



Problèmes à interface mobile pour la dégradation de matériaux et la croissance de biofilms : analyse numérique et modélisation

Antoine Zurek

► To cite this version:

Antoine Zurek. Problèmes à interface mobile pour la dégradation de matériaux et la croissance de biofilms : analyse numérique et modélisation. Analyse numérique [math.NA]. Université de Lille, 2019. Français. NNT : . tel-02397231

HAL Id: tel-02397231

<https://theses.hal.science/tel-02397231>

Submitted on 6 Dec 2019

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.

THÈSE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE LILLE

École Doctorale SPI

Discipline : Mathématiques

Soutenue publiquement le 26 septembre 2019, par :
Antoine Zurek

Problèmes à interface mobile pour la dégradation de matériaux et la croissance de biofilms : analyse numérique et modélisation

Devant le jury composé de :

Mme Raphaële Herbin	Université d'Aix-Marseille	Présidente du jury
M. Franck Boyer	Université Toulouse III	Rapporteur
M. Adrian Muntean	Karlstads Universitet	Rapporteur
M. Frédéric Lagoutière	Université Lyon I	Examineur
Mme Juliette Venel	Université Polytechnique des Hauts de France	Examinatrice
Mme Claire Chainais-Hillairet	Université de Lille	Directrice de thèse
M. Benoît Merlet	Université de Lille	Directeur de thèse

Après avis des rapporteurs :

M. Franck Boyer	Université Toulouse III
M. Adrian Muntean	Karlstads Universitet

Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier très chaleureusement mes directeurs de thèse Claire et Benoît sans qui ce manuscrit n'aurait jamais vu le jour. Je vous remercie pour votre temps, votre patience et votre soutien durant ces trois ans ainsi que toutes les connaissances (mathématiques et autres) que vous m'avez apportées. Merci à Claire, pour ton enthousiasme, tes encouragements, tes nombreux conseils avisés ainsi que les nombreux voyages que j'ai pu réaliser avec toi lors de ma thèse. Merci à Benoît, pour ton soutien et tes enseignements, je n'oublierai pas ta vision des mathématiques et ta recherche d'excellence. Je tacherai de ne rien oublier de ce que vous m'avez transmis.

Je tiens à exprimer ma gratitude envers Franck Boyer et Adrian Muntean pour la relecture minutieuse de ce manuscrit ainsi que leurs remarques. Je remercie également tous les membres du jury qui m'ont fait l'honneur de leur présence lors de ma soutenance.

Je remercie tous les chercheurs, enseignants-chercheurs, doctorants, post-doctorants et membres administratifs du laboratoire Painlevé et du centre Inria Lille. Il est certain que chacun d'entre vous contribue à faire de Lille un endroit plus qu'agréable pour faire sa thèse. De plus, j'adresse un remerciement tout particulier aux membres (actuels et anciens) de l'équipe ANEDP ainsi qu'aux membres (une fois encore actuels et anciens) des équipes Rapsodi et Mephysto que j'ai eu la chance et le grand plaisir de côtoyer durant ces trois ans. Vous avez tous contribué, par votre enthousiasme et votre gentillesse, à rendre mes années de thèse enrichissantes et épanouissantes. Merci également à mes co-bureaux, Pierre, Iheb, Najib, Claire, Amhed, David, Florent et Benoît, qui ont rendu les heures de travail plus agréables. Enfin, je remercie Juliette Venel que j'ai eu la chance de côtoyer, et avec qui j'ai eu grand plaisir à travailler.

Je remercie également Ansgar Jüngel, Esther Daus et tous les membres de la TU de Vienne que j'ai rencontrés (et que je vais bientôt retrouver...) pour leur accueil chaleureux lors de mon séjour en 2018.

Il est temps à présent de remercier mes amis de longue voire de très longue date : Charles-Elie, Florent, Hugo, Thomas, Gauthier, Pierre-Antoine, Loïc, Hanna, Giulia, James, Maël, Maxime, Mimie, Astrée, Jonathan, Justin, Iris, Léa, Jonas, Frédéric et tant d'autres qui m'ont soutenu et encouragé au cours de ma thèse et pour certains depuis plus longtemps encore. J'espère que je bénéficierai encore longtemps de leur soutien.

Enfin, je remercie toute ma famille et ma belle-famille (en y comprenant les Camus et Delaby) pour leur soutien et leur affection sans faille. J'adresse également un remerciement particulier à mon oncle Jean, qui m'a sans aucun doute transmis sa passion des mathématiques. J'ai bien sûr une pensée toute particulière pour mes parents, merci pour votre amour. Je suis sûr que mon père aurait ressenti beaucoup de fierté à la vue de ce manuscrit. Je vous remercie donc tous les deux pour toutes ces années de soutien.

Finalement, je remercie Margot, qui plus que quiconque m'a soutenu (et très souvent supporté...) avant et pendant ma thèse. Ta présence et tes encouragements m'ont toujours permis de maintenir le cap et ce, en dépit de toutes les épreuves. Ces quelques mots ne suffiront pas à décrire ma gratitude et mon amour pour toi mais merci pour tout ce que tu as pu faire pour moi.

*Je dédie cette thèse
à mon père.*

Sommaire

Introduction	1
1 Etude d'un modèle de carbonatation des bétons armés	1
2 Etude d'un système de diffusion croisée modélisant la croissance de biofilms	9
3 Etude d'un modèle simplifié de corrosion	18

Partie I Etude d'un modèle de carbonatation des bétons armés

Chapitre 1

Convergence d'un schéma volumes finis pour un système parabolique à frontière libre modélisant la carbonatation des bétons armés

en collaboration avec C. Chainais-Hillairet et B. Merlet, *ESAIM : Math. Model. Numer. Anal.*, 52(2) : 457-480, 2018

1.1 Introduction	29
1.2 Numerical scheme and main results	31
1.3 Proof of Theorem 1.2.1	36
1.4 Estimates on the approximate solutions	39
1.5 Proof of Theorem 1.2.2	46
1.6 Numerical experiments	51

Chapitre 2

Comportement en temps long d'un schéma volumes finis pour un modèle de carbonatation des bétons armés

Numer. Meth. Partial Diff. Eqs., pp. 1-20, 2019

2.1	Introduction	57
2.2	Numerical scheme and main results	59
2.3	Existence of a solution to the scheme	61
2.4	Discrete $L^2(0, T; H^1(0, 1))$ estimate on the approximate solutions . . .	63
2.5	The long time behavior of the approximate penetration depth	68
2.6	Numerical experiments	76
2.7	Appendix A. Property of the B function	77

Partie II Etude d'un modèle de croissance de biofilms

Chapitre 3

Convergence d'un schéma volumes finis pour un système de diffusion croisée modélisant la croissance de biofilms

en collaboration avec E. Daus et A. Jüngel

3.1	Introduction	83
3.2	Numerical scheme and main results	86
3.3	Existence of finite-volume solutions	91
3.4	A priori estimates	98
3.5	Convergence of solutions	102
3.6	Convergence of the scheme	105
3.7	Numerical experiments	109
3.8	Appendix A. Proof of Lemma 3.3.2	110

Partie III Etude d'un modèle simplifié de corrosion

Chapitre 4

Etude d'un modèle jouet de corrosion par une approche flot de gradient pour une métrique de type Wasserstein

en collaboration avec B. Merlet et J. Venel

4.1	Introduction	121
4.2	La méthode des mouvements minimisants	127
4.3	Preuve du Théorème 4.2.3	141
4.4	Propriétés des minimiseurs	145
4.5	Preuve du Théorème 4.2.4	173
4.6	Discussion autour de l'unicité	188

Bibliographie	191
----------------------	------------

Introduction

L'objet de cette thèse est l'étude de différents modèles mathématiques de dégradation de matériaux, décrivant la carbonatation des bétons armés d'une part et la corrosion d'acier d'autre part, ainsi qu'un modèle décrivant la croissance de biofilms bactériens. L'intérêt pour ces modèles provient d'enjeux environnementaux et industriels importants. Les biofilms bactériens, colonies de cellules en expansion au cours du temps, sont utilisés dans les technologies environnementales pour traiter les eaux usées ou assainir les sols. La réaction de carbonatation dégrade les bétons armés et limite la durée de vie des ouvrages d'art. Enfin, les phénomènes de corrosion interviennent aussi bien au cœur des centrales nucléaires que dans le stockage des déchets radioactifs.

D'un point de vue mathématique, les trois modèles considérés dans ce manuscrit sont des problèmes à frontières libres. La modélisation de la dégradation des bétons comme celle de la corrosion d'acier dans le contexte du stockage des déchets radioactifs conduit à des systèmes d'équations aux dérivées partielles de type convection-réaction-diffusion posés sur un domaine qui varie au cours du temps. Quant au modèle de croissance de biofilms, c'est l'espace occupé par la colonie qui est vu comme un domaine variant au cours du temps où un système d'équations aux dérivées partielles de type réaction-diffusion décrit l'expansion du biofilm. C'est ce couplage entre équations aux dérivées partielles et géométrie du domaine qui constitue l'originalité principale des modèles étudiés. Comprendre la dynamique de ces couplages est le défi le plus important de cette thèse, que ce soit pour l'étude théorique ou les simulations numériques.

Dans la suite de cette introduction, nous introduisons les différents modèles qui seront traités dans les trois parties principales du manuscrit et nous présentons les principaux résultats obtenus.

1 Etude d'un modèle de carbonatation des bétons armés

Dans la première partie de cette thèse, nous nous intéressons à un modèle à frontière libre introduit et étudié par Aiki et Muntean dans [2, 3, 4, 5]. Ce modèle décrit la réaction de carbonatation des bétons armés. Il est constitué d'un système de deux équations paraboliques de type réaction-diffusion définies sur un domaine unidimensionnel variant au cours du temps où une interface est fixe et l'autre mobile. L'évolution de l'interface mobile est régie par une équation différentielle ordinaire. Pour ce modèle, nous définissons et analysons deux schémas numériques de type volumes finis. En particulier, nous

prouvons dans le Chapitre 1 la convergence d'un schéma numérique et au Chapitre 2 nous nous intéressons, au niveau discret, au comportement en temps long de l'interface mobile.

1.1 Présentation du modèle

Le phénomène de carbonatation des bétons armés est la principale cause de dégradation de ce matériau et réduit sa durée de vie, on parle parfois de « cancer du béton ». Il s'agit d'une réaction chimique qui dégrade les armatures en acier enchâssées dans le béton censées garantir sa résistance. En effet, cette réaction rend possible la corrosion des barres métalliques qui gonflent et font éclater le béton, comme représenté sur la Figure 1.

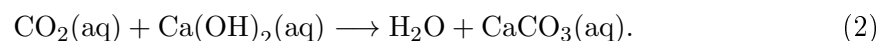


FIGURE 1 – Illustration de l'éclatement du béton armé dû à la réaction de carbonatation (source : MADe – CC-BY-SA, https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Betonrot_Hippodroom.JPG).

Cette réaction peut être décrite simplement comme suit : du CO_2 en phase gazeuse provenant de l'atmosphère entre à l'intérieur des pores du béton et y est rapidement transformé en CO_2 en phase aqueuse. Cette réaction chimique est décrite par l'équation



Ensuite, le $\text{CO}_2(\text{aq})$ est transporté par diffusion au sein du béton et il s'ensuit la réaction irréversible, appelée réaction de carbonatation, suivante :



La principale conséquence de cette dernière réaction chimique est une baisse significative

1. Etude d'un modèle de carbonatation des bétons armés

du pH dans la zone du béton ayant subi cette réaction. Il est estimé que le pH passe d'une valeur supérieure à 12 à une valeur inférieure à 9, voir Figure 2 issue de [63]. Cette chute du pH est la cause de la dégradation du béton armé. En effet, cette réaction de carbonatation se propage au sein du matériau et divise celui-ci en deux zones bien distinctes, une région dite carbonatée et l'autre saine. Or, lorsque la région carbonatée atteint les structures métalliques enchâssées dans le béton, le pH bas permet les réactions de corrosion du métal.

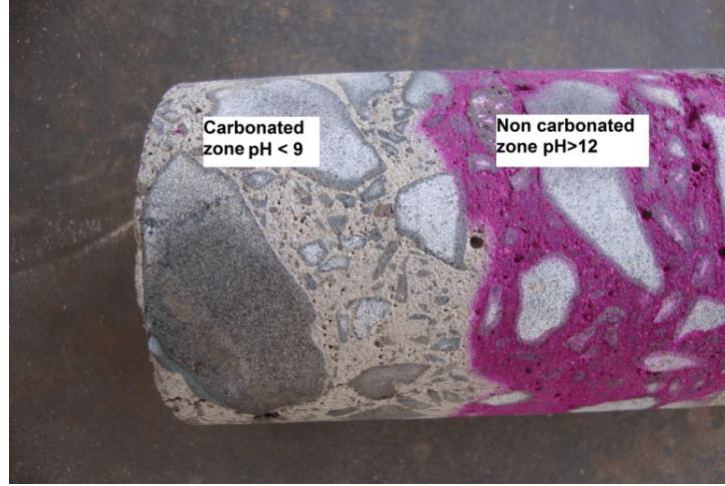


FIGURE 2 – Illustration de la chute du pH après la réaction de carbonatation (Possan, Thomaz, Aleandri, Felix, Santos – CC-BY-NC-ND).

Pour décrire la réaction de carbonatation des bétons, Muntean et Böhm ont proposé dans [56] un modèle unidimensionnel à frontière libre suivant l'évolution des concentrations dans la zone saine et carbonatée des différentes espèces intervenant dans les réactions (1) et (2). Pour ce modèle, ils prouvent l'existence d'une unique solution (faible) globale en temps. Le modèle de carbonatation que nous considérerons dans la Partie I introduit par Aiki et Muntean est une simplification du modèle proposé par Muntean et Böhm. En effet, dans ce modèle, partant du principe que c'est la présence de $\text{CO}_2(\text{aq})$ à l'interface entre la zone carbonatée et la zone saine qui pilote la réaction de carbonatation (2) (l'espèce $\text{Ca}(\text{OH})_2(\text{aq})$ étant omniprésente au sein du béton), Aiki et Muntean ne s'intéressent qu'à l'évolution de la concentration en $\text{CO}_2(\text{g})$ et $\text{CO}_2(\text{aq})$ au sein de la zone carbonatée. Par le biais de ce modèle, ils veulent justifier mathématiquement que l'interface mobile entre la zone saine et la zone carbonatée se propage au cours du temps suivant une loi en $\sqrt{t}$. Nous renvoyons à la Section 1.2 de [4] où Aiki et Muntean donnent des détails concernant cette loi de propagation observée expérimentalement.

Dans le modèle à frontière libre proposé dans [2], où le domaine mobile représente la zone carbonatée du béton, les inconnues sont les concentrations u et v en CO_2 respectivement en phase aqueuse et gazeuse et s l'abscisse de l'interface mobile entre zone saine et zone

Introduction

carbonatée. Pour tout $0 < T < \infty$, la zone carbonatée $Q_s(T)$ est définie par

$$Q_s(T) = \{(t, y) : 0 < t < T, 0 < y < s(t)\}.$$

Avec ces notations les équations du modèle introduit par Aiki et Muntean [2] s'écrivent :

$$\partial_t u - \partial_y(\kappa_u \partial_y u) = f(u, v) \quad \text{dans } Q_s(T), \quad (3a)$$

$$\partial_t v - \partial_y(\kappa_v \partial_y v) = -f(u, v) \quad \text{dans } Q_s(T), \quad (3b)$$

$$s'(t) = \psi(u(s(t), t)) \quad \text{pour } 0 < t < T, \quad (3c)$$

$$u(0, t) = g(t) \quad \text{pour } 0 < t < T, \quad (3d)$$

$$v(0, t) = r(t) \quad \text{pour } 0 < t < T, \quad (3e)$$

$$-\kappa_u \partial_y u(s(t), t) - s'(t)u(s(t), t) = \psi(u(s(t), t)) \quad \text{pour } 0 < t < T, \quad (3f)$$

$$-\kappa_v \partial_y v(s(t), t) - s'(t)v(s(t), t) = 0 \quad \text{pour } 0 < t < T, \quad (3g)$$

$$u(y, 0) = u_0(y) \quad \text{pour } 0 < y < s(0), \quad (3h)$$

$$v(y, 0) = v_0(y) \quad \text{pour } 0 < y < s(0), \quad (3i)$$

$$s(0) = s_0. \quad (3j)$$

Le terme source f dans les équations (3a) et (3b) prend en compte la transformation réversible du $\text{CO}_2(\text{g})$ en $\text{CO}_2(\text{aq})$ décrite par (1) et est de la forme $f(u, v) = \beta(\gamma v - u)$ pour β et γ des constantes positives. Par ailleurs, dans ce modèle, la présence de $\text{CO}_2(\text{aq})$ à l'interface entre la zone carbonatée et la zone saine permet à la réaction de carbonatation (2) d'avoir lieu. Cette hypothèse permet d'expliquer la forme de l'équation (3c) qui relie la vitesse de propagation de l'interface mobile à la valeur de la concentration en $\text{CO}_2(\text{aq})$ à l'interface.

Dans [2], sous certaines hypothèses précisées dans la Partie I, les auteurs montrent l'existence et l'unicité d'une solution faible globale pour le problème (3) vérifiant pour tout $(x, t) \in Q_s(T)$

$$0 \leq u(x, t) \leq g^* \quad \text{et} \quad 0 \leq v(x, t) \leq r^*, \quad (4)$$

où g^* et r^* sont des constantes positives majorant des conditions initiales et des conditions au bord de Dirichlet. La preuve de ce résultat repose sur des estimations a priori permettant d'appliquer une technique de point fixe. Plus tard, dans [3, 4], Aiki et Muntean montrent, dans le cas où les conditions au bord de Dirichlet sont supposées constantes, l'existence de deux constantes strictement positives c et C telles que

$$c\sqrt{t} \leq s(t) \leq C\sqrt{1+t}, \quad \forall t \geq 0. \quad (5)$$

L'inégalité (5) justifie ainsi la loi empirique de propagation de l'interface de la zone carbonatée en $\sqrt{t}$.

Via un changement de variable en espace, nous réécrivons les équations de (3) sur un domaine fixe. Cela permet d'une part d'introduire plus simplement une notion de so-

1. Etude d'un modèle de carbonatation des bétons armés

lution faible pour le système (3), et d'autre part de réduire le temps de calcul de nos méthodes numériques en nous évitant de devoir remailler le domaine spatial à chaque pas de temps. Une telle approche est également employée dans [13] où Bataillon et ses coauteurs introduisent et étudient un schéma numérique pour un modèle de corrosion, également à frontières libres, que nous étudierons dans la dernière partie de ce manuscrit, voir Partie III. Plus proche de notre cas d'étude, nous citons également l'article de Muntean [53] dans lequel un schéma semi-discret en espace fondé sur une méthode d'éléments finis pour le modèle introduit par Muntean et Böhm évoqué plus haut est proposé. Dans ce travail, l'auteur se ramène également à un domaine fixe afin de prouver la convergence de ce schéma semi-discret. Nous considérons, comme dans [53], le changement de variable suivant :

$$\begin{aligned} \cup_{0 \leq t \leq T} [0, s(t)] \times \{t\} &\rightarrow [0, 1] \times [0, T], \\ (y, t) &\mapsto \left(x(y, t) = \frac{y}{s(t)}, t \right). \end{aligned}$$

Dans ce nouveau système de coordonnées, le système (3) se réécrit dans le domaine $Q(T) = (0, 1) \times (0, T)$ sous la forme

$$s(t)\partial_t(s(t)u) + \partial_x J_u = s^2(t)f(u, v) \quad \text{dans } Q(T), \quad (6a)$$

$$s(t)\partial_t(s(t)v) + \partial_x J_v = -s^2(t)f(u, v) \quad \text{dans } Q(T), \quad (6b)$$

$$s'(t) = \psi(u(1, t)) \quad \text{pour } 0 < t < T, \quad (6c)$$

$$u(0, t) = g(t) \quad \text{pour } 0 < t < T, \quad (6d)$$

$$v(0, t) = r(t) \quad \text{pour } 0 < t < T, \quad (6e)$$

$$J_u(1, t) = s(t)\psi(u(1, t)) \quad \text{pour } 0 < t < T, \quad (6f)$$

$$J_v(1, t) = 0 \quad \text{pour } 0 < t < T, \quad (6g)$$

$$u(x, 0) = u_0(s_0x) \quad \text{pour } 0 < x < 1, \quad (6h)$$

$$v(x, 0) = v_0(s_0x) \quad \text{pour } 0 < x < 1, \quad (6i)$$

$$s(0) = s_0, \quad (6j)$$

où le flux de convection-diffusion est défini par

$$J_w = -\kappa_w \partial_x w - s(t)s'(t)xw,$$

pour $w = u$ ou $w = v$.

1.2 Convergence d'un schéma volumes finis

Dans ce premier travail nous construisons et montrons la convergence d'un schéma volumes finis pour les solutions de (6). La source principale de difficulté provient du couplage entre les équations de convection-réaction-diffusion (6a) et (6b) portant sur u et v et l'équation différentielle ordinaire (6c) portant sur s .

Introduction

Afin de présenter ce schéma et les résultats obtenus pour celui-ci, nous introduisons quelques notations concernant le maillage en espace et en temps et nous présentons de façon informelle le schéma numérique. Nous renvoyons au Chapitre 1 pour plus de détails. Un maillage $\mathcal{T}$ de l'intervalle $[0, 1]$, est constitué d'une collection de l cellules de la forme $(x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}})$, pour $1 \leq i \leq l$, avec

$$0 = x_{\frac{1}{2}} < x_{\frac{3}{2}} < \dots < x_{l-\frac{1}{2}} < x_{l+\frac{1}{2}} = 1,$$

nous notons $h_i = x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}$, pour $1 \leq i \leq l$, la taille de la i -ième cellule.

Pour l'intervalle $[0, T]$ nous considérons un maillage uniforme. Pour cela nous définissons un pas de temps Δt et un entier N_T , partie entière de $T/\Delta t$, et une suite $(t_n)_{0 \leq n \leq N_T}$ avec $t_n = n\Delta t$.

Avec ces notations, pour $1 \leq i \leq l$ et $0 \leq n \leq N_T - 1$, le schéma s'écrit

$$s^{n+1} = s^n + \Delta t \psi(u_{l+1}^n),$$

et

$$\begin{aligned} s^{n+1} h_i \frac{s^{n+1} v_i^{n+1} - s^n v_i^n}{\Delta t} + \left(G_{v, i+\frac{1}{2}}^{n+1} - G_{v, i-\frac{1}{2}}^{n+1} \right) &= -(s^{n+1})^2 h_i \beta(\gamma v_i^{n+1} - u_i^n), \\ s^{n+1} h_i \frac{s^{n+1} u_i^{n+1} - s^n u_i^n}{\Delta t} + \left(G_{u, i+\frac{1}{2}}^{n+1} - G_{u, i-\frac{1}{2}}^{n+1} \right) &= (s^{n+1})^2 h_i \beta(\gamma v_i^{n+1} - u_i^{n+1}), \end{aligned}$$

où les $G_{w, i+\frac{1}{2}}^{n+1}$, pour $w = u$ ou v , sont des approximations consistantes de $J_w(x_{i+\frac{1}{2}}, t_{n+1})$.

Nous considérons ici pour $G_{w, i+\frac{1}{2}}^{n+1}$ les flux de Scharfetter-Gummel [68] qui permettent une approximation simultanée des termes de diffusion et de convection apparaissant dans J_w . Enfin, une approximation convenable des conditions initiales et des conditions aux bords complète le schéma.

L'approximation implicite/explicite des termes sources permet de découpler les équations (6a), (6b) et (6c). Ainsi, si (s^n, u^n, v^n) désigne une solution de ce schéma au temps t_n alors pour calculer une solution au schéma numérique au temps t_{n+1} il faut calculer dans un premier temps s^{n+1} , puis v^{n+1} et enfin u^{n+1} .

Nous montrons, dans le Théorème 1.2.1, l'existence et l'unicité d'une solution au schéma numérique. De plus, comme au niveau continu, pour tout $n \geq 0$ et $i \in \{0, \dots, l+1\}$ ces solutions vérifient

$$0 \leq v_i^n \leq r^*, \quad 0 \leq u_i^n \leq g^*.$$

La preuve d'existence et d'unicité repose sur la structure linéaire du schéma. Nous réécrivons le schéma sous forme matricielle et nous démontrons l'inversibilité de ces matrices via une propriété de M-matrice. De plus, en s'inspirant de [13], nous utilisons cette propriété de M-matrice pour en déduire la positivité et les bornes supérieures vérifiées par les solutions.

1. Etude d'un modèle de carbonatation des bétons armés

Une fois l'existence d'une solution obtenue, nous considérons une suite de maillages en espace et en temps telles que $h, \Delta t \rightarrow 0$ où h désigne le maximum des h_i ainsi qu'une suite de solutions au schéma numérique associée à la suite de maillages. Nous montrons, dans le Théorème 1.2.2, la convergence de cette suite de solutions, en un certain sens, vers un triplet (s, u, v) solution faible du problème (6). La preuve de convergence repose sur une méthodologie classique dans le cas des schémas volumes finis comme présentée dans le livre de Eymard, Gallouët et Herbin [37], qui consiste en l'établissement d'estimations d'énergie discrètes afin d'appliquer des résultats de compacité adéquats. Dans notre cas, nous établissons des estimations du type $L^2(0, T; H^1(0, 1))$ et $H^1(0, T; H^*)$ discrètes avec H^* le dual de

$$H = \{z \in H^1(0, 1) : z(0) = 0\}.$$

Afin d'établir ces estimations, nous nous reposons sur l'analyse du schéma de Scharfetter-Gummel faite par Bessemoulin-Chatard dans [14]. Ces estimations nous permettent alors d'appliquer une version discrète du lemme d'Aubin-Simon [70] établie dans [40] par Gallouët et Latché et de déduire de la compacité sur la suite de solutions.

Enfin, au travers de simulations numériques, nous montrons que ce schéma préserve bien la propagation en $\sqrt{t}$ de l'interface mobile, voir Figure 3, et nous nous intéressons à l'ordre de convergence en espace et en norme L^2 du schéma.

Ce travail fait l'objet d'une publication dans *ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, voir [28]. Il fait également l'objet d'une publication dans les *proceedings* du congrès FVCA VIII, 8th International Symposium on Finite Volume for Complex Applications, voir [27] et est en collaboration avec Claire Chainais-Hillairet et Benoît Merlet.

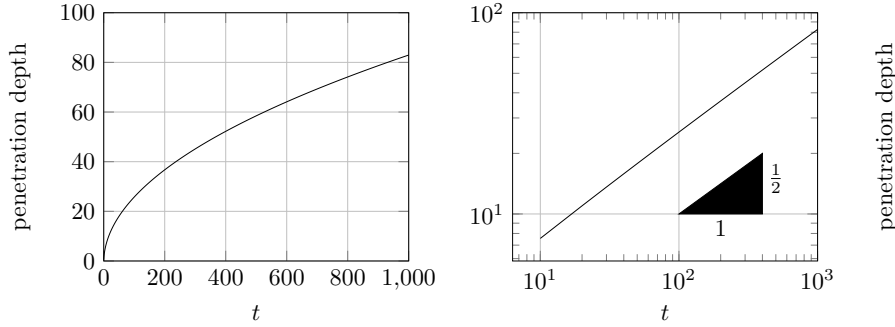


FIGURE 3 – Comportement de s en échelle linéaire (à gauche) et en échelle logarithmique (à droite) pour $T = 1000$.

1.3 Comportement en temps long d'un schéma volumes finis non linéaire

Au vu des simulations numériques obtenues avec le schéma précédent, qui capture de façon satisfaisante la propagation de s au cours du temps, nous avons poursuivi notre étude du modèle (6) en démontrant au niveau discret une inégalité du type (5). Pour ce faire, nous avons voulu adapter au cas discret les techniques utilisées par Aiki et Muntean dans [3, 4]. Pour être en mesure d'adapter ces techniques nous proposons une modification du schéma : le nouveau schéma, toujours de type volumes finis est désormais complètement implicite en temps. Pour présenter ce schéma, nous considérons les mêmes notations pour le maillage en espace et en temps que celles introduites précédemment et le schéma numérique s'écrit

$$s^{n+1} = s^n + \Delta t \psi(u_{l+1}^{n+1}),$$

et

$$h_i s^{n+1} \frac{s^{n+1} u_i^{n+1} - s^n u_i^n}{\Delta t} + \left(\mathcal{F}_{u,i+\frac{1}{2}}^{n+1} - \mathcal{F}_{u,i-\frac{1}{2}}^{n+1} \right) = h_i (s^{n+1})^2 f(u_i^{n+1}, v_i^{n+1}),$$

$$h_i s^{n+1} \frac{s^{n+1} v_i^{n+1} - s^n v_i^n}{\Delta t} + \left(\mathcal{F}_{v,i+\frac{1}{2}}^{n+1} - \mathcal{F}_{v,i-\frac{1}{2}}^{n+1} \right) = -h_i (s^{n+1})^2 f(u_i^{n+1}, v_i^{n+1}),$$

où pour $w = u$ ou v le flux numérique $\mathcal{F}_{w,i+\frac{1}{2}}^{n+1}$ est une approximation consistante de $J_w(x_{i+\frac{1}{2}}, t_{n+1})$. En utilisant une approche similaire à [23], où Chainais-Hillairet et Droniou introduisent une définition générale permettant d'englober sous une même formulation des approximations classiques des flux de type convection-diffusion, comme le flux de Scharfetter-Gummel, le flux centré, ou encore le flux décentré amont, nous considérons une classe assez large de flux discrets $\mathcal{F}_{w,i+\frac{1}{2}}^{n+1}$. Enfin le schéma est complété par l'approximation des conditions initiales et des conditions aux bords. Nous renvoyons au chapitre 2 pour une introduction complète du schéma.

Nous montrons, dans le Théorème 2.2.1, l'existence d'une solution au schéma numérique. De plus, pour tout $n \geq 0$ et $i \in \{0, \dots, l+1\}$ les solutions vérifient les bornes suivantes

$$0 \leq v_i^n \leq r^*, \quad 0 \leq u_i^n \leq g^*.$$

La preuve de ce théorème repose sur une linéarisation adéquate nous permettant l'utilisation des résultats obtenus pour le schéma linéaire. Une application du théorème de point fixe de Brouwer permet de conclure.

Pour obtenir (5), Aiki et Muntean établissent dans [3, 4], en supposant g et r constantes,

2. Etude d'un système de diffusion croisée modélisant la croissance de biofilms

que pour presque tout $t > 0$ l'égalité suivante est vérifiée

$$\begin{aligned} \int_0^1 s^2(t) x \left(u(x, t) + v(x, t) \right) dx + \frac{1}{2} s^2(t) + \kappa_u \int_0^t \int_0^1 \partial_x u(x, z) dx dz \\ + \kappa_v \int_0^t \int_0^1 \partial_x v(x, z) dx dz = \frac{1}{2} s_0^2 + \int_0^1 s_0^2 x \left(u_0(s_0 x) + v_0(s_0 x) \right) dx, \end{aligned} \quad (7)$$

ainsi que le contrôle suivant sur le gradient de u et v

$$\kappa_u \int_0^t \int_0^1 |\partial_x u(x, z)|^2 dx dz + \kappa_v \int_0^t \int_0^1 |\partial_x v(x, z)|^2 dx dz \leq C s^2(t). \quad (8)$$

En adaptant cette démarche, nous établissons deux inégalités d'énergies, voir Proposition 2.5.1 et Proposition 2.5.2 qui remplacent l'égalité (7) au niveau discret, ainsi qu'un contrôle similaire à (8) sur le gradient discret de u et v , voir Proposition 2.4.1. Nous prouvons alors dans le Théorème 2.2.2 que sous certaines hypothèses, il existe deux constantes strictement positives c et C indépendantes de la discrétisation telles que

$$c \sqrt{T} \leq s^{N_T} \leq C \sqrt{T+1}.$$

Finalement, nous concluons notre étude par quelques simulations numériques obtenues en implémentant ce schéma, voir Figure 4 ($p \geq 1$ est un paramètre intervenant dans la définition de la fonction ψ (6c)).

Ce travail fait l'objet d'une publication dans *Numerical Method for Partial Differential Equations*, voir [77].

1.4 Perspective

Les simulations suggèrent qu'il existe une constante Λ^* telle que

$$s(t) \sim \Lambda^* \sqrt{t},$$

pour $t \rightarrow +\infty$. Prouver cette asymptotique est une perspective de travaux futurs. Comme piste possible de recherche, nous pourrions essayer de définir une fonctionnelle de Lyapunov pour le système (3) ou (6). Dans notre cas, la principale difficulté vient des conditions au bord non conservatives (et non linéaires) qui ne permettent pas d'identifier une fonctionnelle de Lyapunov évidente.

2 Etude d'un système de diffusion croisée modélisant la croissance de biofilms

La Partie II de ce manuscrit est consacrée à l'étude d'un système de diffusion croisée modélisant la croissance de biofilms proposé par Rahman, Sudarsan et Eberl dans [66]

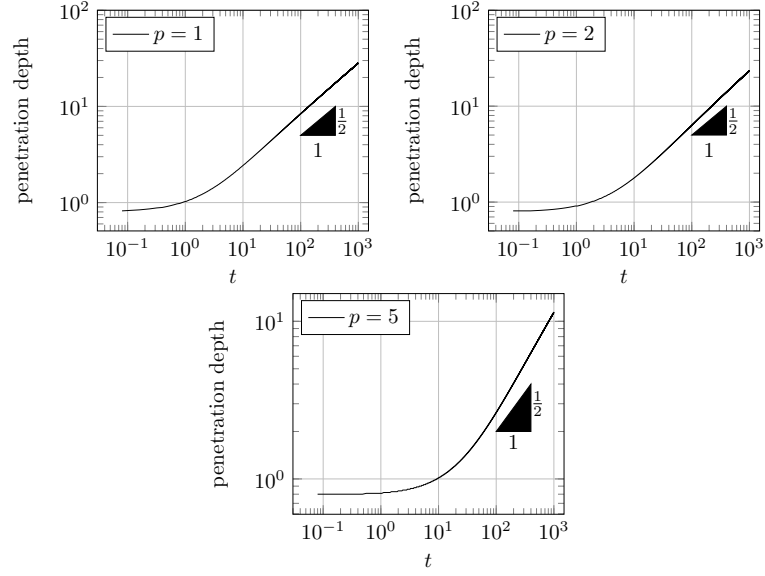


FIGURE 4 – Comportement de s en échelle logarithmique pour différentes valeurs de p .

et étudié par Daus, Milišić et Zamponi dans [32]. L'étude mathématique de ce système repose sur sa structure formelle de flot de gradient qui permet l'emploi d'une méthode spécifique, appelée « boudedness-by-entropy method », développées par Jüngel dans [45] et présentées dans la suite. Pour ce modèle, nous introduisons un schéma numérique de type volumes finis préservant la structure des équations du modèle et nous prouvons l'existence de solutions ainsi que la convergence de ce schéma.

2.1 Présentation du modèle

Un biofilm bactérien est un amas de cellules bactériennes enveloppé d'une matrice constituée de polymères, et attaché à une surface ou une interface du type air-liquide. Une fois fixées et sous des conditions favorables de croissance, les bactéries se multiplient et la taille du biofilm croît. Ces communautés multicellulaires organisées et résistantes sont omniprésentes dans la nature et ont un impact sur les activités humaines. En effet ces colonies interviennent dans les infections bactériennes comme la mucoviscidose ou les pathologies buccodentaires et ORL (parodontites, caries, otites chroniques). Ils peuvent aussi avoir un effet bénéfique pour l'homme via leur utilisation pour la décontamination des eaux usées [20, 59].

Comme représenté sur la Figure 5, le cycle de vie d'un biofilm se décompose en plusieurs étapes. Dans un premier temps, quelques bactéries se déposent sur une surface ou une interface. Elles se regroupent alors et sécrètent la matrice extracellulaire qui assure la cohésion de la colonie. A cette étape, la colonie est fixée de façon durable à la surface. S'ensuit alors une phase d'expansion du biofilm par multiplication des cellules et éta-

2. Etude d'un système de diffusion croisée modélisant la croissance de biofilms

lement de la colonie, phase 3 et 4 sur la Figure 5. Enfin, le biofilm atteint une masse maximale critique et débute une phase dite de dispersion où des bactéries quittent la colonie, ce qui met fin au cycle de vie de cette dernière. Le modèle proposé par Rahman, Sudarsan et Eberl se focalise uniquement sur les étapes 3 et 4 concernant la croissance d'un biofilm constitué de différents types d'espèces bactériennes. En particulier, au travers de ce modèle les auteurs s'intéressent à la distribution spatiale au cours du temps des différentes espèces constituant la colonie.

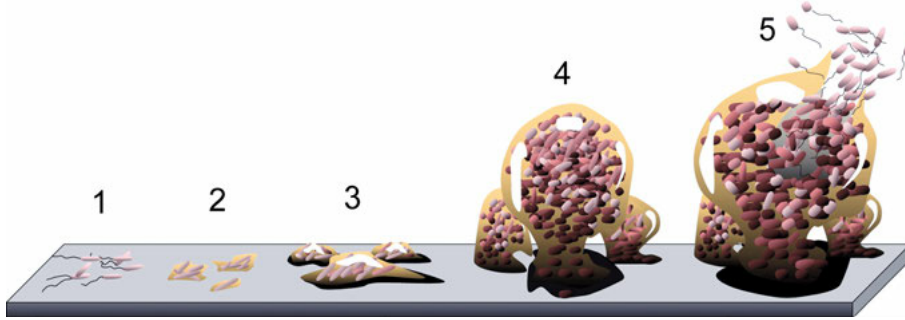


FIGURE 5 – Illustration des différentes phases du cycle de vie d'un biofilm (Illustration issue de [52] et adaptée sous la licence *Creative Commons*).

Pour construire un modèles mathématique permettant de décrire la croissance et l'architecture d'un biofilm multi-espèces, il faut prendre en compte dans les équations du modèle la manière dont la croissance d'une espèce est influencée par la présence et la croissance d'autres espèces. A cette fin, Rahman, Sudarsan et Eberl proposent dans [66] un système de diffusion croisée. Les termes de diffusion croisée permettent de prendre en compte l'influence du gradient de concentration d'une espèce sur la diffusion d'une autre. Les modèles de diffusion croisée sont une alternative possible à d'autres modèles préexistants mais qui ne rendent pas compte de façon satisfaisante d'observations expérimentales d'après [66, Section 1.3].

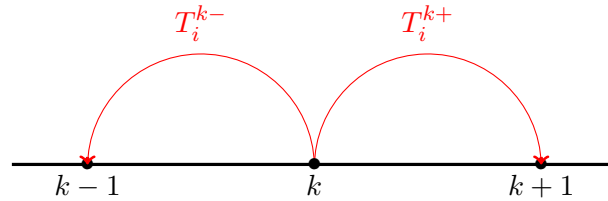


FIGURE 6 – Illustration des déplacements possibles et les taux de transition associés.

Pour présenter les équations du modèle nous reproduisons le raisonnement de [66]. Pour simplifier les notations, nous adoptons une approche 1D et nous considérons une suite

Introduction

de points $(x_k)_{0 \leq k \leq N}$ répartis de façon équidistante sur un intervalle. En supposant que le biofilm est constitué de n espèces, nous notons $u_i^k = u_i(x_k)$ où u_i représente la quantité d'espèce i au point x_k . Nous définissons également $T_i^{k\pm}$ les taux de transition qui décrivent le mouvement de l'espèce i du site k vers le site $k \pm 1$ comme représenté sur la Figure 6. Nous autorisons uniquement des déplacements des espèces entre sites contigus du maillage. De ces considérations, nous obtenons les équations d'évolutions suivantes pour u_i

$$\frac{du_i^k}{dt} = T_i^{(k-1)+} u_i^{k-1} + T_i^{(k+1)-} u_i^{k+1} - \left(T_i^{k+} + T_i^{k-} \right) u_i^k + r_i^k, \quad (9)$$

où r_i^k est un terme source décrivant la croissance de l'espèce i . Il reste à définir les taux de transitions. Nous supposons, après renormalisation, que le biofilm a une taille maximale égale à 1 et nous supposons que si cette taille maximale est atteinte au point x_k , alors aucune espèce située sur un site voisin ne peut « sauter » sur ce site. Suivant l'approche de Rahman, Sudarsan et Eberl, nous considérons la définition suivante pour les taux de transition

$$T_i^{k\pm} = \alpha_i q_i(u_1^k, \dots, u_n^k) p_i(u_1^{k\pm 1}, \dots, u_n^{k\pm 1}),$$

où α_i mesure la vitesse de déplacement des cellules entre sites voisins et p_i et q_i désignent des fonctions positives ne dépendant que de $u_1, \dots, u_n$. La quantité $q_i(u_1^k, \dots, u_n^k)$ mesure l'attrait de l'espèce i à quitter le site x_k et $p_i(u_1^{k\pm 1}, \dots, u_n^{k\pm 1})$ mesure l'attractivité du site $x_{k\pm 1}$ pour l'espèce i venant du site x_k . Les considérations concernant l'impossibilité pour une espèce de passer du site x_k à x_{k+1} si le biofilm a atteint sa taille maximale en x_{k+1} conduisent à imposer la condition $p_i(u_1^{k+1}, \dots, u_n^{k+1}) = 0$ si $\sum_{i=1}^n u_i^{k+1} = 1$. De même, un site, disons x_{k+1} , représente plus d'attrait pour l'espèce i si il est faiblement occupé. Nous supposons alors que p_i est une fonction décroissante et que les fonctions p_i et q_i sont toutes identiques et ne dépendent que de $\sum_{i=1}^n u_i$.

En faisant tendre le pas du maillage en espace vers 0, on obtient en 1D avec $M = \sum_{i=1}^n u_i$

$$\partial_t u_i - \alpha_i \left[p(M) \partial_x^2 (q(M) u_i) - q(M) u_i \partial_x^2 p(M) \right] = r_i(u).$$

Nous réécrivons cette équation sous la forme

$$\partial_t u_i - \alpha_i \operatorname{div} (p(M) q(M) \partial_x u_i + u_i (p(M) \partial_x q(M) - q(M) \partial_x p(M))) = r_i(u). \quad (10)$$

En effectuant le même type de raisonnement en dimension supérieure, nous déduisons de (10) en utilisant $\nabla p(M) = p'(M) \sum_{j=1}^n \nabla u_j$ et $\nabla q(M) = q'(M) \sum_{j=1}^n \nabla u_j$ le système d'équations suivant pour u_i la densité de l'espèce i

$$\partial_t u_i - \operatorname{div} \left(\sum_{j=1}^n A_{ij}(u) \nabla u_j \right) = r_i(u) \quad \text{dans } \Omega, \quad t > 0, \quad (11)$$

où $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ($d \geq 1$) désigne un domaine borné de $\mathbb{R}^d$ et où pour $i, j = 1, \dots, n$ les

2. Etude d'un système de diffusion croisée modélisant la croissance de biofilms

coefficients de la matrice de diffusion sont définis par

$$A_{ij}(u) = \alpha_i \delta_{ij} p(M) q(M) + \alpha_i u_i (p(M) q'(M) - p'(M) q(M)). \quad (12)$$

Ici $\alpha_i > 0$ désigne les coefficients de diffusion. Nous supposons que $p \in C^1([0, 1])$, décroissante et $p(1) = 0$. De plus, nous définissons q par l'expression suivante

$$q(M) = \frac{p(M)}{M} \int_0^M \frac{s^a}{(1-s)^b} \frac{ds}{p(s)^2}, \quad M > 0, \quad (13)$$

avec $a, b > 1$ données. Nous justifierons dans la suite cette forme particulière pour q . Enfin les équations du modèle sont complétées par des conditions initiales et des conditions mixtes du type Dirichlet/flux nul

$$\begin{aligned} u_i(0) &= u_i^0 \quad \text{dans } \Omega, \quad i = 1, \dots, n, \\ u_i &= u_i^D \quad \text{sur } \Gamma^D, \quad \mathcal{F}_i \cdot \nu = 0 \quad \text{sur } \Gamma^N, \end{aligned}$$

avec $\Gamma^D \cap \Gamma^N = \emptyset$ et $\Gamma^D \cup \Gamma^N = \partial\Omega$.

Comme remarqué par Daus, Milišić et Zamponi dans [32], nous pouvons réécrire l'équation (11) sous la forme

$$\partial_t u_i + \operatorname{div} \mathcal{F}_i = r_i(u), \quad \mathcal{F}_i = -\alpha_i p(M)^2 \nabla \frac{u_i q(M)}{p(M)} \quad \text{dans } \Omega, \quad t > 0, \quad i = 1, \dots, n. \quad (14)$$

En supposant alors $\alpha_i = 1$ pour tout $i = 1, \dots, n$, nous obtenons en sommant les équations précédentes (et en oubliant les termes de réaction)

$$\partial_t M = \operatorname{div} \left(p(M)^2 \nabla \frac{M q(M)}{p(M)} \right).$$

En utilisant (13) cela donne

$$\partial_t M = \operatorname{div} \left(\frac{M^a}{(1-M)^b} \nabla M \right). \quad (15)$$

Nous voyons ainsi que le modèle construit par Rahman, Sudarsan et Eberl est une extension d'un modèle antérieur introduit par Eberl, Parker et van Loosdrecht [34] dans lequel les auteurs s'intéressent à la croissance d'un biofilm constitué d'une seule espèce et dont l'équation constitutive est donnée par (15). Ainsi, si toutes les densités u_i s'annulent sauf une, les équations du système (11) doivent se réduire à l'équation (15). Ces considérations expliquent le choix de q sous la forme (13).

Pour démontrer l'existence d'une solution globale à ce système, il faut s'assurer que la borne supérieure $M < 1$ est vérifiée afin d'éviter la singularité lorsque $M = 1$. Or, et c'est l'une des caractéristiques des systèmes de diffusion croisée, la matrice de diffusion $(A_{i,j}(u))_{1 \leq i,j \leq n}$ n'est ni diagonale, ni symétrique, ni définie positive et l'utilisation du principe du maximum n'est pas envisageable pour obtenir un contrôle L^∞ . Une approche

Introduction

possible est d'employer la « boundedness-by-entropy method » que nous présentons dans la suite.

Dans [32], Daus, Milišić et Zamponi prouvent, sous l'hypothèse $0 < M^0 = \sum_1^n u_i^0 < 1$ et $0 < M^D = \sum_1^n u_i^D < 1$, l'existence et l'unicité de solutions faibles globales en temps. Ils établissent la positivité des densités u_i ainsi que la borne supérieure $M = \sum_{i=1}^n u_i < 1$. Nous reviendrons dans la suite sur l'hypothèse faite dans [32] sur M^0 et M^D qui empêchent l'étude de la propagation de l'interface mobile $\{M > 0\}$.

2.2 Méthodes d'entropie

Un point clef de l'analyse du modèle de croissance de biofilms repose sur l'emploi d'une méthode particulière portant le nom de « boundedness-by-entropy method ». Cette méthode a été introduite par Burger, Di Francesco, Pietschmann et Schlake dans [18] afin d'étudier un modèle de diffusion croisée modélisant le transport de deux types d'espèces chargées de densité ρ_1 et ρ_2 sous la contrainte $\rho_1 + \rho_2 \leq 1$ puis formalisée et généralisée par Jüngel dans [45]. Dans ce travail, Jüngel établit de nombreux résultats d'existence de solutions globales pour des modèles de diffusion croisée où, comme dans l'exemple du modèle de biofilms et le modèle considéré dans [18], la masse totale du système est contrainte par une borne supérieure. Ce type de contraintes représente un défi pour l'étude mathématique de ces modèles à cause de la structure particulière des matrices de diffusion qui exclut l'emploi du principe du maximum.

Afin de présenter les idées principales des méthodes d'entropie, considérons un système de diffusion croisée général de la forme

$$\partial_t u - \operatorname{div}(A(u) \nabla u) = f(u), \quad \text{dans } \Omega, \quad t > 0. \quad (16)$$

Ici $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ($d \geq 1$) désigne un domaine borné de $\mathbb{R}^d$, $u(t) = (u_1, \dots, u_n)(\cdot, t) : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$ pour $n \geq 1$ est l'inconnue, $A(u) = (a_{i,j}(u)) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ est la matrice de diffusion et les termes de réactions sont représentés par les composantes de $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$. Afin d'alléger la présentation nous supposons que le modèle est complété par les conditions

$$(A(u) \nabla u) \cdot \mathbf{n} = 0 \quad \text{sur } \partial\Omega, \quad t > 0, \quad \text{et} \quad u(\cdot, 0) = u^0(\cdot) \quad \text{dans } \Omega,$$

où $\mathbf{n}$ est le vecteur unitaire extérieur à $\partial\Omega$. Les idées principales de la méthode restent inchangées dans le cas de conditions mixtes mais nécessitent l'introduction d'un nombre plus important d'outils.

L'hypothèse principale nécessaire pour appliquer la technique de « boundedness-by-entropy method » est que le système (16) possède, au moins formellement, une structure de flot de gradient i.e. qu'il existe une matrice $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ semi-définie positive telle que (16) puisse se réécrire sous la forme

$$\partial_t u - \operatorname{div} \left(B \nabla \frac{\delta H}{\delta u} \right) = f(u), \quad (17)$$

2. Etude d'un système de diffusion croisée modélisant la croissance de biofilms

où la fonctionnelle, appelée dans la suite entropie, est définie par $H(u) = \int_{\Omega} h(u) dx$ pour h une fonction régulière fixée. La dérivée, au sens de Fréchet, $\delta H / \delta u$ est définie comme un opérateur d'un espace de Banach X dans son dual X' avec

$$\langle \frac{\delta H}{\delta u}, v \rangle = \int_{\Omega} Dh(u) v dx, \quad (18)$$

où Dh désigne la dérivée de h . Cette fonction $h : \mathcal{O} \subset \mathbb{R}^n \rightarrow [0, \infty)$ est supposée convexe et représente la densité de l'entropie H . Nous supposons dans la suite que $\mathcal{O}$ est un ensemble ouvert et borné de $\mathbb{R}^n$ fonction du modèle considéré et qui représente l'ensemble des valeurs possibles que peut prendre u le vecteur solution de (16).

En supposant que la fonction h appartient à $C^2(\mathcal{O}; [0, \infty))$ et en identifiant via le théorème de représentation de Riesz, dans le cas $X = L^2(\Omega)$ par la formule (18), $\delta H / \delta u$ à Dh , nous définissons $w = Dh(u)$. Dans la suite la variable w sera appelée variable entropique et nous réécrivons alors (17) en terme de variable entropique sous la forme

$$\partial_t u - \operatorname{div}(B(w) \nabla w) = f(u), \quad (19)$$

pour $B = B(w) = A(u) (D^2 h(u))^{-1} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ et où $D^2 h(u) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ désigne la matrice Hessienne de h . Pour passer de (19) à (17) il faut alors supposer que $Dh : \mathcal{O} \rightarrow \mathbb{R}^n$ est inversible et dans ce cas $u = (Dh)^{-1}(w)$.

Toujours en supposant que h appartient à $C^2(\mathcal{O}; [0, \infty))$ nous déduisons deux conséquences importantes :

Premièrement, en calculant formellement la dérivée en temps de H , nous déduisons de (19) et d'une intégration par parties

$$\begin{aligned} \frac{dH}{dt} &= \int_{\Omega} \partial_t u \cdot Dh(u) dx = \int_{\Omega} \partial_t u \cdot w \\ &= - \int_{\Omega} \nabla w : B(w) \nabla w dx + \int_{\Omega} f(u) \cdot w dx, \end{aligned} \quad (20)$$

avec $A : B = \sum_{i,j} a_{i,j} b_{i,j}$ pour deux matrices $A = (a_{i,j})$ et $B = (b_{i,j})$. Le terme $\int_{\Omega} \nabla w : B(w) \nabla w$ est appelé dissipation d'entropie. En supposant à présent que $f(u) \cdot w \leq 0$ nous obtenons l'inégalité suivante

$$\frac{dH}{dt} \leq - \int_{\Omega} \nabla w : B(w) \nabla w dx, \quad (21)$$

appelé inégalité de dissipation d'entropie. De plus, puisque $B(w)$ est supposée semi-définie positive, nous déduisons de l'inégalité (21) que H est une fonctionnelle de Lyapunov. L'existence d'une telle fonctionnelle est utile pour montrer l'existence de solutions globales à (16) et (17) ; la relation (21) permettant d'obtenir des estimations a priori sur u .

Deuxièmement, si il existe une solution faible pour (19) alors l'inversibilité de $Dh : \mathcal{O} \rightarrow \mathbb{R}^n$ implique que $u = (Dh)^{-1}(w)$ satisfait $u(\cdot, t) \in \mathcal{O}$ pour $t > 0$. Or par hypothèse $\mathcal{O}$ est

Introduction

supposé borné et nous obtenons ainsi des estimations L^∞ pour u sans avoir recours au principe du maximum.

En résumé la méthode que nous venons d'exposer repose sur :

- 1) L'existence de $h \in C^2(\mathcal{O}; [0, \infty))$ convexe telle que Dh est inversible et $\mathcal{O}$ est un ouvert borné de $\mathbb{R}^n$ (ce qui permet d'obtenir des bornes L^∞ sur u).
- 2) La matrice $A(u) (D^2h(u))^{-1}$ est semi-définie positive et $f(u) \cdot w \leq 0$ pour tout $u \in \mathcal{O}$ (ce qui permet d'établir des estimations a priori sur u).

Nous renvoyons à [45] pour plus de détails.

A titre illustratif, nous considérons le modèle de croissance de biofilms, avec des conditions de type flux nul sur tout $\partial\Omega$ et sans termes sources. Dans ce cas, suivant l'approche développée par Daus, Milišić et Zamponi dans [32], nous introduisons

$$\mathcal{O} = \left\{ u = (u_1, \dots, u_n) \in (0, \infty)^n : \sum_{i=1}^n u_i < 1 \right\}.$$

On considère la fonctionnelle d'entropie $H(u) = \int_\Omega h(u) dx$ avec

$$h(u) = \sum_{i=1}^n (u_i (\log u_i - 1) + 1) + \int_0^M \log \frac{q(s)}{p(s)} ds.$$

Les variables entropiques sont alors définies par

$$w_i = \frac{\partial h}{\partial u_i} = \log \left(\frac{u_i q(M)}{p(M)} \right).$$

En argumentant comme dans la preuve de [32, Lemme 6] on peut montrer que Dh est inversible ce qui conduit à

$$u = (Dh)^{-1}(w) \in \mathcal{O}.$$

De plus, on a l'égalité de dissipation d'entropie suivante

$$\frac{dH}{dt} + 2 \sum_{i=1}^n \alpha_i \int_\Omega p^2(M) \left| \nabla \sqrt{\frac{u_i q(M)}{p(M)}} \right|^2 dx = 0.$$

2.3 Convergence d'un schéma volumes finis

Les résultats de ce Chapitre sont un travail en collaboration avec Ansgar Jüngel et Esther Daus et ont été réalisés lors d'un séjour de deux mois à la *Technische Universität* de Vienne.

Dans le Chapitre 3, nous introduisons et analysons un schéma numérique de type volumes finis pour le système de croissance de biofilms proposé dans [66]. L'une des principales difficultés est de définir un schéma numérique capable de préserver au niveau discret la structure du modèle continu. Pour ce faire, nous proposons un schéma obtenu par une

2. Etude d'un système de diffusion croisée modélisant la croissance de biofilms

méthode de type Euler implicite en temps et une approximation des flux de type volumes finis où les flux sont approchés par une méthode à deux points avec un traitement particulier pour le terme $p^2(M)$ en facteur du gradient de $u_i q(M)/p(M)$. Notons qu'un autre schéma numérique de type volumes finis semi-implicite en temps a été développé par Rahman et Eberl, voir [65], pour étudier, au travers de simulations numériques, le système de croissance de biofilms introduit dans [66]. Cependant aucune analyse de ce schéma n'a été effectuée.

Dans le Chapitre 3, nous montrons que le schéma décrit précédemment vérifie les résultats suivants :

- (i) Dans le Théorème 3.2.1, nous prouvons l'existence de solutions positives et bornées.
- (ii) Toujours dans le Théorème 3.2.1 et sous une hypothèse similaire à l'hypothèse 2) de la partie précédente pour le terme source, nous prouvons que le schéma préserve la structure de flot de gradient du modèle de biofilm. En particulier, nous établissons l'inégalité de dissipation d'entropie vérifiée par les solutions du schéma numérique.
- (iii) Enfin dans le Théorème 3.2.2, nous prouvons sous certaines hypothèses sur les constantes de diffusion la convergence du schéma.

La preuve du Théorème 3.2.1 repose sur l'adaptation au niveau discret de la « boudedness-by-entropy method » exposée plus haut ainsi que de la démarche générale de preuve d'existence de solutions globales pour des systèmes de diffusion croisée telle qu'employée par Jüngel dans [45, Théorème 2]. En particulier, c'est l'établissement d'une version discrète de l'égalité d'entropie qui nous permet, par le biais d'un argument de degré topologique, de prouver l'existence d'une solution au schéma numérique.

De façon similaire à la preuve de convergence du schéma introduit au Chapitre 1, la preuve du Théorème 3.2.2 est fondée sur des estimations d'énergie discrètes qui permettent l'application d'un résultat de compacité adéquat. Pour cela, nous établissons en supposant l'égalité des constantes de diffusion des estimations discrètes du type $L^\infty((0, T) \times \Omega)$ et $L^2(0, T; H^1(\Omega))$ qui nous permettent d'employer un résultat de compacité dû à Andreianov, Cancès et Moussa [11].

Finalement, nous concluons le Chapitre 3 par la présentation de certaines simulations numériques en dimension un. Dans ces simulations, nous nous intéressons au comportement en temps long, ainsi qu'à l'ordre de convergence en espace et en norme L^2 du schéma.

2.4 Perspectives

Sur la Figure 7, nous illustrons la convergence du schéma dans le cas d'un biofilm constitué de deux espèces et où les constantes de diffusion sont données par $\alpha_1 = 1$ et $\alpha_2 = 10$. Dans ce cas, le schéma semble être convergent et nous espérons pouvoir

Introduction

généraliser le résultat du Théorème 3.2.2 sans l'hypothèse restrictive sur les α_i .

D'autres pistes de recherches futures sont également envisagées. En effet, afin d'étudier la propagation de l'interface mobile $\{M > 0\}$, nous aimerions prouver des résultats d'existence au niveau continu et discret dans le cas où les conditions initiales sont à support compact ainsi que pour des conditions de Dirichlet homogènes. Pour cela, nous pourrions utiliser la même démarche que Chen et Jüngel [31], pour prouver, au moins dans le cas de conditions au bord de type flux nul sur tout $\partial\Omega$, l'existence de solutions dans le cas où les conditions initiales sont à support compact. L'idée principale de cette méthode est de modifier la donnée initiale afin de la rendre strictement positive sur tout le domaine puis de démontrer l'existence d'une solution associée à cette donnée initiale modifiée. Dans notre cas, nous pourrions considérer, en notant $u^0 = (u_1^0, \dots, u_n^0)$ la donnée initiale à support compact, la modification suivante

$$\tilde{u}_i^0 = \frac{u_i^0 + \eta^0}{1 + n\eta^0}, \quad \forall 1 \leq i \leq n,$$

pour tout $0 < \eta^0 < 1/n$ et avec cette définition nous obtenons $\tilde{u}_i^0 > 0$ pour tout $1 \leq i \leq n$ et $\sum_{i=1}^n \tilde{u}_i^0 < 1$. En appliquant le résultat de Daus, Milišić et Zamponi, on obtient l'existence d'une solution $\tilde{u} = (\tilde{u}_1, \dots, \tilde{u}_n)$. Il reste alors à établir des estimations uniformes en η^0 afin de pouvoir passer à la limite $\eta^0 \rightarrow 0$ pour en déduire l'existence d'une solution associée à u^0 . Il serait intéressant d'étudier si ce type d'approche peut également s'appliquer pour prouver l'existence de solutions dans le cas de conditions au bord mixtes Dirichlet homogène/flux-nul.

Par ailleurs, nous aimerions également vérifier si l'adaptation au niveau discret de la « boudedness-by-entropy method » est envisageable afin d'obtenir des résultats d'existence généraux pour des schémas numériques volumes finis développés pour d'autres modèles de diffusion croisée. Nous pensons par exemple au schéma proposé par Cancès, Chainais-Hillairet, Gerstenmayer et Jüngel dans [19] pour un modèle de transport d'ions et dans lequel les auteurs sont contraints de supposer l'égalité des constantes de diffusion afin de prouver l'existence de solutions au schéma. Nous pensons également à [10] où Andreianov, Bendahmane et Baier développent un schéma volumes finis convergent pour un modèle de dynamique des populations introduit par Shigesada, Kawasaki et Teramoto [69]. Dans [10], les auteurs prouvent l'existence de solutions au schéma sous certaines hypothèses sur la matrice de diffusion. Des résultats, dus à Chen et Jüngel [29, 30, 45], prouvant l'existence de solutions globales pour ce modèle sous des hypothèses plus générales que celles considérées par Andreianov, Bendahmane et Baier nous laissent espérer une généralisation possible des résultats obtenus dans [10].

3 Etude d'un modèle simplifié de corrosion

Dans cette dernière partie nous introduisons et étudions un modèle jouet pour décrire l'évolution de la corrosion d'une plaque métallique. Il s'agit à nouveau d'un modèle

3. Etude d'un modèle simplifié de corrosion

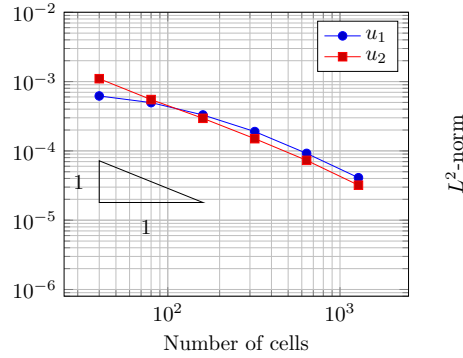


FIGURE 7 – Convergence en espace et en norme L^2 dans le cas d'une biofilm constitué de deux espèces de bactéries et avec $\alpha_1 = 1$ et $\alpha_2 = 10$.

à frontière libre, la position de l'interface entre le métal et la couche oxydée fait partie des inconnues. Notre résultat principal est l'existence de solutions faibles. Nous les obtenons en interprétant le modèle comme un flot de gradient pour une métrique de type Wasserstein et en discrétisant en temps par la méthode des « Minimizing Movements » de De Giorgi.

Le modèle étudié dérive du modèle DPCM (*Diffusion-Poisson-Coupled-Model*) introduit par Bataillon et ses coauteurs dans [12] et qui décrit la corrosion d'une plaque métallique (fer) en contact avec une solution aqueuse. Cette étude est motivée par les projets de stockage des déchets radioactifs dans des barils métalliques enterrés en milieu argileux, option envisagée par l'ANDRA (Agence Nationale pour la gestion des déchets radioactifs).

Pour ce modèle, un schéma numérique de type volumes finis a été proposé dans [13] par Bataillon et ses coauteurs. Dans cet article, les auteurs s'intéressent au comportement d'éventuelles solutions. Citons également l'étude réalisée par Chainais-Hillairet et Gallouët dans [24] sur l'existence d'ondes progressives. Enfin, un résultat d'existence de solutions a été obtenu par Chainais-Hillairet et Lacroix-Violet pour une version simplifiée du modèle où les interfaces mobiles ne sont pas prises en compte, voir [25]. Cependant, il n'existe pour l'heure aucun résultat d'existence pour le modèle DPCM complet. Le fait que le domaine sur lequel les équations du problème sont définies soit variable et soit lui-même une des inconnues est l'une des principales difficultés de l'analyse mathématique de ce modèle. Nous essayons, par l'introduction d'un problème plus simple, de mieux comprendre la structure du modèle DPCM.

3.1 Présentation du modèle jouet de corrosion

Dans ce modèle simplifié nous considérons, comme dans le modèle DPCM, que le baril métallique est en contact avec une solution contenant des espèces chimiques chargées de type cation. La présence de cette solution est due au stockage de ce dernier en milieu argileux. Par ailleurs, sur la surface du baril, une couche dense d'oxyde se forme,

Introduction

protégeant le métal en réduisant la vitesse de corrosion de ce dernier. La taille de cette couche varie au cours du temps et constitue le domaine sur lequel nos équations vont être définies. De plus, son épaisseur étant très faible en comparaison de la taille du baril, l'emploi d'un modèle unidimensionnel est justifié.

Comme représenté sur la Figure 8, nous considérons trois zones : la solution représentée par l'intervalle $(-\infty, 0]$, la couche d'oxyde par l'intervalle $(0, X)$ et le métal par l'intervalle $[X, +\infty)$. À l'interface entre la solution et la couche d'oxyde des échanges d'espèces chimiques se produisent. En particulier, des atomes d'oxygènes pénètrent dans la couche d'oxyde et si la concentration en oxygène est assez élevée à l'interface X , le baril subit une réaction d'oxydation. Cette dernière réaction dégrade le métal et fait augmenter la taille de la couche d'oxyde. À l'inverse, si la concentration en oxygène est trop faible à l'interface, le métal peut se reformer réduisant la taille du domaine $(0, X)$.

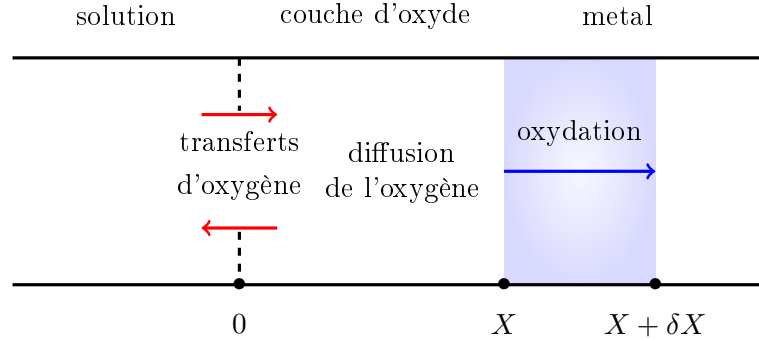


FIGURE 8 – Représentation des différentes zones considérées dans le modèle et de la propagation de l'interface mobile due à la réaction d'oxydation

En suivant la même approche que celle adoptée par Bataillon et ses coauteurs dans [12], nous nous focalisons sur l'évolution de la concentration en lacune d'oxygène, notée ρ , plutôt que sur la concentration en oxygène dans la zone $(0, X)$. Ces lacunes représentent des défauts d'oxygène dans la structure quasi cristalline de la couche d'oxyde. Nous supposons que la concentration de lacunes dans la zone oxydée évolue par diffusion linéaire. À l'interface entre la solution et la couche d'oxyde, le modèle DPCM propose une loi pour le flux de lacunes d'oxygènes qui est une fonction non linéaire de la concentration de lacune et du saut de potentiel électrostatique (non considéré dans le modèle simplifié). Ici nous nous donnons des concentrations limites $0 < \rho_- < \rho_+$ et nous imposons que le flux soit nul si $\rho_- < \rho < \rho_+$ et que le flux amène des lacunes dans la couche d'oxyde si $\rho = \rho_-$ et les évacue si $\rho = \rho_+$ (régulation).

À l'interface mobile X , la dégradation ou la reformation de métal libère dans ou soustrait à la couche d'oxyde des lacunes d'oxygène. De façon abstraite, nous voyons la zone métallique comme une source constante de lacune d'oxygène notée $\bar{\rho}$. En notant $X + \delta X$ une variation de l'interface X , alors le nombre de lacune ajouté ou retranché à la couche d'oxyde est $\bar{\rho} \delta X$. Cette constante $\bar{\rho}$ représente le maximum possible de ρ et si $\rho = \bar{\rho}$ sur

3. Etude d'un modèle simplifié de corrosion

$[0, +\infty)$ alors $X = 0$. Cette interprétation abstraite est conforme à la réaction d'oxydation au niveau de l'interface entre la couche d'oxyde et le métal. En effet, si la concentration en oxygène est basse au voisinage de X , le métal se reforme. Si on se concentre sur la concentration en lacune d'oxygène alors le métal se reforme si cette concentration est élevée.

Les inconnues du modèle sont : ρ la concentration en lacune d'oxygène, X l'abscisse de l'interface mobile, R une fonction dont les variations R' représentent la quantité de matière échangée entre la solution et la couche d'oxyde. Pour décrire mathématiquement les phénomènes exposés, nous considérons, pour $0 < T < +\infty$ fixé, les équations d'évolution suivantes

$$\partial_t \rho(x, t) - \partial_x^2 \rho(x, t) = 0 \quad \text{pour} \quad (x, t) \in (0, X(t)) \times (0, T), \quad (22a)$$

$$\rho(x, t) = \bar{\rho} \quad \text{pour} \quad (x, t) \in (X(t), +\infty) \times (0, T), \quad (22b)$$

$$\partial_x \rho(X(t), t) + X'(t) (\rho(X(t), t) - \bar{\rho}) = 0 \quad \text{pour} \quad t \in (0, T), \quad (22c)$$

$$\partial_x \rho(0, t) = R'(t) \quad \text{pour} \quad t \in (0, T), \quad (22d)$$

$$\rho(x, 0) = \rho^0(x) \quad \text{pour} \quad x \in (0, X^0), \quad (22e)$$

La contrainte (22b) garantit une concentration constante égale à $\bar{\rho}$ dans le métal. La condition au bord (22c) est une condition de type Neumann homogène sur un domaine mobile. Cette condition assure la conservation du nombre de lacunes d'oxygène au cours des échanges au travers de l'interface X . L'évolution de cette interface mobile est régie par l'équation

$$\lambda X'(t) = \alpha - (\bar{\rho} - \rho(X(t), t)) + \bar{\rho} (\log \bar{\rho} - \log \rho(X(t), t)) \quad \text{pour} \quad t \in (0, T), \quad (23)$$

où α et λ sont des constantes strictement positives. Nous supposons qu'initialement la couche d'oxyde est déjà formée, à savoir $X(0) = X^0 > 0$. Cette forme particulière pour l'équation (23) vient de la structure sous-jacente de flot de gradient pour une certaine métrique du modèle proposé. En particulier, l'équation (23) prend en compte les variations d'énergie des mécanismes impliqués dans le déplacement de l'interface mobile, voir Proposition 4.4.6. Enfin, il nous reste à décrire le comportement de la concentration en lacune d'oxygène lors de réactions chimiques entre la solution et la couche d'oxyde. Nous imposons des conditions non linéaires de type « thermostat » à l'interface fixe entre la couche d'oxyde et la solution. Nous définissons

$$\rho_+ = \bar{\rho} \exp \left(\beta + \frac{c^2}{2} - 1 \right) \quad \text{et} \quad \rho_- = \bar{\rho} \exp \left(\beta - \frac{c^2}{2} - 1 \right), \quad (24)$$

avec $\beta \in \mathbb{R}$ et $c \in (0, +\infty)$ deux constantes vérifiant $\beta + c^2/2 < 1$. Dans le cas où la solution et la couche d'oxyde échangent de la matière, nous imposons à la concentration en lacune d'oxygène ρ de rester constante en $x = 0$, à savoir

$$\rho(0, t) = \rho_+ \text{ si } R'(t) > 0 \quad \text{et} \quad \rho(0, t) = \rho_- \text{ si } R'(t) < 0 \quad \text{pour } t \in (0, T). \quad (25)$$

Introduction

Dans le cas où ces deux zones (solution/couche d'oxyde) n'échangent aucune matière, nous imposons que ρ vérifie

$$\rho_- \leq \rho(0, t) \leq \rho_+ \text{ si } R'(t) = 0 \text{ pour } t \in (0, T). \quad (26)$$

Notons que le modèle DPCM comprend des conditions au bord plus complexes que (25)-(26) décrivant les réactions chimiques se produisant entre la solution et la couche d'oxyde. Néanmoins, notre approche ne nous a pas permis pour l'instant d'inclure ce type de conditions dans le modèle simplifié.

Notons également que le modèle (22)-(26) néglige certains phénomènes décrits dans le modèle DPCM. En particulier, nous négligeons la présence d'un champ électrique dans la couche d'oxyde créé par la différence de potentiel entre la solution et le métal. Nous négligeons également la présence d'autres espèces chimiques (cations Fe^{3+} et électrons e^-) dans le domaine mobile $(0, X(t))$ ainsi que le phénomène de dissolution de la couche d'oxyde par la solution. L'inclusion de ces phénomènes fera l'objet de développements futurs.

3.2 Existence de solutions faibles

Au Chapitre 4, nous prouvons l'existence d'une solution faible au modèle (22)-(23). Notre approche repose sur l'approximation de la structure de flot de gradient du modèle pour une certaine métrique. Pour mettre en avant et tirer parti de cette structure, nous employons un schéma variationnel semi-discret en temps. Nous définissons dans un premier temps un maillage uniforme de l'intervalle $(0, T)$, nous fixons un pas de temps $\tau > 0$, un entier N_T tel que $N_T \tau = T$ et une suite de points $t_n = n\tau$. Le schéma semi-discret permet d'obtenir des approximations des solutions du problème (22)-(23) aux différents instants t_n en résolvant à chaque itération un problème de minimisation.

