \, d\sigma$$

En introduisant la dualité  $\langle \cdot, \cdot \rangle_{H^{-1/2}(\Gamma) \times H^{1/2}(\Gamma)}$  qui étend naturellement le produit scalaire sur  $L^2(\Gamma)$  , la formule de Green s'écrit encore pour  $u \in H^1(\Omega)$  et  $v \in H^1(\Omega, \Delta)$  :

$$(\nabla u, \nabla v)_{L^2(\Omega)} = -(\Delta v, u)_{L^2(\Omega)} + \langle \gamma_1 v, \gamma_0 u \rangle_{H^{-1/2}(\Gamma) \times H^{1/2}(\Gamma)}$$

### 1.3. TRACE SUR UNE PARTIE $\Gamma_1$ DE $\Gamma$ :

Soit  $\Gamma_1$  un ouvert régulier de  $\Gamma$  de mesure non nulle. Pour  $h \in L^2(\Gamma)$  , on désignera par  $\Sigma_1 h$  la fonction de  $L^2(\Gamma)$  égale à  $h$  sur  $\Gamma_1$  et 0 ailleurs.

Soit  $j$  l'injection de  $H^{1/2}(\Gamma)$  dans  $L^2(\Gamma)$ . On montre que  $\Sigma_1 \circ j$  est à valeurs dans  $H^{1/2}(\Gamma)$  et que le projecteur  $\sigma_1$  ainsi obtenu est continu (voir [1]).

On notera  $\sigma_2 = 1 - \sigma_1$ .

Enonçons maintenant une inégalité qui servira constamment dans les démonstrations :

#### 1.4. INEGALITE DE FRIEDRICHS [13] :

Soit  $\Gamma_1$  une partie de la frontière  $\Gamma$  de  $\Omega$  telle que  $\text{mes}(\Gamma_1) \neq 0$ . Pour  $u \in H^1(\Omega)$  on a :

$$\|u\|_{H^1(\Omega)} \leq \text{cste} \times \left( \int_{\Gamma_1} |\gamma_0 u|^2 d\sigma + \int_{\Omega} |\nabla u|^2 dx \right)^{1/2}$$

Pour traiter la non-linéarité de notre problème nous utiliserons des résultats sur les opérateurs monotones. Dans la suite nous désignerons par  $W^*$  le dual d'un espace de Banach  $W$ . On désignera par  $\langle \dots \rangle_{W^* \times W}$  la dualité entre  $W$  et  $W^*$ .

Enfin  $\sigma^*$  désignera l'adjoint d'un opérateur  $\sigma$ .

#### 1.5. DEFINITION D'UN OPERATEUR MONOTONE :

On dit qu'un opérateur  $A$  défini sur  $W$  à valeurs dans  $W^*$  est monotone si :

$$\forall w_1, w_2 \in W \quad \langle Aw_1 - Aw_2, w_1 - w_2 \rangle_{W^* \times W} \geq 0$$

1.6. DEFINITION DE L'HEMICONTINUITE :

L'opérateur monotone  $A$  est hémicontinu si

$$\forall w_1, w_2, w_3 \in W \quad \lambda \rightarrow \langle A(w_1 + \lambda w_2), w_3 \rangle_{W^* \times W}$$

est une application continue sur  $\mathbb{R}$ .

Citons maintenant un théorème de surjectivité des opérateurs monotones :

1.7. THEOREME [3] :

Soit  $W$  un espace de Banach réflexif . Soit  $A$  un opérateur de  $W$  dans  $W^*$  ayant les propriétés suivantes :

- i)  $A$  est monotone
- ii)  $A$  est hémicontinu
- iii)  $\lim_{\|v\| \rightarrow \infty} \frac{\langle Av, v \rangle_{W^* \times W}}{\|v\|} = +\infty$

Alors  $A$  est surjectif de  $W$  sur  $W^*$

Nous déduirons de ce théorème l'existence et l'unicité d'une solution au problème  $P_I$  dans le paragraphe 3.

## 2. UNE NOUVELLE FORMULATION POUR LE PROBLEME $P_I$ :

Nous plaçons le problème physique initial dans une classe de problèmes non linéaires de façon à utiliser la théorie des opérateurs monotones.

### 2.1. MODIFICATION DE LA CONDITION NON LINEAIRE SUR $\Gamma_2$ :

Si  $m$  représente le point courant sur  $\Gamma_2$  nous avons vu que cette condition s'écrivait :

$$-\frac{\partial u}{\partial n}(m) = \frac{1}{\lambda_S} \{ \alpha(u(m)+T_f-u_a)^{1.25} + \mu_S(m)(u(m)+T_f)^4 - \eta_S(m) \}$$

Posons pour  $x \geq u_a - T_f$  et  $m \in \Gamma_2$

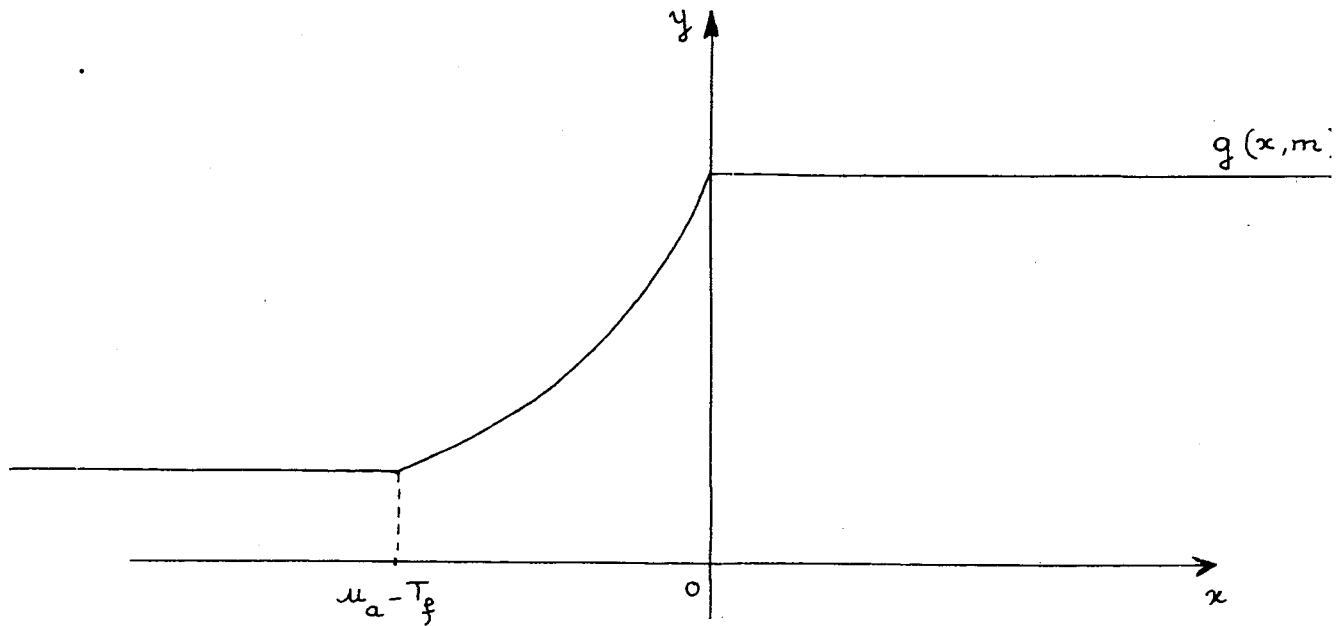
$$f(x,m) = \frac{1}{\lambda_S} \{ \alpha(x+T_f-u_a)^{1.25} + \mu_S(m)(x+T_f)^4 - \eta_S(m) \}$$

Rappelons que  $\mu_S(m)$  et  $\eta_S(m)$  sont des fonctions positives,  $u_a$  et  $T_f$  des nombres positifs avec  $T_f > u_a$ .

La fonction  $x \rightarrow f(x,m)$  est croissante pour tout  $m \in \Gamma_2$ .

Posons alors :

$$g(x,m) = \begin{cases} f(x,m) & [x \in u_a - T_f, 0] \\ f(u_a - T_f, m) & x < u_a - T_f \\ f(0, m) & x > 0 \end{cases}$$



Le prolongement en dehors de l'intervalle  $[u_{a-T_f}, 0]$  est choisi pour avoir une fonction monotone et bornée sur  $\mathbb{R}$ .

Enfin étendons encore cette fonction à tout  $\mathbb{R} \times \Gamma$  en prenant 0 sur  $\mathbb{R} \times \Gamma \setminus \Gamma_2$

## 2.2. L'OPERATEUR $\varphi$ DE $L^2(\Gamma)$ DANS $L^2(\Gamma)$ ASSOCIE A $g$ :

On définit  $\varphi : L^2(\Gamma) \rightarrow L^2(\Gamma)$  par :

$$\varphi(u)(m) = g(u(m), m) \quad \text{p.t.m. } \in \Gamma$$

### 2.2.1. Proposition :

$\varphi$  est un opérateur monotone et Lipschitzien de  $L^2(\Gamma)$  dans  $L^2(\Gamma)$ . De plus  $\varphi(L^2(\Gamma))$  est borné.

Démonstration :

Il est clair que si  $u \in L^2(\Gamma)$   $\varphi(u) \in L^\infty(\Gamma)$  car  $\mu_S$  et  $\eta_S \in L^\infty(\Gamma_2)$  et puisque  $g$  est bornée,  $\varphi(L^2(\Gamma))$  est borné. On a :

$$|g(u,m)-g(v,m)| \leq C_g |u-v| \quad \text{sur } \mathbb{R} \times \Gamma$$

et donc :

$$\|\varphi(u)-\varphi(v)\|_{L^2(\Gamma)} \leq C_g \|u-v\|_{L^2(\Gamma)}$$

La monotonie de  $\varphi$  découle trivialement du fait que  $g(u,m)$  est croissante par rapport à  $u$  pour tout  $m$  fixé.

— x —

Nous allons maintenant donner une formulation nouvelle pour le problème  $P_I$  en le situant dans

### 2.3. UNE CLASSE DE PROBLEMES MIXTES NON LINEAIRES :

La condition sur  $\Gamma_2$  s'écrit maintenant avec l'opérateur  $\varphi$  :

$$-\frac{\partial u}{\partial n}(m) = \varphi(u)(m) \quad \text{pour } m \in \Gamma_2$$

Les hypothèses expérimentales soulignées au chapitre II en 2.3. et 2.5. se traduisent sur  $\varphi$  par les conditions suivantes :

- a)  $\varphi(0) \geq 0$
- b)  $\varphi(u_a - T_f) \leq 0$

La positivité est prise au sens de presque partout sur  $\Gamma$  .  
Avec les notations introduites au paragraphe 1, le problème se met sous la forme plus générale suivante :

Trouver  $u \in H^1(\Omega, \Delta)$  vérifiant :

$$P_M \begin{cases} -\Delta u = 0 \\ \sigma_1 \gamma_0 u = 0 \\ \sigma_2^* (\gamma_1 u + \varphi(\gamma_0 u)) = 0 \end{cases}$$

où  $\varphi$  est un opérateur monotone de  $L^2(\Gamma)$  dans  $L^2(\Gamma)$  et  $\sigma_2^*$  l'opérateur adjoint de  $\sigma_2 = 1 - \sigma_1$  défini sur  $H^{-1/2}(\Gamma)$  .

Les résultats d'existence et d'unicité qui vont maintenant être démontrés sont valables pour cette classe de problèmes.

### 3. EXISTENCE ET UNICITE D'UNE SOLUTION AU PROBLEME $P_I$ . METHODE DE MONOTONIE.

Ce paragraphe repose essentiellement sur le théorème de surjectivité énoncé en 1.7. Nous mettons le problème  $P_M$  sous la forme d'une équation fonctionnelle  $Au = h$  définie dans un espace de trace.

#### 3.1. PRELIMINAIRES :

Soit  $t \in H^{-1/2}(\Gamma)$  . On considère son relèvement  $u_t$  dans  $H^1(\Omega)$  défini par :

$$\begin{cases} -\Delta u_t = 0 \\ \gamma_0 u_t = t \end{cases}$$



Notons  $R$  l'opérateur  $t \rightarrow u_t$

$R$  est un isomorphisme de  $H^{1/2}(\Gamma)$  sur  $\{u \in H^1(\Omega) \mid \Delta u = 0\}$   
(cf. par exemple [12]). Il existe en particulier  $C > 0$  tel que

$$\forall t \in H^{1/2}(\Gamma) \quad \|t\|_{H^{1/2}(\Gamma)} \leq C \|Rt\|_{H^1(\Omega)}$$

Cette inégalité sera utile pour montrer la coercivité de l'opérateur  $A$  que nous définirons après avoir considéré les deux points suivants :

- a)  $R$  étant à valeurs dans  $H^1(\Omega, \Delta)$ , l'opérateur  $T$  de  $H^{1/2}(\Gamma)$  dans  $H^{-1/2}(\Gamma)$  défini par :

$$T(t) = \gamma_1 R(t) + \varphi(t)$$

a un sens.

- b) Soit  $W = \{t \in H^{1/2}(\Gamma) \mid \sigma_1 t = 0\}$

$W$  est un sous-espace fermé de  $H^{1/2}(\Gamma)$  puisque c'est le noyau de  $\sigma_1$ .  $W$  est donc un espace de Hilbert lorsqu'on le munit de la norme induite.

Soit  $i$  l'injection de  $W$  dans  $H^{1/2}(\Gamma)$  et  $i^*$  son adjointe.

### 3.2. DEFINITION DE $A$ :

$A$  est un opérateur de  $W$  dans  $W^*$  défini par

$$A(t) = (i^* \sigma_2^* T i)t$$

Afin de simplifier l'écriture nous noterons  $\langle \cdot, \cdot \rangle_W$  (respectivement  $\langle \cdot, \cdot \rangle_\Gamma$ ) la dualité entre  $W$  et  $W^*$  (respectivement  $H^{1/2}(\Gamma)$  et  $H^{-1/2}(\Gamma)$ ).

Remarquons que pour  $g_1$  et  $g_2$  dans  $W$  nous avons

$$\langle Ag_1, g_2 \rangle_W = \langle i^* \sigma_2^* T i g_1, g_2 \rangle_W = \langle T i g_1, \sigma_2 i g_2 \rangle_\Gamma$$

Comme  $g_2 \in W$  nous obtenons :

$$\langle Ag_1, g_2 \rangle_W = \langle T i g_1, i g_2 \rangle_\Gamma = \langle T g_1, g_2 \rangle_\Gamma$$

Pour appliquer le théorème 1.7. il nous reste à prouver que l'opérateur  $A$  possède les bonnes propriétés de monotonie ce qui est démontré dans la proposition suivante.

### 3.3. PROPOSITION :

*A est un opérateur monotone, coercif hémicontinu et borné de  $W$  dans  $W^*$ .*

Démonstration :

Soient  $g_1$  et  $g_2$  dans  $W$

$$\begin{aligned} \langle Ag_1 - Ag_2, g_1 - g_2 \rangle_W &= \langle T g_1 - T g_2, g_1 - g_2 \rangle_\Gamma \\ &= \langle \gamma_1^R(g_1 - g_2) + \varphi(g_1) - \varphi(g_2), g_1 - g_2 \rangle_\Gamma \end{aligned}$$

La formule de Green nous donne :

$$\begin{aligned} \langle \gamma_1 R(g_1 - g_2), \gamma_0 R(g_1 - g_2) \rangle_\Gamma &= (\nabla R(g_1 - g_2), \nabla R(g_1 - g_2))_{L^2(\Omega)} + \\ & (\Delta R(g_1 - g_2), R(g_1 - g_2))_{L^2(\Omega)} \end{aligned}$$

Par définition de  $R$ ,  $\Delta R(g_1 - g_2) = 0$  et avec la monotonie de  $\varphi$  nous obtenons :

$$\begin{aligned} \langle Ag_1 - Ag_2, g_1 - g_2 \rangle_W &= (\nabla R(g_1 - g_2), \nabla R(g_1 - g_2))_{L^2(\Omega)} + \langle \varphi(g_1) - \varphi(g_2), g_1 - g_2 \rangle_\Gamma \\ &\geq \|\nabla R(g_1 - g_2)\|_{L^2(\Omega)}^2 \geq 0 \end{aligned}$$

Ceci démontre la monotonie de  $A$ . Nous avons en fait mieux en utilisant l'inégalité de Friedrichs donnée en 1.4. :

$g_1 - g_2$  est nul sur  $\Gamma_1$  puisque c'est un élément de  $W$ .  
Nous avons donc :

$$\langle Ag_1 - Ag_2, g_1 - g_2 \rangle_W \geq C' \|R(g_1 - g_2)\|_{H^1(\Omega)}^2 \quad C' > 0$$

Avec l'inégalité donnée en 3.1. nous obtenons :

$$\langle Ag_1 - Ag_2, g_1 - g_2 \rangle_W \geq C'' \|g_1 - g_2\|_{H^{1/2}(\Gamma)}^2 \quad C'' > 0$$

$A$  est donc coercif.

L'opérateur  $\varphi$  étant Lipschitzien,  $T$  est Lipschitzien et donc  $A$  également ; il transforme donc les bornés en bornés. L'hémicontinuité de  $A$  résulte directement de la continuité de  $\varphi$ .

— X —

### 3.6. THEOREME

Le problème  $P_M$  admet une solution et une seule.

**Démonstration**

En application du théorème 1.7. nous savons qu'il existe une solution  $t \in W$  telle que  $A(t) = 0$ .

Cette solution est unique à cause de la stricte monotonie de  $A$ . Considérons  $R(t)$ ; on a  $R(t) \in H^1(\Omega, \Delta)$ ,

$$\begin{cases} -\Delta R(t) = 0 \\ \sigma_1 \gamma_0 R(t) = \sigma_1 t = 0 \end{cases}$$

Enfin l'équation  $A(t) = 0$  est équivalente à :

$$\forall w \in W \quad \langle A(t), w \rangle_W = 0$$

Ce qui donne avec l'expression de  $A$

$$\forall w \in W \quad \langle i^* \sigma_2^* T i(t), w \rangle_W = 0$$

Soit

$$\forall w \in W \quad \langle \gamma_1 R(t) + \varphi(\gamma_0 R(t)), \sigma_2 w \rangle_\Gamma = 0$$

et donc puisque  $\sigma_2^2 = \sigma_2$

$$\text{on a } \sigma_2^*(\gamma_1 R(t) + \varphi(\gamma_0 R(t))) = 0$$

Par conséquent  $R(t)$  est solution de  $P_M$  et l'existence est démontrée.

Remarquons que si  $u$  est solution de  $P_M$ , alors  $\gamma_0 u \in W$  et vérifie  $A(\gamma_0 u) = 0$ .

Soient  $u_1$  et  $u_2$  deux solutions de  $P_M$ . Les traces  $\gamma_0 u_1$  et  $\gamma_0 u_2$  étant solutions de  $A(t) = 0$ , elles sont égales.  $u_1$  et  $u_2$  vérifiant donc :

$$\begin{cases} -\Delta(u_1 - u_2) = 0 \\ \gamma_0(u_1 - u_2) = 0 \end{cases}$$

on a  $u_1 = u_2$  et l'unicité est démontrée.

~~X~~

Remarque :

Le théorème précédent donne l'existence et l'unicité d'une solution à tout problème de la forme  $P_M$  donnée en 2.3., en particulier  $P_I$ .

Énonçons maintenant la formulation variationnelle du problème  $P_M$  :

### 3.7. PROPOSITION

Soit  $H_{\Gamma_1}^1(\Omega) = \{u \in H^1(\Omega) \mid \sigma_1 \gamma_0 u = 0\}$

$u$  est solution de  $P_M$  si et seulement si

$u \in H_{\Gamma_1}^1(\Omega)$  et vérifie :

$$\forall v \in H_{\Gamma_1}^1(\Omega) \quad (\nabla u, \nabla v)_{L^2(\Omega)} + \langle \varphi(\gamma_0 u), \gamma_0 v \rangle_{\Gamma} = 0$$

Démonstration :

$u$  est solution de  $P_M$  si et seulement si

$$(\Delta u = 0, \sigma_1 \gamma_0 u = 0, \sigma_2^*(\gamma_1 u + \varphi(\gamma_0 u)) = 0)$$

$\Leftrightarrow$

$$\begin{cases} u \in H_{\Gamma_1}^1(\Omega) & , \quad \Delta u = 0 \\ \forall t \in H^{1/2}(\Gamma) \text{ tel que } \sigma_1 t = 0 & \langle \gamma_1 u + \varphi(\gamma_0 u), t \rangle_{\Gamma} = 0 \end{cases}$$

Avec la surjectivité de  $\gamma_0$  ceci est équivalent à :

$$\begin{cases} u \in H_{\Gamma_1}^1(\Omega) & , \quad \Delta u = 0 \\ \forall v \in H_{\Gamma_1}^1(\Omega) & \langle \gamma_1 u + \varphi(\gamma_0 u), \gamma_0 v \rangle_{\Gamma} = 0 \end{cases}$$

Avec la formule de Green ceci est équivalent à :

$$\begin{cases} u \in H_{\Gamma_1}^1(\Omega) & , \quad \Delta u = 0 \\ \forall v \in H_{\Gamma_1}^1(\Omega) & (\nabla u, \nabla v)_{L^2(\Omega)} + (\Delta u, v)_{L^2(\Omega)} + \langle \varphi(\gamma_0 u), \gamma_0 v \rangle_{\Gamma} = 0 \end{cases}$$

$\Rightarrow$

$$\begin{cases} u \in H_{\Gamma_1}^1(\Omega) \\ \forall v \in H_{\Gamma_1}^1(\Omega) & (\nabla u, \nabla v)_{L^2(\Omega)} + \langle \varphi(\gamma_0 u), \gamma_0 v \rangle_{\Gamma} = 0 \end{cases}$$

La réciproque de cette dernière implication se montre en prenant  $v \in \mathcal{D}(\Omega)$

Nous avons  $(\nabla u, \nabla v)_{L^2(\Omega)} = 0 \quad \forall v \in \mathcal{D}(\Omega)$

D'où  $(-\Delta u, v)_{L^2(\Omega)} = 0 \quad \forall v \in \mathcal{D}(\Omega)$

ce qui signifie que  $\Delta u$  est nul au sens des distributions.

Nous montrerons dans le paragraphe 5 le rapport entre la solution du problème modifié  $P_I$  et le problème physique initial. Nous verrons que la solution  $u$  de  $P_I$  est à valeurs dans l'intervalle  $[u_a - T_f, 0]$  et que  $u + T_f$  est donc solution du problème physique.

Les démonstrations reposent sur le *principe du maximum*. Afin que celles-ci soient clairement justifiées nous avons réuni dans le paragraphe suivant :

#### 4. QUELQUES RESULTATS AUTOUR DU PRINCIPE DU MAXIMUM.

##### 4.1. DEFINITION :

Soit  $u \in H^1(\Omega)$ . On définit l'application  $u^+$  de  $\Omega$  dans  $\mathbb{R}$  par :

$$u^+(x) = \text{Sup}(u(x), 0) \quad \text{p.t. } x \in \Omega$$

On posera :

$$u^- = u^+ - u$$

##### 4.2. REMARQUE

Considérons la fonction  $\alpha : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  définie par

$$\alpha(t) = \begin{cases} t & t > 0 \\ 0 & t \leq 0 \end{cases}$$

Nous avons  $u^+ = \alpha \circ u$

$\alpha$  est Lipschitzienne de constante 1, vérifie  $\alpha(0) = 0$

$\alpha' \in L^\infty(\mathbb{R})$  et  $|\alpha'|_\infty \leq 1$ .

Nous étudierons de façon plus générale les fonctions  $\alpha \circ u$  où  $\alpha$  est Lipschitzienne de constante  $K$  et vérifie  $\alpha(0) = 0$ .

Les démonstrations se font par régularisation à partir du lemme suivant :

#### 4.3. LEMME :

Soit  $\alpha \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R})$ , tel que  $|\alpha'|_\infty < K$  et  $\alpha(0) = 0$

Si  $u \in H^1(\Omega)$  alors :

i)  $\alpha \circ u \in H^1(\Omega)$

ii)  $\|\alpha \circ u\|_{H^1(\Omega)} \leq K \|u\|_{H^1(\Omega)}$

#### Démonstration

$\mathcal{D}(\bar{\Omega})$  est dense dans  $H^1(\Omega)$ . Soit  $u_m \in \mathcal{D}(\bar{\Omega})$  tel que

$u_m \xrightarrow{H^1(\Omega)} u$ . Cette suite vérifie :

a)  $\alpha \circ u_m \in \mathcal{D}(\bar{\Omega})$  car  $\alpha \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R})$ . De plus :

$$D_i \alpha \circ u_m = \alpha' \circ u_m D_i u_m$$



$$\begin{aligned}
 \text{b) } \|\alpha \circ u_m\|_{H^1(\Omega)}^2 &= \int_{\Omega} |\alpha(u_m(x)) - \alpha(0)|^2 dx + \sum_{|i|=1} \int_{\Omega} |\alpha'(u_m(x)) D_i u_m(x)|^2 dx \\
 &\leq K^2 \int_{\Omega} |u_m(x)|^2 dx + K^2 \sum_{|i|=1} \int_{\Omega} |D_i u_m(x)|^2 dx
 \end{aligned}$$

D'où

$$\|\alpha \circ u_m\|_{H^1(\Omega)} \leq K \|u_m\|_{H^1(\Omega)} \quad (1)$$

Passons à la limite sur  $m$ .

