

# THÈSE

## Modélisation Mathématique et Simulation Numérique de Systèmes Fluides Quantiques

**Samy Gallego<sup>1</sup>**

Directeurs de thèse: Pierre Degond<sup>1</sup> et Florian Méhats<sup>2</sup>

<sup>1</sup>IMT, Université Paul Sabatier de Toulouse

<sup>2</sup>IRMAR, Université de Rennes 1

Mercredi 12 Décembre 2007



# Plan

## 1 Introduction

- Quelques Modèles de Transport de Particules
- Modèle Fluide Quantique pour Une Particule : Madelung
- Modèles Fluides Quantiques pour Plusieurs Particules

## 2 Dérive-Diffusion Quantique (QDD)

- QDD en domaine fermé : présentation et schémas
- QDD en domaine ouvert : simulations numériques et prise en compte du spectre continu

## 3 Euler Quantique Isotherme

- Présentation du modèle et simplifications
- Limites asymptotiques et simulations numériques

## 4 Conclusion

- Résumé
- A Propos des Modèles Non Isothermes
- Perspectives

# Plan

## 1 Introduction

- Quelques Modèles de Transport de Particules
- Modèle Fluide Quantique pour Une Particule : Madelung
- Modèles Fluides Quantiques pour Plusieurs Particules

## 2 Dérive-Diffusion Quantique (QDD)

- QDD en domaine fermé : présentation et schémas
- QDD en domaine ouvert : simulations numériques et prise en compte du spectre continu

## 3 Euler Quantique Isotherme

- Présentation du modèle et simplifications
- Limites asymptotiques et simulations numériques

## 4 Conclusion

- Résumé
- A Propos des Modèles Non Isothermes
- Perspectives



# Quelques Modèles de Transport de particules


$\hbar \rightarrow 0$   


Limite semi-classique

	Classique	Quantique
<b>Micro</b>	Newton Pos. et imp. $(x_i(t), p_i(t))$	Schrödinger Fonction d'Onde $\psi(x_i, t)$
<b>Meso</b>	Boltzmann Fonct. de Distrib. $f(x, p, t)$	Wigner ou Liouville fonc. de Wigner $w(x, p, t)$ ou opérateur densité $\rho(t)$
<b>Macro</b>	Euler sans pression Dérive-Diffusion Euler Transport d'Énergie Dens. $n(x, t), nu(x, t)$	Madelung QDD Euler Quantique QET Dens. $n(x, t), nu(x, t)$



# Quelques Modèles de Transport de particules


$\hbar \rightarrow 0$   


Limite semi-classique

	Classique	Quantique
<b>Micro</b>	Newton Pos. et imp. $(x_i(t), p_i(t))$	Schrödinger Fonction d'Onde $\psi(x_i, t)$
<b>Meso</b>	Boltzmann Fonct. de Distrib. $f(x, p, t)$	Wigner ou Liouville fonc. de Wigner $w(x, p, t)$ ou opérateur densité $\rho(t)$
<b>Macro</b>	Euler sans pression Dérive-Diffusion Euler Transport d'Énergie Dens. $n(x, t), nu(x, t)$	Madelung QDD Euler Quantique QET Dens. $n(x, t), nu(x, t)$



# Quelques Modèles de Transport de particules

$\hbar \rightarrow 0$   


Limite semi-classique

	Classique	Quantique
<b>Micro</b>	Newton Pos. et imp. $(x_i(t), p_i(t))$	Schrödinger Fonction d'Onde $\psi(x_i, t)$
<b>Meso</b>	Boltzmann Fonct. de Distrib. $f(x, p, t)$	Wigner ou Liouville fonc. de Wigner $w(x, p, t)$ ou opérateur densité $\rho(t)$
<b>Macro</b>	Euler sans pression Dérive-Diffusion Euler Transport d'Énergie Dens. $n(x, t), nu(x, t)$	Madelung QDD Euler Quantique QET Dens. $n(x, t), nu(x, t)$



# Quelques Modèles de Transport de particules


$\hbar \rightarrow 0$   


Limite semi-classique

	Classique	Quantique
<b>Micro</b>	Newton Pos. et imp. $(x_i(t), p_i(t))$	Schrödinger Fonction d'Onde $\psi(x_i, t)$
<b>Meso</b>	Boltzmann Fonct. de Distrib. $f(x, p, t)$	Wigner ou Liouville fonc. de Wigner $w(x, p, t)$ ou opérateur densité $\rho(t)$
<b>Macro</b>	Euler sans pression Dérive-Diffusion Euler Transport d'Énergie Dens. $n(x, t), nu(x, t)$	Madelung QDD Euler Quantique QET Dens. $n(x, t), nu(x, t)$



# Quelques Modèles de Transport de particules

$\hbar \rightarrow 0$   


Limite semi-classique

	Classique	Quantique
<b>Micro</b>	Newton Pos. et imp. $(x_i(t), p_i(t))$	Schrödinger Fonction d'Onde $\psi(x_i, t)$
<b>Meso</b>	Boltzmann Fonct. de Distrib. $f(x, p, t)$	Wigner ou Liouville fonc. de Wigner $w(x, p, t)$ ou opérateur densité $\rho(t)$
<b>Macro</b>	Euler sans pression Dérive-Diffusion Euler Transport d'Énergie Dens. $n(x, t), nu(x, t)$	Madelung QDD Euler Quantique QET Dens. $n(x, t), nu(x, t)$





# Quelques Modèles de Transport de particules


$\hbar \rightarrow 0$

Limite semi-classique

	Classique	Quantique
<b>Micro</b>	Newton Pos. et imp. $(x_i(t), p_i(t))$	Schrödinger Fonction d'Onde $\psi(x_i, t)$
<b>Meso</b>	Boltzmann Fonct. de Distrib. $f(x, p, t)$	Wigner ou Liouville fonc. de Wigner $w(x, p, t)$ ou opérateur densité $\rho(t)$
<b>Macro</b>	Euler sans pression Dérive-Diffusion Euler Transport d'Énergie Dens. $n(x, t), nu(x, t)$	Madelung QDD Euler Quantique QET Dens. $n(x, t), nu(x, t)$



# Quelques Modèles de Transport de particules


$\hbar \rightarrow 0$   


Limite semi-classique

	Classique	Quantique
Micro	Newton Pos. et imp. $(x_i(t), p_i(t))$	Schrödinger Fonction d'Onde $\psi(x_i, t)$
Meso	Boltzmann Fonct. de Distrib. $f(x, p, t)$	Wigner ou Liouville fonc. de Wigner $w(x, p, t)$ ou opérateur densité $\rho(t)$
Macro	Euler sans pression Dérive-Diffusion Euler Transport d'Énergie Dens. $n(x, t), nu(x, t)$	Madelung QDD Euler Quantique QET Dens. $n(x, t), nu(x, t)$



# Quelques Modèles de Transport de particules

$\hbar \rightarrow 0$   


Limite semi-classique

	Classique	Quantique
<b>Micro</b>	Newton Pos. et imp. $(x_i(t), p_i(t))$	Schrödinger Fonction d'Onde $\psi(x_i, t)$
<b>Meso</b>	Boltzmann Fonct. de Distrib. $f(x, p, t)$	Wigner ou Liouville fonc. de Wigner $w(x, p, t)$ ou opérateur densité $\rho(t)$
<b>Macro</b>	Euler sans pression Dérive-Diffusion Euler Transport d'Énergie Dens. $n(x, t), nu(x, t)$	<b>Madelung</b> <b>QDD</b> <b>Euler Quantique</b> <b>QET</b> Dens. $n(x, t), nu(x, t)$