Pour un schéma variationnel ou schéma minimisant, le problème de minimisation à résoudre à chaque itération consiste à déterminer le minimum d'une certaine fonctionnelle. Cette fonctionnelle est constituée de deux termes : une distance et une fonctionnelle d'énergie. Par construction, les solutions du schéma minimisant font décroître à chaque itération la fonctionnelle d'énergie suivant une direction de plus forte pente donnée par le gradient de cette fonctionnelle. Grâce à la discrétisation en temps, l'un des intérêts des schémas minimisants est de pouvoir éviter d'utiliser la notion de gradient d'une fonctionnelle définie sur un espace sans structure différentiable, par exemple dans des espaces métriques.

Nous proposons de considérer un schéma variationnel de type JKO introduit par Jordan, Kinderlehrer et Otto dans [44]. Pour ce genre de schéma, on considère la métrique de Wasserstein qui permet de munir l'ensemble des mesures positives et de même masse d'une distance. Notons, que nous aurions pu considérer d'autres métriques pour obtenir nos résultats, comme par exemple la métrique L^2 . Cependant, certaines raisons, en particulier l'unicité de solutions au problème (22)-(23), nous poussent à considérer une métrique du type Wasserstein, nous renvoyons à la Section 4.1.1 du Chapitre 4 pour plus de détails sur les justifications de notre approche.

3. Etude d'un modèle simplifié de corrosion

L'une des difficultés de notre étude est d'adapter la définition de la distance de Wasserstein au type de mesures particulier qui apparaît dans notre modèle. En effet, la contrainte (22b) sur ρ nous impose de définir une distance sur l'ensemble des mesures μ définies sur $\mathbb{R}$ et valant $\bar{\rho}$ à partir d'un certain $\Lambda > 0$. En particulier, ces mesures sont de masse infinie et le cadre usuel pour les métriques de Wasserstein est proscrit. Nous renvoyons à la Section 4.2.2 pour plus de détails sur la construction de ces distances de type Wasserstein et à la Section 4.2.3 pour une introduction complète du schéma minimisant. Dans le Chapitre 4 nous prouvons les résultats suivants :

- Dans le Théorème 4.2.3 nous prouvons, pour un pas de temps fixé, l'existence de solutions au schéma minimisant. De plus, en supposant $\alpha > 0$ nous prouvons également la croissance de l'interface mobile.
- Dans le Théorème 4.2.4 nous prouvons l'existence d'une solution faible au problème (22)-(23).

La preuve du Théorème 4.2.3 repose sur des techniques classiques en théorie du calcul des variations comme exposé par Santambrogio dans [67]. Pour montrer l'existence d'une solution, nous prouvons tout d'abord l'existence d'une suite minimisante, puis par le biais d'estimations a priori, nous montrons que cette suite converge à une sous suite extraite près vers une solution du schéma minimisant. La croissance de l'interface est établie en raisonnant par contradiction.

Une fois l'existence d'une solution au schéma minimisant obtenue pour un pas de temps, on itère ce résultat pour en déduire l'existence d'une suite de solutions pour tout $0 \leq n \leq N_T$. On établit alors l'équation d'Euler-Lagrange vérifiée par cette suite de minimiseurs. On prouve ensuite des estimations a priori satisfaites par la suite qui nous permettent de déduire après passage à la limite $\tau \rightarrow 0$ l'existence de $X \in H^1(0, T)$, $\rho \in L^2(0, T; BV_{\text{loc}}(\mathbb{R}_+))$ et $R \in BV(0, T)$. Enfin, en passant à la limite $\tau \rightarrow 0$ dans l'équation d'Euler-Lagrange on prouve que le triplet (X, ρ, R) est solution faible du problème (22)-(23).

Ce travail est en collaboration avec Benoît Merlet et Juliette Venel.

3.3 Perspectives

Plusieurs pistes de recherches sont envisagées. Dans le Théorème 4.2.4, nous établissons l'existence d'une solution faible au problème (22)-(23). Cependant, si nous sommes en mesure d'établir que la fonction limite ρ vérifie pour presque tout $t \in (0, T)$ $\rho(0, t) \in [\rho_-, \rho_+]$, voir Théorème 4.2.4, nous ne sommes pas en mesure, à cause de problème de régularité sur les fonctions solutions de (22)-(23), d'établir que ρ et R vérifient les conditions (25) et (26). Une approche possible est de reformuler formellement ces conditions. En effet, en considérant $\tilde{\rho} \in \mathcal{D}(\mathbb{R})$ avec $\tilde{\rho}(0) \in [\rho_-, \rho_+]$ nous pouvons réécrire les conditions (25) et (26) sous la forme

$$(\rho(0, t) - \tilde{\rho}(0)) R'(t) \geq 0, \quad \text{pour } t \in (0, T). \quad (27)$$

Considérons à présent $\phi \in \mathcal{D}(0, T)$ avec $\phi(t) \geq 0$ pour tout $t \in (0, T)$. En multipliant (22) par $(\rho - \tilde{\rho})\phi$ et en intégrant en espace et en temps, nous obtenons après intégration par

Introduction

parties

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{2} \int_0^T \int_0^{+\infty} |\rho(x, t)|^2 \partial_t \phi(t) \, dx dt - \int_0^T \int_0^{+\infty} \rho(x, t) \tilde{\rho}(x) \partial_t \phi(t) \, dx dt \\
& + \int_0^T R'(t) (\rho(0, t) - \tilde{\rho}(0)) \phi(t) \, dt + \int_0^T \int_0^{X(t)} |\partial_{x,a} \rho(x, t)|^2 \phi(t) \, dx dt \\
& - \int_0^T \int_0^{X(t)} \partial_{x,a} \rho(x, t) \partial_x \tilde{\rho}(x) \phi(t) \, dx dt = 0,
\end{aligned}$$

où $\partial_{x,a} \rho$ désigne la partie absolument continue de $\partial_x \rho$. En utilisant l'inégalité (27) nous déduisons :

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{2} \int_0^T \int_0^{+\infty} |\rho(x, t)|^2 \partial_t \phi(t) \, dx dt \\
& - \int_0^T \int_0^{+\infty} \rho(x, t) \tilde{\rho}(x) \partial_t \phi(t) \, dx dt + \int_0^T \int_0^{X(t)} |\partial_{x,a} \rho(x, t)|^2 \phi(t) \, dx dt \\
& - \int_0^T \int_0^{X(t)} \partial_{x,a} \rho(x, t) \partial_x \tilde{\rho}(x) \phi(t) \, dx dt \leq 0. \quad (28)
\end{aligned}$$

L'inégalité variationnelle (28) est une relaxation des conditions (25)-(26). En effet, d'après ce qui vient d'être fait, si (X, ρ, R) est une solution assez régulière de (22)-(23), alors les conditions (25)-(26) et (28) sont équivalentes. Par contre l'inégalité (28) fait sens pour des fonctions peu régulières.

Il s'avère qu'au niveau discret, les solutions du schéma minimisant vérifient également une inégalité du type (27), voir Proposition 4.4.2, Proposition 4.4.3 et Proposition 4.4.4. L'idée serait alors d'établir un pendant discret de (28) pour les solutions du schéma minimisant puis de passer à la limite $\tau \rightarrow 0$ pour prouver que les fonctions obtenues au Théorème 4.2.4 vérifient (28). Ceci permettrait d'affirmer que ces fonctions satisfont, en un sens faible, les conditions au bord (25) et (26).

Nous aimerions également étudier l'unicité d'une solution au problème (22)-(23). Pour cela, inspiré de travaux de Otto [61], notre espoir est que le flot de gradient basé sur une métrique de type Wasserstein dont on considère l'approximation ici via notre schéma minimisant soit contractant. Cependant, la présence de l'interface mobile rend l'établissement d'un tel résultat délicat. Nous renvoyons à l'introduction du Chapitre 4 et à la Section 4.6 pour une discussion plus détaillée.

Enfin, une autre extension possible de notre travail consiste à enrichir le modèle simplifié. En particulier, il serait intéressant de prendre en compte l'évolution d'autres espèces comme les cations Fe^{3+} et les électrons, d'inclure la présence d'un champ électrique dans la couche d'oxyde, d'inclure des conditions de type Robin dépendants de ρ et d'ajouter un phénomène de dissolution entre la solution et la couche d'oxydes. L'ajout de ces phénomènes dans notre problème simplifié permettrait de nous rapprocher du modèle DPCM.

Première partie

Etude d'un modèle de carbonatation des bétons armés

Chapitre 1

Convergence d'un schéma volumes finis pour un système parabolique à frontière libre modélisant la carbonatation des bétons armés

Travail en collaboration avec Claire Chainais-Hillairet et Benoît Merlet¹.
Ce chapitre est publié dans *ESAIM : M2AN* [28].

In this chapter we define and study a finite volume scheme for a concrete carbonation model proposed by Aiki and Muntean in [2]. The model consists in a system of two weakly coupled parabolic equations in a varying domain whose length is governed by an ordinary differential equation. The numerical scheme is obtained by a Euler discretisation in time and a Scharfetter-Gummel discretisation in space. We establish the convergence of the scheme. As a by-product, we obtain existence of a solution to the model. Finally, some numerical experiments show the efficiency of the scheme.

1. Univ. Lille, CNRS, UMR 8524, Inria - Laboratoire Paul Painlevé, F-59000 Lille.
E-mail: claire.chainais@univ-lille.fr, benoit.merlet@univ-lille.fr

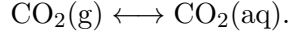
Sommaire

1.1	Introduction	29
1.2	Numerical scheme and main results	31
1.2.1	The drift-diffusion model on a fixed domain	31
1.2.2	Definition of the numerical scheme	33
1.2.3	Main results and outline of the chapter	34
1.3	Proof of Theorem 1.2.1	36
1.4	Estimates on the approximate solutions	39
1.4.1	Functional spaces and discrete norms	39
1.4.2	Discrete $L^2(0, T; H^1(0, 1))$ estimates	40
1.4.3	Discrete $H^1(0, T; H^*)$ estimates	43
1.5	Proof of Theorem 1.2.2	46
1.5.1	Compactness results	46
1.5.2	Convergence of the traces	47
1.5.3	Passage to the limit	47
1.6	Numerical experiments	51

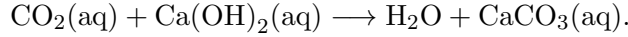
1.1 Introduction

The carbonation phenomenon in reinforced concrete (a material widely used in civil engineering for the construction of buildings, factories, bridges, roads, etc) is a physico-chemical reaction which is the main cause of concrete structure degradation. There exists a wide literature on the modeling of this reaction, see [50, 54, 55, 56] and all references therein.

From a physical point of view the carbonation process can be explained as follows: CO_2 from the atmosphere enters in the concrete via the unsaturated porous media matrix where it is quickly transformed in CO_2 in the aqueous phase. This reaction can be described by



Then, the $\text{CO}_2(\text{aq})$ is transported in the concrete and the carbonation reaction writes



This reaction facilitates a drop of the pH inside the material and allows the corrosion process to damage the metallic reinforcement bars. These damages deteriorate the concrete and reduce the durability of the structure.

From a mathematical point of view, one of the main source of interest for this problem is the existence of a moving domain (like for instance in the corrosion theory, see [13]). Indeed, the carbonation process produces a moving interface (front position in one dimension) which splits the concrete in two regions: the carbonated one, which grows in time, and the uncarbonated one. In this work we consider a free-boundary system proposed by Aiki and Muntean in [2] where the varying space domain represents the carbonated zone. The unknowns u and v represent the mass concentration of CO_2 respectively in aqueous (u) and gaseous (v) phase and s represents the penetration depth which measures the size of the carbonated zone. We denote the carbonated domain $Q_s(T)$ defined by

$$Q_s(T) = \{(t, y) : 0 < t < T < +\infty, 0 < y < s(t)\}.$$

Then, the system considered by Aiki and Muntean writes:

$$\partial_t u - \partial_y(\kappa_u \partial_y u) = f(u, v) \quad \text{in} \quad Q_s(T), \quad (1.1a)$$

$$\partial_t v - \partial_y(\kappa_v \partial_y v) = -f(u, v) \quad \text{in} \quad Q_s(T), \quad (1.1b)$$

$$s'(t) = \psi(u(s(t), t)) \quad \text{for} \quad 0 < t < T, \quad (1.1c)$$

$$u(0, t) = g(t) \quad \text{for} \quad 0 < t < T, \quad (1.1d)$$

$$v(0, t) = r(t) \quad \text{for} \quad 0 < t < T, \quad (1.1e)$$

$$-\kappa_u \partial_y u(s(t), t) - s'(t)u(s(t), t) = \psi(u(s(t), t)) \quad \text{for} \quad 0 < t < T, \quad (1.1f)$$

$$-\kappa_v \partial_y v(s(t), t) - s'(t)v(s(t), t) = 0 \quad \text{for} \quad 0 < t < T, \quad (1.1g)$$

$$u(y, 0) = u_0(y) \quad \text{for} \quad 0 < y < s(0), \quad (1.1h)$$

$$v(y, 0) = v_0(y) \quad \text{for} \quad 0 < y < s(0), \quad (1.1i)$$

$$s(0) = s_0. \quad (1.1j)$$

Existence and uniqueness of a global solution to (1.1) are established in [2]. As in the theoretical analysis, we consider that the following assumptions are satisfied:

(H1-1) $\psi : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ represents the kinetics of the carbonation reaction and is defined by $\psi(x) = \alpha x$ with $\alpha > 0$,

(H1-2) $f : \mathbb{R}^2 \longrightarrow \mathbb{R}$ is given by the Henry's law and is defined by $f(u, v) = \beta(\gamma v - u)$ with β and γ two real constants,

(H1-3) g and r belong to $H^1(0, T)$,

(H1-4) u_0 and v_0 belong to $L^\infty([0, s_0])$,

(H1-5) the diffusive coefficients κ_u and κ_v are two positive constants,

(H1-6) $s_0 > 0$,

(H1-7) there exist two positive constants g^* and r^* with $g^* = \gamma r^*$ such that

$$0 \leq g \leq g^*, \quad 0 \leq r \leq r^* \quad \text{on} \quad [0, +\infty),$$

and

$$0 \leq u_0 \leq g^*, \quad 0 \leq v_0 \leq r^* \quad \text{on} \quad [0, s_0].$$

Remark 1.1.1. In [2], the authors consider, for the kinetics of the reaction, $\psi(x) = \alpha(x^+)^p$ where $x^+ = \max(x, 0)$ and with $p \geq 1$. As we will see later, the positive part is not necessary in the definition of ψ due to the nonnegativity of u . We note that it is also possible to consider a nonlinear source term f , corresponding to a nonlinear Henry's law as in [5]. However, in this work we focus on the numerical analysis of a finite volume scheme for (1.1) in the linear case: $p = 1$ and with a linear f . The main difficulty is due to the coupling between the reaction-diffusion equations and the ordinary differential equation governing the evolution of the domain. The techniques we develop could be adapted to the nonlinear case.

There exist few convergence results for numerical schemes dedicated to carbonation models. In [53], Muntean develop a semi-discrete finite element scheme in space for a more complex model than (1.1) written on a varying space domain. He proves that the semi-discrete scheme converges with an order one. In [64], the authors show the convergence of a numerical scheme obtained by a semi-implicit discretisation in time and a mixed finite element method in space for a concrete carbonation model on a fixed space domain. We also refer to [57] where the authors prove the convergence of a Galerkin method for a class of multiscale reaction-diffusion systems, still defined on a fixed space domain. Finally in [76], the author defines a finite volume scheme which approximate the solutions of a nonlinear parabolic system modeling the carbonation process in a porous concrete material occupying a fixed space domain.

In this chapter, we propose a numerical scheme obtained by a Euler discretisation in time

and a finite volume discretisation in space. Our purpose is to study the convergence of the scheme towards the weak solution of (1.1). As it is usual in the finite volume framework, the convergence proof is based on some energy estimates, see Proposition 1.4.1 and Proposition 1.4.2, which yield the compactness of the sequence of approximate solutions. However, even if the method is classical, the originality of the proof is due to the coupling between the two partial differential equations (1.1a) and (1.1b) and the ordinary differential equation (1.1c) which governs the growth of the domain.

The chapter is organized as follows. In Section 1.2, we first rewrite the system (1.1) on a fixed domain and we introduce the numerical scheme. Then, we state the main results: Theorem 1.2.1 gives the existence and the uniqueness of the solution to the scheme, while Theorem 1.2.2 gives the convergence result. Section 1.3 is devoted to the proof of Theorem 1.2.1. Then, in Section 1.4, we establish some energy inequalities satisfied by the approximate solutions. The proof of Theorem 1.2.2 is given in Section 1.5. Finally, in Section 1.6 we discuss some numerical experiments. We show some profiles and illustrate the convergence of the scheme. Moreover, we investigate the long time behavior of the scheme: the penetration depth follows a $\sqrt{t}$ -law of propagation, which fits experimental observations and which has been established in [3, 4].

1.2 Numerical scheme and main results

1.2.1 The drift-diffusion model on a fixed domain

For numerical reasons and in order to define easily the notion of weak solution for (1.1), it is convenient to rewrite (1.1) on a fixed space domain. To this end, we follow the ideas of [13, 53] and we consider the following change of variables

$$\begin{aligned} \cup_{0 \leq t \leq T} [0, s(t)] \times \{t\} &\rightarrow [0, 1] \times [0, T], \\ (y, t) &\mapsto \left(x(y, t) = \frac{y}{s(t)}, t \right). \end{aligned}$$

We associate to every function w defined on $\cup_{0 \leq t \leq T} [0, s(t)] \times \{t\}$ a function $\bar{w}$ defined on $Q(T) = [0, 1] \times [0, T]$ by the relation

$$w(y, t) = \bar{w}(x(y, t), t).$$

Let us consider

$$J_u = -\kappa_u \partial_y u \quad \text{and} \quad J_{\bar{u}} = -\kappa_u \partial_x \bar{u}.$$

The diffusion-reaction equation $\partial_t u + \partial_y J_u = f(u, v)$ becomes

$$\frac{1}{s(t)} \partial_t (s(t) \bar{u}) - \frac{s'(t)}{s(t)} \partial_x (x \bar{u}) + \frac{1}{s^2(t)} \partial_x J_{\bar{u}} = f(\bar{u}, \bar{v}). \quad (1.2)$$

Multiplying (1.2) by $s^2(t)$, we obtain the following convection-diffusion-reaction equation

$$s(t) \partial_t (s(t) \bar{u}) + \partial_x \bar{J}_{\bar{u}} = s^2(t) f(\bar{u}, \bar{v}),$$

with $\bar{J}_{\bar{u}} = -\kappa_u \partial_x \bar{u} - s(t)s'(t)x\bar{u}$. We use the same technique for the equation (1.1b). If we drop the bars, the system (1.1) rewrites as

$$s(t)\partial_t(s(t)u) + \partial_x J_u = s^2(t)f(u, v) \quad \text{in } Q(T), \quad (1.3a)$$

$$s(t)\partial_t(s(t)v) + \partial_x J_v = -s^2(t)f(u, v) \quad \text{in } Q(T), \quad (1.3b)$$

$$s'(t) = \psi(u(1, t)) \quad \text{for } 0 < t < T, \quad (1.3c)$$

$$u(0, t) = g(t) \quad \text{for } 0 < t < T, \quad (1.3d)$$

$$v(0, t) = r(t) \quad \text{for } 0 < t < T, \quad (1.3e)$$

$$J_u(1, t) = s(t)\psi(u(1, t)) \quad \text{for } 0 < t < T, \quad (1.3f)$$

$$J_v(1, t) = 0 \quad \text{for } 0 < t < T, \quad (1.3g)$$

$$u(x, 0) = u_0(s_0x) \quad \text{for } 0 < x < 1, \quad (1.3h)$$

$$v(x, 0) = v_0(s_0x) \quad \text{for } 0 < x < 1, \quad (1.3i)$$

$$s(0) = s_0. \quad (1.3j)$$

The general convection-diffusion fluxes write

$$J_w = -\kappa_w \partial_x w - s(t)s'(t)xw,$$

where w refers to either u or v . We also use this notation $w = u$ or v without further mention in the sequel. Let us now define the notion of weak solution of (1.3). We consider the functional space $H = \{z \in H^1(0, 1) : z(0) = 0\}$, endowed with the $H^1(0, 1)$ norm.

Assuming (H1-1)-(H1-7), we say that (s, u, v) is a weak solution of (1.3) if the following conditions (S1)-(S5) are satisfied:

$$(S1) \ (u, v) \in (L^2(0, T; H^1(0, 1)) \cap L^\infty(Q(T)))^2,$$

$$(S2) \ u - g, v - r \in L^2(0, T; H),$$

$$(S3) \ s \in W^{1,\infty}(0, T), \ s(0) = s_0 \text{ and } s'(t) = \psi(u(1, t)) \text{ for almost every } t \text{ in } [0, T],$$

$$(S4) \ \text{for all } \phi \in \mathcal{C}_c^\infty([0, T] \times (0, 1])$$

$$\begin{aligned} & - \int_0^T \int_0^1 u(x, t) s(t) \partial_t(s(t)\phi(x, t)) dx dt - \int_0^1 u_0(s_0x) s_0^2 \phi(x, 0) dx \\ & + \int_0^T \int_0^1 \kappa_u \partial_x u(x, t) \partial_x \phi(x, t) dx dt + \int_0^T \int_0^1 s(t)s'(t)x u(x, t) \partial_x \phi(x, t) dx dt \\ & + \int_0^T s(t)\psi(u(1, t)) \phi(1, t) dt = \int_0^T \int_0^1 s^2(t)f(u(x, t), v(x, t)) \phi(x, t) dx dt, \end{aligned}$$

$$(S5) \ \text{for all } \phi \in \mathcal{C}_c^\infty([0, T] \times (0, 1])$$

$$\begin{aligned} & - \int_0^T \int_0^1 v(x, t) s(t) \partial_t(s(t)\phi(x, t)) dx dt - \int_0^1 v_0(s_0x) s_0^2 \phi(x, 0) dx \\ & + \int_0^T \int_0^1 \kappa_v \partial_x v(x, t) \partial_x \phi(x, t) dx dt + \int_0^T \int_0^1 s(t)s'(t)x v(x, t) \partial_x \phi(x, t) dx dt \\ & = - \int_0^T \int_0^1 s^2(t)f(u(x, t), v(x, t)) \phi(x, t) dx dt. \end{aligned}$$

1.2. Numerical scheme and main results

As already mentioned the existence and uniqueness of a weak solution to (1.3) has been proved in [2]. But, in this paper, Aiki and Muntean considered a different functional space for (S1). Indeed, they add the condition that $\partial_t u$ and $\partial_t v \in L^2(0, T; H^*)$ with H^* the dual space to H . Nevertheless, with the assumptions (H1-1)-(H1-7) and the conditions (S1)-(S5) we can prove that $\partial_t u$ and $\partial_t v$ are actually in $L^2(0, T; H^*)$. As a consequence, we deduce the equivalence of the two definitions of a weak solution to (1.3).

1.2.2 Definition of the numerical scheme

In order to write the finite volume scheme we introduce some notation related to the discretization of $[0, 1]$. A mesh $\mathcal{T}$, consists in a finite sequence of cells denoted by $(x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}})$, for $1 \leq i \leq l$, with

$$0 = x_{\frac{1}{2}} < x_{\frac{3}{2}} < \dots < x_{l-\frac{1}{2}} < x_{l+\frac{1}{2}} = 1.$$

We note $h_i = x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}$, for $1 \leq i \leq l$, the length of the i -th cell. The mesh size is defined as $h = \max\{h_i, 1 \leq i \leq l\}$. Moreover, for $1 \leq i \leq l$, we define x_i as the center of the cell $(x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}})$, $x_0 = x_{\frac{1}{2}}$ and $x_{l+1} = x_{l+\frac{1}{2}}$. We set

$$h_{i+\frac{1}{2}} = x_{i+1} - x_i, \quad \text{for } 0 \leq i \leq l.$$

We define a time step Δt and we assume that there exists an integer N_T such that $N_T \Delta t = T$ (we can define N_T as the integer part of $T/\Delta t$). We consider the sequence $(t_n)_{0 \leq n \leq N_T}$ with $t_n = n\Delta t$.

Then, for $1 \leq i \leq l$ and $0 \leq n \leq N_T - 1$, the scheme writes

$$s^{n+1} = s^n + \Delta t \psi(u_{l+1}^n), \quad (1.4a)$$

$$s^{n+1} h_i \frac{s^{n+1} v_i^{n+1} - s^n v_i^n}{\Delta t} + \left(G_{v, i+\frac{1}{2}}^{n+1} - G_{v, i-\frac{1}{2}}^{n+1} \right) = -(s^{n+1})^2 h_i \beta(\gamma v_i^{n+1} - u_i^n), \quad (1.4b)$$

$$s^{n+1} h_i \frac{s^{n+1} u_i^{n+1} - s^n u_i^n}{\Delta t} + \left(G_{u, i+\frac{1}{2}}^{n+1} - G_{u, i-\frac{1}{2}}^{n+1} \right) = (s^{n+1})^2 h_i \beta(\gamma v_i^{n+1} - u_i^{n+1}), \quad (1.4c)$$

Let us highlight that the time discretisation ensures a decoupling between (1.4a), (1.4b) and (1.4c). Indeed, knowing (s^n, v^n, u^n) , s^{n+1} , v^{n+1} and u^{n+1} are computed successively in an explicit manner.

The term $G_{w, i+\frac{1}{2}}^{n+1}$ is the numerical approximation of $J_w(x_{i+\frac{1}{2}}, t_{n+1})$. We choose to discretize simultaneously the diffusive part and the convective part of the fluxes J_w . More precisely, we consider the Scharfetter-Gummel fluxes introduced by Il'in in [43] and Scharfetter and Gummel in [68]. We set

$$C^{n+1} = s^{n+1} \frac{s^{n+1} - s^n}{\Delta t}, \quad (1.5a)$$

$$G_{w, i+\frac{1}{2}}^{n+1} = \kappa_w \frac{B\left(h_{i+\frac{1}{2}} \frac{C^{n+1}}{\kappa_w} x_{i+\frac{1}{2}}\right) w_i^{n+1} - B\left(-h_{i+\frac{1}{2}} \frac{C^{n+1}}{\kappa_w} x_{i+\frac{1}{2}}\right) w_{i+1}^{n+1}}{h_{i+\frac{1}{2}}}, \quad (1.5b)$$

where B is the Bernoulli function defined by

$$B(x) = \frac{x}{e^x - 1} \quad \text{for } x \neq 0, \quad B(0) = 1.$$

This choice of numerical fluxes is motivated by the fact that the Scharfetter-Gummel scheme exhibits a second order convergence rate in space, see [23, 48]. We supplement the numerical scheme with the discretization of the boundary conditions, for $0 \leq n \leq N_T - 1$,

$$v_0^n = r^n = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} r(t) dt, \quad u_0^n = g^n = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} g(t) dt, \quad (1.6a)$$

$$G_{v, l+\frac{1}{2}}^{n+1} = 0, \quad (1.6b)$$

$$G_{u, l+\frac{1}{2}}^{n+1} = s^{n+1} \psi(u_{l+1}^{n+1}), \quad (1.6c)$$

and of the initial conditions

$$s^0 = s_0, \quad (1.7a)$$

$$u_i^0 = \frac{1}{h_i} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} u_0(s_0 x) dx, \quad v_i^0 = \frac{1}{h_i} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} v_0(s_0 x) dx \quad \text{for } 1 \leq i \leq l, \quad (1.7b)$$

$$u_{l+1}^0 = u_0(s_0) \quad \text{and} \quad v_{l+1}^0 = v_0(s_0). \quad (1.7c)$$

We denote by (S_1) the scheme (1.4)-(1.7).

1.2.3 Main results and outline of the chapter

We first state the existence and uniqueness result of a solution to (S_1) . Moreover, as in the continuous case, we prove that the solutions of (S_1) fulfill lower and upper bounds.

Theorem 1.2.1. *Let the hypotheses (H1-1)-(H1-6) hold. Then, there exists a unique solution to the numerical scheme (S_1) . Furthermore, under the assumptions (H1-1)-(H1-7), we have for every $n \geq 0$ and $i \in \{0, \dots, l+1\}$*

$$0 \leq v_i^n \leq r^*, \quad 0 \leq u_i^n \leq g^*, \quad (1.8)$$

and

$$0 \leq \frac{s^{n+1} - s^n}{\Delta t} \leq \alpha g^*. \quad (1.9)$$

For $0 \leq n \leq N_T$, we deduce

$$0 < s^{n+1} \leq s^0 + n \Delta t \alpha g^* \leq s^0 + T \alpha g^*. \quad (1.10)$$

Remark 1.2.1. *We notice that the inequality (1.10) is far away from the $\sqrt{t}$ -behavior mentioned in the introduction. Nevertheless, the estimate (1.10) suffices for the convergence analysis of the scheme.*

1.2. Numerical scheme and main results

As it is usual for finite volume method (see [37]), we define some piecewise constant functions in space and time. For a given mesh $\mathcal{T}$ and a given time step Δt , we define

$$w_h^k = \sum_{i=1}^l w_i^k \mathbf{1}_{(x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}})} + w_0^k \mathbf{1}_{\{x=0\}} + w_{l+1}^k \mathbf{1}_{\{x=1\}}, \quad \text{for } 0 \leq k \leq N_T, \quad (1.11)$$

$$w_{h,\Delta t} = \sum_{k=0}^{N_T-1} w_h^{k+1} \mathbf{1}_{[t_k, t_{k+1})}. \quad (1.12)$$

For these functions we define a discrete derivative operator in space as

$$\partial_{x,\mathcal{T}} w_{h,\Delta t}(x, t) = \partial_{x,\mathcal{T}}^i w_{h,\Delta t} = \frac{w_{i+1}^{k+1} - w_i^{k+1}}{h_{i+\frac{1}{2}}}, \quad \text{for } (x, t) \in (x_i, x_{i+1}) \times (t_k, t_{k+1}).$$

We can also reconstruct a piecewise affine function $s_{\Delta t}$, for a given time step Δt , we set

$$s_{\Delta t} = \sum_{k=0}^{N_T-1} \left(s^{k+1} + (t - t_{k+1}) \frac{s^{k+1} - s^k}{\Delta t} \right) \mathbf{1}_{[t_k, t_{k+1})}. \quad (1.13)$$

The choice of this piecewise affine reconstruction for s_m will allow us to apply Ascoli's compactness theorem in the proof of the convergence of the scheme (see Theorem 1.2.2). Then, we consider a sequence of meshes and time steps $(\mathcal{T}_m, \Delta t_m)_m$ such that $h_m \rightarrow 0$ and $\Delta t_m \rightarrow 0$ as $m \rightarrow +\infty$. As a consequence of Theorem 1.2.1, we can define a sequence of solutions to (S_1) , denoted $(s_m, u_m, v_m)_m$ with $s_m = s_{\Delta t_m}$ and $w_m = w_{h_m, \Delta t_m}$. We establish the convergence of the sequence $(s_m, u_m, v_m)_m$, as stated in the following theorem.

Theorem 1.2.2. *Let us assume that the hypotheses (H1-1)-(H1-7) are satisfied. Then, the sequence $(s_m, u_m, v_m)_m$ converges to some (s, u, v) with $s \in W^{1,\infty}(0, T)$ and u or $v \in L^2(0, T; H^1(0, 1))$, with*

$$\begin{aligned} w_m &\rightharpoonup w \quad \text{in } L^2(0, T; L^2(0, 1)), \\ \partial_{x,\mathcal{T}_m} w_m &\rightharpoonup \partial_x w \quad \text{in } L^2(0, T; L^2(0, 1)), \\ s_m &\rightarrow s \quad \text{in } \mathcal{C}([0, T]), \\ s'_m &\overset{*}{\rightharpoonup} s' \quad \text{in } L^\infty(0, T), \end{aligned}$$

and (s, u, v) is the weak solution to (1.3).

We prove Theorem 1.2.1 in Section 1.3. The proof is based on some monotonicity properties of the numerical scheme. In Section 1.4, we establish $L^2(0, T; H^1(0, 1))$ and $H^1(0, T; H^*)$ discrete estimates for the approximate solutions. These estimates allow us to apply a discrete version of Aubin-Simon lemma, see [40], and we deduce some compactness properties of the sequence $(s_m, u_m, v_m)_m$. In Section 1.5, we pass to the limit in the scheme and we prove Theorem 1.2.2. The proof is based on some arguments developed in [14, 17]. Eventually, in Section 1.6, we present some numerical experiments. We draw profiles of u , v and s . Moreover, we investigate the question of the L^2 -convergence rate in space of the numerical scheme.

1.3 Proof of Theorem 1.2.1

In this Section, we prove Theorem 1.2.1. To this end, we proceed by induction on n and we follow some ideas developed in [13]. First, let us note that (s^0, u^0, v^0) is well defined and satisfies (1.8)-(1.10). We now assume that (1.8)-(1.10) is verified for (s^n, u^n, v^n) , for some $n \geq 0$. The inequalities (1.9) and (1.10) are straightforward consequences of the definition of s^{n+1} . Furthermore, as a by-product of the lower bound of (1.9), we observe that $C^{n+1} \geq 0$. We first notice, thanks to (1.6b) and the definition of B , that we can express v_{l+1}^{n+1} as

$$v_{l+1}^{n+1} = \exp\left(-h_{l+\frac{1}{2}} \frac{C^{n+1}}{\kappa_v}\right) v_l^{n+1}.$$

As already mentioned, the equations (1.4) are decoupled. We rewrite (1.4b) and (1.4c) as two independent linear systems

$$\mathbb{M}_v^n v^{n+1} = b_v^n \quad \text{and} \quad \mathbb{M}_u^n u^{n+1} = b_u^n,$$

where we consider that $u^{n+1} = (u_1^{n+1}, \dots, u_{l+1}^{n+1})^t$, $v^{n+1} = (v_1^{n+1}, \dots, v_l^{n+1})^t$ and $b_u^n \in \mathcal{M}_{l+1,1}(\mathbb{R})$, $b_v^n \in \mathcal{M}_{l,1}(\mathbb{R})$, $\mathbb{M}_u^n \in \mathcal{M}_{l+1}(\mathbb{R})$ and $\mathbb{M}_v^n \in \mathcal{M}_l(\mathbb{R})$. The matrices $\mathbb{M}_u^n$ and $\mathbb{M}_v^n$ are tridiagonal and defined by

$$\begin{aligned} (\mathbb{M}_v^n)_{i,i} &= h_i \frac{(s^{n+1})^2}{\Delta t} + h_i (s^{n+1})^2 \beta \gamma + \kappa_v \frac{B(h_{i+\frac{1}{2}} \frac{C^{n+1}}{\kappa_v} x_{i+\frac{1}{2}})}{h_{i+\frac{1}{2}}} \\ &\quad + \kappa_v \frac{B(-h_{i-\frac{1}{2}} \frac{C^{n+1}}{\kappa_v} x_{i-\frac{1}{2}})}{h_{i-\frac{1}{2}}}, \quad \text{for } 1 \leq i \leq l-1, \\ (\mathbb{M}_v^n)_{i,i+1} &= -\kappa_v \frac{B(-h_{i+\frac{1}{2}} \frac{C^{n+1}}{\kappa_v} x_{i+\frac{1}{2}})}{h_{i+\frac{1}{2}}}, \quad \text{for } 1 \leq i \leq l-1, \\ (\mathbb{M}_v^n)_{i,i-1} &= -\kappa_v \frac{B(h_{i-\frac{1}{2}} \frac{C^{n+1}}{\kappa_v} x_{i-\frac{1}{2}})}{h_{i-\frac{1}{2}}}, \quad \text{for } 2 \leq i \leq l, \\ (\mathbb{M}_v^n)_{l,l} &= h_l \frac{(s^{n+1})^2}{\Delta t} + h_l (s^{n+1})^2 \beta \gamma + \kappa_v \frac{B(-h_{l-\frac{1}{2}} \frac{C^{n+1}}{\kappa_v} x_{l-\frac{1}{2}})}{h_{l-\frac{1}{2}}}, \\ (\mathbb{M}_u^n)_{i,i} &= h_i \frac{(s^{n+1})^2}{\Delta t} + h_i (s^{n+1})^2 \beta + \kappa_u \frac{B(h_{i+\frac{1}{2}} \frac{C^{n+1}}{\kappa_u} x_{i+\frac{1}{2}})}{h_{i+\frac{1}{2}}} \\ &\quad + \kappa_u \frac{B(-h_{i-\frac{1}{2}} \frac{C^{n+1}}{\kappa_u} x_{i-\frac{1}{2}})}{h_{i-\frac{1}{2}}}, \quad \text{for } 1 \leq i \leq l, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(\mathbb{M}_u^n)_{i,i+1} &= -\kappa_u \frac{B(-h_{i+\frac{1}{2}} \frac{C^{n+1}}{\kappa_u} x_{i+\frac{1}{2}})}{h_{i+\frac{1}{2}}}, \quad \text{for } 1 \leq i \leq l, \\
(\mathbb{M}_u^n)_{i,i-1} &= -\kappa_u \frac{B(h_{i-\frac{1}{2}} \frac{C^{n+1}}{\kappa_u} x_{i-\frac{1}{2}})}{h_{i-\frac{1}{2}}}, \quad \text{for } 2 \leq i \leq l+1, \\
(\mathbb{M}_u^n)_{l+1,l+1} &= \kappa_u \frac{B(-h_{l+\frac{1}{2}} \frac{C^{n+1}}{\kappa_u} x_{l+\frac{1}{2}})}{h_{l+\frac{1}{2}}} + s^{n+1} \alpha.
\end{aligned}$$

The vectors b_u^n and b_v^n are defined by

$$\begin{aligned}
(b_v^n)_i &= h_i \frac{s^{n+1} s^n}{\Delta t} v_i^n + h_i (s^{n+1})^2 \beta u_i^n, \quad \forall 2 \leq i \leq l, \\
(b_v^n)_1 &= h_1 \frac{s^{n+1} s^n}{\Delta t} v_1^n + h_1 (s^{n+1})^2 \beta u_1^n + \kappa_v \frac{r^{n+1}}{h_{\frac{1}{2}}}, \\
(b_u^n)_i &= h_i \frac{s^{n+1} s^n}{\Delta t} u_i^n + h_i (s^{n+1})^2 \beta \gamma v_i^{n+1}, \quad \forall 2 \leq i \leq l, \\
(b_u^n)_1 &= h_1 \frac{s^{n+1} s^n}{\Delta t} u_1^n + h_1 (s^{n+1})^2 \beta \gamma v_1^{n+1} + \kappa_u \frac{g^{n+1}}{h_{\frac{1}{2}}}, \\
(b_u^n)_{l+1} &= 0.
\end{aligned}$$

The matrices $\mathbb{M}_u^n$ and $\mathbb{M}_v^n$ have positive diagonal terms and non-positive off-diagonal terms and are strictly diagonally dominant with respect to their columns. Therefore, $\mathbb{M}_u^n$ and $\mathbb{M}_v^n$ are M-matrices and thus invertible and monotone. We first deduce the existence and uniqueness of a solution to (S_1) . Moreover, as $b_u^n \geq 0$ and $b_v^n \geq 0$, we deduce, thanks to the induction hypothesis, that $u^{n+1} \geq 0$, $v^{n+1} \geq 0$ and by definition of v_{l+1}^{n+1} , we conclude that $v_{l+1}^{n+1} \geq 0$.

Let us prove now the upper bounds (1.8). We notice that the inequalities are true for $i = 0$ by construction of the scheme (S_1) . Now let $R^* \in \mathcal{M}_{l+1}(\mathbb{R})$ be the vector with all its components equal to r^* . Using the equality $B(x) - B(-x) = -x$, we obtain that, for $2 \leq i \leq l-1$,

$$\begin{aligned}
(\mathbb{M}_v^n R^*)_i &= r^* h_i \frac{(s^{n+1})^2}{\Delta t} + r^* h_i (s^{n+1})^2 \beta \gamma - r^* h_i s^{n+1} \frac{s^{n+1} - s^n}{\Delta t} \\
&= r^* h_i (s^{n+1})^2 \beta \gamma + r^* h_i \frac{s^{n+1} s^n}{\Delta t}.
\end{aligned}$$

Thanks to the induction hypothesis and to the identity $g^* = \gamma r^*$, it yields for $2 \leq i \leq l-1$

$$(\mathbb{M}_v^n (v^{n+1} - R^*))_i = h_i \frac{s^{n+1} s^n}{\Delta t} (v_i^n - r^*) + h_i (s^{n+1})^2 \beta (u_i^n - \gamma r^*) \leq 0.$$

Then, for $i = l$, we have

$$(\mathbb{M}_v^n R^*)_l = h_l \frac{(s^{n+1})^2}{\Delta t} r^* + h_l (s^{n+1})^2 \beta \gamma r^* + x_{l-\frac{1}{2}} s^{n+1} \frac{s^{n+1} - s^n}{\Delta t} r^*.$$

Hence

$$\begin{aligned} (\mathbb{M}_v^n(v^{n+1} - R^*))_l &= h_l \frac{s^{n+1} s^n}{\Delta t} v_l^n - h_l \frac{(s^{n+1})^2}{\Delta t} r^* \\ &\quad + h_l (s^{n+1})^2 \beta (u_i^n - \gamma r^*) - x_{l-\frac{1}{2}} s^{n+1} \frac{s^{n+1} - s^n}{\Delta t} r^*, \end{aligned}$$

which leads to

$$(\mathbb{M}_v^n(v^{n+1} - R^*))_l \leq h_l \frac{(s^{n+1})^2}{\Delta t} r^* - h_l \frac{(s^{n+1})^2}{\Delta t} r^* - x_{l-\frac{1}{2}} s^{n+1} \frac{(s^{n+1} - s^n)}{\Delta t} r^* \leq 0.$$

For $i = 1$, since $x_{\frac{3}{2}} = h_1$,

$$\begin{aligned} (\mathbb{M}_v^n R^*)_1 &= h_1 \frac{(s^{n+1})^2}{\Delta t} r^* + h_1 (s^{n+1})^2 \beta \gamma r^* - x_{\frac{3}{2}} s^{n+1} \frac{s^{n+1} - s^n}{\Delta t} r^* + \kappa_v \frac{r^*}{h_{\frac{1}{2}}}, \\ &= h_1 (s^{n+1})^2 \beta \gamma r^* + h_1 \frac{s^{n+1} s^n}{\Delta t} r^* + \kappa_v \frac{r^*}{h_{\frac{1}{2}}}. \end{aligned}$$

Thus, using the induction hypothesis, we obtain

$$\begin{aligned} (\mathbb{M}_v^n(v^{n+1} - R^*))_1 &= h_1 \frac{s^{n+1} s^n}{\Delta t} (v_1^n - r^*) + h_1 (s^{n+1})^2 \beta (u_1^n - \gamma r^*) \\ &\quad + \frac{\kappa_v}{h_{\frac{1}{2}}} (r^{n+1} - r^*) \leq 0. \end{aligned}$$

As $\mathbb{M}_v^n$ is an M-matrix we deduce that

$$v^{n+1} \leq r^*,$$

and $v_{l+1}^{n+1} \leq r^*$ follows from the definition of v_{l+1}^{n+1} .

Similarly, let $G^* \in \mathcal{M}_{l+1,1}(\mathbb{R})$ a constant vector of component g^* , we show that for $i \in \{1, \dots, l\}$

$$(\mathbb{M}_u^n(u^{n+1} - G^*))_i \leq 0.$$

Moreover

$$(\mathbb{M}_u^n G^*)_{l+1} = \alpha s^{n+1} g^* + s^{n+1} \frac{s^{n+1} - s^n}{\Delta t} g^* \geq 0,$$

and

$$(\mathbb{M}_u^n u^{n+1})_{l+1} = 0.$$

Eventually, $(\mathbb{M}_u^n(u^{n+1} - G^*))_{l+1} \leq 0$ and as $\mathbb{M}_u^n$ is an M-matrix we deduce the upper bounds of (1.8). This concludes the proof of Theorem 1.2.1.

1.4 Estimates on the approximate solutions

1.4.1 Functional spaces and discrete norms

For the proof of Theorem 1.2.2, we introduce some discrete functional spaces and norms.

Definition 1.4.1. Let $\mathcal{T}$ a mesh of size h and Δt a time step. We define the set $X_{\mathcal{T}}$ of piecewise constant functions in space by

$$X_{\mathcal{T}} = \{z_h : [0, 1] \longrightarrow \mathbb{R} : \exists (z_i)_{0 \leq i \leq l+1} \in \mathbb{R}^{l+2} \text{ and} \\ z_h(x) = \sum_{i=1}^l z_i \mathbf{1}_{(x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}})}(x) + z_0 \mathbf{1}_{\{x=0\}}(x) + z_{l+1} \mathbf{1}_{\{x=1\}}(x)\}.$$

We also define the set $X_{\mathcal{T}, \Delta t}$ of piecewise constant functions in space and time by

$$X_{\mathcal{T}, \Delta t} = \{z_{h, \Delta t} : [0, 1] \times [0, T] \longrightarrow \mathbb{R} : \exists (z_h^{k+1})_{0 \leq k \leq N_T-1} \in (X_{\mathcal{T}})^{N_T} \text{ and} \\ z_{h, \Delta t}(x, t) = \sum_{k=0}^{N_T-1} z_h^{k+1}(x) \mathbf{1}_{[t_k, t_{k+1})}(t)\}.$$

For $z_h \in X_{\mathcal{T}}$, we notice that if $\|\cdot\|_0$ denote the $L^2(0, 1)$ norm, then

$$\|z_h\|_0 = \left(\sum_{i=1}^l h_i |z_i|^2 \right)^{\frac{1}{2}}.$$

On $X_{\mathcal{T}}$ and $X_{\mathcal{T}, \Delta t}$ we define some norms which are the discrete version of the $H^1(0, 1)$, H^* , $L^2(0, T; L^2(0, 1))$, $L^2(0, T; H^1(0, 1))$ and $L^2(0, T; H^*)$ norms.

$$\begin{aligned} \|z_h\|_{1,2,\mathcal{T}} &= \left(\sum_{i=0}^l \frac{(z_{i+1} - z_i)^2}{h_{i+\frac{1}{2}}} + z_0^2 + z_{l+1}^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad \forall z_h \in X_{\mathcal{T}}, \\ \|z_h\|_{-1,2,\mathcal{T}} &= \sup \left\{ \int_0^1 z_h \eta_h : \eta_h \in X_{\mathcal{T}}, \eta_h(0) = 0, \|\eta_h\|_{1,2,\mathcal{T}} \leq 1 \right\}, \quad \forall z_h \in X_{\mathcal{T}}, \\ \|z_{h, \Delta t}\|_{0,0,\mathcal{T}} &= \left(\sum_{k=0}^{N_T-1} \Delta t \|z_h^{k+1}\|_0^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad \forall z_{h, \Delta t} \in X_{\mathcal{T}, \Delta t}, \\ \|z_{h, \Delta t}\|_{0,1,2,\mathcal{T}} &= \left(\sum_{k=0}^{N_T-1} \Delta t \|z_h^{k+1}\|_{1,2,\mathcal{T}}^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad \forall z_{h, \Delta t} \in X_{\mathcal{T}, \Delta t}, \\ \|z_{h, \Delta t}\|_{0,-1,2,\mathcal{T}} &= \left(\sum_{k=0}^{N_T-1} \Delta t \|z_h^{k+1}\|_{-1,2,\mathcal{T}}^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad \forall z_{h, \Delta t} \in X_{\mathcal{T}, \Delta t}. \end{aligned}$$

In [21] the authors have shown that, for all $z_h \in X_{\mathcal{T}}$,

$$(z_i)^2 \leq 2 \|z_h\|_{1,2,\mathcal{T}}^2, \quad \text{for } 1 \leq i \leq l.$$

As a by-product, we obtain the discrete Poincaré inequality, for all $z_h \in X_{\mathcal{T}}$

$$\|z_h\|_0 \leq \sqrt{2} \|z_h\|_{1,2,\mathcal{T}}. \quad (1.14)$$

1.4.2 Discrete $L^2(0, T; H^1(0, 1))$ estimates

In this section we prove $L^2(0, T; H^1(0, 1))$ discrete estimates for the solutions of (S_1) . Let Δt be a time step. Then, we introduce a piecewise constant reconstruction of the boundary condition

$$g_{\Delta t}(t) = \sum_{n=0}^{N_T-1} g^{n+1} \mathbf{1}_{[t_n, t_{n+1})}(t) \quad \text{and} \quad r_{\Delta t}(t) = \sum_{n=0}^{N_T-1} r^{n+1} \mathbf{1}_{[t_n, t_{n+1})}(t),$$

where, for $0 \leq n \leq N_T - 1$, the elements g^{n+1} and r^{n+1} are defined by (1.6a). For these functions we define a discrete seminorm, denoted $\|\cdot\|_{1,2,\Delta t}$, defined by

$$\|q_{\Delta t}\|_{1,2,\Delta t} = \left(\sum_{n=0}^{N_T-1} \frac{(q^{n+1} - q^n)^2}{\Delta t} \right)^{\frac{1}{2}},$$

for $q_{\Delta t} = g_{\Delta t}$ or $r_{\Delta t}$. As g and $r \in H^1(0, T)$, there exist $G, R < +\infty$, not depending on Δt , such that

$$\|g_{\Delta t}\|_{1,2,\Delta t} < G \quad \text{and} \quad \|r_{\Delta t}\|_{1,2,\Delta t} < R.$$

Proposition 1.4.1. *For a given Δt , a given mesh $\mathcal{T}$ and under the assumptions (H1-1)-(H1-7), there exists a positive constant C depending on s^0 , α , $\|g_{\Delta t}\|_{1,2,\Delta t}$, $\|r_{\Delta t}\|_{1,2,\Delta t}$, g^* , r^* , κ_w , β , γ and T and independent of h and Δt such that*

$$\|w_{h,\Delta t}\|_{0;1,2,\mathcal{T}} \leq C.$$

Proof. Let us show the result for $v_{h,\Delta t}$. We multiply (1.4b) by $\frac{\Delta t}{s^{n+1}s^n} (v_i^{n+1} - r^{n+1})$ and we sum over n and i , we obtain $E + F + G = 0$, with

$$\begin{aligned} E &= \sum_{n=0}^{N_T-1} \frac{\Delta t}{s^n} \sum_{i=1}^l h_i \frac{(s^{n+1}v_i^{n+1} - s^n v_i^n)}{\Delta t} (v_i^{n+1} - r^{n+1}), \\ F &= \sum_{n=0}^{N_T-1} \frac{\Delta t}{s^{n+1}s^n} \sum_{i=1}^l \left(G_{v,i+\frac{1}{2}}^{n+1} - G_{v,i-\frac{1}{2}}^{n+1} \right) (v_i^{n+1} - r^{n+1}), \\ G &= \sum_{n=0}^{N_T-1} \frac{\Delta t s^{n+1}}{s^n} \sum_{i=1}^l h_i \beta (\gamma v_i^{n+1} - u_i^n) (v_i^{n+1} - r^{n+1}). \end{aligned}$$

1.4. Estimates on the approximate solutions

We notice that we can rewrite E as $E = E_1 + E_2 + E_3$, with

$$\begin{aligned} E_1 &= \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=1}^l h_i \frac{(v_i^{n+1} - r^{n+1} - (v_i^n - r^n))}{\Delta t} (v_i^{n+1} - r^{n+1}), \\ E_2 &= \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=1}^l h_i \frac{(r^{n+1} - r^n)}{\Delta t} (v_i^{n+1} - r^{n+1}), \\ E_3 &= \sum_{n=0}^{N_T-1} \frac{\Delta t}{s^n} \sum_{i=1}^l h_i \frac{s^{n+1} - s^n}{\Delta t} v_i^{n+1} (v_i^{n+1} - r^{n+1}). \end{aligned}$$

For E_1 , we apply the formula $(a - b)a \geq (a^2 - b^2)/2$, to get a telescopic sum. Then, we obtain

$$E_1 \geq \sum_{i=1}^l \frac{h_i}{2} (v_i^{N_T} - r^{N_T})^2 - \sum_{i=1}^l \frac{h_i}{2} (v_i^0 - r^0)^2 \geq -\frac{1}{2} \|v_h^0 - r^0\|_0^2.$$

For E_2 , using the inequality $2ab \geq -a^2 - b^2$, we deduce

$$E_2 \geq -\frac{1}{2} \|r_{\Delta t}\|_{1,2,\Delta t}^2 - \frac{1}{2} \|v_{h,\Delta t} - r_{\Delta t}\|_{0;0,\mathcal{T}}^2.$$

Finally, applying the Cauchy-Schwarz inequality, we have for E_3

$$E_3 \geq - \sum_{n=0}^{N_T-1} \frac{\Delta t}{s^n} \frac{s^{n+1} - s^n}{\Delta t} \left(\sum_{i=1}^l h_i (v_i^{n+1})^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{i=1}^l h_i (v_i^{n+1} - r^{n+1})^2 \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Thus, from Theorem 1.2.1 and the Young inequality, we deduce that

$$E_3 \geq -\frac{\alpha g^*}{2 s^0} (\|v_{h,\Delta t}\|_{0;0,\mathcal{T}}^2 + \|v_{h,\Delta t} - r_{\Delta t}\|_{0;0,\mathcal{T}}^2).$$

Hence, we obtain

$$\begin{aligned} E \geq & -\frac{1}{2} \|v_h^0 - r^0\|_0^2 - \frac{1}{2} \|r_{\Delta t}\|_{1,2,\Delta t}^2 - \frac{(s^0 + \alpha g^*)}{2 s^0} \|v_{h,\Delta t} - r_{\Delta t}\|_{0;0,\mathcal{T}}^2 \\ & - \frac{\alpha g^*}{s^0} \|v_{h,\Delta t}\|_{0;0,\mathcal{T}}^2. \end{aligned} \quad (1.15)$$

For the term F , we use a discrete integration by parts

$$F = - \sum_{n=0}^{N_T-1} \frac{\Delta t}{s^{n+1} s^n} \sum_{i=0}^l G_{v,i+\frac{1}{2}}^{n+1} (v_{i+1}^{n+1} - v_i^{n+1}).$$

Following the ideas of [14], we recall the standard decomposition of the numerical fluxes:

$$G_{w,i+\frac{1}{2}}^{n+1} = -\kappa_w \frac{B^c\left(h_{i+\frac{1}{2}} \frac{C^{n+1}}{\kappa_w} x_{i+\frac{1}{2}}\right)}{h_{i+\frac{1}{2}}} (w_{i+1}^{n+1} - w_i^{n+1}) - C^{n+1} x_{i+\frac{1}{2}} \frac{(w_i^{n+1} + w_{i+1}^{n+1})}{2}, \quad (1.16)$$

with

$$B^c(x) = \frac{B(x) + B(-x)}{2} = \frac{x}{2} \coth\left(\frac{x}{2}\right).$$

Then, applying (1.16) to F , we have

$$F = \sum_{n=0}^{N_T-1} \frac{\Delta t}{s^{n+1} s^n} \left[\sum_{i=0}^l \kappa_v \frac{B^c\left(h_{i+\frac{1}{2}} \frac{C^{n+1}}{\kappa_v} x_{i+\frac{1}{2}}\right)}{h_{i+\frac{1}{2}}} (v_{i+1}^{n+1} - v_i^{n+1})^2 + \sum_{i=0}^l \frac{C^{n+1}}{2} x_{i+\frac{1}{2}} ((v_{i+1}^{n+1})^2 - (v_i^{n+1})^2) \right].$$

Using $B^c(x) \geq 1$ for all $x \in \mathbb{R}$ and reordering the terms, we obtain

$$F \geq \sum_{n=0}^{N_T-1} \frac{\Delta t}{s^{n+1} s^n} \sum_{i=0}^l \kappa_v \frac{(v_{i+1}^{n+1} - v_i^{n+1})^2}{h_{i+\frac{1}{2}}} + \sum_{n=0}^{N_T-1} \frac{\Delta t C^{n+1}}{2 s^{n+1} s^n} (v_{l+1}^{n+1})^2 - \sum_{n=0}^{N_T-1} \frac{\Delta t C^{n+1}}{2 s^{n+1} s^n} \sum_{i=1}^l h_i (v_i^{n+1})^2.$$

Thus, it yields that

$$F \geq \frac{\kappa_v}{(s^{N_T})^2} \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l \frac{(v_{i+1}^{n+1} - v_i^{n+1})^2}{h_{i+\frac{1}{2}}} - \frac{\alpha g^*}{2 s^0} \|v_{h,\Delta t}\|_{0;0,\mathcal{T}}^2. \quad (1.17)$$

Eventually, using the Cauchy-Schwarz and Young inequalities, we conclude that

$$G \geq -\frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N_T-1} \frac{\Delta t s^{n+1}}{s^n} \|v_h^{n+1} - r^{n+1}\|_0^2 - \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N_T-1} \frac{\Delta t s^{n+1}}{s^n} \|f(u_h^n, v_h^{n+1})\|_0^2.$$

Moreover, the Minkowski inequality and the L^∞ -bounds yield to

$$\|f(u_h^n, v_h^{n+1})\|_0 \leq \beta (\gamma r^* + g^*).$$

1.4. Estimates on the approximate solutions

We deduce, thanks to Theorem 1.2.1, that

$$G \geq -\frac{s^{N_T}}{2s^0} \|v_{h,\Delta t} - r_{\Delta t}\|_{0;0,\mathcal{T}}^2 - \frac{s^{N_T}}{2s^0} \beta^2 (\gamma r^* + g^*)^2 T. \quad (1.18)$$

Furthermore, as $E + F + G = 0$, we deduce from (1.15), (1.17) and (1.18) the existence of a constant C only depending on s_0 , α , $\|r_{\Delta t}\|_{1,2,\Delta t}$, g^* , r^* , κ_v , β , γ and T such that

$$\|v_{h,\Delta t}\|_{0;1,2,\mathcal{T}} \leq C.$$

Let us prove now the result for $u_{h,\Delta t}$. As previously, we multiply (1.4c) by $\frac{\Delta t}{s^{n+1}s^n} (u_i^{n+1} - g^{n+1})$ and we sum over n and i , so that we obtain similarly $E + F + G = 0$. The only difference with the previous case concerns the term F . Indeed, due to the boundary conditions, the discrete integration by parts yields to

$$F = \sum_{n=0}^{N_T-1} \frac{\Delta t}{s^{n+1}s^n} \left[\sum_{i=0}^l G_{u,i+\frac{1}{2}}^{n+1} (u_i^{n+1} - u_{i+1}^{n+1}) + G_{u,l+\frac{1}{2}}^{n+1} (u_{l+1}^{n+1} - g^{n+1}) \right].$$

Thus, we define

$$F_1 = \sum_{n=0}^{N_T-1} \frac{\Delta t}{s^{n+1}s^n} G_{u,l+\frac{1}{2}}^{n+1} (u_{l+1}^{n+1} - g^{n+1}).$$

Using the boundary condition (1.6c) and Theorem 1.2.1, we deduce that

$$F_1 = \sum_{n=0}^{N_T-1} \frac{\Delta t}{s^n} \alpha u_{l+1}^{n+1} (u_{l+1}^{n+1} - g^{n+1}) \geq -\frac{\alpha T (g^*)^2}{s_0}.$$

Then, applying the same techniques as before we conclude that there exists a positive constant C only depending on s^0 , α , $\|g_{\Delta t}\|_{1,2,\Delta t}$, g^* , r^* , κ_u , β , γ and T such that

$$\|u_{h,\Delta t}\|_{0;1,2,\mathcal{T}} \leq C.$$

□

1.4.3 Discrete $H^1(0, T; H^*)$ estimates

In order to show some compactness properties for the sequence of approximate solutions (s_m, u_m, v_m) , we want to apply a discrete version of Aubin-Simon lemma obtained in [40]. In this purpose, we need to establish discrete $L^2(0, T; H^*)$ -estimates for $\partial_{t,\Delta t} u_m$ and $\partial_{t,\Delta t} v_m$, where $\partial_{t,\Delta t}$ denotes the discrete derivative operator in time defined, for all $z_{h,\Delta t} \in X_{\mathcal{T},\Delta t}$, by

$$\partial_{t,\Delta t} z_{h,\Delta t}(x, t) = \partial_{t,\Delta t}^k z_{h,\Delta t} = \frac{(z_h^{k+1} - z_h^k)}{\Delta t}, \quad \text{for } t \in [t_k, t_{k+1}).$$

Proposition 1.4.2. *For a given Δt , a given mesh $\mathcal{T}$ and under the assumptions (H1-1)-(H1-7), there exists a positive constant C depending only on s^0 , α , g^* , r^* , κ_w , β , γ and T and independent of h and Δt such that*

$$\sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \|\partial_{t,\mathcal{T}}^n(w_{h,\Delta t})\|_{-1,2,\mathcal{T}}^2 \leq C.$$

Proof. As in the previous proof, we first show the result for $v_{h,\Delta t}$. Let $\eta_h \in X_{\mathcal{T}}$ such that $\eta_h(0) = 0$ and $\|\eta_h\|_{1,2,\mathcal{T}} \leq 1$. We first notice that

$$E = \int_0^1 \partial_{t,\mathcal{T}}^n(v_{h,\Delta t}) \eta_h dx = \sum_{i=1}^l h_i \frac{(v_i^{n+1} - v_i^n)}{\Delta t} \eta_i.$$

For a given n we multiply (1.4b) by $\frac{1}{s^{n+1}s^n} \eta_i$ and we sum over i , we obtain $E = F + G + H$, with

$$\begin{aligned} F &= -\frac{1}{s^n} \frac{(s^{n+1} - s^n)}{\Delta t} \sum_{i=1}^l h_i v_i^{n+1} \eta_i, \\ G &= -\frac{1}{s^{n+1}s^n} \sum_{i=1}^l \left(G_{v,i+\frac{1}{2}}^{n+1} - G_{v,i-\frac{1}{2}}^{n+1} \right) \eta_i, \\ H &= -\frac{s^{n+1}}{s^n} \sum_{i=1}^l h_i \beta (\gamma v_i^{n+1} - u_i^n) \eta_i. \end{aligned}$$

Using the Cauchy-Schwarz inequality, Theorem 1.2.1 and (1.14), we obtain

$$|F| \leq \frac{\alpha g^*}{s^0} \|v_h^{n+1}\|_0 \|\eta_h\|_0 \leq \frac{2\alpha g^*}{s^0} \|v_h^{n+1}\|_{1,2,\mathcal{T}} \|\eta_h\|_{1,2,\mathcal{T}}. \quad (1.19)$$

For G , we use a discrete integration by parts and apply (1.16), so that $G = G_1 + G_2$, with

$$\begin{aligned} G_1 &= -\frac{\kappa_v}{s^{n+1}s^n} \sum_{i=0}^l B^c \left(h_{i+\frac{1}{2}} \frac{C^{n+1}}{\kappa_v} x_{i+\frac{1}{2}} \right) \frac{(v_{i+1}^{n+1} - v_i^{n+1}) (\eta_{i+1} - \eta_i)}{h_{i+\frac{1}{2}}}, \\ G_2 &= -\frac{1}{2s^n} \frac{s^{n+1} - s^n}{\Delta t} \sum_{i=0}^l x_{i+\frac{1}{2}} (v_{i+1}^{n+1} + v_i^{n+1}) (\eta_{i+1} - \eta_i). \end{aligned}$$

Thanks to Theorem 1.2.1, the term C^{n+1} is bounded. Then, we observe that $B^c(h_{i+\frac{1}{2}} C^{n+1} x_{i+\frac{1}{2}} / \kappa_v)$ is also bounded for $0 \leq i \leq l$. We conclude, from Theorem 1.2.1 and the Cauchy-Schwarz inequality that

$$|G_1| \leq \frac{C \kappa_v}{(s^0)^2} \|v_h^{n+1}\|_{1,2,\mathcal{T}} \|\eta_h\|_{1,2,\mathcal{T}}.$$

1.4. Estimates on the approximate solutions

Applying Theorem 1.2.1, we obtain that

$$|G_2| \leq \frac{\alpha (g^*)^2}{s^0} \sum_{i=0}^l |\eta_{i+1} - \eta_i|.$$

Thus, the Cauchy-Schwarz inequality yields to

$$|G_2| \leq \frac{\alpha (g^*)^2}{s^0} \|\eta_h\|_{1,2,\mathcal{T}}.$$

Hence, we conclude that

$$|G| \leq \frac{C \kappa_v}{(s^0)^2} \|v_h^{n+1}\|_{1,2,\mathcal{T}} \|\eta_h\|_{1,2,\mathcal{T}} + \frac{\alpha (g^*)^2}{s^0} \|\eta_h\|_{1,2,\mathcal{T}}. \quad (1.20)$$

Using the Cauchy-Schwarz inequality, we have

$$|H| \leq \frac{s^{n+1}}{s^n} \|f(u_h^n, v_h^{n+1})\|_0 \|\eta_h\|_0.$$

Eventually, the L^∞ -estimates and (1.14) provide

$$|H| \leq \sqrt{2} \frac{s^{N_T}}{s^0} \beta (\gamma r^* + g^*) \|\eta_h\|_{1,2,\mathcal{T}}. \quad (1.21)$$

Then, from (1.19), (1.20) and (1.21), we deduce:

$$|E| \leq \left(\frac{2\alpha s^0 g^* + C \kappa_v}{(s^0)^2} \|v_h^{n+1}\|_{1,2,\mathcal{T}} + \frac{\alpha (g^*)^2}{s^0} + \sqrt{2} \frac{s^{N_T}}{s^0} \beta (\gamma r^* + g^*) \right) \|\eta_h\|_{1,2,\mathcal{T}}.$$

There exists a constant C depending on s^0 , α , g^* , r^* , κ_v , β , γ and T such that

$$\|\partial_{t,\mathcal{T}}^n(v_{h,\Delta t})\|_{-1,2,\mathcal{T}} \leq C (\|v_h^{n+1}\|_{1,2,\mathcal{T}} + 1).$$

Finally, we multiply by Δt , we sum over n and we get

$$\sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \|\partial_{t,\mathcal{T}}^n(v_{h,\Delta t})\|_{-1,2,\mathcal{T}}^2 \leq C (\|v_{h,\Delta t}\|_{0;1,2,\mathcal{T}}^2 + T).$$

Proposition 1.4.1 provides the existence of a positive constant C independent of h and Δt such that

$$\sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \|\partial_{t,\mathcal{T}}^n(v_{h,\Delta t})\|_{-1,2,\mathcal{T}}^2 \leq C.$$

Let us prove now the result for $u_{h,\Delta t}$. Let $\eta_h \in X_{\mathcal{T}}$ such that $\eta_h(0) = 0$ and $\|\eta_h\|_{1,2,\mathcal{T}} \leq 1$. For a given n we multiply (1.4c) by $\frac{1}{s^{n+1}s^n} \eta_i$ and we sum over i , we obtain $E = F + G + H$.

As in the proof of Proposition 1.4.1, the only difference concerns the term G . Then, after a discrete integration by parts to G , we have $G = G_1 + G_2$, with

$$G_1 = \frac{1}{s^{n+1}s^n} \sum_{i=0}^l G_{u,i+\frac{1}{2}}^{n+1} (\eta_{i+1} - \eta_i),$$

$$G_2 = \frac{1}{s^{n+1}s^n} G_{u,l+\frac{1}{2}}^{n+1} \eta_{l+1}.$$

Thanks to (1.6c) and Theorem 1.2.1, we deduce that

$$|G_2| \leq \frac{\alpha}{(s^0)^2} |u_{l+1}^{n+1} \eta_{l+1}| \leq \frac{\alpha}{(s^0)^2} \|u_h^{n+1}\|_{1,2,\mathcal{T}} \|\eta_h\|_{1,2,\mathcal{T}}.$$

Then, applying the same techniques as before we conclude that there exists a positive constant C depending only on s^0 , α , g^* , r^* , κ_u , β , γ and T and independent of h and Δt such that

$$\sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \|\partial_{t,\mathcal{T}}^n(u_{h,\Delta t})\|_{-1,2,\mathcal{T}}^2 \leq C.$$

□

1.5 Proof of Theorem 1.2.2

1.5.1 Compactness results

We now consider a sequence of meshes and time steps $(\mathcal{T}_m, \Delta t_m)_m$, such that $h_m \rightarrow 0$ and $\Delta t_m \rightarrow 0$ as $m \rightarrow +\infty$, and the associated sequence $(X_{\mathcal{T}_m})_m$. Let us notice that $(X_{\mathcal{T}_m})_m$ is a sequence of finite-dimensional subspaces of $L^2(0, 1)$. Furthermore, we can endow each $X_{\mathcal{T}_m}$ with the $\|\cdot\|_{1,2,\mathcal{T}_m}$ norm or with the $\|\cdot\|_{-1,2,\mathcal{T}_m}$ norm. These norms achieve the hypotheses of Gallouët-Latché lemma (lemma 3.1 in [40]). For a rigorous proof of this fact one can read Lemmas 2.1 and 2.2 in [22]. Eventually, for each m , we define (s_m, u_m, v_m) a sequence of solution to (S_1) with $s_m = s_{\Delta t_m}$ and $w_m = w_{h_m, \Delta t_m}$.