La suite  $u_m$  étant convergente dans  $H^1(\Omega)$  le membre de droite converge vers  $K \|u\|_{H^1(\Omega)}$ . Donc la suite  $\alpha \circ u_m$  est bornée dans  $H^1(\Omega)$ , nous pouvons en extraire une sous-suite  $\alpha \circ u_{m'}$ , qui converge faiblement vers  $\beta$  dans  $H^1(\Omega)$ . L'injection de  $H^1(\Omega)$  dans  $L^2(\Omega)$  étant compacte, il existe une sous-suite  $\alpha \circ u_{m''}$ , qui converge dans  $L^2(\Omega)$  fort vers  $\beta$ . Nous avons d'autre part :

$$\|\alpha \circ u_m - \alpha \circ u\|_{L^2(\Omega)}^2 = \int_{\Omega} |\alpha(u_m(x)) - \alpha(u(x))|^2 dx \leq K^2 \|u_m - u\|_{L^2(\Omega)}^2$$

La suite  $\alpha \circ u_m$  converge donc dans  $L^2(\Omega)$  fort vers  $\alpha \circ u$ . En conséquence  $\beta = \alpha \circ u$  et  $\alpha \circ u \in H^1(\Omega)$ .

Utilisons la semi-continuité inférieure faible de la norme et passons à la limite dans (1) :

$$\|\alpha \circ u\|_{H^1(\Omega)} \leq \underline{\lim} \|\alpha \circ u_m\|_{H^1(\Omega)} \leq K \underline{\lim} \|u_m\|_{H^1(\Omega)} = K \|u\|_{H^1(\Omega)}$$

Le lemme est démontré.

— x —

Nous pouvons énoncer une première proposition.

4.4. PROPOSITION

Soit  $\alpha$  une fonction de  $\mathbb{R}$  dans  $\mathbb{R}$ , Lipschitzienne de constante  $K$ , telle que  $\alpha(0) = 0$

Si  $u \in H^1(\Omega)$  alors :

i)  $\alpha \circ u \in H^1(\Omega)$

ii)  $\|\alpha \circ u\|_{H^1(\Omega)} \leq K \|u\|_{H^1(\Omega)}$

Démonstration

Elle se fait par régularisation à partir du lemme 4.3.

Soit  $\rho_n$  une suite régularisante (voir par exemple [19]).

Posons :

$$\alpha_n(t) = (\rho_n * \alpha)(t) - (\rho_n * \alpha)(0)$$

Les fonctions  $\alpha_n$  définies de  $\mathbb{R}$  dans  $\mathbb{R}$  sont dans  $\mathcal{C}^\infty(\mathbb{R})$ . et convergent uniformément sur  $\mathbb{R}$  vers  $\alpha$ . On vérifie aisément que  $\alpha_n$  est Lipschitzienne de constante  $K$  et  $\alpha_n(0) = 0$ .

D'après le lemme 4.3., la suite  $\alpha_n \circ u$  est bornée dans  $H^1(\Omega)$ . Par injection compacte de  $H^1(\Omega)$  dans  $L^2(\Omega)$  il existe une sous-suite  $\alpha_{n'} \circ u$  qui converge dans  $L^2(\Omega)$  fort vers  $\beta$  et  $\beta \in H^1(\Omega)$ .

D'autre part  $\alpha_0 u \in L^2(\Omega)$  et :

$$\|\alpha_{n'} \circ u - \alpha_0 u\|_{L^2(\Omega)}^2 = \int_{\Omega} |\alpha_{n'}(u(x)) - \alpha(u(x))|^2 dx \leq (\text{mes } \Omega)^2 |\alpha_{n'} - \alpha|_{\infty}^2$$

$\Omega$  étant borné, la convergence uniforme de  $\alpha_{n'}$  vers  $\alpha$  implique que  $\alpha_0 u = \beta$ . Donc  $\alpha_0 u \in H^1(\Omega)$  et le point i) est démontré.

L'inégalité ii) se montre comme dans 4.3. en passant à la limite

$$\|\alpha_0 u\|_{H^1(\Omega)} \leq \liminf \|\alpha_{n'} \circ u\|_{H^1(\Omega)} \leq K \|u\|_{H^1(\Omega)} .$$

La proposition suivante est relative à la dérivation de  $\alpha_o u$ .  
Donnons tout d'abord un lemme :

4.5. LEMME

Soit  $\alpha \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R})$  tel que  $|\alpha'|_\infty \leq K$  et  $\alpha(0) = 0$   
Si  $u \in H^1(\Omega)$  nous avons :

$$D_i(\alpha_o u) = \alpha'_o u \cdot D_i u$$

Démonstration :

Il existe une suite  $u_m \in \mathcal{D}(\bar{\Omega})$  qui converge vers  $u$  dans  $H^1(\Omega)$  fort. Nous avons :

$$\forall m \in \mathbb{N} \quad D_i(\alpha_o u_m) = \alpha'_o u_m \cdot D_i u_m$$

La suite  $u_m$  étant bornée dans  $H^1(\Omega)$ ,  $\alpha_o u_m$  est bornée dans  $H^1(\Omega)$  d'après 4.3. ii). Il existe donc une sous-suite  $\alpha_o u_{m'}$  qui converge dans  $H^1(\Omega)$  faible vers  $\beta$ . Un raisonnement analogue à celui fait dans 4.3 montre que  $\beta = \alpha_o u$ .

$D_i$  étant linéaire et continu de  $H^1(\Omega)$  fort dans  $L^2(\Omega)$  fort,  $D_i$  est aussi faiblement continu et  $D_i(\alpha_o u_{m'})$  converge vers  $D_i(\alpha_o u)$  dans  $L^2(\Omega)$  faible.

Examinons maintenant  $\alpha'_o u_{m'} \cdot D_i u_{m'}$ .

$u_{m'}$  converge vers  $u$  dans  $H^1(\Omega)$ , donc dans  $L^2(\Omega)$ . Il existe une sous-suite  $u_{m''}$  qui converge presque partout vers  $u$ .  $\alpha'$  étant continu,  $\alpha'_o u_{m''}$  converge presque partout vers  $\alpha'_o u$ . De plus :

$$|\alpha'_o u_{m''} - \alpha'_o u|^2 \leq 4|\alpha'|_\infty^2 \leq 4K^2$$

$\Omega$  étant borné, nous en déduisons par le théorème de la convergence dominée que  $\alpha'_o u_m \rightarrow \alpha'_o u$  dans  $L^2(\Omega)$  fort. Ecrivons :

$$\begin{aligned} \|\alpha'_o u_m - \alpha'_o u\|_{L^2(\Omega)} &\leq \|(\alpha'_o u_m - \alpha'_o u) D_i u\|_{L^2(\Omega)} + \\ &\quad \|\alpha'_o u_m (D_i u_m - D_i u)\|_{L^2(\Omega)} \end{aligned}$$

et ceci  $\leq$

$$\|\alpha'_o u_m - \alpha'_o u\|_{L^2(\Omega)} \|D_i u\|_{L^2(\Omega)} + \|\alpha'_o u_m\|_{L^2(\Omega)} \|D_i u_m - D_i u\|_{L^2(\Omega)}$$

d'où on déduit que  $\alpha'_o u_m - \alpha'_o u \rightarrow 0$  dans  $L^2(\Omega)$  et donc  $D_i(\alpha_o u) = \alpha'_o u D_i u$ .

— x —

Enonçons maintenant :

#### 4.6. PROPOSITION

Soit  $\alpha$  une fonction Lipschitzienne de  $\mathbb{R}$  dans  $\mathbb{R}$  telle que  $\alpha(0) = 0$  et  $|\alpha'|_\infty \leq K$ . Soit  $u \in H^1(\Omega)$ .

Il existe  $\eta \in L^\infty(\Omega)$ ,  $\|\eta\|_\infty \leq K$  tel que :

$$D_i(\alpha_o u) = \eta \cdot D_i u$$

#### Démonstration

Soit  $\rho_n$  une suite régularisante dans  $\mathbb{R}$  et posons comme précédemment :

$$\alpha_n(t) = (\rho_n * \alpha)(t) - (\rho_n * \alpha)(0)$$

$$\alpha_n \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}), \alpha'_n o u \in L^\infty(\Omega) \text{ et } \|\alpha'_n o u\|_\infty \leq K.$$

La suite  $\alpha'_{n_k} u$  est donc bornée dans  $L^\infty(\Omega)$ .  
 $L^\infty(\Omega)$  étant le dual de  $L^1(\Omega)$  qui est séparable, toute boule fermée de  $L^\infty(\Omega)$  est faible étoile séquentiellement compacte ([7], p. 426) et nous pouvons donc extraire une sous-suite  $\alpha'_{n_k} u$  qui converge faible étoile vers  $\eta \in L^\infty(\Omega)$  avec  $\|\eta\|_\infty \leq K$  puisque  $\|\alpha'_{n_k} u\|_\infty \leq K \quad \forall n \in \mathbb{N}$ .

Montrons que pour tout  $\varphi \in \mathcal{D}(\Omega)$  on a :

$$(\alpha'_{n_k} u \cdot D_i u, \varphi)_{L^2(\Omega)} \rightarrow (\eta D_i u, \varphi)_{L^2(\Omega)}$$

Puisque  $u \in H^1(\Omega)$ ,  $D_i u \in L^2(\Omega)$  et le produit  $D_i u \cdot \varphi$  est dans  $L^1(\Omega)$ . Comme  $\alpha'_{n_k} u$  converge dans  $L^\infty(\Omega)$  faible étoile nous avons avec la dualité :

$$\int_\Omega \alpha'_{n_k} u (D_i u \cdot \varphi) dx \rightarrow \int_\Omega \eta D_i u \cdot \varphi dx$$

Mais nous avons prouvé dans le lemme 4.5. que

$$\alpha'_{n_k} u \cdot D_i u = D_i(\alpha_{n_k} u)$$

Il reste donc à trouver une sous-suite  $D_i(\alpha_{n_k} u)$  telle que :

$$\forall \varphi \in \mathcal{D}(\Omega) \quad (D_i(\alpha_{n_k} u), \varphi)_{L^2(\Omega)} \rightarrow (D_i(\alpha_0 u), \varphi)_{L^2(\Omega)} \quad (1)$$

Comme dans la démonstration de 4.4. il existe une sous-suite  $\alpha_{n_k} u$  qui converge vers  $\alpha_0 u$  dans  $H^1(\Omega)$  faible. Par suite  $D_i(\alpha_{n_k} u)$  converge vers  $D_i(\alpha_0 u)$  dans  $L^2(\Omega)$  faible et (1) est donc vérifié.

4.7. REMARQUE :

La proposition 4.6. étend le résultat obtenu avec  $\alpha \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R})$ . Lorsque  $\alpha$  est seulement Lipschitzienne,  $\alpha$  est dérivable au sens usuel sauf sur un ensemble  $E$  de mesure nulle et  $\alpha'_0 u$  n'a en général pas de sens. La fonction  $\eta$  n'est généralement pas unique sauf si  $D_1 u \neq 0$  p.p.

Les propriétés que nous allons énoncer maintenant concernent la positivité des fonctions dans  $H^1(\Omega)$  et dans  $L^2(\Gamma)$ . Elles seront utiles dans les paragraphes 5 et 6.

Tout d'abord regardons une propriété classique sur les fonctions  $u^+$  et  $u^-$ .

4.8. PROPOSITION :

Si  $u \in H^1(\Omega)$ , alors :

i)  $u^+ \in H^1(\Omega)$

ii)  $u \rightarrow u^+$  est contractante de  $H^1(\Omega)$  dans  $H^1(\Omega)$

Démonstration

Considérons  $\alpha : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  défini par

$$\alpha(t) = \begin{cases} t & t > 0 \\ 0 & t \leq 0 \end{cases}$$

$\alpha$  est Lipschitzienne de constante  $K = 1$  et  $\alpha(0) = 0$ .

Il est clair que  $u^+ = \alpha_0 u$ . D'après 4.4. i)  $\alpha_0 u \in H^1(\Omega)$ .

Soient  $u_1$  et  $u_2$  dans  $H^1(\Omega)$  :

$$\begin{aligned} \|u_1^+ - u_2^+\|_{H^1(\Omega)}^2 &= \|\alpha_0 u_1 - \alpha_0 u_2\|_{H^1(\Omega)}^2 = \\ &= \int_{\Omega} |\alpha(u_1(x)) - \alpha(u_2(x))|^2 dx + \sum_{|i|=1} \int_{\Omega} |D_i \alpha(u_1(x)) - D_i \alpha(u_2(x))|^2 dx \end{aligned}$$

D'après 4.6.  $D_i \alpha_0 u = \eta D_i u$  avec  $\|\eta\|_{\infty} \leq 1$

Nous avons donc :

$$\begin{aligned} \|u_1^+ - u_2^+\|_{H^1(\Omega)}^2 &\leq \int_{\Omega} |u_1(x) - u_2(x)|^2 dx + \sum_{|i|=1} \int_{\Omega} |D_i u_1(x) - D_i u_2(x)|^2 dx \\ &\leq \|u_1 - u_2\|_{H^1(\Omega)}^2 \end{aligned}$$

— x —

Remarque :

$u^-$  possède des propriétés identiques puisque  $u = u^+ - u^-$ .

La propriété suivante nous permettra d'énoncer des résultats sur la positivité des traces sur  $\Gamma$  de fonctions de  $H^1(\Omega)$ .

#### 4.9. PROPOSITION

Soit  $u \in H^1(\Omega)$ . Nous avons :

$$\gamma_0^+ u^+(x) \cdot \gamma_0^- u^-(x) = 0 \quad \text{p.t.x. } \in \Gamma$$

Démonstration :

Il existe une suite de fonctions  $u_m$  de  $\mathcal{D}(\bar{\Omega})$  convergent vers  $u$  dans  $H^1(\Omega)$ . Avec 4.8. ii) nous avons :

$$u_m^+ \rightarrow u^+ \text{ dans } H^1(\Omega) \quad \text{et} \quad u_m^- \rightarrow u^- \text{ dans } H^1(\Omega)$$

$\gamma_0$  étant un opérateur linéaire et continu de  $H^1(\Omega)$  dans  $L^2(\Gamma)$  nous en déduisons que :

$$\gamma_0 u_m^+ \rightarrow \gamma_0 u^+ \text{ dans } L^2(\Gamma) \quad \text{et} \quad \gamma_0 u_m^- \rightarrow \gamma_0 u^- \text{ dans } L^2(\Gamma)$$

Comme  $u_m \in \mathcal{D}(\bar{\Omega})$ ,  $u_m^+ \in \mathcal{C}^0(\bar{\Omega})$  et

$$\gamma_0 u_m^+ = u_m^+|_{\Gamma}$$

au sens classique.

La convergence dans  $L^2(\Gamma)$  fort implique qu'il existe une sous-suite  $u_{m_p}$  telle que :

$$\gamma_0 u_{m_p}^+(x) \rightarrow \gamma_0 u^+(x) \quad \text{p.t.x. } \in \Gamma$$

$$\gamma_0 u_{m_p}^-(x) \rightarrow \gamma_0 u^-(x) \quad \text{p.t.x. } \in \Gamma$$

$$\text{Mais } \gamma_0 u_{m_p}^+(x) \cdot \gamma_0 u_{m_p}^-(x) = u_{m_p}^+|_{\Gamma}(x) \cdot u_{m_p}^-|_{\Gamma}(x) = 0 \quad \forall x \in \Gamma$$

$$\text{Donc } \gamma_0 u^+(x) \cdot \gamma_0 u^-(x) = 0 \quad \text{p.t.x. } \in \Gamma$$



4.10. PROPOSITION :

<p>Si <math>u \in H^1(\Omega)</math> alors :</p> <p>i) <math>\gamma_0 u^+ = (\gamma_0 u)^+</math></p> <p>ii) <math>\gamma_0 u^- = (\gamma_0 u)^-</math></p>
---

Démonstration

Par définition  $\gamma_0 u = (\gamma_0 u)^+ - (\gamma_0 u)^-$

Soit  $u_m \rightarrow u$  dans  $H^1(\Omega)$  . D'après 4.8. :

$$u_m^+ \rightarrow u^+ \text{ dans } H^1(\Omega) \text{ fort}$$

$\gamma_0$  étant continu nous avons :

$$\gamma_0 u_m^+ \rightarrow \gamma_0 u^+ \text{ dans } L^2(\Gamma) \text{ fort}$$

$$\gamma_0 u_m \rightarrow \gamma_0 u \text{ dans } L^2(\Gamma) \text{ fort}$$

Il existe en particulier une sous-suite  $\gamma_0 u_{m_p}$  qui converge presque partout vers  $\gamma_0 u$  .

Mais  $u_{m_p}^+ \in \mathcal{C}^0(\bar{\Omega})$  et par suite  $\gamma_0 u_{m_p}^+(x) = u_{m_p}^+(x)$  pour tout  $x \in \Gamma$  .

$$\gamma_0 u_{m_p}^+(x) = \text{Sup}(u_{m_p}(x), 0) = \text{Sup}(\gamma_0 u_{m_p}(x), 0) = (\gamma_0 u_{m_p})^+(x)$$

En passant à la limite nous avons :

$$\gamma_0 u^+(x) = (\gamma_0 u)^+(x) \quad \text{p.t.x.} \in \Gamma$$

Le point ii) est identique.

4.11. PROPOSITION :

$$\begin{array}{l} \text{Soit } u \in H_{\Gamma_1}^1(\Omega) = \{u \in H^1(\Omega) \mid \sigma_1 \gamma_0 u = 0\} \\ \\ \text{i)} \quad u^+ \text{ et } u^- \in H_{\Gamma_1}^1(\Omega) \\ \\ \text{ii)} \quad \sigma_1 \gamma_0 u \geq 0 \quad \text{p.t.x. } \in \Gamma \quad \Rightarrow \quad \sigma_1 \gamma_0 u^- = 0 \\ \\ \text{iii)} \quad \sigma_1 \gamma_0 u \leq 0 \quad \text{p.t.x. } \in \Gamma \quad \Rightarrow \quad \sigma_1 \gamma_0 u^+ = 0 \end{array}$$

Démonstration

C'est un corollaire immédiat de 4.10.

~~— X —~~

Nous terminerons ce paragraphe par deux applications de la proposition 4.6.

4.12. PROPOSITION :

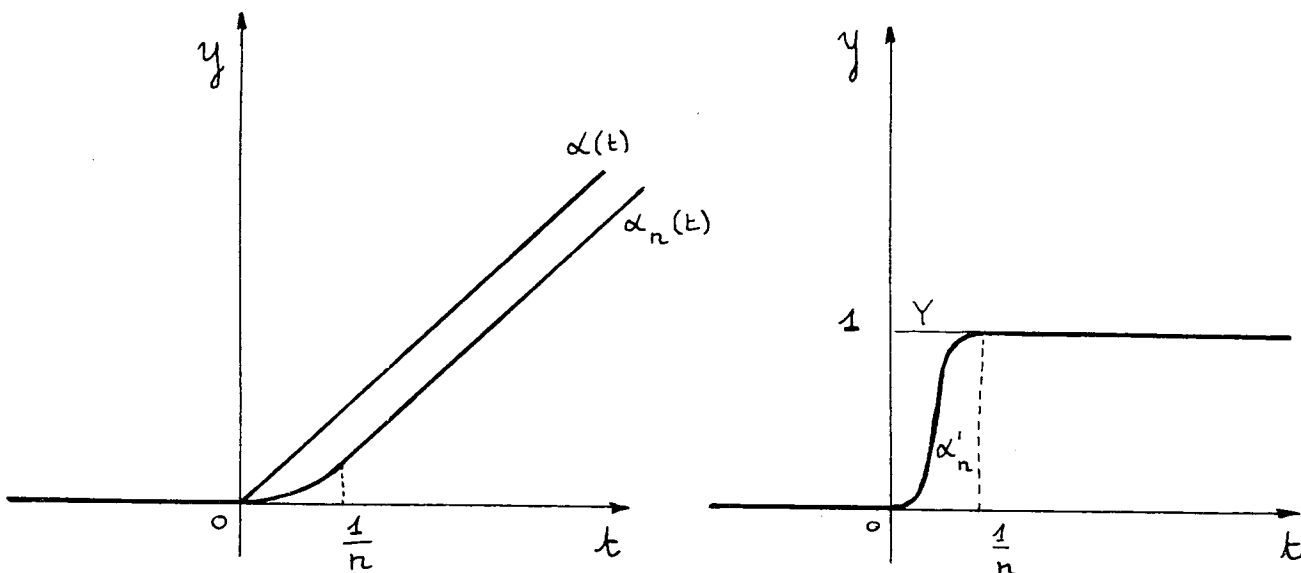
$$\begin{array}{l} \text{Soit } u \in H^1(\Omega) . \text{ Il existe } \eta \text{ appartenant à } L^\infty(\Omega) \\ \text{tel que } \eta^2 = \eta \text{ et vérifiant :} \\ \\ \quad \nabla u^+ = \eta \nabla u \\ \\ \text{( } \eta \text{ dépend de } u \text{ )} \end{array}$$

Démonstration :

Soit  $\alpha : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ , la fonction définie par :

$$\alpha(t) = \begin{cases} 0 & t \leq 0 \\ t & t > 0 \end{cases}$$

Approchons  $\alpha$  par une suite  $\alpha_n \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R})$



Soit  $Y$  la fonction de Heaviside :

$$Y(t) = \begin{cases} 0 & t \leq 0 \\ 1 & t > 0 \end{cases}$$

La suite  $\alpha'_n$  converge ponctuellement vers  $Y$ . Donc

$$\alpha'_n(u(x)) \rightarrow Y(u(x)) \quad \text{p.t.x. } \in \Omega$$

On en déduit que  $D_i u^+ = Y_{0i} u$ , d'où on peut prendre  $\eta = Y_{0i} u$  qui vérifie bien  $\eta^2 = \eta$  et comme  $\eta$  ne dépend pas de  $i$  :  
 $\nabla u^+ = \eta \nabla u$ .

—————~~x~~

Une conséquence immédiate est :

4.13. PROPOSITION :

$Soit \ u \in H^1(\Omega) \quad (\nabla u^+, \nabla u^-)_{L^2(\Omega)} = 0$
---

Démonstration :

$$\nabla u^+ = \eta \nabla u$$

$$\nabla u^- = \nabla u^+ - \nabla u = (\eta - 1) \nabla u$$

$$(\nabla u^+, \nabla u^-)_{L^2(\Omega)} = \int_{\Omega} \eta(\eta - 1) \nabla u^2 dx = 0$$

—————~~x~~

Enonçons enfin un dernier résultat concernant une définition de la positivité dans  $H^1(\Omega)$ .

4.14. DEFINITION [18] :

Soit  $E$  un sous-ensemble de  $\bar{\Omega}$ . On dit que  $u \in H^1(\Omega)$  est non-négative sur  $E$  au sens de  $H^1(\Omega)$  s'il existe une suite de fonctions de  $\mathcal{C}^1(\bar{\Omega})$  telle que :

- i)  $u_m \geq 0$  sur  $E$
- ii)  $u_m \rightarrow u$  dans  $H^1(\Omega)$ .

4.15. PROPOSITION :

Si  $\Omega$  est un ouvert borné régulier, la positivité dans  $H^1(\Omega)$  est équivalente à la positivité presque partout.

Démonstration :

CN : Soit  $u \in H^1(\Omega)$ ,  $u \geq 0$  dans  $H^1(\Omega)$ . Il existe une suite  $u_m \geq 0 \in \mathcal{C}^1(\bar{\Omega})$  qui converge vers  $u$  dans  $H^1(\Omega)$ . Il existe donc une sous-suite  $u_{m_p}$  qui converge presque partout dans  $\Omega$  vers  $u$  qui est donc positif presque partout.

CS : Soit  $u \geq 0$  p.p. dans  $\Omega$ .  
 $\Omega$  étant régulier,  $\mathcal{D}(\bar{\Omega})$  est dense dans  $H^1(\Omega)$ .

Soit  $u_m \in \mathcal{D}(\bar{\Omega})$  tel que  $u_m \rightarrow u$  dans  $H^1(\Omega)$ .

Considérons la suite  $\alpha_k$  définie en 4.12.

$$\alpha_{k \circ} u_m \in \mathcal{C}^1(\bar{\Omega}) \quad \text{et} \quad \alpha_{k \circ} u_m \geq 0$$

Pour tout  $k$  fixé on a  $\alpha_{k \circ} u_m \rightarrow \alpha_{k \circ} u$  dans  $H^1(\Omega)$  et donc  $\alpha_{k \circ} u \geq 0$  au sens de  $H^1(\Omega)$ .

D'autre part, on a déjà vu que  $\alpha_k \circ u \rightharpoonup u^+$  dans  $H^1(\Omega)$  faible. Or l'ensemble des éléments positifs ou nuls au sens de  $H^1(\Omega)$  constituent un cône convexe fermé qui est donc faiblement fermé et par conséquent  $u \geq 0$  au sens  $H^1(\Omega)$ .

—\*—

4.16. REMARQUE :

Nous venons de montrer de façon équivalente que la fonction  $u^+$  est positive dans  $H^1(\Omega)$  de même que  $u^-$ .

