Saclay, le 28 juin 2004

Rapport sur le mémoire de Thèse de Denis GREBENKOV

TRANSPORT LAPLACIEN AUX INTERFACES IRRÉGULIÈRES : ÉTUDE THÉORIQUE, NUMÉRIQUE et EXPÉRIMENTALE

J'ai connu M. Denis GREBENKOV à l'occasion de son stage d'option, en fin d'études à l'École Polytechnique. Il a effectué celui-ci au Laboratoire de Physique de la Matière Condensée, au sein de l'équipe animée par Bernard Sapoval et Marcel Filoche, dans le domaine de la physique des fractales et de leurs applications. B. Sapoval fut alors grandement impressionné par le sérieux et les compétences de Denis Grebenkov. Depuis, Denis Grebenkov a poursuivi en parallèle deux thèse de doctorat, l'une à Saint Pétersbourg, avec Prof. A.P. Grinin, l'autre à l'École Polytechnique sous la supervision de B. Sapoval et M. Filoche. Il a soutenu la première en décembre dernier, et il soutient maintenant la seconde à l'École Polytechnique. Les sujets en sont très différents : "*Étude de la relaxation d'une solution micellaire modèle*" en Russie, et "*Transport laplacien aux interfaces irrégulières : étude théorique, numérique et expérimentale*" en France. Le travail effectué avec le Prof. Grinin portait sur la formation des micelles, et sur les équations différentielles qui en régissent l'agrégation. La diversité des sujets de ces deux thèses laisse entrevoir la somme de travail tout-à-fait considérable qu'a dû fournir Denis Grebenkov depuis ses inscriptions en thèses en 2001.

La thèse considérée ici s'occupe de diffusion stationnaire à travers des membranes semi-perméables, ou de transport électrique à travers une électrode dans un électrolyte, voire encore de catalyse hétérogène. Le facteur commun en est l'existence d'une équation de Laplace, associée à des conditions aux limites variées sur une interface irrégulière ou fractale.

Dans une première partie, les phénomènes de transport laplaciens sont introduits, ainsi que les différentes conditions aux limites qui caractérisent les modèles d'interfaces. La caractéristique principale en est une condition de type mixte (Dirichlet-Neumann) sur l'interface irrégulière, l'autre "électrode" régulière supportant en général une condition de type Dirichlet. Le comportement dit "anormal" de l'impédance associée (dit de CPA pour "constant phrase angle"), en loi de puissance, est introduit. Les différentes approches historiques (et approximatives) qui ont tenté de prédire ce comportement anormal sont passées en revue de manière approfondie et bien organisée. Une approximation, simple et naturelle, mais assez mal contrôlée, dite "de l'arpenteur", est décrite, car elle sera analysée plus en détail dans la suite. Une attention toute particulière est portée à la solution dite "de double couche", donnée par Halsey et Leibig pendant les années 87-92.

Le deuxième chapitre porte sur l'"opérateur d'auto-transport brownien Q", sous-jacent à la représentation de la diffusion près d'interfaces. Il s'agit, dans une version *discrétisée du problème*, de la matrice de transfert par marche aléatoire entre deux sites distincts de l'interface (dite "de travail"). D. Grebenkov s'attache à analyser en détail les valeurs propres, les vecteurs propres et les densités d'états associées à cette matrice, dont les projections sur des vecteurs identité reconstituent les impédances. Cette étude est soit analytique pour des interfaces euclidiennes simples, soit numérique pour des interfaces (pré-)fractales comme les courbes de Koch de génération finie. La méthode des éléments frontières utilisée requiert l'introduction de domaines à support compact et de conditions aux limites périodiques. Les subtilités liées à la nécessité de définir proprement une frontière sans points voisins dédoublés sont finement analysées et résolues. Une structure hiérarchique approximative est découverte à l'intérieur de la matrice Q, qui reflète la structure hiérarchique des fractales régulières auto-similaires.

Le chapitre trois est consacré à l'étude du passage au continu lorsque la maille du réseau tend vers zéro, et que les marches aléatoires se rapprochent du mouvement brownien. L'opérateur Q tend alors vers l'identité et D. Grebenkov montre en détail comment extraire de celui-ci une autre opérateur fini $\mathcal{M}$, dit "de Dirichlet-Neumann", qui émerge dans la limite continue, et dont les propriétés seront analysées dans le chapitre quatre. Pour ce faire, il introduit (comme Halsey et Leibig auparavant) un mouvement brownien avec sauts, ainsi que la statistique du nombre de ces sauts, entre points sur l'interface, qui représentent les réflexions multiples avant adsorption sur une interface semi-perméable ou électrode partiellement "bloquante". Il lui est associé une mesure harmonique dite "étalée" par les réflexions partielles du mouvement brownien de diffusion. La région caractéristique d'adsorption, paramètre important, sur laquelle la moitié des marcheurs est adsorbée, est définie.