Proposition 1.5.1. *Under the assumptions (H1-1)-(H1-7), there exist $s \in W^{1,\infty}(0, T)$ and u and $v \in L^2(0, T; H^1(0, 1))$ such that, up to a subsequence, we have*

$$\begin{aligned} w_m &\longrightarrow w \quad \text{in } L^2(0, T; L^2(0, 1)), \\ \partial_{x,\mathcal{T}_m} w_m &\rightharpoonup \partial_x w \quad \text{in } L^2(0, T; L^2(0, 1)), \\ s_m &\longrightarrow s \quad \text{in } \mathcal{C}([0, T]), \\ s'_m &\overset{*}{\rightharpoonup} s' \quad \text{in } L^\infty(0, T). \end{aligned}$$

Proof. Thanks to Proposition 1.4.1 and Proposition 1.4.2, we apply a discrete version of Aubin-Simon lemma for the sequence $(w_m)_m$ (see Theorem 3.4 in [40]). We deduce the existence of a function $w \in L^2(0, T; L^2(0, 1))$ such that, up to a subsequence,

$$w_m \longrightarrow w \quad \text{in } L^2(0, T; L^2(0, 1)).$$

1.5. Proof of Theorem 1.2.2

Furthermore, Proposition 1.4.1 provides the existence of a function z which belongs to $L^2(0, T; L^2(0, 1))$ with, up to a subsequence,

$$\partial_{x, \tau_m} w_m \rightharpoonup z \quad \text{in} \quad L^2(0, T; L^2(0, 1)).$$

As a straightforward consequence, we have $\partial_x w = z$ and $w \in L^2(0, T; H^1(0, 1))$. For the sequence $(s_m)_m$, Theorem 1.2.1 and Ascoli theorem give the existence of a function $s \in \mathcal{C}([0, T])$ such that, up to a subsequence,

$$s_m \longrightarrow s \quad \text{in} \quad \mathcal{C}([0, T]).$$

Finally, using (1.9) of Theorem 1.2.1, we obtain the existence of $q \in L^\infty(0, T)$ with, up to a subsequence,

$$s'_m \xrightarrow{*} q \quad \text{in} \quad L^\infty(0, T).$$

Moreover, in the sense of distribution, $s' = q$. □

1.5.2 Convergence of the traces

In the next section we pass to the limit $h \rightarrow 0$ and $\Delta t \rightarrow 0$ in the scheme. Let us first consider the boundary terms. Let us define the trace $\delta z_{h, \Delta t}$, of $z_{h, \Delta t} \in X_{\mathcal{T}, \Delta t}$, by

$$\delta z_{h, \Delta t}(0, t) = z_0^{n+1} \quad \text{and} \quad \delta z_{h, \Delta t}(1, t) = z_{l+1}^{n+1}, \quad \text{for} \quad t \in [t_n, t_{n+1}).$$

Proposition 1.5.2. *The traces $\delta w_m(0, \cdot)$ and $\delta w_m(1, \cdot)$ converge, up to a subsequence, to $w(0, \cdot)$ and $w(1, \cdot)$ in $L^1(0, T)$ and in $L^2(0, T)$.*

Proof. See the proof of Proposition 3.4 and the proof of Corollary 3.1 in [22]. □

1.5.3 Passage to the limit

In order to conclude the proof of Theorem 1.2.2, it remains to show that (s, u, v) , obtained in Proposition 1.5.1 is a weak solution to (1.3). In order to prove that (s, u, v) satisfies (S3), (S4) and (S5), we follow some ideas developed in [14, 22]. For sake of simplicity, for a given mesh $\mathcal{T}$ and a given time step Δt , we define:

$$\begin{aligned} \check{s}_{\Delta t} &= \sum_{k=0}^{N_T-1} s^k \mathbf{1}_{[t_k, t_{k+1})} + s^{N_T} \mathbf{1}_{\{t=T\}}, \\ \bar{s}_{\Delta t} &= \sum_{k=0}^{N_T-1} s^{k+1} \mathbf{1}_{(t_k, t_{k+1}]} + s^0 \mathbf{1}_{\{t=0\}}, \\ \check{w}_{h, \Delta t} &= \sum_{k=0}^{N_T-1} w_h^k \mathbf{1}_{[t_k, t_{k+1})}, \end{aligned}$$

where, for $0 \leq k \leq N_T$, the term w_h^k is defined by (1.11). For a sequence of meshes and time steps $(\mathcal{T}_m, \Delta t_m)$ such that $h_m \rightarrow 0$ and $\Delta t_m \rightarrow 0$ as $m \rightarrow +\infty$, we notice that

$$\begin{aligned}\check{w}_m &\longrightarrow w \quad \text{in } L^2(0, T; L^2(0, 1)), \\ \partial_{x, \mathcal{T}_m} \check{w}_m &\rightharpoonup \partial_x w \quad \text{in } L^2(0, T; L^2(0, 1)), \\ \check{s}_m &\longrightarrow s \quad \text{in } L^\infty(0, T), \\ \bar{s}_m &\longrightarrow s \quad \text{in } L^\infty(0, T),\end{aligned}$$

where $\check{w}_m = \check{w}_{h_m, \Delta t_m}$, $\check{s}_m = \check{s}_{\Delta t_m}$ and $\bar{s}_m = \bar{s}_{\Delta t_m}$. Let $\phi \in \mathcal{D}([0, T] \times (0, 1])$, we define

$$\begin{aligned}A_{u,1}(m) &= - \int_0^T \int_0^1 \check{u}_m(x, t) \check{s}_m(t) s'_m(t) \phi(x, t) dx dt \\ &\quad - \int_0^T \int_0^1 u_m(x, t) \bar{s}_m^2(t) \partial_t(\phi(x, t)) dx dt \\ &\quad - \int_0^1 \check{u}_m(x, 0) s_m^2(0) \phi(x, 0) dx, \\ A_{u,2}(m) &= \int_0^T \int_0^1 \kappa_u \partial_{x, \mathcal{T}_m} u_m(x, t) \partial_x \phi(x, t) dx dt \\ &\quad + \int_0^T \int_0^1 s_m(t) s'_m(t) x u_m(x, t) \partial_x \phi(x, t) dx dt \\ &\quad + \int_0^T s_m(t) \psi(u_m(1, t)) \phi(1, t) dt, \\ A_{u,3}(m) &= - \int_0^T \int_0^1 s_m^2(t) f(u_m(x, t), v_m(x, t)) \phi(x, t) dx dt.\end{aligned}$$

We set

$$\varepsilon_m = A_{u,1}(m) + A_{u,2}(m) + A_{u,3}(m).$$

Then, thanks to Proposition 1.5.1 and Proposition 1.5.2, we deduce

$$\begin{aligned}\varepsilon_m \xrightarrow{m \rightarrow +\infty} & - \int_0^T \int_0^1 u(x, t) s(t) (s'(t) \phi(x, t) + s(t) \partial_t \phi(x, t)) dx dt \\ & - \int_0^1 u_0(x) s^2(0) \phi(x, 0) dx + \int_0^T \int_0^1 \kappa_u \partial_x u(x, t) \partial_x \phi(x, t) dx dt \\ & + \int_0^T \int_0^1 s(t) s'(t) x u(x, t) \partial_x \phi(x, t) dx dt + \int_0^T s(t) \psi(u(1, t)) \phi(1, t) dt \\ & - \int_0^T \int_0^1 s^2(t) f(u(x, t), v(x, t)) \phi(x, t) dx dt.\end{aligned}$$

In order to prove (S4), it remains to prove that $\varepsilon_m \rightarrow 0$ as $m \rightarrow +\infty$. For this, we multiply (1.4c) by $\Delta t_m \phi_i^n$, where $\phi_i^n = \phi(x_i, t_n)$, and we sum over i and n . We get

$$A'_{u,1}(m) + A'_{u,2}(m) + A'_{u,3}(m) = 0,$$

with

$$\begin{aligned} A'_{u,1}(m) &= \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t_m \sum_{i=1}^l h_i s^{n+1} \frac{(s^{n+1} u_i^{n+1} - s^n u_i^n)}{\Delta t_m} \phi_i^n, \\ A'_{u,2}(m) &= \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t_m \sum_{i=0}^l \left(G_{u,i+\frac{1}{2}}^{n+1} - G_{u,i-\frac{1}{2}}^{n+1} \right) \phi_i^n, \\ A'_{u,3}(m) &= - \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t_m \sum_{i=1}^l h_i (s^{n+1})^2 f(u_i^{n+1}, v_i^{n+1}) \phi_i^n. \end{aligned}$$

Applying the standard method used in [14, 22], we must show that for $j \in \{1, 2, 3\}$ we have

$$|A'_{u,j}(m) - A_{u,j}(m)| \xrightarrow{m \rightarrow +\infty} 0.$$

In our case, we notice that the only term which differ from [14, 22] is the term $|A'_{u,1} - A_{u,1}|$. For this reason, we only prove that $|A'_{u,1}(m) - A_{u,1}(m)| \rightarrow 0$ as $m \rightarrow +\infty$ in the sequel. For the other terms we refer to [14, 22]. By definition of $A_{u,1}(m)$, we have

$$\begin{aligned} A_{u,1}(m) &= - \sum_{n=0}^{N_T-1} \sum_{i=1}^l \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} u_i^n s^n \frac{(s^{n+1} - s^n)}{\Delta t_m} \phi(x, t) dx dt \\ &\quad - \sum_{n=0}^{N_T-1} \sum_{i=1}^l \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} u_i^{n+1} (s^{n+1})^2 \partial_t \phi(x, t) dx dt \\ &\quad - \sum_{i=1}^l \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} u_i^0 (s^0)^2 \phi(x, 0) dx. \end{aligned}$$

For $A'_{u,1}(m)$, using a discrete integration by parts we get

$$A'_{u,1}(m) = \sum_{n=0}^{N_T} \Delta t_m \sum_{i=1}^l \frac{h_i}{\Delta t_m} \left[(s^n)^2 u_i^n \phi_i^{n-1} - s^{n+1} s^n u_i^n \phi_i^n \right] - \sum_{i=1}^l h_i s^1 s^0 u_i^0 \phi_i^0.$$

Then, using $\phi_i^N = 0$ and inserting the term $(-s^n \phi_i^n + s^n \phi_i^n)$ we obtain

$$\begin{aligned} A'_{u,1}(m) &= - \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t_m \sum_{i=1}^l h_i s^n u_i^n \frac{(s^{n+1} - s^n)}{\Delta t_m} \phi_i^n + \Delta t_m \sum_{i=1}^l h_i s^0 u_i^0 \frac{(s^1 - s^0)}{\Delta t_m} \phi_i^0 \\ &\quad - \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t_m \sum_{i=1}^l h_i (s^{n+1})^2 u_i^{n+1} \frac{(\phi_i^{n+1} - \phi_i^n)}{\Delta t_m} - \sum_{i=1}^l h_i s^1 s^0 u_i^0 \phi_i^0. \end{aligned}$$

Thus, we obtain $|A'_{u,1}(m) - A_{u,1}(m)| \leq E + F + G + H$, with

$$\begin{aligned} E &= \sum_{n=0}^{N_T-1} \sum_{i=1}^l \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} u_i^n s^n \frac{s^{n+1} - s^n}{\Delta t_m} |\phi(x, t) - \phi_i^n| dx dt, \\ F &= \sum_{n=0}^{N_T-1} \sum_{i=1}^l \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} (s^{n+1})^2 u_i^{n+1} \left| \partial_t \phi(x, t) - \frac{\phi_i^{n+1} - \phi_i^n}{\Delta t_m} \right| dx dt, \\ G &= \Delta t_m \sum_{i=1}^l \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} u_i^0 s^0 \frac{s^1 - s^0}{\Delta t_m} |\phi_i^0| dx, \\ H &= \sum_{i=1}^l \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} u_i^0 s^0 |s^0 \phi(x, 0) - s^1 \phi_i^0| dx. \end{aligned}$$

Therefore, thanks to the regularity of ϕ , the inequalities (1.8), (1.9) and (1.10) and the Cauchy-Schwarz inequality, we conclude that there exists a constant C only depending on s^0 , g^* , α and T such that

$$|A'_{u,1}(m) - A_{u,1}(m)| \leq C \|\phi\|_{C^2([0,T] \times [0,1])} (\Delta t_m + h_m) \xrightarrow{m \rightarrow +\infty} 0.$$

Then, we obtain that $\varepsilon_m \rightarrow 0$ as $m \rightarrow +\infty$ and (S4) is satisfied. Using the same method we may show that (s, u, v) verifies (S5).

For (S3), we consider $\varphi \in \mathcal{D}([0, T])$. Then, for all m , we have

$$\int_0^T s'_m(t) \varphi(t) dt = \int_0^T \psi(u_m(1, t)) \varphi(t) dt.$$

Thus, we deduce, from Theorem 1.2.2 and Proposition 1.5.2, that for all $\varphi \in \mathcal{D}([0, T])$

$$\int_0^T s'(t) \varphi(t) dt = \int_0^T \psi(u(1, t)) \varphi(t) dt.$$

Eventually, for almost every $t \in [0, T]$ we obtain $s'(t) = \psi(u(1, t))$. Moreover, from Theorem 1.2.2, we deduce that $s(0) = s_0$.

Finally for (S2) we show, for instance, that $u - g \in L^2(0, T; H)$. In this purpose, we prove that for almost every $t \in [0, T]$ we have $u(0, t) = g(t)$. Thanks to Proposition 1.5.2, we get

$$g_m(t) = u_m(0, t) \longrightarrow u(0, t).$$

Let $\varepsilon > 0$ and $t \in [t_n, t_{n+1})$. We have

$$|g_m(t) - g(t)| = \left| \frac{1}{\Delta t_m} \int_{t_n}^{t_{n+1}} (g(s) - g(t)) ds \right|.$$

As $g \in H^1(0, T) \subset \mathcal{C}([0, T])$, g is uniformly continuous. Therefore, for $|s - t| \leq \eta(\varepsilon) \leq \Delta t_m$, we obtain

$$|g_m(t) - g(t)| \leq \varepsilon.$$

We deduce from this inequality that $u - g \in L^2(0, T; H)$ and the same arguments show that $v - r \in L^2(0, T; H)$.

As already mentioned, we can show that u and v belong also to $H^1(0, T; H^*)$. Then, thanks to [2], we deduce the uniqueness of the weak solution (s, u, v) . We also deduce that the whole sequence $(s_m, u_m, v_m)_m$ converges to the weak solution of (1.3).

1.6 Numerical experiments

In this Section, we present some numerical experiments. The test case is described in Table 1.1. Moreover, we assume that $g(t) = 15$, $r(t) = 2.25$ for all $t \in [0, 1]$ and $u_0(x) = 1$,

κ_u	κ_v	s_0	α	γ	β
1	0.1	0.5	1	6.5	7.5

TABLE 1.1 – Definition of parameters used in the test case

$v_0(x) = 1$ for all $x \in [0, 1]$. We are interested in the computations of the profiles of u and v at different times, in the long time behavior of the penetration depth and also in the order of convergence of the scheme. We may compare the results given by the Scharfetter-Gummel scheme presented in the chapter and the upwind scheme corresponding to the B function defined by $B(x) = 1 + x^-$ with $x^- = \max(-x, 0)$ (see [23]).

Figure 1.1 shows the different profiles of v and u as functions of x where $x \in [0, s(t)]$ for $t \in \{20, 40, 60, 80, 100\}$. The results are obtained with 1000 cells and $\Delta t = 10^{-2}$. We observe profiles similar to those given in [4, 50].

In Figure 1.2, we illustrate the behaviour of s in linear scale on the left and in logarithmic scale on the right, up to time $T = 1000$. We observe that the penetration depth s follows a $\sqrt{t}$ -law of propagation (see [4, 50]). The results are obtained with 1000 cells and $\Delta t = 10^{-2}$. Let us mention that the upwind scheme gives the same results than the Scharfetter-Gummel scheme.

Since the exact solutions u and v of (1.3) are not explicitly known, we compute two reference solutions on a uniform mesh composed of 2560 cells and with $\Delta t = (1/2560)^2$ in the Scharfetter-Gummel case and $\Delta t = 1/2560$ in the upwind case, in order to investigate the question of the convergence rate in space for (S_1) . We impose this condition on Δt because the Euler discretisation in time exhibits a first order convergence rate while we expect a second order convergence rate in space for the Scharfetter-Gummel scheme and a first order for the upwind scheme. Then, we compute approximate solutions on a uniform mesh made of respectively 10, 20, 40, 80, 160, 320, 640 and 1280 cells. Finally,

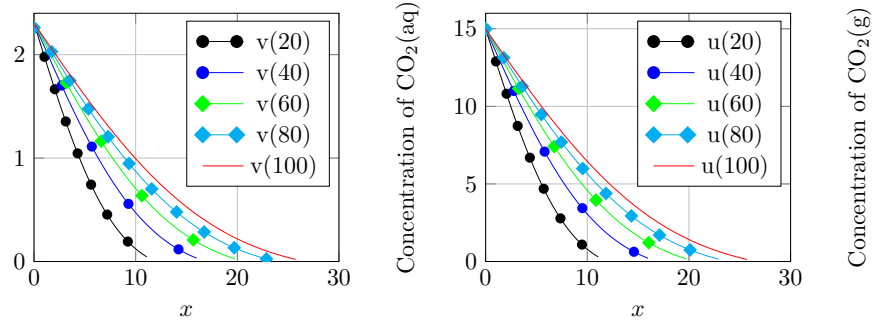


FIGURE 1.1 – Profiles of v (on the left) and u (on the right) at different times. The solutions are plotted on $[0, s(t)]$.

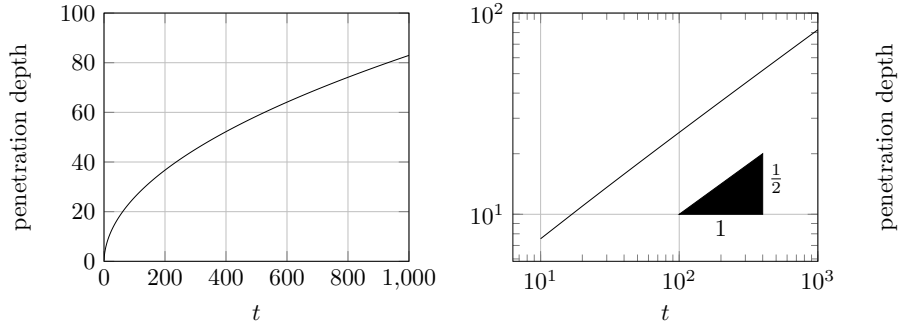


FIGURE 1.2 – Behavior of s in linear scale (on the left) and in logarithmic scale (on the right) for $T = 1000$.

we compute the L^2 -norm of the difference between the approximate solution and the average of the reference solution at different final times: $T = 0.1, 1$ and 5 . The results are shown on Figure 1.3 for the Scharfetter-Gummel scheme and on Figure 1.4 for the upwind scheme. As expected (see [48]), the Scharfetter-Gummel scheme converges with an order around 2, while the upwind scheme converges with an order around 1.

1.6. Numerical experiments

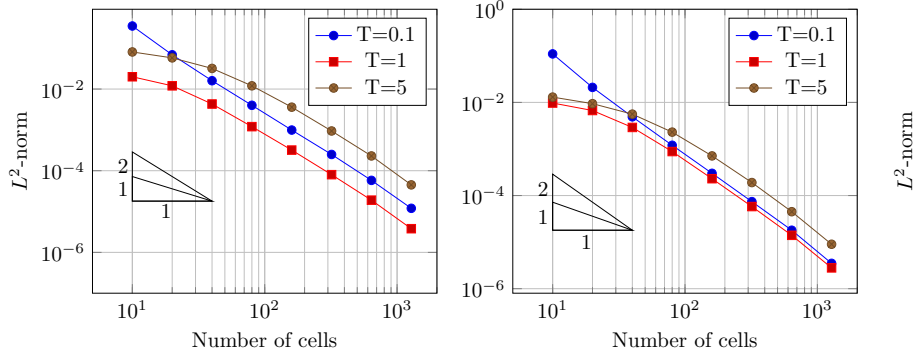


FIGURE 1.3 – L^2 -norm of the error for u (on the left) and v (on the right) in space at different final times with the Scharfetter-Gummel fluxes.

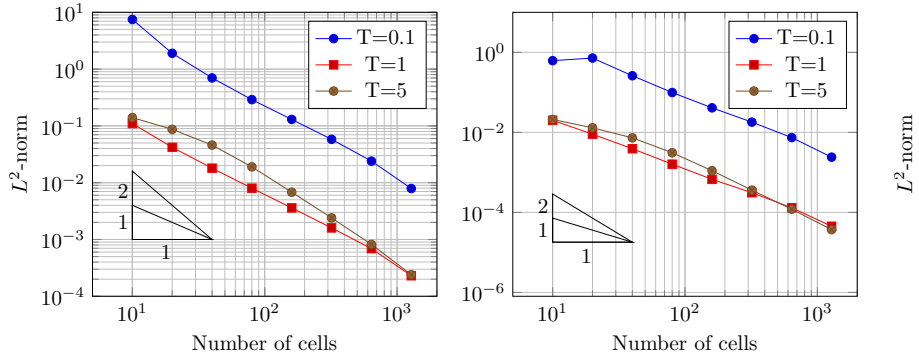


FIGURE 1.4 – L^2 -norm of the error for u (on the left) and v (on the right) in space at different final times with the upwind fluxes.

Chapitre 2

Comportement en temps long d'un schéma volumes finis pour un modèle de carbonatation des bétons armés

Ce chapitre est publié dans *Numerical Methods for Partial Differential Equations* [77].

In this chapter, we are interested in the long time behavior of approximate solutions to a free boundary model which appears in the modeling of concrete carbonation [2]. In particular, we study the long time regime of the moving interface. The numerical solutions are obtained by an implicit in time and finite volume in space scheme. We show the existence of solutions to the scheme and, following [3, 4], we prove that the approximate free boundary increases in time following a $\sqrt{t}$ -law. Finally, we supplement the study through numerical experiments.

Sommaire

2.1	Introduction	57
2.2	Numerical scheme and main results	59
2.2.1	The fully implicit finite volume scheme	59
2.2.2	Main results	61
2.3	Existence of a solution to the scheme	61
2.4	Discrete $L^2(0, T; H^1(0, 1))$ estimate on the approximate solutions	63
2.5	The long time behavior of the approximate penetration depth	68
2.5.1	The lower bound	68
2.5.2	The upper bound	73
2.6	Numerical experiments	76
2.7	Appendix A. Property of the B function	77

2.1 Introduction

The carbonation phenomenon in reinforced concrete is a physico-chemical reaction which produces a moving interface inside the concrete. The carbonation process can be described as follows: CO_2 in gaseous phase which comes from the atmosphere is quickly transformed in CO_2 in aqueous phase. The transformation of $\text{CO}_2(\text{g})$ to $\text{CO}_2(\text{aq})$ leads to the carbonation reaction when $\text{CO}_2(\text{aq})$ reacts with $\text{Ca}(\text{OH})_2(\text{aq})$. This reaction produces a moving interface which splits the concrete in two parts: the carbonated one which grows in time and the uncarbonated one. We refer to [2, 3, 4, 56, 28] for more details on the concrete carbonation reaction.

In [2], Aiki and Muntean have proposed a free boundary system in one dimension in space modeling concrete carbonation. This model consists in a system of two weakly coupled reaction-diffusion equations in a varying domain, the carbonated zone, whose length is governed by an ordinary differential equation. In this model, the unknowns u and v represent the mass concentration of CO_2 respectively in aqueous and gaseous phase and s represents the penetration depth which measures the size of the carbonated zone. Let us mention that this system is derived from [56]. In this chapter, we consider the numerical approximation of the model proposed in [2]. As mentioned above, this system is defined on a varying domain. For numerical reasons, it is convenient to rewrite this model on a fixed domain. To this end, we use a change of variables [28]. Then, in the new coordinate system we consider

$$Q(T) = \{(t, x) : 0 < x < 1, 0 < t < T\}.$$

So that, we can rewrite the model in [2] as a convection-diffusion-reaction system defined by:

$$s(t)\partial_t(s(t)u) + \partial_x J_u = s^2(t)f(u, v) \quad \text{in } Q(T), \quad (2.1a)$$

$$s(t)\partial_t(s(t)v) + \partial_x J_v = -s^2(t)f(u, v) \quad \text{in } Q(T), \quad (2.1b)$$

$$s'(t) = \psi(u(1, t)) \quad \text{for } 0 < t < T, \quad (2.1c)$$

$$u(0, t) = g(t) \quad \text{for } 0 < t < T, \quad (2.1d)$$

$$v(0, t) = r(t) \quad \text{for } 0 < t < T, \quad (2.1e)$$

$$J_u(1, t) = s(t)\psi(u(1, t)) \quad \text{for } 0 < t < T, \quad (2.1f)$$

$$J_v(1, t) = 0 \quad \text{for } 0 < t < T, \quad (2.1g)$$

$$u(x, 0) = u_0(s_0x) \quad \text{for } 0 < x < 1, \quad (2.1h)$$

$$v(x, 0) = v_0(s_0x) \quad \text{for } 0 < x < 1, \quad (2.1i)$$

$$s(0) = s_0. \quad (2.1j)$$

The general convection-diffusion fluxes are defined by

$$J_w = -\kappa_w \partial_x w - s(t)s'(t)xw,$$

where $w = u$ or v . We refer to [2], where existence and uniqueness of a global solution to (2.1) are established. As in the theoretical analysis, we suppose that the following assumptions are satisfied:

Chapitre 2. Comportement en temps long d'un schéma VF

(H2-1) $\psi : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ represents the kinetics of the reaction and is defined by $\psi(x) = \alpha x^p$ with $\alpha > 0$ and $p \geq 1$,

(H2-2) $f : \mathbb{R}^2 \longrightarrow \mathbb{R}$ is given by the Henry's law and is defined by $f(u, v) = \beta(\gamma v - u)$ with β and γ two positive constants,

(H2-3) g and r belong to $H^1(0, T)$,

(H2-4) u_0 and v_0 belong to $L^\infty([0, s_0])$,

(H2-5) the diffusive coefficients κ_u and κ_v are two positive constants,

(H2-6) $s_0 > 0$,

(H2-7) there exist g^* and r^* two positive constants with $g^* = \gamma r^*$ such that

$$\begin{aligned} 0 \leq g \leq g^* \quad \text{and} \quad 0 \leq r \leq r^* \quad \text{on} \quad [0, +\infty[, \\ 0 \leq u_0 \leq g^* \quad \text{and} \quad 0 \leq v_0 \leq r^* \quad \text{on} \quad [0, s_0]. \end{aligned}$$

In [3, 4], Aiki and Muntean show that the penetration depth s follows a $\sqrt{t}$ -law of propagation for constant Dirichlet boundary conditions. In this case, they prove the existence of two positive constants c and C independent of t such that

$$c\sqrt{t} \leq s(t) \leq C\sqrt{1+t}, \quad \forall t \geq 0. \quad (2.2)$$

They extend their result to the case of time dependent Dirichlet boundary conditions in [5]. We notice that there exists a wide literature in the continuous setting on the long time behavior of the free interface for Stefan like problem, see for instance [39, 41, 42, 72] and references therein. However, up to our knowledge, there exist no such results in the discrete setting.

In [28], we propose and show the convergence of a finite volume scheme for (2.1) and we observe that the approximate penetration depth follows a $\sqrt{t}$ -law of propagation. The aim of this chapter is to establish an inequality similar to (2.2). In [3, 4], the key idea is to prove an energy equality and then to deduce the $\sqrt{t}$ -bounds satisfied by s . In the discrete setting the main difficulty is to define a scheme which permits to adapt this proof. To this end, we need to modify the scheme proposed in [28] and we will consider in this chapter a fully implicit in time and finite volume in space scheme.

The chapter is organized as follows: Section 2.2 introduces the numerical scheme and states the main results. Theorem 2.2.1 gives the existence of a solution to the scheme and Theorem 2.2.2 gives the long time behavior of the approximate penetration depth. Section 2.3 is devoted to the proof of Theorem 2.2.1, while we establish in Section 2.4 a discrete $L^2(0, T; H^1(0, 1))$ estimate needed for the proof of Theorem 2.2.2. Theorem 2.2.2 is then proved in Section 2.5. We present some numerical results obtained with the scheme in Section 2.6. Finally, an Appendix gives a result required for the theoretical study of the scheme.

2.2 Numerical scheme and main results

2.2.1 The fully implicit finite volume scheme

In order to write a finite volume scheme we introduce notations related to the discretisation of $[0, 1] \times [0, T]$. A mesh $\mathcal{T}$, consists in a finite sequence of cells denoted $(x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}})$, for $1 \leq i \leq l$, with

$$0 = x_{\frac{1}{2}} < x_{\frac{3}{2}} < \dots < x_{l-\frac{1}{2}} < x_{l+\frac{1}{2}} = 1.$$

We note $h_i = x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}$, for $1 \leq i \leq l$, the length of the i -th cell. The mesh size is defined as $h = \max\{h_i, 1 \leq i \leq l\}$. Moreover, for $1 \leq i \leq l$, we define x_i as the center of the cell $(x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}})$, $x_0 = x_{\frac{1}{2}}$ and $x_{l+1} = x_{l+\frac{1}{2}}$. We set

$$h_{i+\frac{1}{2}} = x_{i+1} - x_i \quad \text{for } 0 \leq i \leq l.$$

For the discretisation of $[0, T]$, we define a time step Δt and an integer N_T such that $N_T \Delta t = T$. We consider the sequence $(t_n)_{0 \leq n \leq N_T}$ with $t_n = n \Delta t$.

Then, for $1 \leq i \leq l$ and $0 \leq n \leq N_T - 1$, the scheme writes

$$s^{n+1} = s^n + \Delta t \psi(u_{l+1}^{n+1}), \quad (2.3)$$

$$h_i s^{n+1} \frac{s^{n+1} u_i^{n+1} - s^n u_i^n}{\Delta t} + \left(\mathcal{F}_{u, i+\frac{1}{2}}^{n+1} - \mathcal{F}_{u, i-\frac{1}{2}}^{n+1} \right) = h_i (s^{n+1})^2 f(u_i^{n+1}, v_i^{n+1}), \quad (2.4)$$

$$h_i s^{n+1} \frac{s^{n+1} v_i^{n+1} - s^n v_i^n}{\Delta t} + \left(\mathcal{F}_{v, i+\frac{1}{2}}^{n+1} - \mathcal{F}_{v, i-\frac{1}{2}}^{n+1} \right) = -h_i (s^{n+1})^2 f(u_i^{n+1}, v_i^{n+1}). \quad (2.5)$$

It remains to define the numerical fluxes. We define

$$\sigma^{n+1} = s^{n+1} \frac{s^{n+1} - s^n}{\Delta t}, \quad (2.6)$$

we introduce the local numerical Péclet number

$$P_{w, i+\frac{1}{2}}^{n+1} = \frac{h_{i+\frac{1}{2}} \sigma^{n+1} x_{i+\frac{1}{2}}}{\kappa_w}, \quad \forall 0 \leq i \leq l, \quad (2.7)$$

and we define a generic numerical flux, that is:

$$\mathcal{F}_{w, i+\frac{1}{2}}^{n+1} = \kappa_w \frac{B \left(P_{w, i+\frac{1}{2}}^{n+1} \right) w_i^{n+1} - B \left(-P_{w, i+\frac{1}{2}}^{n+1} \right) w_{i+1}^{n+1}}{h_{i+\frac{1}{2}}}, \quad \forall 0 \leq i \leq l, \quad (2.8)$$

for $w = u$ or v . For B , we should consider the upwind fluxes $B(x) = B_{up}(x) = 1 + x^-$ with $x^- = \max(-x, 0)$ (see [23]) or the Scharfetter-Gummel fluxes $B(x) = B_{sg}(x) = x/(e^x - 1)$ with $B(0) = 1$ introduced by Il'in in [43] and Scharfetter and Gummel in [68]. We notice that in both cases the function B satisfies the following assumptions:

$$B \text{ is } L_B\text{-Lipschitz continuous on } \mathbb{R}, \quad (2.9a)$$

$$B(0) = 1 \text{ and } B(x) > 0, \quad \forall x \in \mathbb{R}, \quad (2.9b)$$

$$B(x) \leq 1, \quad \forall x \in \mathbb{R}^+, \quad (2.9c)$$

$$B(x) - B(-x) = -x, \quad \forall x \in \mathbb{R}. \quad (2.9d)$$

We supplement the numerical scheme with the discretization of the boundary conditions

$$v_0^n = r^n = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} r(t) dt, \quad u_0^n = g^n = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_n}^{t_{n+1}} g(t) dt, \quad (2.10)$$

for $0 \leq n \leq N_T$ and

$$\mathcal{F}_{v,l+\frac{1}{2}}^{n+1} = 0, \quad (2.11)$$

$$\mathcal{F}_{u,l+\frac{1}{2}}^{n+1} = s^{n+1} \psi(u_{l+1}^{n+1}). \quad (2.12)$$

Moreover, thanks to (2.3) and (2.6), we have for $0 \leq n \leq N_T$

$$\mathcal{F}_{u,l+\frac{1}{2}}^{n+1} = s^{n+1} \psi(u_{l+1}^{n+1}) = \sigma^{n+1}. \quad (2.13)$$

Finally, for the initial conditions we define for $1 \leq i \leq l$

$$s^0 = s_0, \quad (2.14)$$

$$w_i^0 = \frac{1}{h} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} w_0(s_0 x) dx \quad \text{and} \quad w_{l+1}^0 = w_0(s_0), \quad (2.15)$$

for $w = u$ or v . We denote by (S_2) the scheme (2.3)-(2.15).

Remark 2.2.1. *Let us notice that thanks to the hypothesis (2.9d) we have for $1 \leq i \leq l$ and $n \geq 0$ two decomposition formulae for the fluxes, either an upwind reformulation*

$$\mathcal{F}_{w,i+\frac{1}{2}}^{n+1} = -\kappa_w B \left(P_{w,i+\frac{1}{2}}^{n+1} \right) \frac{w_{i+1}^{n+1} - w_i^{n+1}}{h_{i+\frac{1}{2}}} - \sigma^{n+1} x_{i+\frac{1}{2}} w_{i+1}^{n+1}, \quad (2.16)$$

or a centered one

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{w,i+\frac{1}{2}}^{n+1} = & -\kappa_w B^c \left(P_{w,i+\frac{1}{2}}^{n+1} \right) \frac{w_{i+1}^{n+1} - w_i^{n+1}}{h_{i+\frac{1}{2}}} \\ & - \sigma^{n+1} x_{i+\frac{1}{2}} \frac{w_i^{n+1} + w_{i+1}^{n+1}}{2}, \end{aligned} \quad (2.17)$$

with

$$B^c(x) = \frac{B(x) + B(-x)}{2}, \quad \forall x \in \mathbb{R}. \quad (2.18)$$

2.2.2 Main results

First, we state the existence of a solution to the scheme (S_2) . Let us introduce for a given $\mathcal{T}$ the compact and convex set

$$\mathbb{K} = \left\{ (u, v) \in \mathbb{R}^{l+2} \times \mathbb{R}^{l+2} : 0 \leq u_i \leq g^*, 0 \leq v_i \leq r^*, \forall 0 \leq i \leq l+1 \right\}.$$

Theorem 2.2.1. *Under the assumptions (H2-1)-(H2-7) and (2.9) and for a given mesh $\mathcal{T}$ and a given Δt then (S_2) admits a solution (s^n, u^n, v^n) for all $0 \leq n \leq N_T$ such that*

$$(u^n, v^n) \in \mathbb{K} \quad \text{and} \quad s^n \geq s^0 > 0, \quad \forall 0 \leq n \leq N_T. \quad (2.19)$$

Moreover

$$0 \leq \frac{s^{n+1} - s^n}{\Delta t} \leq \alpha (g^*)^p, \quad \forall 0 \leq n \leq N_T - 1. \quad (2.20)$$

We prove Theorem 2.2.1 in Section 2.3. The proof is based on the Brouwer's fixed-point theorem.

As already said, our main result concerns the long time behavior of the approximate penetration depth. This result is given in Theorem 2.2.2.

Theorem 2.2.2. *For a given Δt , let the hypothesis (H2-1)-(H2-7) and (2.9) hold, assume that $g(t) = g^*$ and $r(t) = r^*$ for $t \in [0, +\infty)$ with $g^* + r^* < 1$. Then, there exist two positive constants c and C independent of Δt such that*

$$c\sqrt{T} \leq s^{N_T} \leq C\sqrt{T+1}. \quad (2.21)$$

We show Theorem 2.2.2 in Section 2.5. For the proof, we establish two energy inequalities, see Proposition 2.5.1 and Proposition 2.5.2. Then, we prove the lower and upper bound of (2.21).

2.3 Existence of a solution to the scheme

In this section, we prove Theorem 2.2.1. The proof of existence is done by induction on n and we follow some ideas developed in [16]. Let us note that the element s^0 is defined by (2.14) and the vectors u^0 and v^0 are defined by (2.15). Hypothesis (H2-7) ensures that u^0 and v^0 fulfill the condition (2.19).

We suppose that, for some $n \geq 0$, (s^n, u^n, v^n) is known and satisfies (2.19) and (2.20). We want to establish the existence of $(s^{n+1}, u^{n+1}, v^{n+1})$ solution to (S_2) satisfying (2.19) and (2.20). To this end, we introduce the application $T^n : \mathbb{K} \rightarrow \mathbb{R}^{l+2} \times \mathbb{R}^{l+2}$, such that $T^n(u, v) = (\hat{u}, \hat{v})$. The definition of T^n is based on the linear scheme proposed in [28] and defined in two steps.

— First, for $(u, v) \in \mathbb{K}$ we define the element

$$\hat{s} = s^n + \Delta t \alpha (u_{l+1})^p. \quad (2.22)$$

— Then, we define $(\hat{u}, \hat{v})$ as the solution to the following linear scheme

$$\begin{aligned} h_i \hat{s} \frac{\hat{s} \hat{v}_i - s^n v_i^n}{\Delta t} + \left(\hat{G}_{\hat{v}, i+\frac{1}{2}} - \hat{G}_{\hat{v}, i-\frac{1}{2}} \right) &= -h_i (\hat{s})^2 f(u_i, \hat{v}_i), \\ h_i \hat{s} \frac{\hat{s} \hat{u}_i - s^n u_i^n}{\Delta t} + \left(\hat{G}_{\hat{u}, i+\frac{1}{2}} - \hat{G}_{\hat{u}, i-\frac{1}{2}} \right) &= h_i (\hat{s})^2 f(\hat{u}_i, \hat{v}_i), \end{aligned}$$

for $1 \leq i \leq l$ and

$$\hat{G}_{\hat{v}, l+\frac{1}{2}} = 0, \quad \hat{G}_{\hat{u}, l+\frac{1}{2}} = \hat{s} \alpha \hat{u}_{l+1} (u_{l+1})^{p-1},$$

where

$$\hat{G}_{\hat{w}, i+\frac{1}{2}} = \kappa_w \frac{B\left(P_{w, i+\frac{1}{2}}\right) \hat{w}_i - B\left(P_{w, i+\frac{1}{2}}\right) \hat{w}_{i+1}}{h_{i+\frac{1}{2}}},$$

with

$$P_{w, i+\frac{1}{2}} = \frac{h_{i+\frac{1}{2}} x_{i+\frac{1}{2}}}{\kappa_w} \sigma,$$

and where

$$\sigma = \hat{s} \frac{\hat{s} - s^n}{\Delta t}.$$

We supplement this scheme by the boundary conditions

$$\hat{v}_0 = r^{n+1} \quad \text{and} \quad \hat{u}_0 = g^{n+1},$$

with r^{n+1} and g^{n+1} defined by (2.10).

We notice two important facts. First, the assumption (H2-7) ensures that $\hat{v}_0$ and $\hat{u}_0$ satisfy

$$0 \leq \hat{v}_0 \leq r^* \quad \text{and} \quad 0 \leq \hat{u}_0 \leq g^*.$$

Furthermore, since

$$0 \leq \frac{\hat{s} - s^n}{\Delta t} \leq \alpha (g^*)^p,$$

and using the boundary condition for $\hat{v}$ at $x = 1$ and the hypothesis (2.9), we rewrite $\hat{v}_{l+1}$ as

$$\hat{v}_{l+1} = \omega \hat{v}_l, \tag{2.23}$$

with ω a positive constant. Then, it suffices to study the two decoupled linear systems which can be written as

$$\mathbb{M}_{\hat{u}} \hat{U} = b_{\hat{u}} \quad \text{and} \quad \mathbb{M}_{\hat{v}} \hat{V} = b_{\hat{v}},$$

2.4. Discrete $L^2(0, T; H^1(0, 1))$ estimate on the approximate solutions

with $\hat{U} = (\hat{u}_1, \dots, \hat{u}_{l+1})^t$, $\hat{V} = (\hat{v}_1, \dots, \hat{v}_l)^t$, $\mathbb{M}_{\hat{u}} \in \mathcal{M}_{l+1}(\mathbb{R})$, $\mathbb{M}_{\hat{v}} \in \mathcal{M}_l(\mathbb{R})$, $b_{\hat{u}} \in \mathbb{R}^{l+1}$ and $b_{\hat{v}} \in \mathbb{R}^l$. The matrices $\mathbb{M}_{\hat{u}}$ and $\mathbb{M}_{\hat{v}}$ are tridiagonal. Moreover, $\mathbb{M}_{\hat{u}}$ and $\mathbb{M}_{\hat{v}}$ are M-matrices and thus invertible and monotone, see [28]. Since, $b_{\hat{u}} \geq 0$ and $b_{\hat{v}} \geq 0$, we deduce thanks to the induction hypothesis that $\hat{U} \geq 0$, $\hat{V} \geq 0$ and by (2.23) we conclude that $\hat{v}_{l+1} \geq 0$.

Finally, following the proof of [28], we show that for all $i \in \{1, \dots, l+1\}$ we have

$$\hat{u}_i \leq g^* \quad \text{and} \quad \hat{v}_i \leq r^*.$$

Thus, T^n stabilizes the set $\mathbb{K}$ and then, thanks to the Brouwer's fixed-point theorem, T^n has a fixed-point in $\mathbb{K}$, denoted by (u^{n+1}, v^{n+1}) . Eventually, we construct s^{n+1} by

$$s^{n+1} = s^n + \Delta t \alpha (u_{l+1}^{n+1})^p.$$

Hence, we deduce the existence of $(s^{n+1}, u^{n+1}, v^{n+1})$ solution to (S_2) such that u^{n+1} , v^{n+1} and s^{n+1} satisfy (2.19). As a by-product, we deduce (2.20) since $u^{n+1} \in \mathbb{K}$ and $s^{n+1} \geq s^n \geq 0$.

2.4 Discrete $L^2(0, T; H^1(0, 1))$ estimate on the approximate solutions

Following [3, 4], we establish in this section a discrete $L^2(0, T; H^1(0, 1))$ estimate. This estimate is the discrete counterpart of [3, Lemma 3.4], under the assumptions (H2-1)-(H2-7) and if we assume that $g(t) = g^*$ and $r(t) = r^*$ on $[0, +\infty)$. Then, for almost every $t > 0$ we have the following estimate

$$\begin{aligned} & \int_0^t s^0 \left[\frac{1}{\alpha^{1/p}} (s'(z))^{(p+1)/p} + \frac{1}{2\alpha^{2/p}} (s'(z))^{(p+2)/p} \right] dz + \kappa_u \int_0^t \int_0^1 |\partial_x u(x, z)|^2 dx dz \\ & + \kappa_v \gamma \int_0^t \int_0^1 |\partial_x v(x, z)|^2 dx dz \leq \frac{1}{2} \int_0^t \int_0^1 s(z) s'(z) (u^2(x, z) + \gamma v^2(x, z)) dx dz \\ & + \frac{s^2(t)}{2} ((g^*)^2 + g^* + \gamma (r^*)^2) + \frac{1}{2} \int_0^1 s_0^2 [(u_0(s_0 x) - g^*)^2 + \gamma (v_0(s_0 x) - r^*)^2] dx. \end{aligned} \tag{2.24}$$

In order to state the discrete version of (2.24), let us remark that there exists a positive constant τ such that

$$B^c(x) \geq \tau, \quad \forall x \in \mathbb{R}.$$

We refer to Appendix A where we prove the existence of τ . Moreover, we notice that in the case of the upwind fluxes or the Scharfetter-Gummel fluxes $\tau = 1$. We now state the discrete $L^2(0, T; H^1(0, 1))$ estimate.

Proposition 2.4.1. *Let the hypothesis (H2-1)-(H2-7) and (2.9) hold and assume that $g(t) = g^*$ and $r(t) = r^*$ on $[0, +\infty)$. Then, for a given Δt and a given mesh $\mathcal{T}$ we have*

$$\begin{aligned}
 & \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t s^0 \left[\frac{1}{\alpha^{1/p}} \left(\frac{s^{n+1} - s^n}{\Delta t} \right)^{(p+1)/p} + \frac{1}{2\alpha^{2/p}} \left(\frac{s^{n+1} - s^n}{\Delta t} \right)^{(p+2)/p} \right] \\
 & + \kappa_u \tau \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l \frac{(u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1})^2}{h_{i+\frac{1}{2}}} + \gamma \kappa_v \tau \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l \frac{(v_{i+1}^{n+1} - v_i^{n+1})^2}{h_{i+\frac{1}{2}}} \\
 & \leq (s^{N_T})^2 ((g^*)^2 + g^* + \gamma (r^*)^2) + \frac{(s_0)^2}{2} \sum_{i=1}^l h_i [(u_i^0 - g^*)^2 + \gamma (v_i^0 - r^*)^2] \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l h_i \sigma^{n+1} [(u_i^{n+1})^2 + \gamma (v_i^{n+1})^2]. \tag{2.25}
 \end{aligned}$$

Proof. We multiply (2.4) by $\Delta t (u_i^{n+1} - g^*)$ and we sum over i and n , we obtain $E + F = G$, with

$$\begin{aligned}
 E &= \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=1}^l h_i s^{n+1} \frac{(s^{n+1} u_i^{n+1} - s^n u_i^n)}{\Delta t} (u_i^{n+1} - g^*), \\
 F &= \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=1}^l \left(\mathcal{F}_{u,i+\frac{1}{2}}^{n+1} - \mathcal{F}_{u,i-\frac{1}{2}}^{n+1} \right) (u_i^{n+1} - g^*), \\
 G &= \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=1}^l h_i (s^{n+1})^2 f(u_i^{n+1}, v_i^{n+1}) (u_i^{n+1} - g^*).
 \end{aligned}$$

We notice that we can rewrite E as

$$\begin{aligned}
 E &= \sum_{n=0}^{N_T-1} \sum_{i=1}^l h_i s^{n+1} \left[s^{n+1} (u_i^{n+1} - g^*) - s^n (u_i^n - g^*) \right. \\
 & \quad \left. + g^* (s^{n+1} - s^n) \right] (u_i^{n+1} - g^*).
 \end{aligned}$$

Using the formula $(a - b)a \geq (a^2 - b^2)/2$ we obtain

$$\begin{aligned}
 E &\geq \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N_T-1} \sum_{i=1}^l h_i \left[(s^{n+1})^2 (u_i^{n+1} - g^*)^2 - (s^n)^2 (u_i^n - g^*)^2 \right] \\
 & \quad + g^* \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=1}^l h_i \sigma^{n+1} (u_i^{n+1} - g^*).
 \end{aligned}$$

2.4. Discrete $L^2(0, T; H^1(0, 1))$ estimate on the approximate solutions

Thanks to Theorem 2.2.1 we know that $u_i^{n+1} \geq 0$ for all $1 \leq i \leq l$ and $0 \leq n \leq N_T - 1$ which leads to

$$E \geq \frac{1}{2} \sum_{i=1}^l h_i \left[(s^{N_T})^2 (u_i^{N_T} - g^*)^2 - (s^0)^2 (u_i^0 - g^*)^2 \right] - (g^*)^2 \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=1}^l h_i \sigma^{n+1},$$

and since $\sum_{i=1}^l h_i = 1$ we have

$$E \geq \frac{1}{2} \sum_{i=1}^l h_i \left[(s^{N_T})^2 (u_i^{N_T} - g^*)^2 - (s^0)^2 (u_i^0 - g^*)^2 \right] - (g^*)^2 \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sigma^{n+1}.$$

Now, let us notice, by monotonicity of $(s^n)_{0 \leq n \leq N_T}$ thanks to (2.20), that for all $0 \leq n \leq N_T - 1$

$$\Delta t \sigma^{n+1} = (s^{n+1})^2 - s^{n+1} s^n \leq (s^{n+1})^2 - (s^n)^2. \quad (2.26)$$

Then, we deduce that

$$E \geq -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^l h_i (s^0)^2 (u_i^0 - g^*)^2 - (g^*)^2 \sum_{n=0}^{N_T-1} \left((s^{n+1})^2 - (s^n)^2 \right).$$

Hence, we obtain

$$E \geq -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^l h_i (s^0)^2 (u_i^0 - g^*)^2 - (g^*)^2 (s^{N_T})^2. \quad (2.27)$$

For F , a summation by parts leads to $F = F_1 + F_2$ where F_1 contains the numerical fluxes and F_2 the boundary terms:

$$\begin{aligned} F_1 &= - \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l \mathcal{F}_{u, i+\frac{1}{2}}^{n+1} (u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1}), \\ F_2 &= \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \mathcal{F}_{u, l+\frac{1}{2}}^{n+1} (u_{l+1}^{n+1} - g^*). \end{aligned}$$

For F_1 , we use the decomposition formula (2.17) and we get

$$\begin{aligned} F_1 &= \kappa_u \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l B^c \left(P_{u, i+\frac{1}{2}}^{n+1} \right) \frac{(u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1})^2}{h_{i+\frac{1}{2}}} \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l x_{i+\frac{1}{2}} \sigma^{n+1} \left((u_{i+1}^{n+1})^2 - (u_i^{n+1})^2 \right). \end{aligned}$$

We reorder the convective terms and since by Lemma 2.7.1, $B^c(x) \geq \tau$ for all $x \in \mathbb{R}$, we obtain

$$F_1 \geq \kappa_u \tau \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l \frac{(u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1})^2}{h_{i+\frac{1}{2}}} - \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l h_i \sigma^{n+1} (u_i^{n+1})^2 + \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sigma^{n+1} (u_{l+1}^{n+1})^2.$$

Using equation (2.3) we have $\alpha (u_{l+1}^{n+1})^p = (s^{n+1} - s^n)/\Delta t$ and the inequality $\sigma^{n+1} \geq s^0 (s^{n+1} - s^n)/\Delta t$ for the last term of the right hand side, we deduce that

$$F_1 \geq \kappa_u \tau \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l \frac{(u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1})^2}{h_{i+\frac{1}{2}}} - \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l h_i \sigma^{n+1} (u_i^{n+1})^2 + \sum_{n=0}^{N_T-1} \frac{\Delta t s^0}{2\alpha^{2/p}} \left(\frac{s^{n+1} - s^n}{\Delta t} \right)^{(p+2)/p}.$$

For F_2 , we apply (2.13) and we have

$$F_2 = \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sigma^{n+1} u_{l+1}^{n+1} - g^* \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sigma^{n+1}.$$

Using equation (2.3), as for the term F_1 , we obtain

$$F_2 = \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \frac{s^{n+1}}{\alpha^{1/p}} \left(\frac{s^{n+1} - s^n}{\Delta t} \right)^{(p+1)/p} - g^* \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sigma^{n+1}.$$

Applying the inequality (2.26) and the fact that $s^{n+1} \geq s^0$ for all $0 \leq n \leq N_T - 1$ we infer that

$$F_2 \geq \sum_{n=0}^{N_T-1} \frac{\Delta t s^0}{\alpha^{1/p}} \left(\frac{s^{n+1} - s^n}{\Delta t} \right)^{(p+1)/p} - g^* (s^{N_T})^2.$$

We conclude that

$$\begin{aligned} F &\geq \kappa_u \tau \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l \frac{(u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1})^2}{h_{i+\frac{1}{2}}} - \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l h_i \sigma^{n+1} (u_i^{n+1})^2 \\ &\quad + \sum_{n=0}^{N_T-1} \frac{\Delta t s^0}{2\alpha^{2/p}} \left(\frac{s^{n+1} - s^n}{\Delta t} \right)^{(p+2)/p} + \sum_{n=0}^{N_T-1} \frac{\Delta t s^0}{\alpha^{1/p}} \left(\frac{s^{n+1} - s^n}{\Delta t} \right)^{(p+1)/p} \\ &\quad - g^* (s^{N_T})^2. \end{aligned} \quad (2.28)$$

2.4. Discrete $L^2(0, T; H^1(0, 1))$ estimate on the approximate solutions

Then, we obtain from equation $E + F = G$, inequalities (2.27) and (2.28)

$$\begin{aligned}
& \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t s^0 \left[\frac{1}{\alpha^{1/p}} \left(\frac{s^{n+1} - s^n}{\Delta t} \right)^{(p+1)/p} + \frac{1}{2\alpha^{2/p}} \left(\frac{s^{n+1} - s^n}{\Delta t} \right)^{(p+2)/p} \right] \\
& + \kappa_u \tau \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l \frac{(u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1})^2}{h_{i+\frac{1}{2}}} \leq (s^{N_T})^2 ((g^*)^2 + g^*) + \frac{(s_0)^2}{2} \sum_{i=1}^l h_i (u_i^0 - g^*)^2 \\
& + \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=1}^l h_i (s^{n+1})^2 f(u_i^{n+1}, v_i^{n+1}) (u_i^{n+1} - g^*) + \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l h_i \sigma^{n+1} (u_i^{n+1})^2.
\end{aligned} \tag{2.29}$$

As previously, we multiply (2.5) by $\gamma \Delta t (v^{n+1} - r^*)$ and we sum over i and n , so that we obtain similarly $E + F = G$. Thus, applying the same techniques as before, we deduce that

$$\begin{aligned}
& \gamma \kappa_v \tau \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l \frac{(v_{i+1}^{n+1} - v_i^{n+1})^2}{h_{i+\frac{1}{2}}} \leq (s^{N_T})^2 \gamma (r^*)^2 \\
& + \frac{\gamma}{2} \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l h_i \sigma^{n+1} (v_i^{n+1})^2 + \frac{\gamma (s_0)^2}{2} \sum_{i=1}^l h_i (v_i^0 - r^*)^2 \\
& - \gamma \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=1}^l h_i (s^{n+1})^2 f(u_i^{n+1}, v_i^{n+1}) (v_i^{n+1} - r^*).
\end{aligned} \tag{2.30}$$

Finally, we notice that, for $0 \leq n \leq N_T - 1$ and $1 \leq i \leq l$, we have

$$\begin{aligned}
& f(u_i^{n+1}, v_i^{n+1}) (u_i^{n+1} - g^*) - \gamma f(u_i^{n+1}, v_i^{n+1}) (v_i^{n+1} - r^*) \\
& = -\beta (\gamma v_i^{n+1} - u_i^{n+1})^2 \leq 0.
\end{aligned} \tag{2.31}$$

Thus, we sum (2.29) and (2.30) and we deduce, thanks to (2.31), the inequality (2.25). $\square$

Corollary 2.4.1. *Let the hypothesis (H2-1)-(H2-7) and (2.9) hold and assume that $g(t) = g^*$ and $r(t) = r^*$ on $[0, +\infty)$. Then, for a given Δt and a given mesh $\mathcal{T}$, there exists a constant C which depends on g^* , r^* , τ , $\|u^0 - g^*\|_0^2$ and $\|v^0 - r^*\|_0^2$ such that*

$$\kappa_u \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l \frac{(u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1})^2}{h_{i+\frac{1}{2}}} + \kappa_v \gamma \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l \frac{(v_{i+1}^{n+1} - v_i^{n+1})^2}{h_{i+\frac{1}{2}}} \leq C (s^{N_T})^2. \tag{2.32}$$

Proof. Since $s_0 \leq s^{N_T}$ we deduce from Proposition 2.4.1 that

$$\begin{aligned} \kappa_u \tau \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l \frac{(u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1})^2}{h_{i+\frac{1}{2}}} + \gamma \kappa_v \tau \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l \frac{(v_{i+1}^{n+1} - v_i^{n+1})^2}{h_{i+\frac{1}{2}}} \\ \leq (s^{N_T})^2 \left[(g^*)^2 + g^* + \gamma (r^*)^2 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^l h_i [(u_i^0 - g^*)^2 + \gamma (v_i^0 - r^*)^2] \right. \\ \left. + \frac{(g^*)^2 + \gamma (r^*)^2}{2} \right]. \end{aligned}$$

This concludes the proof of Corollary 2.4.1. $\square$

2.5 The long time behavior of the approximate penetration depth

In this section, we prove Theorem 2.2.2. As already mentioned, in the continuous setting the key idea is to establish an energy equality and then to deduce the $\sqrt{t}$ -bounds for the penetration depth. This equality is established in [3, Lemma 3.3], see also [4, Lemma 2.4], and could be stated as follows: assume that the assumptions (H2-1)-(H2-7) hold, then for almost every $t > 0$ we have

$$\begin{aligned} \int_0^1 s^2(t) x \left(u(x, t) + v(x, t) \right) dx + \frac{1}{2} s^2(t) + \kappa_u \int_0^t \int_0^1 \partial_x u(x, z) dx dz \\ + \kappa_v \int_0^t \int_0^1 \partial_x v(x, z) dx dz = \frac{1}{2} s_0^2 + \int_0^1 s_0^2 x \left(u_0(s_0 x) + v_0(s_0 x) \right) dx. \quad (2.33) \end{aligned}$$

However, at the discrete level the techniques employed in [3, 4] for the establishment of (2.33) do not directly apply. Hence, in order to prove Theorem 2.2.2 we establish two discrete energy inequalities and then we will deduce the $\sqrt{t}$ -bounds satisfied by the approximate penetration depth.

2.5.1 The lower bound

In this section, we show the lower bound of (2.21). To this end, we first state an energy inequality.

Proposition 2.5.1. *Let the hypothesis (H2-1)-(H2-7) and (2.9) hold. Then, for a given Δt and a given mesh $\mathcal{T}$ a solution to (S_2) satisfies*

$$\begin{aligned} \frac{3g^* + 3r^* + 1}{2} (s^{N_T})^2 + \kappa_u \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l B \left(P_{u, i+\frac{1}{2}}^{n+1} \right) (u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1}) \\ + \kappa_v \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l B \left(P_{v, i+\frac{1}{2}}^{n+1} \right) (v_{i+1}^{n+1} - v_i^{n+1}) \geq 0. \quad (2.34) \end{aligned}$$

2.5. The long time behavior of the approximate penetration depth

Proof. We multiply (2.4) by $\Delta t x_i$ and we sum over i and n , we obtain $E + F = G$, with

$$\begin{aligned} E &= \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=1}^l h_i x_i s^{n+1} \frac{(s^{n+1} u_i^{n+1} - s^n u_i^n)}{\Delta t}, \\ F &= \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=1}^l x_i \left(\mathcal{F}_{u,i+\frac{1}{2}}^{n+1} - \mathcal{F}_{u,i-\frac{1}{2}}^{n+1} \right), \\ G &= \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=1}^l h_i x_i (s^{n+1})^2 f(u_i^{n+1}, v_i^{n+1}). \end{aligned}$$

For E we notice that

$$E = \sum_{n=0}^{N_T-1} \sum_{i=1}^l h_i x_i \left((s^{n+1})^2 u_i^{n+1} - (s^n)^2 u_i^n \right) - \sum_{n=0}^{N_T-1} \sum_{i=1}^l h_i x_i s^n (s^{n+1} - s^n) u_i^n.$$

Thanks to Theorem 2.2.1 we know that for all $1 \leq i \leq l$ and $0 \leq n \leq N_T - 1$ we have $s^n (s^{n+1} - s^n) u_i^n \geq 0$ and we get

$$E \leq \sum_{n=0}^{N_T-1} \sum_{i=1}^l h_i x_i \left((s^{n+1})^2 u_i^{n+1} - (s^n)^2 u_i^n \right).$$

Then, using the telescopic sum and the inequality $\sum_{i=1}^l h_i x_i \leq \sum_{i=1}^l h_i = 1$ we have

$$E \leq \sum_{i=1}^l h_i x_i (s^{N_T})^2 u_i^{N_T} - \sum_{i=1}^l h_i x_i (s^0)^2 u_i^0 \leq g^* (s^{N_T})^2. \quad (2.35)$$

For F , a summation by parts leads to

$$F = - \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l h_{i+\frac{1}{2}} \mathcal{F}_{u,i+\frac{1}{2}}^{n+1} + \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \mathcal{F}_{u,l+\frac{1}{2}}^{n+1}.$$

Then, using the decomposition formula (2.16) and the equation (2.13), we obtain

$$\begin{aligned} F &= \kappa_u \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l B \left(P_{u,i+\frac{1}{2}}^{n+1} \right) (u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1}) \\ &\quad + \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l h_{i+\frac{1}{2}} x_{i+\frac{1}{2}} \sigma^{n+1} u_{i+1}^{n+1} + \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sigma^{n+1}. \end{aligned}$$

Since $u_i^{n+1} \leq g^*$ for all $1 \leq i \leq l+1$, we deduce thanks to the inequality $\sum_{i=0}^l h_{i+\frac{1}{2}} x_{i+\frac{1}{2}} \leq \sum_{i=0}^l h_{i+\frac{1}{2}} = 1$ that

$$F \leq \kappa_u \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l B \left(P_{u,i+\frac{1}{2}}^{n+1} \right) (u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1}) + (g^* + 1) \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sigma^{n+1}.$$

Moreover, the inequality (2.26) yields to

$$F \leq \kappa_u \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l B \left(P_{u,i+\frac{1}{2}}^{n+1} \right) (u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1}) + \frac{g^* + 1}{2} \sum_{n=0}^{N_T-1} \left((s^{n+1})^2 - (s^n)^2 \right). \quad (2.36)$$

Then, applying (2.35) and (2.36) in the equation $E + F = G$ we get

$$\frac{3g^* + 1}{2} (s^{N_T})^2 + \kappa_u \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l B \left(P_{u,i+\frac{1}{2}}^{n+1} \right) (u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1}) \geq G. \quad (2.37)$$

If we use the same techniques for v we have

$$\frac{3r^*}{2} (s^{N_T})^2 + \kappa_v \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l B \left(P_{v,i+\frac{1}{2}}^{n+1} \right) (v_{i+1}^{n+1} - v_i^{n+1}) \geq -G. \quad (2.38)$$

Finally, we sum (2.37) and (2.38) and we deduce (2.34). $\square$

Now, let us show the lower bound of (2.21). Thanks to Proposition 2.5.1 we obtain the inequality $E + F + G \geq 0$ with

$$\begin{aligned} E &= \frac{3g^* + 3r^* + 1}{2} (s^{N_T})^2, \\ F &= \kappa_u \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l B \left(P_{u,i+\frac{1}{2}}^{n+1} \right) (u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1}), \\ G &= \kappa_v \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l B \left(P_{v,i+\frac{1}{2}}^{n+1} \right) (v_{i+1}^{n+1} - v_i^{n+1}). \end{aligned}$$

We rewrite F as $F = F_1 + F_2$ with

$$\begin{aligned} F_1 &= \kappa_u \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l \left(B \left(P_{u,i+\frac{1}{2}}^{n+1} \right) - 1 \right) (u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1}), \\ F_2 &= \kappa_u \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l (u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1}). \end{aligned}$$

For $|F_1|$, the Cauchy-Schwarz inequality yields to

$$|F_1| \leq \kappa_u \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \left(\sum_{i=0}^l h_{i+\frac{1}{2}} \left(B \left(P_{u,i+\frac{1}{2}}^{n+1} \right) - 1 \right)^2 \right)^{1/2} \left(\sum_{i=0}^l \frac{(u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1})^2}{h_{i+\frac{1}{2}}} \right)^{1/2}.$$

2.5. The long time behavior of the approximate penetration depth

Since $0 \leq B(x) \leq 1$ for $x \geq 0$ then $(B(x) - 1)^2 \leq 1$ for $x \geq 0$ and we obtain

$$|F_1| \leq \kappa_u \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \left(\sum_{i=0}^l h_{i+\frac{1}{2}} \right)^{1/2} \left(\sum_{i=0}^l \frac{(u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1})^2}{h_{i+\frac{1}{2}}} \right)^{1/2}.$$

Using the fact that $\sum_{i=0}^l h_{i+\frac{1}{2}} = 1$ and the Cauchy-Schwarz inequality lead to

$$\begin{aligned} |F_1| &\leq \kappa_u \left(\sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \right)^{1/2} \left(\sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l \frac{(u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1})^2}{h_{i+\frac{1}{2}}} \right)^{1/2} \\ &\leq \sqrt{\kappa_u T} \left(\kappa_u \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l \frac{(u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1})^2}{h_{i+\frac{1}{2}}} \right)^{1/2}. \end{aligned}$$

Thanks to Corollary 2.4.1, we deduce the existence of a constant c_1 independent of Δt such that

$$|F_1| \leq c_1 \sqrt{\kappa_u T} s^{N_T}.$$

Then, we use the generalized Young inequality

$$ab \leq \varepsilon \frac{a^r}{r} + \frac{b^q}{q \varepsilon^{q/r}}, \quad \text{with } \frac{1}{r} + \frac{1}{q} = 1 \text{ and } 1 < r, q < \infty, \quad (2.39)$$

with $a = c_1 s^{N_T}$, $b = \sqrt{\kappa_u T}$, $r = 2$ and $\varepsilon = 4/g^*$ and we deduce the existence of a positive constant, still denoted c_1 , independent of Δt such that

$$|F_1| \leq c_1 \left(s^{N_T} \right)^2 + \frac{\kappa_u g^*}{8} T. \quad (2.40)$$

For F_2 , using the telescopic sum and (2.3) we have

$$F_2 = \sum_{n=0}^{N_T-1} \frac{\Delta t \kappa_u}{\alpha^{1/p}} \left(\frac{s^{n+1} - s^n}{\Delta t} \right)^{1/p} - \kappa_u g^* T.$$

In the case where $p > 1$, applying Hölder inequality with exponents p and $p/(p-1)$, we get

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{N_T-1} \frac{\Delta t \kappa_u}{\alpha^{1/p}} \left(\frac{s^{n+1} - s^n}{\Delta t} \right)^{1/p} &\leq \frac{\kappa_u}{\alpha^{1/p}} \left(\sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \left(\frac{s^{n+1} - s^n}{\Delta t} \right) \right)^{1/p} T^{(p-1)/p} \\ &\leq \frac{\kappa_u}{\alpha^{1/p}} (s^{N_T})^{1/p} T^{(p-1)/p}. \end{aligned}$$

Then, we apply the generalized Young inequality (2.39) with $a = (\kappa_u s^{N_T}/\alpha)^{1/p}$, $b = (\kappa_u T)^{(p-1)/p}$, $r = p$ and $\varepsilon = (4(p-1)/g^* p)^{p-1}$ and we deduce the existence of a constant c_2 independent of Δt such that

$$\sum_{n=0}^{N_T-1} \frac{\Delta t \kappa_u}{\alpha^{1/p}} \left(\frac{s^{n+1} - s^n}{\Delta t} \right)^{1/p} \leq c_2 s^{N_T} + \frac{\kappa_u g^*}{4} T.$$

In the case where $p = 1$ using the telescopic sum we obtain

$$\sum_{n=0}^{N_T-1} \frac{\Delta t \kappa_u}{\alpha} \left(\frac{s^{n+1} - s^n}{\Delta t} \right) \leq \frac{\kappa_u}{\alpha} s^{N_T} \leq \frac{\kappa_u}{\alpha} s^{N_T} + \frac{\kappa_u g^*}{4} T.$$

Thus, in both cases, we deduce the existence of a constant, still denoted c_2 , independent of Δt such that

$$F_2 \leq c_2 s^{N_T} - \frac{3 \kappa_u g^*}{4} T. \quad (2.41)$$

For G , thanks to Corollary 2.4.1 we deduce that there exists a positive constant c_3 independent of Δt such that

$$\kappa_v \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l \frac{(v_{i+1}^{n+1} - v_i^{n+1})^2}{h_{i+\frac{1}{2}}} \leq c_3 (s^{N_T})^2. \quad (2.42)$$

Applying the Cauchy-Schwarz inequality, we obtain

$$G \leq \kappa_v \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \left(\sum_{i=0}^l h_{i+\frac{1}{2}} B^2 \left(P_{v, i+\frac{1}{2}}^{n+1} \right) \right)^{1/2} \left(\sum_{i=0}^l \frac{(v_{i+1}^{n+1} - v_i^{n+1})^2}{h_{i+\frac{1}{2}}} \right)^{1/2}.$$

Since $B(x) \leq 1$ for all $x \in \mathbb{R}^+$ and $\sum_{i=0}^l h_{i+\frac{1}{2}} = 1$ we deduce that

$$G \leq \kappa_v \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \left(\sum_{i=0}^l \frac{(v_{i+1}^{n+1} - v_i^{n+1})^2}{h_{i+\frac{1}{2}}} \right)^{1/2}.$$

Using the Cauchy-Schwarz inequality we end up with

$$G \leq \sqrt{\kappa_v} \left(\kappa_v \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l \frac{(v_{i+1}^{n+1} - v_i^{n+1})^2}{h_{i+\frac{1}{2}}} \right)^{1/2} T^{1/2}.$$

Hence, applying (2.42) we deduce the existence of a constant c_4 independent of Δt such that

$$G \leq c_4 \sqrt{\kappa_v T} s^{N_T}.$$

Thanks to the generalized Young inequality (2.39) with $a = c_4 s^{N_T}$, $b = \sqrt{\kappa_v T}$, $r = 2$ and $\varepsilon = 4\kappa_v/\kappa_u g^*$ we deduce the existence of a constant, still denoted c_4 , independent of Δt such that

$$G \leq c_4 (s^{N_T})^2 + \frac{\kappa_u g^*}{8} T. \quad (2.43)$$

2.5. The long time behavior of the approximate penetration depth

Then, from equation $E + F + G \geq 0$ and (2.40)–(2.43) we deduce that

$$\left(\frac{3g^* + 3r^* + 1}{2} + c_1 + c_4 \right) (s^{N_T})^2 + c_2 s^{N_T} \geq \frac{\kappa_u g^*}{2} T.$$

If $T > 1$, again applying the generalized Young inequality (2.39) with $a = c_2 s^{N_T}$, $b = T^{1/2}$, $r = 2$ and $\varepsilon = 2/\kappa_u g^*$ we obtain

$$c_2 s^{N_T} \leq c_2 s^{N_T} T^{1/2} \leq \frac{c_2^2}{\kappa_u g^*} (s^{N_T})^2 + \frac{\kappa_u g^*}{4} T.$$

We deduce the existence of a positive constant c , independent of Δt , such that

$$s^{N_T} \geq c \sqrt{T}.$$

In the case $0 \leq T \leq 1$, we have

$$s^{N_T} \geq s_0 \geq s_0 T^{1/2}.$$

This concludes the proof of the lower bound of (2.21).

2.5.2 The upper bound

In this section, we prove the upper bound of (2.21). As previously, we first establish an energy inequality:

Proposition 2.5.2. *Let the hypothesis (H2-1)–(H2-7) and (2.9) hold and assume that $g^* + r^* < 1$. Then, for a given Δt and a given mesh $\mathcal{T}$ a solution to (S_2) satisfies*

$$\begin{aligned} & \frac{1 - (g^* + r^*)}{2} (s^{N_T})^2 + \kappa_u \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l B \left(P_{u,i+\frac{1}{2}}^{n+1} \right) (u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1}) \\ & + \kappa_v \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l B \left(P_{v,i+\frac{1}{2}}^{n+1} \right) (v_{i+1}^{n+1} - v_i^{n+1}) \leq \sum_{i=1}^l h_i x_i (s_0)^2 (u_i^0 + v_i^0) \\ & + \frac{1 - (g^* + r^*)}{2} (s^0)^2. \end{aligned} \quad (2.44)$$

Proof. We multiply (2.4) by $\Delta t x_i$ and we sum over i and n , we obtain $E + F = G$, with

$$\begin{aligned} E &= \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=1}^l h_i x_i s^{n+1} \frac{(s^{n+1} u_i^{n+1} - s^n u_i^n)}{\Delta t}, \\ F &= \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=1}^l x_i \left(\mathcal{F}_{u,i+\frac{1}{2}}^{n+1} - \mathcal{F}_{u,i-\frac{1}{2}}^{n+1} \right), \\ G &= \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=1}^l h_i x_i (s^{n+1})^2 f(u_i^{n+1}, v_i^{n+1}). \end{aligned}$$

For E we notice that

$$E = \sum_{n=0}^{N_T-1} \sum_{i=1}^l h_i x_i \left((s^{n+1})^2 u_i^{n+1} - (s^n)^2 u_i^n \right) - \sum_{n=0}^{N_T-1} \sum_{i=1}^l h_i x_i s^n (s^{n+1} - s^n) u_i^n.$$

Then, using the telescopic sum and the fact that $s^n (s^{n+1} - s^n) u_i^n \leq \Delta t \sigma^{n+1} g^*$ for all $1 \leq i \leq l$ and $0 \leq n \leq N_T - 1$ and $\sum_{i=1}^l h_i x_i \leq \sum_{i=1}^l h_i = 1$ we have

$$E \geq - \sum_{i=1}^l h_i x_i (s^0)^2 u_i^0 - g^* \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sigma^{n+1}. \quad (2.45)$$

For F , a summation by parts leads to

$$F = - \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l h_{i+\frac{1}{2}} \mathcal{F}_{u,i+\frac{1}{2}}^{n+1} + \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \mathcal{F}_{u,l+\frac{1}{2}}^{n+1}.$$

Then, using the decomposition formula (2.16) and the equation (2.13), we obtain

$$\begin{aligned} F = \kappa_u \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l B \left(P_{u,i+\frac{1}{2}}^{n+1} \right) (u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1}) \\ + \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l h_{i+\frac{1}{2}} x_{i+\frac{1}{2}} \sigma^{n+1} u_{i+1}^{n+1} + \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sigma^{n+1}. \end{aligned}$$

Since $\sigma^{n+1} u_i^{n+1} \geq 0$ for all $1 \leq i \leq l+1$ and $0 \leq n \leq N_T - 1$, we deduce that

$$F \geq \kappa_u \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l B \left(P_{u,i+\frac{1}{2}}^{n+1} \right) (u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1}) + \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sigma^{n+1}. \quad (2.46)$$

Then, applying (2.45) and (2.46) in the equation $E + F = G$ we get

$$\begin{aligned} (1 - g^*) \sum_{n=1}^{N_T-1} \Delta t \sigma^{n+1} + \kappa_u \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l B \left(P_{u,i+\frac{1}{2}}^{n+1} \right) (u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1}) \\ \leq G + \sum_{i=1}^l h_i x_i (s_0)^2 u_i^0. \end{aligned} \quad (2.47)$$

If we use the same techniques for v we have

$$\begin{aligned} -r^* \sum_{n=1}^{N_T-1} \Delta t \sigma^{n+1} + \kappa_v \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l B \left(P_{v,i+\frac{1}{2}}^{n+1} \right) (v_{i+1}^{n+1} - v_i^{n+1}) \\ \leq -G + \sum_{i=1}^l h_i x_i (s_0)^2 v_i^0. \end{aligned} \quad (2.48)$$

Finally, summing (2.47) and (2.48) and using the hypothesis $g^* + r^* < 1$ we deduce (2.44). $\square$

2.5. The long time behavior of the approximate penetration depth

Now, let us establish the upper bound of (2.21). Thanks to Proposition 2.5.2 we obtain the inequality $E \leq F + G + H$ with

$$\begin{aligned} E &= \frac{1 - (g^* + r^*)}{2} \left(s^{N_T} \right)^2, \\ F &= -\kappa_u \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l B \left(P_{u,i+\frac{1}{2}}^{n+1} \right) (u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1}), \\ G &= -\kappa_v \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l B \left(P_{v,i+\frac{1}{2}}^{n+1} \right) (v_{i+1}^{n+1} - v_i^{n+1}), \\ H &= \sum_{i=1}^l h_i x_i (s_0)^2 (u_i^0 + v_i^0) + \frac{1 - (g^* + r^*)}{2} \left(s^0 \right)^2. \end{aligned}$$

We rewrite F as $F = F_1 + F_2$ with

$$\begin{aligned} F_1 &= -\kappa_u \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l \left(B \left(P_{u,i+\frac{1}{2}}^{n+1} \right) - 1 \right) (u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1}), \\ F_2 &= -\kappa_u \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l (u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1}) = -\kappa_u \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t (u_{l+1}^{n+1} - u_0^{n+1}). \end{aligned}$$

For $|F_1|$, using the same techniques as in the previous section, we obtain the existence of a positive constant C_1 independent of Δt such that

$$|F_1| \leq C_1 \sqrt{\kappa_u T} s^{N_T}.$$

Then, the generalized Young inequality (2.39) with $a = s^{N_T}$, $b = C_1 \sqrt{\kappa_u T}$, $r = 2$ and $\varepsilon = (1 - (g^* + r^*))/4$ leads to the existence of a positive constant, still denoted C_1 , independent of Δt such that

$$|F_1| \leq \frac{1 - (g^* + r^*)}{8} \left(s^{N_T} \right)^2 + \frac{2 C_1 \kappa_u}{1 - (g^* + r^*)} T. \quad (2.49)$$

For F_2 , applying $u_{l+1}^{n+1} \geq 0$, we end up with

$$F_2 \leq \kappa_u g^* T. \quad (2.50)$$

We also rewrite G as $G = G_1 + G_2$ with

$$\begin{aligned} G_1 &= -\kappa_v \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l \left(B \left(P_{v,i+\frac{1}{2}}^{n+1} \right) - 1 \right) (v_{i+1}^{n+1} - v_i^{n+1}), \\ G_2 &= -\kappa_v \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{i=0}^l (v_{i+1}^{n+1} - v_i^{n+1}). \end{aligned}$$

Then, using the same techniques as before for $|G_1|$ and G_2 we obtain

$$|G_1| \leq \frac{1 - (g^* + r^*)}{8} (s^{N_T})^2 + \frac{2 C_2 \kappa_v}{1 - (g^* + r^*)} T, \quad (2.51)$$

and

$$G_2 \leq \kappa_v r^* T, \quad (2.52)$$

with C_2 a constant independent of Δt . We apply (2.49)–(2.52) in the inequality $E \leq F + G + H$ and we end up with

$$\frac{1 - (g^* + r^*)}{4} (s^{N_T})^2 \leq \left[\kappa_u g^* + \kappa_v r^* + \frac{4 C_3}{1 - (g^* + r^*)} \right] T + H,$$

with $C_3 = \max\{\kappa_u C_1, \kappa_v C_2\}$. Eventually, we deduce the existence of a positive constant C independent of Δt such that

$$s^{N_T} \leq C \sqrt{1 + T}.$$

This concludes the proof of Theorem 2.2.2.