# Modèle Fluide Quantique pour **Une** Particule : Madelung

## L'équation de Schrödinger pour une particule

$$i\hbar\partial_t\psi = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta\psi + V\psi$$

peut être reformulée de manière **fluide** grâce à la transformée de Madelung (1927) :

$$\psi = \sqrt{n}e^{iS/\hbar}.$$

On obtient :

le système de Madelung avec inconnues  $n(x,t)$  et  $u(x,t) = \nabla S$

$$\partial_t n + \nabla \cdot nu = 0,$$

$$\partial_t(nu) + \nabla \cdot (nu \otimes u) + n\nabla \left( V - \frac{\hbar^2}{2} \frac{\Delta\sqrt{n}}{\sqrt{n}} \right) = 0.$$

# Modèle Fluide Quantique pour **Une** Particule : Madelung

## L'équation de Schrödinger pour une particule

$$i\hbar\partial_t\psi = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta\psi + V\psi$$

peut être reformulée de manière **fluide** grâce à la transformée de Madelung (1927) :

$$\psi = \sqrt{n}e^{iS/\hbar}.$$

On obtient :

le système de Madelung avec inconnues  $n(x,t)$  et  $u(x,t) = \nabla S$

$$\partial_t n + \nabla \cdot nu = 0,$$

$$\partial_t(nu) + \nabla \cdot (nu \otimes u) + n\nabla \left( V - \frac{\hbar^2}{2} \frac{\Delta\sqrt{n}}{\sqrt{n}} \right) = 0.$$

# Modèle Fluide Quantique pour **Une** Particule : Madelung

## L'équation de Schrödinger pour une particule

$$i\hbar\partial_t\psi = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta\psi + V\psi$$

peut être reformulée de manière **fluide** grâce à la transformée de Madelung (1927) :

$$\psi = \sqrt{n}e^{iS/\hbar}.$$

On obtient :

le système de Madelung avec inconnues  $n(x, t)$  et  $u(x, t) = \nabla S$

$$\partial_t n + \nabla \cdot nu = 0,$$

$$\partial_t(nu) + \nabla \cdot (nu \otimes u) + n\nabla \left( V - \frac{\hbar^2}{2} \frac{\Delta\sqrt{n}}{\sqrt{n}} \right) = 0.$$

# Avantages et Inconvénients du système de Madelung

## Inconvénient

On passe d'une équation **linéaire** à un système **non-linéaire**.

## Avantage

- Dans la limite semi-classique  $\hbar \rightarrow 0$ ,  $\psi$  développe des oscillations d'ordre  $\hbar$

⇒ Meilleurs maillages [Markowich et al.] :  $\Delta x = o(\hbar)$  ;  $\Delta t = \mathcal{O}(\hbar)$ .

- Pas d'oscillations sur les quantités macroscopiques  $n$  et  $u$ .

## Bibliographie

- Très peu de travaux sur le système de Madelung.
- Méthodes **particulaires** dans une formulation **lagrangienne** ont été employées en chimie quantique [Wyatt et al.].



# Avantages et Inconvénients du système de Madelung

## Inconvénient

On passe d'une équation **linéaire** à un système **non-linéaire**.

## Avantage

- Dans la limite **semi-classique**  $\hbar \rightarrow 0$ ,  $\psi$  développe des **oscillations** d'ordre  $\hbar$

⇒ Meilleurs maillages [Markowich et al.] :  $\Delta x = o(\hbar)$  ;  $\Delta t = \mathcal{O}(\hbar)$ .

- Pas d'oscillations sur les quantités macroscopiques  $n$  et  $u$ .

## Bibliographie

- Très peu de travaux sur le système de Madelung.
- Méthodes **particulaires** dans une formulation **lagrangienne** ont été employées en chimie quantique [Wyatt et al.].



# Avantages et Inconvénients du système de Madelung

## Inconvénient

On passe d'une équation **linéaire** à un système **non-linéaire**.

## Avantage

- Dans la limite **semi-classique**  $\hbar \rightarrow 0$ ,  $\psi$  développe des **oscillations** d'ordre  $\hbar$
- ⇒ Meilleurs maillages [Markowich et al.] :  $\Delta x = o(\hbar)$  ;  $\Delta t = \mathcal{O}(\hbar)$ .
- Pas d'oscillations sur les quantités macroscopiques  $n$  et  $u$ .

## Bibliographie

- Très peu de travaux sur le système de Madelung.
- Méthodes **particulaires** dans une formulation **lagrangienne** ont été employées en chimie quantique [Wyatt et al.].



# Avantages et Inconvénients du système de Madelung

## Inconvénient

On passe d'une équation **linéaire** à un système **non-linéaire**.

## Avantage

- Dans la limite **semi-classique**  $\hbar \rightarrow 0$ ,  $\psi$  développe des **oscillations** d'ordre  $\hbar$
- ⇒ Meilleurs maillages [Markowich et al.] :  $\Delta x = o(\hbar)$  ;  $\Delta t = \mathcal{O}(\hbar)$ .
- Pas d'oscillations sur les quantités macroscopiques  $n$  et  $u$ .

## Bibliographie

- Très peu de travaux sur le système de Madelung.
- Méthodes **particulaires** dans une formulation **lagrangienne** ont été employées en chimie quantique [Wyatt et al.].

## Travail effectué sur le système de Madelung

- Proposition d'un schéma **semi-implicite** en formulation eulerienne et lagrangienne qui a le même coût que le schéma explicite (on implícite le courant).
- Analyse du système linéarisé donne un critère de stabilité  $\Delta t < \frac{\Delta x^2}{\hbar \pi^2}$  (on parle de **stabilité asymptotique**).
- Stabilité vérifiée de manière numérique sur le système non linéaire avec potentiel  $V$  constant.

Pour  $\Delta x$  fixé, on peut prendre  $\Delta t = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\hbar}\right)$ .

- On a noté des instabilités pour les densités proches de zéro.

Résultats publiés dans *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences de Paris, Ser. I* 345 (2007).



## Travail effectué sur le système de Madelung

- Proposition d'un schéma **semi-implicite** en formulation eulerienne et lagrangienne qui a le même coût que le schéma explicite (on implícite le courant).
- Analyse du système linéarisé donne un critère de stabilité  $\Delta t < \frac{\Delta x^2}{\hbar \pi^2}$  (on parle de **stabilité asymptotique**).
- Stabilité vérifiée de manière numérique sur le système non linéaire avec potentiel  $V$  constant.

Pour  $\Delta x$  fixé, on peut prendre  $\Delta t = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\hbar}\right)$ .

- On a noté des instabilités pour les densités proches de zéro.

Résultats publiés dans *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences de Paris, Ser. I* 345 (2007).



## Travail effectué sur le système de Madelung

- Proposition d'un schéma **semi-implicite** en formulation eulerienne et lagrangienne qui a le même coût que le schéma explicite (on implícite le courant).
- Analyse du système linéarisé donne un critère de stabilité  $\Delta t < \frac{\Delta x^2}{\hbar \pi^2}$  (on parle de **stabilité asymptotique**).
- Stabilité vérifiée de manière numérique sur le système non linéaire avec potentiel  $V$  constant.