5. COMPARAISON ENTRE LA SOLUTION DE  $P_I$  ET LA SOLUTION PHYSIQUE.

Nous allons montrer que la solution de  $P_I$  est à valeurs dans l'intervalle  $[u_a - T_f, 0]$ . La démonstration de la proposition suivante repose sur le principe du maximum.

5.1. PROPOSITION :

Soit  $u$  la solution de  $P_I$ . Pour presque tout  $x$  dans  $\bar{\Omega}$ ,  
 $u(x) \in [u_a - T_f, 0]$ .

Démonstration :

Prouvons que  $u \leq 0$  en montrant que  $u^+ = 0$

Comme  $u \in H_{\Gamma_1}^1(\Omega)$ , il en est de même pour  $u^+$  d'après 4.11. Ecrivons la formulation variationnelle de  $P_{\Gamma}$  :

$$\forall v \in H_{\Gamma_1}^1(\Omega) \quad (\nabla u, \nabla v)_{L^2(\Omega)} + \langle \varphi(\gamma_0 u), \gamma_0 v \rangle_{\Gamma} = 0$$

En particulier pour  $v = u^+$  nous obtenons en remplaçant  $u$  par  $u^+ - u^-$

$$(\nabla u^+, \nabla u^+)_{L^2(\Omega)} - (\nabla u^-, \nabla u^+)_{L^2(\Omega)} + \langle \varphi(\gamma_0 u), \gamma_0 u^+ \rangle_{\Gamma} = 0$$

D'après 4.13.  $(\nabla u^-, \nabla u^+)_{L^2(\Omega)} = 0$

Comme  $\gamma_0 u^+ = (\gamma_0 u)^+$  nous pouvons écrire :

$$\langle \varphi(\gamma_0 u), \gamma_0 u^+ \rangle_{\Gamma} = \langle \varphi((\gamma_0 u)^+), (\gamma_0 u)^+ \rangle_{\Gamma}$$

car

$$\varphi(\gamma_0 u(x))(\gamma_0 u)^+(x) = \begin{cases} \varphi((\gamma_0 u)^+(x))(\gamma_0 u)^+(x) & \text{si } \gamma_0 u(x) \geq 0 \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

D'où

$$(\nabla u^+, \nabla u^+)_{L^2(\Omega)} + \langle \varphi((\gamma_0 u)^+) - \varphi(0), (\gamma_0 u)^+ \rangle_{\Gamma} + \langle \varphi(0), (\gamma_0 u)^+ \rangle_{\Gamma} = 0$$

$\varphi$  étant monotone et  $\varphi(0) \geq 0$  (2.3., a),

nous en déduisons que  $0 \geq \|\nabla u^+\|_{L^2(\Omega)}^2$

Utilisons l'inégalité de Friedrichs. Puisque  $u^+ \in H_{\Gamma_1}^1(\Omega)$  nous avons :

$$0 \geq \|\nabla u^+\|_{L^2(\Omega)}^2 \geq c \|u^+\|_{H^1(\Omega)}^2 \quad c > 0$$

et par suite  $u^+ = 0$ .

On montre de la même façon que  $u \geq u_a - T_f$  avec l'hypothèse  $\varphi(u_a - T_f) \leq 0$  (2.3.,b) .

~~—x—~~

En conclusion, la solution  $u$  de  $P_I$  étant dans l'intervalle  $[u_a - T_f, 0]$ ,  $u + T_f$  vérifie les équations formulées au chapitre II. Comme nous avons physiquement unicité de la solution sur  $\Omega$ , il en découle que  $u + T_f$  est cette solution.

Pour calculer la solution nous appliquerons donc une méthode numérique directement sur le problème  $P_I$ . Ceci fait l'objet du paragraphe suivant .

## 6. UNE METHODE CONSTRUCTIVE DE RESOLUTION DE $P_I$ PAR CROISSANCE DE SOUS-SOLUTIONS ET DECROISSANCE DE SUR-SOLUTIONS.

Cette méthode qui donnera lieu à un algorithme de calcul de la solution montre aussi l'existence d'une solution par convergence. Cette solution est encadrée par une suite de sous-solutions et de sur-solutions (6.3.3.).

### 6.1. LEMME :

Soient  $u \in H^1(\Omega)$  et  $\lambda \in \mathbb{R}^+$  tels que :

$$\Delta u = 0$$

$$\sigma_1 \gamma_0 u \geq 0$$

$$\sigma_2^* (\lambda \gamma_0 u + \gamma_1 u) \geq 0$$

alors  $u \geq 0$  .



Démonstration :

Notons d'abord que  $\sigma_1 \gamma_0 u \geq 0$  signifie  $\gamma_0 u(x) \geq 0$  p.t.x.  $\in \Gamma_1$  et  $\sigma_2^*(\lambda \gamma_0 u + \gamma_1 u)$  est positif au sens de  $H^{-1/2}(\Gamma)$  c'est-à-dire que :

$$\forall \varphi \in H^{1/2}(\Gamma) \quad \varphi \geq 0 \quad \langle \sigma_2^*(\lambda \gamma_0 u + \gamma_1 u), \varphi \rangle_{\Gamma} \geq 0$$

Montrons que  $u^- = 0$ .

Ecrivons la formule de Green avec  $u$  et  $u^-$  :

$$\begin{aligned} 0 &= -(\Delta u, u^-)_{L^2(\Omega)} = (\nabla u, \nabla u^-)_{L^2(\Omega)} - \langle \gamma_1 u, \gamma_0 u^- \rangle_{\Gamma} \\ &= \underbrace{(\nabla u^+, \nabla u^-)_{L^2(\Omega)}}_{\text{0}} - (\nabla u^-, \nabla u^-)_{L^2(\Omega)} - \langle \lambda \gamma_0 u + \gamma_1 u, \gamma_0 u^- \rangle_{\Gamma} + \lambda \langle \gamma_0 u, \gamma_0 u^- \rangle_{\Gamma} \end{aligned}$$

D'après 4.11., ii)  $\sigma_1 \gamma_0 u \geq 0 \Rightarrow \sigma_1 \gamma_0 u^- = 0$

D'où  $\gamma_0 u^- = \sigma_2 \gamma_0 u^-$  et :

$$0 = -(\nabla u^-, \nabla u^-)_{L^2(\Omega)} - \langle \lambda \gamma_0 u + \gamma_1 u, \sigma_2 \gamma_0 u^- \rangle_{\Gamma} + \lambda \langle \gamma_0 u^+ - \gamma_0 u^-, \gamma_0 u^- \rangle_{\Gamma}$$

Nous avons vu en 4.9. que  $\gamma_0 u^+(x) \cdot \gamma_0 u^-(x) = 0$  p.t.x.  $\in \Gamma$

Il vient :

$$(\nabla u^-, \nabla u^-)_{L^2(\Omega)} + \langle \sigma_2^*(\lambda \gamma_0 u + \gamma_1 u), \gamma_0 u^- \rangle_{\Gamma} + \lambda \langle \gamma_0 u^-, \gamma_0 u^- \rangle_{\Gamma} = 0$$

Comme  $\gamma_0 u^- = (\gamma_0 u)^-$  est positif p.p. sur  $\Gamma$  nous avons :

$$\|\nabla u^-\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq 0$$

et avec l'inégalité de Friedrichs nous en déduisons :

$$u^- = 0.$$

## 6.2. LINEARISATION DU PROBLEME $P_I$ :

Pour résoudre numériquement  $P_I$  nous serons amenés à construire une suite d'itérés, solutions de problèmes linéaires. Le choix de la linéarisation se pose alors .

### 6.2.1. Remarque :

L'expérience numérique des physiciens traitant des problèmes de rayonnement montre le fait suivant : la linéarisation d'une condition du type :

$$-\frac{\partial u}{\partial n} = u^4 - u_0^4$$

donne en différences finies de meilleurs résultats lorsque l'on résoud :

$$(L1) \quad -\frac{\partial u}{\partial n} = (u-u_0)(v^3+3v^2u_0+3vu_0^2+u_0^3)$$

de préférence à :

$$(L2) \quad -\frac{\partial u}{\partial n} = v^4 - u_0^4$$

En posant  $\beta(v) = v^3+3v^2u_0+3vu_0^2+u_0^3$  et  $\Psi(u) = u^4-u_0^4$  la condition (L1) devient :

$$(L3) \quad \beta(v)u + \frac{\partial u}{\partial n} = u_0\beta(v) = -\Psi(v)+\beta(v)v .$$

Nous allons utiliser cette remarque et montrer pourquoi ce type de linéarisation conduit à de bons résultats.

Reprenons la condition non linéaire de  $P_I$  :

$$\sigma_2^*(\gamma_1 u + \varphi(\gamma_0 u)) = 0$$

Si nous construisons l'itération  $u_{n-1} \rightarrow u_n$  où  $u_n$  est solution de

$$\left\{ \begin{array}{l} -\Delta u_n = 0 \\ \sigma_1 \gamma_0 u_n = 0 \\ \sigma_2^*(\gamma_1 u_n) = \sigma_2^*(-\varphi(\gamma_0 u_{n-1})) \end{array} \right.$$

nous constatons, en utilisant le lemme 6.1. et la croissance de  $\varphi$ , que la suite ainsi définie est au mieux alternée. Cette itération correspond à la linéarisation (L2). Tenant compte de 6.2.1., considérons la linéarisation définissant la suite d'itérés suivante :

$u_{n-1} \rightarrow u_n$  où  $u_n$  est solution  $*$  de :

$$P_{L_n} \left\{ \begin{array}{l} -\Delta u_n = 0 \\ \sigma_1 \gamma_0 u_n = 0 \\ \sigma_2^*(\lambda \gamma_0 u_n + \gamma_1 u_n) = \sigma_2^*(-\varphi(\gamma_0 u_{n-1}) + \lambda \gamma_0 u_{n-1}) \end{array} \right.$$

$\lambda$  étant un nombre positif choisi de façon à ce que :

$$u_1 \geq u_2 \Rightarrow -\varphi(\gamma_0 u_1) + \varphi(\gamma_0 u_2) + \lambda(\gamma_0 u_1 - \gamma_0 u_2) \geq 0 \quad \text{p.p. } \Gamma$$

Ceci est possible d'après la définition de  $\varphi$  (2.2.) :

$$\forall u \in L^2(\Gamma) \quad \varphi(u)(m) = g(u(m), m) \quad \text{p.p. } m \in \Gamma$$

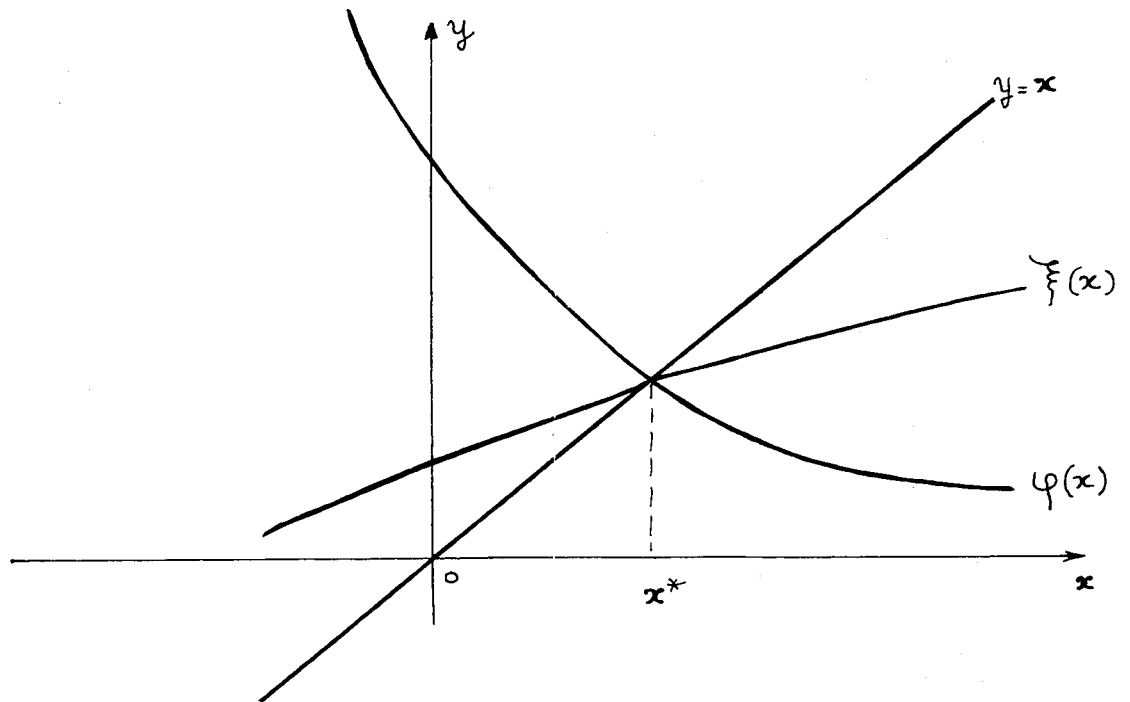
et il nous suffit donc de prendre  $\lambda \geq C_g$ .

D'après le lemme 6.1., la correspondance  $u_{n-1} \rightarrow u_n$  est alors croissante.

\* L'existence et l'unicité seront montrés en 6.3.1.

6.2.2. Remarque :

Expliquons dans un exemple sur  $\mathbb{R}$  ce qui se passe



Soit  $\varphi$  une fonction décroissante de  $\mathbb{R}$  dans  $\mathbb{R}$  admettant  $x^*$  pour point fixe. La suite des approximations successives est alternée. Nous écrivons que  $x^*$  est le point fixe de toute nouvelle fonction  $\xi(x)$  obtenue par combinaison convexe de  $\varphi$  et de  $y = x$ . Soit :

$$\xi(x) = \frac{\rho}{1+\rho} x + \frac{1}{1+\rho} \varphi(x)$$

$$\xi'(x) = \frac{\rho}{1+\rho} + \frac{1}{1+\rho} \varphi'(x)$$

$\varphi'(x)$  est négatif. Si  $\varphi'$  est borné nous pouvons rendre  $\xi'(x) > 0$  pour tout  $x$  en prenant  $\rho$  assez grand. La suite des approximations successives est alors monotone.

C'est ce principe que nous appliquons. Nous allons montrer que l'itération ainsi construite converge toujours dès que l'on sait trouver  $u_0 \leq u_1$  ou  $u_0 \geq u_1$ . (C'est la notion de sous-(sur)-solution).

Notons que nous avons remplacé le terme  $\beta(v)$  de (L3) par  $\lambda$ . Dans l'expérience numérique, le coefficient  $\beta(v)$  est du même ordre que  $\lambda$  ce qui tend à expliquer pourquoi cette linéarisation donne de bons résultats.

Nous allons montrer la convergence de la méthode.

### 6.3. CONSTRUCTION DES ITERES

Reprenons le problème  $P_{L_n}$  exposé en 6.2. Il est de la forme :

Trouver  $u \in H^1(\Omega, \Delta)$  tel que :

$$P_L \begin{cases} -\Delta u = 0 \\ \sigma_1 \gamma_0 u = 0 \\ \sigma_2^*(\lambda \gamma_0 u + \gamma_1 u) = \sigma_2^*(t) \end{cases} \quad t \in H^{-1/2}(\Gamma) \quad \lambda \in \mathbb{R}_+$$

#### 6.3.1. Théorème :

Les deux assertions suivantes sont équivalentes :

- i)  $\hat{u}$  est solution de  $P_L$
- ii)  $\hat{u} \in H_{\Gamma_1}^1(\Omega)$  et vérifie

$$\forall v \in H_{\Gamma_1}^1(\Omega). \quad (\nabla \hat{u}, \nabla v)_{L^2(\Omega)} + \lambda \langle \gamma_0 \hat{u}, \gamma_0 v \rangle_{\Gamma} = \langle t, \gamma_0 v \rangle_{\Gamma}$$

Le problème  $P_L$  admet une solution unique qui dépend continuellement de  $t$ .

### Démonstration

L'équivalence de i) et ii) est standard.

Considérons la forme :

$$a(u,v) = (\nabla u, \nabla v)_{L^2(\Omega)} + \lambda \langle \gamma_0 u, \gamma_0 v \rangle_{\Gamma}$$

C'est évidemment une forme bilinéaire et continue sur  $H_{\Gamma_1}^1(\Omega) \times H_{\Gamma_1}^1(\Omega)$ .

Elle est de plus coercive sur  $H_{\Gamma_1}^1(\Omega)$ . En effet,  $\lambda$  étant positif et

$u \in H_{\Gamma_1}^1(\Omega)$  nous avons :

$$a(u,u) \geq \|\nabla u\|_{L^2(\Omega)}^2 \geq c \|u\|_{H^1(\Omega)}^2 \quad c > 0$$

d'après l'inégalité de Friedrichs.

Par suite pour tout  $\ell \in (H_{\Gamma_1}^1(\Omega))^*$  il existe une solution unique

$\hat{u} \in H_{\Gamma_1}^1(\Omega)$  telle que :

$$a(\hat{u}, v) = \langle \ell, v \rangle \quad \forall v \in H_{\Gamma_1}^1(\Omega)$$

En particulier pour  $\ell = \gamma_0^* t$ .

Le lemme de Lax-Milgram donne aussi la continuité de l'application  $\ell \rightarrow \hat{u}$ .  $\gamma_0^*$  étant aussi continue, le théorème est démontré.

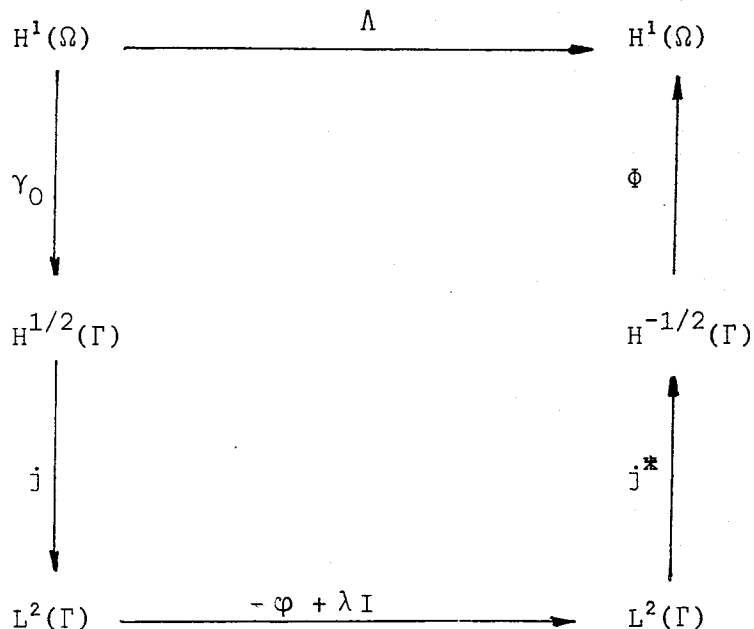
-----x

### 6.3.2. Définition

Nous désignerons par  $\Phi$  l'opérateur qui à  $t \in H^{-1/2}(\Gamma)$  associe  $\hat{u} \in H^1(\Omega)$  solution du problème  $P_L$ .

Nous pouvons établir maintenant le diagramme qui permet de passer d'un itéré au suivant :

6.3.3. Diagramme d'itération :



$j$  est l'injection de  $H^{1/2}(\Gamma)$  dans  $L^2(\Gamma)$

Il est clair que  $\Lambda$  est un opérateur continu de  $H^1(\Omega)$  dans  $H^1(\Omega)$  et que  $\Lambda$  est *croissant* au sens :

$$u_1 \geq u_2 \text{ p.p. } \Rightarrow \Lambda u_1 \geq \Lambda u_2 \text{ p.p. sur } \Omega$$

La suite des itérés est donnée par  $u_n = \Lambda u_{n-1}$ .

6.3.4. Définition

<p>Nous dirons que <math>u</math> est une sur-(sous)-solution si</p> $\Lambda u \leq u \qquad (\Lambda u \geq u)$
---

L'étude de la convergence des itérations qui va maintenant être faite reposera sur deux points :

- i) détermination d'une sous-solution  $u_0$  et d'une sur-solution  $v^0$
- ii) démonstration de la convergence des suites  $u_0, u_1, \dots, u_n = \Lambda u_{n-1}$  et  $v^0, \dots, v^n = \Lambda v^{n-1}$ .

#### 6.4. ETUDE DE LA CONVERGENCE DES ITERATIONS :

##### 6.4.1. Proposition :

- |  |
|--|
| <ul style="list-style-type: none"> <li>i) <math>u_0 = u_a - T_f</math> est une sous-solution de <math>P_L</math></li> <li>ii) <math>v^0 = 0</math> est une sur-solution de <math>P_L</math></li> </ul> |
|--|

Démonstration :

- i)  $u_1 = \Lambda u_0$  est tel que :

$$-\Delta(u_1 - u_0) = 0$$

$$\sigma_1 \gamma_0(u_1 - u_0) = -(u_a - T_f) > 0$$

$$\sigma_2^*(\lambda \gamma_0(u_1 - u_0) + \gamma_1(u_1 - u_0)) = \sigma_2^*(-\varphi(\gamma_0 u_0) + \lambda \gamma_0 u_0 - \lambda \gamma_0 u_0 - \gamma_1 u_0)$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{= 0}$

L'hypothèse 2.3.,b) implique  $\sigma_2^*(-\varphi(\gamma_0 u_0)) \geq 0$ .

D'après le lemme 6.1.  $u_1 - u_0 \geq 0$ . Donc  $\Lambda u_0 \geq u_0$  et  $u_0$  est une sous-solution.



ii) La démonstration est analogue en utilisant l'hypothèse 2.3.,a).

~~X~~

#### 6.4.2. Théorème :

*La suite des itérés  $u_n$  est convergente vers  $\underline{u}$  dans  $H^1(\Omega)$ .  
De même  $\bar{v}^n$  converge vers  $\bar{v}$  dans  $H^1(\Omega)$ . On a  
 $\underline{u} = \bar{v} = u$  solution de  $P_M$ .*

#### Démonstration

Montrons la convergence de  $u_n$ .

On a une suite de fonctions mesurables telles que :

$$u_0 \leq u_1 \leq \dots \leq u_n \leq \dots \leq 0$$

Posons  $\underline{u} = \sup u_n$ .

Le théorème de la convergence dominée appliqué à  $(\underline{u} - u_n)^2$  montre que  $u_n \rightarrow \underline{u}$  dans  $L^2(\Omega)$  fort.

Supposons maintenant que la suite  $u_n$  soit bornée dans  $H^1(\Omega)$ . Alors  $\{\Lambda u_n \mid n \in \mathbb{N}\}$  est relativement compact dans  $H^1(\Omega)$  ( $\Lambda$  transforme les bornés en relativement compacts puisque  $j^*$  est compact et  $\varphi$  Lipschitzien). Il existe donc une sous-suite  $u_{n_k} \rightarrow u^*$  dans  $H^1(\Omega)$  et par suite  $\underline{u} = u^* \in H^1(\Omega)$ . On en déduit que  $u_n \rightarrow \underline{u}$  dans  $H^1(\Omega)$ .

Il reste à montrer que  $u_n$  est bornée dans  $H^1(\Omega)$ . Ecrivons la formulation variationnelle :

$$u_n \in H_{\Gamma_1}^1(\Omega) \quad \text{et} \quad \forall v \in H_{\Gamma_1}^1(\Omega) :$$

$$(\nabla u_n, \nabla v)_{L^2(\Omega)} + \lambda \langle \gamma_0 u_n, \gamma_0 v \rangle_{\Gamma} = \langle t_{n-1}, \gamma_0 v \rangle_{\Gamma}$$

où 
$$t_{n-1} = -\varphi(\gamma_0 u_{n-1}) + \lambda \gamma_0 u_{n-1}.$$

D'où en prenant  $v = u_n$  :

$$\|\nabla u_n\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq \langle t_{n-1}, \gamma_0 u_n \rangle_\Gamma$$

Comme  $\gamma_0 u_0 \leq \gamma_0 u_1 \leq \dots \leq \gamma_0 u_n \leq \dots \leq 0$  sur  $\Gamma$  la suite  $\gamma_0 u_n$  est bornée dans  $L^2(\Gamma)$ .

On en déduit que  $\|\nabla u_n\|_{L^2(\Omega)}^2$  est bornée et donc, d'après l'inégalité de Friedrichs,  $u_n$  est bornée dans  $H^1(\Omega)$ .

L'opérateur  $\Lambda$  étant continu sur  $H^1(\Omega)$   $u_n = \Lambda u_{n-1}$  donne à la limite  $\underline{u} = \Lambda \underline{u}$ , idem  $\bar{v} = \Lambda \bar{v}$ .

$\underline{u} - \bar{v}$  est solution de :

$$-\Delta(\underline{u} - \bar{v}) = 0$$

$$\sigma_1 \gamma_0(\underline{u} - \bar{v}) = 0$$

$$\sigma_2^* \gamma_1(\underline{u} - \bar{v}) = \sigma_2^* (-\varphi(\gamma_0 \underline{u}) + \varphi(\gamma_0 \bar{v}))$$

$\underline{u} - \bar{v}$  vérifie donc :

$$0 = \|\nabla(\underline{u} - \bar{v})\|_{L^2(\Omega)}^2 + \langle \varphi(\gamma_0 \underline{u}) - \varphi(\gamma_0 \bar{v}), \gamma_0 \underline{u} - \gamma_0 \bar{v} \rangle_\Gamma$$

La monotonie de  $\varphi$  et l'inégalité de Friedrichs implique  $\underline{u} = \bar{v}$  unique solution de  $P_M$ .