2.6 Numerical experiments

In this section, we present some numerical experiments. The test case is described in Table 2.1. Furthermore, as already observed in [28], the upwind scheme gives the same

κ_u	κ_v	s_0	α	β
1	0.1	0.5	1	7.5

TABLE 2.1 – Definition of parameters used in the test case.

results than the Scharfetter-Gummel scheme. Since the Scharfetter-Gummel scheme is more accurate for diffusion-convection problem, we consider in the sequel that $B = B_{sg}$. Let us mention that the numerical results are obtained using Newton's method with a tolerance equal to $1e - 8$ on a uniform mesh made of 100 cells and $\Delta t = 1e - 2$.

In Figure 2.1, we illustrate the behavior of s in logarithmic scale for different values of p up to $T = 1000$ with $g^* = 0.5$, $r^* = 0.25$, $\gamma = 2$ and $u_0(x) = v_0(x) = 0.25$ for all $x \in [0, 1]$. We observe that the penetration depth follows a $\sqrt{t}$ -law of propagation.

In Figure 2.2, we illustrate the behavior of s in logarithmic scale for $p = 2$ up to $T = 1000$ with $g^* = 15$, $r^* = 2.25$, $\gamma = 6.67$ and $u_0(x) = v_0(x) = 1$ for all $x \in [0, 1]$. We observe that, even if $g^* + r^* > 1$, the scheme (S_2) preserves the $\sqrt{t}$ -law of propagation for the approximate penetration depth. Let us mention that we obtain similar profiles for s for different values of p in the case $g^* + r^* > 1$.

2.7. Appendix A. Property of the B function

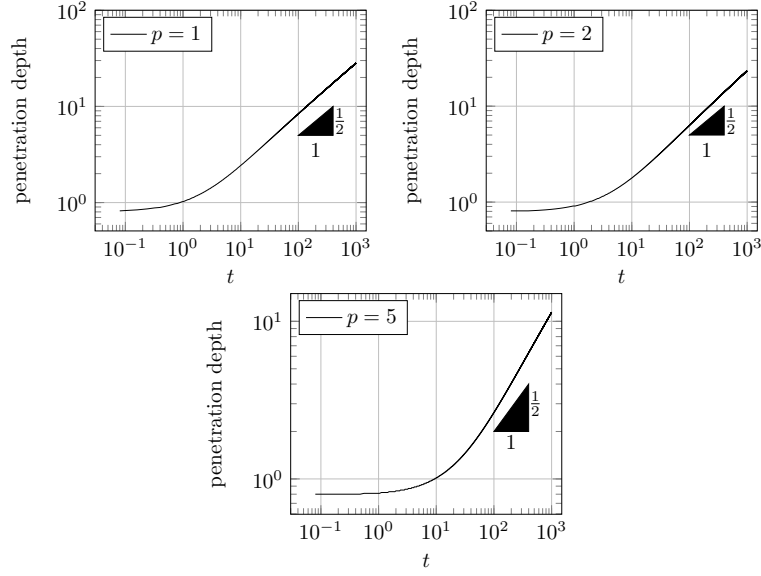


FIGURE 2.1 – Profiles of s in logarithmic scale with the Scharfetter-Gummel fluxes for different values of p with $g^* + r^* < 1$.

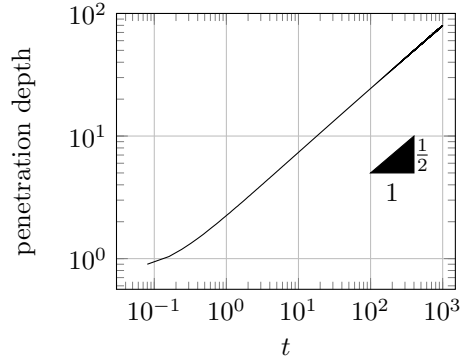


FIGURE 2.2 – Profiles of s in logarithmic scale with the Scharfetter-Gummel fluxes for $p = 2$ with $g^* + r^* > 1$.

2.7 Appendix A. Property of the B function

We prove in this Appendix the following result:

Lemma 2.7.1. *Under the hypothesis (2.9), there exists a positive constant τ such that*

$$B^c(x) = \frac{B(x) + B(-x)}{2} \geq \tau, \quad \forall x \in \mathbb{R}. \quad (2.53)$$

Chapitre 2. Comportement en temps long d'un schéma VF

Proof. To this end, we first notice that thanks to (2.9b) and (2.9d) we have

$$B(x) \geq -x.$$

Then, $\lim_{x \rightarrow -\infty} B(x) = +\infty$. Moreover, we have

$$B^c(x) \geq \frac{B(x)}{2} \quad \text{and} \quad B^c(x) \geq \frac{B(-x)}{2}.$$

Thus, we deduce that

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} B^c(x) = \lim_{x \rightarrow +\infty} B^c(x) = +\infty.$$

Finally, since $B(x) > 0$ for $x \in \mathbb{R}$ we conclude that there exists $\tau > 0$ such that (2.53) is satisfied. $\square$

Deuxième partie

Etude d'un modèle de croissance de biofilms

Chapitre 3

Convergence d'un schéma volumes finis pour un système de diffusion croisée modélisant la croissance de biofilms

Travail en collaboration avec Esther Daus et Ansgar Jüngel².

In this chapter we define and study an implicit Euler finite volume scheme for a cross-diffusion system modeling biofilm growth proposed in [66]. As established in [32] this system possesses a formal gradient-flow structure. The numerical scheme is based on a two-point flux approximations. It preserves the structure of the continuous model and we adapt at the discrete level the method used in [32] in order to prove the existence of nonnegative and bounded solutions to the scheme. Under suitable assumptions the convergence of the scheme is proved. Finally, we supplement the study through numerical experiments.

2. Institute for Analysis and Scientific Computing, Vienna University of Technology, Wiedner Hauptstrasse 8–10, 1040 Wien, Austria.

E-mail: esther.daus@tuwien.ac.at, juengel@tuwien.ac.at

Sommaire

3.1	Introduction	83
3.2	Numerical scheme and main results	86
3.2.1	Notation and assumptions	86
3.2.2	Numerical scheme	88
3.2.3	Main results	89
3.3	Existence of finite-volume solutions	91
3.4	A priori estimates	98
3.4.1	L^∞ estimate	98
3.4.2	Gradient estimate	99
3.4.3	Estimate for the time difference	100
3.5	Convergence of solutions	102
3.5.1	Compactness properties	102
3.6	Convergence of the scheme	105
3.7	Numerical experiments	109
3.8	Appendix A. Proof of Lemma 3.3.2	110

3.1 Introduction

Biofilms are organized, cooperating communities of microorganisms. They can be used for the treatment of wastewater [20, 59], as they help to reduce sulfate and to remove nitrogen. Typically, biofilms consist of several species such that multicomponent fluid models need to be considered. Recently, a multi-species biofilm model was introduced by Rahman, Sudarsan, and Eberl [66], which reflects the same properties as the single-species diffusion model of [34]. In particular, the model has a porous-medium-type degeneracy when the local biomass vanishes, and a singularity when the biomass reaches the maximum capacity, which guarantees the boundedness of the total mass. The model was derived formally from a space-time discrete random walk on a lattice in [66]. The global existence of weak solutions to the single-species model was proved in [35], while the global existence analysis for the multi-species cross-diffusion system can be found in [32]. The proof of the multi-species model is based on an entropy method which also provides the boundedness of the biomass hidden in its entropy structure. Numerical simulations were performed in [32, 66], but no numerical analysis was given. In this paper, we analyze an implicit Euler finite-volume scheme of the multi-species system that preserves the structure of the continuous model, namely positivity, boundedness, and discrete entropy production.

The model equations for the proportions of the biofilm species u_i are given by

$$\partial_t u_i + \operatorname{div} \mathcal{F}_i = r_i(u), \quad \mathcal{F}_i = -\alpha_i p(M)^2 \nabla \frac{u_i q(M)}{p(M)} \quad \text{in } \Omega, \quad t > 0, \quad i = 1, \dots, n, \quad (3.1)$$

where $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ($d \geq 1$) is a bounded domain, $\alpha_i > 0$ are some diffusion coefficients, and $M = \sum_{i=1}^n u_i$ is the total biomass. The proportions $u_i(x, t)$ are nonnegative and satisfy $M = \sum_{i=1}^n u_i(x, t) \leq 1$. We have assumed for simplicity that the functions p and q only depend on the total biomass and are the same for all species. The function $p \in C^1([0, 1])$ is decreasing such that $p(1) = 0$ and

$$q(M) = \frac{p(M)}{M} \int_0^M \frac{s^a}{(1-s)^b p(s)^2} ds, \quad M > 0, \quad (3.2)$$

where $a, b > 1$. Equations (3.1) are complemented by initial and mixed boundary conditions:

$$u_i(0) = u_i^0 \quad \text{in } \Omega, \quad i = 1, \dots, n, \quad (3.3)$$

$$u_i = u_i^D \quad \text{on } \Gamma^D, \quad \mathcal{F}_i \cdot \nu = 0 \quad \text{on } \Gamma^N, \quad (3.4)$$

where Γ^D is the contact boundary part, Γ^N is the union of isolating boundary parts, and $\partial\Omega = \Gamma^D \cup \Gamma^N$.

We recover the single-species model if all species are the same and diffusive with the same coefficient $\alpha_i = 1$ for $i = 1, \dots, n$. Indeed, summing (3.1) over $i = 1, \dots, n$, it follows that (without reactions)

$$\partial_t M = \operatorname{div} \left(p(M)^2 \nabla \frac{M q(M)}{p(M)} \right) = \operatorname{div} \left(\frac{M^a}{(1-M)^b} \nabla M \right),$$

which makes the degenerate-singular structure of the model evident. Equations (3.1) can be written as the cross-diffusion system

$$\partial_t u_i - \operatorname{div} \left(\sum_{j=1}^n A_{ij}(u) \nabla u_j \right) = r_i(u) \quad \text{in } \Omega, \quad t > 0, \quad (3.5)$$

where the nonlinear diffusion coefficients are defined by

$$A_{ij}(u) = \alpha_i \delta_{ij} p(M) q(M) + \alpha_i u_i (p(M) q'(M) - p'(M) q(M)), \quad i, j = 1, \dots, n. \quad (3.6)$$

Due to the cross-diffusion structure, standard techniques like the maximum principle and regularity theory cannot be used. Moreover, the diffusion matrix $(A_{ij}(u))$ is generally neither symmetric nor positive definite.

The key of the analysis, already observed in [32], is that system (3.5)-(3.6) allows for an entropy or formal gradient-flow structure. Indeed, introduce the (relative) entropy

$$\begin{aligned} H(u) &= \int_{\Omega} h^*(u|u^D) dx, \quad \text{where} \\ h^*(u|u^D) &= h(u) - h(u^D) - h'(u^D) \cdot (u - u^D), \\ h(u) &= \sum_{i=1}^n (u_i (\log u_i - 1) + 1) + \int_0^M \log \frac{q(s)}{p(s)} ds, \end{aligned}$$

defined on the set

$$\mathcal{O} = \left\{ u = (u_1, \dots, u_n) \in (0, \infty)^n : \sum_{i=1}^n u_i < 1 \right\}. \quad (3.7)$$

A computation gives the entropy identity [32, Theorem 1]

$$\frac{dH}{dt} + 2 \sum_{i=1}^n \alpha_i \int_{\Omega} p(M)^2 \left| \nabla \sqrt{\frac{u_i q(M)}{p(M)}} \right|^2 dx = \int_{\Omega} r(u) \cdot h'(u) dx, \quad (3.8)$$

where $r(u) = (r_1(u), \dots, r_n(u))$. Thus, in the absence of reactions, H is a Lyapunov functional along the solutions to (3.1). Moreover, the entropy production term (the second term on the left-hand side) can be bounded from below, with some constant $C > 0$, by

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^n \alpha_i \int_{\Omega} p(M)^2 \left| \nabla \sqrt{\frac{u_i q(M)}{p(M)}} \right|^2 dx \\ & \geq C \int_{\Omega} \frac{M^{a-1} |\nabla M|^2}{(1-M)^{1+b+\kappa}} dx + \sum_{i=1}^n \int_{\Omega} p(M) q(M) |\nabla \sqrt{u_i}|^2 dx, \end{aligned} \quad (3.9)$$

yielding suitable gradient estimates. Moreover, it implies that $(1-M)^{1-b-\kappa}$ is integrable, showing that $M < 1$ a.e. in Ω , $t > 0$, which excludes biofilm saturation and allows us to

define the nonlinear terms.

Another feature of the entropy method is that equations (3.1), written in the so-called entropy variables $w_i = \partial h^* / \partial u_i$, can be written as the formal gradient-flow system

$$\partial_t u - \operatorname{div}(B(w)\nabla w) = r(u)$$

with a positive semidefinite diffusion matrix B . Since the function $(h^*)' : \mathcal{O} \rightarrow \mathbb{R}^n$ is invertible [32, Lemma 6], u can be interpreted as a function of w , $u(w) = [(h^*)']^{-1}(w)$, mapping from $\mathbb{R}^n$ to $\mathcal{O}$. This gives automatically $u(w) \in \mathcal{O}$ and thus L^∞ bounds. This property, for another volume-filling model, was first observed in [18] and later generalized in [45].

The aim of this paper is to reproduce the above mentioned properties on the discrete level. For this, we suggest an implicit Euler scheme in time (with time step size Δt) and a finite-volume discretization in space (with grid size parameter Δx), based on two-point approximations. The challenge is to formulate the discrete fluxes and to prove a discrete analog of inequality (3.9). We suggest the discrete fluxes (3.19), where the coefficient $p(M)^2$ is replaced by $\max\{p(M_K), p(M_L)\}$, where K and L are two neighboring control volumes with a common edge (see Section 3.2.1 for details). Inequality (3.9) is proved on the discrete level by exploiting the properties of the functions p and q as in [32, Lemma 7] and distinguishing carefully the cases $M \leq 1 - \delta$ and $M > 1 - \delta$ for sufficiently small $\delta > 0$. Our results can be sketched as follows (see Section 3.2.3 for the precise statements):

- We prove the existence of finite-volume solutions with nonnegative discrete proportions $u_{i,K}$ and discrete total biomass $M_K < 1$ for all control volumes K .
- The discrete solution satisfies a discrete analog of the entropy equality (which becomes an inequality in (3.26)) and of the lower bound (3.9) for the entropy production.
- The discrete solution converges in a certain sense, for mesh sizes $(\Delta x, \Delta t) \rightarrow 0$, to a weak solution to (3.1).

There are several finite-volume schemes for other cross-diffusion systems in the mathematical literature. For instance, an upwind two-point flux approximation was used in [6] for a seawater intrusion model. A positivity-preserving two-point flux approximation for a two-species population system was suggested in [10]. The Laplacian structure of the population model was exploited in [58] to design a convergent linear finite-volume scheme, avoiding fully implicit approximations. Cross-diffusion systems with nonlocal (in space) terms modeling food chains and epidemics were approximated in [8, 9].

A finite-volume scheme for the biofilm growth, coupled with the computation of the surrounding fluid flow, was presented in [75]. Finite-volume-based simulations of biofilm processes in axisymmetric reactors were given in [71]. Closer to our numerical study is the work [65], where the multi-species biofilm model was discretized using finite volumes, but without any numerical analysis.

The paper is organized as follows. The notation and assumptions on the mesh as well as the main theorems are introduced in Section 3.2. The existence of discrete solutions is proved in Section 3.3, based on a topological degree argument. In this section, also the

lower bound for the entropy production and the discrete analog of the integrability of the singular term $(1 - M)^{1-b-\kappa}$ is shown. We deduce a gradient estimate and an estimate of the discrete time derivative in Section 3.4. These estimates allow us in Section 3.5 to apply the discrete compactness argument in [11] to conclude the a.e. convergence of the proportions and to show the convergence of the discrete gradient associated to $\nabla(u_i q(M)/p(M))$. The convergence of the scheme is then proved in Section 3.6. Finally, we present some numerical results obtained with the scheme in one dimension in space in Section 3.7.

3.2 Numerical scheme and main results

In this section, we introduce the numerical scheme and detail our main results.

3.2.1 Notation and assumptions

Let $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ be an open, bounded, polygonal domain with $\partial\Omega = \Gamma^D \cup \Gamma^N \in C^{0,1}$, $\Gamma^D \cap \Gamma^N = \emptyset$, and $\text{meas}(\Gamma^D) > 0$. We consider only two-dimensional domains Ω , but the generalization to higher dimensions is straightforward. An admissible mesh $\mathcal{M} = (\mathcal{T}, \mathcal{E}, \mathcal{P})$ of Ω is given by a family $\mathcal{T}$ of open polygonal control volumes (or cells), a family $\mathcal{E}$ of edges, and a family $\mathcal{P}$ of points $(x_K)_{K \in \mathcal{T}}$ associated to the control volumes and satisfying Definition 9.1 in [37]. This definition implies that the straight line between two centers of neighboring cells $\overline{x_K x_L}$ is orthogonal to the edge $\sigma = K|L$ between two cells K and L . The condition is satisfied by, for instance, triangular meshes whose triangles have angles smaller than $\pi/2$ [37, Examples 9.1] or Voronoï meshes [37, Example 9.2]. The family of edges $\mathcal{E}$ is assumed to consist of the interior edges $\sigma \in \mathcal{E}_{\text{int}}$ satisfying $\sigma \subset \Omega$ and the boundary edges $\sigma \in \mathcal{E}_{\text{ext}}$ fulfilling $\sigma \subset \partial\Omega$. We suppose that each exterior edge is an element of either the Dirichlet or Neumann boundary, i.e. $\mathcal{E}_{\text{ext}} = \mathcal{E}_{\text{ext}}^D \cup \mathcal{E}_{\text{ext}}^N$. For a given control volume $K \in \mathcal{T}$, we denote by $\mathcal{E}_K$ the set of its edges. This set splits into $\mathcal{E}_K = \mathcal{E}_{\text{int},K} \cup \mathcal{E}_{\text{ext},K}^D \cup \mathcal{E}_{\text{ext},K}^N$. For any $\sigma \in \mathcal{E}$, there exists at least one cell $K \in \mathcal{T}$ such that $\sigma \in \mathcal{E}_K$. We denote this cell by K_σ . When σ is an interior cell, $\sigma = K|L$, K_σ can be either K or L .

Let $\sigma \in \mathcal{E}$ an edge. We define

$$d_\sigma = \begin{cases} d(x_K, x_L) & \text{if } \sigma = K|L \in \mathcal{E}_{\text{int}}, \\ d(x_K, \sigma) & \text{if } \sigma \in \mathcal{E}_{\text{ext},K}, \end{cases}$$

where d is the Euclidean distance in $\mathbb{R}^2$. The transmissibility coefficient is defined by

$$\tau_\sigma = \frac{m(\sigma)}{d_\sigma}, \quad (3.10)$$

where $m(\sigma)$ denotes the Lebesgue measure of σ . We assume that the mesh satisfies the following regularity requirement: There exists $\xi > 0$ such that

$$d(x_K, \sigma) \geq \xi d_\sigma \quad \text{for all } K \in \mathcal{T}, \sigma \in \mathcal{E}_K. \quad (3.11)$$

3.2. Numerical scheme and main results

This hypothesis is needed to apply a discrete Sobolev inequality ; see [15].

The size of the mesh is denoted by $\Delta x = \max_{K \in \mathcal{T}} \text{diam}(K)$. Let $N_T \in \mathbb{N}$ be the number of time steps and $\Delta t = T/N_T$ be the time step size with the time steps $t_k = k\Delta t$ for $k = 0, \dots, N_T$. We denote by $\mathcal{D}$ an admissible space-time discretization of $Q_T = \Omega \times (0, T)$ composed of an admissible mesh $\mathcal{M}$ of Ω and the values $(\Delta t, N_T)$. The size of $\mathcal{D}$ is defined by $\eta = \max\{\Delta x, \Delta t\}$.

As it is usual for the finite-volume method, we introduce functions that are piecewise constant in space and time. A finite-volume scheme provides a vector $v_{\mathcal{T}} = (v_K)_{K \in \mathcal{T}} \in \mathbb{R}^{\#\mathcal{T}}$ of approximate values of a function v and the associate piecewise constant function, still denoted by $v_{\mathcal{T}}$,

$$v_{\mathcal{T}} = \sum_{K \in \mathcal{T}} v_K \mathbf{1}_K,$$

where $\mathbf{1}_K$ is the characteristic function of K . The vector $v_{\mathcal{M}}$, containing the approximate values in the control volumes and the approximate values on the Dirichlet boundary edges, is written as $v_{\mathcal{M}} = (v_{\mathcal{T}}, v_{\mathcal{E}^D})$, where $v_{\mathcal{E}^D} = (v_{\sigma})_{\sigma \in \mathcal{E}_{\text{ext}}^D} \in \mathbb{R}^{\#\mathcal{E}_{\text{ext}}^D}$. For a vector $v_{\mathcal{M}}$, we introduce for $K \in \mathcal{T}$ and $\sigma \in \mathcal{E}_K$ the notation

$$v_{K,\sigma} = \begin{cases} v_L & \text{if } \sigma = K|L \in \mathcal{E}_{\text{int},K}, \\ v_{\sigma} & \text{if } \sigma \in \mathcal{E}_{\text{ext},K}^D, \\ v_K & \text{if } \sigma \in \mathcal{E}_{\text{ext},K}^N, \end{cases} \quad (3.12)$$

and the discrete gradient

$$D_{\sigma}v = |Dv_{K,\sigma}|, \quad \text{where } D_{K,\sigma}v = v_{K,\sigma} - v_K. \quad (3.13)$$

The discrete $H^1(\Omega)$ seminorm and the discrete $H^1(\Omega)$ norm is then defined by

$$|v_{\mathcal{M}}|_{1,2,\mathcal{M}} = \left(\sum_{\sigma \in \mathcal{E}} \tau_{\sigma} (D_{\sigma}v)^2 \right)^{1/2}, \quad \|v\|_{1,2,\mathcal{M}} = \|v_{\mathcal{M}}\|_{0,2,\mathcal{M}} + |v_{\mathcal{M}}|_{1,2,\mathcal{M}},$$

where $\|\cdot\|_{0,p,\mathcal{M}}$ denotes the discrete $L^p(\Omega)$ norm

$$\|v_{\mathcal{M}}\|_{0,p,\mathcal{M}} = \left(\sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) |v_K|^p \right)^{1/p}, \quad \forall 1 \leq p < \infty.$$

We collect some auxiliary results related to the triangulation.

- Thanks to the regularity assumption (3.11) and the fact that Ω is two-dimensional, we have

$$\sum_{K \in \mathcal{T}} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} m(\sigma) d(x_K, \sigma) \leq 2 \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) = 2m(\Omega). \quad (3.14)$$

- We recall the discrete Poincaré-Sobolev inequality [15, Theorem 6]

$$\|v_{\mathcal{M}}\|_{0,1,\mathcal{M}} \leq \frac{C_P}{\xi^{1/2}} \|v_{\mathcal{M}}\|_{1,2,\mathcal{M}} \quad \text{for all } v_{\mathcal{M}} \in \mathbb{R}^{\#\mathcal{T} + \#\mathcal{E}_{\text{ext}}^D}, \quad (3.15)$$

with $v_{\sigma} = 0$ for every $\sigma \in \mathcal{E}_{\text{ext}}^D$ and where $C_P > 0$ depends on Ω but not on the mesh size.

3.2.2 Numerical scheme

We are now in the position to define the finite-volume discretization of (3.1)-(3.4). Let $\mathcal{D}$ be a finite-volume discretization of Q_T . The initial and boundary conditions are discretized by the averages

$$u_{i,K}^0 = \frac{1}{m(K)} \int_K u_i^0(x) dx \quad \text{for } K \in \mathcal{T}, \quad (3.16)$$

$$u_{i,\sigma}^D = \frac{1}{m(\sigma)} \int_\sigma u_i^D ds \quad \text{for } \sigma \in \mathcal{E}_{\text{ext}}^D, \quad i = 1, \dots, n. \quad (3.17)$$

We suppose for simplicity that the Dirichlet datum is constant on Γ^D such that $u_{i,\sigma}^D = u_i^D$ for $i = 1, \dots, n$. Furthermore, we set $u_{i,\sigma}^k = u_{i,\sigma}^D$ for $\sigma \in \mathcal{E}_{\text{ext}}^D$ at time t_k .

Let $u_{i,K}^k$ be the approximation of the mean value of $u_i(\cdot, t_k)$ in the cell K . Then the implicit Euler finite-volume scheme reads as

$$\frac{m(K)}{\Delta t} (u_{i,K}^k - u_{i,K}^{k-1}) + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{F}_{i,K,\sigma}^k = m(K) r_i(u_{i,K}^k), \quad (3.18)$$

$$\mathcal{F}_{i,K,\sigma}^k = -\tau_\sigma \alpha_i (p_\sigma^k)^2 D_{K,\sigma} \left(\frac{u_i^k q(M_K^k)}{p(M_K^k)} \right), \quad (3.19)$$

where $K \in \mathcal{T}$, $\sigma \in \mathcal{E}_K$, $i = 1, \dots, n$, and the value p_σ^k is defined by

$$p_\sigma^k = \max \{p(M_K^k), p(M_{K,\sigma}^k)\}, \quad (3.20)$$

recalling definition (3.10) for τ_σ and notation (3.12) for $M_{K,\sigma}$.

Observe that definitions (3.12) and (3.13) ensure that the discrete fluxes vanish on the Neumann boundary edges, i.e. $\mathcal{F}_{i,K,\sigma}^k = 0$ for all $\sigma \in \mathcal{E}_{\text{ext},K}^N$, $k \in \mathbb{N}$, and $i = 1, \dots, n$. This is consistent with the Neumann boundary conditions in (3.4).

For the convergence result, we need to define the discrete gradients. To this end, let $v_{\mathcal{M}} = (v_{\mathcal{T}}, v_{\mathcal{E}^D})$ as defined before. Then we introduce the piecewise constant approximation $v_{\mathcal{D}} = (u_{1,\mathcal{D}}, \dots, u_{n,\mathcal{D}})$ by

$$u_{i,\mathcal{D}}(x, t) = \sum_{K \in \mathcal{T}} u_{i,K}^k \mathbf{1}_K(x) \quad \text{for } x \in \Omega, \quad t \in (t_{k-1}, t_k], \quad (3.21)$$

$$u_{i,\mathcal{D}}(x, t) = u_i^D \quad \text{for } x \in \Gamma^D, \quad i = 1, \dots, n. \quad (3.22)$$

For given $K \in \mathcal{T}$ and $\sigma \in \mathcal{E}_K$, we define the cell $T_{K,\sigma}$ of the dual mesh by

- If $\sigma = K|L \in \mathcal{E}_{\text{int},K}$, then $T_{K,\sigma}$ is that cell (“diamond”) whose vertices are given by x_K , x_L , and the end points of the edge σ .
- If $\sigma \in \mathcal{E}_{\text{ext},K}$, then $T_{K,\sigma}$ is that cell (“triangle”) whose vertices are given by x_K and the end points of the edge σ .

An example of a construction of such a dual mesh can be found in [26]. The cells $T_{K,\sigma}$ define a partition of Ω and we notice with this definition of the dual mesh that

3.2. Numerical scheme and main results

- As the straight line between two neighboring centers of cells $\overline{x_K x_L}$ is orthogonal to the edge $\sigma = K|L$, it follows that

$$m(\sigma)d(x_K, x_L) = 2m(T_{K,\sigma}) \quad \text{for all } \sigma = K|L \in \mathcal{E}_{\text{int},K}. \quad (3.23)$$

- The property $m(T_{K,\sigma}) = m(T_{L,\sigma})$ for $\sigma = K|L \in \mathcal{E}_{\text{int},K}$ implies that

$$\sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} m(T_{K,\sigma}) \leq 2m(\Omega), \quad (3.24)$$

where the sum is over all edges $\sigma \in \mathcal{E}$, and to each given σ we associate the cell $K = K_\sigma$.

The approximate gradient of the piecewise constant function $v_{\mathcal{D}}$ in Q_T is defined by

$$\nabla^{\mathcal{D}} v_{\mathcal{D}}(x, t) = \frac{m(\sigma)}{m(T_{K,\sigma})} D_{K,\sigma} v^k \nu_{K,\sigma} \quad \text{for } x \in T_{K,\sigma}, \quad t \in (t_{k-1}, t_k],$$

where $D_{K,\sigma} v$ is given in (3.12) and $\nu_{K,\sigma}$ is the unit vector that is normal to σ and points outward of K .

3.2.3 Main results

Our first result guarantees that the scheme (3.16)-(3.20) possesses a solution and that it preserves the entropy dissipation property. Let us collect our assumptions:

- (H3-1) Domain: $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ is a bounded polygonal domain with Lipschitz boundary $\partial\Omega = \Gamma^D \cup \Gamma^N$, $\Gamma^D \cap \Gamma^N = \emptyset$, and $\text{meas}(\partial\Gamma^D) > 0$.
- (H3-2) Discretization: $\mathcal{D}$ is an admissible discretization of Q_T satisfying the regularity condition (3.11).
- (H3-3) Data : $u^0 = (u_1^0, \dots, u_n^0) \in L^2(\Omega; (0, \infty)^n)$, $u^D = (u_1^D, \dots, u_n^D) \in (0, \infty)^n$ is a constant vector, $\sum_{i=1}^n u_i^0 < 1$ in Ω , $\sum_{i=1}^n u_i^D < 1$, and $\alpha_1, \dots, \alpha_n > 0$, $a, b > 1$.
- (H3-4) Functions: $p \in C^1([0, 1]; [0, \infty))$ is decreasing, $p(1) = 0$, and there exist $c, \kappa > 0$ such that $\lim_{M \rightarrow 1} (-(1 - M)^{1+\kappa} p'(M)/p(M)) = c$. The function q is defined in (3.2).
- (H3-5) Reactions: $r_i(u) = u_i^D - u_i$ for $u \in (0, \infty)^n$, $i = 1, \dots, n$.

Remark 3.2.1 (Discussion of the hypotheses). The condition that the boundary data is constant on the Dirichlet boundary is made for simplification. We expect that non-constant Dirichlet data can be assumed but the estimates are getting more involved. In particular, we need a chain rule of the type

$$p(M)^2 \nabla \frac{u_i q(M)}{p(M)} = 2\sqrt{u_i p(M) q(M)} \nabla \sqrt{\frac{u_i q(M)}{p(M)}},$$

which is not easily extended to the discrete case. When u^D is constant, we employ the inequality

$$(v_{i,K,\sigma} - v_{i,K})(\log v_{i,K,\sigma} - \log v_{i,K}) \geq 4(\sqrt{v_{i,K,\sigma}} - \sqrt{v_{i,K}})^2$$

for $v_i = u_i q(M)/p(M)$, which resembles the chain rule, but the case of nonconstant u^D is more involved.

The assumption on the behavior of p when $M \rightarrow 1$ quantifies how fast this function decreases to zero as $M \rightarrow 1$. An integration implies the bound

$$p(M) \leq K_1 \exp(-K_2(1-M)^{-\kappa}) \quad \text{for } 0 < M < 1.$$

This condition is needed for technical reasons. The simple choice for the reaction terms is made for simplicity. $\square$

We introduce the discrete entropy

$$H(u_{\mathcal{M}}^k) = \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) h^*(u_K^k | u^D), \quad (3.25)$$

where

$$\begin{aligned} h^*(u_K^k | u^D) &= h(u_K^k) - h(u^D) - h'(u^D) \cdot (u_K^k - u^D) \\ \text{with } h(u_K^k) &= \sum_{i=1}^n (u_{i,K}^k (\log u_{i,K}^k - 1) + 1) + \int_0^{M_K^k} \log \frac{q(s)}{p(s)} ds \end{aligned}$$

is the relative entropy density.

Theorem 3.2.1 (Existence of discrete solutions). *Let hypotheses (H3-1)-(H3-5) hold. Then there exists a solution $(u_K^k)_{K \in \mathcal{T}, k=0, \dots, N_T}$ with $u_K^k = (u_{1,K}^k, \dots, u_{n,K}^k)$ to the scheme (3.16)-(3.20) satisfying*

$$u_{i,K}^k \geq 0, \quad M_K^k = \sum_{i=1}^n u_{i,K}^k < 1 \quad \text{for } K \in \mathcal{T}, \quad k \in \mathbb{N}.$$

Moreover, the discrete entropy dissipation inequality

$$H(u_{\mathcal{M}}^k) + \Delta t \sum_{i=1}^n I_i(u_{\mathcal{M}}^k) \leq H(u_{\mathcal{M}}^{k-1}), \quad k = 1, \dots, N_T, \quad (3.26)$$

holds with the entropy dissipation

$$I_i(u_{\mathcal{M}}^k) = \alpha_i \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma (p_\sigma^k)^2 \left| D_\sigma \left(\sqrt{\frac{u_i^k q(M^k)}{p(M^k)}} \right) \right|^2, \quad (3.27)$$

where the sum is over all edges $\sigma \in \mathcal{E}$, and to each given σ we associate the cell $K = K_\sigma$.

3.3. Existence of finite-volume solutions

For the convergence result, we introduce a family $(\mathcal{D}_\eta)_{\eta>0}$ of admissible space-time discretizations of Q_T indexed by the size $\eta = \max\{\Delta x, \Delta t\}$ of the mesh. We denote by $(\mathcal{M}_\eta)_{\eta>0}$ the corresponding meshes of Ω . For any $\eta > 0$, let $u_\eta = u_{\mathcal{D}_\eta}$ be the finite-volume solution constructed in Theorem 3.2.1 and set $\nabla^\eta = \nabla^{\mathcal{D}_\eta}$.

Theorem 3.2.2. *Let the hypothesis of Theorem 3.2.1 hold and assume $\alpha_i = 1$ for every $i \in \{1, \dots, n\}$. Let $(\mathcal{D}_\eta)_{\eta>0}$ be a family of admissible discretizations satisfying (3.11) uniformly in η . Furthermore, let $(u_\eta)_{\eta>0}$ be a family of finite-volume solutions to the scheme (3.16)-(3.20). Then there exists a function $u = (u_1, \dots, u_n)$ satisfying $u(x, t) \in \overline{\mathcal{O}}$ (see (3.7)) such that, up to a subsequence,*

$$\begin{aligned} u_{i,\eta} &\rightarrow u_i \quad \text{a.e. in } Q_T, \quad i = 1, \dots, n, \\ M_\eta &= \sum_{i=1}^n u_{i,\eta} \rightarrow M = \sum_{i=1}^n u_i < 1 \quad \text{a.e. in } Q_T, \\ \nabla^\eta \left(\frac{u_{i,\eta} q(M_\eta)}{p(M_\eta)} \right) &\rightharpoonup \nabla \left(\frac{u_i q(M)}{p(M)} \right) \quad \text{weakly in } L^2(Q_T). \end{aligned}$$

The limit function satisfies the boundary condition in the sense

$$\frac{u_i q(M)}{p(M)} - \frac{u_i^D q(M^D)}{p(M^D)} \in L^2(0, T; H_D^1(\Omega)),$$

with $H_D^1(\Omega) = \{v \in H^1(\Omega) : v \equiv 0 \text{ on } \Gamma^D\}$ and it is a weak solution to (3.1)-(3.4) in the sense

$$\begin{aligned} &\sum_{i=1}^n \left(\int_0^T \int_\Omega u_i \partial_t \phi_i dx dt + \int_\Omega u_i^0(x) \phi_i(x, 0) dx \right) \\ &= \sum_{i=1}^n \int_0^T \int_\Omega \left(p(M)^2 \nabla \left(\frac{u_i q(M)}{p(M)} \right) \cdot \nabla \phi_i - r_i(u) \phi_i \right) dx dt \end{aligned} \quad (3.28)$$

for all $\phi_i \in C_0^\infty(\Omega \times [0, T])$.

3.3 Existence of finite-volume solutions

In this section, we prove Theorem 3.2.1. We proceed by induction. For $k = 0$, we have $u^0 \in \mathcal{O}$ by assumption. Assume that there exists a solution $u_{\mathcal{M}}^{k-1}$ for some $k \in \{2, \dots, N_T\}$ such that

$$u_K^{k-1} \geq 0, \quad M_K^{k-1} = \sum_{i=1}^n u_{i,K}^{k-1} < 1 \quad \text{for } K \in \mathcal{T}.$$

The construction of a solution $u_{\mathcal{M}}^k$ is split in several steps.

Step 1. Definition of a linearized problem. We define the set

$$Z = \left\{ w_{\mathcal{M}} = (w_{1,\mathcal{M}}, \dots, w_{n,\mathcal{M}}) : w_{i,\sigma} = 0 \text{ for } \sigma \in \mathcal{E}_{\text{ext}}^D, \right. \\ \left. \|w_{i,\mathcal{M}}\|_{1,2,\mathcal{M}} < \infty \text{ for } i = 1, \dots, n \right\}.$$

Let $\varepsilon > 0$. We define the mapping $F_\varepsilon : Z \rightarrow \mathbb{R}^{\theta n}$ by $F_\varepsilon(w_{\mathcal{M}}) = w_{\mathcal{M}}^\varepsilon$, with $\theta = \#\mathcal{T} + \#\mathcal{E}^D$, where $w_{\mathcal{M}}^\varepsilon = (w_{1,\mathcal{M}}^\varepsilon, \dots, w_{n,\mathcal{M}}^\varepsilon)$ is the solution to the linear problem

$$\varepsilon \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \tau_\sigma D_{K,\sigma}(w_i^\varepsilon) = - \left(\frac{m(K)}{\Delta t} (u_{i,K} - u_{i,K}^{k-1}) + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{F}_{i,K,\sigma} - m(K)r_i(u_K) \right) \quad (3.29)$$

for $K \in \mathcal{T}$, $i = 1, \dots, n$ with

$$w_{i,\sigma}^\varepsilon = 0 \quad \text{for } \sigma \in \mathcal{E}_{\text{ext}}^D, \quad i = 1, \dots, n. \quad (3.30)$$

Here, $u_{i,K}$ is a function of $w_{i,K}$, defined by

$$w_{i,K} = \log \frac{u_{i,K} q(M_K)}{p(M_K)} - \log \frac{u_i^D q(M^D)}{p(M^D)} \quad i = 1, \dots, n, \quad (3.31)$$

and $\mathcal{F}_{i,K,\sigma}$ is defined in (3.19). Note that $\mathcal{F}_{i,K,\sigma}$ depends on $w_{\mathcal{M}}$ via $u_{\mathcal{M}}$ and M (see below). It is shown in [32, Lemma 6] that the mapping $\mathcal{O} \rightarrow \mathbb{R}^n$, $u_K \mapsto w_K$ is invertible, so the function $u_K = u(w_K)$ is well-defined and $u_K \in \mathcal{O}$. The proof in [32, Lemma 6] shows that $M_K \in (0, 1)$, showing that $\mathcal{F}_{i,K,\sigma}$ is well-defined too. Since $M_K = \sum_{i=1}^n u_{i,K}$, we infer that $0 \leq u_{i,K} < 1$.

We note that definitions (3.12) and (3.13) ensure that $D_{K,\sigma}(w_i^\varepsilon) = 0$ for all $\sigma \in \mathcal{E}_{\text{ext},K}^N$. The existence of a unique solution w_K^ε to the linear scheme (3.29)-(3.30) is now a consequence of [37, Lemma 3.2].

Step 2. Continuity of F_ε . We fix $i \in \{1, \dots, n\}$. We derive first an a priori estimate for $w_{i,\mathcal{M}}^\varepsilon$. Multiplying (3.29) by $w_{i,K}^\varepsilon$ and summing over $K \in \mathcal{T}$, we arrive at

$$\varepsilon \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma D_{K,\sigma}(w_i^\varepsilon) w_{i,K}^\varepsilon = - \sum_{K \in \mathcal{T}} \frac{m(K)}{\Delta t} (u_{i,K} - u_{i,K}^{k-1}) w_{i,K}^\varepsilon \quad (3.32)$$

$$- \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \mathcal{F}_{i,K,\sigma} w_{i,K}^\varepsilon + \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) r_i(u_K) w_{i,K}^\varepsilon \\ =: J_1 + J_2 + J_3. \quad (3.33)$$

For the left-hand side, we use the symmetry of τ_σ with respect to $\sigma = K|L$ and the discrete Poincaré inequality [37, Lemma 3.1]

$$\varepsilon \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma D_{K,\sigma}(w_i^\varepsilon) w_{i,K}^\varepsilon = \varepsilon \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} \tau_\sigma (D_\sigma w_i^\varepsilon)^2 = \varepsilon \|w_{i,\mathcal{M}}^\varepsilon\|_{1,2,\mathcal{M}}^2 \geq C \varepsilon \|w_{i,\mathcal{M}}^\varepsilon\|_{1,2,\mathcal{M}}^2.$$

3.3. Existence of finite-volume solutions

By the Cauchy-Schwarz inequality and definition (3.19) of $\mathcal{F}_{i,K,\sigma}$, we find that

$$\begin{aligned} J_1 &\leq \frac{1}{\Delta t} \left(\sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) (u_{i,K} - u_{i,K}^{k-1})^2 \right)^{1/2} \left(\sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) (w_{i,K}^\varepsilon)^2 \right)^{1/2} \\ &\leq \frac{1}{\Delta t} \|u_{i,\mathcal{M}} - u_{i,\mathcal{M}}^{k-1}\|_{0,2,\mathcal{M}} \|w_{i,\mathcal{M}}^\varepsilon\|_{1,2,\mathcal{M}}, \\ J_2 &\leq \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma \alpha_i p_\sigma^2 D_\sigma \left(\frac{u_i q(M)}{p(M)} \right) D_\sigma w_i^\varepsilon \\ &\leq \alpha_i \left\{ \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} \tau_\sigma p_\sigma^4 \left(D_\sigma \left(\frac{u_i q(M)}{p(M)} \right) \right)^2 \right\}^{1/2} \left(\sum_{\sigma \in \mathcal{E}} \tau_\sigma (D_\sigma w_i^\varepsilon)^2 \right)^{1/2}. \end{aligned}$$

Since $M_K \in (0, 1)$ for all $K \in \mathcal{T}$, $u_{i,K} q(M_K)/p(M_K)$ is bounded. Moreover, $p_\sigma \leq p(0)$ as p is decreasing. Hence, there exists a constant $C(M) > 0$ which is independent of $w_{i,\mathcal{M}}^\varepsilon$ such that $J_2 \leq C(M) \|w_{i,\mathcal{M}}^\varepsilon\|_{1,2,\mathcal{M}}$. This constant does not depend on $u_{i,K} \in [0, 1]$. Finally, again by the Cauchy-Schwarz inequality, $J_3 \leq \|r_i(u_{i,\mathcal{M}})\|_{0,2,\mathcal{M}} \|w_{i,\mathcal{M}}^\varepsilon\|_{1,2,\mathcal{M}}$. Inserting these estimations into (3.33) yields

$$\varepsilon \|w_{i,\mathcal{M}}^\varepsilon\|_{1,2,\mathcal{M}} \leq C(M), \quad (3.34)$$

where $C(M) > 0$ is independent of $w_{i,\mathcal{M}}^\varepsilon$.

We turn to the proof of the continuity of F_ε . Let $(w_{\mathcal{M}}^m)_{m \in \mathbb{N}} \in Z$ be such that $w_{\mathcal{M}}^m \rightarrow w_{\mathcal{M}}$ as $m \rightarrow \infty$. Estimate (3.34) shows that $w_{\mathcal{M}}^{\varepsilon,m} = F_\varepsilon(w_{\mathcal{M}}^m)$ is bounded uniformly in $m \in \mathbb{N}$. Thus, there exists a subsequence of $(w_{\mathcal{M}}^{\varepsilon,m})$ which is not relabeled such that $w_{\mathcal{M}}^{\varepsilon,m} \rightarrow w_{\mathcal{M}}^\varepsilon$ as $m \rightarrow \infty$. Passing to the limit $m \rightarrow \infty$ in the scheme (3.29)-(3.30) and taking into account the continuity of the nonlinear functions, we see that $w_{i,\mathcal{M}}^\varepsilon$ is a solution to (3.29)-(3.30) and $w_{\mathcal{M}}^\varepsilon = F_\varepsilon(w_{\mathcal{M}})$. Because of the uniqueness of the limit function, the whole sequence converges, which proves the continuity.

Step 3. Existence of a fixed point. We claim that the map F_ε admits a fixed point. We use a topological degree argument [33], i.e., we prove that $\delta(I - F_\varepsilon, Z_R, 0) = 1$, where δ is the Brouwer topological degree and

$$Z_R = \{w_{\mathcal{M}} \in Z : \|w_{i,\mathcal{M}}\|_{1,2,\mathcal{M}} < R \text{ for } i = 1, \dots, n\}.$$

Since δ is invariant by homotopy, it is sufficient to prove that any solution $(w_{\mathcal{M}}^\varepsilon, \rho) \in \overline{Z}_R \times [0, 1]$ to the fixed-point equation $w_{\mathcal{M}}^\varepsilon = \rho F_\varepsilon(w_{\mathcal{M}}^\varepsilon)$ satisfies $(w_{\mathcal{M}}^\varepsilon, \rho) \notin \partial Z_R \times [0, 1]$ for sufficiently large values of $R > 0$. Let $(w_{\mathcal{M}}^\varepsilon, \rho)$ be a fixed point and $\rho \neq 0$, the case $\rho = 0$ is clear. Then $w_{i,\mathcal{M}}^\varepsilon/\rho$ solves

$$\varepsilon \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \tau_\sigma D_{K,\sigma}(w_i^\varepsilon) = -\rho \left(\frac{m(K)}{\Delta t} (u_{i,K}^\varepsilon - u_{i,K}^{k-1}) + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{F}_{i,K,\sigma}^\varepsilon - m(K) r_i(u_K^\varepsilon) \right), \quad (3.35)$$

where $\mathcal{F}_{i,K,\sigma}^\varepsilon$ is defined as in (3.19) with $u_{\mathcal{M}}$ replaced by $u_{\mathcal{M}}^\varepsilon$. The following discrete entropy inequality is the key argument.

Lemma 3.3.1 (Discrete entropy inequality). *Let the assumptions of Theorem 3.2.1 hold. Then for any $\rho \in (0, 1]$ and $\varepsilon \in (0, 1)$,*

$$\rho H(u_{\mathcal{M}}^\varepsilon) + \varepsilon \Delta t \sum_{i=1}^n \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma (D_\sigma w_i^\varepsilon)^2 + \rho \Delta t \sum_{i=1}^n I_i(u_{\mathcal{M}}^\varepsilon) \leq \rho H(u_{\mathcal{M}}^{k-1}),$$

$$\text{where } I_i(u_{\mathcal{M}}^\varepsilon) = \alpha_i \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma (p_\sigma^\varepsilon)^2 \left(D_\sigma \left(\sqrt{\frac{u_i^\varepsilon q(M^\varepsilon)}{p(M^\varepsilon)}} \right) \right)^2$$

with obvious notations for p_σ^ε and M^ε .

Proof. We multiply (3.35) by $\Delta t w_{i,K}^\varepsilon$ and sum over $i = 1, \dots, n$ and $K \in \mathcal{T}$. This gives

$$\begin{aligned} \varepsilon \Delta t \sum_{i=1}^n \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma D_{K,\sigma} (w_i^\varepsilon) w_{i,K}^\varepsilon + J_4 + J_5 &= J_6, \quad \text{where} \\ J_4 &= \rho \sum_{i=1}^n \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) (u_{i,K}^\varepsilon - u_{i,K}^{k-1}) w_{i,K}^\varepsilon, \\ J_5 &= \rho \Delta t \sum_{i=1}^n \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \mathcal{F}_{i,K,\sigma}^\varepsilon w_{i,K}^\varepsilon, \\ J_6 &= \rho \Delta t \sum_{i=1}^n \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) r_i(u_K^\varepsilon) w_{i,K}^\varepsilon. \end{aligned}$$

By the symmetry of τ_σ with respect to $\sigma = K|L$, the left-hand side is written as

$$\varepsilon \Delta t \sum_{i=1}^n \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma D_{K,\sigma} (w_i^\varepsilon) w_{i,K}^\varepsilon = \varepsilon \Delta t \sum_{i=1}^n \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} \tau_\sigma (D_\sigma w_i^\varepsilon)^2.$$

3.3. Existence of finite-volume solutions

Inserting definition (3.31) of $w_{i,K}^\varepsilon$ and using the convexity of $u \mapsto u(\log u - 1)$, we obtain

$$\begin{aligned}
J_4 &= \rho \sum_{i=1}^n \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) (u_{i,K}^\varepsilon - u_{i,K}^{k-1}) \left(\log u_{i,K}^\varepsilon + \log \frac{q(M_K^\varepsilon)}{p(M_K^\varepsilon)} \right) \\
&\quad - \rho \sum_{i=1}^n \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) (u_{i,K}^\varepsilon - u_{i,K}^{k-1}) \left(\log u_i^D + \log \frac{q(M^D)}{p(M^D)} \right) \\
&\geq \rho \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) (h(u_K^\varepsilon) - h(u_K^{k-1}) - \rho \sum_{i=1}^n m(K) (u_{i,K}^\varepsilon - u_{i,K}^{k-1}) \frac{\partial h}{\partial u_i}(u^D)) \\
&= \rho \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) (h(u_K^\varepsilon) - (u_K^\varepsilon - u^D) \cdot h'(u^D)) \\
&\quad - \rho \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) (h(u_K^{k-1}) - (u_K^{k-1} - u^D) \cdot h'(u^D)) \\
&= \rho \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) (h^*(u_K^\varepsilon | u^D) - h^*(u_K^{k-1} | u^D)) = \rho (H(u_{\mathcal{M}}^\varepsilon) - H(u_{\mathcal{M}}^{k-1})).
\end{aligned}$$

We abbreviate $v_{i,K}^\varepsilon = u_{i,K}^\varepsilon q(M_K^\varepsilon)/p(M_K^\varepsilon)$. Then

$$\begin{aligned}
J_5 &= -\rho \Delta t \sum_{i=1}^n \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \mathcal{F}_{i,K,\sigma}^\varepsilon D_{K,\sigma}(w_i^\varepsilon) \\
&= \rho \Delta t \sum_{i=1}^n \alpha_i \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma(p_\sigma^\varepsilon)^2 (v_{i,K,\sigma}^\varepsilon - v_{i,K}^\varepsilon) (\log v_{i,K,\sigma}^\varepsilon - \log v_{i,K}^\varepsilon).
\end{aligned}$$

The elementary inequality $(x - y)(\log x - \log y) \geq 4(\sqrt{x} - \sqrt{y})^2$ for any $x, y > 0$ implies that

$$J_5 \geq 4\rho \Delta t \sum_{i=1}^n \alpha_i \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma(p_\sigma^\varepsilon)^2 \left(D_\sigma \left(\sqrt{\frac{u_i^\varepsilon q(M^\varepsilon)}{p(M^\varepsilon)}} \right) \right)^2.$$

Finally, assumption (H3-5) leads to

$$\begin{aligned}
J_6 &= -\rho \Delta t \sum_{i=1}^n \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) (u_{i,K}^\varepsilon - u_i^D) (\log u_{i,K}^\varepsilon - \log u_i^D) \\
&\quad - \rho \Delta t \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) (M_{i,K}^\varepsilon - M_i^D) \left(\log \frac{q(M_K^\varepsilon)}{p(M_K^\varepsilon)} - \log \frac{q(M^D)}{p(M^D)} \right).
\end{aligned}$$

Then by convexity of $u \mapsto u(\log u - 1) + 1$ and the monotonicity of $M \mapsto q(M)/p(M)$, see [32, Lemma 7], we obtain

$$J_6 \leq 0.$$

Putting all the estimations together completes the proof. $\square$

We proceed with the topological degree argument. The previous lemma implies that

$$\varepsilon \Delta t \sum_{i=1}^n \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma (D_\sigma w_i^\varepsilon)^2 \leq \rho H(u_{\mathcal{M}}^{k-1}) \leq H(u_{\mathcal{M}}^{k-1})$$

or $|w_{i,\mathcal{M}}^\varepsilon|_{1,2,\mathcal{M}}^2 \leq H(u_{\mathcal{M}}^{k-1})/(\varepsilon \Delta t)$. By the discrete Poincaré inequality in the version of [37, Lemma 3.1],

$$\|w_{i,\mathcal{M}}^\varepsilon\|_{1,2,\mathcal{M}} \leq (\text{diam}(\Omega) + 1) |w_{i,\mathcal{M}}^\varepsilon|_{1,2,\mathcal{M}} < R = \frac{\text{diam}(\Omega) + 1}{\sqrt{\varepsilon \Delta t}} H(u_{\mathcal{M}}^{k-1}) + 1. \quad (3.36)$$

We conclude that $w_{\mathcal{M}}^\varepsilon \notin \partial Z_R$ and $\delta(I - F_\varepsilon, Z_R, 0) = 1$. Thus, F_ε admits a fixed point.

Step 4. Limit $\varepsilon \rightarrow 0$. We recall that $u_{\mathcal{M}}^\varepsilon \in \overline{\mathcal{O}}$. Thus, up to a subsequence, $u_{\mathcal{M}}^\varepsilon \rightarrow u_{\mathcal{M}} \in \overline{\mathcal{O}}$ as $\varepsilon \rightarrow 0$. We deduce from (3.34) that there exists a subsequence (not relabeled) such that $\varepsilon w_{i,K}^\varepsilon \rightarrow 0$ for any $K \in \mathcal{T}$ and $i = 1, \dots, n$. In order to pass to the limit in the fluxes $\mathcal{F}_{i,K,\sigma}^\varepsilon$, we need to show that $M_K^\varepsilon = \sum_{i=1}^n u_{i,K}^\varepsilon < 1$ for any $K \in \mathcal{T}$. To this end, we first state an estimate of the entropy dissipation from below.

Lemma 3.3.2 (Lower bound for the entropy dissipation). *Let the assumptions of Theorem 3.2.1 hold. Then there exists a constant $C_1 > 0$ depending on p , a and $\alpha = \min\{\alpha_1, \dots, \alpha_n\}$ such that*

$$\sum_{i=1}^n I_i(u_{\mathcal{M}}^\varepsilon) \geq \alpha \sum_{i=1}^n \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma \beta_{K,\sigma} (D_\sigma \sqrt{u_i^\varepsilon})^2 + C_1 \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma \frac{(M_\sigma^\varepsilon)^{a-1} (D_\sigma M^\varepsilon)^2}{(1 - M_\sigma^\varepsilon)^{1+b+\kappa}}, \quad (3.37)$$

where $M_\sigma^\varepsilon = \theta_\sigma M_K^\varepsilon + (1 - \theta_\sigma) M_{K,\sigma}^\varepsilon$ for some $\theta_\sigma \in (0, 1)$,

$$\beta_{K,\sigma} = \min \{p(M_K^\varepsilon)q(M_K^\varepsilon), p(M_{K,\sigma}^\varepsilon)q(M_{K,\sigma}^\varepsilon)\},$$

and we recall that $I_i(u_{\mathcal{M}}^\varepsilon)$ is defined in (3.27).

The proof is quite technical and therefore transferred to Appendix 3.8.

Corollary 3.3.1 (Uniform bound for the singular term). *Let the assumptions of Theorem 3.2.1 hold. There exists a constant $C_2 > 0$ depending on $H(u_{\mathcal{M}}^{k-1})$, M^D , Ω , b , κ , and C_1 (but not on ε or Δx) such that*

$$\|(1 - M_{\mathcal{M}}^\varepsilon)^{1-b-\kappa}\|_{0,1,\mathcal{M}} \leq C_2. \quad (3.38)$$

Proof. The idea is to exploit the second term on the right-hand side of (3.37). For this, we introduce

$$J = \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma \frac{(M_\sigma^\varepsilon)^{a-1} (D_\sigma M^\varepsilon)^2}{(1 - M_\sigma^\varepsilon)^{1+b+\kappa}}.$$

3.3. Existence of finite-volume solutions

Then

$$\begin{aligned}
J &\geq \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma \mathbf{1}_{\{M_\sigma^\varepsilon \geq M^D\}} \frac{(M_\sigma^\varepsilon)^{a-1} (D_\sigma M^\varepsilon)^2}{(1 - M_\sigma^\varepsilon)^{1+b+\kappa}} \\
&\geq (M^D)^{a-1} \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma \mathbf{1}_{\{M_\sigma^\varepsilon \geq M^D\}} \frac{(D_\sigma M^\varepsilon)^2}{(1 - M_\sigma^\varepsilon)^{1+b+\kappa}} \\
&\geq (M^D)^{a-1} \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma \mathbf{1}_{\{M_\sigma^\varepsilon \geq M^D\}} \left[\frac{(D_\sigma M^\varepsilon)}{(1 - \min\{M_K^\varepsilon, M_{K,\sigma}^\varepsilon\})^{(1+b+\kappa)/2}} \right]^2.
\end{aligned}$$

Next, we claim that

$$(f(x) - f(y))^2 \leq [f'(\min\{x, y\}) (x - y)]^2$$

for any $x, y \in [0, 1)$, where $f \in C^2([0, 1))$ is a convex function. Indeed, let $x < y$. The convexity of f implies that $f'(x)(x - y) \geq f(x) - f(y)$. The case $x \geq y$ is treated in a similar way, proving the claim. Applying this result to the function $f(x) = (1 - x)^{(1-b-\kappa)/2}$, it follows that

$$\begin{aligned}
J &\geq \frac{4(M^D)^{a-1}}{(b + \kappa - 1)^2} \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma \mathbf{1}_{\{M_\sigma^\varepsilon \geq M^D\}} (D_\sigma ((1 - M^\varepsilon)^{(1-b-\kappa)/2}))^2 \\
&\geq \frac{4(M^D)^{a-1}}{(b + \kappa - 1)^2} \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma \mathbf{1}_{\{\max\{M_K^\varepsilon, M_{K,\sigma}^\varepsilon\} \geq M^D\}} (D_\sigma ((1 - M^\varepsilon)^{(1-b-\kappa)/2}))^2 \\
&= \frac{4(M^D)^{a-1}}{(b + \kappa - 1)^2} \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma \mathbf{1}_{\{\max\{M_K^\varepsilon, M_{K,\sigma}^\varepsilon\} \geq M^D\}} \\
&\quad \times [D_\sigma ((1 - M^\varepsilon)^{(1-b-\kappa)/2} - (1 - M^D)^{(1-b-\kappa)/2})]^2.
\end{aligned}$$

In the last step, we used the fact that M^D is constant, so that $D_\sigma(1 - M^D)^{(1-b-\kappa)/2} = 0$. On the set $\{\max\{M_K^\varepsilon, M_{K,\sigma}^\varepsilon\} \geq M^D\}$, it holds that

$$(1 - \max\{M_K^\varepsilon, M_{K,\sigma}^\varepsilon\})^{(1-b-\kappa)/2} \geq (1 - M^D)^{(1-b-\kappa)/2}.$$

We infer that, using again the discrete Poincaré inequality [37, Lemma 3.1],

$$\begin{aligned}
J &\geq \frac{4(M^D)^{a-1}}{(1 - b - \kappa)^2} \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma [D_\sigma ((1 - M^\varepsilon)^{(1-b-\kappa)/2} - (1 - M^D)^{(1-b-\kappa)/2})_+]^2 \\
&\geq \frac{4(M^D)^{a-1}}{\text{diam}(\Omega)^2 (1 - b - \kappa)^2} \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) [((1 - M^\varepsilon)^{(1-b-\kappa)/2} - (1 - M^D)^{(1-b-\kappa)/2})_+]^2,
\end{aligned}$$

where $z_+ = \max\{0, z\}$. This shows that there exist constants $c_1(M^D) > 0$ and $c_2(M^D)$ such that

$$J \geq c_1(M^D) \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K)(1 - M_K^\varepsilon)^{1-b-\kappa} - c_2(M^D).$$

On the other hand, we know that J is bounded uniformly in ε , by Lemma 3.3.2. This finishes the proof. $\square$

We know that $M_K^\varepsilon \rightarrow M_K$ as $\varepsilon \rightarrow 0$ for all $K \in \mathcal{T}$. Corollary 3.3.1 and Fatou's lemma imply that $\|(1 - M_K)^\varepsilon\|_{0,1,\mathcal{M}} \leq C_2$ with the same constant C_2 as in (3.38). This shows that $M_K < 1$ for all $K \in \mathcal{T}$. We can perform the limit $\varepsilon \rightarrow 0$ in (3.35), which completes the proof of Theorem 3.2.1.

3.4 A priori estimates

In this section, we establish some uniform estimates for the solutions to the scheme (3.16)-(3.20).

3.4.1 L^∞ estimate

First in the case where all the diffusion coefficients are equals we establish a L^∞ bound for the total biomass strictly smaller than one and depending only on the initial and boundary conditions.

Lemma 3.4.1 (L^∞ estimate). *Let the assumptions of Theorem 3.2.1 hold and assume that $\alpha_i = 1$ for every $i \in \{1, \dots, n\}$. Then the following bound holds*

$$M_K^k \leq M^*, \quad \forall K \in \mathcal{T}, k \in \{1, \dots, N_T\}, \quad (3.39)$$

where $M^* = \sup_{x \in \Omega} \{M^D, M^0(x)\} < 1$.

Proof. We proceed by induction. For $k = 0$, the upper bound (3.39) holds because of our assumptions. Assume, for some $k \in \{2, \dots, N_T\}$, that $M_K^{k-1} \leq M^*$ for all $K \in \mathcal{T}$. Let $M_K^k = \max\{M_L^k : L \in \mathcal{T}\}$ for some $K \in \mathcal{T}$ and assume that $M_K^k > M^*$. Then, summing (3.18) over i we obtain thanks to the assumption on the diffusion coefficients that

$$m(K) \frac{M_K^k - M_K^{k-1}}{\Delta t} + \sum_{i=1}^n \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{F}_{i,K,\sigma}^k = m(K) (M^D - M_K^k), \quad \forall K \in \mathcal{T}.$$

Multiplying the previous equation by $[M_K^k - M^*]_+$ where $z_+ = \max\{0, z\}$ and using $\frac{1}{2}(x^2 - y^2) \leq x(x - y)$ we obtain

$$\begin{aligned} \frac{m(K)}{2\Delta t} \left([M_K^k - M^*]_+^2 - [M_K^{k-1} - M^*]_+^2 \right) + \sum_{i=1}^n \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{F}_{i,K,\sigma}^k [M_K^k - M^*]_+ \\ \leq m(K) (M^D - M_K^k) [M_K^k - M^*]_+. \end{aligned}$$

Then thanks to the induction hypothesis and the definition of M^* we have

$$\frac{m(K)}{2\Delta t} [M_K^k - M^*]_+^2 + \sum_{i=1}^n \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{F}_{i,K,\sigma}^k [M_K^k - M^*]_+ \leq 0. \quad (3.40)$$

Moreover, we notice that

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{F}_{i,K,\sigma}^k [M_K^k - M^*]_+ \\ = - \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \tau_\sigma (p_\sigma^k)^2 D_{K,\sigma} \left(\frac{M^k q(M^k)}{p(M^k)} \right) [M_K^k - M^*]_+. \end{aligned}$$

Since by definition (3.2) the function $M \mapsto M q(M)/p(M)$ is increasing we deduce that $D_{K,\sigma}(M^k q(M^k)/p(M^k)) \leq 0$ for every $\sigma \in \mathcal{E}_K$. Hence, we conclude from (3.40) the following inequality

$$\frac{m(K)}{2\Delta t} [M_K^k - M^*]_+^2 \leq 0,$$

which leads to a contradiction and concludes the proof. $\square$

3.4.2 Gradient estimate

We deduce the gradient estimate from the entropy inequality (3.26).

Lemma 3.4.2 (Gradient estimate). *Let the assumptions of Theorem 3.2.1 hold and assume that $\alpha_i = 1$ for every $i \in \{1, \dots, n\}$. Then there exists a constant $C_3 > 0$ only depending on $H(u_{\mathcal{M}}^0)$, Ω and the upper bound M^* defined in Lemma 3.4.1 such that*

$$\sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \left\| \frac{u_{i,\mathcal{M}}^k q(M_{\mathcal{M}}^k)}{p(M_{\mathcal{M}}^k)} \right\|_{1,2,\mathcal{M}}^2 \leq C_3, \quad \forall 1 \leq i \leq n.$$

Proof. Let $i \in \{1, \dots, n\}$, thanks to the uniform L^∞ bound for $u_{\mathcal{M}}^k$, it is sufficient to show that there exists a constant $C > 0$ independent of Δx and Δt such that

$$J = \sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \left| \frac{u_{i,\mathcal{M}}^k q(M_{\mathcal{M}}^k)}{p(M_{\mathcal{M}}^k)} \right|_{1,2,\mathcal{M}}^2 \leq C.$$

To prove this estimate, we start from the following bound which comes from the discrete entropy inequality in Lemma 3.3.1

$$\sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma \left(D_\sigma \left(\sqrt{\frac{u_i^k q(M^k)}{p(M^k)}} \right) \right)^2 \leq \frac{H(u_{\mathcal{M}}^0)}{p(M^*)^2}. \quad (3.41)$$

Using the inequality $x^2 - y^2 \leq 2x(x - y)$ and $u_{i,K,\sigma}^k \leq 1$, we can write

$$\begin{aligned} J &= \sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma \left(D_\sigma \left(\frac{u_i^k q(M^k)}{p(M^k)} \right) \right)^2 \\ &\leq 2 \sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma \frac{u_{i,K,\sigma}^k q(M_{K,\sigma}^k)}{p(M_{K,\sigma}^k)} \left(D_\sigma \left(\sqrt{\frac{u_i^k q(M^k)}{p(M^k)}} \right) \right)^2 \\ &\leq 2 \sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma \frac{q(M_{K,\sigma}^k)}{p(M_{K,\sigma}^k)} \left(D_\sigma \left(\sqrt{\frac{u_i^k q(M^k)}{p(M^k)}} \right) \right)^2. \end{aligned}$$

Thanks to [32, Lemma 7] we know that the function $x \mapsto \sqrt{q(x)/p(x)}$ is strictly increasing for $x \in (0, 1)$. We use Lemma 3.4.1 to conclude that

$$J \leq \frac{2q(M^*)}{p(M^*)} \sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma \left(D_\sigma \left(\sqrt{\frac{u_i^k q(M^k)}{p(M^k)}} \right) \right)^2.$$

In view of (3.41), this shows the lemma. $\square$

3.4.3 Estimate for the time difference

We wish to apply the compactness result from [11]. Therefore, we need to prove a uniform estimate on the difference $u_{i,K}^k - u_{i,K}^{k-1}$.

Lemma 3.4.3 (Time estimate). *Let the assumptions of Theorem 3.2.1 hold and assume that $\alpha_i = 1$ for every $i \in \{1, \dots, n\}$. Then there exists a constant $C_4 > 0$ not depending on Δx and Δt such that for all $i \in \{1, \dots, n\}$ and $\phi \in C_0^\infty(Q_T)$,*

$$\sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \sum_{K \in \mathcal{T}} (u_{i,K}^k - u_{i,K}^{k-1}) \phi(x_K, t_k) \leq C_4 \Delta t \|\nabla \phi\|_{L^\infty(Q_T)}.$$

Proof. We abbreviate $\phi_K^k = \phi(x_K, t_k)$. Let $i \in \{1, \dots, n\}$, we multiply (3.18) by $\Delta t \phi_K^k$ and sum over $K \in \mathcal{T}$ and $k = 1, \dots, N_T$

$$\begin{aligned} &\sum_{k=1}^{N_T} \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) (u_{i,K}^k - u_{i,K}^{k-1}) \phi_K^k \\ &= - \sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \mathcal{F}_{i,K,\sigma}^k \phi_K^k + \sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) r_i(u_K^k) \phi_K^k \\ &=: J_7 + J_8. \end{aligned}$$

3.4. A priori estimates

Inserting the definition of $\mathcal{F}_{i,K,\sigma}^k$ and using the symmetry of τ_σ with respect to $\sigma = K|L$, it follows that

$$J_7 = \sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma (p_\sigma^k)^2 D_{K,\sigma} \left(\frac{u_i^k q(M^k)}{p(M^k)} \right) D\phi_K^k =: J_{71} + J_{72},$$

where

$$\begin{aligned} J_{71} &= \sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma (p_\sigma^k)^2 D_{K,\sigma} \left(\frac{u_i^k q(M^k)}{p(M^k)} \right) D\phi_K^k \mathbf{1}_{\{M_K^k \geq M_{K,\sigma}^k\}}, \\ J_{72} &= \sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma (p_\sigma^k)^2 D_{K,\sigma} \left(\frac{u_i^k q(M^k)}{p(M^k)} \right) D\phi_K^k \mathbf{1}_{\{M_K^k < M_{K,\sigma}^k\}}. \end{aligned}$$

Using the Cauchy-Schwarz inequality, $|J_{71}| \leq J_{711} J_{712}$, where

$$\begin{aligned} J_{711} &= \left(\sum_{k=1}^{N_T} \Delta t |\phi_{\mathcal{M}}^k|_{1,2,\mathcal{M}}^2 \right)^{1/2}, \\ J_{712} &= \left(\sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma (p_\sigma^k)^4 \left[D_\sigma \left(\frac{u_i^k q(M^k)}{p(M^k)} \right) \right]^2 \mathbf{1}_{\{M_K^k \geq M_{K,\sigma}^k\}} \right)^{1/2}. \end{aligned}$$

It follows from the mesh properties (3.11) and (3.14) that

$$\begin{aligned} |J_{711}| &\leq \|\nabla \phi\|_{L^\infty(Q_T)} \left(\sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} m(\sigma) d_\sigma \right)^{1/2} \\ &\leq \frac{1}{\xi^{1/2}} \|\nabla \phi\|_{L^\infty(Q_T)} \left(\sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \sum_{K \in \mathcal{T}} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} m(\sigma) d(x_K, \sigma) \right)^{1/2} \\ &\leq \frac{2^{1/2}}{\xi^{1/2}} \|\nabla \phi\|_{L^\infty(Q_T)} \left(\sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) \right)^{1/2} = \sqrt{\frac{2m(\Omega)T}{\xi}} \|\nabla \phi\|_{L^\infty(Q_T)}. \end{aligned}$$

Next, we estimate the term J_{712} . For this, we use the fact that $p_\sigma^k = p(M_{K,\sigma}^k)$ if

$M_K^k \geq M_{K,\sigma}^k$ and the inequality $x^2 - y^2 \leq 2x(x - y)$

$$\begin{aligned}
 |J_{712}| &\leq 2 \left\{ \sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma p(M_{K,\sigma}^k)^4 \left[\sqrt{\frac{u_{i,K,\sigma}^k q(M_{K,\sigma}^k)}{p(M_{K,\sigma}^k)}} D_\sigma \left(\sqrt{\frac{u_i^k q(M^k)}{p(M^k)}} \right) \right]^2 \mathbf{1}_{\{M_K^k \geq M_{K,\sigma}^k\}} \right\}^{1/2} \\
 &\leq 2 \left\{ \sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma u_{i,K,\sigma}^k p(M_{K,\sigma}^k) q(M_{K,\sigma}^k) \right. \\
 &\quad \times \left. \left[p(M_{K,\sigma}^k) D_\sigma \left(\sqrt{\frac{u_i^k q(M^k)}{p(M^k)}} \right) \right]^2 \mathbf{1}_{\{M_K^k \geq M_{K,\sigma}^k\}} \right\}^{1/2}.
 \end{aligned}$$

Observing that $u_{i,K,\sigma}^k < M^*$ for all $\sigma \in \mathcal{E}$ thanks to Lemma 3.4.1 and

$$\max_{1 \leq k \leq N_T} \|p(M_{\mathcal{M}}^k) q(M_{\mathcal{M}}^k)\|_{L^\infty(\Omega)}^{1/2} \leq C$$

with a constant $C > 0$ not depending on $(\Delta x, \Delta t)$, we infer that

$$|J_{712}| \leq 2C \left\{ \sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma (p_\sigma^k)^2 \left[D_\sigma \left(\sqrt{\frac{u_i^k q(M^k)}{p(M^k)}} \right) \right]^2 \right\}^{1/2} \leq C,$$

where the last inequality follows from the discrete entropy inequality in Lemma 3.3.1. This proves a uniform bound for J_{71} . Similar arguments lead to a uniform estimate for J_{72} . We conclude that $|J_7| \leq |J_{71}| + |J_{72}| \leq C$ for some constant $C > 0$. Finally, because of assumption (H3-5),

$$|J_8| \leq C \sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) \phi_K^k \leq C \|\nabla \phi\|_{L^\infty(Q_T)}.$$

This concludes the proof. $\square$

3.5 Convergence of solutions

We wish to prove Theorem 3.2.2. Before proving the convergence of the scheme, we show some compactness properties for the discrete solutions of the scheme (3.16)-(3.20).