Pour  $\Delta x$  fixé, on peut prendre  $\Delta t = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\hbar}\right)$ .

- On a noté des instabilités pour les densités proches de zéro.

Résultats publiés dans *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences de Paris, Ser. I* 345 (2007).



## Travail effectué sur le système de Madelung

- Proposition d'un schéma **semi-implicite** en formulation eulerienne et lagrangienne qui a le même coût que le schéma explicite (on implícite le courant).
- Analyse du système linéarisé donne un critère de stabilité  $\Delta t < \frac{\Delta x^2}{\hbar \pi^2}$  (on parle de **stabilité asymptotique**).
- Stabilité vérifiée de manière numérique sur le système non linéaire avec potentiel  $V$  constant.

Pour  $\Delta x$  fixé, on peut prendre  $\Delta t = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\hbar}\right)$ .

- On a noté des instabilités pour les densités proches de zéro.

Résultats publiés dans *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences de Paris, Ser. I* 345 (2007).



## Travail effectué sur le système de Madelung

- Proposition d'un schéma **semi-implicite** en formulation eulerienne et lagrangienne qui a le même coût que le schéma explicite (on implícite le courant).
- Analyse du système linéarisé donne un critère de stabilité  $\Delta t < \frac{\Delta x^2}{\hbar \pi^2}$  (on parle de **stabilité asymptotique**).
- Stabilité vérifiée de manière numérique sur le système non linéaire avec potentiel  $V$  constant.

Pour  $\Delta x$  fixé, on peut prendre  $\Delta t = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\hbar}\right)$ .

- On a noté des instabilités pour les densités proches de zéro.

Résultats publiés dans **Comptes Rendus de l'Académie des Sciences de Paris, Ser. I 345 (2007)**.



# Modèles Fluides Quantiques pour **Plusieurs** Particules

## Point de départ de la thèse

- Méthode des moments de Levermore adaptée au cas Quantique par Degond et Ringhofer dans **Journal of Statistical Physics 112 (2003)**.
- Puis modèles Diffusifs développés par Degond, Méhats et Ringhofer dans **Journal of Statistical Physics 118 (2005)**.

## Méthode

- Cette méthode consiste à prendre les moments de l'équation de Wigner.
- Fermer le système par un équilibre local (ou **Maxwellienne Quantique**) défini comme le minimiseur d'une entropie quantique sous contrainte.



# Modèles Fluides Quantiques pour Plusieurs Particules

## Point de départ de la thèse

- Méthode des moments de Levermore adaptée au cas Quantique par Degond et Ringhofer dans [Journal of Statistical Physics 112 \(2003\)](#).
- Puis modèles Diffusifs développés par Degond, Méhats et Ringhofer dans [Journal of Statistical Physics 118 \(2005\)](#).

## Méthode

- Cette méthode consiste à prendre les moments de l'équation de Wigner.
- Fermer le système par un équilibre local (ou **Maxwellienne Quantique**) défini comme le minimiseur d'une entropie quantique sous contrainte.

# Modèles Fluides Quantiques pour Plusieurs Particules

## Point de départ de la thèse

- Méthode des moments de Levermore adaptée au cas Quantique par Degond et Ringhofer dans *Journal of Statistical Physics* **112** (2003).
- Puis modèles Diffusifs développés par Degond, Méhats et Ringhofer dans *Journal of Statistical Physics* **118** (2005).

## Méthode

- Cette méthode consiste à prendre les moments de l'équation de Wigner.
- Fermer le système par un équilibre local (ou Maxwellienne Quantique) défini comme le minimiseur d'une entropie quantique sous contrainte.

# Modèles Fluides Quantiques pour **Plusieurs** Particules

## Point de départ de la thèse

- Méthode des moments de Levermore adaptée au cas Quantique par Degond et Ringhofer dans **Journal of Statistical Physics 112 (2003)**.
- Puis modèles Diffusifs développés par Degond, Méhats et Ringhofer dans **Journal of Statistical Physics 118 (2005)**.

## Méthode

- Cette méthode consiste à prendre les moments de l'équation de Wigner.
- Fermer le système par un équilibre local (ou **Maxwellienne Quantique**) défini comme le minimiseur d'une entropie quantique sous contrainte.



## Maxwelliennes Quantiques

- Dans le cas où les contraintes sont sur la densité  $n$ , le courant  $nu$  et l'énergie  $\mathcal{W}$  :

$$w_{n,nu,\mathcal{W}}^{eq} = \mathcal{E}xp \left( -\frac{1}{2C}(p - B)^2 - A \right)$$

où  $A, B, C$  sont les multiplicateurs de Lagrange définis tels

$$\text{que } \begin{pmatrix} n \\ nu \\ \mathcal{W} \end{pmatrix} = \int \begin{pmatrix} 1 \\ p \\ \frac{p^2}{2} \end{pmatrix} w_{n,nu,\mathcal{W}}^{eq} \frac{dp}{(2\pi\hbar)^3}.$$

- Dans le cas classique, on a :

$$A = -\log(n) + \frac{3}{2} \log \left( \frac{T}{2\pi\hbar^2} \right), \quad B = u,$$

$$C = T, \quad \mathcal{W} = \frac{1}{2}n|u|^2 + \frac{3}{2}nT.$$



# Maxwelliennes Quantiques

- Dans le cas où les contraintes sont sur la densité  $n$ , le courant  $nu$  et l'énergie  $\mathcal{W}$  :

$$w_{n,nu,\mathcal{W}}^{eq} = \text{Exp} \left( -\frac{1}{2C} (p - B)^2 - A \right)$$

où  $A, B, C$  sont les multiplicateurs de Lagrange définis tels

$$\text{que} \begin{pmatrix} n \\ nu \\ \mathcal{W} \end{pmatrix} = \int \begin{pmatrix} 1 \\ p \\ \frac{p^2}{2} \end{pmatrix} w_{n,nu,\mathcal{W}}^{eq} \frac{dp}{(2\pi\hbar)^3}.$$

- Dans le cas classique, on a :

$$A = -\log(n) + \frac{3}{2} \log \left( \frac{T}{2\pi\hbar^2} \right), \quad B = u,$$

$$C = T, \quad \mathcal{W} = \frac{1}{2} n |u|^2 + \frac{3}{2} n T.$$



## Maxwelliennes Quantiques

- Dans le cas où les contraintes sont sur la densité  $n$ , le courant  $nu$  et l'énergie  $\mathcal{W}$  :

$$w_{n,nu,\mathcal{W}}^{eq} = \mathcal{E}xp \left( -\frac{1}{2C}(p - B)^2 - A \right)$$

où  $A, B, C$  sont les multiplicateurs de Lagrange définis tels

$$\text{que } \begin{pmatrix} n \\ nu \\ \mathcal{W} \end{pmatrix} = \int \begin{pmatrix} 1 \\ p \\ \frac{p^2}{2} \end{pmatrix} w_{n,nu,\mathcal{W}}^{eq} \frac{dp}{(2\pi\hbar)^3}.$$

- Dans le cas classique, on a :

$$A = -\log(n) + \frac{3}{2} \log \left( \frac{T}{2\pi\hbar^2} \right), \quad B = u,$$

$$C = T, \quad \mathcal{W} = \frac{1}{2}n|u|^2 + \frac{3}{2}nT.$$



## Maxwelliennes Quantiques (suite)

- Dans le cas quantique, les potentiels thermodynamiques  $(A, B, C)$  sont reliés de manière **non locales** aux densités  $(n, nu, \mathcal{W})$ .
- $\mathcal{E}xp = W \circ \exp \circ W^{-1}$  avec  $W$  la transformée de Wigner et  $W^{-1}$  son inverse (quantification de Weyl).
- $W$  et  $W^{-1}$  forment une isométrie entre les espaces  $\mathcal{L}^2$  (ensemble des opérateurs tels que  $\rho\rho^\dagger$  est à trace) et  $L^2(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)$  (ensemble des fonctions de  $x$  et de  $p$  de carré sommable).