————— X —————

Cette méthode de sous-solutions et de sur-solutions donne un algorithme permettant de calculer la solution approchée de  $P_M$ . Nous la développerons au chapitre suivant.

Nous allons maintenant donner des théorèmes d'existence utilisant les théorèmes de point fixe.

Ils permettent d'étendre la classe des fonctions  $\varphi$  permises.

## 7. METHODES DE POINT FIXE BASEES SUR LA COMPACTITE.

Reprenons le problème sous sa formulation générale :

Trouver  $u \in H^1(\Omega, \Delta)$  vérifiant :

$$P_F \quad \begin{cases} -\Delta u = 0 \\ \sigma_1 \gamma_0 u = 0 \\ \sigma_2^*(\gamma_1 u + \varphi(\gamma_0 u)) = 0 \end{cases}$$

$\varphi$  étant un opérateur non linéaire Lipschitzien de  $L^2(\Gamma)$  dans  $L^2(\Gamma)$ .

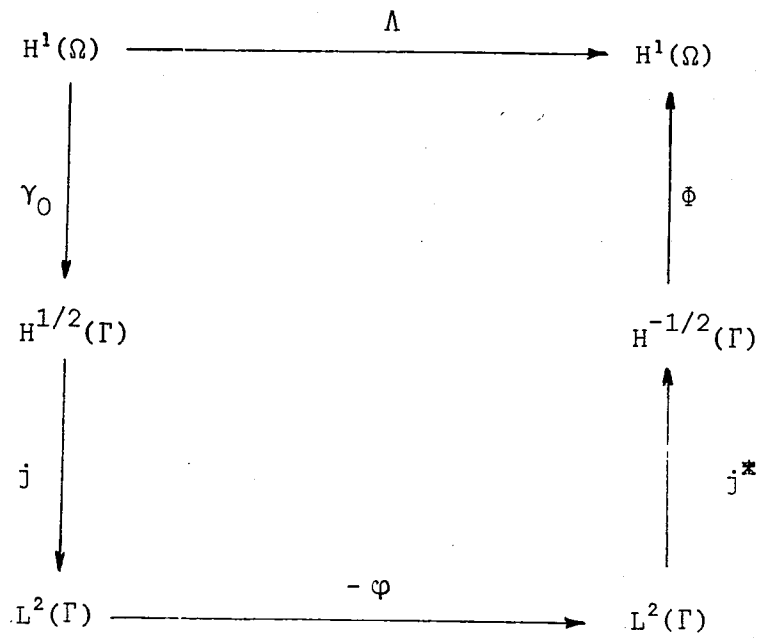
Nous énonçons deux résultats d'existence :

- a) dans le cas  $\varphi$  monotone
- b) dans le cas  $\varphi$  borné (i.e.  $\varphi(L^2(\Gamma))$  borné) ce qui étend la classe de problèmes non linéaires traitée.

L'étude de l'existence d'une solution au problème  $P_F$  sera basée sur la recherche de point fixe de l'opérateur  $\Lambda$  ci-dessous :

$$\Lambda = \Phi j^*(-\varphi)j \gamma_0$$

$\Phi$  étant l'opérateur défini en 6.3.2. avec  $\lambda = 0$



7.1. CAS  $\varphi$  MONOTONE :

7.1.1. Théorème :

*Si  $\varphi$  est un opérateur monotone (Lipschitzien) de  $L^2(\Gamma)$  dans  $L^2(\Gamma)$  le problème  $P_F$  admet une solution unique.*

La démonstration est basée sur le théorème de point fixe de Schaefer [16] et sur une estimation a priori.

7.1.2. Théorème (Schaefer)

*Soit  $E$  un espace de Banach et  $\Lambda$  une application continue de  $E$  dans  $E$  telle que :*

- i) pour tout boule  $B_r = \{y \in E \mid \|y\|_E \leq r\}$  l'image  $\Lambda(B_r)$  est relativement compacte*
- ii)  $\{x \in E \mid x = \delta \Lambda x \quad \delta \in ]0, 1[ \}$  est borné*

*Alors  $\Lambda$  admet un point fixe :  $\exists x^* \quad x^* = \Lambda x^*$ .*

On applique ce théorème dans :

7.1.3. Démonstration du théorème 7.1.1.

Prenons  $E = H^1(\Omega)$  et  $\Lambda = \Phi j^*(-\varphi)j \gamma_0$

Le point i) résulte de la compacité de  $j^*$  et de  $\varphi$  Lipschitzien. Il reste à montrer le point ii).

Soit  $u = \delta \Lambda u$  avec  $\delta \in ]0, 1[$

$$\frac{1}{\delta} u = \Phi j^*(-\varphi)j \gamma_0 u$$

On a donc d'après la définition de  $\Phi$  (6.3.2.)

$$\left\langle \frac{1}{\delta} \sigma_2^* \gamma_1 u, \gamma_0 u \right\rangle_{\Gamma} = - \left\langle \sigma_2^* (j^* \varphi j \gamma_0 u), \gamma_0 u \right\rangle_{\Gamma}$$

Soit

$$\frac{1}{\delta} \langle \gamma_1 u, \sigma_2 \gamma_0 u \rangle_{\Gamma} = - (\varphi j \gamma_0 u, j \sigma_2 \gamma_0 u)_{L^2(\Gamma)}$$

Remarquons que la condition  $\sigma_1 \gamma_0 u = 0$  implique  $\sigma_2 \gamma_0 u = \gamma_0 u$ .

D'où

$$\frac{1}{\delta} \langle \gamma_1 u, \gamma_0 u \rangle_{\Gamma} = - (\varphi j \gamma_0 u, j \gamma_0 u)_{L^2(\Gamma)}$$

Appliquons la formule de Green au premier membre :

$$\frac{1}{\delta} \{ (\nabla u, \nabla u)_{L^2(\Omega)} + \underbrace{(\Delta u, u)_{L^2(\Omega)}}_{0} \} = - (\varphi j \gamma_0 u, j \gamma_0 u)_{L^2(\Gamma)}$$

Avec la monotonie de  $\varphi$  on a :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\delta} \|\nabla u\|_{L^2(\Omega)}^2 &= -(\varphi j\gamma_0 u - \varphi(0), j\gamma_0 u)_{L^2(\Gamma)} - (\varphi(0), j\gamma_0 u)_{L^2(\Gamma)} \\ &\leq \|\varphi(0)\|_{L^2(\Gamma)} \cdot \|j\gamma_0 u\|_{L^2(\Gamma)} \end{aligned}$$

Appliquons l'inégalité de Friedrichs et la continuité de  $j\gamma_0$  :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\delta} \frac{1}{C^2} \|u\|_{H^1(\Omega)}^2 &\leq \frac{1}{\delta} \|\nabla u\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ &\leq \|\varphi(0)\|_{L^2(\Gamma)} \|j\gamma_0\| \|u\|_{H^1(\Omega)} \end{aligned}$$

D'où

$$\|u\|_{H^1(\Omega)} \leq \text{cste.}$$

L'opérateur  $A$  possède donc un point fixe solution de  $P_F$ .  
L'unicité se démontre comme en 3.3.

—————x

## 7.2. CAS $\varphi$ BORNE :

Pour montrer l'existence de solutions à cette classe de problèmes, nous utiliserons le théorème de point-fixe de Schauder [17].

### 7.2.1. Théorème, (Schauder)

*Soit  $E$  un espace de Banach et  $C$  un convexe compact non vide dans  $E$ . Tout opérateur continu de  $C$  dans  $C$  possède un point fixe (non nécessairement unique).*

### 7.2.2. Théorème

*Si  $\varphi$  un opérateur (Lipschitzien) borné de  $L^2(\Gamma)$  dans  $L^2(\Gamma)$ , le problème  $P_F$  admet au moins une solution.*

### Démonstration

$\varphi$  étant borné, l'image de  $L^2(\Gamma)$  est incluse dans une boule  $\bar{B}$ .

$j^*$  étant compacte et  $\Phi$  continu,  $\Phi(j^*(\bar{B}))$  est un convexe relativement compact dans  $H^1(\Omega)$ .

Soit  $C = \overline{\Phi(j^*(\bar{B}))}$ .  $C$  est un convexe compact non vide.

$\Lambda|_C : C \rightarrow C$  possède donc un point fixe  $u$ .

$u$  est solution de  $P_F$ .

~~—————x~~

## CHAPITRE IV

### RESOLUTION NUMERIQUE DU PROBLEME $P_I$

---

- § 1. Invariance par rotation du problème  $P_I$
- § 2. Approximation du problème  $P_I$  par des éléments finis de révolution
- § 3. Algorithme de résolution de  $P_I(h)$
- § 4. Conditions suffisantes sur la triangulation  $\mathcal{T}_h$
- § 5. Majoration de l'erreur
- § 6. Un théorème de convergence
- § 7. Résultats numériques.





Ce chapitre traite de la résolution numérique du problème  $P_I$  dont nous venons de faire l'étude théorique.

Au paragraphe 1 nous montrons l'invariance par rotation du problème  $P_I$  due à sa symétrie axiale. Cela nous conduit à introduire au paragraphe 2 une approximation  $P_I(h)$  du problème  $P_I$  par des éléments finis de révolution. Le problème est ainsi ramené de  $\mathbb{R}^3$  dans  $\mathbb{R}^2$ .

L'algorithme de résolution de  $P_I(h)$  est basé comme au chapitre III paragraphe 6 sur une méthode de sous-solutions et de sur-solutions. Sa convergence est montrée avec une hypothèse de triangulation non-négative explicitée au paragraphe 4. Le lien avec le principe du maximum et les matrices non-négatives est également fait dans ce paragraphe.

On donne enfin une majoration de l'erreur au paragraphe 5, ce qui permet de déduire au paragraphe 6 la convergence de la méthode d'éléments finis utilisée.

Le paragraphe 7 est consacré aux résultats numériques.



1. INVARIANCE PAR ROTATION DU PROBLEME  $P_I$  :

Soit  $(Ox, Oy, Oz)$  un repère orthonormé dans  $\mathbb{R}^3$ . Le domaine  $\Omega$  les frontières  $\Gamma_1$  et  $\Gamma_2$  possèdent une symétrie de révolution d'axe  $Oz$ . Nous allons montrer que la solution  $u$  de  $P_I$  possède aussi cette symétrie.

1.1. NOTATIONS :

Désignons par  $\mathcal{R}_\theta$  l'opérateur de rotation  $(Oz, \theta)$

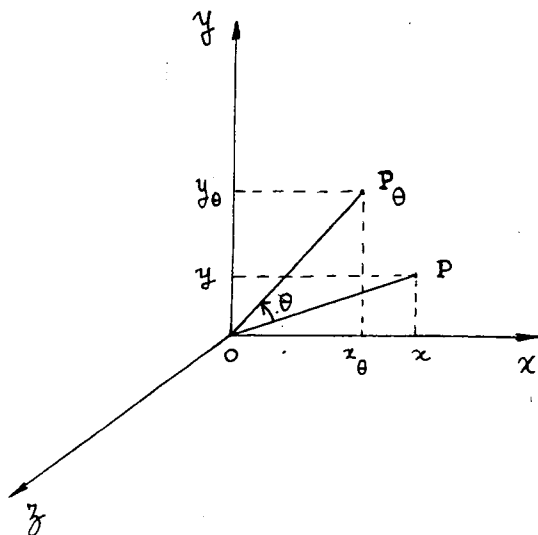
$$\mathcal{R}_\theta : M(x, y, z) \rightarrow M_\theta(x_\theta, y_\theta, z)$$

$$x_\theta = x \cos \theta - y \sin \theta$$

$$y_\theta = x \sin \theta + y \cos \theta$$

$\mathcal{R}_\theta$  laisse  $\Omega$ ,  $\Gamma_1$ ,  $\Gamma_2$  invariants

$\mathcal{R}_\theta$  est linéaire continu et bijectif d'inverse



$$\mathcal{R}_\theta^{-1} = \mathcal{R}_{-\theta}$$

Considérons l'application  $\mathcal{Y}_\theta$  de  $\mathcal{D}(\bar{\Omega})$  dans  $\mathcal{D}(\bar{\Omega})$  définie par

$$\mathcal{Y}_\theta \varphi = \varphi \circ \mathcal{R}_{-\theta}$$

$\varphi \in \mathcal{D}(\bar{\Omega})$  est invariante par rotation  $(Oz, \theta)$  si :

$$\forall \theta \in \mathbb{R} \quad \mathcal{Y}_\theta \varphi = \varphi$$

Nous noterons

$$\mathcal{Y}_\theta \varphi = \varphi_\theta .$$

1.2. PROPOSITION :

$\mathcal{Y}_\theta$  est une isométrie de  $\mathcal{C}^1(\bar{\Omega})$  dans  $\mathcal{C}^1(\bar{\Omega})$  pour la norme  $H^1(\Omega)$  .

Démonstration :

$$\text{Posons } \begin{pmatrix} u \\ v \\ z \end{pmatrix} = \mathcal{R}_{-\theta} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

On vérifie facilement qu'avec ce changement de variable on a :

$$\begin{aligned} \|\mathcal{Y}_\theta \varphi\|_{H^1(\Omega)}^2 &= \int_{\Omega} |\varphi_\theta(x,y,z)|^2 dx dy dz + \int_{\Omega} |\nabla \varphi_\theta(x,y,z)|^2 dx dy dz \\ &= \int_{\Omega} |\varphi(u,v,z)|^2 du dv dz + \int_{\Omega} |\nabla \varphi(u,v,z)|^2 du dv dz \\ &= \|\varphi\|_{H^1(\Omega)}^2 \end{aligned}$$

— x —

$\mathcal{Y}_\theta$  se prolonge donc par densité en une application linéaire isométrique de  $H^1(\Omega)$  dans  $H^1(\Omega)$ .

1.3. DEFINITION :

Nous dirons que  $u \in H^1(\Omega)$  est invariant par rotation si :

$$\forall \theta \in \mathbb{R} \quad \mathcal{Y}_\theta u = u$$

Pour montrer l'invariance par rotation de la solution  $u$  de  $P_I$  nous aurons besoin des deux propositions suivantes :

1.4. PROPOSITION :

Soient  $u$  et  $v$  dans  $H^1(\Omega)$

$$i) \quad (u_\theta, v)_{L^2(\Omega)} = (u, v_{-\theta})_{L^2(\Omega)}$$

$$ii) \quad (\nabla u_\theta, \nabla v)_{L^2(\Omega)} = (\nabla u, \nabla v_{-\theta})_{L^2(\Omega)}$$

$$iii) \quad \langle \varphi(\gamma_\theta u_\theta), \gamma_\theta v \rangle_\Gamma = \langle \varphi(\gamma_\theta u), \gamma_\theta v_{-\theta} \rangle_\Gamma$$

Démonstration :

i) s'obtient immédiatement par le changement de variables

$$(x, y, z) \rightarrow \mathcal{R}_{-\theta}(x, y, z)$$

ii) si  $u \in \mathcal{C}^1(\bar{\Omega})$ , un calcul immédiat donne :

$$\nabla(u_\theta) = \mathcal{R}_\theta(\nabla u)_\theta$$

Ce résultat s'étend par densité à  $H^1(\Omega)$ .

Donc :

$$\begin{aligned} (\nabla u_\theta, \nabla v)_{L^2(\Omega)} &= (\mathcal{R}_\theta(\nabla u)_\theta, \nabla v)_{L^2(\Omega)} \\ &= ((\nabla u)_\theta, \mathcal{R}_{-\theta} \nabla v)_{L^2(\Omega)} \end{aligned}$$

De plus, par le même changement de variable qu'en i) on a :

$$(\nabla u_\theta, \nabla v)_{L^2(\Omega)} = (\nabla u, \mathcal{R}_{-\theta}(\nabla v)_{-\theta})_{L^2(\Omega)} = (\nabla u, \nabla v_{-\theta})_{L^2(\Omega)} .$$

iii) La mesure superficielle  $d\sigma$  sur  $\Gamma$  est invariante par les rotations  $\mathcal{R}_\theta$ . Désignons par  $\mathcal{B}_\theta$  l'isométrie de  $L^2(\Gamma)$  dans  $L^2(\Gamma)$  définie par  $\mathcal{B}_\theta(g) = g \circ \mathcal{R}_{-\theta}$ . Le diagramme suivant commute trivialement :

$$\begin{array}{ccc} H^1(\Omega) & \xrightarrow{\mathcal{Y}_\theta} & H^1(\Omega) \\ \gamma_\theta \downarrow & & \downarrow \gamma_\theta \\ L^2(\Gamma) & \xrightarrow{\mathcal{B}_\theta} & L^2(\Gamma) \end{array}$$

et donc :

$$\begin{aligned}
 \langle \varphi(\gamma_0 u_\theta), \gamma_0 v \rangle_\Gamma &= \langle \varphi(\mathcal{B}_\theta \gamma_0 u), \gamma_0 v \rangle_\Gamma \\
 &= \langle \mathcal{B}_\theta \varphi(\gamma_0 u), \gamma_0 v \rangle_\Gamma \\
 &= \langle \varphi(\gamma_0 u), \mathcal{B}_{-\theta} \gamma_0 v \rangle_\Gamma = \langle \varphi(\gamma_0 u), \gamma_0 v_{-\theta} \rangle_\Gamma
 \end{aligned}$$

— x —

1.5. PROPOSITION :

Soit  $\mathcal{D}_{\Gamma_1}(\bar{\Omega})$  le sous-espace de  $\mathcal{D}(\bar{\Omega})$  des fonctions nulles sur  $\Gamma_1$ . Si  $\Gamma_1$  est régulier, l'adhérence de  $\mathcal{D}_{\Gamma_1}(\bar{\Omega})$  dans  $H^1(\Omega)$  est  $H_{\Gamma_1}^1(\Omega)$ .

Démonstration :

Soit  $u \in H_{\Gamma_1}^1(\Omega)$ .  $\Gamma_1$  étant un ouvert régulier on montre qu'il existe une suite  $g_n \in \mathcal{D}(\Gamma)$  convergente vers  $\gamma_0 u \in H^{1/2}(\Gamma)$  et telle que  $g_n|_{\Gamma_1} = 0$ . Par ailleurs (cf. [12]) il existe une suite  $v_n$

dépendant continûment de  $g_n$ , telle que :

$$\begin{cases} \Delta v_n = 0 \\ \gamma_0 v_n = g_n \end{cases}$$

Comme  $g_n \in \mathcal{D}(\Gamma)$ , la solution  $v_n \in \mathcal{D}(\bar{\Omega})$  (cf. [12]).  $v_n$  converge vers  $v$  solution de :

$$\begin{cases} \Delta v = 0 \\ \gamma_0 v = \gamma_0 u \end{cases}$$



$v-u$  est donc dans  $H_0^1(\Omega) = \text{Ker } \gamma_0$ .  $\mathcal{D}(\Omega)$  étant dense dans  $H_0^1(\Omega)$  il existe une suite  $u_n \in \mathcal{D}(\Omega)$  qui converge vers  $u-v$ . Nous avons donc :

$$u_n + v_n \in \mathcal{D}_{\Gamma_1}(\bar{\Omega})$$

$$u_n + v_n \xrightarrow{H^1(\Omega)} u$$

la proposition est démontrée.

—————~~x~~

#### 1.6. PROPOSITION :

*La solution  $u$  du problème  $P_I$  est invariante par rotation  $(Oz, \theta)$ .*

Démonstration :

$u$  vérifie :

$$\forall v \in H_{\Gamma_1}^1(\Omega) \quad (\nabla u, \nabla v)_{L^2(\Omega)} + \langle \varphi(\gamma_0 u), \gamma_0 v \rangle_{\Gamma} = 0$$

La proposition 1.5. montre que  $v_{-\theta} \in H_{\Gamma_1}^1(\Omega)$ . En effet  $\mathcal{Y}_{-\theta}$  laisse invariant  $\mathcal{D}_{\Gamma_1}(\bar{\Omega})$  et par densité  $v_{-\theta} \in H_{\Gamma_1}^1(\Omega)$ . Nous avons alors

avec 1.4. :

$$\begin{aligned} 0 &= (\nabla u, \nabla v_{-\theta})_{L^2(\Omega)} + \langle \varphi(\gamma_0 u), \gamma_0 v_{-\theta} \rangle_{\Gamma} \\ &= (\nabla u_{\theta}, \nabla v)_{L^2(\Omega)} + \langle \varphi(\gamma_0 u_{\theta}), \gamma_0 v \rangle_{\Gamma} \end{aligned}$$

$u_{\theta}$  est donc solution de  $P_J$ . Puisqu'il y a unicité :

$$\forall \theta \in \mathbb{R} \quad u_{\theta} = u .$$

-----\*

1.7. REMARQUE :

Un raisonnement analogue montre que la solution du problème linéarisé  $P_J$  (chapitre III, paragraphe 6.3.) est aussi invariante par rotation  $(Oz, \theta)$ .

1.8. DEFINITION :

Nous désignerons par  $V$  le sous-espace de  $H_{\Gamma_1}^1(\Omega)$  des fonctions invariantes par rotation :

$$V = \{u \in H_{\Gamma_1}^1(\Omega) \mid \forall \theta \in \mathbb{R} \quad u_{\theta} = u\}$$

$V$  est un sous-espace fermé de  $H_{\Gamma_1}^1(\Omega)$  puisque  $\mathcal{Y}_{\theta}$  est continue.

Nous avons maintenant une nouvelle formulation variationnelle pour les problèmes  $P_L$  et  $P_I$ .

1.9. PROPOSITION :

i)  $u$  est solution de  $P_I$  si et seulement si :  
 $u \in V$  et

$$\forall v \in V \quad (\nabla u, \nabla v)_{L^2(\Omega)} + \langle \varphi(\gamma_0 u), \gamma_0 v \rangle_{\Gamma} = 0$$

ii)  $u$  est solution de  $P_L$  si et seulement si :

$u \in V$  et

$$\forall v \in V \quad (\nabla u, \nabla v)_{L^2(\Omega)} + \lambda \langle \gamma_0 u, \gamma_0 v \rangle_{\Gamma} = \\ = \langle -\varphi(\gamma_0 w) + \lambda \gamma_0 w, \gamma_0 v \rangle_{\Gamma}$$

Démonstration :

i) - Puisque  $V \subset H_{\Gamma_1}^1(\Omega)$  la solution  $u$  de  $P_I$  vérifie  $u \in V$   
et :

$$\forall v \in V \quad (\nabla u, \nabla v)_{L^2(\Omega)} + \langle \varphi(\gamma_0 u), \gamma_0 v \rangle_{\Gamma} = 0$$

Et comme la solution de cette équation est unique, (même raisonnement que pour la formulation variationnelle initiale), l'équivalence est vérifiée.

ii) démonstration identique.

Nous introduisons donc de façon naturelle :

## 2. APPROXIMATION DU PROBLEME $P_I$ PAR DES ELEMENTS FINIS DE REVOLUTION

Le traitement de la frontière libre  $\Gamma_1$  nécessite un changement de maillage pour chaque itération sur l'interface. La méthode d'éléments finis nous a paru mieux adaptée que les différences finies pour traiter ce problème.

Etant donnée la symétrie de révolution du problème nous cherchons la solution numérique de  $P_I$  dans un sous-espace de dimension finie de fonctions invariantes par rotation.

### 2.1. LE SOUS-ESPACE $V_h$ DE $V$ :

Désignons par  $\omega$  l'ouvert borné de  $\mathbb{R}^2$  suivant :

$$\omega = \Omega \cap \{(x,y,z) \in \mathbb{R}^3 \mid x > 0 \quad y = 0\}$$

Nous supposons que  $\omega$  est un ouvert polygonal de  $\mathbb{R}^2$ . Nous donnons sur  $\bar{\omega}$  une triangulation  $\mathcal{T}_h$  définie ainsi : (cf. [4] ),

- i)  $\forall T \in \mathcal{T}_h \quad T \subset \bar{\omega} \quad \bigcup_{T \in \mathcal{T}_h} T = \bar{\omega}$
- ii) Si  $T_1$  et  $T_2$  appartiennent à  $\mathcal{T}_h$ , on a soit  $T_1 \cap T_2 = \emptyset$ , soit leur intersection réduite à un côté ou un sommet.

iii) Si l'on pose  $\Gamma_{1h} = \bar{\Gamma}_1 \cap \bar{\omega}$  et  $\Gamma_{2h} = \Gamma_2 \cap \bar{\omega}$   
 alors  $\Gamma_{1h}$  et  $\Gamma_{2h}$  sont réunions de côtés de triangles.

Le paramètre  $h$  "mesure" la triangulation :  
 c'est le plus grand diamètre des triangles construits.

Nous désignerons les noeuds du maillage par  $N_i$ .