3.5.1 Compactness properties

Applying Theorem 3.9 in [11], we obtain the following result.

Proposition 3.5.1 (Almost everywhere convergence). *Let the assumptions of Theorem 3.2.2 hold and let $(u_\eta)_{\eta>0}$ be a family of discrete solutions to the scheme (3.16)-(3.20)*

3.5. Convergence of solutions

constructed in Theorem 3.2.1. Then there exists a subsequence of $(u_\eta)_{\eta>0}$ which is not relabeled and a function $u = (u_1, \dots, u_n) \in L^\infty(Q_T)^n$ such that

$$u_{i,\eta} \rightarrow u_i \geq 0 \quad \text{a.e. in } Q_T, \quad i = 1, \dots, n.$$

Moreover, there exists $M \in L^\infty(Q_T)$ such that

$$M_\eta = \sum_{i=1}^n u_{i,\eta} \rightarrow M = \sum_{i=1}^n u_i < 1 \quad \text{a.e. in } Q_T.$$

Proof. Assumptions (A_x1) and (A_x3) in [11, Theorem 3.9] are satisfied due to the choice of finite volumes. Assumption (A_t) is always fulfilled for one-step methods like the implicit Euler discretization. Assumptions (a) and (b) are a consequence of the L^∞ bound, while Lemma 3.4.3 ensures assumption (c). Thus, the result follows directly from [11, Theorem 3.9]. $\square$

The gradient estimate in Lemma 3.4.2 shows that the discrete gradient of $u_{i,\eta}q(M_\eta)/p(M_\eta)$ converges weakly in $L^2(Q_T)$ (up to a subsequence) to some function. The following lemma shows that the limit can be identified with $\nabla(u_iq(M)/p(M))$.

Lemma 3.5.1 (Convergence of the gradient). *Let the assumptions of Theorem 3.2.2 hold and let $(u_\eta)_{\eta>0}$ be a family of discrete solutions to the scheme (3.16)-(3.20) constructed in Theorem 3.2.1. Then, up to a subsequence, as $\eta \rightarrow 0$,*

$$\nabla_\eta \left(\frac{u_{i,\eta}q(M_\eta)}{p(M_\eta)} \right) \rightharpoonup \nabla \left(\frac{u_iq(M)}{p(M)} \right) \quad \text{weakly in } L^2(Q_T),$$

where u_i and M are the limit functions obtained in Proposition 3.5.1.

Proof. We follow the lines of the proof of [26, Lemma 4.4]. It follows from Lemma 3.4.2 that, up to a subsequence,

$$\nabla_\eta \left(\frac{u_{i,\eta}q(M_\eta)}{p(M_\eta)} \right) \rightharpoonup \psi_i \quad \text{weakly in } L^2(Q_T) \text{ as } \eta \rightarrow 0$$

for some function $\psi_i \in L^2(Q_T)$, $i = 1, \dots, n$. It remains to show that $\psi_i = \nabla(u_iq(M)/p(M))$ in the sense of distributions. To this end, we choose a test function $\phi \in C_0^\infty(Q_T)$ and a sufficiently small mesh size $\eta = \max\{\Delta x, \Delta t\} > 0$ such that

$$\text{supp}(\phi) \subset \{x \in \Omega : d(x, \partial\Omega) > \eta\} \times (0, T).$$

This implies that ϕ vanishes in $T_{K,\sigma}$ for all $\sigma \in \mathcal{E}_{\text{ext},K}$ and $K \in \mathcal{T}$ since $m(T_{K,\sigma}) \leq \Delta x \leq \eta$. We set $\phi_K^k = \phi(x_K, t_k)$. In the following, we use the following two approximation properties: There exists a constant $C_{\text{cons}} > 0$ such that

$$\left| \int_{t_{k-1}}^{t_k} \left(\frac{D_{K,\sigma}\phi^k}{d_\sigma} - \frac{1}{m(T_{K,\sigma})} \int_{T_{K,\sigma}} \nabla \phi \cdot \nu_{K,\sigma} dx \right) dt \right| \leq C_{\text{cons}} \Delta t \eta. \quad (3.42)$$

This result is shown in the proof of [26, Theorem 5.1]. Furthermore, for any $\phi \in C_0^\infty(Q_T)$ and any $\sigma = K|L \in \mathcal{E}_{\text{int},K}$, $t \in (0, T)$, the regularity of ϕ implies that

$$\left| \frac{1}{m(T_{K,\sigma})} \int_{T_{K,\sigma}} \phi \cdot \nu_{K,\sigma} dx - \frac{1}{m(\sigma)} \int_{\sigma} \phi(x, t) \cdot \nu_{K,\sigma} ds \right| \leq \eta \|\phi\|_{C^1(\overline{Q_T})}. \quad (3.43)$$

Next, we abbreviate $v_{i,\eta} = u_{i,\eta} q(M_\eta) / p(M_\eta)$ and let $t \in (t_{k-1}, t_k]$. On the one hand, using the divergence theorem on $K \in \mathcal{T}$ and the relation $\nu_{L,\sigma} = -\nu_{K,\sigma}$, we obtain

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} v_{i,\eta}(x, t) \operatorname{div} \phi(x, t) dx &= \sum_{K \in \mathcal{T}} \int_K v_{i,\eta}(x, t) \operatorname{div} \phi(x, t) dx \\ &= \sum_{K \in \mathcal{T}} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{\text{int},K}} v_{i,K}^k \int_{\sigma} \phi(s, t) \cdot \nu_{K,\sigma} ds = -\frac{1}{2} \sum_{K \in \mathcal{T}} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{\text{int},K}} D_{K,\sigma} v_i^k \int_{\sigma} \phi(s, t) \cdot \nu_{K,\sigma} ds. \end{aligned}$$

On the other hand, the definition of $\nabla^\eta v_{i,\eta}$ gives

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \nabla^\eta v_{i,\eta}(x, t) \phi(x, t) dx &= \frac{1}{2} \sum_{K \in \mathcal{T}} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{\text{int},K}} \int_{T_{K,\sigma}} \nabla^\eta v_{i,\eta}(x, t) \phi(x, t) dx \\ &= \frac{1}{2} \sum_{K \in \mathcal{T}} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{\text{int},K}} \frac{m(K)}{m(T_{K,\sigma})} D_{K,\sigma} v_i^k \int_{T_{K,\sigma}} \phi(x, t) \cdot \nu_{K,\sigma} dx. \end{aligned}$$

By (3.43),

$$\begin{aligned} &\left| \int_0^T \int_{\Omega} \nabla^\eta v_{i,\eta} \cdot \phi dx dt + \int_0^T \int_{\Omega} v_{i,\eta} \operatorname{div} \phi dx dt \right| \\ &\leq \eta \|\phi\|_{C^1(\overline{Q_T})} \sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \sum_{K \in \mathcal{T}} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{\text{int},K}} m(\sigma) D_{\sigma} v_i^k =: \eta \|\phi\|_{C^1(\overline{Q_T})} J_9. \end{aligned}$$

It remains to show that J_9 is uniformly bounded. We use the Cauchy-Schwarz inequality, the definition of $|\cdot|_{1,2,\mathcal{M}}$ and properties (3.23) and (3.24) to find that

$$\begin{aligned} J_9 &\leq \left(\sum_{k=1}^{N_T} \Delta t |v_{i,\mathcal{M}_\eta}^k|_{1,2,\mathcal{M}}^2 \right)^{1/2} \left(\sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \sum_{K \in \mathcal{T}} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{\text{int},K}} m(\sigma) d(x_K, x_L) \right)^{1/2} \\ &\leq \left(\sum_{k=1}^{N_T} \Delta t |v_{i,\mathcal{M}_\eta}^k|_{1,2,\mathcal{M}}^2 \right)^{1/2} \left(\sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \sum_{K \in \mathcal{T}} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{\text{int},K}} 2m(T_{K,\sigma}) \right)^{1/2} \\ &\leq \left(\sum_{k=1}^{N_T} \Delta t |v_{i,\mathcal{M}_\eta}^k|_{1,2,\mathcal{M}}^2 \right)^{1/2} (4m(\Omega)T)^{1/2}. \end{aligned}$$

In view of Lemma 3.4.2, the right-hand side is bounded uniformly in η , and the result follows. $\square$

3.6. Convergence of the scheme

Finally, we verify that the limit function u satisfies the Dirichlet boundary condition in a weak sense.

Lemma 3.5.2 (Convergence of the traces). *Let the assumptions of Theorem 3.2.2 hold and let $(u_\eta)_{\eta>0}$ be a family of discrete solutions to the scheme (3.16)-(3.20) constructed in Theorem 3.2.1 such that $u_\eta \rightarrow u$ and $M_\eta \rightarrow M$ a.e. in Q_T . Then*

$$\frac{u_i q(M)}{p(M)} - \frac{u_i^D q(M^D)}{p(M^D)} \in L^2(0, T; H_D^1(\Omega)).$$

Proof. Let us define for $i = 1, \dots, n$

$$v_{i,\eta} = \frac{u_{i,\eta} q(M_\eta)}{p(M_\eta)}.$$

Then, using [17, Lemma 4.7] and [17, Lemma 4.8] we can prove thanks to Lemma 3.4.2 and the L^∞ -estimate that, up to a subsequence, for all $1 \leq p < +\infty$ as $\eta \rightarrow 0$

$$v_{i,\eta} \rightarrow v_i = \frac{u_i q(M)}{p(M)} \quad \text{strongly in } L^p(\Gamma^D \times (0, T)), \quad i = 1, \dots, n,$$

see for instance the proof of [17, Proposition 4.9]. Then, up to a subsequence, as $\eta \rightarrow 0$

$$v_{i,\eta} \rightarrow v_i \quad \text{a.e. in } \Gamma^D \times (0, T), \quad i = 1, \dots, n. \quad (3.44)$$

Moreover, by construction (3.21)-(3.22) of $u_\eta = (u_{1,\eta}, \dots, u_{n,\eta})$ solutions to the scheme (3.16)-(3.20) we have

$$v_{i,\eta}(x, t) = \frac{u_i^D q(M^D)}{p(M^D)} \quad \text{for } (x, t) \in \Gamma^D \times (0, T), \quad i = 1, \dots, n.$$

Thus, we deduce from (3.44) that

$$v_i = \frac{u_i^D q(M^D)}{p(M^D)} \quad \text{a.e. in } \Gamma^D \times (0, T), \quad i = 1, \dots, n,$$

which concludes the proof of Lemma 3.5.2. $\square$

3.6 Convergence of the scheme

We prove in this section that, under the assumptions of Theorem 3.2.2, the limit function $u = (u_1, \dots, u_n)$ obtained in Proposition 3.5.1 is a weak solution to (3.1)-(3.4). For this, we follow some ideas developed in [19, 26].

Let $\phi \in C_0^\infty(\Omega \times [0, T])$ and choose $\eta = \max\{\Delta x, \Delta t\}$ sufficiently small such that

$\text{supp}(\phi) \subset \{x \in \Omega : d(x, \partial\Omega) > \eta\} \times [0, T]$. In particular, ϕ vanishes in any cell $K \in \mathcal{T}$ with $K \cap \partial\Omega \neq \emptyset$. Again, we abbreviate $\phi_K^k = \phi(x_K, t_k)$ and we fix $i \in \{1, \dots, n\}$. Let

$$\begin{aligned}\varepsilon(\eta) &= F_{10}^\eta + F_{20}^\eta + F_{30}^\eta, \quad \text{where} \\ F_{10}^\eta &= - \int_0^T \int_\Omega u_{i,\eta} \partial_t \phi dx dt - \int_\Omega u_{i,\eta}(x, 0) \phi(x, 0) dx, \\ F_{20}^\eta &= \int_0^T \int_\Omega p(M_\eta)^2 \nabla^\eta \left(\frac{u_{i,\eta} q(M_\eta)}{p(M_\eta)} \right) \cdot \nabla \phi dx dt, \\ F_{30}^\eta &= - \int_0^T \int_\Omega r_i(u_\eta) \phi dx dt.\end{aligned}$$

Proposition 3.5.1 and Lemma 3.5.1 imply that we can perform the limit $\eta \rightarrow 0$ in these integrals, leading to

$$\begin{aligned}\lim_{\eta \rightarrow 0} \varepsilon(\eta) &= - \int_0^T \int_\Omega u_i \partial_t \phi dx dt - \int_\Omega u_i(x, 0) \phi(x, 0) dx \\ &\quad + \int_0^T \int_\Omega p(M)^2 \nabla \left(\frac{u_i q(M)}{p(M)} \right) \cdot \nabla \phi dx dt - \int_0^T \int_\Omega r_i(u) \phi dx dt.\end{aligned}$$

Therefore, it remains to prove that $\varepsilon(\eta) \rightarrow 0$ as $\eta \rightarrow 0$.

To this end, we multiply (3.18) by $\Delta t \phi_K^{k-1}$ and sum over $K \in \mathcal{T}$ and $k = 1, \dots, N_T$, giving

$$\begin{aligned}F_1^\eta + F_2^\eta + F_3^\eta &= 0, \quad \text{where} \\ F_1^\eta &= \sum_{k=1}^{N_T} \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) (u_{i,K}^k - u_{i,K}^{k-1}) \phi_K^{k-1}, \\ F_2^\eta &= \sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \sum_{K \in \mathcal{T}} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{\text{int},K}} \mathcal{F}_{i,K,\sigma}^k \phi_K^{k-1}, \\ F_3^\eta &= - \sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) r_i(u_{i,K}^k) \phi_K^{k-1}.\end{aligned}$$

For the proof of $\varepsilon(\eta) \rightarrow 0$ as $\eta \rightarrow 0$ it is enough to show that $F_{j0}^\eta - F_j^\eta \rightarrow 0$ as $\eta \rightarrow 0$ for $j = 1, 2, 3$.

The arguments in [19, Section 5.2] show that

$$|F_{10}^\eta - F_1^\eta| \leq CT m(\Omega) \|\phi\|_{C^1(\overline{Q_T})} \eta \rightarrow 0 \quad \text{as } \eta \rightarrow 0.$$

Furthermore, since ϕ is regular,

$$\begin{aligned}|F_{30}^\eta - F_3^\eta| &\leq \sum_{k=1}^{N_T} \sum_{K \in \mathcal{T}} |r_i(u_{i,K}^k)| \left| \int_{t_{k-1}}^{t_k} \left(m(K) \phi_K^{k-1} - \int_K \phi dx \right) dt \right| \\ &\leq CT \eta \|\phi\|_{C^1(\overline{Q_T})} \rightarrow 0 \quad \text{as } \eta \rightarrow 0\end{aligned}$$

3.6. Convergence of the scheme

The remaining convergence for $|F_{20}^\eta - F_2^\eta|$ is more involved. First, we rewrite F_2^η . By the symmetry of τ_σ with respect to $\sigma = K|L$ and the definition of $\mathcal{F}_{i,K,\sigma}^k$, we have

$$\begin{aligned} F_2^\eta &= -\frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \sum_{K \in \mathcal{T}} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{\text{int},K}} \mathcal{F}_{i,K,\sigma}^k D_{K,\sigma} \phi^{k-1} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \sum_{K \in \mathcal{T}} p(M_K^k)^2 \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{\text{int},K}} \tau_\sigma D_{K,\sigma} \left(\frac{u_i^k q(M^k)}{p(M^k)} \right) D_{K,\sigma} \phi^{k-1} \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \sum_{K \in \mathcal{T}} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{\text{int},K}} \tau_\sigma ((p_\sigma^k)^2 - p(M_K^k)^2) D_{K,\sigma} \left(\frac{u_i^k q(M^k)}{p(M^k)} \right) D_{K,\sigma} \phi^{k-1} \\ &=: F_{21}^\eta + F_{22}^\eta. \end{aligned}$$

Inserting the definition of the discrete gradient $\nabla^\eta = \nabla^{\mathcal{D}^\eta}$, we can reformulate F_{20}^η as

$$\begin{aligned} F_{20}^\eta &= \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N_T} \sum_{K \in \mathcal{T}} p(M_K^k)^2 \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{\text{int},K}} D_{K,\sigma} \left(\frac{u_i^k q(M^k)}{p(M^k)} \right) \\ &\quad \times \frac{m(\sigma)}{m(T_{K,\sigma})} \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{T_{K,\sigma}} \nabla \phi \cdot \nu_{K,\sigma} dx dt. \end{aligned}$$

Thus, using (3.42), the monotonicity of p , and the Cauchy-Schwarz inequality,

$$\begin{aligned} |F_{20}^\eta - F_{21}^\eta| &\leq \frac{1}{2} p(0)^2 \sum_{k=1}^{N_T} \sum_{K \in \mathcal{T}} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{\text{int},K}} m(\sigma) D_\sigma \left(\frac{u_i^k q(M^k)}{p(M^k)} \right) \\ &\quad \times \left| \int_{t_{k-1}}^{t_k} \left(\frac{D_{K,\sigma} \phi^k}{d_\sigma} - \frac{1}{m(T_{K,\sigma})} \int_{T_{K,\sigma}} \nabla \phi \cdot \nu_{K,\sigma} dx \right) dt \right| \\ &\leq \frac{1}{2} p(0)^2 C_{\text{cons}} \eta \left(\sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} m(\sigma) d_\sigma \right)^{1/2} \left(\sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \left| \frac{u_i^k q(M^k)}{p(M^k)} \right|_{1,2,\mathcal{M}}^2 \right)^{1/2}. \end{aligned}$$

We use the mesh regularity (3.11), property (3.23), and the gradient estimate given by Lemma 3.4.2 to conclude that, for some constant $C > 0$,

$$|F_{20}^\eta - F_{21}^\eta| \leq C(\xi, C_3) p(0)^2 \eta \rightarrow 0 \quad \text{as } \eta \rightarrow 0. \quad (3.45)$$

We turn to the estimate of F_{22}^η . Since $p_\sigma^k = p(M_K^k)$ if $M_K^k \leq M_{K,\sigma}^k$, it is sufficient to consider the terms in F_{22}^η only on the set where $M_K^k > M_{K,\sigma}^k$ and we have

$$\begin{aligned} |F_{22}^\eta| &\leq \frac{\eta}{2} \|\phi\|_{C^1(\overline{Q_T})} \sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \sum_{K \in \mathcal{T}} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{\text{int},K}} \tau_\sigma \\ &\quad \times \left| (p(M_{K,\sigma}^k)^2 - p(M_K^k)^2) D_{K,\sigma} \left(\frac{u_i^k q(M^k)}{p(M^k)} \right) \mathbf{1}_{\{M_K^k > M_{K,\sigma}^k\}} \right|. \end{aligned}$$

Then, using the inequality $x^2 - y^2 \leq 2x(x - y)$,

$$|F_{22}^\eta| \leq \eta \|\phi\|_{C^1(\overline{Q_T})} \sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \sum_{K \in \mathcal{T}} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{\text{int}, K}} \tau_\sigma \times \left| \left(p(M_{K,\sigma}^k)^2 - p(M_K^k)^2 \right) \sqrt{\frac{u_{i,K,\sigma}^k q(M_{K,\sigma}^k)}{p(M_{K,\sigma}^k)}} D_{K,\sigma} \left(\sqrt{\frac{u_i^k q(M^k)}{p(M^k)}} \right) \mathbf{1}_{\{M_K^k > M_{K,\sigma}^k\}} \right|$$

By a Taylor expansion, for $\widetilde{M}_\sigma^k = \tilde{\theta}_\sigma M_K^k + (1 - \tilde{\theta}_\sigma) M_{K,\sigma}^k$ for some $\tilde{\theta}_\sigma \in (0, 1)$,

$$p(M_{K,\sigma}^k)^2 - p(M_K^k)^2 = 2p'(\widetilde{M}_\sigma^k) p(\widetilde{M}_\sigma^k) (M_{K,\sigma}^k - M_K^k).$$

Hence, the Cauchy-Schwarz inequality gives

$$|F_{22}^\eta| \leq 2\eta \|\phi\|_{C^1(\overline{Q_T})} F_{221}^\eta F_{222}^\eta, \quad \text{where} \quad (3.46)$$

$$F_{221}^\eta = \left\{ \sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} \tau_\sigma p(\widetilde{M}_\sigma^k)^2 \left(D_\sigma \left(\sqrt{\frac{u_i^k q(M^k)}{p(M^k)}} \right) \right)^2 \right\}^{1/2},$$

$$F_{222}^\eta = \left\{ \sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} \tau_\sigma p'(\widetilde{M}_\sigma^k)^2 \frac{u_{i,K,\sigma}^k q(M_{K,\sigma}^k)}{p(M_{K,\sigma}^k)} (D_\sigma M)^2 \mathbf{1}_{\{M_K^k > M_{K,\sigma}^k\}} \right\}^{1/2}.$$

For $M_K^k > \widetilde{M}_\sigma^k > M_{K,\sigma}^k$, we have $p(M_K^k) \leq p(\widetilde{M}_\sigma^k) \leq p(M_{K,\sigma}^k) = p_\sigma^k$. Thus, replacing $p(\widetilde{M}_\sigma^k)^2$ in F_{221}^η by $(p_\sigma^k)^2$, the discrete entropy inequality (3.26) shows that $|F_{221}^\eta| \leq H(u_{\mathcal{M}}^0)$.

For the estimate of F_{222}^η , we use $u_{i,K,\sigma}^k \leq 1$ and $C_5 = \sup_{0 \leq x \leq M^*} p'(x)^2/p(x) < \infty$ (this is finite since $M^* < 1$) to infer that

$$|F_{222}^\eta| \leq C_5 \left\{ \sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} \tau_\sigma q(M_{K,\sigma}^k) (D_\sigma M)^2 \mathbf{1}_{\{M_K^k > M_{K,\sigma}^k\}} \right\}^{1/2}$$

$$= C_5 \left\{ \sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} \tau_\sigma (M_\sigma^k)^{1-a} (1 - M_\sigma^k)^{1+b+\kappa} q(M_{K,\sigma}^k) \right.$$

$$\left. \times \frac{(M_\sigma^k)^{a-1}}{(1 - M_\sigma^k)^{1+b+\kappa}} (D_\sigma M)^2 \mathbf{1}_{\{M_K^k > M_{K,\sigma}^k\}} \right\}^{1/2},$$

where $M_\sigma^k = \theta_\sigma M_K^k + (1 - \theta_\sigma) M_{K,\sigma}^k$ is defined in Lemma 3.3.2. Then $M_K^k \geq M_\sigma^k \geq M_{K,\sigma}^k$ and $a > 1$ imply that $(M_\sigma^k)^{1-a} \leq (M_{K,\sigma}^k)^{1-a}$, which shows, together with $(1 - M_\sigma^k)^{1+b+\kappa} \leq 1$, that

$$|F_{222}^\eta| \leq C_5 \left\{ \sum_{k=1}^{N_T} \Delta t \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} \tau_\sigma (M_{K,\sigma}^k)^{1-a} q(M_{K,\sigma}^k) \right.$$

$$\left. \times \frac{(M_\sigma^k)^{a-1}}{(1 - M_\sigma^k)^{1+b+\kappa}} (D_\sigma M)^2 \mathbf{1}_{\{M_K^k > M_{K,\sigma}^k\}} \right\}^{1/2}.$$

By (3.37) and the bound

$$(M_{K,\sigma}^k)^{1-a} q(M_{K,\sigma}^k) \leq \frac{M^*}{(a+1)(1-M^*)^b}, \quad \forall \sigma \in \mathcal{E},$$

this expression is bounded by the entropy dissipation which is uniformly bounded due to the entropy inequality.

We have shown that F_{221}^η and F_{222}^η are bounded uniformly in η such that (3.46) implies that $F_{22}^\eta \rightarrow 0$ as $\eta \rightarrow 0$. This convergence and convergence (3.45) then imply that

$$|F_{20}^\eta - F_2^\eta| \leq |F_{20}^\eta - F_{21}^\eta| + |F_{22}^\eta| \rightarrow 0 \quad \text{as } \eta \rightarrow 0.$$

The proof of Theorem 3.2.2 is complete.

3.7 Numerical experiments

We present in this section some numerical experiments in one dimension in space. We are interested in the long time behavior and in the order of convergence in space of the scheme. The numerical results are obtained using a Newton's method with a tolerance equal to 1e-10 on a uniform mesh.

The test case is described in Table 3.1, we consider the following initial conditions

$$u_1^0(x) = u_1^D + u_1^D \mathbf{1}_{(0.2,0.6)}(x) \quad \text{and} \quad u_2^0(x) = u_2^D + u_2^D \mathbf{1}_{(0.4,0.8)}(x),$$

and where the source terms are defined in (H3-5).

u_1^D	u_2^D	a	b	κ
0.2	0.1	1.2	2	1

TABLE 3.1 – Definition of parameters used in the test case

In Figure 3.1 we illustrate the long time behavior of the solutions to the scheme with different definitions of p . In the case of mixed Dirichlet-Neumann boundary conditions the steady states for u_1 and u_2 are given by $u_1^\infty = u_1^D$ and $u_2^\infty = u_2^D$, see [32, Theorem 2]. Figure 3.1 shows the exponential convergence of the solutions to the steady states in L^2 norm in semi-logarithmic scale for $\alpha_1 = 1$, $\alpha_2 = 10$, $T = 10$, a mesh made of 100 cells and $\Delta t = 1/100$. We assume that the function p is either given by

$$p(x) = \exp(-1/(1-x)^\kappa), \quad \forall x \in [0, 1], \quad (3.47)$$

or

$$p(x) = (1-x), \quad \forall x \in [0, 1]. \quad (3.48)$$

We notice that the function p defined by (3.48) does not satisfy (H3-4).

The result in [32, Theorem 2] establish that the convergence towards the steady states is of order $1/t$. However, as in [32, Section 7.2], our numerical experiments suggest that exponential decay should hold. Moreover it seems that the results obtained in [32] should also hold for more general functions p .

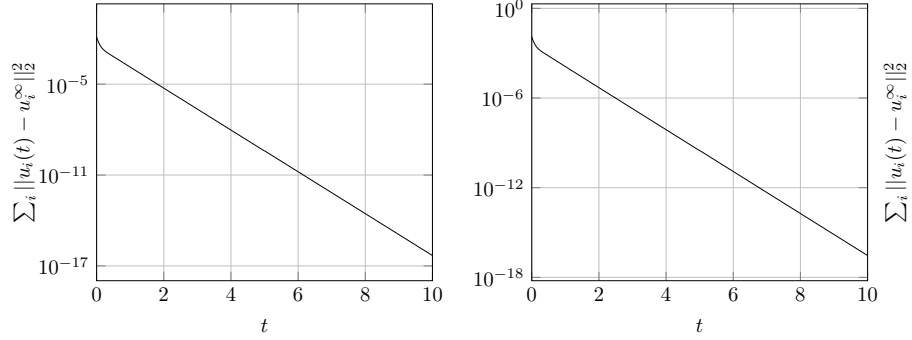


FIGURE 3.1 – Convergence of the solutions to the steady states in L^2 norm with p defined by (3.47) (on the right) or by (3.48) (on the left) in semi-logarithmic scale.

We investigate in Figure 3.2 and Figure 3.3 the order of convergence in space of the scheme. Since exact solutions to the biofilm model are not explicitly known, we compute a reference solution on a uniform mesh composed of 5120 cells and with $\Delta t = 1e - 6$. Then, we compute approximate solutions on a uniform mesh made of respectively 40, 80, 160, 320, 640 and 1280 cells. Finally, we compute the L^2 -norm of the difference between the approximate solution and the average of the reference solution over 40, 80, 160, 320, 640 and 1280 cells. We consider $T = 1e - 3$, it is important to take a small time T in order to compute a solution different from the stationary state, see Figure 3.1. Figure 3.2 shows the results for p defined by (3.47) and with different choices of α_1 and α_2 , while Figure 3.3 shows the results for p defined by (3.48) and with different choices of α_1 and α_2 . We observe for any choices of p , α_1 and α_2 the expected first order convergence in space.

3.8 Appendix A. Proof of Lemma 3.3.2

To simplify the presentation, we omit the superindex ε throughout the proof. Summing definition (3.27) for $I_i(u_{\mathcal{M}}^k)$ over $i = 1, \dots, n$ and setting $f(x) = \sqrt{q(x)/p(x)}$, we obtain

$$I = \sum_{i=1}^n I_i(u_{\mathcal{M}}^k) \geq \alpha \sum_{i=1}^n \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma p_\sigma^2 (D_{K,\sigma}(\sqrt{u_i} f(M)))^2$$

3.8. Appendix A. Proof of Lemma 3.3.2

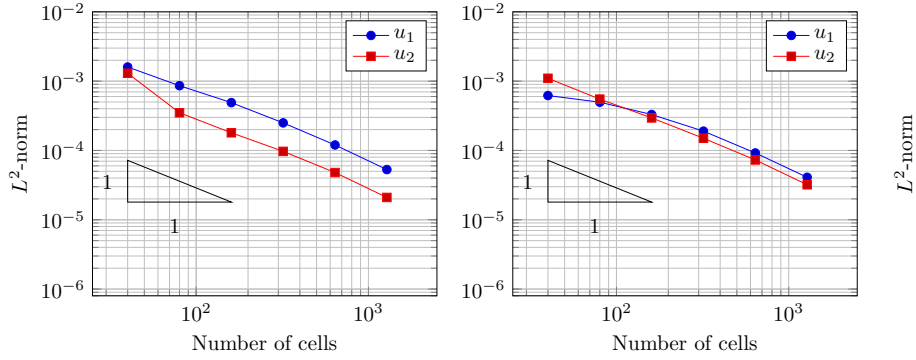


FIGURE 3.2 – L^2 -norm of the error in space with $\alpha_1 = \alpha_2 = 1$ (on the left) and $\alpha_1 = 1$ and $\alpha_2 = 10$ (on the right) and with p defined by (3.47).

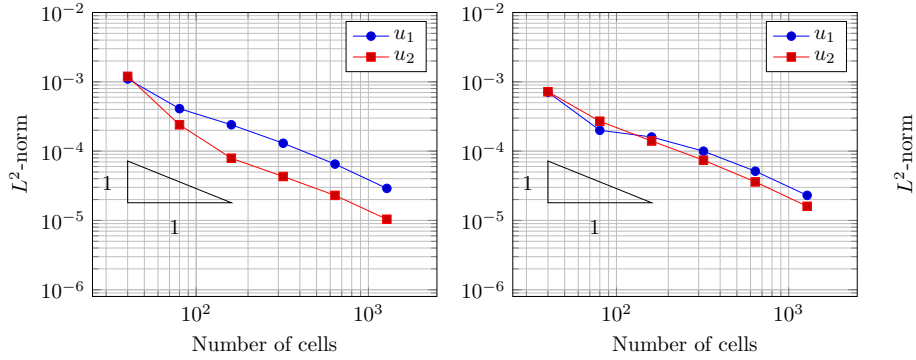


FIGURE 3.3 – L^2 -norm of the error in space with $\alpha_1 = \alpha_2 = 1$ (on the left) and $\alpha_1 = 1$ and $\alpha_2 = 10$ (on the right) and with p defined by (3.48).

where $\alpha = \min_{i=1,\dots,n} \alpha_i$. We split the sum into two parts and use the product rule for finite volumes. Then $I = J_{10} + J_{11}$, where

$$J_{10} = \alpha \sum_{i=1}^n \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma p_\sigma^2 \left(\sqrt{u_{i,K,\sigma}} D_{K,\sigma}(f(M)) + D_{K,\sigma}(\sqrt{u_i}) f(M_K) \right)^2 \mathbf{1}_{\{M_{K,\sigma} \geq M_K\}},$$

$$J_{11} = \alpha \sum_{i=1}^n \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma p_\sigma^2 \left(\sqrt{u_{i,K}} D_{K,\sigma}(f(M)) + D_{K,\sigma}(\sqrt{u_i}) f(M_{K,\sigma}) \right)^2 \mathbf{1}_{\{M_{K,\sigma} < M_K\}}.$$

A Taylor expansion of f around $M_{K,\sigma}$ gives

$$J_{10} = \alpha \sum_{i=1}^n \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma p_\sigma^2 (\sqrt{u_{i,K,\sigma}} D_{K,\sigma}(M) f'(M_\sigma) + D_{K,\sigma}(\sqrt{u_i}) f(M_K))^2 \mathbf{1}_{\{M_{K,\sigma} \geq M_K\}},$$

$$J_{11} = \alpha \sum_{i=1}^n \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma p_\sigma^2 (\sqrt{u_{i,K}} D_{K,\sigma}(M) f'(M_\sigma) + D_{K,\sigma}(\sqrt{u_i}) f(M_{K,\sigma}))^2 \mathbf{1}_{\{M_{K,\sigma} < M_K\}},$$

where $M_\sigma = \theta_\sigma M_{K,\sigma} + (1 - \theta_\sigma) M_K$ for some $\theta_\sigma \in (0, 1)$ for $K \in \mathcal{T}$ and $\sigma \in \mathcal{E}_K$.

Let us consider the term J_{10} first. Expanding the square gives three terms, $J_{10} = J_{101} + J_{102} + J_{103}$ with

$$J_{101} = \alpha \sum_{i=1}^n \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma p_\sigma^2 f(M_K)^2 (D_{K,\sigma}(\sqrt{u_i}))^2 \mathbf{1}_{\{M_{K,\sigma} \geq M_K\}},$$

$$J_{102} = 2\alpha \sum_{i=1}^n \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma p_\sigma^2 \sqrt{u_{i,K,\sigma}} D_{K,\sigma}(\sqrt{u_i}) f'(M_\sigma) f(M_K) D_{K,\sigma}(M) \mathbf{1}_{\{M_{K,\sigma} \geq M_K\}},$$

$$J_{103} = \alpha \sum_{i=1}^n \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma p_\sigma^2 u_{i,K,\sigma} f'(M_\sigma)^2 (D_{K,\sigma} M)^2 \mathbf{1}_{\{M_{K,\sigma} \geq M_K\}}$$

$$= \alpha \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma p_\sigma^2 M_{K,\sigma} f'(M_\sigma)^2 (D_{K,\sigma} M)^2 \mathbf{1}_{\{M_{K,\sigma} \geq M_K\}},$$

where in the last equality we used $\sum_{i=1}^n u_{i,K,\sigma} = M_{K,\sigma}$.

On the set $\{M_{K,\sigma} \geq M_K\}$, we have $p_\sigma = p(M_K)$. Then, by definition of f ,

$$J_{101} = \alpha \sum_{i=1}^n \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma p(M_K) q(M_K) (D_{K,\sigma}(\sqrt{u_i}))^2 \mathbf{1}_{\{M_{K,\sigma} \geq M_K\}}.$$

The function f is strictly increasing (see [32, Lemma 7]). Since $x(x - y) \geq \frac{1}{2}(x^2 - y^2)$, it follows that

$$J_{102} \geq \alpha \sum_{i=1}^n \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma p_\sigma^2 (u_{i,K,\sigma} - u_{i,K}) f'(M_\sigma) f(M_K) D_{K,\sigma}(M) \mathbf{1}_{\{M_{K,\sigma} \geq M_K\}}$$

$$= \alpha \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma p_\sigma^2 (D_{K,\sigma} M)^2 f'(M_\sigma) f(M_K) \mathbf{1}_{\{M_{K,\sigma} \geq M_K\}} \geq 0.$$

It remains to estimate J_{103} . For this, we set $J_{103} = \alpha \sum_{\sigma \in \mathcal{E}, K=K_\sigma} J_{103}(\sigma)$, where

$$J_{103}(\sigma) = \tau_\sigma p_\sigma^2 M_{K,\sigma} f'(M_\sigma)^2 (D_{K,\sigma} M)^2 \mathbf{1}_{\{M_{K,\sigma} \geq M_K\}}.$$

3.8. Appendix A. Proof of Lemma 3.3.2

We know thanks to [32, Lemma 4] that there exists a constant C_{pq} such that

$$\lim_{M \rightarrow 1} \frac{p(M)q(M)}{(1-M)^{1-b+\kappa}} = C_{pq} \in (0, \infty).$$

Then we deduce that there exists $\delta \in (0, 1/2)$ such that for all $M_\sigma > 1 - \delta$,

$$\frac{p(M_\sigma)q(M_\sigma)}{(1-M_\sigma)^{1-b+\kappa}} \geq \frac{C_{pq}}{2}. \quad (3.49)$$

Therefore, we distinguish the cases (i) $0 \leq M_\sigma \leq 1 - \delta$ and (ii) $1 - \delta < M_\sigma < 1$.

Consider first case (i). Modifying slightly the proof of [32, Lemma 7], it holds that for all $0 \leq M_\sigma \leq 1 - \delta$,

$$f'(M_\sigma) \geq \frac{a}{2M_\sigma} f(M_\sigma), \quad p(M_\sigma)q(M_\sigma) \geq \frac{p(1-\delta)^2 M_\sigma^a}{p(0)^2(a+1)}.$$

Again, $M_{K,\sigma} \geq M_\sigma \geq M_K$ implies that $p(M_{K,\sigma}) \leq p(M_\sigma) \leq p(M_K) = p_\sigma$. Therefore, taking into account the definition of f ,

$$\begin{aligned} J_{103} &\geq \tau_\sigma p(M_\sigma)^2 M_{K,\sigma} \frac{a^2}{4M_\sigma^2} f(M_\sigma)^2 (D_\sigma M)^2 \mathbf{1}_{\{M_{K,\sigma} \geq M_K\}} \\ &= \frac{a^2}{4} \tau_\sigma p(M_\sigma) q(M_\sigma) \frac{M_{K,\sigma}}{M_\sigma^2} (D_\sigma M)^2 \mathbf{1}_{\{M_{K,\sigma} \geq M_K\}} \\ &\geq \frac{a^2 p(1-\delta)^2}{4(a+1)p(0)^2} \tau_\sigma M_\sigma^{a-1} \frac{M_{K,\sigma}}{M_\sigma} (D_\sigma M)^2 \mathbf{1}_{\{M_{K,\sigma} \geq M_K\}} \\ &\geq \frac{a^2 p(1-\delta)^2}{4(a+1)p(0)^2} \tau_\sigma M_\sigma^{a-1} (D_\sigma M)^2 \mathbf{1}_{\{M_{K,\sigma} \geq M_K\}}, \end{aligned}$$

where we used $M_{K,\sigma} \geq M_\sigma$ in the last inequality. Since $M_\sigma \leq 1 - \delta$, we have $(1 - M_\sigma)^{1+b+\kappa} \geq \delta^{1+b+\kappa}$ and consequently,

$$J_{103}(\sigma) \geq \frac{a^2 p(1-\delta)^2 \delta^{1+b+\kappa}}{4(a+1)p(0)^2} \frac{\tau_\sigma M_\sigma^{a-1}}{(1-M_\sigma)^{1+b+\kappa}} (D_\sigma M)^2 \mathbf{1}_{\{M_{K,\sigma} \geq M_K\}}.$$

In case (ii), using $M_{K,\sigma} \geq M_\sigma > 1 - \delta$ and $p_\sigma = p(M_K) \geq p(M_\sigma)$, we find that

$$\begin{aligned} J_{103}(\sigma) &\geq (1-\delta) \tau_\sigma p(M_\sigma)^2 f'(M_\sigma)^2 (D_\sigma M)^2 \mathbf{1}_{\{M_{K,\sigma} \geq M_K\}} \\ &\geq (1-\delta) \tau_\sigma p(M_\sigma) q(M_\sigma) \left(\frac{f'(M_\sigma)}{f(M_\sigma)} \right)^2 (D_\sigma M)^2 \mathbf{1}_{\{M_{K,\sigma} \geq M_K\}}. \end{aligned}$$

The proof of [32, Lemma 7] shows that there exists a constant $C > 0$ such that

$$\frac{f'(x)}{f(x)} \geq \frac{C_7}{(1-x)^{1+\kappa}} \quad \text{for } \frac{1}{2} < x < 1.$$

Hence, together with (3.49), we infer that

$$\begin{aligned} J_{103}(\sigma) &\geq (1-\delta)C_7^2\tau_\sigma \frac{p(M_\sigma)q(M_\sigma)}{(1-M_\sigma)^{1-b+\kappa}}(1-M_\sigma)^{-1-b-\kappa}(D_\sigma M)^2 \mathbf{1}_{\{M_{K,\sigma} \geq M_K\}} \\ &\geq (1-\delta)\frac{C_{pq}C_7^2}{4}(1-M_\sigma)^{-1-b-\kappa}(D_\sigma M)^2 \mathbf{1}_{\{M_{K,\sigma} \geq M_K\}} \\ &\geq (1-\delta)\frac{C_{pq}C_7^2}{4}\tau_\sigma \frac{M_\sigma^{a-1}}{(1-M_\sigma)^{1+b+\kappa}}(D_\sigma M)^2 \mathbf{1}_{\{M_{K,\sigma} \geq M_K\}}, \end{aligned}$$

where in the last step we used $M_\sigma \leq 1$. We have proved that in both cases (i) and (ii), there exists a constant $C_8 > 0$ such that

$$J_{103} \geq C_8 \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma \frac{M_\sigma^{a-1}}{(1-M_\sigma)^{1+b+\kappa}}(D_\sigma M)^2 \mathbf{1}_{\{M_{K,\sigma} \geq M_K\}}.$$

Similarly, we expand the square in J_{11} such that $J_{11} = J_{111} + J_{112} + J_{113}$ with

$$\begin{aligned} J_{111} &= \alpha \sum_{i=1}^n \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma p_\sigma^2 f(M_{K,\sigma})^2 (D_{K,\sigma}(\sqrt{u_i}))^2 \mathbf{1}_{\{M_{K,\sigma} < M_K\}}, \\ J_{112} &= 2\alpha \sum_{i=1}^n \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma p_\sigma^2 \sqrt{u_{i,K}} D_{K,\sigma}(\sqrt{u_i}) f'(M_\sigma) f(M_{K,\sigma}) D_{K,\sigma}(M) \mathbf{1}_{\{M_{K,\sigma} < M_K\}}, \\ J_{113} &= \alpha \sum_{i=1}^n \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma p_\sigma^2 u_{i,K} f'(M_\sigma)^2 (D_{K,\sigma} M)^2 \mathbf{1}_{\{M_{K,\sigma} < M_K\}}. \end{aligned}$$

Arguing as for the expressions J_{101} and J_{102} , we obtain $J_{112} \geq 0$ and

$$J_{111} = \alpha \sum_{i=1}^n \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma p(M_{K,\sigma}) q(M_{K,\sigma}) (D_{K,\sigma}(\sqrt{u_i}))^2 \mathbf{1}_{\{M_{K,\sigma} < M_K\}}.$$

The terms in J_{113} are studied as before for the cases $0 \leq M_\sigma \leq 1 - \delta$ and $M_\sigma > 1 - \delta$. Similar computations lead to the existence of a constant $C_9 > 0$ such that

$$J_{113} \geq C_9 \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma \frac{M_\sigma^{a-1}}{(1-M_\sigma)^{1+b+\kappa}}(D_\sigma M)^2 \mathbf{1}_{\{M_{K,\sigma} < M_K\}}.$$

We put together the estimates for J_{101} and J_{111}

$$J_{101} + J_{111} \geq \alpha \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma \min \{p(M_K)q(M_K), p(M_{K,\sigma})q(M_{K,\sigma})\} (D_\sigma \sqrt{u_i})^2. \quad (3.50)$$

3.8. Appendix A. Proof of Lemma 3.3.2

Furthermore, we add J_{103} and J_{113}

$$J_{103} + J_{113} \geq \min\{C_8, C_9\} \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E} \\ K=K_\sigma}} \tau_\sigma \frac{M_\sigma^{a-1}}{(1 - M_\sigma)^{1+b+\kappa}} (D_\sigma M)^2. \quad (3.51)$$

Note that $J_{102} + J_{112} \geq 0$. Then $I \geq (J_{101} + J_{111}) + (J_{103} + J_{113})$ and inserting estimates (3.50) and (3.51), we finish the proof.

Troisième partie

Etude d'un modèle simplifié de corrosion

Chapitre 4

Etude d'un modèle jouet de corrosion par une approche flot de gradient pour une métrique de type Wasserstein

Travail en collaboration avec Benoît Merlet³ et Juliette Venel⁴.

Dans ce dernier chapitre, nous proposons et étudions un modèle jouet à frontière libre. L'introduction de ce modèle simplifié est motivé par l'étude du modèle DPCM (Diffusion-Poisson-Coupled-Model) qui décrit la corrosion d'un baril métallique placé en milieu argileux (conditions envisagées de stockage de déchets radioactifs en France). Il n'existe pour l'heure aucun résultat d'existence pour ce modèle. Notre étude d'un problème simplifié est un premier pas vers de tels résultats. Dans ce travail, nous tirons parti de la structure de flot de gradient pour une métrique de type Wasserstein du modèle simplifié pour établir l'existence de solution faible. Notre approche est fondée sur un schéma variationnel semi-discret en temps de type JKO, voir [44]. Nous étudions les propriétés des solutions du problème variationnel puis nous établissons la convergence, à sous suite-extraite près, de ces solutions vers une solution faible.

3. Univ. Lille, CNRS, UMR 8524, Inria - Laboratoire Paul Painlevé, F-59000 Lille.
E-mail: benoit.merlet@univ-lille.fr

4. Univ. Polytechnique Hauts-de-France, EA 4015 - LAMAV - FR CNRS 2956, F-59313 Valenciennes, France.
E-mail: juliette.venel@uphf.fr

Sommaire

4.1	Introduction	121
4.1.1	Justifications mathématiques de l'approche par flot de gradient pour une métrique de type Wasserstein	125
4.2	La méthode des mouvements minimisants	127
4.2.1	Résultats préliminaires et rappels en théorie du transport optimal	127
4.2.2	Définitions d'autres distances sur l'espace des mesures	130
4.2.3	Introduction du schéma minimisant et notations	135
4.2.4	Principaux résultats	139
4.3	Preuve du Théorème 4.2.3	141
4.4	Propriétés des minimiseurs	145
4.4.1	Comportement dans la couche d'oxyde	145
4.4.2	Comportement à l'interface fixe	148
4.4.3	Bornes L^∞	163
4.4.4	Equation d'évolution de l'interface mobile	169
4.5	Preuve du Théorème 4.2.4	173
4.5.1	Preuve de la Proposition 4.2.3	173
4.5.2	Estimations a priori	176
4.5.3	Compacité et passage à la limite	180
4.6	Discussion autour de l'unicité	188

4.1 Introduction

Nous introduisons et étudions l'existence de solutions faibles pour un modèle simplifié de corrosion. Dans ce modèle simplifié nous considérons, comme dans le modèle DPCM, que le baril métallique contenant les déchets radioactifs est en contact avec une solution contenant des espèces chimiques chargées de type cation. La présence de cette solution est due au stockage de ce dernier en milieu argileux. Par ailleurs, sur la surface du baril, une couche dense d'oxyde se forme, protégeant le métal en réduisant le taux de corrosion. La taille de cette couche varie au cours du temps et constitue le domaine sur lequel nos équations vont être définies. De plus, son épaisseur étant très faible en comparaison de la taille du baril, l'emploi d'un modèle unidimensionnel est justifié.

Comme représenté sur la Figure 4.1, nous considérons trois zones : le domaine occupé par la solution représenté par l'intervalle $(-\infty, 0]$, le domaine $(0, X)$ occupé par la couche d'oxyde et le domaine occupé par le métal représenté par l'intervalle $[X, +\infty)$. À l'interface entre la solution et la couche d'oxyde des échanges d'espèces chimiques se produisent. En particulier, des atomes d'oxygènes pénètrent dans la couche d'oxyde et si la concentration en oxygène est assez élevée à l'interface X , le baril subit une réaction d'oxydation. Cette dernière réaction dégrade le métal et fait augmenter la taille de la couche d'oxyde. À l'inverse, si la concentration en oxygène est trop faible à l'interface, le métal peut se reformer réduisant la taille du domaine $(0, X)$.

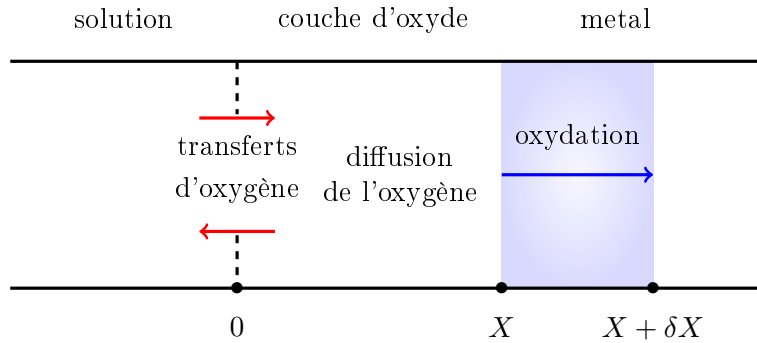


FIGURE 4.1 – Représentation des différentes zones considérées dans le modèle et de la propagation de l'interface mobile due à la réaction d'oxydation

En suivant la même approche que celle adoptée par Bataillon et ses coauteurs dans [12], nous nous focalisons sur l'évolution de la concentration en lacune d'oxygène, notée ρ , plutôt que sur la concentration en oxygène dans la zone $(0, X)$. Ces lacunes représentent des défauts d'oxygène dans la structure quasi cristalline de la couche d'oxyde. Nous supposons que la concentration de lacunes dans la zone oxydée évolue par diffusion linéaire. À l'interface entre la solution et la couche d'oxyde, le modèle DPCM propose une loi pour le flux de lacunes d'oxygènes qui est une fonction non linéaire de la concentration de lacune et du saut de potentiel électrostatique (non considéré dans le modèle simplifié). Ici nous nous donnons des concentrations limites $0 < \rho_- < \rho_+$ et nous imposons que le

le flux soit nul si $\rho_- < \rho < \rho_+$ et que le flux amène des lacunes dans la couche d'oxyde si $\rho = \rho_-$ et les évacue si $\rho = \rho_+$ (régulation).

À l'interface mobile X , la dégradation ou la reformation de métal libère dans ou soustrait à la couche d'oxyde des lacunes d'oxygène. De façon abstraite, nous voyons la zone métallique comme une source constante de lacune d'oxygène notée $\bar{\rho}$. En notant $X + \delta X$ une variation de l'interface X , alors le nombre de lacune ajouté ou retranché à la couche d'oxyde est $\bar{\rho} \delta X$. Cette constante $\bar{\rho}$ représente le maximum possible de ρ et si $\rho = \bar{\rho}$ sur $[0, +\infty)$ alors $X = 0$. Cette interprétation abstraite est conforme à la réaction d'oxydation au niveau de l'interface entre la couche d'oxyde et le métal. En effet, si la concentration en oxygène est basse au voisinage de X , le métal se reforme. Si on se concentre sur la concentration en lacune d'oxygène alors le métal se reforme si cette concentration est élevée.

En résumé, les inconnues du modèle sont : ρ la concentration en lacune d'oxygène, X l'abscisse de l'interface mobile, R une fonction dont les variations R' représentent la quantité de matière échangée entre la solution et la couche d'oxyde. Pour décrire mathématiquement les phénomènes exposés, nous considérons, pour $0 < T < +\infty$ fixé, les équations d'évolution suivantes

$$\partial_t \rho(x, t) - \partial_x^2 \rho(x, t) = 0 \quad \text{pour} \quad (x, t) \in (0, X(t)) \times (0, T), \quad (4.1a)$$

$$\rho(x, t) = \bar{\rho} \quad \text{pour} \quad (x, t) \in (X(t), +\infty) \times (0, T), \quad (4.1b)$$

$$\partial_x \rho(X(t), t) + X'(t) (\rho(X(t), t) - \bar{\rho}) = 0 \quad \text{pour} \quad t \in (0, T), \quad (4.1c)$$

$$\partial_x \rho(0, t) = R'(t) \quad \text{pour} \quad t \in (0, T), \quad (4.1d)$$

$$\rho(x, 0) = \rho^0(x) \quad \text{pour} \quad x \in (0, X^0), \quad (4.1e)$$

La contrainte (4.1b) garantit une concentration constante égale à $\bar{\rho}$ dans le métal. La condition au bord (4.1c) est une condition de type Neumann homogène sur un domaine mobile. Cette condition assure la conservation du nombre de lacunes d'oxygène au cours des échanges au travers de l'interface X . L'évolution de cette interface mobile est régie par l'équation

$$\lambda X'(t) = \alpha - (\bar{\rho} - \rho(X(t), t)) + \bar{\rho} (\log \bar{\rho} - \log \rho(X(t), t)) \quad \text{pour} \quad t \in (0, T), \quad (4.2)$$

où α et λ sont des constantes strictement positives. Nous supposons qu'initialement la couche d'oxyde est déjà formée, à savoir $X(0) = X^0 > 0$. Cette forme particulière pour l'équation (4.2) vient de la structure sous-jacente de flot de gradient pour une certaine métrique du modèle proposé. En particulier, l'équation (4.2) prend en compte les variations d'énergie des mécanismes impliqués dans le déplacement de l'interface mobile, voir Proposition 4.4.6. Enfin, il nous reste à décrire le comportement de la concentration en lacune d'oxygène lors de réactions chimiques entre la solution et la couche d'oxyde. Nous imposons des conditions non linéaires de type « thermostat » à l'interface fixe entre la couche d'oxyde et la solution. Nous définissons

$$\rho_+ = \bar{\rho} \exp \left(\beta + \frac{c^2}{2} - 1 \right) \quad \text{et} \quad \rho_- = \bar{\rho} \exp \left(\beta - \frac{c^2}{2} - 1 \right), \quad (4.3)$$

4.1. Introduction

avec $\beta \in \mathbb{R}$ et $c \in (0, +\infty)$ deux constantes vérifiant $\beta + c^2/2 < 1$. Dans le cas où la solution et la couche d'oxyde échangent de la matière, nous imposons à la concentration en lacune d'oxygène ρ de rester constante en $x = 0$, à savoir

$$\rho(0, t) = \rho_+ \text{ si } R'(t) > 0 \quad \text{et} \quad \rho(0, t) = \rho_- \text{ si } R'(t) < 0 \quad \text{pour } t \in (0, T). \quad (4.4)$$

Dans le cas où ces deux zones (solution/couche d'oxyde) n'échangent aucune matière, nous imposons que ρ vérifie

$$\rho_- \leq \rho(0, t) \leq \rho_+ \text{ si } R'(t) = 0 \quad \text{pour } t \in (0, T). \quad (4.5)$$

Notons que le modèle DPCM comprend des conditions au bord plus complexes que (4.4)-(4.5) décrivant les réactions chimiques se produisant entre la solution et la couche d'oxyde. Néanmoins, notre approche ne nous a pas permis pour l'instant d'inclure ce type de conditions dans le modèle simplifié.

Notons également que le modèle (4.1)-(4.5) néglige certains phénomènes décrits dans le modèle DPCM. En particulier, nous négligeons la présence d'un champ électrique dans la couche d'oxyde créé par la différence de potentiel entre la solution et le métal. Nous négligeons également la présence d'autre espèces chimiques (cations Fe^{3+} et électrons e^-) dans le domaine mobile $(0, X(t))$ ainsi que le phénomène de dissolution de la couche d'oxyde par la solution.

Dans ce travail, nous prouvons l'existence d'une solution faible au problème (4.1)-(4.2) notion que nous définissons à présent.

Définition 4.1.1. Soit un triplet (X^0, ρ^0, R^0) . On suppose que $X^0 > 0$, $R^0 \in \mathbb{R}$, $\rho^0(x) = \bar{\rho}$ pour tout $x \in (X^0, +\infty)$, $\rho|_{(0, X^0)} \in H^1$ et

$$0 < \rho^0(x) < \bar{\rho}, \quad \text{pour tout } x \in (0, X^0).$$

Un triplet (X, ρ, R) est dit solution faible du problème (4.1)-(4.2) si $X \in H^1(0, T)$, $\rho \in L^2(0, T; BV_{\text{loc}}(\mathbb{R}_+))$ et $R \in BV(0, T)$ et si ces fonctions vérifient pour tout $\psi \in \mathcal{D}([0, +\infty) \times [0, T])$

$$\begin{aligned} & - \int_0^T \int_{\mathbb{R}_+} \rho(x, t) \partial_t \psi(x, t) dx dt - \int_{\mathbb{R}_+} \rho^0(x) \psi(x, 0) dx \\ & + \int_0^T \psi(0, t) dR'(t) + \int_0^T \int_0^{X(t)} \partial_{x,a} \rho(x, t) \partial_x \psi(x, t) dx dt = 0, \end{aligned} \quad (4.6)$$

où R' désigne la dérivée en temps de la mesure R' et $\partial_{x,a} \rho$ désigne la partie absolument continue par rapport à la mesure de Lebesgue de la mesure $\partial_x \rho$. De plus, X et ρ doivent vérifier pour tout $\phi \in \mathcal{C}(0, T)$

$$\begin{aligned} \lambda \int_0^T X'(t) \phi(t) dt &= \alpha \int_0^T \phi(t) dt - \int_0^T (\bar{\rho} - \rho(X(t), t)) \phi(t) dt \\ &+ \bar{\rho} \int_0^T (\log \bar{\rho} - \log \rho(X(t), t)) \phi(t) dt. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Formellement, nous déduisons de (4.6) que si la mesure R' admet une densité par rapport à la mesure de Lebesgue sur $(0, T)$ et si ρ est au moins H^2 au voisinage de 0, alors pour presque tout $t \in (0, T)$

$$\partial_{x,a}\rho(0, t) = R'(t),$$

où nous identifions la mesure R' et sa densité.

Enonçons à présent le principal résultat de ce chapitre.

Théorème 4.1.1. *Soit un triplet (X^0, ρ^0, R^0) . Nous supposons que $X^0 > 0$, $R^0 \in \mathbb{R}$, $\rho^0(x) = \bar{\rho}$ pour tout $x \in (X^0, +\infty)$, $\rho^0|_{(0, X^0)} \in H^1$ et*

$$0 < \rho_- \leq \rho^0(x) < \bar{\rho}, \quad \text{pour tout } x \in (0, X^0).$$

Alors il existe au moins un triplet (X, ρ, R) solution faible du problème (4.1)-(4.2) au sens de la Définition 4.1.1. De plus, ρ vérifie pour presque tout $t \in (0, T)$

$$\rho_- \leq \rho(0, t) \leq \rho_+.$$

Afin d'établir ce résultat notre approche est fondée sur une interprétation de (4.1)-(4.2) comme flot de gradient pour une métrique de type Wasserstein, voir Section 4.2.1 pour une définition de cette distance. Notons que pour établir le Théorème 4.1.1 nous aurions également pu considérer d'autres métriques comme la métrique L^2 . Cependant, d'autres raisons, en particulier la question de l'unicité de solutions faibles au problème (4.1)-(4.2), nous poussent à considérer la distance de Wasserstein. Nous renvoyons à la Section 4.1.1 pour plus de détails concernant ce choix.

Pour tirer parti de la structure de flot de gradient, nous employons un schéma variationnel ou schéma minimisant semi-discret en temps de type JKO introduit par Jordan, Kinderlehrer et Otto dans [44]. Les solutions de ce schéma sont obtenues comme minimiseur d'une fonctionnelle constituée de deux termes, une distance et une fonctionnelle d'énergie. Dans le cas d'un schéma minimisant de type JKO, on considère la métrique de Wasserstein qui permet de munir l'ensemble des mesures positives et de même masse d'une distance. Cependant, l'une des difficultés de notre étude est d'adapter cette distance au type de mesures particulier qui apparaît dans notre modèle. En effet, la contrainte (4.1b) sur ρ nous impose de définir une distance sur l'ensemble des mesures μ définies sur $\mathbb{R}$ et valant $\bar{\rho}$ à partir d'un certain $\Lambda > 0$. En particulier, ces mesures sont de masse infinie et le cadre usuel pour les métriques de Wasserstein est proscrit. Nous renvoyons à la Section 4.2.2 pour plus de détails sur la construction des distances (de type Wasserstein) que nous considérerons dans ce travail.

Enfin, nous remarquons que la Définition 4.1.1 ne tient pas compte des conditions à l'interface fixe (4.4) et (4.5). En remarquant que l'on peut réécrire ces conditions sous la forme

$$(\rho(0, t) - \tilde{\rho}(0)) R'(t) \geq 0, \quad \text{pour } t \in (0, T). \quad (4.8)$$

Considérons $\phi \in \mathcal{D}(0, T)$ avec $\phi(t) \geq 0$ pour tout $t \in (0, T)$. En multipliant (4.1) par $(\rho - \tilde{\rho})\phi$ et en intégrant en espace et en temps, nous obtenons après intégration par parties

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2} \int_0^T \int_0^{+\infty} |\rho(x, t)|^2 \partial_t \phi(t) dx dt - \int_0^T \int_0^{+\infty} \rho(x, t) \tilde{\rho}(x) \partial_t \phi(t) dx dt \\ & + \int_0^T R'(t) (\rho(0, t) - \tilde{\rho}(0)) \phi(t) dt + \int_0^T \int_0^{X(t)} |\partial_{x,a} \rho(x, t)|^2 \phi(t) dx dt \\ & - \int_0^T \int_0^{X(t)} \partial_{x,a} \rho(x, t) \partial_x \tilde{\rho}(x) \phi(t) dx dt = 0. \end{aligned}$$

En utilisant l'inégalité (4.8) nous déduisons :

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2} \int_0^T \int_0^{+\infty} |\rho(x, t)|^2 \partial_t \phi(t) dx dt \\ & - \int_0^T \int_0^{+\infty} \rho(x, t) \tilde{\rho}(x) \partial_t \phi(t) dx dt + \int_0^T \int_0^{X(t)} |\partial_{x,a} \rho(x, t)|^2 \phi(t) dx dt \\ & - \int_0^T \int_0^{X(t)} \partial_{x,a} \rho(x, t) \partial_x \tilde{\rho}(x) \phi(t) dx dt \leq 0. \quad (4.9) \end{aligned}$$

L'inégalité variationnelle (4.9) est une relaxation des conditions (4.4)-(4.5). En effet, d'après ce qui vient d'être fait, si (X, ρ, R) est une solution assez régulière de (4.1)-(4.5), alors les conditions (4.4)-(4.5) et (4.9) sont équivalentes. Par contre l'inégalité (4.9) fait sens pour des fonctions peu régulières. En particulier, les fonctions (X, ρ, R) obtenues au Théorème 4.1.1 possèdent assez de régularité.

Une définition possible d'une notion de solution faible pour le problème (4.1)-(4.5) serait de rajouter à la Définition 4.1.1 l'inégalité variationnelle (4.9).

Notre approche nous permet d'affirmer que ρ obtenue au Théorème 4.1.1 vérifie pour presque tout $t \in (0, T)$ la condition $\rho(0, t) \in [\rho_-, \rho_+]$. Cependant, nous n'avons pas été en mesure d'établir une inégalité du type (4.9). Néanmoins, nous renvoyons aux Proposition 4.4.2, Proposition 4.4.3 et Proposition 4.4.4 où nous établissons que les solutions de notre schéma minimisant vérifient une inégalité du type (4.8). Ce qui nous laisse l'espoir de pouvoir établir une version discrète de (4.9) pour pouvoir ensuite faire tendre le paramètre de discrétisation en temps vers 0 et obtenir que les fonctions (X, ρ, R) introduites au Théorème 4.1.1 sont solutions faibles du problème (4.1)-(4.5).

4.1.1 Justifications mathématiques de l'approche par flot de gradient pour une métrique de type Wasserstein

Dans voulons dans cette section donner les raisons pour lesquelles nous avons choisi d'interpréter (4.1)-(4.2) comme un flot de gradient associé à une métrique de type Wasserstein alors qu'il s'agit essentiellement d'une équation de diffusion linéaire. Un premier

argument vient de la modélisation et de ses évolutions futures. La formule

$$\int_0^X \rho \ln \frac{\rho}{\bar{\rho}} dx,$$

que nous considérons comme définition de l'énergie des lacunes d'oxygène, voir Section 4.2.3, est un cas particulier. Nous pourrions être amenés à choisir des formes plus générales qui conduiront à des équations de diffusion non-linéaires sans que la structure de flot de gradient ne soit perdue. Plus particulièrement, la formule précédente ne prend pas en compte les effets de saturation pour ρ proche de $\bar{\rho}$. Pour cela, nous pourrions considérer

$$\int_0^X \left[a_1 \rho \ln \frac{\rho}{\bar{\rho}} + a_2 (\bar{\rho} - \rho) \ln \frac{\bar{\rho} - \rho}{\bar{\rho}} \right] dx,$$

avec $a_1, a_2 > 0$. Avec une telle fonctionnelle, les méthodes utilisées dans ce travail sont toujours valides.

Une autre raison vient de la difficulté mathématique introduite par la présence d'interfaces mobiles pour montrer l'unicité et même le caractère contractant du flot défini par (4.1)-(4.2). La situation serait plus simple si nous avions $X = L$ fixé indépendamment du temps avec une condition de flux nul en L . Dans ce cas, si nous considérons deux solutions ρ_1, ρ_2 de (4.1a)-(4.1d), (4.4) et (4.5). Nous obtenons par linéarité, en utilisant comme fonctions tests $\rho_1 - \rho_2$ et en intégrant par parties,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_0^L (\rho_1 - \rho_2)^2(x, t) dx + \int_0^L [\partial_x(\rho_1 - \rho_2)]^2(x, t) dx \\ = -(\rho_1 - \rho_2)(0, t) (R'_1 - R'_2)(t). \end{aligned}$$

Mais nos conditions aux bord impliquent précisément

$$(\rho_1 - \rho_2)(0, t)(R'_1 - R'_2)(t) \geq 0.$$

Ainsi, dans cette version simplifiée, le flot est contractant dans $L^2(0, L)$. Si maintenant, nous essayons de faire le même type de calcul avec le système initial, nous obtenons

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}} (\rho_1 - \rho_2)^2(x, t) dx + \int_{\mathbb{R}} [\partial_{x,a}(\rho_1 - \rho_2)]^2(x, t) dx \\ = -(\rho_1 - \rho_2)(0, t) (R'_1 - R'_2)(t) + \tilde{Q}. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Si le premier terme du membre de droite est toujours négatif, le nouveau terme de reste $\tilde{Q}$ est une combinaison de termes du type

$$(\rho_1 - \rho_2)(X_1^-(t), t) \partial_{x,a} \rho_2(X_1(t), t) \quad (4.11)$$

qui n'ont pas de signe et ne sont pas contrôlables par les termes du membre de gauche de (4.10) ou en tout cas ne permettent pas d'appliquer un raisonnement de type lemme de Grönwall. Il faut donc essayer une autre méthode et pour éviter d'avoir à traiter des termes du type (4.11) avec des dérivées ponctuelles, nous nous tournons vers des distances plus faibles que la norme L^2 et des énergies dont le taux de dissipation ne fait pas intervenir de dérivées en espace : voir la discussion sur l'unicité à la Section 4.6.

4.2 La méthode des mouvements minimisants

4.2.1 Résultats préliminaires et rappels en théorie du transport optimal

Avant d'introduire notre schéma minimisant, nous présentons différents objets, dans un cadre restreint mais suffisant pour notre travail, issus de la théorie du transport optimal. Nous renvoyons au livre de Santambrogio [67] et à ceux de Villani [73] et [74] pour une introduction complète et détaillée de cette théorie.

Nous commençons par introduire en dimension un, mais des généralisations en dimension supérieure sont possibles, le problème initial considéré par Monge dans [51] et qui a entraîné le développement de la théorie du transport optimal. Le problème s'énonce comme suit : soient deux mesures positives ν et η de même masse, définies sur un même intervalle ouvert et borné I de $\mathbb{R}$. On considère le problème de minimisation suivant :

$$\inf \left\{ \int_I (x - T(x))^2 d\nu(x) : T_{\#}\nu = \eta \right\}, \quad (4.12)$$

où la mesure $T_{\#}\nu$ est définie par $(T_{\#}\nu)(A) = \nu(T^{-1}(A))$ pour tout ensemble mesurable $A \subset \mathbb{R}$. Si une telle application T existe et réalise l'infimum de (4.12) alors T est appelée application de transport optimal. Dans le problème (4.12) on veut déplacer, via l'application T , une masse m située au point x vers un point $y = T(x)$. La condition $T_{\#}\nu = \eta$ permet d'assurer que m est distribuée suivant ν au départ et suivant η à l'arrivée. De plus, on veut que cette application déplace ces points en minimisant le coût quadratique, carré de la distance euclidienne entre x et $T(x)$.

Afin de résoudre (4.12), resté sans solution pendant plusieurs siècles, Kantorovich [46] introduit une relaxation de ce problème qui se formule comme suit :

$$\inf \left\{ \int_{I \times I} |x - y|^2 d\gamma(x, y) : \gamma \in \Gamma(\nu, \eta) \right\}, \quad (4.13)$$

où $\Gamma(\nu, \eta)$ désigne l'ensemble des plans de transport de ν à η défini par

$$\Gamma(\nu, \eta) = \left\{ \gamma \in \mathcal{M}^+(I \times I) : \pi_{1\#}\gamma = \nu, \pi_{2\#}\gamma = \eta \right\},$$

avec π_1 et π_2 les projections sur la première et deuxième coordonnée respectivement et $\mathcal{M}^+(I \times I)$ désigne l'ensemble des mesures positives sur $I \times I$. Dans la suite nous appellerons plan de transport optimal un plan γ réalisant l'infimum dans (4.13). Le problème (4.13) est une relaxation de (4.12). En effet, on peut maintenant distribuer la masse au point x sur plusieurs points. Les conditions $\pi_{1\#}\gamma = \nu$ et $\pi_{2\#}\gamma = \eta$ assurent que cette masse soit distribuée correctement au départ et à l'arrivée. Cette vision permet de rendre le problème (4.12) moins rigide. En particulier, si on arrive à prouver l'existence d'une application de transport optimal entre deux mesures alors on obtient l'existence d'un plan de transport optimal entre ces mesures mais l'inverse n'est pas vrai en général. Un contre exemple classique est le suivant : considérons $\nu = \delta_{-1}$ et $\eta = \mathcal{L} \llcorner [0, 1]$ où δ désigne la mesure de Dirac et $\mathcal{L} \llcorner [0, 1]$ désigne la restriction de la mesure de Lebesgue à

$[0, 1]$. Il n'existe alors aucune application de transport T telle que $T_{\#} \nu = \eta$. En effet, si une telle application existait alors

$$T_{\#} \nu = T_{\#} \delta_{-1} = \delta_{T(-1)} \neq \eta.$$

À l'inverse, il existe un unique plan de transport permettant de passer de ν à η . Ce plan est donné par $\gamma = \nu \otimes \eta$ et ainsi (4.13) possède une solution mais pas (4.12). Par contre, si on inverse l'ordre des mesures alors il existe une application de transport entre ν et η . Plus précisément, si $\nu = \mathcal{L} \llcorner [0, 1]$ et $\eta = \delta_{-1}$ alors l'application constante T définie par $T(x) = -1$ vérifie bien $T_{\#} \nu = \eta$. Nous utiliserons à de nombreuses reprises ce type d'application de transport constante qui envoie une mesure absolument continue sur une mesure de Dirac dans la suite.