L'analyse mathématique plus fine de l'opérateur auto-adjoint $\mathcal{M}$ est faite en partie quatre, tandis qu'est précisée son utilisation pour la détermination de l'impédance : celle-ci s'obtient à partir de la série discrète des valeurs propres μ_α de $\mathcal{M}$, ainsi qu'à partir de ses composantes spectrales F_α (qui sont les carrés des coefficients de la densité de mesure harmonique dans la base des vecteurs propres de $\mathcal{M}$). L'interprétation probabiliste de l'opérateur de "Dirichlet-Neumann" $\mathcal{M}$ permet à D. Grebenkov de redériver le résultat de Halsey et Leibig pour le comportement anormal de l'impédance de manière plus satisfaisante que dans l'approche originale, tout en justifiant sa validité au regard d'approches plus frustes comme les approximations de Le Méhauté et Crepy, ou de l'arpenteur. Il s'agit là d'un travail à la fois nécessaire et utile.

Une fois le passage au continu justifié, la cinquième partie constitue "le plat de résistance" de cette thèse, où sont exposés en grand détail les résultats numériques obtenus en pratique pour des interfaces irrégulières en deux ou trois dimensions, constituées de courbes de Koch self-similaires de génération finie, ou parfois même aléatoires. D. Grebenkov s'attache à effectuer une analyse exhaustive des propriétés de regroupement du spectre de valeurs propres de l'opérateur Q, ainsi qu'à préciser l'importance relative des diverses composantes spectrales. Il montre qu'une structure hiérarchique approximative existe, où des pics secondaires se regroupent autour de chaque mode principal, et que peu de vecteurs propres contribuent significativement à l'impédance. Les positions des modes propres μ_α correspondent grosso modo aux échelles caractéristiques de la frontière. Un modèle hiérarchique "analytique" approximatif de l'impédance spectroscopique est déduit de cette observation. Il fournit une bonne approximation des données numériques, mais il a le désavantage de ne pas reproduire le bon comportement de CPA attendu. Il a l'avantage en revanche de montrer que l'établissement du régime fractal avec déphasage constant ne peut être obtenu pour les premières générations des courbes auto-similaires.

La sixième partie montre des résultats assez spectaculaires sur le spectre multifractal $\tau(q)$ de la mesure harmonique pour des fractales comme la courbe de Koch quadrangulaire ou la surface de Koch cubique. Grâce à une méthode astucieuse de marches aléatoires rapides, et à une méthode de développement logarithmique des exposants multifractaux locaux, la précision obtenue semble très bonne et permettre l'accès aux résultats asymptotiques pour des générations élevées. Le théorème de Makarov est en particulier vérifié avec une grande précision. Un cas également très intéressant est celui du spectre multifractal de la mesure harmonique étalée, en lien étroit avec l'impédance spectroscopique de l'électrode de travail. Une courbe "universelle" $\tau(q, \xi)$, fonction d'un seul paramètre supplémentaire d'étalement ξ, permet d'interpoler entre le spectre harmonique pur le spectre de Hausdorff pur. Denis Grebenkov montre enfin que le régime fractal intermédiaire de la mesure harmonique étalée correspond au comportement anormal de l'impédance, et il montre que la valeur théorique correcte de l'exposant de CPA ne peut être obtenue que pour des générations élevées, expliquant en cela les résultats contradictoires de la littérature.

La septième partie rapporte les résultats d'une étude expérimentale intéressante sur des électrodes irrégulières de Koch. Il semble qu'il faille insérer l'impédance surfacique d'une électrode plate avec micro-rugosités dans le formalisme hiérarchique général pour reproduire correctement les résultats expérimentaux. Cela suggère, semble-t-il, de nouvelles études pouvant justifier cette remarque intéressante. Une dernière partie résume de manière claire les conclusions de ce mémoire de thèse.

En résumé, cette thèse présente une étude exhaustive et pénétrante de l'influence de la géométrie sur les propriétés de transport laplacien. S'appuyant sur une approche continue cohérente, elle décrit en grand détail l'influence des irrégularités de surface sur le transport laplacien. Elle fait justice aussi de nombreuses approximations non contrôlées qui gisent dans la littérature de ce domaine dit d'"interface". Il s'agit là d'un travail original très minutieux, porté par un souci profond de compréhension et d'éclaircissement qui honore son auteur, et dont on doit le féliciter. Ce mémoire de thèse mérite donc amplement d'être défendu devant le jury, et devrait permettre sans difficulté à Denis Grebenkov de devenir Docteur de l'École Polytechnique.

Bertrand DUPLANTIER
Directeur de Recherche
Service de Physique Théorique de Saclay
Professeur chargé de cours à l'École Polytechnique