Un noeud  $N_j \neq N_i$  sera dit voisin de  $N_i$  s'ils sont sommets d'un même triangle. Enfin, nous notons :

$$\begin{aligned} \mathcal{V}(i) &= \{j \in \mathbb{N} \mid N_j \text{ voisin de } N_i\} \\ I_{\bar{\omega}} &= \{i \in \mathbb{N} \mid N_i \in \bar{\omega}\} \\ I_1 &= \{i \in \mathbb{N} \mid N_i \in \Gamma_{1h}\} \\ I_2 &= \{i \in \mathbb{N} \mid N_i \in \Gamma_{2h}\} \end{aligned}$$

Associons maintenant à  $\mathcal{E}_h$  les sous-espaces suivants :

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_h &= \{u \in \mathcal{C}^0(\bar{\omega}) \mid \forall T \in \mathcal{E}_h \quad u|_T \text{ affine}\} \\ \mathcal{V}_h &= \{u \in \mathcal{W}_h \mid u = 0 \text{ sur } \Gamma_{1h}\} \end{aligned}$$

Définissons une base pour  $\mathcal{W}_h$  et  $\mathcal{V}_h$  :

soit  $b_i \in \mathcal{W}_h$  tel que  $b_i(N_j) = \delta_{ij} \quad \forall j \in I_{\bar{\omega}}$

$\{b_i\}_{i \in I_{\bar{\omega}}}$  est une base de  $\mathcal{W}_h$ .

$\{b_i\}_{i \in I_{\bar{\omega}} \setminus I_1}$  est une base de  $\mathcal{V}_h$ .

Nous construisons maintenant  $V_h$  à partir des fonctions de base  $b_i$  de  $\mathcal{V}_h$  par l'application

$$\mathcal{Y} : \text{Lip}(\bar{\omega}) \rightarrow \text{Lip}(\bar{\Omega})$$

définie par

$$\mathcal{Y}f(x,y,z) = f(\sqrt{x^2+y^2}, z)$$

$\text{Lip}(\bar{\omega})$  (respectivement  $\text{Lip}(\bar{\Omega})$ ) désigne l'espace des fonctions Lipschitziennes sur  $\bar{\omega}$  (respectivement  $\bar{\Omega}$ ).

Il est clair que les fonctions  $\mathcal{Y}b_i$  engendrent un espace  $V_h$  dont les éléments sont invariants par rotation d'axe  $Oz$ . On a aussi  $\dim V_h = \dim \mathcal{U}_h$ .

Pour ramener le problème  $P_I$  dans  $\mathbb{R}^2$  nous introduisons cf. [13] ) :

$$L_r^2(\omega) = \{u \text{ mesurables} \mid \int_{\omega} u^2 r dr dz < +\infty\}$$

$$H_r^1(\omega) = \{u \in L_r^2(\omega) \mid \frac{\partial u}{\partial r}, \frac{\partial u}{\partial z} \in L_r^2(\omega)\}$$

Muni du produit scalaire

$$(u,v)_{H_r^1(\omega)} = \int_{\omega} uv r dr dz + \int_{\omega} \left( \frac{\partial u}{\partial r} \frac{\partial v}{\partial r} + \frac{\partial u}{\partial z} \frac{\partial v}{\partial z} \right) r dr dz$$

$H_r^1(\omega)$  est un espace de Hilbert.

### 2.1.1. Proposition

L'application  $\mathcal{Y}$  s'étend en une application linéaire et continue de  $H_r^1(\omega)$  dans  $H^1(\Omega)$  et on a :

$$\|\mathcal{Y}f\|_{H^1(\Omega)} = \sqrt{2\pi} \|f\|_{H_r^1(\omega)}$$

Démonstration :

$\mathcal{C}^\infty(\bar{\omega})$  est partout dense dans  $H^1_r(\omega)$ , (cf. Nečas [13]).

$\mathcal{J}$  est une application de  $\mathcal{C}^\infty(\bar{\omega})$  dans  $\text{Lip}(\bar{\Omega}) \subset H^1(\Omega)$

Calculons :

$$\|\mathcal{J}f\|_{H^1(\Omega)}^2 = \|\mathcal{J}f\|_{L^2(\Omega)}^2 + \left\| \frac{\partial \mathcal{J}f}{\partial x} \right\|_{L^2(\Omega)}^2 + \left\| \frac{\partial \mathcal{J}f}{\partial y} \right\|_{L^2(\Omega)}^2 + \left\| \frac{\partial \mathcal{J}f}{\partial z} \right\|_{L^2(\Omega)}^2$$

Or

$$\int_{\Omega} (\mathcal{J}f(x,y,z))^2 dx dy dz = \int_0^{2\pi} d\theta \int_{\omega} f^2(r,z) r dr dz = 2\pi \|f\|_{L^2_r(\omega)}^2$$

D'autre part :

$$\frac{\partial \mathcal{J}f}{\partial x} = \frac{\partial f}{\partial r} \frac{x}{r} \quad \text{pour} \quad x^2 + y^2 = r^2 \neq 0$$

D'où :

$$\int_{\Omega} \left( \frac{\partial \mathcal{J}f}{\partial x} \right)^2 dx dy dz = \int_0^{2\pi} d\theta \cos^2 \theta \int_{\omega} \left( \frac{\partial f}{\partial r} \right)^2 r dr dz$$

En définitive on trouve :

$$\|\mathcal{J}f\|_{H^1(\Omega)} = \sqrt{2\pi} \|f\|_{H^1_r(\omega)}$$

et l'application  $\mathcal{J}$  s'étend par densité à tout  $H^1_r(\omega)$  avec la même égalité de normes.

— x —

Nous avons remarqué que sur  $V$ , le produit scalaire  $(\nabla u, \nabla v)_{L^2(\Omega)}$  définissait une norme équivalente à la norme induite par  $H^1(\Omega)$ . Nous noterons :

$r_h$  : la projection de  $V$  sur  $V_h$  au sens de ce produit scalaire  
 $p_h$  : l'injection de  $V_h$  dans  $V$ .

En général nous omettrons d'écrire  $p_h$  pour avoir une notation plus simple.

## 2.2. LE PROBLEME $P_I(h)$ :

La solution numérique du problème  $P_I$  par la méthode des éléments finis consiste à :

$$P_I(h) \left\{ \begin{array}{l} \text{Trouver } u_h \in V_h \text{ tel que :} \\ \forall v_h \in V_h \quad (\nabla u_h, \nabla v_h)_{L^2(\Omega)} + \langle \varphi(\gamma_0 u_h), \gamma_0 v_h \rangle_\Gamma = 0 \end{array} \right.$$

On peut montrer l'existence et l'unicité d'une solution de  $P_I(h)$  par des arguments analogues à ceux développés au chapitre III. La convergence de l'algorithme proposés en 3.3. en donne une autre démonstration. Pour résoudre  $P_I(h)$  nous linéarisons comme nous l'avons expliqué au chapitre III, paragraphe 6.2.

## 3. ALGORITHME DE RESOLUTION DE $P_I(h)$

La linéarisation de  $P_I(h)$  conduit à :

$$P_L(h) \left\{ \begin{array}{l} \text{Etant donné } w_h \in V_h \text{ trouver } u_h \in V_h \text{ tel que :} \\ \forall v_h \in V_h \quad (\nabla u_h, \nabla v_h)_{L^2(\Omega)} + \lambda \langle \gamma_0 u_h, \gamma_0 v_h \rangle_\Gamma = \\ \qquad \qquad \qquad = \langle -\varphi(\gamma_0 w_h) + \lambda \gamma_0 w_h, \gamma_0 v_h \rangle_\Gamma \end{array} \right.$$



La solution  $u_h$  existe et est unique. Nous avons donc :

### 3.1. L'OPERATEUR $\Lambda_h$ :

$\Lambda_h$  est l'opérateur de  $V_h$  dans  $V_h$  qui associe à  $w_h$  la solution  $u_h$  de  $P_L(h)$ .

Désignons par  $q_h$  la projection de  $V$  sur  $V_h$  au sens du produit scalaire :

$$(\nabla u, \nabla v)_{L^2(\Omega)} + \lambda \langle \gamma_0 u, \gamma_0 v \rangle_\Gamma \quad (\lambda > 0)$$

#### 3.1.1. Proposition :

$$\Lambda_h = q_h \Lambda P_h$$

Démonstration :

Soit  $w_h \in V_h$ .  $\Lambda P_h w_h$  vérifie :

$$\begin{aligned} \forall v \in V \quad & (\nabla(\Lambda P_h w_h), \nabla v)_{L^2(\Omega)} + \lambda \langle \gamma_0(\Lambda P_h w_h), \gamma_0 v \rangle_\Gamma = \\ & = \langle -\varphi(\gamma_0 w_h) + \lambda \gamma_0 w_h, \gamma_0 v \rangle_\Gamma \end{aligned}$$

En écrivant la propriété d'orthogonalité pour les projections on obtient :

$$\begin{aligned} \forall v_h \in V_h \quad & (\nabla(q_h \Lambda P_h w_h), \nabla v_h)_{L^2(\Omega)} + \lambda \langle \gamma_0(q_h \Lambda P_h w_h), \gamma_0 v_h \rangle_\Gamma = \\ & = \langle -\varphi(\gamma_0 w_h) + \lambda \gamma_0 w_h, \gamma_0 v_h \rangle_\Gamma \end{aligned}$$

$q_h \wedge p_h w_h$  est donc solution de  $P_L(h)$ , l'unicité implique  
 $u_h = \Lambda_h w_h = q_h \wedge p_h w_h$  et donc  $\Lambda_h = q_h \wedge p_h$ .

—————~~x~~

L'interprétation géométrique de 3.1.1. est que la solution numérique de  $P_L(h)$  est la projection sur  $V_h$  de la solution du problème continu associé.

D'une manière analogue à 6.3.4. au chapitre III nous définissons

### 3.2. SOUS-(SUR)-SOLUTIONS NUMERIQUES :

*Nous dirons que  $u_h$  est une sous-(sur)-solution numérique si*  
 $\Lambda_h u_h \geq u_h \quad (\Lambda_h u_h \leq u_h)$ .

La positivité est prise au sens classique puisque  $V_h \subset \mathcal{C}^0(\bar{\Omega})$ .

### 3.3. ALGORITHME NUMERIQUE :

L'algorithme que nous décrivons utilise comme au paragraphe 6, chapitre III, les techniques de sous-solutions et sur-solutions. On obtient un encadrement de la solution. La démonstration de la convergence donne l'existence et l'unicité d'une solution de  $P_I(h)$ . L'algorithme est le suivant :

- (a) Détermination d'une sous-solution  $u_h^0$  et d'une sur-solution  $v_h^0$ .
- (b) Construction des suites  $u_h^n = \Lambda_h u_h^{n-1}$  et  $v_h^n = \Lambda_h v_h^{n-1}$ .

Nous allons montrer la convergence sous l'hypothèse suivante :

(N.N) Soit  $\phi_h$  l'opérateur de  $L^2(\Gamma)$  dans  $V_h$  qui associe à  $g$  la solution dans  $V_h$ ,  $\phi_h(g)$ , de l'équation

$\forall v_h \in V_h :$

$$(\nabla \phi_h(g), \nabla v_h)_{L^2(\Omega)} + \lambda \langle \gamma_0 \phi_h(g), \gamma_0 v_h \rangle_\Gamma = \langle g, \gamma_0 v_h \rangle_\Gamma$$

On suppose que  $\phi_h$  est positif au sens suivant :

$$g \geq 0 \Rightarrow \phi_h(g) \geq 0 .$$

Cette hypothèse est très liée au principe du maximum discret et à la notion de triangulation non-négative (voir Ciarlet-Raviart [6]). Nous développerons ce point au paragraphe 4.

La démonstration de la convergence de l'algorithme sera basée sur la croissance de  $\Lambda_h$  que nous montrons dans le lemme suivant :

3.3.1. Lemme :

$\Lambda_h$  est un opérateur croissant de  $V_h$  dans  $V_h$  :

$$v_h^1 \geq v_h^2 \Rightarrow \Lambda_h v_h^1 \geq \Lambda_h v_h^2$$

Démonstration :

Le choix de  $\lambda$  permet d'écrire :

$$-\varphi(\gamma_0 v_h^1) + \lambda \gamma_0 v_h^1 + \varphi(\gamma_0 v_h^2) - \lambda \gamma_0 v_h^2 \geq 0 \quad \text{p.p. sur } \Gamma$$

$$(N.N) \Rightarrow \phi_h(-\varphi(\gamma_0 v_h^1) + \lambda \gamma_0 v_h^1 + \varphi(\gamma_0 v_h^2) - \lambda \gamma_0 v_h^2) \geq 0$$

Ce qui équivaut avec la linéarité de  $\phi_h$  et la définition de  $\Lambda_h$  à :

$$\Lambda_h v_h^1 - \Lambda_h v_h^2 \geq 0.$$

————— x

### 3.3.2. Théorème :

Sous l'hypothèse (N.N) on a :

i)  $u_h^0 = 0$  est une sur-solution numérique

$v_h^0 = u_a - T_f$  est une sous-solution numérique

ii) les itérations  $u_h^n = \Lambda_h u_h^{n-1}$  et  $v_h^n = \Lambda_h v_h^{n-1}$  sont convergentes vers l'unique solution de  $P_I(h)$ .

i) Rappelons les hypothèses faites sur  $\varphi$  au chapitre III, paragraphe 2.3. :

$$0 \leq \varphi(0)$$

$$\varphi(u_a - T_f) \leq 0$$

$-\varphi(0) \leq 0$  et (N.N) impliquent  $-\Lambda_h(0) \geq 0$

$u_h^0 = 0$  est donc une sur-solution numérique. D'autre part on vérifie facilement que :

$$\phi_h(-\varphi(u_a - T_f)) = \Lambda_h(u_a - T_f) - (u_a - T_f)$$

$\varphi(u_a - T_f) \leq 0$  et (N.N) impliquent que :

$$\Lambda_h(u_a - T_f) \geq u_a - T_f$$

$v_h^0 = u_a - T_f$  est donc une sous-solution numérique.

ii) Les suites  $u_h^n = \Lambda_h u_h^{n-1}$  et  $v_h^n = \Lambda_h v_h^{n-1}$  ainsi générées sont monotones et avec la croissance de  $\Lambda_h$  on a :

$$v_h^0 \leq v_h^1 \leq \dots \leq v_h^n \leq \dots \leq u_h^n \leq \dots \leq u_h^1 \leq u_h^0$$

$u_h^n$  et  $v_h^n$  étant bornées et monotones, elles convergent donc vers  $u_h$  et  $v_h$  qui sont solutions de  $P_I(h)$ .

L'unicité s'obtient comme dans le cas continu avec la coercivité.

— X —

#### 4. CONDITIONS SUFFISANTES SUR LA TRIANGULATION $\mathcal{T}_h$

La solution de  $P_L(h)$  est donnée par la résolution d'un système linéaire que nous explicitons :

4.1. MATRICE DU PROBLEME  $P_L(h)$  :

Appelons  $\{s_i\}$  la base de  $V_h$  construite en 2.1. et  $N(h)$  la dimension de  $V_h$ .

Etant donné  $w_h \in V_h$ , la solution  $u_h = \sum_{k=1}^{N(h)} \xi_k s_k$  du

problème  $P_L(h)$  associé vérifie :

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{N(h)} [(\nabla s_k, \nabla s_i)_{L^2(\Omega)} + \lambda \langle \gamma_0 s_k, \gamma_0 s_i \rangle_\Gamma] \xi_k &= \\ &= \langle -\varphi(\gamma_0 w_h) + \lambda \gamma_0 w_h, \gamma_0 s_i \rangle_\Gamma \quad i=1, \dots, N(h) \end{aligned}$$

Notons  $G = \{g_{ij}\}$  la matrice de ce système linéaire.

4.1.1. Proposition :

$G$  est une matrice symétrique définie positive

Démonstration :

$G$  est trivialement symétrique

Soit  $X = [x_1, \dots, x_{N(h)}] \in \mathbb{R}^{N(h)}$  et  $u_h = \sum_{i=1}^{N(h)} x_i s_i$

$$X^t G X = (\nabla u_h, \nabla u_h)_{L^2(\Omega)} + \lambda \langle \gamma_0 u_h, \gamma_0 u_h \rangle_\Gamma \geq c \|u_h\|_{H^1(\Omega)}^2 \quad \text{avec } c > 0$$

$G$  est donc définie positive.

#### 4.1.2. Remarque

La proposition 4.1.1. montre l'existence d'une solution du problème linéarisé  $P_L(h)$ .

#### 4.2. PRINCIPE DU MAXIMUM DISCRET

Nous donnons dans ce paragraphe des conditions sur  $\mathcal{T}_h$  qui assureront l'hypothèse (N.N). Elles sont à rapprocher des conditions données dans [6] pour l'étude de la convergence uniforme de la méthode des éléments finis pour un problème de Dirichlet modèle.

Nous dirons qu'une triangulation  $\mathcal{T}_h$  est non-négative si les deux hypothèses suivantes sont vérifiées :

$(\mathcal{E})_1$  : pour tout  $h > 0$  et tout triangle  $T \in \mathcal{T}_h$ , les angles de  $T$  sont inférieurs strictement à  $\pi/2$

$(\mathcal{E})_2$  : pour tout  $h > 0$  et tout triangle  $T$  ayant un côté commun à  $\Gamma_{2h}$ , l'angle opposé à ce côté est inférieur à  $\frac{\pi}{2} - \epsilon$  ( $\epsilon > 0$  indépendant de  $h$ )

La proposition suivante permet d'assurer que l'hypothèse (N.N) est vérifiée.

##### 4.2.1. Proposition

Soit  $X = [x_1, \dots, x_{N(h)}] \in \mathbb{R}^{N(h)}$  tel que  $GX \geq 0$ .

Sous les hypothèses  $(\mathcal{E})_1$  et  $(\mathcal{E})_2$  et pour  $h$  assez petit on a  $X \geq 0$ .

Démontrons d'abord le lemme technique suivant :

4.2.2. Lemme :

Sous les hypothèses  $(\mathcal{E})_1$  et  $(\mathcal{E})_2$  et pour  $h$  suffisamment petit on a :

- i)  $g_{ii} > 0 \quad \forall i \in N(h)$
- ii)  $\forall j \notin \mathcal{V}(i) \quad j \neq i \quad g_{ij} = 0$
- iii)  $\forall j \in \mathcal{V}(i) \quad j \neq i \quad g_{ij} < 0$
- iv) Si  $i \notin I_2$  et  $\mathcal{V}(i) \cap I_1 = \emptyset$   
 $N(h)$   
 $\sum_{j=1} g_{ij} = 0$   
 sinon  $\sum_{j=1}^{N(h)} g_{ij} > 0$  .

Démonstration

i)  $\forall i \in N(h)$

$$g_{ii} = (\nabla s_i, \nabla s_i)_{L^2(\Omega)} + \lambda \langle \gamma_{0i} s_i, \gamma_{0i} s_i \rangle_{\Gamma} \geq \|\nabla s_i\|_{L^2(\Omega)}^2$$

donc  $g_{ii} > 0$  car  $s_i \neq 0$  .

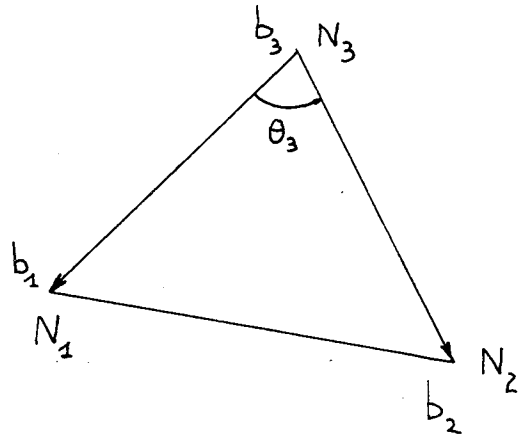
ii) Ce point est trivial par construction des  $b_i$  .



iii) a) Considérons le cas où  $i \in I_2$

Sur un triangle  $T$  de sommets  $N_1(r_1, z_1)$ ,  $N_2(r_2, z_2)$ ,  $N_3(r_3, z_3)$ , les polynomes de base du premier degré  $b_1, b_2, b_3$  sont tels que :

$$\nabla b_1 \cdot \nabla b_2 = - \frac{\overrightarrow{N_3 N_1} \cdot \overrightarrow{N_3 N_2}}{(2 \text{ Aire } (T))^2}$$



$\nabla b_2 \nabla b_3$  et  $\nabla b_3 \nabla b_1$  se déduisent par permutation circulaire. On obtient alors :

$$\int_T \nabla b_1 \nabla b_2 \, r dr dz = - \frac{\overrightarrow{N_3 N_1} \cdot \overrightarrow{N_3 N_2}}{[2 \text{ Aire } (T)]^2} \cdot 2 \text{ Aire } (T) \frac{r_1 + r_2 + r_3}{6}$$

Comme  $2 \text{ Aire } (T) = |\overrightarrow{N_3 N_1}| |\overrightarrow{N_3 N_2}| \sin \theta_3$  on a :

$$\int_T \nabla b_1 \nabla b_2 \, r dr dz = - \frac{\cos \theta_3}{\sin \theta_3} \frac{r_1 + r_2 + r_3}{6}$$

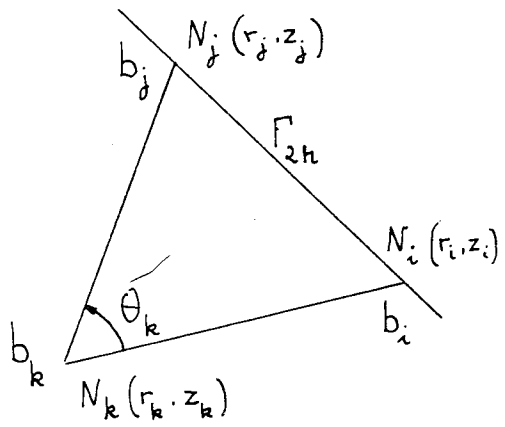
L'hypothèse  $(\mathcal{C})_1$  assure que  $\frac{\cos \theta_3}{\sin \theta_3} > 0$  et

iii) est démontré dans ce cas.

b) Regardons le cas où  $i \in I_2$

Il faut donc considérer un triangle  $T$  ayant un côté commun avec  $\Gamma_{2h}$  et il va s'introduire un terme de bord positif.

Soit donc  $T$  un triangle de sommets  $N_i, N_j, N_k$  et  $\tilde{T}$  le volume engendré par rotation de  $T$  autour de  $Oz$ .  
 Nous avons :



$$\int_{\tilde{T}} (\nabla \mathcal{J}_{b_i} \nabla \mathcal{J}_{b_j}) dx dy dz = 2\pi \int_T \nabla b_i \nabla b_j r dr dz$$

$$= -2\pi \frac{\cos \theta_k}{\sin \theta_k} \frac{r_i + r_j + r_k}{6}$$

Evaluons le terme de bord :

$$\langle \gamma_0 \mathcal{J}_{b_i}, \gamma_0 \mathcal{J}_{b_j} \rangle_{\Gamma} = \int_{\Gamma_2} \gamma_0 \mathcal{J}_{b_i}(m) \gamma_0 \mathcal{J}_{b_j}(m) d\sigma(m)$$

Désignons par  $ds$  la mesure superficielle sur la frontière  $\delta\omega$  de  $\omega$ .  
 On obtient :

$$\int_{\Gamma_2} \gamma_0 \mathcal{J}_{b_i}(m) \gamma_0 \mathcal{J}_{b_j}(m) d\sigma(m) =$$

$$= 2\pi \int_{\Gamma_{2h}} \gamma_0 b_i(r, z) \gamma_0 b_j(r, z) r ds(r, z)$$

Ce terme est évidemment positif et majoré par :

$$2\pi(r_i + r_j) \cdot |\vec{M}_i \vec{M}_j|$$

On obtient donc :

$$g_{ij} \leq -2\pi \frac{\cos \theta_k}{\sin \theta_k} \frac{r_i + r_j + r_k}{6} + 2\pi\lambda(r_i + r_j) |\vec{M}_i \vec{M}_j|$$

$$(\mathcal{E})_2 \Rightarrow \frac{\cos \theta_k}{\sin \theta_k} \geq \cos\left(\frac{\pi}{2} - \varepsilon\right) = c_\varepsilon > 0$$

$$g_{ij} \leq -2\pi(r_i + r_j) \left( \frac{c_\varepsilon}{6} - \lambda |\vec{M}_i \vec{M}_j| \right)$$

Dès que le maillage est assez fin sur la frontière  $\Gamma_{2h}$  on voit donc que  $g_{ij} < 0$

Le point iii) est donc démontré.

iv) a) Soit  $i \in I_2$  tel que  $\mathcal{U}(i) \cap I_1 = \emptyset$

Sur la réunion des triangles ayant un sommet en  $i$ , on a :

$$b_i = 1 - \sum_{j \in \mathcal{U}(i)} b_j$$

$$(\nabla b_i, \nabla b_i)_{L_r^2(\omega)} = - \sum_{j \in \mathcal{U}(i)} (\nabla b_j, \nabla b_i)_{L_r^2(\omega)}$$

$$\begin{aligned} N(h) \sum_{j=1} 2\pi (\nabla b_i, \nabla b_j)_{L_r^2(\omega)} &= \sum_{j \in \mathcal{U}(i)} 2\pi (\nabla b_i, \nabla b_j)_{L_r^2(\omega)} + 2\pi (\nabla b_i, \nabla b_i)_{L_r^2(\omega)} \\ &= 0 \end{aligned}$$

b) Si  $i \in I_2$  il faut tenir compte des termes de bord qui sont strictement positifs. Dans le cas où  $\mathcal{U}(i) \cap I_1 = \emptyset$  on a encore :

$$N(h) \sum_{j=1} 2\pi (\nabla b_i, \nabla b_j)_{L_r^2(\omega)} = 0$$

par suite

$$N(h) \sum_{j=1} g_{ij} = \lambda \sum_{j=1}^{N(h)} \langle \gamma_0 \mathcal{J}_{b_i}, \gamma_0 \mathcal{J}_{b_j} \rangle_\Gamma > 0.$$

Si  $\mathcal{U}(i) \cap I_1 \neq \emptyset$  on peut encore écrire en considérant les éléments de base  $b_j$  de  $\mathcal{W}_h$  tels que  $j \in \mathcal{U}(i) \cap I_1$  :

$$\sum_{j=1}^{N(h)} 2\pi(\nabla b_i, \nabla b_j)_{L_r^2(\omega)} =$$

$$\sum_{j \in \{1 \dots N(h)\} \cup \{\mathcal{U}(i) \cap I_1\}} 2\pi(\nabla b_i, \nabla b_j)_{L_r^2(\omega)} - \sum_{j \in \mathcal{U}(i) \cap I_1} 2\pi(\nabla b_i, \nabla b_j)_{L_r^2(\omega)}$$

Un calcul analogue à iii) b) montre que :

$$2\pi \sum_{j \in \mathcal{U}(i) \cap I_1} (\nabla b_i, \nabla b_j)_{L_r^2(\omega)} < 0$$

et comme en iv) a) on a :

$$2\pi \sum_{j \in \{1 \dots N(h)\} \cup \{\mathcal{U}(i) \cap I_1\}} (\nabla b_i, \nabla b_j)_{L_r^2(\omega)} = 0$$

On en déduit, puisque les termes de bord sont positifs, que :

$$\sum_{j=1}^{N(h)} g_{ij} > 0,$$

et le lemme est démontré.