### Avantages des modèles fluides quantiques

- Ils sont **moins coûteux** numériquement que des modèles microscopiques quantiques.
- Ils prennent en compte implicitement des **collisions**.



## Maxwelliennes Quantiques (suite)

- Dans le cas quantique, les potentiels thermodynamiques  $(A, B, C)$  sont reliés de manière **non locales** aux densités  $(n, nu, \mathcal{W})$ .
- $\mathcal{E}xp = W \circ \exp \circ W^{-1}$  avec  $W$  la transformée de Wigner et  $W^{-1}$  son inverse (quantification de Weyl).
- $W$  et  $W^{-1}$  forment une isométrie entre les espaces  $\mathcal{L}^2$  (ensemble des opérateurs tels que  $\rho\rho^\dagger$  est à trace) et  $L^2(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)$  (ensemble des fonctions de  $x$  et de  $p$  de carré sommable).

### Avantages des modèles fluides quantiques

- Ils sont **moins coûteux** numériquement que des modèles microscopiques quantiques.
- Ils prennent en compte implicitement des **collisions**.



## Maxwelliennes Quantiques (suite)

- Dans le cas quantique, les potentiels thermodynamiques  $(A, B, C)$  sont reliés de manière **non locales** aux densités  $(n, nu, \mathcal{W})$ .
- $\mathcal{E}xp = W \circ \exp \circ W^{-1}$  avec  $W$  la transformée de Wigner et  $W^{-1}$  son inverse (quantification de Weyl).
- $W$  et  $W^{-1}$  forment une isométrie entre les espaces  $\mathcal{L}^2$  (ensemble des opérateurs tels que  $\rho\rho^\dagger$  est à trace) et  $L^2(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)$  (ensemble des fonctions de  $x$  et de  $p$  de carré sommable).

### Avantages des modèles fluides quantiques

- Ils sont **moins coûteux** numériquement que des modèles microscopiques quantiques.
- Ils prennent en compte implicitement des **collisions**.



## Maxwelliennes Quantiques (suite)

- Dans le cas quantique, les potentiels thermodynamiques  $(A, B, C)$  sont reliés de manières **non locales** aux densités  $(n, nu, \mathcal{W})$ .
- $\mathcal{E}xp = W \circ \exp \circ W^{-1}$  avec  $W$  la transformée de Wigner et  $W^{-1}$  son inverse (quantification de Weyl).
- $W$  et  $W^{-1}$  forment une isométrie entre les espaces  $\mathcal{L}^2$  (ensemble des opérateurs tels que  $\rho\rho^\dagger$  est à trace) et  $L^2(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)$  (ensemble des fonctions de  $x$  et de  $p$  de carré sommable).

### Avantages des modèles fluides quantiques

- Ils sont **moins coûteux** numériquement que des modèles microscopiques quantiques.
- Ils prennent en compte implicitement des collisions.

## Maxwelliennes Quantiques (suite)

- Dans le cas quantique, les potentiels thermodynamiques  $(A, B, C)$  sont reliés de manières **non locales** aux densités  $(n, nu, \mathcal{W})$ .
- $\mathcal{E}xp = W \circ \exp \circ W^{-1}$  avec  $W$  la transformée de Wigner et  $W^{-1}$  son inverse (quantification de Weyl).
- $W$  et  $W^{-1}$  forment une isométrie entre les espaces  $\mathcal{L}^2$  (ensemble des opérateurs tels que  $\rho\rho^\dagger$  est à trace) et  $L^2(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)$  (ensemble des fonctions de  $x$  et de  $p$  de carré sommable).

### Avantages des modèles fluides quantiques

- Ils sont **moins coûteux** numériquement que des modèles microscopiques quantiques.
- Ils prennent en compte implicitement des **collisions**.

# Plan

- 1 Introduction
  - Quelques Modèles de Transport de Particules
  - Modèle Fluide Quantique pour Une Particule : Madelung
  - Modèles Fluides Quantiques pour Plusieurs Particules
- 2 Dérive-Diffusion Quantique (QDD)
  - QDD en domaine fermé : présentation et schémas
  - QDD en domaine ouvert : simulations numériques et prise en compte du spectre continu
- 3 Euler Quantique Isotherme
  - Présentation du modèle et simplifications
  - Limites asymptotiques et simulations numériques
- 4 Conclusion
  - Résumé
  - A Propos des Modèles Non Isothermes
  - Perspectives



## Présentation du modèle en domaine fermé

D-D classique	D-D Quantique
$\partial_t n + \nabla \cdot j = 0,$ $j = -\nabla n - n \nabla V = n \nabla (A - V),$ avec $n = \int \exp\left(-\frac{p^2}{2} - A\right) dp$ $= n_0 \exp(-A)$	$\partial_t n + \nabla \cdot j = 0,$ $j = n \nabla (A - V),$ $n = \int \mathcal{E} \exp\left(-\frac{p^2}{2} - A\right) \frac{dp}{(2\pi\hbar)^3}$ $= \sum_p \exp(-\lambda_p(A))  \psi_p(A) ^2$

où  $(\lambda_p(A), \psi_p(A))$  sont les éléments propres de l'Hamiltonien

$$H(A) = W^{-1} \left( \frac{p^2}{2} + A \right) = -\frac{\hbar^2}{2} \Delta + A.$$

### Couplage avec l'équation de Poisson

Pour être plus réaliste, on décompose  $V = V_{ext} + V_s$  où  $V_s$  solution de  $-\alpha^2 \Delta V_s = n$  ( $\alpha$  longueur caractéristique de Debye.)

## Présentation du modèle en domaine fermé

D-D classique	D-D Quantique
$\partial_t n + \nabla \cdot j = 0,$ $j = -\nabla n - n \nabla V = n \nabla (A - V),$ avec $n = \int \exp\left(-\frac{p^2}{2} - A\right) dp$ $= n_0 \exp(-A)$	$\partial_t n + \nabla \cdot j = 0,$ $j = n \nabla (A - V),$ $n = \int \mathcal{E} \exp\left(-\frac{p^2}{2} - A\right) \frac{dp}{(2\pi\hbar)^3}$ $= \sum_p \exp(-\lambda_p(A))  \psi_p(A) ^2$

où  $(\lambda_p(A), \psi_p(A))$  sont les éléments propres de l'Hamiltonien

$$H(A) = W^{-1} \left( \frac{p^2}{2} + A \right) = -\frac{\hbar^2}{2} \Delta + A.$$

### Couplage avec l'équation de Poisson

Pour être plus réaliste, on décompose  $V = V_{ext} + V_s$  où  $V_s$  solution de  $-\alpha^2 \Delta V_s = n$  ( $\alpha$  longueur caractéristique de Debye.)