Une question naturelle est alors de savoir si un plan de transport optimal existe toujours entre deux mesures positives ν et η de même masse. Par ailleurs, si un tel plan existe, est-il induit par une application de transport optimal T . On a le résultat suivant :

Théorème 4.2.1. [67, Théorème 1.17]. *Soient ν et η deux mesures positives et de même masse définies sur un intervalle ouvert et borné I de $\mathbb{R}$. Alors, il existe un plan de transport optimal γ pour le problème (4.13). Si ν est absolument continue par rapport à la mesure de Lebesgue alors γ est unique et est de la forme $(Id, T)_{\#} \nu$ où T est une application de transport optimal. De plus, dans ce cas il existe une unique, à constante additive près, application lipschitzienne appelée potentiel de Kantorovich ϕ telle que ϕ et T sont reliées par*

$$T(x) = x - \nabla \phi(x) \quad \forall x \in I.$$

Pour deux mesures positives ν et η définies sur un même intervalle ouvert et borné I de $\mathbb{R}$, la métrique de Wasserstein associée au coût quadratique, notée $\mathbf{W}_2$, est définie par

$$\mathbf{W}_2(\nu, \eta) = \left(\inf \left\{ \int_{I \times I} |x - y|^2 d\gamma(x, y) : \gamma \in \Gamma(\nu, \eta) \right\} \right)^{1/2}. \quad (4.14)$$

Le Théorème 4.2.1 permet alors d'affirmer que $\mathbf{W}_2(\nu, \eta)$ est bien définie. De plus, si l'on suppose que ν est absolument continue par rapport à la mesure de Lebesgue alors il existe une unique application T telle que $T_{\#} \nu = \eta$ et dans ce cas, on a la réécriture suivante de la métrique de Wasserstein

$$\mathbf{W}_2(\nu, \eta) = \left(\int_I |x - T(x)|^2 \nu(x) dx \right)^{1/2}.$$

Dans le cas où l'on considère deux mesures positives ν et η définies sur $\mathbb{R}$ et absolument continues par rapport à la mesure de Lebesgue, on peut montrer l'existence d'un plan de transport optimal induit par une application de transport, nous renvoyons à [67, Section

1.3.1]. Cependant dans ce cas, il faut supposer que les mesures ν et η admettent des moments d'ordre deux finis, c'est-à-dire

$$\int_{\mathbb{R}} |x|^2 \nu(x) dx < \infty \quad \text{et} \quad \int_{\mathbb{R}} |x|^2 \eta(x) dx < \infty.$$

Nous voulons à présent expliquer l'intérêt de la distance $\mathbf{W}_2$ pour l'étude de certains types d'équations aux dérivées partielles. Pour ce faire, considérons l'équation de la chaleur

$$\partial_t u(x, t) - \partial_x^2 u(x, t), \quad x \in \mathbb{R}, \quad t \in (0, +\infty), \quad (4.15)$$

avec une donnée initiale u^0 appartenant à $L^2(\mathbb{R})$. On peut démontrer que cette équation est un flot de gradient pour la fonctionnelle d'énergie de Dirichlet $\frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}} |\nabla \rho|^2 dx$ par rapport à la distance $L^2(\mathbb{R})$. Une façon de démontrer ce résultat est de se fixer $\tau > 0$ un pas de temps et de considérer le schéma de minimisation suivant : partant de u^0 , trouver pour tout $k \geq 0$ un minimiseur u^{k+1} de

$$u \mapsto \frac{1}{2\tau} \|u - u^k\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}} |\partial_x u(x)|^2 dx.$$

La distance $\mathbf{W}_2$ permet d'obtenir une autre interprétation de l'équation de la chaleur dans le cas où l'on considère des données initiales dans l'ensemble des mesures K défini par

$$K = \left\{ u : \mathbb{R} \rightarrow [0, +\infty) \text{ mesurable} : \int_{\mathbb{R}} u(x) dx = 1, \int_{\mathbb{R}} |x|^2 u(x) dx < \infty \right\}.$$

En effet, une idée introduite par Otto dans [60, 61] et Jordan, Kinderlherer et Otto dans [44] est de considérer les équations de type diffusion avec données initiales dans K comme des flots de gradients sur cet ensemble muni de $\mathbf{W}_2$. En particulier, l'équation de la chaleur sur $\mathbb{R}$ est obtenue comme flot de gradients pour la fonctionnelle d'entropie de Boltzmann $\int_{\mathbb{R}} \rho \log \rho dx$ par rapport à la distance $\mathbf{W}_2$. Pour démontrer un tel résultat, de façon similaire au cas précédent, on se fixe $\tau > 0$ un pas de temps et partant de $u^0 \in K$ on cherche à déterminer pour tout $k \geq 0$ un minimiseur $u^{k+1} \in K$ de

$$u \mapsto \frac{1}{2\tau} \mathbf{W}_2^2(u, u^k) + \int_{\mathbb{R}} u(x) \log u(x) dx. \quad (4.16)$$

Une fois l'existence d'une suite de minimiseurs $(u^k)_{k \in \mathbb{N}}$ établie, Jordan, Kinderlherer et Otto prouvent dans [44] le résultat suivant

Théorème 4.2.2. *Soit $u^0 \in K$ avec $\int_{\mathbb{R}} u^0 \log u^0 dx < \infty$ et $(u^k)_{k \in \mathbb{N}}$ la suite de solutions de (4.16). On définit la fonction $u^\tau : \mathbb{R} \times (0, \infty) \rightarrow [0, +\infty)$ par*

$$u^\tau(t) = u^{k+1} \quad \text{pour } t \in (k\tau, (k+1)\tau] \quad \forall k \geq 0,$$

avec $u^\tau(0) = u^0$. Alors, lorsque $\tau \rightarrow 0$, il existe $u \in \mathcal{D}(\mathbb{R} \times (0, +\infty))$ telle que, à une sous-suite extraite près,

$$u^\tau(t) \rightharpoonup u(t) \quad \text{faiblement dans } L^1(\mathbb{R}) \quad \text{pour tout } t \in (0, +\infty),$$

où u est l'unique solution de (4.15) avec

$$u(t) \rightarrow u^0 \quad \text{fortement dans } L^1(\mathbb{R}) \text{ pour } t \rightarrow 0$$

et pour tout $0 < T < +\infty$

$$\sup_{t \in (0, T)} \int_{\mathbb{R}} |x|^2 u(x, t) dx < \infty \quad \text{et} \quad \sup_{t \in (0, T)} \left| \int_{\mathbb{R}} u(x, t) \log u(x, t) dx \right| < \infty.$$

Ce résultat, permet de donner une justification mathématique à l'interprétation physique du phénomène de diffusion qui énonce qu'un tel phénomène est issu de la tendance d'un système à maximiser son entropie (mathématique).

Par la suite un grand nombre de travaux ont été réalisé démontrant que de nombreux modèles d'équations aux dérivées partielles sont des flots de gradient pour des fonctionnelles d'énergie bien choisies par rapport à la métrique $\mathbf{W}_2$. Nous citons l'exemple de l'équation de Fokker-Planck également traitée par Jordan, Kinderlehrer et Otto dans [44], certains modèles de mouvements de foule étudiés par Maury, Roudneff-Chupin et Santambrogio, voir [49]. Le système de Poisson-Nernst-Planck a été abordé par Kinderlehrer, Monsaingeon et Xu dans [47] et décrit le déplacement d'ions par diffusion et convection. Les équations de ce modèle sont similaires aux équations du modèle DPCM. Néanmoins, dans [47], les auteurs considèrent le cas où les équations du modèle sont définies dans tout l'espace. Enfin, plus proche de notre cas, Portegies et Peletier ont prouvé, dans [62], qu'un problème unidimensionnel à frontières libres modélisant la dissolution/précipitation de cristaux est un flot de gradient pour la métrique $\mathbf{W}_2$.

4.2.2 Définitions d'autres distances sur l'espace des mesures

Nous voulons introduire dans cette partie d'autres métriques sur l'espace des mesures. Nous introduisons tout d'abord une distance entre mesures de masses distinctes puis une distance entre mesures de masses non finies et non nécessairement positives en un point.

Le cas des mesures de masses distinctes. Le résultat obtenu par Jordan, Kinderlehrer et Otto dans [44] peut être également établi dans un domaine borné I de $\mathbb{R}$ où on impose des conditions au bord de type Neumann homogène afin de préserver au cours du temps l'égalité de masse entre deux mesures solutions de (4.16). Au vu des conditions au bord en $x = 0$ du système (4.1)-(4.5), il nous faut introduire une autre métrique capable de mesurer la distance entre deux mesures positives mais de masses non nécessairement égales. C'est l'objet de la métrique, notée $\mathbf{Wb}_2$, proposée par Figalli et Gigli dans [38]. Dans cet article, Figalli et Gigli établissent que l'équation de la chaleur avec condition au bord de type Dirichlet non-homogène égale à 1 est un flot de gradients pour la fonctionnelle d'entropie $\int_I \rho (\log \rho - 1) dx$ par rapport à la distance $\mathbf{Wb}_2$. Cette distance est définie comme suit :

Définition 4.2.1. Soient ν et η deux mesures positives définies sur un même intervalle ouvert et borné I de $\mathbb{R}$ de masses non nécessairement égales, la distance, notée $\mathbf{Wb}_2$,

entre ces deux mesures est définie de la façon suivante

$$\mathbf{Wb}_2(\nu, \eta) = \left(\inf \left\{ \int_{\bar{I} \times \bar{I}} |x - y|^2 d\gamma(x, y) : \gamma \in \hat{\Gamma}(\nu, \eta) \right\} \right)^{1/2},$$

où l'ensemble des plans de transport admissibles $\hat{\Gamma}(\nu, \eta)$ est défini par

$$\hat{\Gamma}(\nu, \eta) = \left\{ \gamma \in \mathcal{M}^+(\bar{I} \times \bar{I}) : \pi_{1\#} \gamma|_I = \nu, \pi_{2\#} \gamma|_I = \eta \right\}.$$

La principale différence entre la définition de $\mathbf{W}_2$ et $\mathbf{Wb}_2$ vient du fait que l'on considère des plans de transport admissibles définis sur $\bar{I} \times \bar{I}$ et pas seulement sur $I \times I$. On voit ainsi les extrémités de I comme des sources de masse où l'on peut prendre ou rendre de la masse et ce sans payer de coût supplémentaire. Cette vision des extrémités de l'intervalle I comme source de masse permet de considérer des mesures de masse distinctes. Le résultat suivant permet de savoir sous quelles conditions la métrique $\mathbf{Wb}_2$ est bien définie.

Proposition 4.2.1. [38, Corollaire 2.5]. *Soient ν et η deux mesures positives définies sur un même intervalle ouvert et borné I de $\mathbb{R}$ de masse non nécessairement égale, si ν et η sont absolument continues par rapport à la mesure de Lebesgue alors il existe un unique plan de transport optimal.*

Remarque 4.2.1. *La proposition précédente admet des généralisations dans le cas où une seule des mesures est absolument continue. Cependant le résultat énoncé dans la Proposition 4.2.1 est suffisant pour notre étude.*

Dans la suite on notera $\mathcal{M}_{ac}^+(\Omega)$ l'ensemble des mesures positives absolument continues par rapport à la mesure de Lebesgue définies sur un intervalle ouvert et borné I de $\mathbb{R}$. La proposition suivante énonce les principales propriétés vérifiées par $\mathbf{Wb}_2$ dans l'espace $\mathcal{M}_{ac}^+(\Omega)$.

Proposition 4.2.2. *La métrique $\mathbf{Wb}_2$ vérifie :*

- (i) *Si une suite de mesures $(\nu_n)_n$ de $\mathcal{M}_{ac}^+(I)$ converge vers une mesure ν de $\mathcal{M}_{ac}^+(I)$ pour $\mathbf{Wb}_2$ alors pour tout $\phi \in \mathcal{C}^0(I)$ on a*

$$\int_I \phi(x) \nu_n(x) dx \rightarrow \int_I \phi(x) \nu(x) dx.$$

De plus, l'espace $(\mathcal{M}_{ac}^+(I), \mathbf{Wb}_2)$ est un espace métrique séparable et complet (espace Polonais) et le sous-espace $\mathcal{M}_{\leq M}(I)$ constitué des mesures de $\mathcal{M}_{ac}^+(I)$ de masse inférieure ou égale à $M \in \mathbb{R}$ est compact.

- (ii) *$(\mathcal{M}_{ac}^+(I), \mathbf{Wb}_2)$ est un espace géodésique.*

On peut trouver une démonstration du point (i) de la Proposition 4.2.2 dans la preuve de la [38, Proposition 2.7] et celle du point (ii) dans la preuve de la [38, Proposition 2.9].

Le cas des mesures de masses non finies. A présent, pour $m \in \mathbb{R}$ et $a \in \mathbb{R}_+$, nous voulons munir le sous espace $\mathbb{A}_{a,m}$ des mesures positives sur $\{-a\} \cup (0, +\infty)$, noté $\mathcal{M}^+(\{-a\} \cup (0, +\infty))$ d'une distance adéquate, où $\mathbb{A}_{a,m}$ est défini comme suit

$$\mathbb{A}_{a,m} = \left\{ \mu \in \mathcal{M}^+(\{-a\} \cup (0, +\infty)) : \begin{array}{l} \text{la mesure} \\ \tilde{\mu} = \mu - \bar{\rho} \mathcal{L} \llcorner (0, +\infty) \text{ est à support compact et } \int d\tilde{\mu} = m \end{array} \right\}.$$

Pour deux mesures μ et μ' de $\mathbb{A}_{a,m}$ nous considérons

$$\mathbf{d}_1(\mu, \mu') = \mathbf{W}_2(\mu, \mu') = \left(\inf \left\{ \int |x - y|^2 d\gamma(x, y) : \gamma \in \Gamma(\mu, \mu') \right\} \right)^{1/2}.$$

La question est alors de savoir si $\mathbf{d}_1(\mu, \mu')$ est fini. On remarque dans un premier temps que $\Gamma(\mu, \mu') \neq \emptyset$. En effet, il suffit de considérer le produit tensoriel $\mu \otimes \mu'$. Nous définissons à présent $\Lambda \in (0, +\infty)$ telle que

$$\mu \llcorner (\Lambda, +\infty) = \mu' \llcorner (\Lambda, +\infty) = \bar{\rho}.$$

Nous pouvons alors décomposer les mesures μ et μ' sous la forme

$$\begin{aligned} \mu &= \nu + \bar{\rho} \mathcal{L} \llcorner (\Lambda, +\infty), \\ \mu' &= \nu' + \bar{\rho} \mathcal{L} \llcorner (\Lambda, +\infty), \end{aligned}$$

où ν et ν' appartiennent à $\mathcal{M}^+(\{-a\} \cup (0, \Lambda])$. En particulier, nous déduisons de la définition des mesures $\tilde{\mu}$ et $\tilde{\mu}'$ associées à μ et μ' les relations suivantes

$$\begin{aligned} \tilde{\mu} &= \nu - \bar{\rho} \mathcal{L} \llcorner (0, \Lambda], \\ \tilde{\mu}' &= \nu' - \bar{\rho} \mathcal{L} \llcorner (0, \Lambda], \end{aligned}$$

et nous remarquons que

$$\int d\nu - \int d\nu' = \int d\tilde{\mu} - \int d\tilde{\mu}' = 0. \quad (4.17)$$

Les mesures ν et ν' étant définies sur un intervalle borné de $\mathbb{R}$ nous savons d'après le Théorème 4.2.1 qu'il existe un plan de transport optimal $\hat{\gamma}$ tel que $\pi_{1\#} \hat{\gamma} = \nu$, $\pi_{2\#} \hat{\gamma} = \nu'$ et

$$\mathbf{W}_2(\nu, \nu') = \left(\int |x - y|^2 d\hat{\gamma}(x, y) \right)^{1/2} < \infty.$$

Nous considérons à présent le plan de transport γ défini par

$$\gamma = \hat{\gamma} + (Id, Id)_{\#} \bar{\rho} \mathcal{L} \llcorner (\Lambda, +\infty).$$

Nous calculons les marginales de γ :

$$\pi_{1\#} \gamma = \pi_{1\#} \hat{\gamma} + \bar{\rho} \mathcal{L} \llcorner (\Lambda, +\infty) = \nu + \bar{\rho} \mathcal{L} \llcorner (\Lambda, +\infty) = \mu,$$

et

$$\pi_{2\#} \gamma = \pi_{2\#} \hat{\gamma} + \bar{\rho} \mathcal{L} \llcorner (\Lambda, +\infty) = \nu' + \bar{\rho} \mathcal{L} \llcorner (\Lambda, +\infty) = \mu'.$$

De plus, nous remarquons que

$$\mathbf{d}_1^2(\mu, \mu') \leq \int |x - y|^2 d\gamma(x, y) = \int |x - y|^2 d\hat{\gamma}(x, y) = \mathbf{W}_2^2(\nu, \nu') < \infty.$$

Par ailleurs, en adaptant l'approche de [67, Section 1.6], tout $\gamma \in \Gamma(\mu, \mu')$ est monotone, au sens où pour tout $(x, y), (x', y') \in \text{supp}(\gamma)$ alors

$$(x - x')(y - y') \geq 0.$$

Or, si nous définissons $\hat{m} = \nu((-\infty, \Lambda]) = \nu'((-\infty, \Lambda])$ d'après (4.17), alors en considérant les fonctions h_ν et $h_{\nu'}$ définies sur $[0, \hat{m}]$ et à valeurs dans $\{-a\} \cup (0, \Lambda]$ par

$$\begin{aligned} h_\nu(s) &= \inf \{x \in \mathbb{R} \mid \nu((-\infty, x]) \geq s\}, \\ h_{\nu'}(s) &= \inf \{x \in \mathbb{R} \mid \nu'((-\infty, x]) \geq s\}, \end{aligned}$$

nous obtenons, en suivant l'approche de [67, Section 2.1],

$$\hat{\gamma} = (h_\nu, h_{\nu'})_{\#} \mathcal{L} \llcorner [0, \hat{m}].$$

Avec cette définition, $\hat{\gamma} \in \Gamma(\nu, \nu')$ est l'unique plan de transport monotone entre ν et ν' . Ce qui implique que le plan $\gamma \in \Gamma(\mu, \mu')$ défini par

$$\gamma = \hat{\gamma} + (Id, Id)_{\#} \bar{\rho} \mathcal{L} \llcorner (\Lambda, +\infty),$$

est l'unique plan de transport monotone entre μ et μ' . Ce qui prouve l'existence et l'unicité d'un plan de transport optimal entre ces mesures. De plus,

$$\mathbf{d}_1^2(\mu, \mu') = \int (x - y)^2 d\gamma(x, y) = \int_{(\{-a\} \cup (0, \Lambda])^2} (x - y)^2 d\hat{\gamma}(x, y) = \mathbf{W}_2^2(\nu, \nu').$$

La construction précédente montre que γ est indépendant de Λ .

Le cas des mesures de masses non finies et non nécessairement positives en un point. Nous voulons généraliser la construction précédente au cas des mesures pouvant avoir une masse négative en $-a$. Plus précisément, nous considérons l'espace des mesures suivant

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbb{A}}_{a,m} &= \left\{ \mu = \rho \mathcal{L} \llcorner (0, +\infty) + R \delta_{-a} : \rho : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+ \text{ mesurable, } R \in \mathbb{R} \right. \\ &\quad \left. \text{la mesure } \tilde{\mu} = \mu - \bar{\rho} \mathcal{L} \llcorner (0, +\infty) \text{ est à support compact et } \int d\tilde{\mu} = m \right\}. \end{aligned}$$

Nous définissons alors pour tout μ et $\mu' \in \tilde{\mathbb{A}}_{a,m}$

$$\mathbf{d}_2(\mu, \mu') = \inf_{\substack{R+\theta \geq 0 \\ R'+\theta \geq 0}} \mathbf{d}_1(\mu + \theta \delta_{-a}, \mu' + \theta \delta_{-a}) = \inf_{\substack{R+\theta \geq 0 \\ R'+\theta \geq 0}} \mathbf{W}_2(\nu + \theta \delta_{-a}, \nu' + \theta \delta_{-a}),$$

où pour des mesures μ et μ' de $\tilde{\mathbb{A}}_{a,m}$ on considère $\Lambda > 0$ assez grand pour que $\rho(x) = \rho'(x) = \bar{\rho}$ pour $x \geq \Lambda$ et ν et ν' sont définies par

$$\nu = \rho \mathcal{L} \llcorner (0, \Lambda) + R \delta_{-a}, \quad (4.18)$$

$$\nu' = \rho' \mathcal{L} \llcorner (0, \Lambda) + R \delta_{-a}. \quad (4.19)$$

Prouvons que $\mathbf{d}_2$ vérifie l'inégalité triangulaire. Pour cela, pour deux mesures ν et ν' de la forme (4.18)-(4.19), nous remarquons que pour tout $v \geq 0$

$$\mathbf{W}_2(\nu + (\theta + v) \delta_{-a}, \nu' + (\theta + v) \delta_{-a}) \leq \mathbf{W}_2(\nu + \theta \delta_{-a}, \nu' + \theta \delta_{-a}), \quad (4.20)$$

pour $R+\theta \geq 0$ et $R'+\theta \geq 0$. Nous considérons à présent trois mesures μ_1, μ_2 et $\mu_3 \in \tilde{\mathbb{A}}_{a,m}$ avec ν_1, ν_2 et ν_3 les mesures associées et de la forme (4.18). Nous définissons, un réel θ tel que $R_1 + \theta \geq 0, R_2 + \theta \geq 0$ et $R_3 + \theta \geq 0$. Pour tout $v \geq 0$ nous obtenons alors

$$\mathbf{d}_2(\mu_1, \mu_3) \leq \mathbf{W}_2(\nu_1 + (\theta + v) \delta_{-a}, \nu_3 + (\theta + v) \delta_{-a}),$$

et

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_2(\mu_1, \mu_3) &\leq \mathbf{W}_2(\nu_1 + (\theta + v) \delta_{-a}, \nu_2 + (\theta + v) \delta_{-a}) \\ &\quad + \mathbf{W}_2(\nu_2 + (\theta + v) \delta_{-a}, \nu_3 + (\theta + v) \delta_{-a}). \end{aligned}$$

Nous déduisons de (4.20)

$$\mathbf{d}_2(\mu_1, \mu_3) \leq \mathbf{W}_2(\nu_1 + \theta \delta_{-a}, \nu_2 + \theta \delta_{-a}) + \mathbf{W}_2(\nu_2 + \theta \delta_{-a}, \nu_3 + \theta \delta_{-a}).$$

Si à présent nous considérons l'infimum des θ tel que $R_1 + \theta \geq 0, R_2 + \theta \geq 0$ et $R_3 + \theta \geq 0$ nous obtenons

$$\mathbf{d}_2(\mu_1, \mu_3) \leq \mathbf{d}_2(\mu_1, \mu_2) + \mathbf{d}_2(\mu_2, \mu_3)$$

Ainsi, $\mathbf{d}_2$ définit une distance sur $\tilde{\mathbb{A}}_{a,m}$. Dans la suite nous considérons des plans de transport dans l'ensemble $\tilde{\Gamma}(\mu, \mu')$ où

$$\tilde{\Gamma}(\mu, \mu') = \{ \gamma \in \mathcal{M}(\mathbb{R}^2) : \pi_{1\#} \gamma = \mu, \pi_{2\#} \gamma = \mu' \}.$$

En particulier, on considère $\gamma \in \tilde{\Gamma}(\mu, \mu')$ avec

$$\gamma \llcorner \mathbb{R}^2 \setminus \{(-a, -a)\} \in \mathcal{M}^+(\mathbb{R}^2 \setminus \{(-a, -a)\}). \quad (4.21)$$

Enfin, nous remarquons que $\mathbf{d}_2$ est indépendante de θ et que le plan de transport optimal $\gamma_\theta \in \Gamma(\mu + \theta \delta_{-a}, \mu' + \theta \delta_{-a})$ est monotone et de la forme

$$\gamma_\theta = \gamma^* + \theta \delta_{(-a, -a)},$$

4.2. La méthode des mouvements minimisants

avec $\gamma^* \in \tilde{\Gamma}(\mu, \mu')$ vérifiant (4.21). En particulier, dans le cas $\theta = -R \wedge R' = -\min(R, R')$ aucune masse n'est envoyée de $-a$ à $-a$. D'après les remarques précédentes nous voyons qu'une définition équivalente de $\mathbf{d}_2$ est donnée par

$$\mathbf{d}_2(\mu, \mu') = \left(\inf \left\{ \int |x - y|^2 d\gamma(x, y) : \gamma \in \Gamma(\mu, \mu'), \gamma \geq 0 \text{ sur } \mathbb{R}^2 \setminus \{(-a, -a)\} \right\} \right)^{1/2}, \quad (4.22)$$

où l'unique minimiseur est donné par γ^* . Nous verrons dans la suite comment construire un tel γ^* dans le cas particulier où $a = c\sqrt{\tau}$ et $m = 0$.

4.2.3 Introduction du schéma minimisant et notations

Dans cette partie, nous introduisons le schéma minimisant étudié dans ce travail ainsi qu'un ensemble de notations utilisées dans la suite.

On définit, pour $\tau > 0$ un pas de temps de l'intervalle $(0, T)$, l'espace des mesures $\mathbb{A}$ défini par

$$\mathbb{A} = \left\{ (X, \mu) \in \mathbb{R}_+ \times \tilde{\mathbb{A}}_{c\sqrt{\tau}, 0} : \rho = \bar{\rho} \text{ p.p. sur } (X, +\infty) \right\}. \quad (4.23)$$

Un pas de temps consiste à effectuer l'opération suivante : pour $(X^0, \mu^0) \in \mathbb{A}$, déterminer un couple $(X, \mu) \in \mathbb{A}$ tel que

$$(X, \mu) = \operatorname{argmin}_{(Y, \nu) \in \mathbb{A}} \left\{ \frac{1}{2\tau} \mathbf{d}^2((Y, \nu); (X^0, \mu^0)) + \mathbf{E}(Y, \nu) \right\}. \quad (4.24)$$

La distance est définie par

$$\mathbf{d}^2((X, \mu); (X^0, \mu^0)) = \mathbf{d}_2^2(\mu, \mu^0) + \lambda (X - X^0)^2, \quad (4.25)$$

où $\mathbf{d}_2$ est définie par (4.22). La fonctionnelle d'énergie $\mathbf{E}$ est définie par

$$\mathbf{E}(X, \mu) = \mathbf{E}_B(X, \rho) - \alpha X + \beta R, \quad (4.26)$$

où l'énergie de « Boltzmann » est donnée par

$$\mathbf{E}_B(X, \rho) = \int_0^X \rho(x) \log \left(\frac{\rho(x)}{\bar{\rho}} \right) dx. \quad (4.27)$$

Enfin, pour $(X^0, \mu^0) \in \mathbb{A}$ et $(X, \mu) \in \mathbb{A}$ nous introduisons la fonctionnelle suivante

$$\mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu) = \frac{1}{2\tau} \mathbf{d}^2((X, \mu); (X^0, \mu^0)) + \mathbf{E}(X, \mu). \quad (4.28)$$

Dans la suite nous définissons des notations concernant le plan de transport optimal $\gamma \in \Gamma(\mu, \mu^0)$ apparaissant dans la définition de $\mathbf{d}_2$ donnée par (4.22). Pour construire ce plan de transport, nous savons d'après la Section 4.2.2, qu'il suffit de construire un plan

de transport entre les mesures $\rho \mathcal{L} \llcorner (0, X \vee X^0) + R \delta_{-c\sqrt{\tau}}$ et $\rho^0 \mathcal{L} \llcorner (0, X \vee X^0) + R^0 \delta_{-c\sqrt{\tau}}$ où $X \vee X^0 = \max(X, X^0)$. La construction d'un tel plan de transport optimal dépend de $R \vee R^0$.

Cas $R < R^0$ (Figure 4.2). Dans ce cas, nous notons $\gamma_1 \in \Gamma(\mu, \mu^0)$ le plan de transport optimal entre μ et μ^0 . Nous définissons $\ell_1 > 0$ tel que

$$\int_0^{\ell_1} \rho(x) dx = R^0 - R. \quad (4.29)$$

Cette définition de ℓ_1 et l'égalité de masse

$$R + \int_0^{X \vee X^0} \rho(x) dx = R^0 + \int_0^{X \vee X^0} \rho^0(x) dx,$$

implique que

$$\int_{\ell_1}^{X \vee X^0} \rho(x) dx = \int_0^{X \vee X^0} \rho^0(x) dx.$$

La mesure $\rho \mathcal{L} \llcorner (0, X \vee X^0)$ étant absolument continue par rapport à la mesure de Lebesgue. Nous déduisons du Théorème 4.2.1, l'existence d'une unique application de transport optimal $T_1 : (0, +\infty) \rightarrow \mathbb{R}$ avec

$$\begin{aligned} T_1(x) &= -c\sqrt{\tau} \quad \forall x \in (0, \ell_1), \\ T_1(x) &= x \quad \forall x \in (X \vee X^0, +\infty), \end{aligned}$$

et telle que

$$\begin{aligned} T_{1\#} \rho \mathcal{L} \llcorner (0, +\infty) &= T_{1\#} \rho \mathcal{L} \llcorner (\ell_1, +\infty) + T_{1\#} \rho \mathcal{L} \llcorner (0, \ell_1) \\ &= \rho^0 \mathcal{L} \llcorner (0, +\infty) + (R^0 - R) \delta_{-c\sqrt{\tau}} = \mu^0. \end{aligned}$$

Avec ces notations, le plan γ_1 est défini par

$$\gamma_1 = (Id, T_1)_{\#} \rho \mathcal{L} \llcorner (\ell_1, +\infty) + (Id, T_1)_{\#} \rho \mathcal{L} \llcorner (0, \ell_1) + R \delta_{(-c\sqrt{\tau}, -c\sqrt{\tau})}. \quad (4.30)$$

Vérifions alors que

$$\pi_{1\#} \gamma_1 = \rho \mathcal{L} \llcorner (0, +\infty) + R \delta_{-c\sqrt{\tau}} = \mu,$$

et

$$\pi_{2\#} \gamma_1 = \rho^0 \mathcal{L} \llcorner (0, +\infty) + (R^0 - R) \delta_{-c\sqrt{\tau}} + R \delta_{-c\sqrt{\tau}} = \mu^0.$$

De plus, la définition de γ_1 permet de déduire que

$$\mathbf{d}_2^2(\mu, \mu^0) = \int_{\ell_1}^{+\infty} (x - T_1(x))^2 \rho(x) dx + \int_0^{\ell_1} (x + c\sqrt{\tau})^2 \rho(x) dx. \quad (4.31)$$

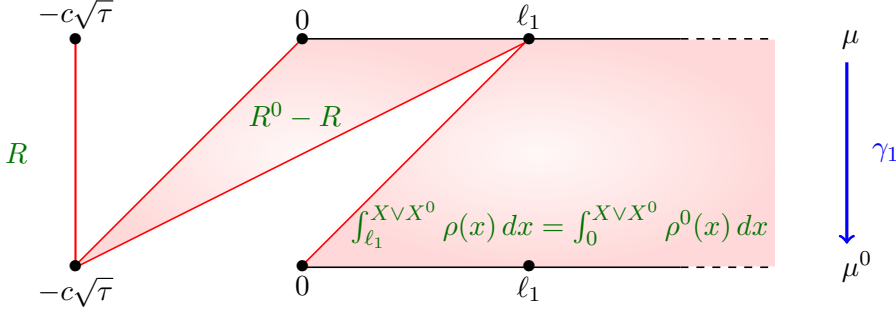


FIGURE 4.2 – Représentation du plan de transport optimal, noté γ_1 , permettant de passer de μ^0 à μ dans le cas $R < R^0$. Nous délimitons en rouge les zones où γ_1 présente un comportement particulier et en vert les masses déplacées dans ces zones.

Cas $R > R^0$ (Figure 4.3). Dans ce cas, nous notons $\gamma_2 \in \Gamma(\mu, \mu^0)$ le plan de transport optimal entre μ et μ^0 . Nous définissons $\ell_2 > 0$ tel que

$$\int_0^{\ell_2} \rho^0(x) dx = R - R^0. \quad (4.32)$$

On remarque que

$$\int_0^{X \vee X^0} \rho(x) dx = \int_{\ell_2}^{X \vee X^0} \rho^0(x) dx.$$

La mesure $\rho \mathcal{L} \llcorner (0, X \vee X^0)$ étant absolument continue par rapport à la mesure de Lebesgue, il existe d'après le Théorème 4.2.1, une unique application de transport optimal $T_2 : (0, +\infty) \rightarrow (\ell_2, +\infty)$ telle que

$$T_{2\#} \rho \mathcal{L} \llcorner (0, +\infty) = \rho^0 \mathcal{L} \llcorner (\ell_2, +\infty), \quad (4.33)$$

où $T_2(x) = x$ pour $x > X \vee X^0$. De plus, nous introduisons l'application constante S_2 définie sur $(0, \ell_2)$ par $S_2(x) = -c\sqrt{\tau}$ telle que

$$S_{2\#} \rho^0 \mathcal{L} \llcorner (0, \ell_2) = (R - R^0) \delta_{-c\sqrt{\tau}}.$$

Le plan γ_2 s'écrit alors

$$\gamma_2 = (Id, T_2)_{\#} \rho \mathcal{L} \llcorner (0, +\infty) + (S_2, Id)_{\#} \rho^0 \mathcal{L} \llcorner (0, \ell_2) + R^0 \delta_{(-c\sqrt{\tau}, -c\sqrt{\tau})}. \quad (4.34)$$

Le plan γ_2 étant ainsi défini nous remarquons que

$$\begin{aligned} \pi_{1\#} \gamma_2 &= \rho \mathcal{L} \llcorner (0, +\infty) + S_{2\#} \rho^0 \mathcal{L} \llcorner (0, \ell_2) + R^0 \delta_{-c\sqrt{\tau}} \\ &= \rho \mathcal{L} \llcorner (0, +\infty) + (R - R^0) \delta_{-c\sqrt{\tau}} + R^0 \delta_{-c\sqrt{\tau}} = \mu, \end{aligned}$$

et

$$\pi_{2\#} \gamma_2 = \rho^0 \mathcal{L} \llcorner (\ell_2, +\infty) + \rho^0 \mathcal{L} \llcorner (0, \ell_2) + R^0 \delta_{-c\sqrt{\tau}} = \mu^0.$$

Nous en déduisons également que

$$\mathbf{d}_2^2(\mu, \mu^0) = \int_0^{+\infty} (x - T_2(x))^2 \rho(x) dx + \int_0^{\ell_2} (c\sqrt{\tau} + y)^2 \rho^0(y) dy. \quad (4.35)$$

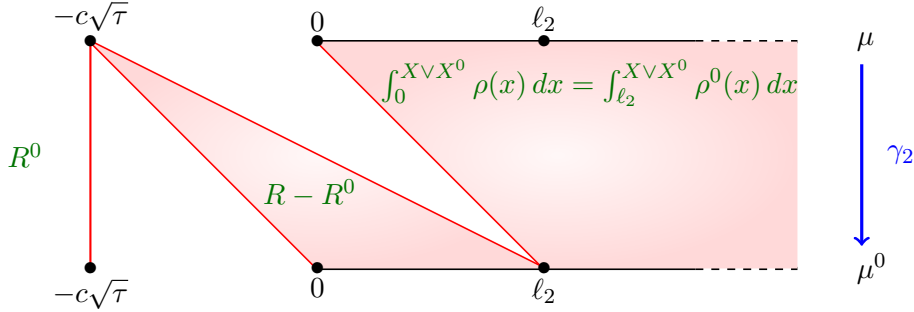


FIGURE 4.3 – Représentation du plan de transport, noté γ_2 , permettant de passer de μ^0 à μ dans le cas $R > R^0$. Nous délimitons en rouge les zones où γ_2 présente un comportement particulier et en vert les masses déplacées dans ces zones.

Cas $R = R^0$ (Figure 4.4). Enfin, nous notons $\gamma_3 \in \Gamma(\mu, \mu^0)$ le plan de transport optimal permettant de passer de μ à μ^0 . Nous remarquons que

$$\int_0^{X \vee X^0} \rho(x) dx = \int_0^{X \vee X^0} \rho^0(x) dx.$$

La mesure $\rho \mathcal{L} \llcorner (0, X \vee X^0)$ est absolument continue par rapport à la mesure de Lebesgue, nous en déduisons d'après le Théorème 4.2.1 l'existence d'une unique application de transport optimal $T_3 : (0, +\infty) \rightarrow (0, +\infty)$ telle que

$$T_{3\#} \rho \mathcal{L} \llcorner (0, +\infty) = \rho^0 \mathcal{L} \llcorner (0, +\infty),$$

où $T_3(x) = x$ pour tout $x \in (X \vee X^0, +\infty)$. Nous définissons le plan γ_3 par

$$\gamma_3 = (Id, T_3)_{\#} \rho \mathcal{L} \llcorner (0, +\infty) + R \delta_{(-c\sqrt{\tau}, -c\sqrt{\tau})}. \quad (4.36)$$

Le plan γ_3 étant ainsi défini nous obtenons

$$\pi_{1\#} \gamma_3 = \rho \mathcal{L} \llcorner (0, +\infty) + R \delta_{-c\sqrt{\tau}} = \mu,$$

et, comme $R = R^0$,

$$\pi_{2\#} \gamma_3 = \rho^0 \mathcal{L} \llcorner (0, +\infty) + R^0 \delta_{-c\sqrt{\tau}} = \mu^0.$$

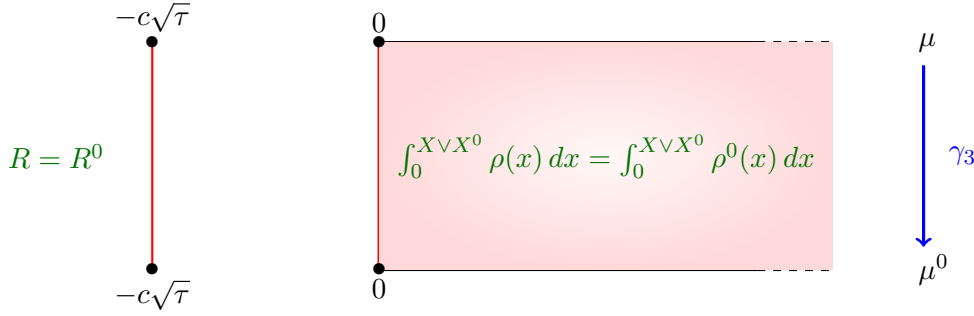


FIGURE 4.4 – Représentation du plan de transport, noté γ_3 , permettant de passer de μ^0 à μ . Nous délimitons en rouge les zones où γ_3 présente un comportement particulier et en vert les masses déplacées dans ces zones.

De plus, par construction de γ_3 nous déduisons

$$\mathbf{d}_2^2(\mu, \mu^0) = \int_0^{+\infty} (x - T_3(x))^2 \rho(x) dx. \quad (4.37)$$

4.2.4 Principaux résultats

Nous prouvons dans un premier temps l'existence d'une solution au problème de minimisation (4.24).

Théorème 4.2.3 (Existence d'un minimiseur). *Soit $(X^0, \mu^0) \in \mathbb{A}$, on suppose que $X^0 > 0$ et ρ^0 la partie absolument continue par rapport à la mesure de Lebesgue de la mesure μ_0 vérifie $\rho^0|_{(0, X^0)} \in H^1$ et*

$$0 < \rho_- \leq \rho^0(x) < \bar{\rho}, \quad \text{pour tout } x \in (0, X^0).$$

Alors pour tout $0 < \tau < 1$ le problème (4.24) admet au moins un minimiseur $(X, \mu) \in \mathbb{A}$ et X vérifie

$$X^0 \leq X. \quad (4.38)$$

La preuve de ce résultat repose sur des outils classiques en théorie du calcul des variations. En partant d'une suite minimisante nous établissons, à extraction près, que cette suite converge vers un minimiseur du problème (4.24). Enfin pour montrer (4.38), nous raisonnons par l'absurde en supposant que $X < X^0$. Le couple (X^0, μ) est alors admissible et par optimalité de (X, μ) nous obtenons

$$\mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu) \leq \mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X^0, \mu),$$

ce qui est faux quand $\alpha > 0$.

Une fois l'existence d'une solution au problème (4.24), nous étudions dans la Section 4.4

les différentes propriétés vérifiées par le couple $(X, \mu) \in \mathbb{A}$ obtenu au Théorème 4.2.3. En particulier, nous montrons que $\rho \in BV_{\text{loc}}(\mathbb{R}_+)$ et nous établissons ensuite l'équation d'Euler Lagrange vérifiée par (X, μ) .

Proposition 4.2.3. *Sous les hypothèses du Théorème 4.2.3, pour toute fonction $\psi \in \mathcal{D}([0, +\infty))$ l'égalité suivante est vérifiée*

$$\int_0^\infty \frac{\rho(x) - \rho^0(x)}{\tau} \psi(x) dx + \frac{R - R^0}{\tau} \psi(0) + \int_0^X \partial_{x,a} \rho(x) \psi'(x) dx = Q, \quad (4.39)$$

où Q est un terme de reste tel que

$$|Q| \leq \frac{\|\psi''\|_\infty}{\tau} \mathbf{d}_2^2(\mu, \mu^0) + \|\psi'\|_\infty \left(\frac{1}{\tau} \int_0^{\ell_1} (x + c\sqrt{\tau}) \rho(x) dx + \frac{1}{\tau} \int_0^{\ell_2} x \rho^0(x) dx \right). \quad (4.40)$$

Ensuite, pour $\tau > 0$ un pas de temps de l'intervalle $(0, T)$ avec $0 < T < +\infty$ fixé, nous définissons un entier N_T tel que $N_T \tau = T$. Nous considérons alors le schéma itératif suivant : partant de $(X^0, \mu^0) \in \mathbb{A}$, vérifiant les hypothèses du Théorème 4.2.3, déterminer pour tout $0 \leq n \leq N_T - 1$ un couple $(X^{n+1}, \mu^{n+1}) \in \mathbb{A}$ solution du problème

$$(X^{n+1}, \mu^{n+1}) = \operatorname{argmin}_{(Y, \nu) \in \mathbb{A}} \left\{ \frac{1}{2\tau} \mathbf{d}^2((Y, \nu); (X^n, \mu^n)) + \mathbf{E}(Y, \nu) \right\}, \quad (4.41)$$

où $\mathbf{d}$ et $\mathbf{E}$ sont introduites à la Section 4.2.3. Nous déduisons par application récursive du Théorème 4.2.3 l'existence d'une suite $(X^n, \mu^n)_{1 \leq n \leq N_T}$ de $\mathbb{A}$ solution pour tout n de (4.41).

Une fois l'existence de cette suite de solution obtenue nous définissons les reconstructions suivantes :

$$\rho^\tau(t) = \rho^{n+1}, \quad X^\tau(t) = X^{n+1} \quad \text{pour } t \in (n\tau, (n+1)\tau], \quad (4.42)$$

avec $\rho^\tau(0) = \rho^0$, $X^\tau(0) = X^0$ et

$$\tilde{X}^\tau(t) = \frac{t - n\tau}{\tau} X^{n+1} + \frac{(n+1)\tau - t}{\tau} X^n \quad \text{pour } t \in (n\tau, (n+1)\tau], \quad (4.43)$$

$$\tilde{R}^\tau(t) = \frac{t - n\tau}{\tau} R^{n+1} + \frac{(n+1)\tau - t}{\tau} R^n \quad \text{pour } t \in (n\tau, (n+1)\tau], \quad (4.44)$$

avec $\tilde{X}^\tau(0) = X^0$ et $\tilde{R}^\tau(0) = R^0$. Nous prouvons ensuite que ces fonctions convergent lorsque $\tau \rightarrow 0$ vers une solution faible du problème (4.1)-(4.2), c'est l'objet du Théorème 4.2.4.

4.3. Preuve du Théorème 4.2.3

Théorème 4.2.4. *Sous les hypothèses du Théorème 4.2.3 et pour tout $0 < T < \infty$, il existe $X \in H^1(0, T)$, $\rho \in L^2(0, T; BV_{\text{loc}}(\mathbb{R}_+))$ et $R \in BV(0, T)$ telles que, à une sous-suite extraite près, lorsque $\tau \rightarrow 0$*

$$\begin{aligned} \tilde{X}^\tau &\rightarrow X \quad \text{fortement dans } L^2(0, T), \\ (\tilde{X}^\tau)' &\rightharpoonup X' \quad \text{faiblement dans } L^2(0, T), \\ \rho^\tau &\rightarrow \rho \quad \text{fortement dans } L^p(0, T; L^p_{\text{loc}}(\mathbb{R}_+)), \quad \forall 1 \leq p < \infty, \\ \tilde{R}^\tau &\rightarrow R \quad \text{fortement dans } L^1(0, T), \\ (\tilde{R}^\tau)' &\rightharpoonup R' \quad \text{faiblement au sens des mesures de Radon,} \end{aligned}$$

et pour tout $\psi \in \mathcal{D}([0, +\infty) \times [0, T))$

$$\int_0^T \int_0^{X^\tau(t)} \partial_{x,a} \rho^\tau(x, t) \partial_x \psi(x, t) dx dt \rightarrow \int_0^T \int_0^{X(t)} \partial_{x,a} \rho(x, t) \partial_x \psi(x, t) dx dt. \quad (4.45)$$

La fonction limite ρ vérifie pour presque tout $t \in (0, T)$

$$\rho(0, t) \in [\rho_-, \rho_+]. \quad (4.46)$$

De plus, (X, ρ, R) est solution faible du problème (4.1)-(4.2) au sens de la Définition 4.1.1.

Nous prouvons le Théorème 4.2.4 à la Section 4.5. Pour ce faire, nous établissons des estimations uniforme en τ sur les reconstructions (4.42)-(4.44), qui nous permettent de déduire l'existence des fonctions X , ρ et R , voir Proposition 4.5.2. Enfin, nous montrons que le triplet (X, ρ, R) est solution faible du problème (4.1)-(4.2) au sens de la Définition 4.1.1.

4.3 Preuve du Théorème 4.2.3

Pour tout $(X, \mu) \in \mathbb{A}$ nous remarquons que

$$\mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu) \geq \int_0^X \rho (\log \rho - \log \bar{\rho}) - \alpha X + \beta R + \frac{\lambda}{2\tau} (X - X^0)^2,$$

et

$$R = - \int_0^X \rho + \bar{\rho} X.$$

Nous obtenons alors

$$\mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu) \geq \int_0^X \rho (\log \rho - \tilde{\beta}) - \alpha X + \beta \bar{\rho} X + \frac{\lambda}{2\tau} (X - X^0)^2,$$

avec $\tilde{\beta} = \beta + \log \bar{\rho}$. De plus, si $X > 0$ d'après l'inégalité de Jensen et la convexité de $f(x) = x \log x$ sur $(0, +\infty)$

$$\int_0^X \rho (\log \rho - \tilde{\beta}) \geq X f \left(\int_0^X \rho \right) - \tilde{\beta} X \int_0^X \rho,$$

Une étude de la fonction $x \mapsto x \log x - \tilde{\beta} x$ permet alors d'affirmer qu'il existe $K' = \bar{\rho} \exp(\beta - 1)$ telle que

$$\int_0^X \rho (\log \rho - \tilde{\beta}) \geq -K' X.$$

Nous en déduisons que

$$\mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu) \geq \frac{\lambda}{2\tau} (X - X^0)^2 + X (\beta \bar{\rho} - \alpha - K'). \quad (4.47)$$

Une étude de la fonction

$$p_\tau(x) = \frac{\lambda}{2\tau} (x - X^0)^2 + x (\beta \bar{\rho} - \alpha - K'),$$

permet d'obtenir que pour tout $x \in \mathbb{R}$

$$p_\tau(x) \geq -\frac{\tau}{2\lambda} (\alpha + K' - \beta \bar{\rho})^2 - X^0 (\alpha + K' - \beta \bar{\rho}).$$

Ainsi pour tout $0 < \tau < 1$

$$\mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu) \geq -\frac{1}{2\lambda} (\alpha + K' - \beta \bar{\rho})^2 - X^0 (\alpha + K' - \beta \bar{\rho}).$$

Par ailleurs, dans la cas $X = 0$

$$\mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu) \geq \frac{\lambda}{2\tau} (X^0)^2 \geq 0,$$

donc pour tout $(X, \mu) \in \mathbb{A}$ et pour tout $0 < \tau < 1$ il existe une constante K indépendante de τ telle que

$$\mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu) \geq K. \quad (4.48)$$

Soit $(X_k, \mu_k)_k \in \mathbb{A}$ une suite minimisante telle que

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X_k, \mu_k) = \operatorname{argmin}_{(Y, \nu) \in \mathbb{A}} \mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(Y, \nu).$$

Il existe $M \in \mathbb{R}$ telle que

$$\mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X_k, \mu_k) \leq M.$$

4.3. Preuve du Théorème 4.2.3

La suite $(X_k)_k$ est donc bornée d'après (4.47) et à une sous-suite extraite près il existe $X \in \mathbb{R}_+$ telle que

$$X_k \rightarrow X.$$

Nous démontrons à présent que la suite $(R_k)_k$ est bornée. Pour cela, nous déduisons de la Section 4.2.3, voir (4.31) et (4.35), que pour tout k

$$\frac{1}{2\tau} \mathbf{d}_2^2(\mu_k, \mu^0) \geq \frac{c^2}{2} |R^0 - R_k|. \quad (4.49)$$

Enfin, nous concluons des inégalités (4.48) et (4.49) que

$$\frac{c^2}{2} |R^0 - R_k| + K \leq \frac{1}{2\tau} \mathbf{d}_2^2(\mu_k, \mu^0) + K \leq \mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X_k, \mu_k) \leq M.$$

Ainsi la suite $(R_k)_k$ est bornée et à une sous-suite extraite près

$$R_k \rightarrow R.$$

Nous définissons à présent $\Lambda \in \mathbb{R}_+$ telle que $\Lambda \geq \sup_k X_k$ ce qui permet d'obtenir l'inégalité

$$\int_0^\Lambda \rho_k \log \left(\frac{\rho_k}{\bar{\rho}} \right) \leq M - \beta R_k + \alpha X_k - \frac{\lambda}{2\tau} (X_k - X^0)^2.$$

De la relation

$$-R_k \leq \int_0^{X_k} \rho_k = \int_0^\Lambda \rho_k - (\Lambda - X_k) \bar{\rho},$$

Nous obtenons

$$\int_0^\Lambda \rho_k \left(\log \left(\frac{\rho_k}{\bar{\rho}} \right) - \beta \right) \leq M - \Lambda \bar{\rho} + X_k (\bar{\rho} + \alpha) - \frac{\lambda}{2\tau} (X_k - X^0)^2.$$

Une étude de la fonction

$$g_\tau(x) = x(\bar{\rho} + \alpha) - \frac{\lambda}{2\tau} (x - X^0)^2,$$

permet d'affirmer que pour tout $x \in \mathbb{R}$

$$g_\tau(x) \leq \frac{\tau}{2\lambda} (\bar{\rho} + \alpha)^2 + X^0 (\bar{\rho} + \alpha).$$

Ainsi pour tout $0 < \tau < 1$ et $x \in \mathbb{R}$

$$g_\tau(x) \leq \frac{1}{2\lambda} (\bar{\rho} + \alpha)^2 + X^0 (\bar{\rho} + \alpha).$$

D'où, pour tout $0 < \tau < 1$,

$$\int_0^\Lambda \rho_k \left(\log \left(\frac{\rho_k}{\bar{\rho}} \right) - \beta \right) \leq M - \Lambda \bar{\rho} + \frac{1}{2\lambda} (\bar{\rho} + \alpha)^2 + X^0 (\bar{\rho} + \alpha). \quad (4.50)$$

Nous obtenons donc, pour tout $0 < \tau < 1$, une borne sur-linéaire sur la suite ρ_k et nous déduisons du théorème de Dunford-Pettis l'existence de $\rho \in L^1(0, \Lambda)$ telle que

$$\rho_k \rightharpoonup \rho \quad \text{faiblement dans } L^1(0, \Lambda).$$

En prolongeant ρ par $\bar{\rho}$ sur $(\Lambda, +\infty)$ nous déduisons que

$$\rho_k \rightharpoonup \rho \quad \text{faiblement dans } L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}_+).$$

De plus par convergence faible dans $L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}_+)$

$$\int_0^{X_k} \rho_k = \int_{\mathbb{R}_+} \rho_k \mathbf{1}_{(0, X_k)} \rightarrow \int_{\mathbb{R}_+} \rho \mathbf{1}_{(0, X)} = \int_0^X \rho,$$

et puisque $(X_k, \mu_k) \in \mathbb{A}$ pour tout k

$$\int_0^{X_k} \rho_k = X_k \bar{\rho} - R_k \rightarrow X \bar{\rho} - R.$$

Nous en déduisons que

$$\int_0^X (\rho - \bar{\rho}) + R = 0,$$

et donc $(X, \mu) \in \mathbb{A}$.

Il reste à prouver que le couple (X, μ) est un minimiseur de la fonctionnelle $\mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}$. Pour cela, nous remarquons par convergence faible dans $L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}_+)$ de la suite $(\rho_k)_k$ vers ρ ainsi que par convergence de la suite $(R_k)_k$ vers R que

$$\mathbf{d}_2(\mu^k, \mu) \rightarrow 0.$$

De plus, pour $\Lambda > 0$ assez grand nous remarquons que

$$\mathbf{E}(X_k, \mu_k) = \int_0^\Lambda \rho_k \log \left(\frac{\rho_k}{\bar{\rho}} \right) - \alpha X_k + \beta R_k.$$

Par convexité et semi-continuité inférieure de f , voir [67, Proposition 7.7], nous en déduisons que

$$\liminf \mathbf{E}(X_k, \mu_k) \geq \mathbf{E}(X, \mu).$$

D'où

$$\mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu) = \min_{(Y, \nu) \in \mathbb{A}} \mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(Y, \nu).$$

4.4. Propriétés des minimiseurs

Il reste à prouver (4.38). Pour cela nous supposons que $X^0 > X$ et nous considérons le couple $(X^0, \mu) \in \mathbb{A}$. Comme (X, μ) est un minimiseur de la fonctionnelle $\mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}$ alors

$$\mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu) \leq \mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X^0, \mu),$$

ce qui implique

$$\frac{1}{2\tau} \mathbf{d}_2^2(\mu, \mu^0) + \frac{\lambda}{2\tau} (X - X^0)^2 + \mathbf{E}(X, \mu) \leq \frac{1}{2\tau} \mathbf{d}_2^2(\mu, \mu^0) + \mathbf{E}(X^0, \mu).$$

Or, sous l'hypothèse $X^0 > X$ alors $\mathbf{E}_B(X^0, \rho) = \mathbf{E}_B(X, \rho)$ et nous déduisons de l'inégalité précédente

$$\alpha (X^0 - X) \leq 0.$$

Puisque par hypothèse $\alpha > 0$ nous aboutissons à une contradiction, ce qui conclut la preuve de (4.38) et par la même occasion la preuve du Théorème 4.2.3.

4.4 Propriétés des minimiseurs

Dans cette section nous caractérisons les différentes propriétés vérifiées par ρ la concentration en lacune d'oxygène ainsi que X la position de l'interface mobile.

4.4.1 Comportement dans la couche d'oxyde

Dans un premier temps nous établissons l'équation vérifiée par ρ dans la couche d'oxyde $(0, X)$.

Proposition 4.4.1. *Sous les hypothèses du Théorème 4.2.3 on a pour tout $\xi \in \mathcal{D}(0, X)$ l'équation suivante*

$$\frac{1}{\tau} \int_0^X \xi(x) (x - T(x)) \rho(x) dx - \int_0^X \rho(x) \xi'(x) dx = 0, \quad (4.51)$$

où T désigne l'une des applications de transport optimal définie à la Section 4.2.3.

Preuve de la Proposition 4.4.1. On note γ le plan de transport optimal entre μ et μ^0 . Pour tout $\xi \in \mathcal{D}(0, X)$ et $\varepsilon > 0$ assez petit tel que

$$(Id + \varepsilon \xi)(\mathbb{R}_+) \subset \mathbb{R}_+,$$

on considère le plan de transport

$$\gamma_\varepsilon = ((Id + \varepsilon \xi) \circ \pi_1, \pi_2) \# \gamma.$$

Avec ce choix de γ_ε on a par construction

$$\mu_\varepsilon = \pi_1 \# \gamma_\varepsilon = (Id + \varepsilon \xi) \# \mu,$$

et $\pi_{2\#} \gamma_\varepsilon = \mu^0$. Ainsi $\gamma_\varepsilon \in \Gamma(\mu_\varepsilon, \mu^0)$ et (X, μ_ε) est une perturbation admissible de (X, μ) . Dans la suite on s'intéresse à la quantité

$$\mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu_\varepsilon) - \mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu) = Q_1 + Q_2, \quad (4.52)$$

avec

$$\begin{aligned} Q_1 &= \frac{1}{2\tau} (\mathbf{d}_2^2(\mu_\varepsilon, \mu^0) - \mathbf{d}_2^2(\mu, \mu^0)), \\ Q_2 &= \mathbf{E}_B(X, \rho_\varepsilon) - \mathbf{E}_B(X, \rho). \end{aligned}$$

La fonction ρ_ε est définie par

$$\int_0^X \rho_\varepsilon(x) \phi(x) dx = \int_0^X \rho(x) \phi(x + \varepsilon \xi(x)) dx, \quad \forall \phi \in \mathcal{D}(0, X). \quad (4.53)$$

Pour Q_1 on commence par remarquer que

$$Q_1 \leq \frac{1}{2\tau} \int \int (x + \varepsilon \xi(x) - y)^2 d\gamma(x, y) - \frac{1}{2\tau} \int \int (x - y)^2 d\gamma(x, y).$$

On utilise les notations introduites dans la Section 4.2.3 et on décompose la suite du calcul selon trois cas :

Cas $R < R^0$. On réécrit l'inégalité précédente sous la forme $Q_1 \leq Q_1^\partial + Q_1^{\text{int}}$ avec

$$\begin{aligned} Q_1^\partial &= \frac{1}{2\tau} \int_0^{\ell_1} (x + \varepsilon \xi(x) - T_1(x))^2 \rho(x) dx - \frac{1}{2\tau} \int_0^{\ell_1} (x - T_1(x))^2 \rho(x) dx, \\ Q_1^{\text{int}} &= \frac{1}{2\tau} \int_{\ell_1}^{+\infty} (x + \varepsilon \xi(x) - T_1(x))^2 \rho(x) dx - \frac{1}{2\tau} \int_{\ell_1}^{+\infty} (x - T_1(x))^2 \rho(x) dx. \end{aligned}$$

On a alors

$$\begin{aligned} Q_1^\partial &= \frac{\varepsilon}{\tau} \int_0^{\ell_1} \xi(x)(x - T_1(x)) \rho(x) dx + O(\varepsilon^2), \\ Q_1^{\text{int}} &= \frac{\varepsilon}{\tau} \int_{\ell_1}^{+\infty} \xi(x)(x - T_1(x)) \rho(x) dx + O(\varepsilon^2). \end{aligned}$$

On regroupe les expressions obtenues précédemment sous la forme

$$Q_1 \leq \frac{\varepsilon}{\tau} \int_0^{+\infty} \xi(x)(x - T_1(x)) \rho(x) dx + O(\varepsilon^2). \quad (4.54)$$

Cas $R > R^0$. On utilise une décomposition similaire au cas précédent, à savoir $Q_1 \leq Q_1^\partial + Q_1^{\text{int}}$ avec

$$\begin{aligned} Q_1^\partial &= \frac{1}{2\tau} \int_0^{\ell_2} (c\sqrt{\tau} + y)^2 \rho^0(y) dy - \frac{1}{2\tau} \int_0^{\ell_2} (c\sqrt{\tau} + y)^2 \rho^0(y) dy, \\ Q_1^{\text{int}} &= \frac{1}{2\tau} \int_0^{+\infty} (x + \varepsilon \xi(x) - T_2(x))^2 \rho(x) dx - \frac{1}{2\tau} \int_0^{+\infty} (x - T_2(x))^2 \rho(x) dx. \end{aligned}$$

On a alors

$$Q_1^\partial = 0,$$

$$Q_1^{\text{int}} = \frac{\varepsilon}{\tau} \int_0^{+\infty} \xi(x)(x - T_2(x)) \rho(x) dx + O(\varepsilon^2).$$

En conclusion dans ce cas on obtient

$$Q_1 \leq \frac{\varepsilon}{\tau} \int_0^{+\infty} \xi(x)(x - T_2(x)) \rho(x) dx + O(\varepsilon^2). \quad (4.55)$$

Cas $R = R^0$. Dans ce cas on obtient directement

$$Q_1 \leq \frac{\varepsilon}{\tau} \int_0^{+\infty} \xi(x)(x - T_3(x)) \rho(x) dx + O(\varepsilon^2). \quad (4.56)$$

Conclusion pour le terme Q_1 . On déduit de (4.54)-(4.56) l'expression suivante

$$Q_1 \leq \frac{\varepsilon}{\tau} \int_0^{+\infty} \xi(x)(x - T(x)) \rho(x) dx + O(\varepsilon^2),$$

où T désigne T_1 , T_2 ou T_3 en fonction de R et R^0 . Par ailleurs, $T(x) = x$ pour tout $x > X \vee X^0 = X$ d'après le Théorème 4.2.3 et on obtient finalement

$$Q_1 \leq \frac{\varepsilon}{\tau} \int_0^X \xi(x)(x - T(x)) \rho(x) dx + O(\varepsilon^2). \quad (4.57)$$

Pour Q_2 , on a par définition de ρ_ε , voir (4.53),

$$Q_2 = \int_0^X \rho_\varepsilon(x) \log \rho_\varepsilon(x) dx - \int_0^X \rho(x) \log \rho(x) dx. \quad (4.58)$$

On divise alors (4.52) par $\varepsilon > 0$, par passage à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$ on déduit de (4.57)-(4.58) que

$$\frac{1}{\tau} \int_0^X \xi(x)(x - T(x)) \rho(x) dx - \int_0^X \rho(x) \xi'(x) \geq 0.$$

Pour passer à la limite dans le terme Q_2/ε on renvoie à la preuve du [44, Théorème 5.1]. Enfin, en remplaçant ξ par $-\xi$ dans l'inégalité précédente on déduit l'égalité (4.51). $\square$

On déduit de la Proposition 4.4.1, un résultat de régularité sur ρ .

Corollaire 4.4.1. *Sous les hypothèses du Théorème 4.2.3, la densité ρ issue de la mesure μ vérifie $\rho|_{(0,X)} \in W^{1,1}(0, X) \subset C([0, X])$ avec les estimations :*

$$\int_0^X |\partial_{x,a} \rho(x)|^2 dx \leq \frac{1}{\tau^2} \|\rho\|_{L^1(0,X)} \mathbf{d}_2^2(\mu, \mu^0), \quad (4.59)$$

et

$$\int_0^X |\partial_{x,a} \rho(x)| dx \leq X^{1/2} \|\rho\|_{L^1(0,X)}^{1/2} \frac{\mathbf{d}_2(\mu, \mu^0)}{\tau}. \quad (4.60)$$

Preuve du Corollaire 4.4.1. Dans un premier temps, par construction du couple (X, μ) on a $\rho \in L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}_+)$. Ensuite, on déduit de (4.51) et de l'inégalité de Cauchy-Schwarz l'estimation :

$$\left| \int_0^X \rho(x) \xi'(x) dx \right| \leq \frac{\|\xi\|_\infty}{\tau} \|\rho\|_{L^1(0,X)}^{1/2} \mathbf{d}_2(\mu, \mu^0), \quad \forall \xi \in \mathcal{D}(0, X).$$

On obtient ainsi

$$\int_0^X |\partial_{x,a} \rho(x)|^2 dx \leq \frac{1}{\tau^2} \|\rho\|_{L^1(0,X)} \mathbf{d}_2^2(\mu, \mu^0).$$

En appliquant une nouvelle fois l'inégalité de Cauchy-Schwarz on a

$$\int_0^X |\partial_{x,a} \rho(x)| dx \leq X^{1/2} \|\rho\|_{L^1(0,X)}^{1/2} \frac{\mathbf{d}_2(\mu, \mu^0)}{\tau}.$$

Ce qui conclut la preuve du Corollaire 4.4.1. □

4.4.2 Comportement à l'interface fixe

D'après le Corollaire 4.4.1 on a $\rho|_{(0,X)} \in W^{1,1}(0, X)$ et ρ possède ainsi une trace en $x = 0$. Dans la suite on veut décrire le comportement de ρ à l'interface fixe $x = 0$. On sépare notre étude selon trois cas en fonction de R et R^0 .

Proposition 4.4.2. *Sous les hypothèses du Théorème 4.2.3 et dans le cas $R < R^0$, on a*

$$\rho(0) = \rho_-. \quad (4.61)$$

Preuve de la Proposition 4.4.2. Nous allons construire une perturbation $(X, \mu_\varepsilon) \in \mathbb{A}$ de (X, μ) . On s'intéressera ensuite à la limite quand $\varepsilon \rightarrow 0$ de

$$q_\varepsilon = \frac{\mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu_\varepsilon) - \mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu)}{\varepsilon}.$$

Remarquons, par condition d'optimalité de (X, μ) , que cette quantité est positive. Nous envisageons deux types de perturbations à l'interface entre la couche d'oxyde et la solution. Le premier scénario consiste à amener de la masse de la solution vers la couche d'oxyde et le deuxième scénario consiste à effectuer l'opération inverse c'est-à-dire, expulser de la masse de la couche d'oxyde vers la solution. Dans la suite nous découpons la preuve suivant ces deux scénarios.