Démonstration de la proposition 4.2.1.

$$\text{Soit } x_{i_0} = \min_{i=1 \dots N(h)} x_i$$

L'équation  $i_0$  s'écrit :

$$\sum_{j=1}^{N(h)} g_{i_0 j} x_j = d_{i_0} \geq 0$$

soit encore :

$$\sum_{j=1}^{N(h)} g_{i_0 j} (x_j - x_{i_0}) + x_{i_0} \sum_{j=1}^{N(h)} g_{i_0 j} = d_{i_0} \geq 0 . \quad (1)$$

Supposons que  $i_0$  vérifie :

$$i_0 \notin I_2 \quad \text{et} \quad \mathcal{V}(i_0) \cap I_1 = \emptyset$$

Alors d'après iv) du lemme 4.2.2. (1) s'écrit

$$\sum_{j=1}^{N(h)} g_{i_0 j} (x_j - x_{i_0}) = d_{i_0} \geq 0 .$$

Comme  $g_{i_0 j} < 0 \quad \forall j \in \mathcal{V}(i_0) \quad j \neq i_0$  (4.2.2. iii) ,

on a  $x_j = x_{i_0} \quad \forall j \in \mathcal{V}(i_0)$  .

Le maillage étant connexe on peut se ramener au cas où

$$\mathcal{V}(i_0) \cap I_1 \neq \emptyset \quad \text{ou} \quad i_0 \in I_2 .$$

Dans l'équation (1) la quantité  $\sum_{j=1}^{N(h)} g_{i_0 j} (x_j - x_{i_0})$  étant négative ou

nulle on voit avec 4.2.2. iv) que nécessairement  $x_{i_0} \geq 0$  .

La proposition est donc démontrée.

#### 4.2.3. Remarque

La matrice  $G$  associée à la triangulation non négative  $\mathcal{T}_h$  est une M-matrice, [17], puisqu'elle vérifie  $GX \geq 0 \Rightarrow X \geq 0$ . Plus précisément nous avons montré qu'une matrice à diagonale positive faiblement dominante telle que les termes hors-diagonaux sont négatifs est une M-matrice.

#### 4.2.4. Remarque

Le principe du maximum pour le problème continu :

$$\left\{ \begin{array}{l} -\Delta u = 0 \\ u|_{\Gamma_1} = 0 \\ \lambda u + \frac{\partial u}{\partial n}|_{\Gamma_2} = h \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} h > 0 \text{ sur } \Gamma_2 \\ \neq \\ \lambda > 0 \end{array}$$

indique que le minimum est atteint en  $m_o \in \Gamma$ .

Si  $m_o \in \Gamma_1$  alors  $u \geq 0$ . Si  $m_o \in \Gamma_2$  on a :

$$\frac{\partial u}{\partial n}(m_o) \leq 0 \quad \text{et} \quad u(m_o) = \frac{1}{\lambda}(h - \frac{\partial u}{\partial n}) \geq 0$$

$u$  est donc positif sur  $\bar{\Omega}$ .

La démonstration de 4.2.1, c'est l'analogie discret du principe du maximum en continu.

#### 4.2.5. Remarque

Les triangles ayant un côté commun avec la frontière  $\Gamma_{2h}$  doivent garder l'angle opposé aigu quand  $h$  tend vers 0. Ceci montre que l'on a intérêt à prendre des triangles au bord qui "cherchent l'information loin vers l'intérieur".

La convergence uniforme de la méthode des éléments finis de révolution pourrait être étudiée comme dans [6]. Nous ne le ferons pas ici.

Nous allons montrer que l'étude de l'erreur dans  $H^1(\Omega)$  se ramène à un problème d'approximation.

### 5. MAJORATION DE L'ERREUR

Nous donnons dans ce paragraphe une majoration de l'erreur entre la solution théorique de  $P_I$  et la solution numérique de  $P_I(h)$  obtenue en résolvant le système linéaire explicité en 4.1.

Résumons :

i) la solution théorique  $u \in V$  de  $P_I$  vérifie :

$$\forall v \in V \quad (\nabla u, \nabla v)_{L^2(\Omega)} + \langle \varphi(\gamma_0 u), \gamma_0 v \rangle_{\Gamma} = 0$$

ii) la solution numérique  $u_h \in V_h$  de  $P_I(h)$  vérifie :

$$\forall v_h \in V_h \quad (\nabla u_h, \nabla v_h)_{L^2(\Omega)} + \langle \varphi(\gamma_0 u_h), \gamma_0 v_h \rangle_{\Gamma} = 0$$

iii) Notons  $u(h)$  la solution dans  $V$  de :

$$\begin{aligned} \forall v \in V \quad (\nabla u(h), \nabla v)_{L^2(\Omega)} + \lambda \langle \gamma_0 u(h), \gamma_0 v \rangle_{\Gamma} &= \\ &= \langle -\varphi(\gamma_0 r_h u) + \lambda \gamma_0 r_h u, \gamma_0 v \rangle_{\Gamma} \end{aligned}$$

### 5.1. LEMME

*Il existe une constante  $\beta > 0$  indépendante de  $h$  telle que :*

$$\|u - u(h)\|_{H^1(\Omega)} \leq 2\beta \|u - r_h u\|_{H^1(\Omega)}$$

Démonstration

$$\begin{aligned} (\nabla(u - u(h)), \nabla(u - u(h)))_{L^2(\Omega)} &= - \langle \varphi(\gamma_0 u), \gamma_0(u - u(h)) \rangle_{\Gamma} + \\ &+ \langle \varphi(\gamma_0 r_h u) + \lambda \gamma_0(u(h) - r_h u), \gamma_0(u - u(h)) \rangle_{\Gamma} \\ &= \langle \varphi(\gamma_0 r_h u) - \varphi(\gamma_0 u), \gamma_0(u - u(h)) \rangle_{\Gamma} + \underbrace{\lambda \langle \gamma_0(u(h) - u), \gamma_0(u - u(h)) \rangle_{\Gamma}}_{\leq 0} \\ &+ \lambda \langle \gamma_0(u - r_h u), \gamma_0(u - u(h)) \rangle_{\Gamma} \end{aligned}$$

Rappelons que  $\varphi$  est Lipschitzienne de constante  $\leq \lambda$

$$(\nabla(u - u(h)), \nabla(u - u(h)))_{L^2(\Omega)} \leq 2\lambda \|\gamma_0(u - u(h))\| \|\gamma_0(u - r_h u)\|$$



$u$  et  $u(h)$  étant nulles sur  $\Gamma_1$ , l'inégalité de Friedrichs donne :

$$\begin{aligned} c \|u-u(h)\|_{H^1(\Omega)}^2 &\leq \|\nabla(u-u(h))\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ &\leq 2\lambda \|\gamma_0\|^2 \|u-u(h)\|_{H^1(\Omega)} \|u-r_h u\|_{H^1(\Omega)} \end{aligned}$$

Le lemme est démontré en prenant  $\beta = \lambda \frac{\|\gamma_0\|^2}{c}$ .

— x —

## 5.2. LEMME

$$\|u_h - r_h u(h)\|_{H^1(\Omega)} \leq \beta \left(1 + 2\beta + \frac{2\beta}{\sqrt{c}}\right) \|u - r_h u\|_{H^1(\Omega)}$$

### Démonstration

Puisque  $r_h u(h)$  est la projection de  $u(h)$  sur  $V_h$  on a :

$$\forall v_h \in V_h \quad (\nabla(u(h) - r_h u(h)), \nabla v_h)_{L^2(\Omega)} = 0$$

D'où

$$\begin{aligned} &(\nabla(u_h - r_h u(h)), \nabla(u_h - r_h u(h)))_{L^2(\Omega)} = \\ &- \langle \varphi(\gamma_0 u_h), \gamma_0(u_h - r_h u(h)) \rangle_{\Gamma} + \langle \varphi(\gamma_0 r_h u) - \lambda \gamma_0(r_h u - u(h)), \gamma_0(u_h - r_h u(h)) \rangle_{\Gamma} = \\ &\langle \varphi(\gamma_0 r_h u) - \varphi(\gamma_0 r_h u(h)) + \varphi(\gamma_0 r_h u(h)) - \varphi(\gamma_0 u_h) \rangle_{\Gamma} \\ &\quad + \lambda \langle \gamma_0(u(h) - r_h u), \gamma_0(u_h - r_h u(h)) \rangle_{\Gamma} \end{aligned}$$

En utilisant la monotonie de  $\varphi$  et l'inégalité de Friedrichs il vient :

$$c \|u_h - r_h u(h)\|_{H^1(\Omega)}^2 \leq \lambda \|\gamma_0\|^2 \|u_h - r_h u(h)\|_{H^1(\Omega)} \{ \|u(h) - r_h u\|_{H^1(\Omega)} + \|r_h u - r_h u(h)\|_{H^1(\Omega)} \}$$

Comme  $\|r_h\| \leq \frac{1}{\sqrt{c}}$  et avec 5.1. on obtient :

$$\|u_h - r_h u(h)\|_{H^1(\Omega)}^2 \leq \beta \|u_h - r_h u(h)\|_{H^1(\Omega)} \left\{ (1+2\beta + \frac{2\beta}{\sqrt{c}}) \|u - r_h u\|_{H^1(\Omega)} \right\}$$

et le lemme est démontré.

— x —

### 5.3. PROPOSITION

*Il existe une constante  $K$  indépendante de  $h$  telle que :*

$$\|u - u_h\|_{H^1(\Omega)} \leq K \|u - r_h u\|_{H^1(\Omega)}$$

#### Démonstration

C'est immédiat à partir des lemmes 5.1. et 5.2. et l'on trouve

$$K = 1 + \beta \left( 5 + \frac{2}{\sqrt{c}} \right) + \beta^2 \left( 2 + \frac{2}{\sqrt{c}} \right) .$$

— x —

La question de l'erreur entre  $u$  et  $u_h$  est donc ramenée à l'évaluation de la distance entre  $u$  et  $V_h$ .

## 6. UN THEOREME DE CONVERGENCE

Associons à chaque triangle  $T \in \mathcal{T}_h$  les quantités :

$$h(T) = \text{diamètre}(T)$$

$$\rho(T) = \text{diamètre du cercle inscrit dans } T$$

$$h = \max_{T \in \mathcal{T}_h} h(T)$$

La triangulation  $\mathcal{T}_h$  est dite régulière s'il existe  $\gamma > 0$ , indépendante de  $h$  tel que :

$$0 < \gamma \leq \min_{T \in \mathcal{T}_h} (\rho(T) / h(T)) \quad \forall h > 0$$

Dans  $\mathbb{R}^2$  cette condition équivaut à la condition de Zlamal :

$\forall h > 0$ , tous les angles des  $T \in \mathcal{T}_h$  sont bornés inférieurement par une constante  $\theta_0 > 0$  (voir [4]).

### 6.1. THEOREME

Si la triangulation  $\mathcal{T}_h$  est régulière, on a :

$$\forall u \in V \quad \lim_{h \rightarrow 0} \|u - r_h u\|_{H^1(\Omega)} = 0$$

Les résultats classiques ne peuvent s'appliquer directement puisque  $V_h$  n'est pas à base polynomiale. Il convient de ramener le problème à deux dimensions :

6.1.1. Lemme

$\mathcal{D}(\bar{\Omega}) \cap V$  est dense dans  $V$  pour la norme  $H^1(\Omega)$ .

Démonstration

Soit  $u \in V$ . Etant donné  $\varepsilon > 0$ , il existe  $\tilde{u} \in \mathcal{D}(\bar{\Omega})$  tel que  $\|u - \tilde{u}\|_{H^1(\Omega)} < \varepsilon$ .

Posons :

$$\hat{u}(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \tilde{u}_\theta(x) d\theta \quad (\tilde{u}_\theta \text{ défini en 1.1.1.})$$

Il est clair que  $\hat{u} \in \mathcal{D}(\bar{\Omega}) \cap V$ .

Montrons que  $\hat{u}$  est la projection de  $\tilde{u}$  sur  $V$  pour la norme  $H^1(\Omega)$ .

Soit  $v \in V$ . Pour tout  $\theta \in \mathbb{R}$  on a  $v_\theta = v$

$$\begin{aligned} (v, \tilde{u} - \hat{u})_{L^2(\Omega)} + (\nabla v, \nabla(\tilde{u} - \hat{u}))_{L^2(\Omega)} &= \\ (v_{-\theta}, \tilde{u} - \hat{u})_{L^2(\Omega)} + (\nabla v_{-\theta}, \nabla(\tilde{u} - \hat{u}))_{L^2(\Omega)} &= \\ (v, \tilde{u}_\theta - \hat{u})_{L^2(\Omega)} + (\nabla v, \nabla(\tilde{u}_\theta - \hat{u}))_{L^2(\Omega)} \end{aligned}$$

Intégrons par rapport à  $\theta$ . Appliquons le théorème de Fubini et remarquons que :

$$\int_0^{2\pi} v(x) \tilde{u}_\theta(x) d\theta = 2\pi v(x) \hat{u}(x) \quad \text{et} \quad \nabla \hat{u}(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \nabla \tilde{u}_\theta(x) d\theta$$

On a donc :

$$2\pi[(v, \tilde{u}-\hat{u})_{L^2(\Omega)} + (\nabla v, \nabla(\tilde{u}-\hat{u}))_{L^2(\Omega)}] = 0$$

Par suite  $\|u-\hat{u}\|_{H^1(\Omega)} < \varepsilon$  et le lemme est démontré.

—\*—

6.1.2. Lemme :

Si la triangulation  $\mathcal{T}_h$  est régulière, on a :

$\forall u \in \mathcal{D}(\bar{\Omega}) \cap V$  il existe  $v_h \in V_h$  tel que :

$$\lim_{h \rightarrow 0} \|u-v_h\|_{H^1(\Omega)} = 0$$

Démonstration

Soit  $u \in \mathcal{D}(\bar{\Omega}) \cap V$ . Notons  $Tu$  sa trace sur  $\bar{\omega}$ .  $Tu|_{\Gamma_{1h}} = 0$ .

Comme la triangulation  $\mathcal{T}_h$  est régulière, la projection  $p_{\mathcal{U}_h}^\dagger(Tu)$  sur  $\mathcal{U}_h$  converge vers  $Tu$  dans  $H^1(\omega)$  fort (voir [5]). D'après 2.1.2.:

$$\begin{aligned} \|u - \mathcal{I}_{p_{\mathcal{U}_h}}(Tu)\|_{H^1(\Omega)} &= \|\mathcal{I}Tu - \mathcal{I}_{p_{\mathcal{U}_h}}(Tu)\|_{H^1(\Omega)} \\ &= \sqrt{2\pi} \|Tu - p_{\mathcal{U}_h}(Tu)\|_{H^1_r(\omega)} \end{aligned}$$

étant borné :  $\| \cdot \|_{H^1_r(\omega)} \leq R \| \cdot \|_{H^1(\Omega)}$

$\mathcal{I}_{p_{\mathcal{U}_h}}(Tu) \in V_h$  et converge donc vers  $u$  dans  $H^1(\Omega)$  fort.

—\*—

<sup>†</sup>  $p_{\mathcal{U}_h}$  est la projection de  $H^1(\omega)$  sur  $\mathcal{U}_h$  au sens du produit scalaire  $(\nabla u, \nabla v)_{L^2(\omega)}$ .

La démonstration du théorème 6.1. est maintenant immédiate :

Etant donné  $u \in V$ , on choisit  $\tilde{u}_\varepsilon \in \mathcal{D}(\bar{\Omega}) \cap V$  tel que  $\|u - \tilde{u}_\varepsilon\|_{H^1(\Omega)} < \varepsilon$ . D'après 6.2.1. il existe  $v_h$  tel que

$$\lim_{h \rightarrow 0} \|\tilde{u}_\varepsilon - v_h\|_{H^1(\Omega)} = 0. \text{ Donc } \lim_{h \rightarrow 0} \|u - r_h u\|_{H^1(\Omega)} \leq \varepsilon \text{ pour tout } \varepsilon > 0$$

et le théorème est démontré.

## 7. EXPERIENCES NUMERIQUES

Nous présentons ici les résultats numériques obtenus à partir des données physiques dans l'expérience de la croissance d'un cristal de germanium.

Un encadrement précis de la solution peut-être obtenu en menant de front sur chaque domaine (bain et cristal) une itération de sous-solutions  $T_n$  et de sur-solutions  $T^n$ . L'écart entre  $T_n$  et  $T^n$  en norme du max donne une majoration de l'erreur au pas  $n$ .

Les résultats après trois itérations sont portés sur la figure 7. nous avons pris comme :

$$\text{sous-solution initiale} \quad \left\{ \begin{array}{l} T = T_f = 937^\circ \text{ C dans le bain} \\ T = T_f - u_a = 573^\circ \text{ C dans le cristal} \end{array} \right.$$

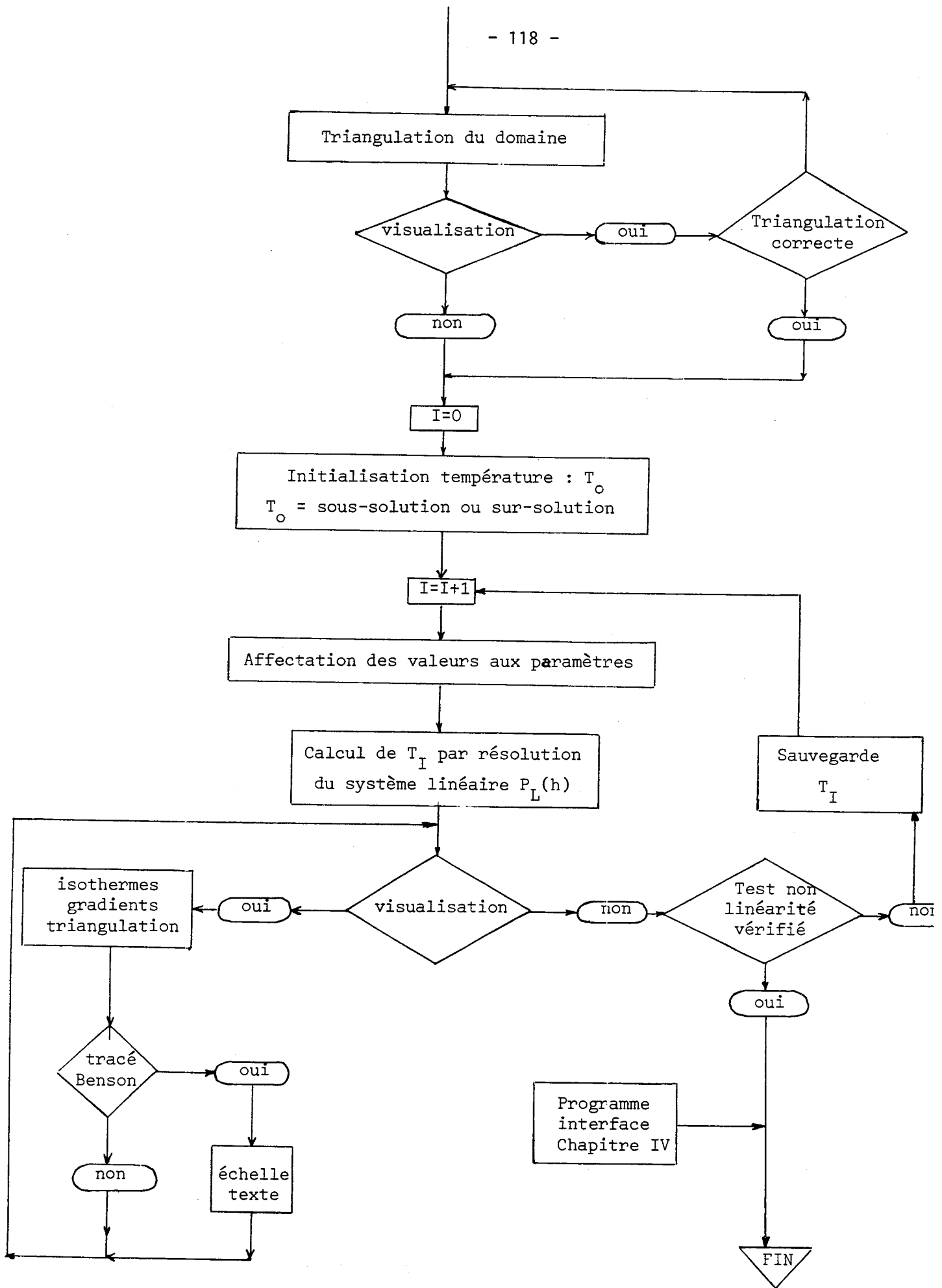
$$\text{sur-solution initiale} \quad \left\{ \begin{array}{l} T = T_c = 947^\circ \text{ C dans le bain} \\ T = T_f = 937^\circ \text{ C dans le cristal} \end{array} \right.$$

Dans le bain les isothermes sont stabilisés au cinquième de degrés. Dans le cristal les cinq premiers isothermes à partir de l'interface sont stabilisés au dixième de degré. Il faut remarquer qu'une précision de l'ordre du degré nous suffit : cette précision doit être en rapport avec les approximations faites.

En pratique on ne conduit pas ces deux itérations en parallèle et le test d'arrêt pour la non linéarité est réalisé lorsque l'écart entre deux itérés successifs en norme du max est inférieur à  $\epsilon > 0$ . Un tel test demande quelques précautions car l'écart entre deux itérés peut-être petit sans que l'on soit près de la solution (convergence lente). Le contrôle de l'itération est rendu facile avec le code de calcul utilisé :

Les expériences numériques ont été réalisées avec le code d'éléments finis DELTA [14] implanté à l'I.M.A.G., actuellement sous CP-CMS sur un IBM 360-67. Le caractère conversationnel de ce code permet de mener les itérations sans avoir à les prévoir à l'avance tout en restant en mémoire centrale. D'autre part, la visualisation sur écran des isothermes, des gradients, permet de s'apercevoir à chaque itération de la validité du calcul. On peut donc stopper ces calculs si les itérations ne se comportent pas bien (divergence, oscillations), on peut les poursuivre jusqu'à ce que l'on estime avoir un bon résultat. Ce contrôle vient donc s'ajouter au test d'arrêt.

L'organigramme de calcul est le suivant :





La résolution numérique de la non linéarité au bord est donc rapide dans la mesure où l'on cherche une température stabilisée au niveau de l'interface. On aura intérêt à partir de  $T = T_f$  comme sur-solution pour le cristal et sous-solution pour le bain. Les isothermes calculés sont satisfaisants, (figure 7).

Remarques :

i) On pourrait s'attendre à avoir des problèmes sur l'axe  $Oz$ . Mais le problème est placé dans  $\mathbb{R}^3$  et c'est le choix de  $V_h$  qui permet de nous ramener dans  $\mathbb{R}^2$  avec introduction d'un poids  $r$ . Il n'y a pas de singularités physiques sur  $Oz$  et le calcul numérique se comporte bien. Nous avons choisi des triangles près de l'axe de façon à ce que les termes de la matrice restent d'un même ordre de grandeur.

Pour le traitement d'un problème de résolution par des éléments finis non conformes on pourra regarder [10].

ii) L'utilisation de polynômes de degré 1 pourrait poser des problèmes pour les conditions de Neuman au bord (à cause de la dérivée normale). La formule de Green permet de passer par des termes de surface qui apparaissent dans la formulation variationnelle et éliminent les termes de dérivée normale.