## Présentation du modèle en domaine fermé

D-D classique	D-D Quantique
$\partial_t n + \nabla \cdot j = 0,$ $j = -\nabla n - n \nabla V = n \nabla (A - V),$ avec $n = \int \exp\left(-\frac{p^2}{2} - A\right) dp$ $= n_0 \exp(-A)$	$\partial_t n + \nabla \cdot j = 0,$ $j = n \nabla (A - V),$ $n = \int \mathcal{E} \exp\left(-\frac{p^2}{2} - A\right) \frac{dp}{(2\pi\hbar)^3}$ $= \sum_p \exp(-\lambda_p(A))  \psi_p(A) ^2$

où  $(\lambda_p(A), \psi_p(A))$  sont les éléments propres de l'Hamiltonien

$$H(A) = W^{-1} \left( \frac{p^2}{2} + A \right) = -\frac{\hbar^2}{2} \Delta + A.$$

### Couplage avec l'équation de Poisson

Pour être plus réaliste, on décompose  $V = V_{ext} + V_s$  où  $V_s$  solution de  $-\alpha^2 \Delta V_s = n$  ( $\alpha$  longueur caractéristique de Debye.)



## Présentation du modèle en domaine fermé

D-D classique	D-D Quantique
$\partial_t n + \nabla \cdot j = 0,$ $j = -\nabla n - n \nabla V = n \nabla (A - V),$ <p>avec <math>n = \int \exp\left(-\frac{p^2}{2} - A\right) dp</math></p> $= n_0 \exp(-A)$	$\partial_t n + \nabla \cdot j = 0,$ $j = n \nabla (A - V),$ $n = \int \mathcal{E} \exp\left(-\frac{p^2}{2} - A\right) \frac{dp}{(2\pi\hbar)^3}$ $= \sum_p \exp(-\lambda_p(A))  \psi_p(A) ^2$

où  $(\lambda_p(A), \psi_p(A))$  sont les éléments propres de l'Hamiltonien

$$H(A) = W^{-1} \left( \frac{p^2}{2} + A \right) = -\frac{\hbar^2}{2} \Delta + A.$$

### Couplage avec l'équation de Poisson

Pour être plus réaliste, on décompose  $V = V_{ext} + V_s$  où  $V_s$  solution de  $-\alpha^2 \Delta V_s = n$  ( $\alpha$  longueur caractéristique de Debye.)



## Présentation du modèle en domaine fermé

D-D classique	D-D Quantique
$\partial_t n + \nabla \cdot j = 0,$ $j = -\nabla n - n \nabla V = n \nabla (A - V),$ <p>avec <math>n = \int \exp\left(-\frac{p^2}{2} - A\right) dp</math></p> $= n_0 \exp(-A)$	$\partial_t n + \nabla \cdot j = 0,$ $j = n \nabla (A - V),$ $n = \int \mathcal{E} \exp\left(-\frac{p^2}{2} - A\right) \frac{dp}{(2\pi\hbar)^3}$ $= \sum_p \exp(-\lambda_p(A))  \psi_p(A) ^2$

où  $(\lambda_p(A), \psi_p(A))$  sont les éléments propres de l'Hamiltonien

$$H(A) = W^{-1} \left( \frac{p^2}{2} + A \right) = -\frac{\hbar^2}{2} \Delta + A.$$

### Couplage avec l'équation de Poisson

Pour être plus réaliste, on décompose  $V = V_{ext} + V_s$  où  $V_s$  solution de  $-\alpha^2 \Delta V_s = n$  ( $\alpha$  longueur caractéristique de Debye.)

## Présentation du modèle en domaine fermé

D-D classique	D-D Quantique
$\partial_t n + \nabla \cdot j = 0,$ $j = -\nabla n - n \nabla V = n \nabla (A - V),$ <p>avec <math>n = \int \exp\left(-\frac{p^2}{2} - A\right) dp</math></p> $= n_0 \exp(-A)$	$\partial_t n + \nabla \cdot j = 0,$ $j = n \nabla (A - V),$ $n = \int \mathcal{E} \exp\left(-\frac{p^2}{2} - A\right) \frac{dp}{(2\pi\hbar)^3}$ $= \sum_p \exp(-\lambda_p(A))  \psi_p(A) ^2$

où  $(\lambda_p(A), \psi_p(A))$  sont les éléments propres de l'Hamiltonien

$$H(A) = W^{-1} \left( \frac{p^2}{2} + A \right) = -\frac{\hbar^2}{2} \Delta + A.$$

### Couplage avec l'équation de Poisson

Pour être plus réaliste, on décompose  $V = V_{ext} + V_s$  où  $V_s$  solution de  $-\alpha^2 \Delta V_s = n$  ( $\alpha$  longueur caractéristique de Debye.)

## Présentation du modèle en domaine fermé

D-D classique	D-D Quantique
$\partial_t n + \nabla \cdot j = 0,$ $j = -\nabla n - n \nabla V = n \nabla (A - V),$ <p>avec <math>n = \int \exp\left(-\frac{p^2}{2} - A\right) dp</math></p> $= n_0 \exp(-A)$	$\partial_t n + \nabla \cdot j = 0,$ $j = n \nabla (A - V),$ $n = \int \mathcal{E} \exp\left(-\frac{p^2}{2} - A\right) \frac{dp}{(2\pi\hbar)^3}$ $= \sum_p \exp(-\lambda_p(A))  \psi_p(A) ^2$

où  $(\lambda_p(A), \psi_p(A))$  sont les éléments propres de l'Hamiltonien

$$H(A) = W^{-1} \left( \frac{p^2}{2} + A \right) = -\frac{\hbar^2}{2} \Delta + A.$$

### Couplage avec l'équation de Poisson

Pour être plus réaliste, on décompose  $V = V_{ext} + V_s$  où  $V_s$  solution de  $-\alpha^2 \Delta V_s = n$  ( $\alpha$  longueur caractéristique de Debye.)

## Présentation du modèle en domaine fermé

D-D classique	D-D Quantique
$\partial_t n + \nabla \cdot j = 0,$ $j = -\nabla n - n \nabla V = n \nabla (A - V),$ <p>avec <math>n = \int \exp\left(-\frac{p^2}{2} - A\right) dp</math></p> $= n_0 \exp(-A)$	$\partial_t n + \nabla \cdot j = 0,$ $j = n \nabla (A - V),$ $n = \int \mathcal{E} \exp\left(-\frac{p^2}{2} - A\right) \frac{dp}{(2\pi\hbar)^3}$ $= \sum_p \exp(-\lambda_p(A))  \psi_p(A) ^2$

où  $(\lambda_p(A), \psi_p(A))$  sont les éléments propres de l'Hamiltonien

$$H(A) = W^{-1} \left( \frac{p^2}{2} + A \right) = -\frac{\hbar^2}{2} \Delta + A.$$

### Couplage avec l'équation de Poisson

Pour être plus réaliste, on décompose  $V = V_{ext} + V_s$  où  $V_s$  solution de  $-\alpha^2 \Delta V_s = n$  ( $\alpha$  longueur caractéristique de Debye.)