Cas 1. Déplacement de la solution vers la couche d'oxyde. Dans ce cas pour $\tilde{\rho} > 0$ et $0 < \varepsilon < 1$ on considère la mesure

$$\mu_\varepsilon = \rho_\varepsilon \mathcal{L} \llcorner \mathbb{R}_+ + (R - \varepsilon \tilde{\rho}) \delta_{-c\sqrt{\tau}},$$

où

$$\rho_\varepsilon(x) = \begin{cases} \tilde{\rho} & \text{pour tout } x \in [0, \varepsilon), \\ \frac{1}{1-\sqrt{\varepsilon}} \rho\left(\frac{x-\varepsilon}{1-\sqrt{\varepsilon}}\right) & \text{pour tout } x \in [\varepsilon, \sqrt{\varepsilon}], \\ \rho(x) & \text{pour tout } x \in (\sqrt{\varepsilon}, +\infty). \end{cases}$$

On définit également l'application $D_1 : (0, +\infty) \rightarrow (0, +\infty)$ par

$$D_1(x) = \begin{cases} (1 - \sqrt{\varepsilon})x + \varepsilon & \text{si } x \in (0, \sqrt{\varepsilon}) \\ x & \text{si } x \in [\sqrt{\varepsilon}, +\infty) \end{cases}$$

Par définition de D_1 et en utilisant la formule de changement de variable on a pour tout $\xi \in \mathcal{D}(\mathbb{R})$

$$\int_\varepsilon^{\sqrt{\varepsilon}} \xi(x) \rho\left(\frac{x-\varepsilon}{1-\sqrt{\varepsilon}}\right) \frac{dx}{1-\sqrt{\varepsilon}} = \int_0^{\sqrt{\varepsilon}} \xi(D_1(x)) \rho(x) dx,$$

autrement dit

$$D_{1\#} [\rho \mathcal{L} \llcorner (0, \sqrt{\varepsilon})] = \rho_\varepsilon \mathcal{L} \llcorner (\varepsilon, \sqrt{\varepsilon}). \quad (4.62)$$

Comme annoncé plus haut, on s'intéresse à la quantité

$$0 \leq q_\varepsilon = \frac{\mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu_\varepsilon) - \mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu)}{\varepsilon} = -\beta \tilde{\rho} + Q_3 + Q_4, \quad (4.63)$$

avec

$$\begin{aligned} Q_3 &= \frac{1}{2\varepsilon\tau} (\mathbf{d}_2^2(\mu_\varepsilon, \mu^0) - \mathbf{d}_2^2(\mu, \mu^0)), \\ Q_4 &= \frac{1}{\varepsilon} (\mathbf{E}_B(X, \rho_\varepsilon) - \mathbf{E}_B(X, \rho)). \end{aligned}$$

Terme Q_3 . Dans ce cas, en supposant $\sqrt{\varepsilon} < \ell_1$, on définit γ_ε par

$$\gamma_\varepsilon = (D_1, T_1)_\# \rho \mathcal{L}(0, +\infty) + (Id, T_1)_\# \tilde{\rho} \mathcal{L} \llcorner (0, \varepsilon) + (R - \varepsilon \tilde{\rho}) \delta_{(-c\sqrt{\tau}, -c\sqrt{\tau})}.$$

On a alors par construction de D_1

$$\pi_{1\#} \gamma_\varepsilon = D_{1\#} \rho \mathcal{L} \llcorner (0, \sqrt{\varepsilon}) + \rho \mathcal{L} \llcorner (\sqrt{\varepsilon}, +\infty) + \tilde{\rho} \mathcal{L} \llcorner (0, \varepsilon) + (R - \varepsilon \tilde{\rho}) \delta_{-c\sqrt{\tau}}.$$

On déduit de (4.62) et de la définition de ρ_ε

$$\pi_{1\#} \gamma_\varepsilon = \rho_\varepsilon \mathcal{L} \llcorner (0, +\infty) + (R - \varepsilon \tilde{\rho}) \delta_{-c\sqrt{\tau}} = \mu_\varepsilon,$$

et en utilisant le fait que

$$T_{1\#} [\rho \mathcal{L} \llcorner (0, \ell_1)] = (R^0 - R) \delta_{-c\sqrt{\tau}} \quad \text{et} \quad T_{1\#} [\tilde{\rho} \mathcal{L} \llcorner (0, \varepsilon)] = \varepsilon \tilde{\rho} \delta_{-c\sqrt{\tau}},$$

on a

$$\pi_{2\#} \gamma_\varepsilon = \rho^0 \mathcal{L} \llcorner (0, +\infty) + (R^0 - R) \delta_{-c\sqrt{\tau}} + (R - \varepsilon \tilde{\rho}) \delta_{-c\sqrt{\tau}} + \varepsilon \tilde{\rho} \delta_{-c\sqrt{\tau}}.$$

D'où

$$\pi_{2\#} \gamma_\varepsilon = \rho^0 \mathcal{L} \llcorner (0, +\infty) + R^0 \delta_{-c\sqrt{\tau}} = \mu^0,$$

et donc $\gamma_\varepsilon \in \Gamma(\mu_\varepsilon, \mu^0)$. On obtient ainsi

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_2^2(\mu_\varepsilon, \mu^0) &\leq \int_0^{\sqrt{\varepsilon}} (D_1(x) - T_1(x))^2 \rho(x) dx + \int_{\sqrt{\varepsilon}}^{+\infty} (x - T_1(x))^2 \rho(x) dx \\ &\quad + \int_0^\varepsilon (x - T_1(x))^2 \tilde{\rho} dx, \end{aligned}$$

en insérant x dans le premier terme de l'inégalité et en développant le carré on a d'après (4.31)

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_2^2(\mu_\varepsilon, \mu^0) &\leq \mathbf{d}_2^2(\mu, \mu^0) + \int_0^{\sqrt{\varepsilon}} (D_1(x) - x)^2 \rho(x) dx \\ &\quad + 2 \int_0^{\sqrt{\varepsilon}} (D_1(x) - x) (x + c\sqrt{\tau}) \rho(x) dx + \int_0^\varepsilon (x - T_1(x))^2 \tilde{\rho} dx. \end{aligned}$$

Puisque $T_1(x) = -c\sqrt{\tau}$ pour tout $x \in [0, \ell_1]$, on en déduit que

$$\begin{aligned} Q_3 &\leq \frac{1}{2\varepsilon\tau} \int_0^{\sqrt{\varepsilon}} (D_1(x) - x)^2 \rho(x) dx + \frac{1}{\varepsilon\tau} \int_0^{\sqrt{\varepsilon}} (D_1(x) - x) (x + c\sqrt{\tau}) \rho(x) dx \\ &\quad + \frac{1}{2\varepsilon\tau} \int_0^\varepsilon (x + c\sqrt{\tau})^2 \tilde{\rho} dx, \end{aligned}$$

et l'inégalité de Cauchy-Schwarz nous fournit

$$\begin{aligned} Q_3 &\leq \frac{1}{2\varepsilon\tau} \int_0^{\sqrt{\varepsilon}} (D_1(x) - x)^2 \rho(x) dx \\ &\quad + \frac{1}{\varepsilon\tau} \left(\int_0^{\sqrt{\varepsilon}} (D_1(x) - x)^2 \rho(x) dx \right)^{1/2} \mathbf{d}_2(\mu, \mu^0) \\ &\quad + \frac{1}{2\varepsilon\tau} \int_0^\varepsilon (x + c\sqrt{\tau})^2 \tilde{\rho} dx. \end{aligned}$$

On remarque, puisque $D_1(x) - x = \varepsilon - \sqrt{\varepsilon}x$, que pour tout $x \in (0, \sqrt{\varepsilon})$

$$\int_0^{\sqrt{\varepsilon}} (D_1(x) - x)^2 \rho(x) dx = O(\varepsilon^{5/2}).$$

De plus, en développant le carré on a

$$\int_0^\varepsilon (x + c\sqrt{\tau})^2 \tilde{\rho} dx = \varepsilon c^2 \tau \tilde{\rho} + O(\varepsilon^2).$$

Finalement, on en déduit que

$$Q_3 \leq \frac{c^2}{2} \tilde{\rho} + O(\varepsilon^{1/4}). \quad (4.64)$$

Terme Q_4 . Pour ce terme, en notant $f(x) = x \log(x/\bar{\rho})$, on commence par remarquer d'après (4.62) que

$$\int_\varepsilon^{\sqrt{\varepsilon}} f(\rho_\varepsilon(x)) dx = \int_0^{\sqrt{\varepsilon}} \rho(x) \log\left(\frac{\rho(x)}{\bar{\rho}(1-\sqrt{\varepsilon})}\right) dx.$$

On en déduit que

$$\begin{aligned} Q_4 &= \tilde{\rho} (\log \tilde{\rho} - \log \bar{\rho}) + \frac{1}{\varepsilon} \int_0^{\sqrt{\varepsilon}} \rho(x) \log\left(\frac{\sqrt{\varepsilon}}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon}\right) dx \\ &= \tilde{\rho} (\log \tilde{\rho} - \log \bar{\rho}) + \frac{1}{\varepsilon} \int_0^{\sqrt{\varepsilon}} \rho(x) \left(\log \sqrt{\varepsilon} - \log(\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon) \right) dx \end{aligned}$$

Un développement limité en $x = \sqrt{\varepsilon}$ nous donne

$$Q_4 = \tilde{\rho} (\log \tilde{\rho} - \log \bar{\rho}) + \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \int_0^{\sqrt{\varepsilon}} \rho(x) dx + O(\sqrt{\varepsilon}). \quad (4.65)$$

Conclusion pour le cas 1. On obtient de (4.64) et (4.65) l'inégalité suivante

$$q_\varepsilon \leq -\beta \tilde{\rho} + \frac{c^2}{2} \tilde{\rho} + \tilde{\rho} (\log \tilde{\rho} - \log \bar{\rho}) + \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \int_0^{\sqrt{\varepsilon}} \rho(x) dx + O(\varepsilon^{1/4}). \quad (4.66)$$

Ainsi, on déduit de (4.63) qu'à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$ l'inégalité suivante est satisfaite

$$\tilde{\rho} \left(\log \tilde{\rho} - \log \bar{\rho} - \beta + \frac{c^2}{2} \right) + \rho(0) \geq 0. \quad (4.67)$$

Le minimum de (4.67) est réalisé pour

$$\tilde{\rho} = \bar{\rho} \exp\left(\beta - \frac{c^2}{2} - 1\right),$$

et on obtient la condition suivante pour ρ en $x = 0$

$$\rho(0) \geq \bar{\rho} \exp\left(\beta - \frac{c^2}{2} - 1\right). \quad (4.68)$$

Cas 2. Déplacement de la couche d'oxyde vers la solution. D'après le cas 1 on a $\rho(0) \geq \rho_- > 0$. De plus, d'après le Corollaire 4.4.1 ρ est continue au voisinage de 0. Pour $\tilde{\rho} > 0$ on considère $\varepsilon > 0$ tel que $\rho(x) > 0$ pour tout $x \in [0, \sqrt{\varepsilon}]$ et pour tout $x \in [\varepsilon, \sqrt{\varepsilon}]$

$$\rho(x) - \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \tilde{\rho} \geq 0.$$

On définit, pour $m(\varepsilon) = \int_0^\varepsilon \rho(x) dx$, la mesure

$$\mu_\varepsilon = \rho_\varepsilon \mathcal{L} \llcorner \mathbb{R}_+ + (R + m(\varepsilon)) \delta_{-c\sqrt{\tau}},$$

avec

$$\rho_\varepsilon(x) = \begin{cases} \tilde{\rho} & \text{pour tout } x \in [0, \varepsilon], \\ \rho(x) - \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \tilde{\rho} & \text{pour tout } x \in [\varepsilon, \sqrt{\varepsilon}], \\ \rho(x) & \text{pour tout } x \in (\sqrt{\varepsilon}, +\infty). \end{cases}$$

On introduit l'application $D_2 : (\varepsilon, \sqrt{\varepsilon}) \rightarrow (0, \varepsilon)$ définie par

$$D_2(x) = \varepsilon \frac{(x - \varepsilon)}{(\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon)},$$

D_2 vérifie pour tout $\psi \in \mathcal{D}(\mathbb{R})$ l'égalité

$$\frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \int_\varepsilon^{\sqrt{\varepsilon}} \psi(D_2(y)) \tilde{\rho} dy = \int_0^\varepsilon \psi(y) \tilde{\rho} dy,$$

autrement dit

$$D_{2\#} \left[\frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \tilde{\rho} \mathcal{L} \llcorner (\varepsilon, \sqrt{\varepsilon}) \right] = \tilde{\rho} \mathcal{L} \llcorner (0, \varepsilon). \quad (4.69)$$

On s'intéresse à la quantité

$$0 \leq q_\varepsilon = \frac{\mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu_\varepsilon) - \mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu)}{\varepsilon} = \beta \frac{m(\varepsilon)}{\varepsilon} + Q_5 + Q_6, \quad (4.70)$$

où Q_5 et Q_6 sont définis par

$$Q_5 = \frac{1}{2\varepsilon\tau} (\mathbf{d}_2^2(\mu_\varepsilon, \mu^0) - \mathbf{d}_2^2(\mu, \mu^0)),$$

$$Q_6 = \frac{1}{\varepsilon} (\mathbf{E}_B(X, \rho_\varepsilon) - \mathbf{E}_B(X, \rho)).$$

Terme Q_5 . Dans ce cas on suppose que $\sqrt{\varepsilon} < \ell_1$ et on définit γ_ε comme suit

$$\begin{aligned} \gamma_\varepsilon &= (Id, T_1)_\# \rho \mathcal{L}(\sqrt{\varepsilon}, +\infty) + R\delta_{(-c\sqrt{\tau}, -c\sqrt{\tau})} + (T_1, T_1)_\# \rho \mathcal{L} \llcorner (0, \varepsilon) \\ &\quad + (Id, T_1)_\# \left(\rho - \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \tilde{\rho} \right) \mathcal{L} \llcorner (\varepsilon, \sqrt{\varepsilon}) + (D_2, T_1)_\# \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \tilde{\rho} \mathcal{L}(\varepsilon, \sqrt{\varepsilon}). \end{aligned}$$

Comme

$$T_{1\#} \rho \mathcal{L} \llcorner (0, \varepsilon) = m(\varepsilon) \delta_{-c\sqrt{\tau}},$$

on a par définition de D_2

$$\pi_{1\#} \gamma_\varepsilon = \rho \mathcal{L} \llcorner (\varepsilon, +\infty) + (R + m(\varepsilon)) \delta_{-c\sqrt{\tau}} - \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \tilde{\rho} \mathcal{L} \llcorner (\varepsilon, \sqrt{\varepsilon}) + \tilde{\rho} \mathcal{L} \llcorner (0, \varepsilon),$$

ce qui implique par définition de ρ_ε que $\pi_{1\#} \gamma_\varepsilon = \mu_\varepsilon$. Par ailleurs, on remarque que

$$\pi_{2\#} \gamma_\varepsilon = \rho^0 \mathcal{L} \llcorner (0, +\infty) + (R^0 - R) \delta_{-c\sqrt{\tau}} + R \delta_{-c\sqrt{\tau}} = \mu^0,$$

et donc $\gamma_\varepsilon \in \Gamma(\mu_\varepsilon, \mu^0)$. On a alors par construction de γ_ε

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_2^2(\mu_\varepsilon, \mu^0) &\leq \int_\varepsilon^{+\infty} (x - T_1(x))^2 \rho(x) dx - \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \int_\varepsilon^{\sqrt{\varepsilon}} (x - T_1(x))^2 \tilde{\rho} dx \\ &\quad + \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \int_\varepsilon^{\sqrt{\varepsilon}} (D_2(x) - T_1(x))^2 \tilde{\rho} dx. \end{aligned}$$

On utilise la décomposition

$$\int_\varepsilon^{+\infty} (x - T_1(x))^2 \rho(x) dx = \int_0^{+\infty} (x - T_1(x))^2 \rho(x) dx - \int_0^\varepsilon (x - T_1(x))^2 \rho(x) dx,$$

et on obtient d'après (4.31)

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_2^2(\mu_\varepsilon, \mu^0) &\leq \mathbf{d}_2^2(\mu, \mu^0) - \int_0^\varepsilon (x - T_1(x))^2 \rho(x) dx - \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \int_\varepsilon^{\sqrt{\varepsilon}} (x - T_1(x))^2 \tilde{\rho} dx \\ &\quad + \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \int_\varepsilon^{\sqrt{\varepsilon}} (D_2(x) - T_1(x))^2 \tilde{\rho} dx. \end{aligned}$$

De plus, en calculant la valeur des intégrales on a

$$-\frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \int_\varepsilon^{\sqrt{\varepsilon}} (x - T_1(x))^2 \tilde{\rho} dx + \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \int_\varepsilon^{\sqrt{\varepsilon}} (D_2(x) - T_1(x))^2 \tilde{\rho} dx = O(\varepsilon^{3/2}),$$

et on en déduit

$$Q_5 \leq -\frac{1}{2\varepsilon\tau} \int_0^\varepsilon (x + c\sqrt{\tau})^2 \rho(x) dx + O(\varepsilon^{1/2}). \quad (4.71)$$

Terme Q_6 . Pour Q_6 on a par définition de ρ_ε

$$\begin{aligned} Q_6 &= \tilde{\rho} \log \left(\frac{\tilde{\rho}}{\rho} \right) + \frac{1}{\varepsilon} \int_\varepsilon^{\sqrt{\varepsilon}} \left(f \left(\rho(x) - \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \tilde{\rho} \right) - f(\rho(x)) \right) dx \\ &\quad - \frac{1}{\varepsilon} \int_0^\varepsilon f(\rho(x)) dx. \end{aligned}$$

Un développement limité, possible ici car on suppose $\varepsilon > 0$ assez petit tel que $\rho(x) > 0$ pour tout $x \in [0, \sqrt{\varepsilon}]$, nous donne

$$Q_6 = \tilde{\rho} \log \left(\frac{\tilde{\rho}}{\bar{\rho}} \right) - \frac{\tilde{\rho}}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \int_{\varepsilon}^{\sqrt{\varepsilon}} f'(\rho(x)) dx - \frac{1}{\varepsilon} \int_0^{\varepsilon} f(\rho(x)) dx + o(1). \quad (4.72)$$

Conclusion pour le cas 2. On déduit de (4.71) et (4.72) l'inégalité :

$$q_{\varepsilon} \leq \beta \frac{m(\varepsilon)}{\varepsilon} - \frac{1}{2\varepsilon\tau} \int_0^{\varepsilon} (x + c\sqrt{\tau})^2 \rho(x) dx + \tilde{\rho} \log \left(\frac{\tilde{\rho}}{\bar{\rho}} \right) - \frac{\tilde{\rho}}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \int_{\varepsilon}^{\sqrt{\varepsilon}} f'(\rho(x)) dx - \frac{1}{\varepsilon} \int_0^{\varepsilon} f(\rho(x)) dx + O(\varepsilon^{1/2}). \quad (4.73)$$

On utilise l'inégalité (4.70) et on obtient en passant à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$

$$\rho(0) \left(-\log \rho(0) + \log \bar{\rho} + \beta - \frac{c^2}{2} \right) + \tilde{\rho} \log \tilde{\rho} - \tilde{\rho} (1 + \log \rho(0)) \geq 0. \quad (4.74)$$

Le minimum de (4.74) est réalisé pour $\tilde{\rho} = \rho(0)$ et on obtient la condition suivante sur ρ en $x = 0$

$$\rho(0) \leq \bar{\rho} \exp \left(\beta - \frac{c^2}{2} - 1 \right). \quad (4.75)$$

Ce qui conclut la preuve de la Proposition 4.4.2. $\square$

Proposition 4.4.3. *Sous les hypothèses du Théorème 4.2.3 et dans le cas $R > R^0$, on a*

$$\rho(0) = \rho_+ \exp(c\ell_2/\sqrt{\tau}). \quad (4.76)$$

Preuve de la Proposition 4.4.3. Ce résultat se démontre de façon similaire à la Proposition 4.4.2. On décompose la preuve en deux cas.

Cas 1. Déplacement de la solution vers la couche d'oxyde. Dans ce cas pour $\tilde{\rho} > 0$ et $0 < \varepsilon < 1$ on considère la mesure

$$\mu_{\varepsilon} = \rho_{\varepsilon} \mathcal{L} \llcorner \mathbb{R}_+ + (R - \varepsilon \tilde{\rho}) \delta_{-c\sqrt{\tau}},$$

où

$$\rho_{\varepsilon}(x) = \begin{cases} \tilde{\rho} & \text{pour tout } x \in [0, \varepsilon], \\ \frac{1}{1-\sqrt{\varepsilon}} \rho \left(\frac{x-\varepsilon}{1-\sqrt{\varepsilon}} \right) & \text{pour tout } x \in [\varepsilon, \sqrt{\varepsilon}], \\ \rho(x) & \text{pour tout } x \in (\sqrt{\varepsilon}, +\infty). \end{cases}$$

On définit l'application $D_1 : (0, +\infty) \rightarrow (0, +\infty)$ comme dans la preuve de la Proposition 4.4.2 et on rappelle que D_1 vérifie

$$D_{1\#} [\rho \mathcal{L} \llcorner (0, \sqrt{\varepsilon}]] = \rho_{\varepsilon} \mathcal{L} \llcorner (\varepsilon, \sqrt{\varepsilon}).$$

On s'intéresse à la quantité

$$0 \leq q_\varepsilon = \frac{\mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu_\varepsilon) - \mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu)}{\varepsilon} = -\beta \tilde{\rho} + Q_7 + Q_8, \quad (4.77)$$

avec

$$\begin{aligned} Q_7 &= \frac{1}{2\varepsilon\tau} (\mathbf{d}_2^2(\mu_\varepsilon, \mu^0) - \mathbf{d}_2^2(\mu, \mu^0)), \\ Q_8 &= \frac{1}{\varepsilon} (\mathbf{E}_B(X, \rho_\varepsilon) - \mathbf{E}_B(X, \rho)). \end{aligned}$$

Terme Q_7 . On suppose que $\varepsilon < \ell_2$ et on définit $D_3 : (0, \varepsilon) \rightarrow (\ell_2 - \varepsilon, \ell_2)$ par $D_3(x) = \ell_2 - \varepsilon + x$ telle que D_3 vérifie

$$D_{3\#} [\tilde{\rho} \mathcal{L} \llcorner (0, \varepsilon)] = \tilde{\rho} \mathcal{L} \llcorner (\ell_2 - \varepsilon, \ell_2).$$

On définit le plan de transport

$$\begin{aligned} \gamma_\varepsilon &= (D_1, T_2)_\# \rho \mathcal{L} \llcorner (0, +\infty) + R^0 \delta_{(-c\sqrt{\tau}, -c\sqrt{\tau})} + (S_2, Id)_\# \rho^0 \mathcal{L} \llcorner (0, \ell_2 - \varepsilon) \\ &\quad + (S_2, Id)_\# (\rho^0 - \tilde{\rho}) \mathcal{L} \llcorner (\ell_2 - \varepsilon, \ell_2) + (Id, D_3)_\# \tilde{\rho} \mathcal{L} \llcorner (0, \varepsilon). \end{aligned}$$

On par définition de D_1

$$\begin{aligned} \pi_{1\#} \gamma_\varepsilon &= D_{1\#} \rho \mathcal{L} \llcorner (0, \sqrt{\varepsilon}) + \rho \mathcal{L} \llcorner (\sqrt{\varepsilon}, +\infty) + R^0 \delta_{-c\sqrt{\tau}} \\ &\quad + (R - R^0 - \varepsilon \tilde{\rho}) \delta_{-c\sqrt{\tau}} + \tilde{\rho} \mathcal{L} \llcorner (0, \varepsilon), \end{aligned}$$

et par construction de ρ_ε on a

$$\pi_{1\#} \gamma_\varepsilon = \rho_\varepsilon \mathcal{L} \llcorner (0, +\infty) + (R - \varepsilon \tilde{\rho}) \delta_{-c\sqrt{\tau}} = \mu_\varepsilon.$$

De plus, par construction de D_3 on a

$$\pi_{2\#} \gamma_\varepsilon = \rho^0 \mathcal{L} \llcorner (0, +\infty) + R^0 \delta_{-c\sqrt{\tau}} - \tilde{\rho} \mathcal{L} \llcorner (\ell_2 - \varepsilon, \ell_2) + D_{3\#} \tilde{\rho} \mathcal{L} \llcorner (0, \varepsilon) = \mu_0,$$

donc $\gamma_\varepsilon \in \Gamma(\mu_\varepsilon, \mu^0)$. Par construction de γ_ε on obtient

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_2^2(\mu_\varepsilon, \mu^0) &\leq \int_0^{+\infty} (D_1(x) - T_2(x))^2 \rho(x) dx + \int_0^{\ell_2} (S_2(y) - y)^2 \rho^0(y) dy \\ &\quad - \int_{\ell_2 - \varepsilon}^{\ell_2} (S_2(y) - y)^2 \tilde{\rho} dy + \int_0^\varepsilon (x - D_3(x))^2 \tilde{\rho} dx. \end{aligned}$$

On insère x et on développe le carré du premier terme de l'inégalité pour déduire de (4.35)

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_2^2(\mu_\varepsilon, \mu^0) &\leq \mathbf{d}_2^2(\mu, \mu^0) + \int_0^{\sqrt{\varepsilon}} (D_1(x) - x)^2 \rho(x) dx \\ &\quad + 2 \int_0^{\sqrt{\varepsilon}} (D_1(x) - x)(x + c\sqrt{\tau}) \rho(x) dx - \int_{\ell_2 - \varepsilon}^{\ell_2} (S_2(y) - y)^2 \tilde{\rho} dy \\ &\quad + \int_0^\varepsilon (x - D_3(x))^2 \tilde{\rho} dx. \quad (4.78) \end{aligned}$$

La preuve de la Proposition 4.4.2 permet d'affirmer que

$$\frac{1}{\varepsilon} \int_0^{\sqrt{\varepsilon}} (D_1(x) - x)^2 \rho(x) dx + \frac{2}{\varepsilon} \int_0^{\sqrt{\varepsilon}} (D_1(x) - x)(x + c\sqrt{\tau}) \rho(x) dx = O(\varepsilon^{1/4}). \quad (4.79)$$

De plus, on remarque que

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\tau\varepsilon} \left[- \int_{\ell_2 - \varepsilon}^{\ell_2} (S_2(y) - y)^2 \tilde{\rho} dy \right] = -\frac{1}{2\tau} (c\sqrt{\tau} + \ell_2)^2 \tilde{\rho}, \quad (4.80)$$

et

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\tau\varepsilon} \left[\int_0^{\varepsilon} (x - D_3(x))^2 \tilde{\rho} dx \right] = \frac{\ell_2^2}{2\tau} \tilde{\rho}. \quad (4.81)$$

On déduit de (4.78)-(4.81)

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} Q_7 \leq -\frac{c^2}{2} \tilde{\rho} - \frac{c\ell_2}{\sqrt{\tau}} \tilde{\rho}. \quad (4.82)$$

Terme Q_8 . Pour ce terme on renvoie à la Proposition 4.4.2 et on obtient

$$Q_8 = \tilde{\rho} (\log \tilde{\rho} - \log \bar{\rho}) + \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \int_0^{\sqrt{\varepsilon}} \rho(x) dx + O(\sqrt{\varepsilon}). \quad (4.83)$$

Conclusion pour le cas 1. On passe à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$ dans (4.77) et on déduit de (4.82) et (4.83) l'inégalité

$$\tilde{\rho} \left(\log \tilde{\rho} - \log \bar{\rho} - \beta - \frac{c^2}{2} - \frac{c\ell_2}{\sqrt{\tau}} \right) + \rho(0) \geq 0. \quad (4.84)$$

Le minimum de (4.84) est réalisé pour

$$\tilde{\rho} = \bar{\rho} \exp \left(\beta + \frac{c^2}{2} + \frac{c\ell_2}{\sqrt{\tau}} - 1 \right),$$

et on obtient la condition suivante sur $\rho(0)$

$$\rho(0) \geq \bar{\rho} \exp \left(\beta + \frac{c^2}{2} + \frac{c\ell_2}{\sqrt{\tau}} - 1 \right) = \rho_+ \exp \left(\frac{c\ell_2}{\sqrt{\tau}} \right). \quad (4.85)$$

Cas 2. Déplacement de la couche d'oxyde vers la solution. D'après le cas précédent $\rho(0) > 0$ et d'après le Corollaire 4.4.1 ρ est continue au voisinage de 0. Comme dans la preuve de la Proposition 4.4.2, pour $\tilde{\rho} > 0$ on considère $\varepsilon > 0$ tel que $\rho(x) > 0$ pour tout $x \in [0, \sqrt{\varepsilon}]$ et pour tout $x \in [\varepsilon, \sqrt{\varepsilon}]$

$$\rho(x) - \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \tilde{\rho} \geq 0.$$

4.4. Propriétés des minimiseurs

On définit, pour $m(\varepsilon) = \int_0^\varepsilon \rho(x) dx$, la mesure

$$\mu_\varepsilon = \rho_\varepsilon \mathcal{L} \llcorner \mathbb{R}_+ + (R + m(\varepsilon)) \delta_{-c\sqrt{\tau}},$$

avec

$$\rho_\varepsilon(x) = \begin{cases} \tilde{\rho} & \text{pour tout } x \in [0, \varepsilon), \\ \rho(x) - \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \tilde{\rho} & \text{pour tout } x \in [\varepsilon, \sqrt{\varepsilon}], \\ \rho(x) & \text{pour tout } x \in (\sqrt{\varepsilon}, +\infty). \end{cases}$$

On définit l'application $D_2 : (\varepsilon, \sqrt{\varepsilon}) \rightarrow (0, \varepsilon)$ comme dans la preuve de la Proposition 4.4.2 et on rappelle que

$$D_{2\#} \left[\frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \tilde{\rho} \mathcal{L} \llcorner (\varepsilon, \sqrt{\varepsilon}) \right] = \tilde{\rho} \mathcal{L} \llcorner (0, \varepsilon).$$

On s'intéresse à la quantité

$$0 \leq q_\varepsilon = \frac{\mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu_\varepsilon) - \mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu)}{\varepsilon} = \beta \frac{m(\varepsilon)}{\varepsilon} + Q_9 + Q_{10}, \quad (4.86)$$

où Q_9 et Q_{10} sont définis par

$$Q_9 = \frac{1}{2\varepsilon\tau} (\mathbf{d}_2^2(\mu_\varepsilon, \mu^0) - \mathbf{d}_2^2(\mu, \mu^0)),$$

$$Q_{10} = \frac{1}{\varepsilon} (\mathbf{E}_B(X, \rho_\varepsilon) - \mathbf{E}_B(X, \rho)).$$

Terme Q_9 . On considère le plan de transport γ_ε défini par

$$\begin{aligned} \gamma_\varepsilon = & (Id, T_2)_\# \rho \mathcal{L} \llcorner (\sqrt{\varepsilon}, +\infty) + R^0 \delta_{(-c\sqrt{\tau}, -c\sqrt{\tau})} + (S_2, Id)_\# \rho^0 \mathcal{L} \llcorner (0, \ell_2) \\ & + (S_2, T_2)_\# \rho \mathcal{L} \llcorner (0, \varepsilon) + (Id, T_2)_\# \left(\rho - \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \tilde{\rho} \right) \mathcal{L} \llcorner (\varepsilon, \sqrt{\varepsilon}) \\ & + (D_2, T_2)_\# \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \tilde{\rho} \mathcal{L} \llcorner (\varepsilon, \sqrt{\varepsilon}). \end{aligned}$$

On a

$$\begin{aligned} \pi_{1\#} \gamma_\varepsilon = & \rho \mathcal{L} \llcorner (\varepsilon, +\infty) + R^0 \delta_{-c\sqrt{\tau}} + (R - R^0 + m(\varepsilon)) \delta_{-c\sqrt{\tau}} \\ & - \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \tilde{\rho} \mathcal{L} \llcorner (\varepsilon, \sqrt{\varepsilon}) + \tilde{\rho} \mathcal{L} \llcorner (0, \varepsilon). \end{aligned}$$

Par construction de μ_ε on en déduit que $\pi_{1\#} \gamma_\varepsilon = \mu_\varepsilon$. De plus, on obtient

$$\pi_{2\#} \gamma_\varepsilon = \rho^0 \mathcal{L} \llcorner (0, +\infty) + R^0 \delta_{-c\sqrt{\tau}} = \mu^0,$$

donc $\gamma_\varepsilon \in \Gamma(\mu_\varepsilon, \mu^0)$. On en déduit que

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_2^2(\mu_\varepsilon, \mu^0) &\leq \int_\varepsilon^{+\infty} (x - T_2(x))^2 \rho(x) dx + \int_0^{\ell_2} (S_2(y) - y)^2 \rho^0(y) dy \\ &\quad + \int_0^\varepsilon (S_2(x) - T_2(x))^2 \rho(x) dx - \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \int_\varepsilon^{\sqrt{\varepsilon}} (x - T_2(x))^2 \tilde{\rho} dx \\ &\quad + \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \int_\varepsilon^{\sqrt{\varepsilon}} (D_2(x) - T_2(x))^2 \tilde{\rho} dx, \end{aligned}$$

ce qui donne d'après (4.35)

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_2^2(\mu_\varepsilon, \mu^0) &\leq \mathbf{d}_2^2(\mu, \mu_0) - \int_0^\varepsilon (x - T_2(x))^2 \rho(x) dx \\ &\quad + \int_0^\varepsilon (S_2(x) - T_2(x))^2 \rho(x) dx - \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \int_\varepsilon^{\sqrt{\varepsilon}} (x - T_2(x))^2 \tilde{\rho} dx \\ &\quad + \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \int_\varepsilon^{\sqrt{\varepsilon}} (D_2(x) - T_2(x))^2 \tilde{\rho} dx. \end{aligned}$$

En adaptant la preuve de la Proposition 4.4.2 on sait que

$$-\frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \int_\varepsilon^{\sqrt{\varepsilon}} (x - T_2(x))^2 \tilde{\rho} dx + \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \int_\varepsilon^{\sqrt{\varepsilon}} (D_2(x) - T_2(x))^2 \tilde{\rho} dx = O(\varepsilon^{3/2}). \quad (4.87)$$

De plus, comme $T_2(0) = \ell_2$ on obtient

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\varepsilon\tau} \left[\int_0^\varepsilon (S_2(x) - T_2(x))^2 \rho(x) dx - \int_0^\varepsilon (x - T_2(x))^2 \rho(x) dx \right] \\ = \frac{1}{2\tau} (c\sqrt{\tau} - \ell_2)^2 \rho(0) - \frac{\ell_2^2}{2\tau} \rho(0) = \frac{c^2}{2} \rho(0) + \frac{c\ell_2}{\sqrt{\tau}} \rho(0). \end{aligned} \quad (4.88)$$

On déduit de (4.87) et (4.88) que

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} Q_9 = \frac{c^2}{2} \rho(0) + \frac{c\ell_2}{\sqrt{\tau}} \rho(0). \quad (4.89)$$

Terme Q_{10} . On effectue les mêmes manipulations que pour le terme Q_6 dans la preuve de la Proposition 4.4.2 et on obtient

$$Q_{10} = \tilde{\rho} \log \left(\frac{\tilde{\rho}}{\bar{\rho}} \right) - \frac{\tilde{\rho}}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \int_\varepsilon^{\sqrt{\varepsilon}} f'(\rho(x)) dx - \frac{1}{\varepsilon} \int_0^\varepsilon f(\rho(x)) dx + o(1). \quad (4.90)$$

Conclusion pour le Cas 2. On passe à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$ dans (4.86) et on déduit de (4.89) et (4.90) l'inégalité suivante

$$\rho(0) \left(\frac{c^2}{2} + \frac{c\ell_2}{\sqrt{\tau}} + \beta - \log \rho(0) + \log \bar{\rho} \right) + \tilde{\rho} \log \tilde{\rho} - \tilde{\rho} (1 + \log \rho(0)) \geq 0. \quad (4.91)$$

4.4. Propriétés des minimiseurs

Le minimum de (4.91) est obtenu pour $\tilde{\rho} = \rho(0)$ et on obtient la condition suivante pour $\rho(0)$

$$\rho(0) \leq \bar{\rho} \exp \left(\beta + \frac{c^2}{2} + \frac{c\ell_2}{\sqrt{\tau}} - 1 \right) = \rho_+ \exp \left(\frac{c\ell_2}{\sqrt{\tau}} \right).$$

Ce qui conclut la preuve de la Proposition 4.4.3 $\square$

Proposition 4.4.4. *Sous les hypothèses du Théorème 4.2.3 et dans le cas $R = R^0$, on a*

$$\rho_- \leq \rho(0) \leq \rho_+ \leq \rho_+ \exp(c\ell_2/\sqrt{\tau}). \quad (4.92)$$

Preuve de la Proposition 4.4.4. Encore une fois on décompose la preuve en deux cas, les calculs sont similaires à ceux effectués pour la preuve de la Proposition 4.4.2 et de la Proposition 4.4.3.

Cas 1. Déplacement de la solution vers la couche d'oxyde. Dans ce cas pour $\tilde{\rho} > 0$ et $0 < \varepsilon < 1$ on considère la mesure

$$\mu_\varepsilon = \rho_\varepsilon \mathcal{L} \llcorner \mathbb{R}_+ + (R - \varepsilon \tilde{\rho}) \delta_{-c\sqrt{\tau}},$$

où

$$\rho_\varepsilon(x) = \begin{cases} \tilde{\rho} & \text{pour tout } x \in [0, \varepsilon), \\ \frac{1}{1-\sqrt{\varepsilon}} \rho \left(\frac{x-\varepsilon}{1-\sqrt{\varepsilon}} \right) & \text{pour tout } x \in [\varepsilon, \sqrt{\varepsilon}], \\ \rho(x) & \text{pour tout } x \in (\sqrt{\varepsilon}, +\infty). \end{cases}$$

L'application $D_1 : (0, +\infty) \rightarrow (0, +\infty)$ est définie comme dans la preuve de la Proposition (4.4.2) et on rappelle que D_1 vérifie

$$D_{1\#} [\rho \mathcal{L} \llcorner (0, \sqrt{\varepsilon}]] = \rho_\varepsilon \mathcal{L} \llcorner (\varepsilon, \sqrt{\varepsilon}).$$

On s'intéresse à la quantité

$$0 \leq q_\varepsilon = \frac{\mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu_\varepsilon) - \mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu)}{\varepsilon} = -\beta \tilde{\rho} + Q_{11} + Q_{12}, \quad (4.93)$$

avec

$$Q_{11} = \frac{1}{2\varepsilon\tau} (\mathbf{d}_2^2(\mu_\varepsilon, \mu^0) - \mathbf{d}_2^2(\mu, \mu^0)),$$

$$Q_{12} = \frac{1}{\varepsilon} (\mathbf{E}_B(X, \rho_\varepsilon) - \mathbf{E}_B(X, \rho)).$$

Terme Q_{11} . On définit l'application constante S_3 telle que $S_3(x) = -c\sqrt{\tau}$ pour tout $x \in (0, \varepsilon)$ et

$$S_{3\#} [\tilde{\rho} \mathcal{L} \llcorner (0, \varepsilon)] = \varepsilon \tilde{\rho} \delta_{-c\sqrt{\tau}}.$$

On définit le plan de transport γ_ε par

$$\gamma_\varepsilon = (D_1, T_3)_\# \rho \mathcal{L} \llcorner (0, +\infty) + (R - \varepsilon \tilde{\rho}) \delta_{(-c\sqrt{\tau}, -c\sqrt{\tau})} + (Id, S_3)_\# \tilde{\rho} \mathcal{L} \llcorner (0, \varepsilon).$$

Par construction de ρ_ε on a

$$\pi_{1\#} \gamma_\varepsilon = \rho_\varepsilon \mathcal{L} \llcorner (0, +\infty) + (R - \varepsilon \tilde{\rho}) \delta_{-c\sqrt{\tau}} = \mu_\varepsilon,$$

et par construction de S_3 et l'hypothèse $R = R^0$

$$\pi_{2\#} \gamma_\varepsilon = \rho^0 \mathcal{L} \llcorner (0, +\infty) + R^0 \delta_{-c\sqrt{\tau}} = \mu^0.$$

Donc $\gamma_\varepsilon \in \Gamma(\mu_\varepsilon, \mu^0)$ et on a

$$\mathbf{d}_2^2(\mu_\varepsilon, \mu^0) \leq \int_0^{+\infty} (D_1(x) - T_3(x))^2 \rho(x) dx + \int_0^\varepsilon (x - S_3(x))^2 \tilde{\rho} dx.$$

En insérant x et en développant le carré dans le premier terme de l'inégalité on obtient d'après (4.37)

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_2^2(\mu_\varepsilon, \mu^0) &\leq \mathbf{d}_2^2(\mu, \mu^0) + \int_0^{\sqrt{\varepsilon}} (D_1(x) - x)^2 \rho(x) dx \\ &\quad + 2 \int_0^{\sqrt{\varepsilon}} (D_1(x) - x)(x - T_3(x)) \rho(x) dx + \int_0^\varepsilon (x + c\sqrt{\tau})^2 \tilde{\rho} dx. \end{aligned}$$

En adaptant la preuve de la Proposition 4.4.2 et de la Proposition 4.4.3 on a

$$\frac{1}{\varepsilon} \int_0^{\sqrt{\varepsilon}} (D_1(x) - x)^2 \rho(x) dx + \frac{2}{\varepsilon} \int_0^{\sqrt{\varepsilon}} (D_1(x) - x)(x - T_3(x)) \rho(x) dx = O(\varepsilon^{1/4}). \quad (4.94)$$

On déduit de (4.94) que

$$Q_{11} \leq \frac{1}{2\varepsilon\tau} \int_0^\varepsilon (x + c\sqrt{\tau})^2 \tilde{\rho} dx + O(\varepsilon^{1/4}). \quad (4.95)$$

Terme Q_{12} . D'après la preuve de la Proposition 4.4.2 et de la Proposition 4.4.3 on a

$$Q_{12} = \tilde{\rho} (\log \tilde{\rho} - \log \bar{\rho}) + \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \int_0^{\sqrt{\varepsilon}} \rho(x) dx + O(\sqrt{\varepsilon}). \quad (4.96)$$

Conclusion pour le cas 1. En passant à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$ dans (4.93) on déduit de (4.95) et (4.96)

$$\tilde{\rho} \left(\log \tilde{\rho} + \frac{c^2}{2} - \log \bar{\rho} - \beta \right) + \rho(0) \geq 0. \quad (4.97)$$

Le minimum de (4.97) est réalisé par

$$\tilde{\rho} = \bar{\rho} \exp \left(\beta - \frac{c^2}{2} - 1 \right).$$

Ce qui implique la condition suivante sur $\rho(0)$

$$\rho(0) \geq \bar{\rho} \exp\left(\beta - \frac{c^2}{2} - 1\right) = \rho_-.$$

Cas 2. Déplacement de la couche d'oxyde vers la solution. D'après le cas 1 $\rho(0) > 0$ et d'après le Corollaire 4.4.1 ρ est continue au voisinage de 0. Comme dans la preuve de la Proposition 4.4.2, pour $\tilde{\rho} > 0$ on considère $\varepsilon > 0$ tel que $\rho(x) > 0$ pour tout $x \in [0, \sqrt{\varepsilon}]$ et pour tout $x \in [\varepsilon, \sqrt{\varepsilon}]$

$$\rho(x) - \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \tilde{\rho} \geq 0.$$

On définit, pour $m(\varepsilon) = \int_0^\varepsilon \rho(x) dx$, la mesure

$$\mu_\varepsilon = \rho_\varepsilon \mathcal{L} \llcorner \mathbb{R}_+ + (R + m(\varepsilon)) \delta_{-c\sqrt{\tau}},$$

avec

$$\rho_\varepsilon(x) = \begin{cases} \tilde{\rho} & \text{pour tout } x \in [0, \varepsilon), \\ \rho(x) - \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \tilde{\rho} & \text{pour tout } x \in [\varepsilon, \sqrt{\varepsilon}], \\ \rho(x) & \text{pour tout } x \in (\sqrt{\varepsilon}, +\infty). \end{cases}$$

L'application $D_2 : (\varepsilon, \sqrt{\varepsilon}) \rightarrow (0, \varepsilon)$ est définie comme dans la preuve de la Proposition 4.4.2 et on rappelle que D_2 vérifie

$$D_{2\#} \left[\frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \tilde{\rho} \mathcal{L} \llcorner (\varepsilon, \sqrt{\varepsilon}) \right] = \tilde{\rho} \mathcal{L} \llcorner (0, \varepsilon).$$

On s'intéresse à la quantité

$$0 \leq q_\varepsilon = \frac{\mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu_\varepsilon) - \mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu)}{\varepsilon} = \beta \frac{m(\varepsilon)}{\varepsilon} + Q_{13} + Q_{14}, \quad (4.98)$$

où Q_{13} et Q_{14} sont définis par

$$\begin{aligned} Q_{13} &= \frac{1}{2\varepsilon\tau} (\mathbf{d}_2^2(\mu_\varepsilon, \mu^0) - \mathbf{d}_2^2(\mu, \mu^0)), \\ Q_{14} &= \frac{1}{\varepsilon} (\mathbf{E}_B(X, \rho_\varepsilon) - \mathbf{E}_B(X, \rho)). \end{aligned}$$

Terme Q_{13} . On considère le plan de transport γ_ε défini par

$$\begin{aligned} \gamma_\varepsilon &= (Id, T_3)_\# \rho \mathcal{L} \llcorner (\sqrt{\varepsilon}, +\infty) + (S_3, T_3)_\# \rho \mathcal{L} \llcorner (0, \varepsilon) + R \delta_{(-c\sqrt{\tau}, -c\sqrt{\tau})} \\ &\quad + (Id, T_3)_\# \left(\rho - \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \tilde{\rho} \right) \mathcal{L} \llcorner (\varepsilon, \sqrt{\varepsilon}) + (D_2, T_3)_\# \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \tilde{\rho} \mathcal{L} \llcorner (\varepsilon, \sqrt{\varepsilon}), \end{aligned}$$

où comme dans le cas 1, l'application S_3 désigne l'application constante telle que $S_3(x) = -c\sqrt{\tau}$ pour tout $x \in (0, \varepsilon)$ et vérifie

$$S_{3\#} [\tilde{\rho} \mathcal{L} \lfloor (0, \varepsilon)] = \varepsilon \tilde{\rho} \delta_{-c\sqrt{\tau}}.$$

Par construction de D_2 on a

$$\begin{aligned} \pi_{1\#} \gamma_\varepsilon &= \rho \mathcal{L} \lfloor (\varepsilon, +\infty) + (R + m(\varepsilon)) \delta_{-c\sqrt{\tau}} \\ &\quad - \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \tilde{\rho} \mathcal{L} \lfloor (\varepsilon, \sqrt{\varepsilon}) + \tilde{\rho} \mathcal{L} \lfloor (0, \varepsilon) = \mu_\varepsilon. \end{aligned}$$

De plus, comme par hypothèse $R = R^0$, on obtient

$$\pi_{2\#} \gamma_\varepsilon = \rho^0 \mathcal{L} \lfloor (0, +\infty) + R^0 \delta_{-c\sqrt{\tau}} = \mu^0.$$

On en déduit que $\gamma_\varepsilon \in \Gamma(\mu_\varepsilon, \mu^0)$ et

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_2^2(\mu_\varepsilon, \mu^0) &\leq \int_\varepsilon^{+\infty} (x - T_3(x))^2 \rho(x) dx + \int_0^\varepsilon (S_3(x) - T_3(x))^2 \rho(x) dx \\ &\quad - \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \int_\varepsilon^{\sqrt{\varepsilon}} (x - T_3(x))^2 \tilde{\rho} dx + \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \int_\varepsilon^{\sqrt{\varepsilon}} (D_2(x) - T_3(x))^2 \tilde{\rho} dx. \end{aligned}$$

En décomposant le premier terme du membre de droite comme

$$\int_\varepsilon^{+\infty} (x - T_3(x))^2 \rho(x) dx = \int_0^{+\infty} (x - T_3(x))^2 \rho(x) dx - \int_0^\varepsilon (x - T_3(x))^2 \rho(x) dx,$$

On obtient d'après (4.37)

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_2^2(\mu_\varepsilon, \mu^0) &\leq \mathbf{d}_2^2(\mu, \mu^0) - \int_0^\varepsilon (x - T_3(x))^2 \rho(x) dx \\ &\quad + \int_0^\varepsilon (S_3(x) - T_3(x))^2 \rho(x) dx - \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \int_\varepsilon^{\sqrt{\varepsilon}} (x - T_3(x))^2 \tilde{\rho} dx \\ &\quad + \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \int_\varepsilon^{\sqrt{\varepsilon}} (D_2(x) - T_3(x))^2 \tilde{\rho} dx. \end{aligned}$$

En adaptant la preuve de la Proposition 4.4.2 et de la Proposition 4.4.3 on a

$$-\frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \int_\varepsilon^{\sqrt{\varepsilon}} (x - T_3(x))^2 \tilde{\rho} dx + \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \int_\varepsilon^{\sqrt{\varepsilon}} (D_2(x) - T_3(x))^2 \tilde{\rho} dx = O(\varepsilon^{3/2}). \quad (4.99)$$

Par ailleurs, comme $T_3(0) = 0$ on en déduit

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[\frac{1}{2\tau\varepsilon} \int_0^\varepsilon (x - T_3(x))^2 \rho(x) dx \right] = 0, \quad (4.100)$$

et

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[\frac{1}{2\tau\varepsilon} \int_0^\varepsilon (S_3(x) - T_3(x))^2 \rho(x) dx \right] = \frac{c^2}{2} \rho(0). \quad (4.101)$$

On conclut de (4.99)-(4.101) que

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} Q_{13} = \frac{c^2}{2} \rho(0). \quad (4.102)$$

Terme Q_{14} . On effectue les mêmes manipulations que pour le terme Q_6 dans la preuve de la Proposition 4.4.2 et on obtient

$$Q_{14} = \tilde{\rho} \log \left(\frac{\tilde{\rho}}{\bar{\rho}} \right) - \frac{\tilde{\rho}}{\sqrt{\varepsilon} - \varepsilon} \int_\varepsilon^{\sqrt{\varepsilon}} f'(\rho(x)) dx - \frac{1}{\varepsilon} \int_0^\varepsilon f(\rho(x)) dx + o(1). \quad (4.103)$$

Conclusion pour le Cas 2. On passe à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$ dans (4.98) et on déduit de (4.102) et (4.103) l'inégalité suivante

$$\rho(0) \left(\frac{c^2}{2} + \beta - \log \rho(0) + \log \bar{\rho} \right) + \tilde{\rho} \log \tilde{\rho} - \tilde{\rho} (1 + \log \rho(0)) \geq 0. \quad (4.104)$$

Le minimum de (4.104) est obtenu pour $\tilde{\rho} = \rho(0)$ et on obtient la condition suivante pour $\rho(0)$

$$\rho(0) \leq \bar{\rho} \exp \left(\beta + \frac{c^2}{2} - 1 \right) = \rho_+ \leq \rho_+ \exp \left(\frac{c\ell_2}{\sqrt{\tau}} \right).$$

Ce qui conclut la preuve de la Proposition 4.4.4 □

4.4.3 Bornes L^∞

Dans cette partie on prouve que $0 < \rho(x) \leq \bar{\rho}$ pour tout $x \in [0, X]$.

Proposition 4.4.5. *Sous les hypothèses du Théorème 4.2.3, pour tout $x \in [0, X]$ on a*

$$0 < \rho_- \leq \rho(x) \leq \bar{\rho}. \quad (4.105)$$

Preuve de la Proposition 4.4.5. La preuve de la borne supérieure et inférieure étant analogues on se contente dans la suite de prouver que pour tout $x \in [0, X]$

$$\rho(x) \leq \bar{\rho}.$$

On raisonne par l'absurde et on suppose que

$$\bar{\rho} < \max_{x \in [0, X]} \rho(x).$$

On note

$$x^* = \inf \{ x \in [0, X] : \rho(x) > \bar{\rho} \}.$$

Heuristique de la preuve. L'idée principale de la preuve est la suivante : en raisonnant en terme de transport de μ^0 à μ , pour que $\rho(x^*) = \bar{\rho}$, de la masse issue de μ^0 a été apportée au voisinage de x^* (on rappelle que ρ est continue d'après le Corollaire 4.4.1). Cette masse provient soit de $[0, X]$ soit du point $\{-c\sqrt{\tau}\}$. En effet, dans le cas $R > R^0$ alors la masse vient de la mesure $\rho^0 \mathcal{L} \llcorner (\ell_2, X)$. Dans le cas $R < R^0$ alors soit $x^* \in [0, \ell_1]$ et dans ce cas la masse est issue du point $\{-c\sqrt{\tau}\}$ soit $x^* > \ell_1$ et alors la masse est issue de $\rho^0 \mathcal{L} \llcorner (0, X)$. Enfin, dans le cas $R = R^0$ la masse est issue de $\rho_0 \mathcal{L} \llcorner (0, X)$.

En distinguant suivant ces cas on construit une perturbation de μ notée μ_ε , de la forme $\rho_\varepsilon \mathcal{L} \llcorner \mathbb{R}_+ + R \delta_{-c\sqrt{\tau}}$. Pour construire cette perturbation on va « suivre » les points déplacés (et les masses associées) pour passer de μ^0 à μ et qui contribuent à obtenir $\rho(x^*) = \bar{\rho}$. Une fois ces points identifiés il suffit pour construire μ_ε d'envoyer moins de masse au voisinage de x^* . On obtient ainsi un gain en terme de distance et d'énergie i.e. on montre que

$$\mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu_\varepsilon) - \mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu) < 0,$$

ce qui contredit l'optimalité de (X, μ) .

Preuve rigoureuse. On note $y^* = \min(\inf\{y > x^* : \rho(y) < \bar{\rho}\}, X)$ avec la convention $\inf \emptyset = +\infty$ et $I = (x^*, y^*)$. Par continuité de ρ alors $I \neq \emptyset$. On définit ensuite pour le plan de transport optimal $\gamma \in \Gamma(\mu, \mu^0)$ l'ensemble $J \subset \{-c\sqrt{\tau}\} \cup [0, X] \setminus I$ tel que

$$\gamma(I \times J) > 0.$$

Notons que en distinguant suivant $R \vee R^0$ on en déduit que soit $J \subset [0, X]$ soit $J = \{-c\sqrt{\tau}\}$ et dans ce cas $R < R^0$ et $x^* \in [0, \ell_1]$. De plus, si $J \subset [0, X]$ alors J est de mesure strictement positive. En effet, dans le cas contraire l'intervalle I reste invariant par le plan de transport et on a par conservation de la masse

$$\bar{\rho} |I| < \int_I \rho(x) dx = \int_I \rho^0(x) dx \leq \bar{\rho} |I|,$$

ce qui est absurde.

Cas $J \subset [0, X]$. Ce cas est similaire à la preuve de la [1, Proposition 2.2] où l'auteur utilise des idées issues de [60].

Dans la suite on note $\gamma \in \Gamma(\mu, \mu^0)$. On considère alors la mesure $\eta = \gamma \llcorner I \times J$ définie par

$$\int_{\mathbb{R} \times \mathbb{R}} \xi(x, y) d\eta(x, y) = \int_{I \times J} \xi(x, y) d\gamma(x, y), \quad \forall \xi \in \mathcal{D}(\mathbb{R} \times \mathbb{R}).$$

On note à présent $\nu = \pi_{1\#} \eta$, $\nu_0 = \pi_{2\#} \eta$ et par construction on a $\nu \ll \rho \mathcal{L} \llcorner I$ et $\nu_0 \ll \rho^0 \mathcal{L} \llcorner J$, dans la suite nous confondrons les mesures ν et ν^0 avec leurs densités. On a les propriétés suivantes

- (i) $0 \leq \nu(x)$ pour presque tout $x \in I$ et $0 \leq \nu_0(x) \leq \bar{\rho}$ pour presque tout $x \in J$,

- (ii) $\nu(x) = 0$ pour presque tout $x \notin I$ et $\nu_0(x) = 0$ pour presque tout $x \notin J$,
- (iii) $\int_I \nu(x) dx = \int_J \nu_0(x) dx$ par conservation de la masse.

D'après le point (iii), quitte à diviser les mesures ν et ν_0 par leur masse commune, on peut supposer sans perdre de généralités que

$$\int_I \nu(x) dx = \int_J \nu_0(x) dx = 1.$$

Dans la suite, pour $\varepsilon \in (0, 1)$ assez petit tel que $\rho(x) - \varepsilon\nu(x) > 0$ pour presque tout $x \in I$, on considère la mesure

$$\mu_\varepsilon = \rho_\varepsilon \mathcal{L} \llcorner \mathbb{R}_+ + R \delta_{-c\sqrt{\tau}},$$

où

$$\rho_\varepsilon(x) = \rho(x) + \varepsilon(\nu_0(x) - \nu(x)) \quad \text{pour } x \in \mathbb{R}.$$

Par hypothèse $J \subset [0, X] \setminus I$ et il existe T une application de transport optimal telle que par monotonie de T alors $T(I) \subset [0, X]$ et

$$T_\# \rho \mathcal{L} \llcorner I = \rho^0 \mathcal{L} \llcorner T(I).$$

On définit le plan de transport γ_ε par

$$\gamma_\varepsilon = \gamma \llcorner \mathbb{R}^2 \setminus I \times T(I) + \varepsilon(Id, Id)_\# \nu_0 \mathcal{L} \llcorner J + (Id, T)_\# (\rho - \varepsilon\nu) \mathcal{L} \llcorner I.$$

On obtient

$$\pi_{1\#} \gamma_\varepsilon = \rho \mathcal{L} \llcorner (0, +\infty) \setminus I + R \delta_{-c\sqrt{\tau}} + \varepsilon \nu_0 \mathcal{L} \llcorner J + (\rho - \varepsilon\nu) \mathcal{L} \llcorner I = \mu_\varepsilon,$$

et comme $\nu^0(x) = 0$ pour presque tout $x \in T(I) \setminus J$ on a

$$\begin{aligned} \pi_{2\#} \gamma_\varepsilon &= \rho^0 \mathcal{L} \llcorner (0, +\infty) \setminus T(I) + R^0 \delta_{-c\sqrt{\tau}} + \varepsilon \nu_0 \mathcal{L} \llcorner J + (\rho^0 - \varepsilon \nu_0) \mathcal{L} \llcorner T(I) \\ &= \rho^0 \mathcal{L} \llcorner (0, +\infty) + R^0 \delta_{-c\sqrt{\tau}} + \varepsilon \nu_0 \mathcal{L} \llcorner J - \varepsilon \nu_0 \mathcal{L} \llcorner J = \mu^0. \end{aligned}$$

On en déduit que $\gamma_\varepsilon \in \Gamma(\mu_\varepsilon, \mu^0)$. Enfin, on remarque que

$$\int_0^X \rho_\varepsilon + R = \int_0^X \rho + R + \varepsilon \left(\int_J \nu_0 - \int_I \nu \right) = \bar{\rho} X,$$

donc le couple (X, μ_ε) est une perturbation admissible de (X, μ) . Comme $\gamma_\varepsilon \in \Gamma(\mu_\varepsilon, \mu^0)$ on obtient

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu_\varepsilon) - \mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu) &\leq \frac{1}{2\tau} \int_{\mathbb{R} \times \mathbb{R}} (x - y)^2 d\gamma_\varepsilon(x, y) \\ &\quad - \frac{1}{2\tau} \int_{\mathbb{R} \times \mathbb{R}} (x - y)^2 d\gamma(x, y) + \int_0^X (f(\rho_\varepsilon(x)) - f(\rho(x))) dx, \quad (4.106) \end{aligned}$$

où $f(x) = x \log(x/\bar{\rho})$. Par définition de γ_ε on a

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\tau} \int_{\mathbb{R} \times \mathbb{R}} (x-y)^2 d\gamma_\varepsilon(x, y) - \frac{1}{2\tau} \int_{\mathbb{R} \times \mathbb{R}} (x-y)^2 d\gamma(x, y) \\ \leq -\frac{\varepsilon}{2\tau} \int_I (x - T(x))^2 \nu(x) dx. \end{aligned} \quad (4.107)$$

De plus, d'après (i), (ii) et par hypothèse sur ε on a

$$\rho_\varepsilon(x) = \rho(x) - \varepsilon \nu(x) > 0 \quad \text{pour presque tout } x \in I, \quad (4.108)$$

et

$$\rho_\varepsilon(x) = \rho(x) + \varepsilon \nu_0(x) \geq \varepsilon \nu_0(x) > 0 \quad \text{pour presque tout } x \in J \cap \{\nu_0 > 0\}. \quad (4.109)$$

Enfin par définition $I \cap J = \emptyset$ et

$$\rho_\varepsilon(x) = \rho(x) + \varepsilon \nu_0(x) \leq \bar{\rho} + \varepsilon \nu_0(x) \quad \text{pour presque tout } x \in J, \quad (4.110)$$

On combine alors (i), (ii), (4.108)-(4.110) et le fait que f soit $\mathcal{C}^2(0, +\infty)$, convexe avec f' croissante sur $(0, +\infty)$ pour obtenir que

$$\begin{aligned} \int_0^X (f(\rho_\varepsilon) - f(\rho)) &= \int_J [f(\rho + \varepsilon \nu_0) - f(\rho)] + \int_I [f(\rho - \varepsilon \nu) - f(\rho)] \\ &\leq \varepsilon \left[\int_{J \cap \{\nu_0 > 0\}} f'(\rho + \varepsilon \nu_0) \nu_0 - \int_I f'(\rho - \varepsilon \nu) \nu \right] \\ &\leq \varepsilon \left[\int_J f'(\bar{\rho} + \varepsilon \nu_0) \nu_0 - \int_I f'(\bar{\rho} - \varepsilon \nu) \nu \right]. \end{aligned}$$

Puisque l'on suppose que ν et ν^0 sont des mesures de probabilité, on en déduit

$$\int_0^X (f(\rho_\varepsilon) - f(\rho)) \leq \varepsilon \left[\int_{I \times J} \left(f'(\bar{\rho} + \varepsilon \nu_0(y)) - f'(\bar{\rho} - \varepsilon \nu(x)) \right) d\gamma(x, y) \right].$$

Enfin, comme $f \in \mathcal{C}^2(0, +\infty)$ on obtient des estimations précédentes que

$$\int_0^X \left(f(\rho_\varepsilon(x)) - f(\rho(x)) \right) dx = O(\varepsilon^2). \quad (4.111)$$

On conclut de (4.106), (4.107) et (4.111) que pour ε assez petit on a

$$\mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu_\varepsilon) - \mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu_\varepsilon) \leq -\frac{\varepsilon}{2\tau} \int_I (x - T(x))^2 \nu(x) dx < 0.$$

Ce qui conclut la preuve du résultat dans le cas où $J \subset [0, X]$.

Cas $J = \{-c\sqrt{\tau}\}$. Dans ce cas on a $R < R^0$ avec $x^* \in [0, \ell_1]$ et comme d'après la Proposition 4.4.2 on a $\rho(0) = \rho_- < \bar{\rho}$ donc $x^* > 0$. On définit pour $0 < r < \ell_1$ assez petit le réel suivant

$$m = \int_{B_r(x^*)} \rho(x) dx,$$

où $B_r(x^*)$ désigne la boule de centre x^* et de rayon r . À présent pour $0 < \varepsilon < 1$ et $0 < r' < \ell_1$ assez petit tel que $[0, r'] \cap B_{r'/2}(x^*) = \emptyset$ on définit la mesure

$$\mu_\varepsilon = \rho_\varepsilon \mathcal{L} \llcorner \mathbb{R}_+ + R \delta_{-c\sqrt{\tau}},$$

avec

$$\rho_\varepsilon(x) = \begin{cases} \rho(x) + \varepsilon m & \text{pour tout } x \in [0, r'], \\ \rho(x) - \varepsilon m & \text{pour tout } x \in B_{r'/2}(x^*), \\ \rho(x) & \text{pour tout } x \in \mathbb{R}_+ \setminus [0, r'] \cup B_{r'/2}(x^*). \end{cases}$$

On construit alors le plan de transport γ_ε suivant

$$\gamma_\varepsilon = (Id, T_1)_\# \rho_\varepsilon \mathcal{L} \llcorner (0, +\infty) + R \delta_{(-c\sqrt{\tau}, -c\sqrt{\tau})},$$

où T_1 est l'application de transport optimal définie à la Section 4.2.3 et on obtient directement que $\gamma_\varepsilon \in \Gamma(\mu_\varepsilon, \mu^0)$. À présent, on écrit

$$\frac{1}{r'\varepsilon} \left(\mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu_\varepsilon) - \mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu) \right) \leq Q_{15} + Q_{16}, \quad (4.112)$$

où

$$\begin{aligned} Q_{15} &= \frac{1}{2\tau r'\varepsilon} (\mathbf{d}_2^2(\mu_\varepsilon, \mu^0) - \mathbf{d}_2^2(\mu, \mu^0)), \\ Q_{16} &= \frac{1}{r'\varepsilon} (\mathbf{E}_B(X, \rho_\varepsilon) - \mathbf{E}_B(X, \rho)). \end{aligned}$$

Par construction de γ_ε on a

$$\begin{aligned} Q_{15} &\leq \frac{\varepsilon m}{2\tau r'\varepsilon} \int_0^{r'} (x + c\sqrt{\tau})^2 dx - \frac{\varepsilon m}{2\tau r'\varepsilon} \int_{B_{r'/2}(x^*)} (x + c\sqrt{\tau})^2 dx \\ &\leq \frac{m}{2\tau r'} \int_0^{r'} (x + c\sqrt{\tau})^2 dx - \frac{m}{2\tau r'} \int_{B_{r'/2}(x^*)} (x + c\sqrt{\tau})^2 dx. \end{aligned}$$

En passant à la limite $r' \rightarrow 0$ on obtient

$$\lim_{r' \rightarrow 0} Q_{15} \leq \frac{m}{2\tau} (0 + c\sqrt{\tau})^2 - \frac{m}{2\tau} (x^* + c\sqrt{\tau})^2 < 0. \quad (4.113)$$

Pour Q_{16} , avec $f(x) = x \log(x/\bar{\rho})$, on a

$$Q_{16} = \frac{1}{r' \varepsilon} \int_0^{r'} \left(f(\rho(x) + \varepsilon m) - f(\rho(x)) \right) dx \\ + \frac{1}{r' \varepsilon} \int_{B_{r'/2}(x^*)} \left(f(\rho(x) - \varepsilon m) - f(\rho(x)) \right) dx.$$

En passant à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$ on a

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} Q_{16} = \frac{m}{r'} \int_0^{r'} f'(\rho(x)) dx - \frac{m}{r'} \int_{B_{r'/2}(x^*)} f'(\rho(x)) dx.$$

Il reste alors à passer à la limite $r' \rightarrow 0$ pour obtenir

$$\lim_{r' \rightarrow 0} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} Q_{16} = m (f'(\rho(0)) - f'(\rho(x^*))) = m (f'(\rho_-) - f'(\bar{\rho})) < 0. \quad (4.114)$$

Ainsi par passage à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$ et $r' \rightarrow 0$ dans (4.112) on déduit de (4.113)-(4.114) que

$$\lim_{r' \rightarrow 0} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu_\varepsilon) - \mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu) \right) < 0, \quad (4.115)$$

ce qui contredit l'optimalité de (X, μ) . □

La Proposition 4.4.5 implique que

$$\rho(x) > 0 \quad \forall x \in [0, X].$$

De plus, après une intégration par parties on déduit de la Proposition 4.4.1 l'égalité suivante

$$\frac{x - T(x)}{\tau} \rho(x) + D\rho(x) = 0 \quad \text{p.p. } x \in (0, X).$$

Par ailleurs, d'après le Théorème 4.2.1, il existe un potentiel de Kantorovich ϕ tel qu'on puisse réécrire la dernière égalité sous la forme

$$\frac{\phi'(x)}{\tau} \rho(x) + D\rho(x) = 0 \quad \text{p.p. } x \in (0, X).$$

En particulier, on en déduit l'existence d'une constante C telle que

$$\rho(x) = \exp \left(C - \frac{\phi(x)}{\tau} \right) \quad \text{p.p. } x \in (0, X),$$

ce qui implique que ρ est une fonction Lipschitzienne. Cependant cette estimation n'est pas uniforme en τ . On rassemble ces résultats de régularité dans le corollaire suivant.

Corollaire 4.4.2. *Sous les hypothèses du Théorème 4.2.3, la densité ρ issue de la mesure μ vérifie $\rho \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}_+)$. De plus, on peut préciser l'estimation (4.59)*

$$\int_0^X |\partial_{x,a}\rho(x)|^2 dx \leq \frac{X\bar{\rho}}{\tau^2} \mathbf{d}_2^2(\mu, \mu^0). \quad (4.116)$$

Preuve du Corollaire 4.4.2. Il suffit d'établir (4.116). Cette estimation est une conséquence directe de l'estimation (4.59) où on utilise $\|\rho\|_{L^1(0,X)} \leq X\bar{\rho}$. $\square$

4.4.4 Equation d'évolution de l'interface mobile

On s'intéresse dans cette section à l'évolution de l'interface libre.

Proposition 4.4.6. *Sous les hypothèses du Théorème 4.2.3 on a*

$$\lambda \frac{X - X^0}{\tau} = \alpha - (\bar{\rho} - \rho(X)) + \bar{\rho}(\log \bar{\rho} - \log \rho(X)). \quad (4.117)$$

Preuve de la Proposition 4.4.6. Pour prouver la proposition on considère deux variations distinctes de l'interface, soit $X_\varepsilon = X + \varepsilon$, soit $X_\varepsilon = X - \varepsilon$ pour $\varepsilon > 0$.

Cas $X_\varepsilon = X + \varepsilon$. Pour tout $0 < \varepsilon < 1$ on considère la mesure

$$\mu_\varepsilon = \rho_\varepsilon \mathcal{L} \llcorner \mathbb{R}_+ + R \delta_{-c\sqrt{\tau}},$$

avec

$$\rho_\varepsilon(x) = \begin{cases} \rho(x) & \text{pour tout } x \in \mathbb{R}_+ \setminus [X - \sqrt{\varepsilon}, X_\varepsilon], \\ \rho(x) + \sqrt{\varepsilon} \tilde{\rho} & \text{pour tout } x \in [X - \sqrt{\varepsilon}, X], \\ \tilde{\rho} - \tilde{\rho} & \text{pour tout } x \in (X, X_\varepsilon], \end{cases}$$

où $0 < \tilde{\rho} < \bar{\rho}$ est fixé tel que

$$\varepsilon \tilde{\rho} + \int_{X-\varepsilon}^X \rho(x) dx = \varepsilon \bar{\rho}. \quad (4.118)$$

On écrit

$$0 \leq \frac{\mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X_\varepsilon, \mu_\varepsilon) - \mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu)}{\varepsilon} = Q_{17} + Q_{18} + Q_{19} - \alpha, \quad (4.119)$$

avec

$$\begin{aligned} Q_{17} &= \frac{1}{2\varepsilon\tau} (\mathbf{d}_2^2(\mu_\varepsilon, \mu^0) - \mathbf{d}_2^2(\mu, \mu^0)), \\ Q_{18} &= \frac{\lambda}{2\varepsilon\tau} ((X_\varepsilon - X^0)^2 - (X - X^0)^2), \\ Q_{19} &= \frac{1}{\varepsilon} (\mathbf{E}_B(X_\varepsilon, \rho_\varepsilon) - \mathbf{E}_B(X, \rho)). \end{aligned}$$

Pour le terme Q_{17} , on remarque que par construction de $\gamma \in \Gamma(\mu, \mu^0)$ alors $\gamma \llcorner (X, X_\varepsilon)^2 = (Id, Id)_\# \bar{\rho} \mathcal{L} \llcorner (X, X_\varepsilon)$ et on définit $\gamma_\varepsilon \in \Gamma(\mu_\varepsilon, \mu^0)$ comme suit

$$\begin{aligned} \gamma_\varepsilon = \gamma \llcorner \mathbb{R}^2 \setminus (X, X_\varepsilon)^2 + (Id, D_3)_\# \sqrt{\varepsilon} \tilde{\rho} \mathcal{L} \llcorner (X - \sqrt{\varepsilon}, X) \\ + (Id, Id)_\# (\bar{\rho} - \tilde{\rho}) \mathcal{L} \llcorner (X, X_\varepsilon), \end{aligned}$$

où l'application $D_4 : (X - \sqrt{\varepsilon}, X) \rightarrow (X, X_\varepsilon)$ est défini par $D_4(x) = X + \sqrt{\varepsilon}(x - X + \sqrt{\varepsilon})$ et tel que

$$D_{4\#} [\sqrt{\varepsilon} \tilde{\rho} \mathcal{L} \llcorner (X - \sqrt{\varepsilon}, X)] = \tilde{\rho} \mathcal{L} \llcorner (X, X_\varepsilon).$$

Vérifions que $\gamma_\varepsilon \in \Gamma(\mu_\varepsilon, \mu^0)$, on a

$$\begin{aligned} \pi_{1\#} \gamma_\varepsilon = \rho \mathcal{L} \llcorner (0, +\infty) \setminus (X, X_\varepsilon) + R \delta_{-c\sqrt{\tau}} + \sqrt{\varepsilon} \tilde{\rho} \mathcal{L} \llcorner (X - \sqrt{\varepsilon}, X) \\ + (\bar{\rho} - \tilde{\rho}) \mathcal{L} \llcorner (X, X_\varepsilon) = \mu_\varepsilon. \end{aligned}$$

De plus comme $\rho^0(x) = \bar{\rho}$ pour tout $x \in (X, X_\varepsilon)$ et par construction de D_4 on obtient

$$\begin{aligned} \pi_{2\#} \gamma_\varepsilon = \rho^0 \mathcal{L} \llcorner (0, +\infty) \setminus (X, X_\varepsilon) + R^0 \delta_{-c\sqrt{\tau}} \\ + D_{4\#} \sqrt{\varepsilon} \tilde{\rho} \mathcal{L} \llcorner (X - \sqrt{\varepsilon}, X) + (\bar{\rho} - \tilde{\rho}) \mathcal{L} \llcorner (X, X_\varepsilon) = \mu^0. \end{aligned}$$

Ce qui permet de conclure que $\gamma_\varepsilon \in \Gamma(\mu_\varepsilon, \mu^0)$. On a alors par construction de γ_ε

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_2^2(\mu_\varepsilon, \mu^0) &\leq \int_{\mathbb{R} \times \mathbb{R}} (x - y)^2 d\gamma(x, y) + \sqrt{\varepsilon} \tilde{\rho} \int_{X - \sqrt{\varepsilon}}^X (x - D_4(x))^2 dx \\ &\leq \mathbf{d}_2^2(\mu, \mu^0) + \sqrt{\varepsilon} \tilde{\rho} \int_{X - \sqrt{\varepsilon}}^X (x - D_4(x))^2 dx. \end{aligned}$$

Or, un calcul direct permet de constater que

$$\sqrt{\varepsilon} \tilde{\rho} \int_{X - \sqrt{\varepsilon}}^X (x - D_4(x))^2 dx = o(\varepsilon).$$

On en déduit que

$$Q_{17} = o(1). \quad (4.120)$$

Pour Q_{18} , un développement nous donne

$$Q_{18} = \frac{\lambda}{\tau} (X - X^0) + o(\varepsilon). \quad (4.121)$$

Pour Q_{19} , toujours en notant $f(x) = x \log(x/\bar{\rho})$ et en utilisant la définition de ρ_ε on a

$$Q_{19} = \frac{1}{\varepsilon} \int_{X - \sqrt{\varepsilon}}^X (f(\rho(x) + \tilde{\rho} \sqrt{\varepsilon}) - f(\rho(x))) dx + \frac{1}{\varepsilon} \int_X^{X_\varepsilon} f(\bar{\rho} - \tilde{\rho}) dx,$$

et un développement limité de f nous donne

$$Q_{19} = \frac{\tilde{\rho}}{\sqrt{\varepsilon}} \int_{X-\sqrt{\varepsilon}}^X f'(\rho(x)) dx + f(\bar{\rho} - \tilde{\rho}) + O(\sqrt{\varepsilon}). \quad (4.122)$$

On passe alors à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$ dans l'inégalité (4.119) et en utilisant (4.120)-(4.122) on obtient l'inégalité suivante

$$\lambda \frac{X - X^0}{\tau} \geq \alpha - (\bar{\rho} - \rho(X)) + \bar{\rho} (\log \bar{\rho} - \log \rho(X)). \quad (4.123)$$

Pour le passage à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$ pour le terme Q_{19} on utilise l'égalité de masse (4.118) vérifiée par $\tilde{\rho}$ et on a

$$\tilde{\rho} \rightarrow \bar{\rho} - \rho(X) \quad \text{quand } \varepsilon \rightarrow 0,$$

ce qui nous permet d'obtenir (4.123).

Cas $X_\varepsilon = X - \varepsilon$. Dans ce cas on considère la mesure

$$\mu_\varepsilon = \rho_\varepsilon \mathcal{L} \llcorner \mathbb{R}_+ + R \delta_{-c\sqrt{\tau}},$$

avec pour $\tilde{\rho} > 0$ et $\varepsilon > 0$ tel que $\rho(x) - \sqrt{\varepsilon} \tilde{\rho} \geq 0$ pour tout $x \in [X_\varepsilon - \sqrt{\varepsilon}, X_\varepsilon]$ et ρ_ε est définie par

$$\rho_\varepsilon(x) = \begin{cases} \rho(x) & \text{pour tout } x \in \mathbb{R}_+ \setminus [X_\varepsilon - \sqrt{\varepsilon}, X], \\ \rho(x) - \sqrt{\varepsilon} \tilde{\rho} & \text{pour tout } x \in [X_\varepsilon - \sqrt{\varepsilon}, X_\varepsilon], \\ \rho(x) + \tilde{\rho} & \text{pour tout } x \in (X_\varepsilon, X], \end{cases}$$

où $\tilde{\rho}$ est fixé tel que

$$\varepsilon \tilde{\rho} + \int_{X_\varepsilon}^X \rho(x) dx = \varepsilon \bar{\rho}. \quad (4.124)$$

On s'intéresse à la quantité

$$0 \leq \frac{\mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X_\varepsilon, \mu_\varepsilon) - \mathbf{J}_{(X^0, \mu^0)}(X, \mu)}{\varepsilon} = Q_{20} + Q_{21} + Q_{22} + \alpha, \quad (4.125)$$

avec

$$\begin{aligned} Q_{20} &= \frac{1}{2\varepsilon\tau} (\mathbf{d}_2^2(\mu_\varepsilon, \mu^0) - \mathbf{d}_2^2(\mu, \mu^0)), \\ Q_{21} &= \frac{\lambda}{2\varepsilon\tau} \left((X_\varepsilon - X^0)^2 - (X - X^0)^2 \right), \\ Q_{22} &= \frac{1}{\varepsilon} (\mathbf{E}_B(X_\varepsilon, \rho_\varepsilon) - \mathbf{E}_B(X, \rho)). \end{aligned}$$

Chapitre 4. Existence de solutions pour un modèle jouet de corrosion

Pour le terme Q_{20} , quitte à choisir $\varepsilon > 0$ tel que $X_\varepsilon - \sqrt{\varepsilon} > \ell_1$ si $R < R^0$ ou $X_\varepsilon - \sqrt{\varepsilon} > \ell_2$ si $R > R^0$, on peut supposer que le plan de transport γ envoie la mesure $\rho \mathcal{L} \llcorner (X_\varepsilon - \sqrt{\varepsilon}, X_\varepsilon)$ via une application de transport optimal T . Autrement dit, γ est de la forme

$$\gamma \llcorner (X_\varepsilon - \sqrt{\varepsilon}, X_\varepsilon) \times (T(X_\varepsilon - \sqrt{\varepsilon}), T(X_\varepsilon)) = (Id, T)_\# \rho \mathcal{L} \llcorner (X_\varepsilon - \sqrt{\varepsilon}, X_\varepsilon).$$

On définit $\gamma_\varepsilon \in \Gamma(\mu_\varepsilon, \mu^0)$ par

$$\begin{aligned} \gamma_\varepsilon = \gamma \llcorner \mathbb{R}^2 \setminus (X_\varepsilon - \sqrt{\varepsilon}, X_\varepsilon) \times (T(X_\varepsilon - \sqrt{\varepsilon}), T(X_\varepsilon)) \\ + (Id, T)_\# (\rho - \sqrt{\varepsilon} \tilde{\rho}) \mathcal{L} \llcorner (X_\varepsilon - \sqrt{\varepsilon}, X_\varepsilon) \\ + (D_5, T)_\# \sqrt{\varepsilon} \tilde{\rho} \mathcal{L} \llcorner (X_\varepsilon - \sqrt{\varepsilon}, X_\varepsilon). \end{aligned}$$

L'application $D_5 : (X_\varepsilon - \sqrt{\varepsilon}, X_\varepsilon) \rightarrow (X_\varepsilon, X)$ est définie par $D_5(x) = X_\varepsilon + \sqrt{\varepsilon} (x - X_\varepsilon + \sqrt{\varepsilon})$ telle que

$$D_{5\#} [\sqrt{\varepsilon} \tilde{\rho} \mathcal{L} \llcorner (X_\varepsilon - \sqrt{\varepsilon}, X_\varepsilon)] = \tilde{\rho} \mathcal{L} \llcorner (X_\varepsilon, X).$$

On vérifie ensuite sans difficultés que $\pi_{1\#} \gamma_\varepsilon = \mu_\varepsilon$ et $\pi_{2\#} \gamma_\varepsilon = \mu^0$. Pour le terme Q_{20} on a

$$Q_{20} \leq -\frac{1}{2\varepsilon\tau} \int_{X_\varepsilon - \sqrt{\varepsilon}}^{X_\varepsilon} (x - T(x))^2 \sqrt{\varepsilon} \tilde{\rho} dx + \frac{1}{2\varepsilon\tau} \int_{X_\varepsilon - \sqrt{\varepsilon}}^{X_\varepsilon} (D_5(x) - T(x))^2 \sqrt{\varepsilon} \tilde{\rho} dx.$$

En insérant x dans le deuxième terme du membre de droite et en développant le carré, on obtient

$$\begin{aligned} Q_{20} \leq \frac{1}{2\varepsilon\tau} \int_{X_\varepsilon - \sqrt{\varepsilon}}^{X_\varepsilon} (D_5(x) - x)^2 \sqrt{\varepsilon} \tilde{\rho} dx \\ + \frac{1}{\varepsilon\tau} \int_{X_\varepsilon - \sqrt{\varepsilon}}^{X_\varepsilon} (D_5(x) - x) (x - T(x)) \sqrt{\varepsilon} \tilde{\rho} dx. \end{aligned}$$

Par monotonie de T on a $T(x) \leq T(X) = X$ pour tout $x \in (X_\varepsilon - \sqrt{\varepsilon}, X_\varepsilon)$ et

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{\varepsilon\tau} \int_{X_\varepsilon - \sqrt{\varepsilon}}^{X_\varepsilon} (D_5(x) - x) (x - T(x)) \sqrt{\varepsilon} \tilde{\rho} dx \right| \\ \leq \frac{2X}{\sqrt{\varepsilon}\tau} \int_{X_\varepsilon - \sqrt{\varepsilon}}^{X_\varepsilon} |D_5(X_\varepsilon - \sqrt{\varepsilon}) - X_\varepsilon + \sqrt{\varepsilon}| dx. \end{aligned}$$

Puisque $D_5(X_\varepsilon - \sqrt{\varepsilon}) - X_\varepsilon + \sqrt{\varepsilon} = \sqrt{\varepsilon}$ on en déduit que

$$\frac{1}{\varepsilon\tau} \int_{X_\varepsilon - \sqrt{\varepsilon}}^{X_\varepsilon} (D_5(x) - x) (x - T(x)) \sqrt{\varepsilon} \tilde{\rho} dx = O(\sqrt{\varepsilon}). \quad (4.126)$$

Un calcul similaire permet également d'obtenir

$$\frac{1}{2\varepsilon\tau} \int_{X_\varepsilon - \sqrt{\varepsilon}}^{X_\varepsilon} (D_5(x) - x)^2 \sqrt{\varepsilon} \tilde{\rho} dx = O(\varepsilon). \quad (4.127)$$

On déduit de (4.126) et (4.127) que

$$Q_{20} = O(\sqrt{\varepsilon}) \quad (4.128)$$

Pour Q_{21} , on a

$$Q_{21} = -\lambda \frac{X - X^0}{\tau} + o(\varepsilon). \quad (4.129)$$

Pour Q_{22} on obtient par définition de ρ_ε

$$Q_{22} = \frac{1}{\varepsilon} \int_{X_\varepsilon - \sqrt{\varepsilon}}^{X_\varepsilon} (f(\rho(x) - \tilde{\rho}\sqrt{\varepsilon}) - f(\rho(x))) dx - \frac{1}{\varepsilon} \int_{X_\varepsilon}^X f(\rho(x)) dx.$$

Un développement limité de f implique que

$$Q_{22} = \frac{-\tilde{\rho}}{\sqrt{\varepsilon}} \int_{X_\varepsilon - \sqrt{\varepsilon}}^{X_\varepsilon} f'(\rho(x)) dx - \frac{1}{\varepsilon} \int_{X_\varepsilon}^X f(\rho(x)) dx + O(\sqrt{\varepsilon}). \quad (4.130)$$

On passe alors à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$ dans l'inégalité (4.125) et en utilisant (4.128)-(4.130) on obtient

$$\lambda \frac{X - X^0}{\tau} \leq \alpha - (\bar{\rho} - \rho(X)) + \bar{\rho} (\log \bar{\rho} - \log \rho(X)). \quad (4.131)$$

Pour passer à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$ pour le terme Q_{22} on utilise l'égalité de masse (4.124) vérifiée par $\tilde{\rho}$ et on a

$$\tilde{\rho} \rightarrow \bar{\rho} - \rho(X) \quad \text{quand } \varepsilon \rightarrow 0.$$

On déduit ainsi de (4.123) et (4.131) l'égalité (4.117), ce qui conclut la preuve de la Proposition 4.4.6. $\square$

4.5 Preuve du Théorème 4.2.4

Pour démontrer le Théorème 4.2.4, on établit, dans la Proposition 4.2.3, l'équation d'Euler-Lagrange vérifiée par les solutions de (4.24) et, via des estimations uniforme en τ , on prouve, dans la Proposition 4.5.2, l'existence des fonctions X , ρ et R introduites dans le Théorème 4.2.4. Il ne nous reste plus alors qu'à prouver que ces fonctions sont solutions faibles de (4.1)-(4.2).