INSTITUT DE MATHEMATIQUES APPLIQUEES DE GRENOBLE

\*\*\*\*\* PROBLEME AUX LIMITES SUR UN DOMAINE PLAN \*\*\*\*\*  
VISUALISATION DE TEMP APPROCHE AU DEGRE 1 SUR 160 POINTS

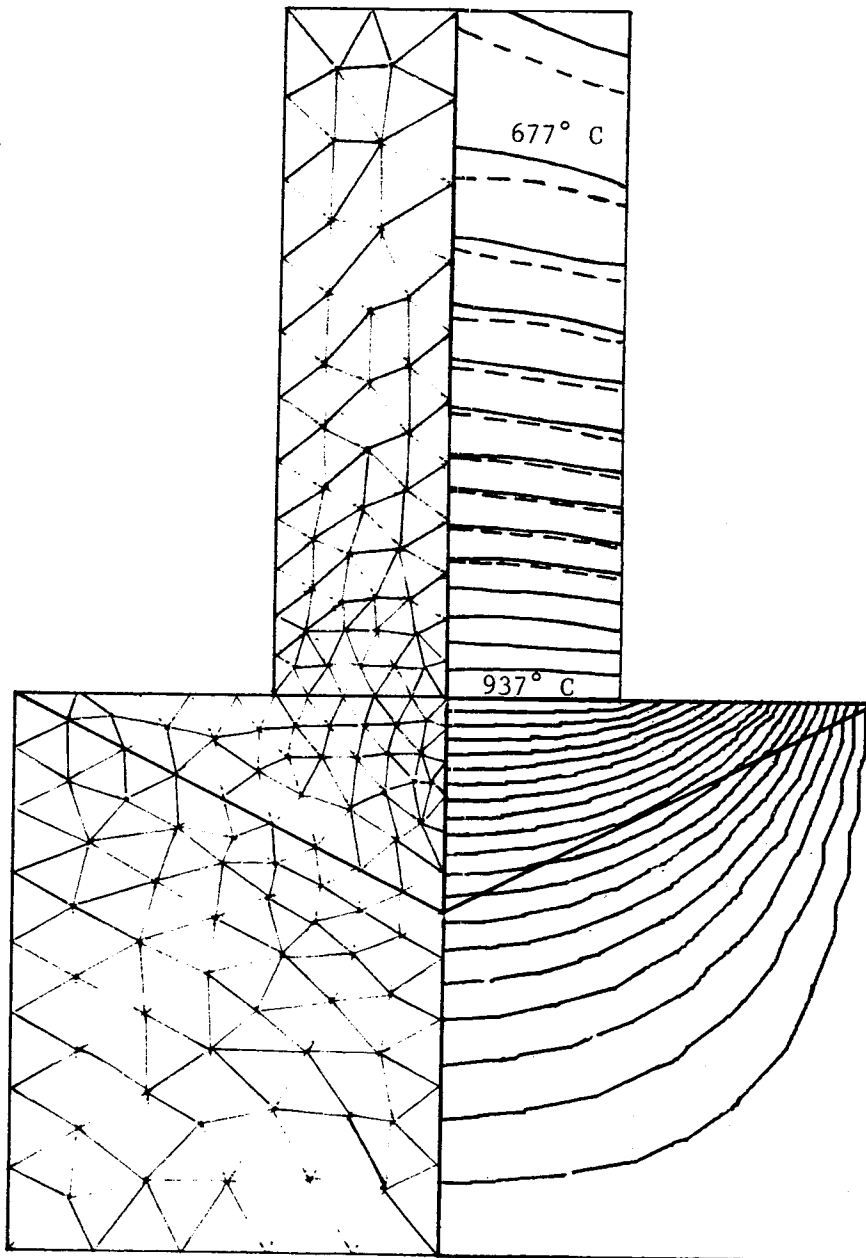


IMAGE DISPLAY NO 007 ECHELLE: 06/10

Figure 7

Triangulation du domaine.

Isothermes dans le bain de  $0^{\circ}5$  C en  $0^{\circ}5$  C (après deux itérations sous-solutions et sur-solutions sont confondues)

Isothermes dans le cristal de  $20^{\circ}$  en  $20^{\circ}$  C

—— Sur-solutions  
---- Sous-solutions } après trois itérations.



CHAPITRE V

SIMULATION DYNAMIQUE DE LA CROISSANCE  
CRISTALLINE PAR TIRAGE

---

- § 1. Méthode de résolution.
- § 2. Résolution numérique.
- § 3. Résultats numériques.

Ce chapitre est consacré au calcul de la forme de l'interface cristal-liquide.

Nous donnons au paragraphe 1 la méthode de résolution basée sur la simulation numérique de l'évolution réelle de la croissance du cristal.

L'organisation des calculs est décrite au paragraphe 2 et les conclusions sur les résultats numériques sont données au paragraphe 3.

# 1. LA METHODE DE RESOLUTION

## 1.1. LE SYSTEME DYNAMIQUE

Pour résoudre le problème a) b) c) d) e) énoncé au chapitre II, paragraphe 3, nous allons le faire apparaître comme étant la limite d'une évolution réelle de croissance d'un cristal. Pour cela nous revenons au problème physique pour décrire l'évolution du cristal durant l'expérience de croissance dans sa phase à diamètre constant.

Pour décrire le cristal, et l'interface liquide-solide, à l'instant  $t$ , nous introduisons deux fonctions  $h_1(x,y,t)$  et  $h_2(x,y,t)$  définies pour  $|(x,y)| \leq r_c$  et pour tout  $t \geq 0$ .

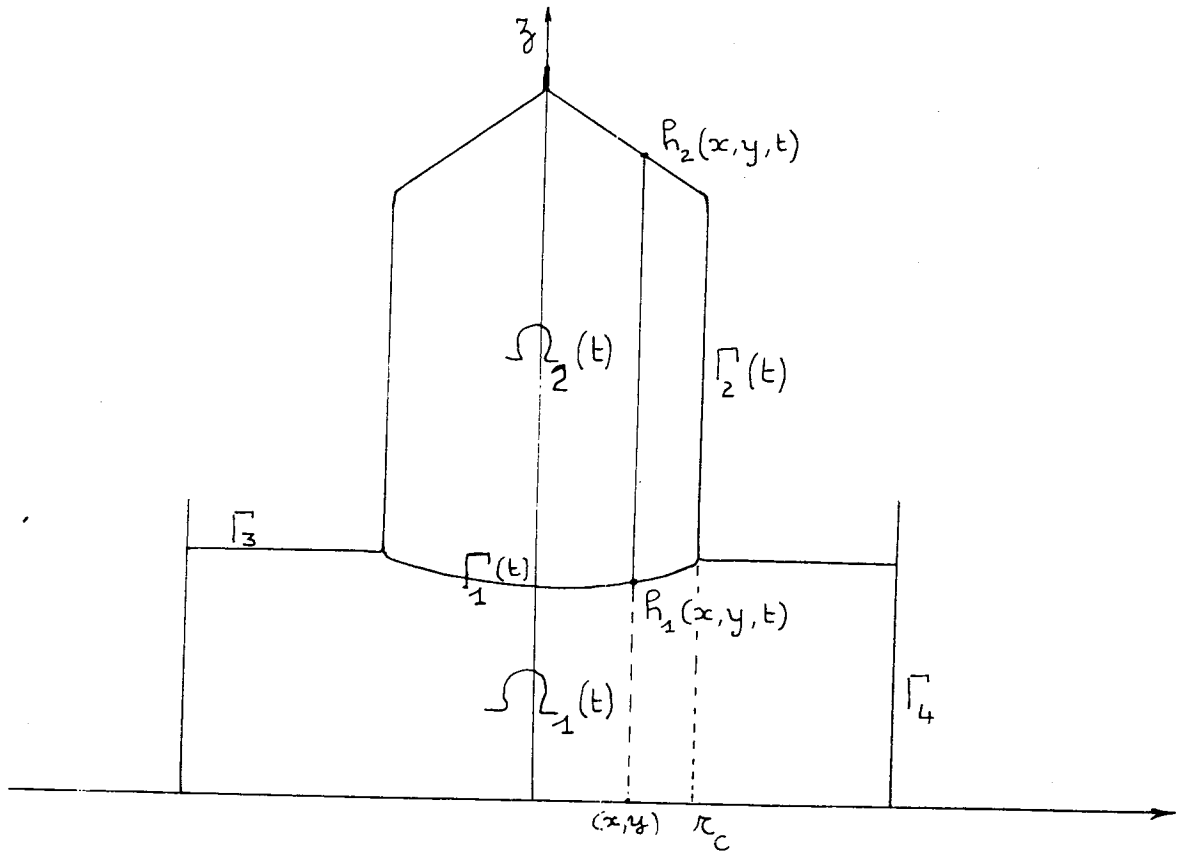


Figure 8

$h_1(x,y,t)$  et  $h_2(x,y,t)$  sont des fonctions invariantes par rotation et décrivent complètement la géométrie du cristal.

$h_2(x,y,t)$  décrit la tête du cristal.

$h_1(x,y,t)$  représente l'interface  $\Gamma_1(t)$  à l'instant  $t$ .

$\Omega_2(t)$  représente le cristal à l'instant  $t$ . La frontière de  $\Omega_2(t)$  est  $\Gamma_2(t) \cup \Gamma_1(t)$ .

$\Omega_1(t)$  représente le bain à l'instant  $t$ . La frontière de  $\Omega_1(t)$  est formée de :

$\Gamma_4$  : creuset

$\Gamma_3$  : surface du bain en contact avec le gaz ambiant

$\Gamma_1(t)$  : interface liquide-solide

$n_1$  (respectivement  $n_2$ ) représenteront les normales à  $\Omega_1(t)$  (respectivement  $\Omega_2(t)$ ) orientées vers l'extérieur de ces domaines.

L'évolution de la croissance est décrite par les conditions suivantes :

### 1.1.1. Vitesse de tirage

E(1)  $f(t)$  est la vitesse de tirage à l'instant  $t$ .

### 1.1.2. Evolution de la tête du cristal

$h_2(x,y,t+\Delta t)$  se déduit de  $h_2(x,y,t)$  par la translation qui résulte du tirage vers le haut pendant l'intervalle de temps  $[t,t+\Delta t]$ . On a :

$$E(2) \quad h_2(x,y,t+\Delta t) = h_2(x,y,t) + \int_t^{t+\Delta t} f(\xi) d\xi$$

### 1.1.3. Température dans le cristal à l'instant $t$

Le cristal à l'instant  $t$  est représenté par  $\Omega_2(t)$  où la température  $u_2(x,y,z,t)$  vérifie le système :  
(voir chapitre II, paragraphe 2.5.)

$$E(3) \quad \begin{cases} \rho_S C_S \frac{\partial U_2}{\partial t} + f(t) \rho_S C_S \frac{\partial U_2}{\partial z} - \lambda_S \Delta U_2 = 0 & \text{sur } \Omega_2(t) \\ \frac{\partial U_2}{\partial n_2} + \varphi_2(U_2) \Big|_{\Gamma_2(t)} = 0 \\ u_2 \Big|_{\Gamma_1(t)} = T_{\text{fusion}} \end{cases}$$

### 1.1.4. Température dans le bain à l'instant $t$

La température  $u_1(x,y,z,t)$  dans  $\Omega_1(t)$  vérifie :

$$E(4) \quad \begin{cases} \rho_l C_l \frac{\partial U_1}{\partial t} - \lambda_l \Delta U_1 = 0 & \text{sur } \Omega_1(t) \\ \frac{\partial U_1}{\partial n_1} + \varphi_1(u_1) \Big|_{\Gamma_3} = 0 \\ u_1 \Big|_{\Gamma_4} = T_C \quad \quad \quad u_1 \Big|_{\Gamma_1(t)} = T_{\text{fusion}} \end{cases}$$



### 1.1.5. Variation de l'interface

L'interface  $\Gamma_1(t)$  bouge sous l'effet :

- \* de la cristallisation
- \* de la vitesse de tirage.

L'hypothèse de croissance à diamètre constant se traduit par la conservation du flux radial de chaleur à travers l'interface. La vitesse de cristallisation est donc dirigée suivant l'axe Oz. Ecrivons le bilan thermique à l'interface  $\Gamma_1(t)$  pour un élément de surface dS pendant l'unité de temps :

la quantité de chaleur  $dQ_C$  dégagée par cristallisation vaut :

$$dQ_C = \left[ \lambda_S \frac{\partial U_2}{\partial n_2} + \lambda_L \frac{\partial U_1}{\partial n_1} \right] dS$$

Avec l'hypothèse de conservation du flux radial de chaleur on obtient :

$$dQ_C = \left[ -\lambda_S \frac{\partial U_2}{\partial z} + \lambda_L \frac{\partial U_1}{\partial z} \right] dS \cos(n_1, Oz)$$

Notons  $V_C(x,y,t)$  la vitesse de cristallisation à l'instant t au point (x,y) de  $\Gamma_1(t)$ . On a :

$$dQ_C = L.V_C(x,y,t)dS \cos(n_1, Oz)$$

en repérant dS par (x,y).

On en déduit :

$$V_C(x,y,t) = \frac{1}{L} \left[ -\lambda_S \frac{\partial U_2}{\partial z} + \lambda_L \frac{\partial U_1}{\partial z} \right] (x,y,t)$$

La vitesse de l'interface au point  $(x,y)$  est la résultante de la vitesse de tirage et de la vitesse de cristallisation. Ce qui se traduit par l'équation :

$$\frac{\partial h_1}{\partial t}(x,y,t) = f(t) - V_C(x,y,t)$$

soit :

$$E(5) \quad \frac{\partial h_1}{\partial t}(x,y,t) = f(t) - \frac{1}{L} \left[ -\lambda_S \frac{\partial U_2}{\partial z} + \lambda_\ell \frac{\partial U_1}{\partial z} \right] (x,y,t)$$

Si la vitesse de tirage est supérieure à la vitesse de cristallisation, l'interface se déplace vers les  $z$  positifs. Si la vitesse de tirage est au contraire plus faible l'interface se déplace vers le bain.

#### 1.1.6. Condition supplémentaire sur l'interface

Un appareil de régulation assure le contrôle de l'expérience à l'aide notamment de la vitesse de tirage  $f(t)$ . La vitesse  $f(t)$  est choisie de telle sorte que l'interface  $\Gamma_1(t)$  passe constamment par le cercle de diamètre  $m_1 m_2$  (figure 7).

Ceci s'écrit :

$$\forall t \geq 0 \quad h_1(x,y,t) = z_{m_1} = z_{m_2} \quad |(x,y)| = r_C$$

Donc :

$$\forall t \geq 0 \quad \frac{\partial h_1}{\partial t}(x,y,t) = 0$$

et la vitesse de tirage vaut d'après E(5) :

$$f(t) = V_C(x,y,t) \quad \text{avec} \quad |(x,y)| = r_C$$

soit :

$$E(6) \quad f(t) = \frac{1}{L} \left\{ \lambda_S \frac{\partial U_2}{\partial z} + \lambda_\ell \frac{\partial U_1}{\partial z} \right\} (x,y,t) \quad |(x,y)| = r_C$$

*Les conditions E(1), E(2), E(3), E(4), E(5), E(6), décrivent l'évolution de la croissance du cristal dans la méthode Czochralski. C'est la dynamique réelle avec une machine bien régulée.*

## 1.2. LES SIMPLIFICATIONS

i) Les conditions d'expériences sont telles que l'évolution géométrique de l'interface est très lente par rapport au temps d'établissement de l'équilibre thermique. Les écoulements de chaleur prépondérants se font par diffusion et rayonnement. L'accumulation de chaleur en un point du cristal ou du bain résultant d'une variation de température peut être négligé. De même, le transfert de chaleur dans le cristal dû à son déplacement est négligeable pour les vitesses de tirage considérées.

Les termes en  $\rho C \frac{\partial u}{\partial t}$  et  $f\rho C \frac{\partial u}{\partial z}$  étant négligeables devant

les termes de diffusion en  $\Delta u$ , nous remplacerons donc :

E(3) par E(3')

$$E(3') \left\{ \begin{array}{l} -\Delta u_2 = 0 \quad \text{sur } \Omega_2(t) \\ \frac{\partial u_2}{\partial n_2} + \varphi_2(u_2) \Big|_{\Gamma_2(t)} = 0 \\ u_2 \Big|_{\Gamma_1(t)} = T_{\text{fusion}} \end{array} \right.$$

et E(4) par E(4')

$$E(4') \left\{ \begin{array}{l} -\Delta U_1 = 0 \quad \text{sur } \Omega_1(t) \\ \frac{\partial U_1}{\partial n_1} + \varphi_1(U_1) \Big|_{\Gamma_3} = 0 \\ u_1 \Big|_{\Gamma_4} = T_C \\ u_1 \Big|_{\Gamma_1(t)} = T_{\text{fusion}} \end{array} \right.$$

Remarquons que  $u_1$  et  $u_2$  continuent à dépendre de  $t$  à cause de  $\Omega_1(t)$  et  $\Omega_2(t)$ .

ii) La thermique dans le cristal au-delà d'une certaine hauteur  $H$  influence peu l'évolution de l'interface. On peut donc tronquer le cristal à cette hauteur par une surface plane sur laquelle on met par exemple une condition de rayonnement. On pourrait aussi donner la température (facilement mesurable par un thermocouple).

On peut donc simplifier le modèle en remplaçant  $E(2)$  par  $E(2')$

$$E(2') \quad h_2(x,y,t) = H \quad \forall t \geq 0 \quad |(x,y)| \leq r_C$$

iii) le modèle dynamique simplifié est donc :

$$E(1) \quad f(t) : \text{ vitesse de tirage}$$

$$E(2') \quad h_2(x,y,t) = H \quad \forall t \geq 0 \quad |(x,y)| \leq r_C$$

$$E(3') \quad \left\{ \begin{array}{l} -\Delta u_2 = 0 \quad \text{sur } \Omega_2(t) \\ \frac{\partial u_2}{\partial n_2} + \varphi_2(u_2) \Big|_{\Gamma_2} = 0 \\ u_2 \Big|_{\Gamma_1(t)} = T_f \end{array} \right.$$

$$E(4') \quad \left\{ \begin{array}{l} -\Delta u_1 = 0 \quad \text{sur } \Omega_1(t) \\ \frac{\partial u_1}{\partial n_1} + \varphi_1(u_1) \Big|_{\Gamma_3} = 0 \\ u_1 \Big|_{\Gamma_4} = T_C \quad \quad \quad u_1 \Big|_{\Gamma_1(t)} = T_f \end{array} \right.$$

$$\begin{aligned} E(5) \quad \frac{\partial h_1}{\partial t}(x,y,t) &= f(t) - V_C(x,y,t) \\ &= f(t) - \frac{1}{L} \left[ -\lambda_S \frac{\partial U_2}{\partial z} + \lambda_\ell \frac{\partial U_1}{\partial z} \right] \end{aligned}$$

$$E(6) \quad f(t) = \frac{1}{L} \left[ +\lambda_\ell \frac{\partial U_1}{\partial z} - \lambda_S \frac{\partial U_2}{\partial z} \right] (x,y,t)$$

$$\text{avec } |(x,y)| = r_C .$$

### 1.3. CONVERGENCE DU SYSTEME DYNAMIQUE VERS UNE INTERFACE QUASI-STATIONNAIRE

Le système dynamique que l'on vient de voir décrit l'expérience réelle. Mis à part quelques cas extrêmes, la physique du système montre que l'interface  $h_1(x,y,t)$  converge lorsque  $t$  augmente vers  $h(x,y)$ , assez rapidement.

On se stabilise vers  $h(x,y)$  indépendant de  $t$  qui définit donc l'état quasi-stationnaire, c'est-à-dire ce que l'on cherche à calculer.

$$\text{Donc } \frac{\partial h}{\partial t}(x,y,t) = 0$$

En particulier la vitesse de tirage vaut

$$f(t) = \frac{1}{L} \left[ \lambda_\ell \frac{\partial U_1}{\partial n_1} - \lambda_S \frac{\partial U_2}{\partial n_2} \right] (x,y) = f$$

$$\text{où } |(x,y)| = r_C .$$

Les équations  $E(1)$ ,  $E(2')$ ,  $E(3')$ ,  $E(4')$ ,  $E(5)$ ,  $E(6)$  donnent exactement pour  $h_1(x,y,t) = h(x,y)$  et  $f(t) = f$  le système a), b), c), d), e) décrit au chapitre II.

L'état quasi-stationnaire que l'on recherche est la limite d'une évolution réelle.

#### 1.4. SIMULATION NUMERIQUE

Ce qui nous intéresse, ce n'est pas l'évolution complète de l'expérience, mais seulement l'état quasi-stationnaire  $(h(x,y),f)$  qui s'établit peu à peu. Nous n'avons pas besoin de simuler en détail l'évolution réelle de l'interface vers sa position d'équilibre, ce qui reviendrait fort cher en temps de calcul.

Il n'y a donc pas d'inconvénients à prendre un pas de discrétisation en temps important pour nous rapprocher rapidement de l'interface d'équilibre. Ceci parce que l'on fait l'hypothèse physique de stabilisation de l'interface. Chaque interface calculée numériquement peut-être considérée comme une interface de départ à partir de laquelle l'évolution physique mène vers l'interface d'équilibre. Lorsque l'on atteint cette interface quasi-stationnaire il n'y a plus d'évolution. Tout moyen numérique permettant d'accélérer la convergence vers l'état d'équilibre est donc intéressant (voir paragraphe 1.4.2.)

##### 1.4.1. Passage de $\Gamma_1(t)$ à $\Gamma_1(t+\Delta t)$

On initialise  $\Gamma_1(t)$  à  $t = 0$  en prenant une interface plane.  $\Gamma_1(t)$  étant connue, les équations  $E(3')$  et  $E(4')$  permettent de calculer les températures  $u_1(x,y,z,t)$  et  $u_2(x,y,z,t)$  dans  $\Omega_1(t)$  et  $\Omega_2(t)$ .

Avec la relation E(6) on calcule la vitesse de tirage  $f(t)$  et on en déduit le champ des vitesses de l'interface à l'instant  $t$  avec la relation E(5).

$\Gamma_1(t+\Delta t)$  se déduit de  $\Gamma_1(t)$  avec :

$$\begin{aligned} h_1(x,y,t+\Delta t) &= h_1(x,y,t) + \Delta t \frac{\partial h_1}{\partial t}(x,y,t) \\ &= h_1(x,y,t) + \Delta t(f(t) - V_C(x,y,t)) \end{aligned}$$

Mais l'interface quasi-stationnaire que l'on cherche à calculer est caractérisée par le fait qu'en tout point  $(x,y)$  de  $\Gamma_1(t)$ , la vitesse de cristallisation est constante, égale à la vitesse de tirage et indépendante du temps. Le test d'arrêt pour les itérations sur l'interface portera sur la variation relative de la vitesse de cristallisation par rapport à la vitesse de tirage. On peut donc écrire :

$$h_1(x,y,t+\Delta t) = h_1(x,y) + \Delta t f(t) \frac{f(t) - V_C(x,y,t)}{f(t)}$$

En posant  $\delta(t) = \Delta t f(t)$  on obtient le déplacement de  $\Gamma_1(t)$  :

$$\Gamma_1(t+\Delta t) = \Gamma_1(t) + \delta(t) \frac{f(t) - V_C(x,y,t)}{f(t)}$$

On en déduit la formule d'itération numérique :

Si  $\Gamma_1^n$  est la  $n^{\text{ème}}$  interface,  $f^n$  la vitesse de tirage correspondante et  $V_C^n$  le champ des vitesses de cristallisation, on a :



$$\Gamma_1^{n+1} = \Gamma_1^n + \delta^n \frac{f^n - V_C^n}{f^n}$$

$\delta^n$  est le coefficient de déplacement que l'on donne en machine et que l'on ajuste à chaque itération.

#### 1.4.2. Accélération de la convergence

Nous avons noté que seule la limite du processus nous intéressait. Aussi, dans le but de limiter les calculs nous avons appliqué une méthode d'accélération de convergence aux interfaces itérées.

Nous avons appliqué une formule d'accélération de convergence sur le point de l'interface situé sur l'axe Oz. Notons  $z_n$  la suite des coordonnées de ces points sur l'axe Oz. On applique la formule du  $\Delta_2$ -algorithme d'Aitken sur cette suite  $z_n$ . A partir de  $z_n, z_{n+1}, z_{n+2}$  on obtient :

$$\tilde{z}_{n+1} = z_n - \frac{(z_{n+1} - z_n)^2}{(z_{n+2} - 2z_{n+1} + z_n)}$$

On détermine alors  $\delta^n$  qui permet de passer directement de  $z_n$  à  $\tilde{z}_{n+1}$

$$\delta^n = \frac{-f^n}{f^n - V_C^n(0)} \frac{(z_{n+1} - z_n)^2}{(z_{n+2} - 2z_{n+1} + z_n)}$$

On prend alors comme nouvelle interface :

$$\tilde{\Gamma}_1^{n+1} = \Gamma_1^n + \delta^n \frac{f^n - v_c^n}{f^n}$$

On itère ensuite le processus.

## 2. RESOLUTION NUMERIQUE

Le calcul de la forme de l'interface pour un cristal de taille donnée dans une thermique donnée se fait en appliquant la simulation numérique décrite au paragraphe 1.

Nous donnons comme exemple le calcul de la forme de l'interface pour un cristal de germanium en cours de croissance.

Le calcul de l'interface se résume en fait à la résolution d'un certain nombre de problèmes de Dirichlet avec conditions mêlées et au calcul des gradients à l'interface.