## Conditions aux Bords et Schéma Semi-Discretisé

### Conditions aux bords

$$\nabla(A - V_s - V_{ext}) \cdot \nu = 0, \quad V_s = 0, \quad \nabla\psi_p \cdot \nu = 0 \quad (\forall p \in \mathbb{N}).$$

### Proposition du système semi-discretisé implicite

$$\begin{aligned} \frac{n^{k+1} - n^k}{\Delta t} + \nabla \cdot \left( n^k \nabla (A^{k+1} - V_s^{k+1} - V_{ext}) \right) &= 0, \\ -\alpha^2 \Delta V_s^{k+1} &= n^{k+1}, \\ n^{k+1} &= \sum_p \exp \left( -\lambda_p(A^{k+1}) \right) |\psi_p(A^{k+1})|^2. \end{aligned}$$

où  $(\lambda_p(A^{k+1}), \psi_p(A^{k+1}))$  sont les éléments propres de l'Hamiltonien  $H(A^{k+1}) = -\frac{\hbar^2}{2} \Delta + A^{k+1}$ .

## Conditions aux Bords et Schéma Semi-Discretisé

### Conditions aux bords

$$\nabla(A - V_s - V_{ext}) \cdot \nu = 0, \quad V_s = 0, \quad \nabla\psi_p \cdot \nu = 0 \quad (\forall p \in \mathbb{N}).$$

### Proposition du système semi-discretisé implicite

$$\begin{aligned} \frac{n^{k+1} - n^k}{\Delta t} + \nabla \cdot \left( n^k \nabla (A^{k+1} - V_s^{k+1} - V_{ext}) \right) &= 0, \\ -\alpha^2 \Delta V_s^{k+1} &= n^{k+1}, \\ n^{k+1} &= \sum_p \exp \left( -\lambda_p(A^{k+1}) \right) |\psi_p(A^{k+1})|^2. \end{aligned}$$

où  $(\lambda_p(A^{k+1}), \psi_p(A^{k+1}))$  sont les éléments propres de l'Hamiltonien  $H(A^{k+1}) = -\frac{\hbar^2}{2} \Delta + A^{k+1}$ .

## Systeme Bien Posé

- Ce système est **bien posé**. En effet,  $(A^{k+1}, V_s^{k+1})$  est l'unique minimiseur d'une fonctionnelle  $J$  définie comme suit :

$$J(A, V_s) = \frac{\Delta t}{2} \int n^k |\nabla(A - V_s - V_{ext})|^2 dx + \frac{\alpha^2}{2} \int |\nabla V_s|^2 dx + \sum_p \exp(-\lambda_p(A)) + \int n^k (A - V_s - V_{ext}) dx.$$

- Démonstration : Inspiré par les travaux de Nier, on peut montrer que cette fonctionnelle est strictement **convexe** et **coercive** ce qui démontre l'existence d'un unique couple minimiseur de  $J$ , et donc que l'on peut passer de manière unique de l'instant  $t^k$  à  $t^{k+1}$ .



# Système Bien Posé

- Ce système est **bien posé**. En effet,  $(A^{k+1}, V_s^{k+1})$  est l'unique minimiseur d'une fonctionnelle  $J$  définie comme suit :

$$J(A, V_s) = \frac{\Delta t}{2} \int n^k |\nabla(A - V_s - V_{ext})|^2 dx + \frac{\alpha^2}{2} \int |\nabla V_s|^2 dx \\ + \sum_p \exp(-\lambda_p(A)) + \int n^k (A - V_s - V_{ext}) dx.$$

- Démonstration : Inspiré par les travaux de Nier, on peut montrer que cette fonctionnelle est strictement **convexe** et **coercive** ce qui démontre l'existence d'un unique couple minimiseur de  $J$ , et donc que l'on peut passer de manière unique de l'instant  $t^k$  à  $t^{k+1}$ .





## Discrétisation Totale

- On a proposé une discrétisation complète par différences finies.
- On a montré que le schéma a de bonnes propriétés : stricte positivité de la densité, conservation de la masse, décroissance de l'entropie.
- Résolution du problème de minimisation de la fonctionnelle par une méthode de **Newton**.

### Remarques

- Résolution d'un problème aux valeurs propres dont la taille est celle de la discrétisation en espace.
- Inversion numérique de la relation constitutive  $A \mapsto n(A)$  démontrée (argument variationnel).

Résultats publiés dans *SIAM Journal on Numerical Analysis* **43** (2005).

## Discrétisation Totale

- On a proposé une discrétisation complète par différences finies.
- On a montré que le schéma a de bonnes propriétés : stricte positivité de la densité, conservation de la masse, décroissance de l'entropie.
- Résolution du problème de minimisation de la fonctionnelle par une méthode de **Newton**.

### Remarques

- Résolution d'un problème aux valeurs propres dont la taille est celle de la discrétisation en espace.
- Inversion numérique de la relation constitutive  $A \mapsto n(A)$  démontrée (argument variationnel).

Résultats publiés dans *SIAM Journal on Numerical Analysis* **43** (2005).

## Discrétisation Totale

- On a proposé une discrétisation complète par différences finies.
- On a montré que le schéma a de bonnes propriétés : stricte positivité de la densité, conservation de la masse, décroissance de l'entropie.
- Résolution du problème de minimisation de la fonctionnelle par une méthode de **Newton**.

### Remarques

- Résolution d'un problème aux valeurs propres dont la taille est celle de la discrétisation en espace.
- Inversion numérique de la relation constitutive  $A \mapsto n(A)$  démontrée (argument variationnel).

Résultats publiés dans *SIAM Journal on Numerical Analysis* 43 (2005).

## Discrétisation Totale

- On a proposé une discrétisation complète par différences finies.
- On a montré que le schéma a de bonnes propriétés : stricte positivité de la densité, conservation de la masse, décroissance de l'entropie.
- Résolution du problème de minimisation de la fonctionnelle par une méthode de **Newton**.

### Remarques

- Résolution d'un problème aux valeurs propres dont la taille est celle de la discrétisation en espace.
- Inversion numérique de la relation constitutive  $A \mapsto n(A)$  démontrée (argument variationnel).

Résultats publiés dans *SIAM Journal on Numerical Analysis* 43 (2005).



## Discrétisation Totale

- On a proposé une discrétisation complète par différences finies.
- On a montré que le schéma a de bonnes propriétés : stricte positivité de la densité, conservation de la masse, décroissance de l'entropie.
- Résolution du problème de minimisation de la fonctionnelle par une méthode de **Newton**.

### Remarques

- Résolution d'un problème aux valeurs propres dont la taille est celle de la discrétisation en espace.
- Inversion numérique de la relation constitutive  $A \mapsto n(A)$  démontrée (argument variationnel).

Résultats publiés dans *SIAM Journal on Numerical Analysis* 43 (2005).



## Discrétisation Totale

- On a proposé une discrétisation complète par différences finies.
- On a montré que le schéma a de bonnes propriétés : stricte positivité de la densité, conservation de la masse, décroissance de l'entropie.
- Résolution du problème de minimisation de la fonctionnelle par une méthode de **Newton**.