4.5.1 Preuve de la Proposition 4.2.3

D'après la Proposition 4.4.1, pour tout $\xi \in \mathcal{D}(0, X)$ l'égalité suivante est satisfaite

$$\frac{1}{\tau} \int_0^X \xi(x) (x - T(x)) \rho(x) dx - \int_0^X \xi'(x) \rho(x) dx = 0.$$

Par régularité de $\rho|_{(0,X)}$, voir Corollaire 4.4.2, on effectue une intégration par parties dans la seconde intégrale, on obtient

$$\frac{1}{\tau} \int_0^X \xi(x) (x - T(x)) \rho(x) dx + \int_0^X \xi(x) \partial_{x,a} \rho(x) dx = 0. \quad (4.132)$$

On peut alors étendre par densité à tout $\xi \in \mathcal{D}([0, +\infty))$ l'égalité précédente et on en déduit la réécriture de (4.132) suivante :

$$\frac{1}{\tau} \int_0^X \xi(x) (x - T(x)) \rho(x) dx + \int_0^X \xi(x) \partial_{x,a} \rho(x) dx = 0, \quad \forall \xi \in \mathcal{D}([0, +\infty)). \quad (4.133)$$

On considère alors $\xi = \psi'$ avec $\psi \in \mathcal{D}([0, +\infty))$ comme fonction test pour (4.133) et on définit

$$q = \frac{1}{\tau} \int_0^X \psi'(x) (x - T(x)) \rho(x) dx.$$

Dans la suite on veut réécrire le terme q afin d'obtenir (4.39). Dans un premier temps nous allons établir

$$\begin{aligned} q = \frac{1}{\tau} \int_0^X \rho(x) \psi(x) dx - \frac{1}{\tau} \int_0^{T(X)} \rho^0(x) \psi(x) dx + \psi(0) \frac{R - R_0}{\tau} \\ + O \left(\frac{\|\psi'\|_\infty}{\tau} \left\{ \begin{array}{l} \int_0^{\ell_1} (x + c\sqrt{\tau}) \rho(x) dx \\ \int_0^{\ell_2} x \rho^0(x) dx \end{array} \right\} \right) \\ + O \left(\frac{\|\psi''\|_\infty}{\tau} \int_0^{+\infty} |x - T(x)|^2 \rho(x) dx \right), \end{aligned} \quad (4.134)$$

où le terme entre accolades dépend de $R \wedge R^0$. Pour établir (4.134), il y a deux cas à distinguer :

Cas $R < R^0$. Dans ce cas, on décompose le terme q en

$$q = \frac{1}{\tau} \int_0^{\ell_1} \psi'(x) (x + c\sqrt{\tau}) \rho(x) dx + \frac{1}{\tau} \int_{\ell_1}^X \psi'(x) (x - T_1(x)) \rho(x) dx. \quad (4.135)$$

En écrivant $\psi'(x)(x - T_1(x)) = \psi(x) - \psi(T_1(x)) + O(\|\psi''\|_\infty |x - T_1(x)|^2)$, on remarque que

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau} \int_{\ell_1}^X \psi'(x) (x - T_1(x)) \rho(x) dx = \frac{1}{\tau} \int_{\ell_1}^X \psi(x) \rho(x) dx \\ - \frac{1}{\tau} \int_{\ell_1}^X \psi(T_1(x)) \rho(x) dx + O \left(\frac{\|\psi''\|_\infty}{\tau} \int_0^{+\infty} |x - T_1(x)|^2 \rho(x) dx \right). \end{aligned}$$

Or, en notant

$$q_1 = \frac{1}{\tau} \int_{\ell_1}^X \psi(x) \rho(x) dx - \frac{1}{\tau} \int_{\ell_1}^X \psi(T_1(x)) \rho(x) dx,$$

on a

$$q_1 = \frac{1}{\tau} \int_{\ell_1}^X \psi(x) \rho(x) dx - \frac{1}{\tau} \int_0^{T_1(X)} \psi(x) \rho^0(x) dx,$$

et donc

$$\begin{aligned} q_1 &= \frac{1}{\tau} \int_0^X \psi(x) \rho(x) dx - \frac{1}{\tau} \int_0^{T_1(X)} \psi(x) \rho^0(x) dx + \frac{R - R^0}{\tau} \psi(0) \\ &\quad + \frac{1}{\tau} \int_0^{\ell_1} (\psi(0) - \psi(x)) \rho(x) dx. \end{aligned}$$

Ainsi par régularité de ψ on en déduit que

$$\begin{aligned} q_1 &= \frac{1}{\tau} \int_0^X \psi(x) \rho(x) dx - \frac{1}{\tau} \int_0^{T_1(X)} \psi(x) \rho^0(x) dx \\ &\quad + \frac{R - R^0}{\tau} \psi(0) + O\left(\frac{\|\psi'\|_\infty}{\tau} \int_0^{\ell_1} x \rho(x) dx\right). \end{aligned}$$

Finalement, on obtient que

$$q = q_1 + \frac{1}{\tau} \int_0^{\ell_1} \psi'(x) (x + c\sqrt{\tau}) \rho(x) dx + O\left(\frac{\|\psi''\|_\infty}{\tau} \int_0^{+\infty} |x - T_1(x)|^2 \rho(x) dx\right),$$

ce qui permet de conclure que

$$\begin{aligned} q &= \frac{1}{\tau} \int_0^X \rho(x) \psi(x) dx - \frac{1}{\tau} \int_0^{T_1(X)} \rho^0(x) \psi(x) dx \\ &\quad + \psi(0) \frac{R - R_0}{\tau} + O\left(\frac{\|\psi'\|_\infty}{\tau} \int_0^{\ell_1} (x + c\sqrt{\tau}) \rho(x) dx\right) \\ &\quad + O\left(\frac{\|\psi''\|_\infty}{\tau} \int_0^{+\infty} |x - T_1(x)|^2 \rho(x) dx\right). \quad (4.136) \end{aligned}$$

Cas $R > R^0$. Dans ce cas, toujours en écrivant $\psi'(x)(x - T_2(x)) = \psi(x) - \psi(T_2(x)) + O(\|\psi''\|_\infty |x - T_2(x)|^2)$, on remarque que

$$\begin{aligned} q &= \frac{1}{\tau} \int_0^X \psi(x) \rho(x) dx - \frac{1}{\tau} \int_0^X \psi(T_2(x)) \rho(x) dx \\ &\quad + O\left(\frac{\|\psi''\|_\infty}{\tau} \int_0^{+\infty} |x - T_2(x)|^2 \rho(x) dx\right), \end{aligned}$$

d'où

$$q = \frac{1}{\tau} \int_0^X \psi(x) \rho(x) dx - \frac{1}{\tau} \int_{\ell_2}^{T_2(X)} \psi(x) \rho^0(x) dx + O\left(\frac{\|\psi''\|_\infty}{\tau} \int_0^{+\infty} |x - T_2(x)|^2 \rho(x) dx\right).$$

En argumentant comme dans le cas précédent on obtient

$$\begin{aligned} q = & \frac{1}{\tau} \int_0^X \rho(x) \psi(x) dx - \frac{1}{\tau} \int_0^{T_2(X)} \rho^0(x) \psi(x) dx \\ & + \psi(0) \frac{R - R_0}{\tau} + O\left(\frac{\|\psi'\|_\infty}{\tau} \int_0^{\ell_2} x \rho^0(x) dx\right) \\ & + O\left(\frac{\|\psi''\|_\infty}{\tau} \int_0^{+\infty} |x - T_2(x)|^2 \rho(x) dx\right). \end{aligned} \quad (4.137)$$

Ainsi on déduit de (4.136)-(4.137) l'égalité (4.134).

Enfin pour obtenir (4.39) il suffit de remarquer que par monotonie du transport optimal, on a $T(x) = x$ pour $x \geq X \vee X^0 = X$ d'après le Théorème 4.2.3, d'où

$$\frac{1}{\tau} \int_0^X \rho(x) \psi(x) dx - \frac{1}{\tau} \int_0^{T(X)} \rho^0(x) \psi(x) dx = \int_0^X \frac{\rho(x) - \rho^0(x)}{\tau} \psi(x) dx.$$

De plus, toujours d'après le Théorème 4.2.3, on a $X^0 \leq X$ et donc $\rho^0(x) = \bar{\rho}$ pour tout $x \in (X, +\infty)$ et on en déduit que

$$\frac{1}{\tau} \int_0^X \rho(x) \psi(x) dx - \frac{1}{\tau} \int_0^{T(X)} \rho^0(x) \psi(x) dx = \int_0^\infty \frac{\rho(x) - \rho^0(x)}{\tau} \psi(x) dx. \quad (4.138)$$

Ainsi en regroupant (4.134) et (4.138) on obtient l'égalité (4.39) avec le contrôle (4.40) du terme de reste Q . Ce qui achève la preuve de la Proposition 4.2.3.

4.5.2 Estimations a priori

Pour $\tau > 0$ un pas de temps de l'intervalle $(0, T)$ avec $0 < T < +\infty$ fixé, nous rappelons la définition du schéma itératif (4.41). Partant de $(X^0, \mu^0) \in \mathbb{A}$ vérifiant les hypothèses du Théorème 4.2.3 nous cherchons à déterminer pour tout $0 \leq n \leq N_T - 1$ (avec N_T un entier tel que $N_T \tau = T$) un couple $(X^{n+1}, \mu^{n+1}) \in \mathbb{A}$ solution du problème

$$(X^{n+1}, \mu^{n+1}) = \operatorname{argmin}_{(Y, \nu) \in \mathbb{A}} \left\{ \frac{1}{2\tau} \mathbf{d}^2((Y, \nu); (X^n, \mu^n)) + \mathbf{E}(Y, \nu) \right\},$$

où $\mathbf{d}$ et $\mathbf{E}$ sont introduites à la Section 4.2.3. Une application récursive du Théorème 4.2.3 permet de déduire l'existence de $(X^n, \mu^n) \in \mathbb{A}_{a,m}$ pour tout $1 \leq n \leq N_T$ solution du problème (4.41). On établit dans le résultat suivant des estimations a priori uniforme en τ vérifiées par la suite $(X^n, \mu^n)_{0 \leq n \leq N_T}$.

Lemme 4.5.1. *Sous les hypothèses du Théorème 4.2.4, il existe une constante C strictement positive et indépendante de τ telle que*

$$\sum_{n=0}^{N_T-1} \frac{\mathbf{d}_2^2(\mu^{n+1}, \mu^n)}{\tau} \leq C, \quad (4.139)$$

$$\sum_{n=0}^{N_T-1} \frac{(X^{n+1} - X^n)^2}{\tau} \leq C. \quad (4.140)$$

et

$$\sum_{n=0}^{N_T-1} |R^{n+1} - R^n| \leq C. \quad (4.141)$$

Preuve du Lemme 4.5.1. En utilisant (X^n, μ^n) comme mesure admissible pour la fonctionnelle $\mathbf{J}_{(X^n, \mu^n)}$ on a, par optimalité de (X^{n+1}, μ^{n+1}) , pour tout $0 \leq n \leq N_T - 1$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\tau} \mathbf{d}_2^2(\mu^{n+1}, \mu^n) + \frac{\lambda}{2\tau} (X^{n+1} - X^n)^2 &\leq \int_0^{X^n} f(\rho^n(x)) dx - \int_0^{X^{n+1}} f(\rho^{n+1}(x)) dx \\ &\quad + \alpha(X^{n+1} - X^n) + \beta(R^{n+1} - R^n), \end{aligned}$$

où $f(x) = x \log(x/\bar{\rho})$. En sommant cette dernière inégalité on obtient

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{N_T-1} \frac{1}{2\tau} \mathbf{d}_2^2(\mu^{n+1}, \mu^n) + \lambda \sum_{n=0}^{N_T-1} \frac{(X^{n+1} - X^n)^2}{2\tau} &\leq \int_0^{X^0} f(\rho^0(x)) dx \\ &\quad + (\alpha + \bar{\rho} \exp(-1)) X^{N_T} + \beta(R^{N_T} - R^0), \end{aligned}$$

où on a utilisé le fait que $f(x) \geq -\bar{\rho} \exp(-1)$ pour tout $x \in \mathbb{R}_+$. De plus, comme

$$R^{N_T} = - \int_0^{X^{N_T}} (\rho^{N_T} - \bar{\rho}) \leq \bar{\rho} X^{N_T},$$

on obtient l'inégalité suivante

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{N_T-1} \frac{1}{2\tau} \mathbf{d}_2^2(\mu^{n+1}, \mu^n) + \lambda \sum_{n=0}^{N_T-1} \frac{(X^{n+1} - X^n)^2}{2\tau} &\leq \int_0^{X^0} f(\rho^0) \\ &\quad + (\alpha + \bar{\rho}(1 + \exp(-1))) X^{N_T} - \beta R^0. \end{aligned}$$

On en déduit l'existence d'une constante C indépendante de τ vérifiant (4.139) et (4.140). Par ailleurs, dans le cas où $R^{n+1} < R^n$ on a

$$\mathbf{d}_2^2(\mu^{n+1}, \mu^n) = \int_0^{\ell_1^{n+1}} (x + c\sqrt{\tau})^2 \rho^{n+1}(x) dx + \int_{\ell_1^{n+1}}^{+\infty} (x - T_1^{n+1}(x))^2 \rho^{n+1}(x) dx,$$

où ℓ_1^{n+1} est définie comme dans la Section 4.2.3. On obtient ainsi

$$\mathbf{d}_2^2(\mu^{n+1}, \mu^n) \geq c^2 \tau \int_0^{\ell_1^{n+1}} \rho^{n+1}(x) dx = c^2 \tau (R^n - R^{n+1}).$$

Un raisonnement similaire dans le cas $R^{n+1} > R^n$ permet de déduire que pour tout $0 \leq n \leq N_T - 1$ on a

$$c^2 |R^{n+1} - R^n| \leq \frac{\mathbf{d}_2^2(\mu^{n+1}, \mu^n)}{\tau}.$$

Ainsi on obtient par le biais de (4.139) l'existence d'une constante C indépendante de τ vérifiant (4.141), ce qui conclut la preuve du Lemme 4.5.1. $\square$

Nous rappelons que les fonctions ρ^τ , X^τ , $\tilde{X}^\tau$ et $\tilde{R}^\tau$ obtenues à partir des solutions $(X^n, \mu^n)_{0 \leq n \leq N_T}$ du problème (4.41), sont définies par

$$\rho^\tau(t) = \rho^{n+1}, \quad X^\tau(t) = X^{n+1} \quad \text{pour } t \in (n\tau, (n+1)\tau],$$

avec $\rho^\tau(0) = \rho^0$, $X^\tau(0) = X^0$ et

$$\begin{aligned} \tilde{X}^\tau(t) &= \frac{t - n\tau}{\tau} X^{n+1} + \frac{(n+1)\tau - t}{\tau} X^n \quad \text{pour } t \in (n\tau, (n+1)\tau], \\ \tilde{R}^\tau(t) &= \frac{t - n\tau}{\tau} R^{n+1} + \frac{(n+1)\tau - t}{\tau} R^n \quad \text{pour } t \in (n\tau, (n+1)\tau], \end{aligned}$$

avec $\tilde{X}^\tau(0) = X^0$ et $\tilde{R}^\tau(0) = R^0$. Ces fonctions vérifient le résultat :

Proposition 4.5.1. *Sous les hypothèses du Théorème 4.2.4, alors pour tout $\psi \in \mathcal{D}([0, +\infty) \times [0, T])$ l'inégalité suivante est vérifiée*

$$\begin{aligned} & \left| - \int_0^T \int_{\mathbb{R}_+} \rho^\tau(x, t) \partial_t^\tau \psi(x, t) dx dt - \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \int_{\mathbb{R}_+} \rho^0(x) \psi(x, t) dx dt \right. \\ & \quad \left. + \int_0^T (\tilde{R}^\tau)'(t) \psi(0, t) dt + \int_0^T \int_0^{X^\tau(t)} \partial_{x,a} \rho^\tau(x, t) \partial_x \psi(x, t) dx dt \right| \\ & \leq \sum_{n=0}^{\lceil T/\tau \rceil} \tau |Q^n|, \quad (4.142) \end{aligned}$$

où

$$\partial_t^\tau \psi(x, t) = \frac{\psi(x, t) - \psi(x, t - \tau)}{\tau},$$

et il existe une constante C indépendante de τ telle que

$$\sum_{n=0}^{\lceil \frac{T}{\tau} \rceil} \tau |Q^n| \leq C \left(\|\partial_x^2 \psi\|_\infty \tau + \|\partial_x \psi\|_\infty \sqrt{\tau} \right). \quad (4.143)$$

De plus pour tout $\phi \in \mathcal{C}(0, T)$ on a

$$\begin{aligned} \lambda \int_0^T \tilde{X}^\tau(t)' \phi(t) dt &= \alpha \int_0^T \phi(t) dt - \int_0^T (\bar{\rho} - \rho^\tau(X^\tau(t), t)) \phi(t) dt \\ &\quad + \bar{\rho} \int_0^T (\log \bar{\rho} - \log \rho^\tau(X^\tau(t), t)) \phi(t) dt. \end{aligned} \quad (4.144)$$

Preuve de la Proposition 4.5.1. Il suffit d'établir le contrôle (4.143) sur la somme des termes de reste Q^n . En effet, l'inégalité (4.142) se déduit directement de (4.39) et d'une intégration par parties discrète et (4.144) est une conséquence immédiate de (4.117). Pour la somme des termes de reste on a d'après la Proposition 4.2.3, pour tout $\psi \in \mathcal{D}([0, +\infty) \times [0, T])$, la décomposition suivante

$$\sum_{n=0}^{\lceil \frac{T}{\tau} \rceil} \tau |Q^n| \leq \|\partial_x^2 \psi\|_\infty \sum_{n=0}^{N_T-1} \mathbf{d}_2^2(\mu^{n+1}, \mu^n) + \|\partial_x \psi\|_\infty (Q_{23} + Q_{24}),$$

avec

$$\begin{aligned} Q_{23} &= \sum_{n=0}^{N_T-1} \int_0^{\ell_1^{n+1}} x \rho^{n+1}(x) dx + \sum_{n=0}^{N_T-1} \int_0^{\ell_2^{n+1}} x \rho^n(x) dx, \\ Q_{24} &= \sum_{n=0}^{N_T-1} c\sqrt{\tau} \left| \int_0^{\ell_1^{n+1}} \rho^{n+1}(x) dx \right|. \end{aligned}$$

Pour Q_{23} on remarque que

$$\begin{aligned} \int_0^{\ell_1^{n+1}} x \rho^{n+1}(x) dx &= \frac{1}{4c\sqrt{\tau}} \int_0^{\ell_1^{n+1}} 4c\sqrt{\tau} x \rho^{n+1}(x) dx \\ &\leq \frac{1}{4c\sqrt{\tau}} \int_0^{\ell_1^{n+1}} |x + c\sqrt{\tau}|^2 \rho^{n+1}(x) dx \\ &\leq \frac{1}{4c\sqrt{\tau}} \int_0^{\ell_1^{n+1}} |x - T_1^{n+1}(x)|^2 \rho^{n+1}(x) dx. \end{aligned}$$

Des manipulations similaires pour l'autre terme définissant Q_{23} permettent d'obtenir

$$Q_{23} \leq \frac{\sqrt{\tau}}{4c} \sum_{n=0}^{N_T-1} \frac{\mathbf{d}_2^2(\mu^{n+1}, \mu^n)}{\tau}. \quad (4.145)$$

Pour Q_{24} , par définition de ℓ_1^{n+1} on a

$$Q_{24} \leq c\sqrt{\tau} \sum_{n=0}^{N_T-1} |R^{n+1} - R^n|. \quad (4.146)$$

Enfin, on déduit de (4.139), (4.141), (4.145) et (4.146) l'existence d'une constante C indépendante de τ telle que

$$\sum_{n=0}^{\lceil \frac{T}{\tau} \rceil} \tau |Q^n| \leq C \left(\|\partial_x^2 \psi\|_{\infty} \tau + \|\partial_x \psi\|_{\infty} \sqrt{\tau} \right),$$

ce qui conclut la preuve de la Proposition 4.5.1. $\square$

4.5.3 Compacité et passage à la limite

On est à présent en mesure de passer à la limite $\tau \rightarrow 0$ et d'établir l'existence des fonctions X , ρ et R introduites dans le Théorème 4.2.4.

Proposition 4.5.2. *Sous les hypothèses du Théorème 4.2.4, il existe $X \in H^1(0, T)$ telle que, à une sous-suite extraite près,*

$$\tilde{X}^\tau \rightarrow X \quad \text{fortement dans } L^2(0, T), \quad (4.147)$$

$$(\tilde{X}^\tau)' \rightharpoonup X' \quad \text{faiblement dans } L^2(0, T). \quad (4.148)$$

Il existe $R \in BV(0, T)$ telle que, à une sous-suite extraite près,

$$\tilde{R}^\tau \rightarrow R \quad \text{fortement dans } L^1(0, T), \quad (4.149)$$

$$(\tilde{R}^\tau)' \rightharpoonup R' \quad \text{faiblement au sens des mesures de Radon.} \quad (4.150)$$

De plus, il existe ρ telle que l'application $t \in [0, T] \rightarrow \rho(t)$ soit $\frac{1}{2}$ -Hölderienne pour la métrique $\mathbf{Wb}_2$ et telle que, à une sous-suite extraite près,

$$\rho^\tau \rightarrow \rho \quad \text{uniformément pour } \mathbf{Wb}_2.$$

Enfin cette fonction limite ρ appartient à $L^2(0, T; BV_{\text{loc}}(\mathbb{R}_+))$ et

$$\rho^\tau \rightarrow \rho \quad \text{fortement dans } L^p(0, T; L^p_{\text{loc}}(\mathbb{R}_+)), \quad \forall 1 \leq p < \infty. \quad (4.151)$$

En outre, $\partial_{x,a}\rho$ appartient à $L^2((0, T) \times \mathbb{R}_+)$ et donc pour presque tout $t \in (0, T)$ on a $\rho(\cdot, t)|_{(0, X(t))} \in H^1$.

Dans un premier temps, on remarque, en adaptant la construction de $\mathbf{d}_2$ faite à la Section 4.2.2, que la métrique $\mathbf{Wb}_2$, introduite dans la même section, peut être définie pour deux mesures ρ^{n+1} et ρ^n issues de μ^{n+1} et μ^n pour $0 \leq n \leq N_T - 1$ de la façon suivante

$$\mathbf{Wb}_2(\rho^{n+1}, \rho^n) = \inf \left\{ \mathbf{W}_2(\rho^{n+1} + \alpha_1 \delta_0, \rho^n + \alpha_2 \delta_0) : \alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{R}, \right. \\ \left. \int_{\mathbb{R}_+} \rho^{n+1}(x) dx + \alpha_1 = \int_{\mathbb{R}_+} \rho^n(x) dx + \alpha_2 \right\}.$$

En particulier, on remarque par définition de $\mathbf{Wb}_2$, que pour tout $0 \leq n \leq N_T - 1$ on a l'inégalité

$$\mathbf{Wb}_2(\rho^{n+1}, \rho^n) \leq \mathbf{d}_2(\mu^{n+1}, \mu^n). \quad (4.152)$$

Preuve de la Proposition 4.5.2. Pour les résultats de convergences (4.147) et (4.148), on commence par remarquer que pour tout $T < \infty$ alors par croissance de l'interface on a $0 \leq X^n \leq X^{N_T} < \infty$ pour tout $0 \leq n \leq N_T$. De plus, on déduit de l'estimation (4.140) que $\tilde{X}^\tau$ est uniformément bornée dans $H^1(0, T)$.

Pour les résultats de convergence (4.149) et (4.150), on commence par remarquer d'après la relation

$$R^n = - \int_0^{X^n} \rho^n(x) dx + X^n \bar{\rho},$$

que pour tout $0 \leq n \leq N_T$ on a

$$|R^n| \leq X^n \bar{\rho} \leq X^{N_T} \bar{\rho}.$$

On en déduit, par définition de $\tilde{R}^\tau$ l'estimation suivante

$$\int_0^T |\tilde{R}^\tau(t)| dt \leq 2 T X^{N_T} \bar{\rho}.$$

De plus, on conclut de (4.141) que $\tilde{R}^\tau$ est uniformément bornée dans $W^{1,1}(0, T) \subset BV(0, T)$. En appliquant le [36, Théorème 5.5], on obtient alors l'existence de $R \in BV(0, T)$ telle que, à une sous-suite extraite près,

$$\tilde{R}^\tau \rightarrow R \quad \text{fortement dans } L^1(0, T).$$

On identifie ensuite tout élément de $L^1(0, T)$ à un élément de l'ensemble des mesures de Radon $\mathcal{M}(0, T)$, avec l'abus classique permettant de confondre une mesure et sa densité, et on obtient l'existence de $P \in \mathcal{M}(0, T)$ telle que, à une sous-suite extraite près,

$$(\tilde{R}^\tau)' \rightharpoonup P \quad \text{faiblement au sens des mesures de Radon.}$$

Il reste alors à identifier au sens des distributions P et R' afin d'obtenir le résultat de convergence (4.150).

On considère à présent $t_1, t_2 \in [0, T]$ avec $t_1 < t_2$. On définit alors $i_1 = \lfloor \frac{t_1}{\tau} \rfloor$ et $i_2 = \lfloor \frac{t_2}{\tau} \rfloor$ vérifiant

$$i_2 - i_1 \leq \frac{t_2 - t_1}{\tau} + 1.$$

On obtient alors en utilisant l'inégalité (4.152) et l'inégalité de Cauchy-Schwarz

$$\begin{aligned} \mathbf{Wb}_2(\rho^\tau(t_2), \rho^\tau(t_1)) &\leq \sum_{j=i_1}^{i_2+1} \mathbf{d}_2(\mu^{n+1}, \mu^n) \\ &\leq \sqrt{i_2 - i_1} \left(\sum_{j=i_1}^{i_2} \mathbf{d}_2^2(\mu^{n+1}, \mu^n) \right)^{1/2} \\ &\leq \frac{1}{\sqrt{\tau}} \sqrt{t_2 - t_1 + \tau} \left(\sum_{j=0}^{N_T-1} \mathbf{d}_2^2(\mu^{n+1}, \mu^n) \right)^{1/2}. \end{aligned}$$

On déduit de (4.139)

$$\mathbf{Wb}_2(\rho^\tau(t_2), \rho^\tau(t_1)) \leq C \sqrt{t_2 - t_1 + \tau}. \quad (4.153)$$

De plus, en tronquant en espace les mesures $t \in [0, T] \mapsto \rho^\tau(t)$ à partir d'un certain rang Λ , pour $\Lambda > X^{N_T} + 1$, alors $\rho_{|(0, \Lambda)}^\tau \in \mathcal{M}_{\leq M}(0, \Lambda)$, où $\mathcal{M}_{\leq M}(0, \Lambda)$ désigne l'espace des mesures positives et absolument continues par rapport à la mesure de Lebesgue sur $(0, \Lambda)$ de masses plus petites ou égales à M , ici $M = \bar{\rho}\Lambda$ convient. Or, d'après la Proposition 4.2.2 cet espace est compact pour la métrique $\mathbf{Wb}_2$. On peut alors appliquer une version raffiné du théorème d'Arzela-Ascoli à l'ensemble $\{\rho^\tau(t) : \tau \in (0, 1], t \in [0, T]\}$, voir [7, Proposition 3.3.1]. On en déduit l'existence de ρ absolument continue pour $\mathbf{Wb}_2$, où pour tout $t \in [0, T]$ on étend $\rho(t)$ par $\bar{\rho}$ pour $x > \Lambda$, telle que, à une sous-suite extraite près,

$$\rho^\tau \xrightarrow[\tau \downarrow 0]{} \rho \quad \text{uniformément pour } \mathbf{Wb}_2.$$

La régularité $\frac{1}{2}$ -Hölderienne de l'application $t \in [0, T] \rightarrow \rho(t)$ est obtenue à partir de (4.153) en faisant tendre τ vers 0.

A présent, par le biais de la Proposition 4.4.5, on sait que $\rho^\tau \in L^2(0, T; L_{\text{loc}}^2(\mathbb{R}_+))$. On considère alors $\xi \in \mathcal{C}_c^1(\mathbb{R}_+)$ avec $\|\xi\|_\infty \leq 1$ on a

$$\begin{aligned} \int_0^T \int_{\mathbb{R}_+} \rho^\tau(x, t) \xi'(x) dx dt &= \sum_{n=0}^{N_T-1} \tau \int_{\mathbb{R}_+} \rho^{n+1}(x) \xi'(x) dx \\ &= \sum_{n=0}^{N_T-1} \tau \left[\int_0^{X^{n+1}} \rho^{n+1}(x) \xi'(x) dx - \bar{\rho} \xi(X^{n+1}) \right]. \end{aligned}$$

D'où

$$\begin{aligned} \int_0^T \int_{\mathbb{R}_+} \rho^\tau(x, t) \xi'(x) dx dt &= - \sum_{n=0}^{N_T-1} \tau \int_0^{X^{n+1}} \partial_{x,a} \rho^{n+1}(x) \xi(x) \\ &\quad + \sum_{n=0}^{N_T-1} \tau (\rho^{n+1}(X^{n+1}) - \bar{\rho}) \xi(X^{n+1}), \end{aligned}$$

et

$$\left| \int_0^T \int_{\mathbb{R}_+} \rho^\tau(x, t) \xi'(x) dx dt \right| \leq \sum_{n=0}^{N_T-1} \tau \left\| \partial_{x,a} \rho^{n+1} \right\|_{L^2(0, X^{n+1})} \left\| \xi \right\|_{L^2(0, X^{n+1})} + 2T \bar{\rho}.$$

L'inégalité de Young nous donne alors

$$\left| \int_0^T \int_{\mathbb{R}_+} \rho^\tau(x, t) \xi'(x) dx dt \right| \leq \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N_T-1} \tau \left\| \partial_{x,a} \rho^{n+1} \right\|_{L^2(0, X^{n+1})}^2 + \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N_T-1} \tau X^{n+1} + 2T \bar{\rho}.$$

On obtient d'après (4.116) l'inégalité suivante

$$\left| \int_0^T \int_{\mathbb{R}_+} \rho^\tau(x, t) \xi'(x) dx dt \right| \leq \frac{X^{N_T} \bar{\rho}}{2} \sum_{n=0}^{N_T-1} \frac{\mathbf{d}_2^2(\mu^{n+1}, \mu^n)}{\tau} + \frac{X^{N_T}}{2} T + 2T \bar{\rho} < \infty.$$

Ainsi ρ^τ est uniformément bornée dans $L^2(0, T; BV_{\text{loc}}(\mathbb{R}_+))$. Il existe alors $v \in L^2(0, T; BV_{\text{loc}}(\mathbb{R}_+))$ telle que

$$\rho^\tau \rightarrow v \quad \text{fortement dans } L^1(0, T; L_{\text{loc}}^1(\mathbb{R}_+)), \quad (4.154)$$

voir [36, Théorème 5.5]. De plus, d'après la Proposition 4.2.2, la distance $\mathbf{Wb}_2$ maîtrise la convergence faible des mesures, on en déduit par identification que $v = \rho$ au sens des distributions. En particulier, on a $\rho \in L^2(0, T; BV_{\text{loc}}(\mathbb{R}_+))$ et le résultat de convergence (4.151) se déduit de (4.154) et du résultat sur les bornes L^∞ obtenu à la Proposition 4.4.5.

L'injection $H^1(0, T) \hookrightarrow C([0, T])$ et (4.147) permettent de déduire que X^τ converge uniformément vers X . Ainsi, on conclut de la convergence forte de ρ^τ vers ρ dans $L^1(0, T; L_{\text{loc}}^1(\mathbb{R}_+))$ que pour presque tout $t \in [0, T]$ alors $\rho(x, t) = \bar{\rho}$ pour $x > X(t)$. Donc, pour montrer que pour presque tout $t \in [0, T]$ on a $\partial_{x,a} \rho(\cdot, t) \in L^2(\mathbb{R}_+)$, il suffit de montrer que $\partial_{x,a} \rho(\cdot, t)|_{(0, X(t))} \in L^2$. Pour cela, on considère $\tilde{\rho}^\tau$ défini pour tout $t \in (n\tau, (n+1)\tau]$ par $\tilde{\rho}^\tau(t) = \tilde{\rho}^{n+1}$ et $\tilde{\rho}^\tau(0) = \rho^0$ avec

$$\tilde{\rho}^{n+1}(x) = \begin{cases} \rho^{n+1}(x) & \text{pour } 0 < x < X^{n+1}, \\ \rho^{n+1}(X^{n+1}) & \text{pour } x \geq X^{n+1}. \end{cases}$$

On déduit de l'estimation (4.116) que $\partial_x \tilde{\rho}^\tau$ est uniformément bornée dans $L^2((0, T) \times \mathbb{R}_+)$ et donc il existe $\tilde{\rho} \in L^2(0, T; H_{\text{loc}}^1(\mathbb{R}_+))$ telle que

$$\partial_x \tilde{\rho}^\tau \rightharpoonup \partial_x \tilde{\rho} \quad \text{faiblement dans } L^2(0, T; L^2(\mathbb{R}_+)).$$

Comme pour tout $(x, t) \in (0, X^\tau(t)) \times (0, T)$ on a $\rho^\tau(x, t) = \tilde{\rho}^\tau(x, t)$ alors (4.151) implique que pour presque tout $(x, t) \in (0, X(t)) \times (0, T)$ on a $\rho(x, t) = \tilde{\rho}(x, t)$. On en déduit que pour presque tout $t \in (0, T)$ et $\xi \in \mathcal{D}(0, X(t))$ on a

$$\int_0^{X(t)} \rho(x, t) \xi'(x) dx = \int_0^{X(t)} \tilde{\rho}(x, t) \xi'(x) dx.$$

Ainsi au sens des distributions pour presque tout $(x, t) \in (0, X(t)) \times (0, T)$ alors $\partial_{x,a}\rho(x, t) = \partial_x \tilde{\rho}(x, t)$ et donc $\partial_{x,a}\rho(\cdot, t)|_{(0, X(t))} \in L^2$. Ce qui conclut la preuve de la Proposition 4.5.2. $\square$

On établit à présent un résultat sur la convergence des traces.

Proposition 4.5.3. *Sous les hypothèses du Théorème 4.2.4, les fonctions limites obtenues dans la Proposition 4.5.2 vérifient pour tout $1 \leq p < +\infty$ les résultats de convergence de traces suivants*

$$\left(\int_0^T |\rho^\tau(X^\tau(t), t) - \rho(X(t), t)|^p dt \right)^{1/p} \rightarrow 0 \quad \text{quand } \tau \rightarrow 0, \quad (4.155)$$

$$\left(\int_0^T |\rho^\tau(0, t) - \rho(0, t)|^p dt \right)^{1/p} \rightarrow 0 \quad \text{quand } \tau \rightarrow 0. \quad (4.156)$$

Preuve de la Proposition 4.5.3. On déduit de la Proposition 4.4.5 qu'il suffit de prouver le résultat (4.155) et (4.156) pour $p = 1$. On commence par établir (4.155). L'injection $H^1(0, T) \hookrightarrow C([0, T])$ et (4.147) permet de déduire que X^τ converge uniformément vers X . On définit alors pour tout $t \in [0, T]$ et $s \in \mathbb{R}_+$

$$\check{X}^\tau(t, s) = \min(X^\tau(t), X(t)) - s.$$

On considère ensuite pour $\varepsilon > 0$ la décomposition suivante

$$\int_0^T |\rho^\tau(X^\tau(t), t) - \rho(X(t), t)| dt \leq Q_{25}(\varepsilon) + Q_{26}(\varepsilon) + Q_{27}(\varepsilon),$$

avec

$$\begin{aligned} Q_{25}(\varepsilon) &= \int_0^T \int_0^\varepsilon |\rho^\tau(X^\tau(t), t) - \rho^\tau(\check{X}^\tau(t, s), t)| ds dt, \\ Q_{26}(\varepsilon) &= \int_0^T \int_0^\varepsilon |\rho^\tau(\check{X}^\tau(t, s), t) - \rho(\check{X}^\tau(t, s), t)| ds dt, \\ Q_{27}(\varepsilon) &= \int_0^T \int_0^\varepsilon |\rho(\check{X}^\tau(t, s), t) - \rho(X(t), t)| ds dt. \end{aligned}$$

On considère dans un premier temps le terme $Q_{26}(\varepsilon)$. On remarque, par construction de $\check{X}^\tau$, que pour tout $s \in (0, \varepsilon)$ et $t \in (0, T)$

$$0 \leq \check{X}^\tau(t, s) \leq X^\tau(t) \quad \text{et} \quad 0 \leq \check{X}^\tau(t, s) \leq X(t).$$

On déduit alors de l'inégalité de Cauchy-Schwarz

$$Q_{26}(\varepsilon) \leq \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \int_0^T \|\rho^\tau(t) - \rho(t)\|_{L^2(\mathbb{R}_+)} dt.$$

On remarque que pour presque tout $t \in [0, T]$ la norme $L^2(\mathbb{R}_+)$ de $\rho^\tau(t) - \rho(t)$ est bien définie puisque ces fonctions sont égales à $\bar{\rho}$ à partir d'un certain $0 < \Lambda < \infty$. Une autre application de l'inégalité de Cauchy-Schwarz nous donne

$$Q_{26}(\varepsilon) \leq \frac{\sqrt{T}}{\sqrt{\varepsilon}} \|\rho^\tau - \rho\|_{L^2((0,T) \times \mathbb{R}_+)}. \quad (4.157)$$

On considère ensuite $Q_{27}(\varepsilon)$ et on écrit

$$Q_{27}(\varepsilon) \leq \int_0^T \int_0^\varepsilon \int_{\check{X}^\tau(t,s)}^{X(t)} |\partial_{x,a}\rho(y,t)| dy ds dt.$$

En appliquant l'inégalité de Cauchy-Schwarz on obtient

$$Q_{27}(\varepsilon) \leq \int_0^T \int_0^\varepsilon |\check{X}^\tau(t,s) - X(t)|^{1/2} \|\partial_{x,a}\rho(t)\|_{L^2(\mathbb{R}_+)} ds dt.$$

On a alors

$$Q_{27}(\varepsilon) \leq \int_0^T \|\partial_{x,a}\rho(t)\|_{L^2(\mathbb{R}_+)} \left(\int_0^\varepsilon |X^\tau(t) - X(t) - s|^{1/2} ds \right) dt.$$

Si on applique une nouvelle fois l'inégalité de Cauchy-Schwarz on en déduit

$$\begin{aligned} Q_{27}(\varepsilon) &\leq \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}} \int_0^T \|\partial_{x,a}\rho(t)\|_{L^2(\mathbb{R}_+)} \left(\int_0^\varepsilon |X^\tau(t) - X(t) - s| ds \right)^{1/2} dt \\ &\leq \frac{1}{2\sqrt{\varepsilon}} \int_0^T \|\partial_{x,a}\rho(t)\|_{L^2(\mathbb{R}_+)} (\|X^\tau - X\|_\infty \varepsilon + \varepsilon^2)^{1/2} dt, \end{aligned}$$

où on utilise l'inégalité $|\check{X}^\tau(t,s) - X(t)| \leq (X^\tau(t) - X(t))/2$. Une dernière application de l'inégalité de Cauchy-Schwarz nous donne

$$Q_{27}(\varepsilon) \leq \frac{\sqrt{T}}{2} \|\partial_{x,a}\rho\|_{L^2((0,T) \times \mathbb{R}_+)} (\|X^\tau - X\|_\infty + \varepsilon)^{1/2}. \quad (4.158)$$

On en déduit un contrôle similaire du terme $Q_{27}(\varepsilon)$. En choisissant $\varepsilon = \|\rho^\tau - \rho\|_{L^2((0,T) \times \mathbb{R}_+)}^{2/3}$ on déduit de (4.157) et (4.158) que

$$\int_0^T |\rho^\tau(X^\tau(t), t) - \rho(X(t), t)| dt \rightarrow 0 \quad \text{quand } \tau \rightarrow 0.$$

Ce qui conclut la preuve de (4.155).

De façon similaire, pour établir (4.156) on considère pour $\varepsilon > 0$ la décomposition suivante

$$\int_0^T |\rho^\tau(0, t) - \rho(0, t)| dt \leq Q_{28}(\varepsilon) + Q_{29}(\varepsilon) + Q_{30}(\varepsilon),$$

avec

$$\begin{aligned} Q_{28}(\varepsilon) &= \int_0^T \int_0^\varepsilon |\rho^\tau(0, t) - \rho^\tau(x, t)| ds dt, \\ Q_{29}(\varepsilon) &= \int_0^T \int_0^\varepsilon |\rho^\tau(x, t) - \rho(x, t)| ds dt, \\ Q_{30}(\varepsilon) &= \int_0^T \int_0^\varepsilon |\rho(x, t) - \rho(0, t)| ds dt. \end{aligned}$$

On commence par remarquer, par régularité de ρ , que

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} Q_{30}(\varepsilon) = 0.$$

Par ailleurs, des manipulations similaires à ce qui précède permettent d'établir les inégalités suivantes

$$Q_{28}(\varepsilon) \leq \frac{\varepsilon \sqrt{T}}{\sqrt{2}} \|\partial_{x,a} \rho^\tau\|_{L^2(0,T) \times (0,+\infty)},$$

et

$$Q_{29}(\varepsilon) \leq \frac{\sqrt{T}}{\sqrt{\varepsilon}} \|\rho^\tau - \rho\|_{L^2(0,T) \times (0,+\infty)}.$$

Il suffit alors de conclure comme précédemment pour obtenir le résultat de convergence (4.156). Ce qui conclut la preuve de la Proposition 4.5.3. $\square$

Comme conséquence immédiate de la Proposition 4.5.3 ainsi que de la Proposition 4.4.5 et du théorème de convergence dominée on en déduit le résultat suivant.

Corollaire 4.5.1. *Sous les hypothèses du Théorème 4.2.4, les fonctions limites obtenues dans la Proposition 4.5.2 vérifient pour tout $1 \leq p < +\infty$,*

$$\left(\int_0^T |\log \rho^\tau(X^\tau(t), t) - \log \rho(X(t), t)|^p dt \right)^{1/p} \rightarrow 0 \quad \text{quand } \tau \rightarrow 0.$$

On prouve à présent un résultat sur la trace en 0 de la fonction limite ρ obtenue dans la Proposition 4.5.2.

Proposition 4.5.4. *Sous les hypothèses du Théorème 4.2.4, la fonction limite ρ obtenue à la Proposition 4.5.2 vérifie pour presque tout $t \in (0, T)$*

$$\rho(0, t) \in [\rho_-, \rho_+].$$

Preuve de la Proposition 4.5.4. Le fait que pour presque tout $t \in (0, T)$ la fonction ρ vérifie $\rho(0, t) \geq \rho_-$ est une conséquence immédiate de la Proposition 4.4.5 et de la Proposition 4.5.3.

On rappelle que d'après la Proposition 4.4.3 on a si $R^{n+1} > R^n$ pour un certain $0 \leq n \leq N_T - 1$,

$$\rho^{n+1}(0) = \rho_+ \exp\left(\frac{c \ell_2^{n+1}}{\sqrt{\tau}}\right),$$

et dans les autres cas d'après la Proposition 4.4.2 et la Proposition 4.4.4 on a $\rho^{n+1}(0) \leq \rho_+$ si $R^{n+1} < R^n$ ou $R^{n+1} = R^n$. De plus, d'après la Proposition 4.4.5 sur les bornes L^∞ on a $\rho^n(x) \leq \bar{\rho}$ et $\rho^n(x) \geq \rho_-$ pour tout $0 \leq n \leq N_T$ et tout $x \in [0, X^n]$. En particulier en $x = 0$, on a si $R^{n+1} > R^n$,

$$c \ell_2^{n+1} \leq \left(\ln \frac{\bar{\rho}}{\rho_+}\right) \sqrt{\tau} = \kappa \sqrt{\tau}. \quad (4.159)$$

On veut à présent montrer que

$$\int_0^T [\rho^\tau(0, t) - \rho_+]_+ dt \rightarrow 0 \quad \text{quand } \tau \rightarrow 0, \quad (4.160)$$

où $[x]_+ = \max(x, 0)$. Pour $0 \leq n \leq N_T - 1$ tel que $R^{n+1} > R^n$, on a

$$\rho_- \ell_2^{n+1} c^2 \tau \leq \int_0^{\ell_2^{n+1}} (x + c\sqrt{\tau})^2 \rho^n(x) dx \leq \mathbf{d}_2^2(\mu_{n+1}, \mu_n).$$

En posant $\ell_2^{n+1} = 0$ quand $R^{n+1} \leq R^n$, on a par sommation et en utilisant le Lemme 4.5.1

$$c^2 \rho_- \sum_{n=0}^{N_T-1} \ell_2^{n+1} \leq \sum_{n=0}^{N_T-1} \frac{\mathbf{d}_2^2(\mu_{n+1}, \mu_n)}{\tau} \leq C$$

D'où, en particulier,

$$\sum_{n=0}^{N_T-1} \tau \frac{c \ell_2^{n+1}}{\sqrt{\tau}} = O(\sqrt{\tau}). \quad (4.161)$$

On définit la fonction k^τ par $k^\tau(t) = c \ell_2^{n+1} / \sqrt{\tau}$ pour $\tau \in (n\tau, (n+1)\tau]$ et $k^\tau(0) = 0$. On déduit de (4.161) que

$$\int_0^T k^\tau(t) dt \rightarrow 0 \quad \text{quand } \tau \rightarrow 0. \quad (4.162)$$

De même (4.159) s'écrit pour $t \in (0, T)$

$$k^\tau(t) \leq \kappa. \quad (4.163)$$

On écrit maintenant,

$$\int [\rho^\tau(0, t) - \rho_+]_+ dt = \rho^+ \int_0^T (e^{k^\tau(t)} - 1) dt.$$

Par (4.159), on a pour tout $t \in (0, T)$

$$e^{k^\tau(t)} - 1 \leq \kappa k^\tau(t),$$

et donc par (4.162), on a bien (4.160). Ce qui conclut la preuve de la Proposition 4.5.4. $\square$

On est à présent en mesure de prouver le résultat principal de ce travail.

Preuve du Théorème 4.2.4. l'égalité (4.7) se déduit directement de (4.144), de la Proposition 4.5.3 ainsi que du Corollaire 4.5.1. De plus, la propriété (4.46) est une conséquence de la Proposition 4.5.4.

L'égalité (4.6) se déduit de l'inégalité (4.142), du contrôle sur la somme des termes de reste (4.143) et des résultats de convergences obtenues dans la Proposition 4.5.2. Le seul point délicat pour obtenir (4.6) est de montrer le résultat de convergence (4.45) qui énonce que pour tout $\psi \in \mathcal{D}([0, +\infty) \times [0, T])$ on ait

$$\int_0^T \int_0^{X^\tau(t)} \partial_{x,a} \rho^\tau(x, t) \partial_x \psi(x, t) dx dt \rightarrow \int_0^T \int_0^{X(t)} \partial_{x,a} \rho(x, t) \partial_x \psi(x, t) dx dt.$$

Pour cela, on écrit

$$\begin{aligned} \int_0^T \int_0^{X^\tau(t)} \partial_{x,a} \rho^\tau(x, t) \partial_x \psi(x, t) dx dt &= - \int_0^T \int_0^{+\infty} \rho^\tau(x, t) \partial_x^2 \psi(x, t) dx dt \\ &\quad + \int_0^T (\rho^\tau(X^\tau(t), t) - \bar{\rho}) \partial_x \psi(X^\tau(t), t) dt \\ &\quad - \int_0^T \rho^\tau(0, t) \partial_x \psi(0, t) dt. \end{aligned}$$

Il suffit alors d'utiliser la convergence forte de ρ^τ vers ρ dans $L^p(0, T; L_{\text{loc}}^p(\mathbb{R}_+))$ ainsi que le résultat sur la convergence forte des traces obtenu à la Proposition 4.5.3 afin de déduire (4.45). Ce qui conclut la preuve du Théorème 4.2.4. $\square$

4.6 Discussion autour de l'unicité

Concernant la possibilité d'établir l'unicité d'une solution à (4.1)-(4.2), notre espoir est que le flot de gradient basé sur une métrique de type Wasserstein dont on considère la discrétisation ici soit contractant. Formellement, comme dans [61] nous voulons montrer que l'énergie

$$\mathbf{E}(X, \mu) = \int_0^X \rho \ln \frac{\rho}{\bar{\rho}} - \alpha X + \beta R,$$

est géodésiquement convexe pour la métrique

$$\mathbf{d}^2((X_0, \mu_0), (X_1, \mu_1)) = \inf \int_0^1 \left\{ \int_{\mathbb{R}} |v(x, s)|^2 d\mu(x, s) + |\dot{X}(s)|^2 \right\} ds, \quad (4.164)$$

où l'infimum est pris sur les $X \in H^1((0, 1), (0, +\infty))$ tels que $X(0) = X_0$, $X(1) = X_1$ et où v est un champ de vecteurs sur $\mathbb{R} \times (0, 1)$ tel qu'il existe une mesure $\mu(s)$ sur $\mathbb{R}$ pour $0 \leq s \leq 1$ avec $\mu(0) = \mu_0$, $\mu(1) = \mu_1$, $\mu(s) - \bar{\rho}\mathcal{L} \llcorner (X(s), +\infty)$ supportée dans $(-\infty, X(s)]$ et

$$\partial_t \mu + \partial_x(v \mu) = 0 \quad \text{sur } (0, 1) \times \mathbb{R}.$$

La définition (4.164) correspond à une réécriture de la distance de Wasserstein à l'aide d'un problème de minimisation d'une fonctionnelle de Benamou-Brenier, voir [67, Théorème 5.28]. Cependant, ce développement est à l'état d'ébauche et n'apparaît pas dans ce manuscrit.

Bibliographie

- [1] M. Agueh. Existence of solutions to degenerate parabolic equations via the Monge-Kantorovich theory. *Adv. Differential Equ.*, 10(3) :309–360, 2005.
- [2] T. Aiki and A. Muntean. Existence and uniqueness of solutions to a mathematical model predicting service life of concrete structure. *Adv. Math. Sci. Appl.*, 19 :109–129, 2009.
- [3] T. Aiki and A. Muntean. Large time behavior of solutions to a moving-interface problem modeling concrete carbonation. *Comm. Pure Appl. Anal.*, 9 :1117–1129, 2010.
- [4] T. Aiki and A. Muntean. A free-boundary problem for concrete carbonation : Front nucleation and rigorous justification of the $\sqrt{T}$ -law of propagation. *Interfaces and Free Boundaries*, 15 :167–180, 2013.
- [5] T. Aiki and A. Muntean. Large-time asymptotics of moving-reaction interfaces involving nonlinear Henry’s law and time-dependent Dirichlet data. *Nonlinear Anal.*, 93 :3–14, 2013.
- [6] A. Ait Hammou Oulhaj. Numerical analysis of a finite volume scheme for a seawater intrusion model with cross-diffusion in an unconfined aquifer. *Numer. Meth. Partial Diff. Eqs.*, 34 :857–880, 2018.
- [7] L. Ambrosio, N. Gigli, and G. Savaré. *Gradient flows in metric spaces and in the space of probability measures*. Lectures in Mathematics ETH Zürich. Birkhäuser Verlag, Basel, second edition, 2008.
- [8] V. Anaya, M. Bendahmane, M. Langlais, and M. Sepúlveda. A convergent finite volume method for a model of indirectly transmitted diseases with nonlocal cross-diffusion. *Comput. Math. Appl.*, 70 :132–157, 2015.
- [9] V. Anaya, M. Bendahmane, and M. Sepúlveda. Numerical analysis for a three interacting species model with nonlocal and cross diffusion. *ESAIM : Math. Model. Numer. Anal.*, 49 :171–192, 2015.
- [10] B. Andreianov, M. Bendahmane, and R.R. Baier. finite volume method for a cross-diffusion model in population dynamics. *Math. Models Meth. Appl. Sci.*, 21 :307–344, 2011.
- [11] B. Andreianov, C. Cancès, and A. Moussa. A nonlinear time compactness result and applications to discretization of degenerate parabolic-elliptic pdes. *J. Funct. Anal.*, 273 :3633–3670, 2017.

Bibliographie

- [12] C. Bataillon, F. Bouchon, C. Chainais-Hillairet, C. Desgranges, E. Hoarau, F. Martin, M. Tupin, and J. Talandier. Corrosion modelling of iron based alloy in nuclear waste repository. *Electrochim. Acta*, 55(15) :4451–4467, 2010.
- [13] C. Bataillon, F. Bouchon, C. Chainais-Hillairet, J. Fuhrmann, E. Hoarau, and R. Touzani. Numerical methods for the simulation of a corrosion model with a moving oxide layer. *J. Comput. Phys.*, 231(18) :6213–6231, 2012.
- [14] M. Bessemoulin-Chatard. A finite volume scheme for convection-diffusion equations with nonlinear diffusion derived from the Schafetter-Gummel scheme. *Numer. Math.*, 121(4) :637–670, 2012.
- [15] M. Bessemoulin-Chatard, C. Chainais-Hillairet, and F. Filbet. On discrete functional inequalities for some finite volume schemes. *IMA J. Numer. Anal.*, 35 :1125–1149, 2015.
- [16] M. Bessemoulin-Chatard, C. Chainais-Hillairet, and M.-H. Vignal. Study of a finite volume scheme for the drift-diffusion system. asymptotic behavior in the quasi-neutral limit. *SIAM J. Numer. Anal.*, 52 :1666–1691, 2014.
- [17] K. Brenner, C. Cancès, and D. Hilhorst. Finite volume approximation for an immiscible two-phase flow in porous media with discontinuous capillary pressure. *Comput. Geosci.*, 17(3) :573–597, 2013.
- [18] M. Burger, M. Di Francesco, J.-F. Pietschmann, and B. Schlake. Nonlinear cross-diffusion with size exclusion. *SIAM J. Math. Anal.*, 42 :2842–2871, 2010.
- [19] C. Cancès, C. Chainais-Hillairet, A. Gerstenmayer, and A. Jüngel. Convergence of a finite-volume scheme for a degenerate cross-diffusion model for ion transport. *Numer. Meth. Partial Diff. Eqs.*, 35 :545–575, 2019.
- [20] B Capdeville and J.L. Rols. Introduction to biofilms in water and wastewater treatment. *Biofilms-Science and Technology*, pages 13–20, 01 1992.
- [21] C. Chainais-Hillairet and C. Bataillon. Mathematical and numerical study of a corrosion model. *Numer. Math.*, 110 :689–716, 2008.
- [22] C. Chainais-Hillairet, P.-L. Colin, and I. Lacroix-Violet. Convergence of a finite volume scheme for a corrosion model. *International Journal on Finite Volumes*, 12, 2015.
- [23] C. Chainais-Hillairet and J. Droniou. Finite volume schemes for non-coercive elliptic problems with neumann boundary conditions. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 31(1) :61–85, 2011.
- [24] C. Chainais-Hillairet and T.O. Gallouët. Study of a pseudo-stationary state for a corrosion model : Existence and numerical approximation. *Nonlinear Anal. Real. World Appl.*, 31 :38–56, 2015.
- [25] C. Chainais-Hillairet and I. Lacroix-Violet. The existence of solutions to a corrosion model. *Appl. Math. Lett.*, 25, 2012.
- [26] C. Chainais-Hillairet, J.-G. Liu, and Y.-J. Peng. Finite volume scheme for multi-dimensional drift-diffusion equations and convergence analysis. *ESAIM : Math. Model. Numer. Anal.*, 37 :319–338, 2003.

- [27] C. Chainais-Hillairet, B. Merlet, and A. Zurek. Design and analysis of a finite volume scheme for a concrete carbonation model. In *Finite Volumes for Complex Applications VIII - Methods and Theoretical Aspects*, volume 199, pages 285–292. Springer Proceedings in Mathematics and Statistics, 2017.
- [28] C. Chainais-Hillairet, B. Merlet, and A. Zurek. Convergence of a finite volume scheme for a parabolic system with a free boundary modeling concrete carbonation. *ESAIM : Math. Model. Numer. Anal.*, 52(2) :457–480, 2018.
- [29] L. Chen and A. Jüngel. Analysis of a multidimensional parabolic population model with strong cross-diffusion. *SIAM J. Math. Analysis*, 36 :301–322, 2004.
- [30] L. Chen and A. Jüngel. Analysis of a parabolic cross-diffusion population model without self-diffusion. *J. Differ. Equ.*, 224 :39–59, 2006.
- [31] X. Chen and A. Jüngel. Analysis of an incompressible Navier–Stokes–Maxwell–Stefan system. *Commun. Math. Phys.*, 340 :471–497, 2015.
- [32] E. Daus, P. Milišić, and N. Zamponi. Analysis of a degenerate and singular volume-filling cross-diffusion system modeling biofilm growth. *Submitted for publication*, 2018.
- [33] K. Deimling. *Nonlinear Functionnal Analysis*. Springer, Berlin, 1985.
- [34] H. Eberl, D. Parker, and M. van Loosdrecht. A new deterministic spatio-temporal continuum model for biofilm development. *J. Theor. Medicine*, 3 :161–175, 2001.
- [35] M. Efendiev, S. Zelik, and H. Eberl. Existence and longtime behavior of a biofilm model. *Commun. Pure and Appl. Anal.*, 8 :509–531, 2008.
- [36] L.C. Evans and R.F. Gariepy. *Measure theory and fine properties of functions*. Textbooks in Mathematics. CRC Press, Boca Raton, FL, revised edition, 2015.
- [37] R. Eymard, T. Gallouët, and R. Herbin. *Finite volume methods*, pages 713–1020. In Handbook of numerical analysis, Vol. VII. North-Holland, 2000.
- [38] A. Figalli and N. Gigli. A new transportation distance between non-negative measures, with applications to gradients flows with dirichlet boundary conditions. *J. Math. Pures Appl.*, 94 :107–130, 2010.
- [39] M. Fila and P. Souplet. Existence of global solutions with slow decay and unbounded free boundary for a superlinear Stefan problem. *Interface Free Bound.*, 3 :337–344, 2001.
- [40] T. Gallouët and J.-C. Latché. Compactness of discrete approximate solutions to parabolic PDEs–application to a turbulence model. *Commun. Pure Appl. Anal.*, 11(6) :2371–2391, 2012.
- [41] H. Ghidouche, P. Souplet, and D.A. Tarzia. Decay of global solutions, stability and blow-up for a reaction-diffusion problem with free boundary. *Proc. Amer. Math. Soc.*, 129 :781–792, 2001.
- [42] D. Hilhorst, F. Issard-Roch, and J.M. Roquejoffre. Large time behavior of the solutions to a one-dimensional Stefan problem with a kinetic condition at the free boundary. *Euro. Jnl of Applied Mathematics*, 15 :297–313, 2004.

Bibliographie

- [43] A.M. Il'in. A difference scheme for a differential equation with a small parameter multiplying the highest derivative. *Mat. Zametki*, 6 :237–248, 1969.
- [44] R. Jordan, D. Kinderlehrer, and F. Otto. The variational formulation of the Fokker-Planck equation. *SIAM J. Math. Anal.*, 29(1) :1–17, 1998.
- [45] A. Jüngel. The boundedness-by-entropy method for cross-diffusion systems. *Nonlinearity*, 28 :1963–2001, 2015.
- [46] L. Kantorovich. On the transfer of masses. *Dokl. Acad. Nauk. USSR*, 37 :7–8, 1942.
- [47] D. Kinderlehrer, L. Monsaingeon, and X. Xu. A wasserstein gradient flow approach to Poisson-Nernst-Planck equations. *ESAIM : COCV*, 23 :137–164, 2017.
- [48] R. D. Lazarov, I. D. Mishev, and P. S. Vassilevski. Finite volume methods for convection-diffusion problems. *SIAM J. Numer. Anal.*, 33(1) :31–55, 1996.
- [49] B. Maury, A. Roudneff-Chupin, and F. Santambrogio. A macroscopic crowd motion model of gradient flow type. *Math. Mod. Meth. Appl. S.*, 20 :1787–1821, 2010.
- [50] S.A. Meier, M. Peter, A. Muntean, and M. Böhm. Dynamics of the internal reaction layer arising during carbonation of concrete. *Chem. Eng. Sci.*, 62 :1125–1137, 2007.
- [51] G. Monge. Mémoire sur la théorie des déblais et des remblais. *Histoire de l'Académie Royale des Sciences de Paris, avec les Mémoires de Mathématiques et de Physique pour la même année*, pages 666–704, 1781.
- [52] D. Monroe. Looking for chinks in the armor of bacterial biofilms. *PloS Biol*, 5 :e307, 2007.
- [53] A. Muntean. Error bounds on semi-discrete finite element approximations of a moving-boundary system arising in concrete corrosion. *Int. J. Numer. Anal. Mod.*, 5(3) :353–372, 2008.
- [54] A. Muntean and M. Böhm. On a moving reaction layer model for the prediction of the service life of concrete structures. In G. Yagawa, M. Kikuchi, G.M. Atanasiu, and C. Bratianu, editors, *Proceedings of the International Conference on Performance based Engineering for 21st Century*, pages 72–77. University of Iasi, Romania, 2004.
- [55] A. Muntean and M. Böhm. On a prediction model for the service life of concrete structures based on moving interfaces. In F. Stangenberg, O.T. Bruhns, D. Hartmann, and G. Meschke, editors, *Proceedings of the Second International Conference on Lifetime-Oriented Design Concepts*, pages 209–218. Ruhr University Bochum, Germany, 2004.
- [56] A. Muntean and M. Böhm. A moving-boundary problem for concrete carbonation : global existence and uniqueness of solutions. *J. Math. Anal. Appl.*, 350 :234–251, 2009.
- [57] A. Muntean and M. Neuss-Radu. A multiscale Galerkin approach for a class of nonlinear coupled reaction-diffusion systems in complex media. *J. Math. Anal. Appl.*, 371(2) :705–718, 2010.
- [58] H. Murakawa. A linear finite volume method for nonlinear cross-diffusion systems. *Numer. Math.*, 136 :1–26, 2017.

- [59] C Nicoletta, M. van Loosdrecht, and J. Heijnen. Wastewater treatment with particulate biofilm reactors. *J. Biotech.*, 80 :1–33, 2000.
- [60] F. Otto. Dynamics of labyrinthine pattern formation in magnetic fluids : a mean-field theory. *Arch. Ration. Mech. Anal.*, 141(1) :63–103, 1998.
- [61] F. Otto. The geometry of dissipative evolution equations : the porous medium equation. *Comm. Partial Differential Equations*, 26(1-2) :101–174, 2001.
- [62] J.W. Portegies and M.A. Peletier. Well-posedness of a parabolic moving-boundary problem in the setting of wasserstein gradient flows. *Interface Free Bound.*, 12(2) :121–150, 2010.
- [63] E. Possan, W. Thomaz, G. Aleandri, E. Felix, and A. Santos. Co2 uptake potential due to concrete carbonation : A case study. *Case Studies in Construction Materials*, 6 :147–161, 2017.
- [64] F. Radu, A. Muntean, N. Suciu, O. Kolditz, and I.S. Pop. A mixed finite element discretization scheme for a concrete carbonation model with concentration-dependent porosity. *J. Comput. Appl. Math.*, 246 :74–85, 2013.
- [65] K. Rahman and H. Eberl. Numerical treatment of a cross-diffusion model of biofilm exposure to antimicrobials. In R. Wyrzykowski, J. Dongarra, K. Karczewski, and J. Waśniewski, editors, *Parallel Processing and Applied Mathematics*, pages 134–144. Lect. Notes Comput. Sci. 8384, Springer, Heidelberg, 2014.
- [66] K. Rahman, R. Sudarsan, and H. Eberl. A mixed-culture biofilm model with cross-diffusion. *Bull. Math. Biol.*, 77 :2086–2124, 2015.
- [67] F. Santambrogio. *Optimal Transport for Applied Mathematicians : Calculus of Variations, PDEs, and Modeling*. Progress in Nonlinear Differential Equations and Their Applications 87. Birkhäuser Verlag, Basel, 2015.
- [68] D.L. Scharfetter and H.K. Gummel. Large signal analysis of a silicon read diode oscillator. *IEEE Trans. Electron Dev.*, 16 :64–77, 1969.
- [69] N. Shigesada, K. Kawasaki, and E. Teramoto. Spatial segregation of interacting species. *J. Theor. Biol.*, 79 :83–99, 1979.
- [70] J. Simon. Compact sets in the space $L^p(0, T; B)$. *Ann. Mat. Pura Appl. (4)*, 146 :65–96, 1987.
- [71] S. Szego, P. Cinnella, and A. Cunningham. Numerical simulation of biofilm processes in closed circuits. *J. Comput. Phys.*, 108 :246–263, 1993.
- [72] D.A. Tarzia. *Explicit and Approximated Solutions for Heat and Mass Transfer Problems with a Moving Interface*, *Advanced Topics in Mass Transfer*, chapter 20, pages 439–484. M. El-Amin (Ed.) InTech Open Access Publisher, 2011.
- [73] C. Villani. *Topics in Optimal Transportation*. Graduate Studies in Mathematics. AMS, 2003.
- [74] C. Villani. *Optimal Transport : Old and New*. Springer Verlag, 2008.

Bibliographie

- [75] T. Yamamoto and S. Ueda. Numerical simulation of biofilm growth in flow channels using a cellular automaton approach coupled with a macro flow computation. *Biorheology*, 50 :203–16, 2013.
- [76] Q. Zhang. Mathematical modeling and numerical study of carbonation in porous concrete materials. *Appl. Math. Comput.*, 281 :16–27, 2016.
- [77] A. Zurek. Numerical approximation of a concrete carbonation model : Study of the $\sqrt{t}$ -law of propagation. *Numer. Meth. Partial Diff. Eqs.*, pages 1–20, 2019.

Résumé

Dans cette thèse on s'intéresse à l'étude mathématique et numérique de modèles à frontières libres intervenant en physique et en biologie. Dans une première partie on considère un modèle de carbonatation des bétons armés. Ce modèle unidimensionnel est composé d'un système d'équations paraboliques de type réaction-diffusion défini sur un domaine où une interface est fixe et l'autre mobile. Cette interface mobile est solution d'une équation différentielle ordinaire et évolue au cours du temps suivant une loi en $\sqrt{t}$. Dans un premier temps, on définit pour ce modèle un schéma numérique de type volumes finis implicite/explicite en temps et on prouve la convergence de ce schéma. Dans un second temps, on construit un schéma volumes finis complètement implicite permettant de démontrer la propagation en $\sqrt{t}$ de l'interface mobile au niveau discret. On s'intéresse ensuite à un système de diffusion croisée modélisant la croissance de biofilms. On introduit un schéma numérique de type volumes finis préservant la structure de flot de gradient du modèle. On prouve alors l'existence de solutions et la convergence du schéma. Enfin, on établit via des outils du transport optimal et du calcul des variations un résultat d'existence pour un modèle jouet de corrosion à frontière libre. Nous essayons par l'introduction de ce problème de mieux comprendre la structure du modèle DPCM (Diffusion-Poisson-Coupled-Model), également défini sur domaine mobile, décrivant la corrosion d'un baril métallique placé dans un milieu argileux (conditions de stockage des déchets nucléaires) et pour lequel il n'existe aucun résultat d'existence.

Mots-clés: Equations aux dérivées partielles, analyse numérique, analyse, modélisation.

Abstract

This thesis deals with the numerical and mathematical study of models with free boundaries coming from physics and biology. In the first part, we consider a model which describes the carbonation phenomena in reinforced concrete. The model involves a system of 1D-parabolic equation of reaction diffusion type defined on a domain with a moving boundary. The motion of this interface is governed by an ordinary differential equation and it increases asymptotically as $\sqrt{t}$ for large times. We first introduce a Finite Volume numerical scheme for the model with implicit/explicit time discretization and we prove its convergence. Next, we build a fully implicit scheme for which we are able to establish the behavior in $\sqrt{t}$ of the interface in this discrete setting. In a second part, we study a cross-diffusion system modeling the expansion of some biofilms. We introduce a numerical scheme of Finite Volumes type which preserves the gradient flow structure of the model. We establish the existence of solutions to the scheme and its convergence towards a solution to the original model. Eventually, we consider a toy model derived from a more complete model called DPCM (*Diffusion-Poisson-Coupled-Model*). The later

describes the corrosion of (nuclear waste) containers made of iron and stored in clay soil. Again the model involves a free boundary whose position is part of the unknowns. Using tools from Optimal Transport Theory and Calculus of Variations, we establish the existence of a solution to the model. This is a first step towards the study of DPCM for which no such result is available.

Keywords: Partial differential equations, numerical analysis, analysis, modelisation.