Comme pour le calcul de la non linéarité au bord (chapitre IV, paragraphe 7), l'utilisation du code DELTA a permis de mener les itérations en les contrôlant. Etant donné que pour chaque itération sur l'interface il faut résoudre deux problèmes de Dirichlet non linéaires, il convient de minimiser au mieux le nombre des calculs.

### 2.1. DECOUPAGE DE $\Omega_1(t)$ :

Pour suivre la variation de  $\Gamma_1(t)$  au cours des itérations sur l'interface, on modifie la triangulation sur  $\Omega_1(t)$ , donc les termes de la matrice associée au système linéaire donnant  $u_1(x,y,z,t)$ . De même la résolution de la non linéarité due au rayonnement sur  $\Gamma_3$  introduit à chaque itération une modification du second membre du système linéaire associé.

On sépare donc  $\Omega_1(t)$  en deux sous-domaines, notés  $\Omega_1(t)$  et  $\Omega_3$ . Sur  $\Omega_3$  la triangulation est conservée ainsi que la partie des équations triangularisées relatives aux nœuds intérieurs de  $\Omega_3$ .  $\bar{\Omega}_1(t)$  contient  $\Gamma_1(t)$  et  $\Gamma_3$  et  $\bar{\Omega}_3$  contient  $\Gamma_4$ , (voir figure 9).

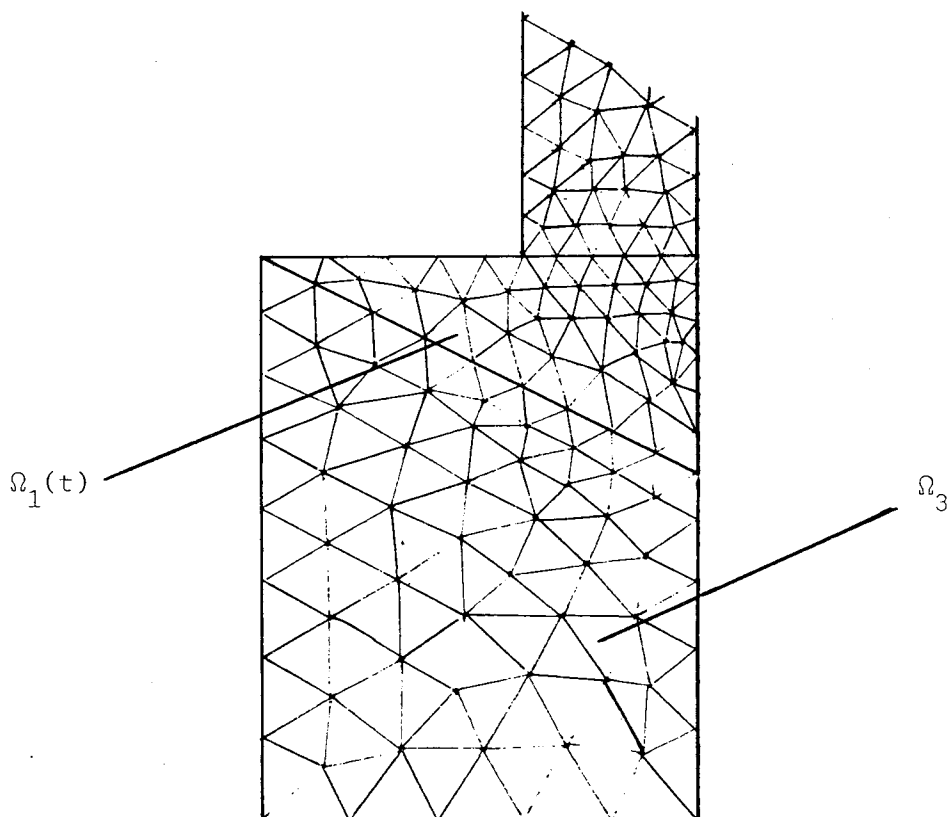


Figure 9 : Découpage du domaine  $\Omega_1(t)$  en deux sous-domaines.

## 2.2. SOUS(SUR) SOLUTIONS A L'ITERATION (n+1) sur $\Gamma_1(t)$

A l'itération  $n$  sur l'interface on a les solutions  $u_1^n(x,y,z,t)$  et  $u_2^n(x,y,z,t)$  de deux problèmes de Dirichlet non linéaires. Après avoir calculé la nouvelle interface  $\Gamma_1^{n+1}(t)$  on détermine  $u_1^{n+1}(x,y,z,t)$  et  $u_2^{n+1}(x,y,z,t)$  dans les nouveaux domaines  $\Omega_3$ ,  $\Omega_1^{n+1}(t)$  et  $\Omega_2^{n+1}(t)$  à partir de  $u_1^n$  et  $u_2^n$  que l'on prend comme sous-solution et sur-solution.

## 2.3. DEPLACEMENT DE L'INTERFACE

Le déplacement de  $\Gamma_1^n(t)$  vers  $\Gamma_1^{n+1}(t)$  se fait sur les noeuds du maillage appartenant à  $\Gamma_1^n(t)$  dans la direction  $Oz$ . La triangulation de  $\Omega_1^n(t) \cup \Omega_2^n(t)$  est modifiée. La visualisation de cette nouvelle triangulation permet de la conserver si elle est correcte ou bien de la refaire entièrement si elle est mauvaise (chevauchement de triangles, coefficient d'aplatissement trop grand).

### Remarque

Dans ce cas particulier de frontière libre, l'utilisation d'éléments finis trapèzes avec deux côtés parallèles à  $Oz$  permettrait de suivre plus facilement l'évolution de la frontière. Cependant des problèmes se posent au niveau de l'intégration numérique et nous avons utilisé le maillage automatique du code DELTA.

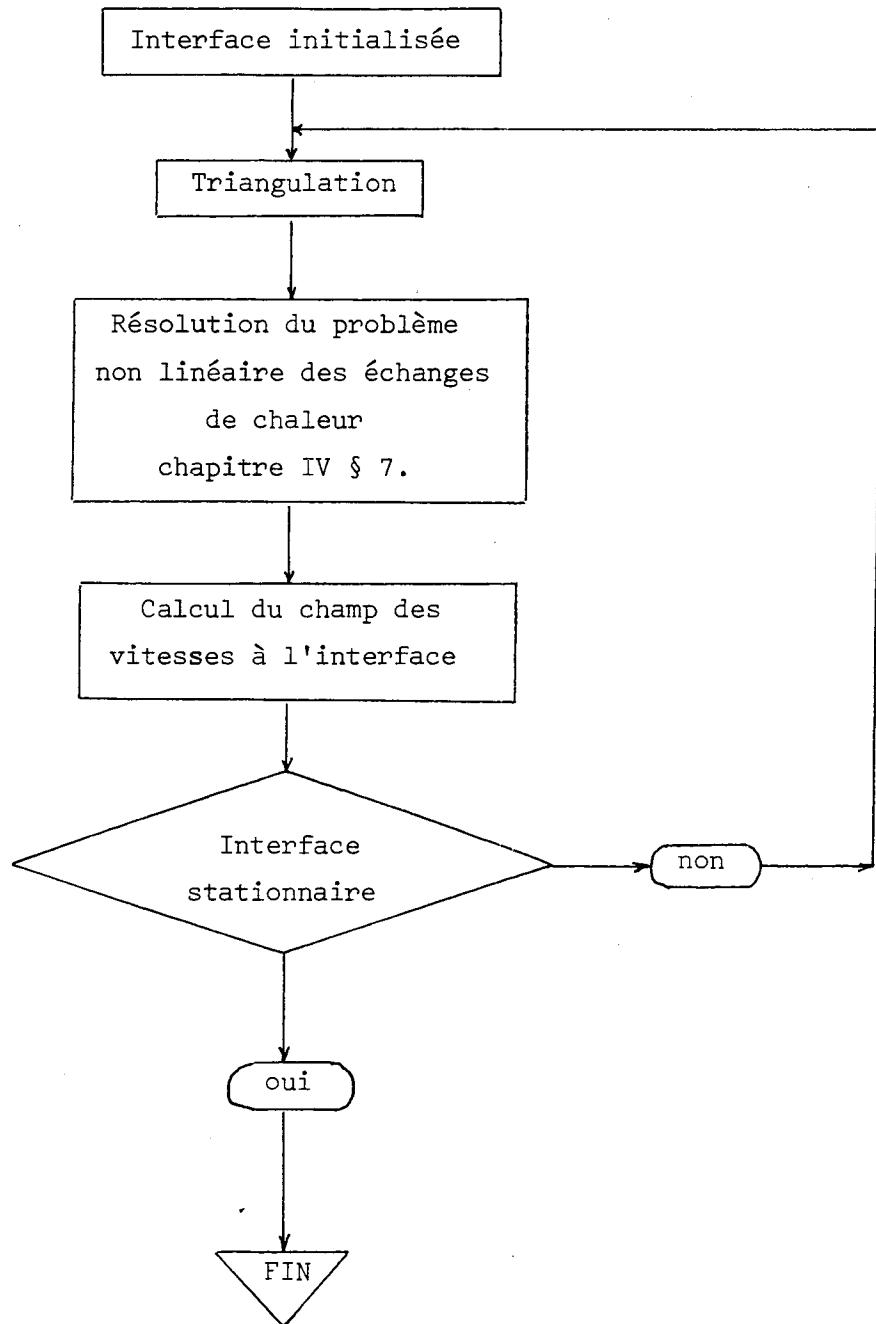
## 2.4. ACCELERATION DE CONVERGENCE POUR L'INTERFACE

Le procédé du  $\Delta_2$  d'Aitken décrit au paragraphe 1 donne de bons résultats. Il possède l'avantage de donner un ordre de grandeur pour le coefficient du déplacement  $\delta^n$  de l'interface  $\Gamma_1^n(t)$  à l'itération  $n$ . On calcule  $\Gamma_1^1$  et  $\Gamma_1^2$  en prenant  $\delta^0$  et  $\delta^1$  arbitraires. Puis on détermine  $\delta^2$  avec la formule d'Aitken et on itère le procédé.

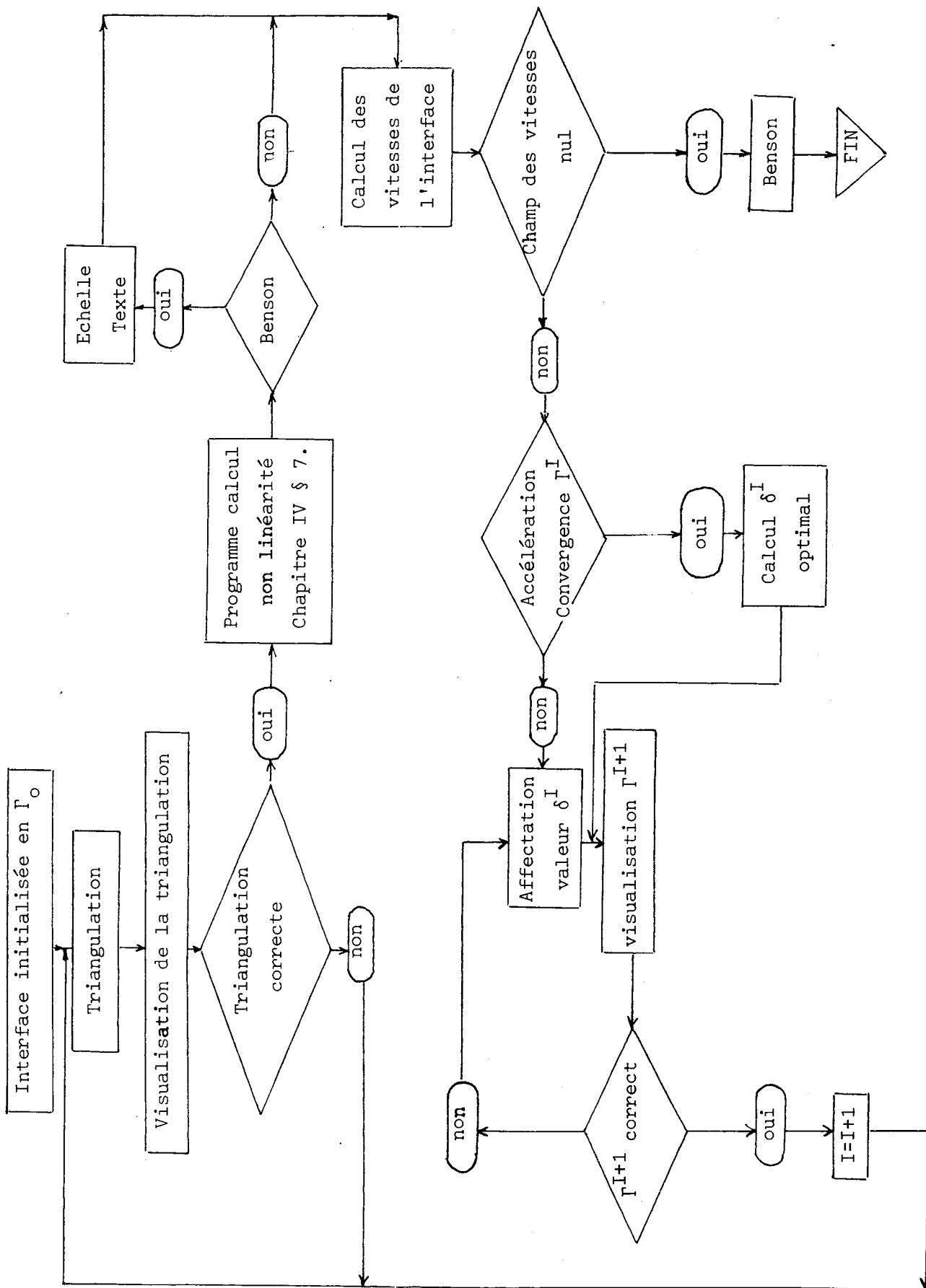
## 2.5. ORGANIGRAMME

Nous donnons dans les deux organigrammes qui suivent l'organisation des calculs.

Tout d'abord l'enchaînement des itérations sur l'interface et sur la non-linéarité au bord, et ensuite le programme de calcul de l'interface.



Disposition générale des calculs.



Programme de calcul de la forme de l'interface.

### 3. RESULTATS NUMERIQUES

La méthode de résolution numérique exposée au paragraphe 2 a été testée avec des données provenant d'expériences de croissance de monocristaux d'alumine et de germanium.

Nous donnons ici, à titre d'exemple, le calcul de la forme de l'interface pour un cristal de germanium de cinq centimètres de diamètre après dix centimètres de tirage. L'interface initiale est plane. L'interface stabilisée a été obtenue après sept itérations, (figure 11). La variation relative  $(V_C - f) / f$  est inférieure à 1 % . Le temps de calcul est de 51 secondes pour une triangulation de 179 noeuds.

La vitesse de tirage obtenue (25,6 cm/heure) est un peu supérieure aux vitesses utilisées dans la pratique. La forme de l'interface est satisfaisante. Cependant, pour tester le modèle mis au point et la méthode numérique utilisée, il faut aussi voir la dépendance par rapport aux paramètres.

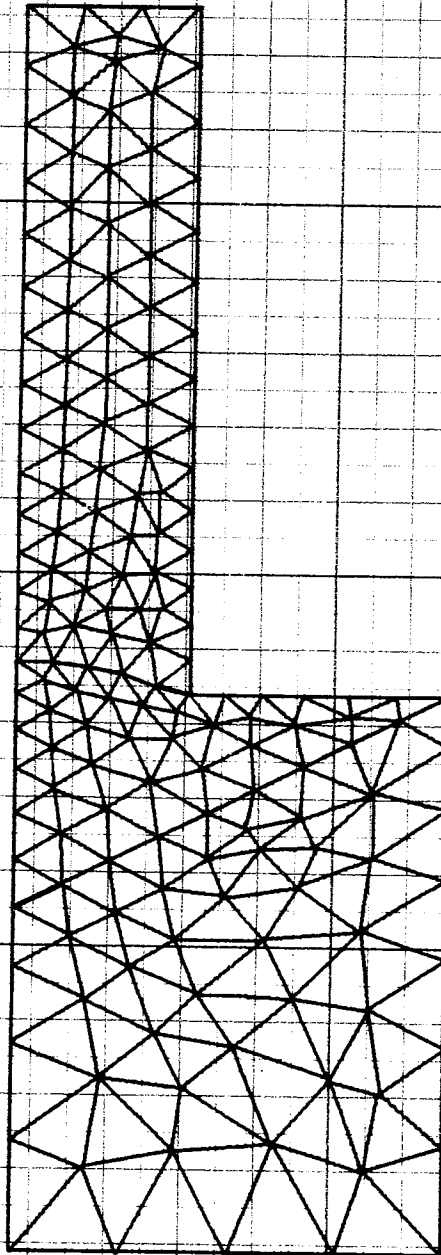
Nous avons réalisé deux expériences numériques qui montrent que le programme suit la réalité physique. Tout d'abord nous avons fait varier les gradients dans le liquide. La variation de la forme de l'interface se fait dans le sens attendu : l'interface devient plus arrondie vers le bain et la vitesse de tirage plus faible au fur et à mesure que le gradient augmente. Cependant ces gradients au niveau de l'interface sont apparus faibles. En prenant un maillage plus fin au niveau de l'interface nous n'avons pas amélioré de façon très sensible les résultats. Il semble donc (au moins pour certains cristaux comme l'alumine) que la prise en compte des courants de convection naturelle dans le bain soit nécessaire.

Le traitement des équations devenant alors beaucoup plus complexe, nous avons introduit un modèle simplifié pour tenir compte de ces courants. La forme des isothermes obtenus par ce calcul montre une amélioration dans le sens escompté.



Nous espérons que la modèle présenté ici donne une représentation correcte de l'expérience de croissance par tirage et que les évaluations numériques que l'on peut obtenir en fonction des paramètres importants de l'expérience permettront de cerner plus rapidement les conditions optimales de tirage pour un cristal donné.

\*\*\*\*\* PROBLEME AUX LIMITES SUR UN DOMAINE PLAN \*\*\*\*\*  
DOMAINE DISCRETISE



TRIANGULATION 2-IEME INTERFACE

Figure 10

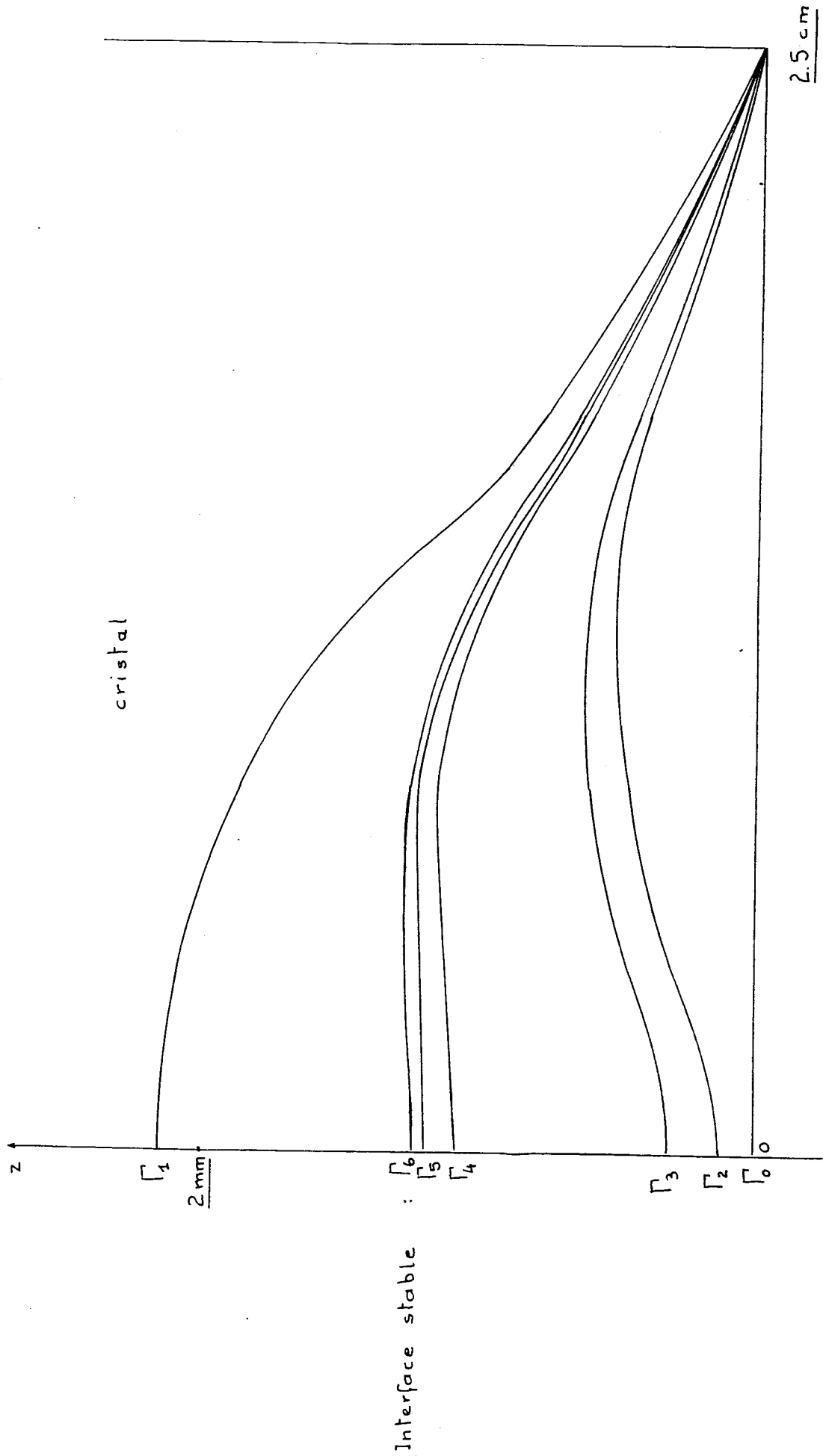


Figure 11 : Itérations sur l'interface.

B I B L I O G R A P H I E

---

- [1] AUBIN J.P.  
Approximation of elliptic boundary-value problems.  
Pure and Applied Mathematics, (vol. XXVI, Wiley-Interscience 1972).
- [2] BRICE J.C.  
The growth of crystals from the melt. Selected topics in solid state physics (vol. V, North-Holland publishing company).
- [3] BROWDER F.E.  
Problèmes non linéaires. (Presse de l'Université de Montréal).
- [4] CIARLET P.G.  
Numerical Analysis of the finite element method.  
Séminaire de Mathématiques Supérieures.  
Université de Montréal (1975).
- [5] CIARLET P.G. ; RAVIART P.A.  
General Lagrange and Hermite interpolation in  $\mathbb{R}^n$  with applications to finite element method.  
Archive Rat. Mech. Anal. 46 (1972).
- [6] CIARLET P.G. ; RAVIART P.A.  
Maximum principle and uniform convergence for the finite element method. Comput. Methods Appl. Mech. Eng. 2 (1973).
- [7] DUNFORD N. ; SCHWARTZ J.T.  
Linear operators, Part I. Pure and Applied Mathematics.  
(Vol. VII. Interscience 1958).
- [8] DUVAUT G. ; LIONS J.L.  
Les inéquations en mécanique et en physique. Dunod, Paris, (1972).
- [9] GLOWINSKI R. ; LIONS J.L. ; TREMOLIERES R.  
Analyse numérique des inéquations variationnelles. (tome 2)  
Méthodes Mathématiques de l'Informatique, Dunod (1976).

- [10] LAILLY P.  
Résolution numérique des équations de Stokes en symétrie de révolution par une méthode d'éléments finis non conformes.  
Thèse (1976), Paris XI.
- [11] LAUDISE R.A.  
The growth of single crystals. Solids state physical electronics series. Prentice-Hall-Inc (1970).
- [12] LIONS J.L. ; MAGENES E.  
Problèmes aux limites non homogènes et applications.  
Vol. Dunod, Paris (1968).
- [13] NECAS J.  
Les méthodes directes dans la théorie des équations aux dérivées partielles. Masson, Paris (1967).
- [14] PONCET A.  
Ecriture d'un code d'éléments finis.  
Journées éléments finis, Rennes (1975).
- [15] ROBERT F.  
Matrices nonnégatives et normes vectorielles.  
(Cours I.N.P.G., Grenoble (73-74).
- [16] SCHAEFFER H.  
Über die Methode der a priori Schranken.  
Math. ann t.279 (1955) 415-416.
- [17] SCHWARTZ J.T.  
Non linear functional analysis. Gordon and Breach (1969).
- [18] STAMPACCHIA G.  
Equations elliptiques du second ordre à coefficients discontinus.  
Presses Universitaires de Montréal.

[19] VO-KHAC KHOAN

Distributions. Analyse de Fourier. Opérateurs aux dérivées partielles. (Tome 1, Vuibert (1970)).

[20] WEIL

Eléments des échanges thermiques. (Gauthier-Villars (1965)).

## E R R A T A

Les numéros de page 36 , 72 , 82 , 114  
ont été omis dans la numérotation.

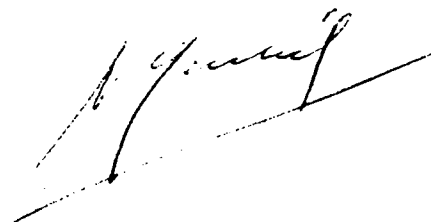


Dernière page d'une thèse

VU

Grenoble, le 7 Janvier 1977

Le Président de la thèse



Vu, et permis d'imprimer,

Grenoble, le

Le Président de l'Université  
Scientifique et Médicale