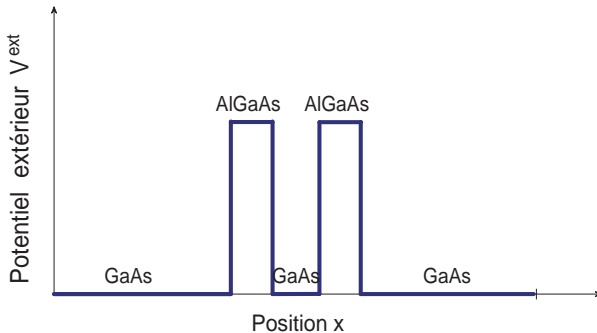
### Remarques

- Résolution d'un problème aux valeurs propres dont la taille est celle de la discrétisation en espace.
- Inversion numérique de la relation constitutive  $A \mapsto n(A)$  démontrée (argument variationnel).

Résultats publiés dans **SIAM Journal on Numerical Analysis** **43** (2005).



# QDD en Domaine Ouvert : La diode à effet tunnel résonnant

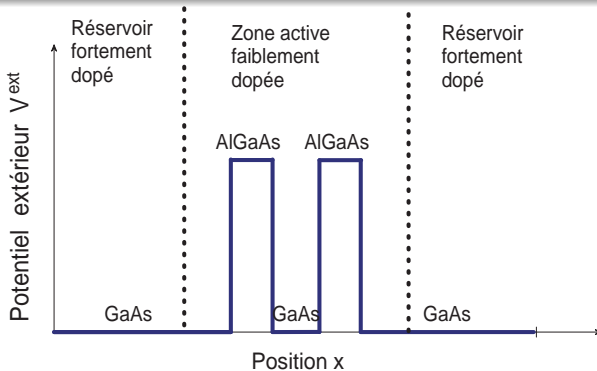


Conditions aux bords

$$n = \sum_p e^{-\lambda_p} |\psi_p|^2 = n^d, \quad V_s = V_{app}, \quad \nabla \psi_p \cdot \nu = 0 \quad (\forall p \in \mathbb{N}).$$



# QDD en Domaine Ouvert : La diode à effet tunnel résonnant



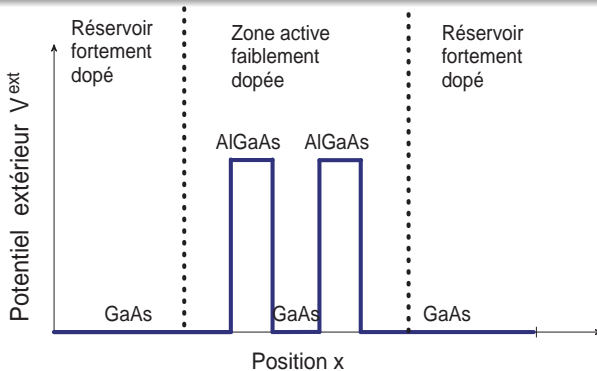
Conditions aux bords

$$n = \sum_p e^{-\lambda_p} |\psi_p|^2 = n^d, \quad V_s = V_{app}, \quad \nabla \psi_p \cdot \nu = 0 \quad (\forall p \in \mathbb{N}).$$





# QDD en Domaine Ouvert : La diode à effet tunnel résonnant

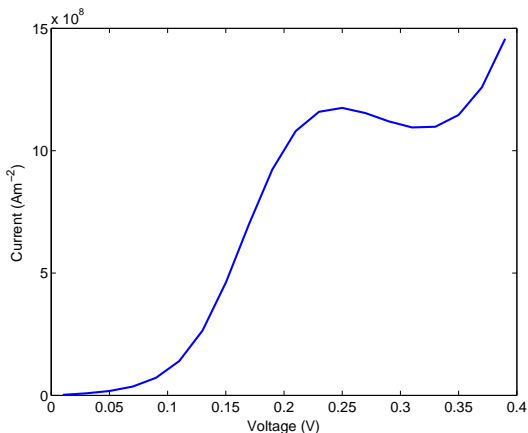


## Conditions aux bords

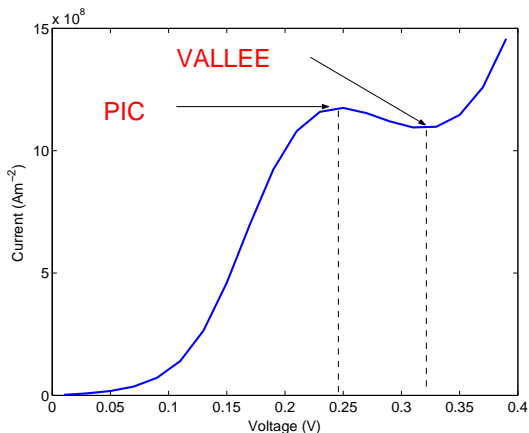
$$n = \sum_p e^{-\lambda_p} |\psi_p|^2 = n^d, \quad V_s = V_{app}, \quad \nabla \psi_p \cdot \nu = 0 \quad (\forall p \in \mathbb{N}).$$



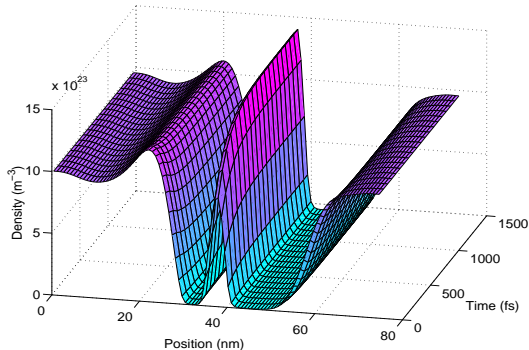
# Caractéristique courant-tension d'une diode à effet tunnel



# Caractéristique courant-tension d'une diode à effet tunnel



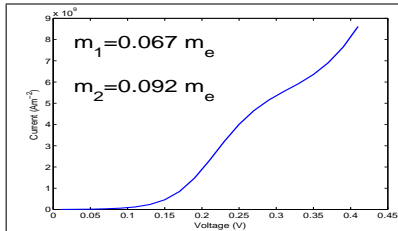
# Évolution de la densité du pic à la vallée



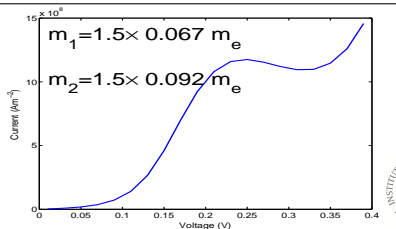
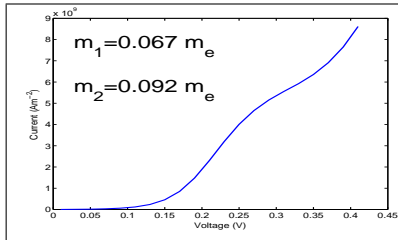
Evolution de la densité du pic (potentiel appliqué : 0.25V) à la vallée (potentiel appliqué : 0.31V).



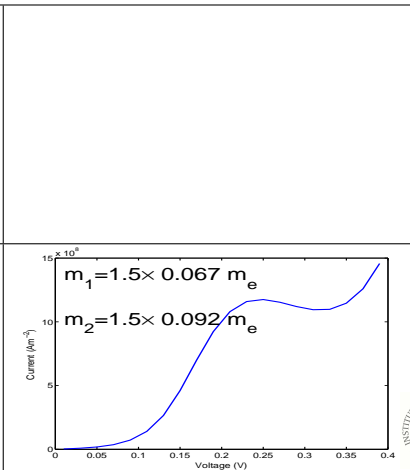
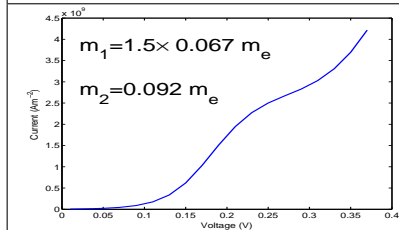
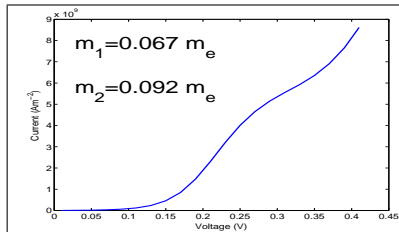
Influence de la masse effective :  $m_1$  (resp.  $m_2$ ) est la masse des électrons à l'extérieur (resp. intérieur) des barrières.



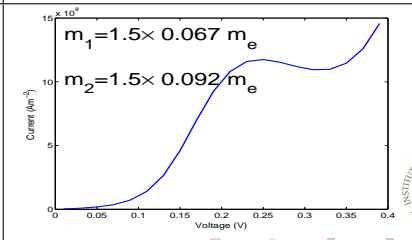
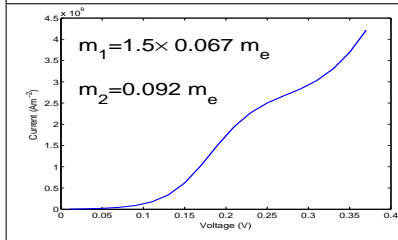
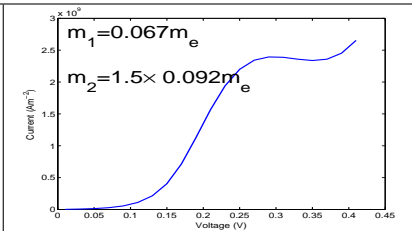
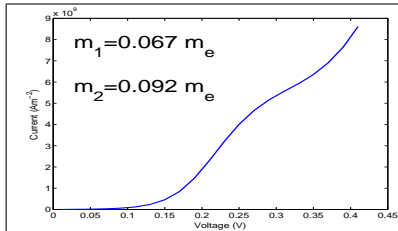
Influence de la masse effective :  $m_1$  (resp.  $m_2$ ) est la masse des électrons à l'extérieur (resp. intérieur) des barrières.



Influence de la masse effective :  $m_1$  (resp.  $m_2$ ) est la masse des électrons à l'extérieur (resp. intérieur) des barrières.



Influence de la masse effective :  $m_1$  (resp.  $m_2$ ) est la masse des électrons à l'extérieur (resp. intérieur) des barrières.





## Comparaisons avec d'autres modèles

On a aussi comparé le modèle avec d'autres modèles diffusifs

- Density-Gradient [Ancona et al. (1987)]
- Schrödinger-Poisson Drift-Diffusion [Pirovano et al. (2002)].

Résultats publiés dans [Journal on Computational Physics 221 \(2007\)](#).



## Comparaisons avec d'autres modèles

On a aussi comparé le modèle avec d'autres modèles diffusifs

- Density-Gradient [Ancona et al. (1987)]
- Schrödinger-Poisson Drift-Diffusion [Pirovano et al. (2002)].

Résultats publiés dans [Journal on Computational Physics 221 \(2007\)](#).



## Conditions aux Bords Transparentes pour QDD

On veut améliorer la condition  $\nabla\psi_p \cdot \nu = 0$ , on se place en 1D.

### Hypothèse

On suppose que dans les réservoirs d'électrons

$A(x) = A_0 = \log(n_0) - \log(n_0^d)$  où  $n_0^d$  est la densité des ions dopants à droite et à gauche du domaine  $\Omega = [0, 1]$  et  $n_0 = (2\pi\hbar^2)^{1/2}$  est la densité d'état.

Conditions obtenues sur les fonctions propres généralisées  $\psi_p$

$$\begin{aligned} \hbar\psi_p'(1) + ip\psi_p(1) &= 2ip \quad ; \quad \hbar\psi_p'(0) = ip\psi_p(0) \quad \text{pour } p < 0, \\ \hbar\psi_p'(0) + ip\psi_p(0) &= 2ip \quad ; \quad \hbar\psi_p'(1) = ip\psi_p(1) \quad \text{pour } p > 0, \end{aligned}$$

où  $\psi_p$  est solution de  $-\frac{\hbar^2}{2}\psi_p'' + A\psi_p = \left(\frac{p^2}{2} + A_0\right)\psi_p$ .

## Conditions aux Bords Transparentes pour QDD

On veut améliorer la condition  $\nabla\psi_p \cdot \nu = 0$ , on se place en 1D.

### Hypothèse

On suppose que dans les réservoirs d'électrons

$A(x) = A_0 = \log(n_0) - \log(n_0^d)$  où  $n_0^d$  est la densité des ions dopants à droite et à gauche du domaine  $\Omega = [0, 1]$  et  $n_0 = (2\pi\hbar^2)^{1/2}$  est la densité d'état.

### Conditions obtenues sur les fonctions propres généralisées $\psi_p$

$$\hbar\psi_p'(1) + ip\psi_p(1) = 2ip \quad ; \quad \hbar\psi_p'(0) = ip\psi_p(0) \quad \text{pour } p < 0,$$

$$\hbar\psi_p'(0) + ip\psi_p(0) = 2ip \quad ; \quad \hbar\psi_p'(1) = ip\psi_p(1) \quad \text{pour } p > 0,$$

où  $\psi_p$  est solution de 
$$-\frac{\hbar^2}{2}\psi_p'' + A\psi_p = \left(\frac{p^2}{2} + A_0\right)\psi_p.$$

## Conditions aux Bords Transparentes pour QDD (suite)

$$n = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{p^2}{2} - A_0\right) |\psi_p|^2 \frac{dp}{2\pi\hbar} + \sum_{\lambda_k < A_0} \exp(-\lambda_k) |\psi_k|^2.$$

- **Remarque** : On a maintenant un problème aux valeurs propres à résoudre ET une infinité d'équations de type Schrödinger stationnaire à résoudre  $\Rightarrow$  Runge Kutta.
- On résout le problème stationnaire (QDD+Poisson) avec **Gummel** (algorithme classique pour Schrödinger-Poisson).
- On résout le modèle instationnaire avec Newton (nouveau à notre connaissance), nécessité de dériver le spectre continu par rapport au potentiel  $A$ . On a utilisé pour cela formellement des outils de la théorie du scattering.



## Conditions aux Bords Transparentes pour QDD (suite)

$$n = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{p^2}{2} - A_0\right) |\psi_p|^2 \frac{dp}{2\pi\hbar} + \sum_{\lambda_k < A_0} \exp(-\lambda_k) |\psi_k|^2.$$

- **Remarque** : On a maintenant un problème aux valeurs propres à résoudre ET une infinité d'équations de type Schrödinger stationnaire à résoudre  $\Rightarrow$  Runge Kutta.
- On résout le problème stationnaire (QDD+Poisson) avec **Gummel** (algorithme classique pour Schrödinger-Poisson).
- On résout le modèle instationnaire avec Newton (nouveau à notre connaissance), nécessité de dériver le spectre continu par rapport au potentiel  $A$ . On a utilisé pour cela formellement des outils de la théorie du scattering.



## Conditions aux Bords Transparentes pour QDD (suite)

$$n = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{p^2}{2} - A_0\right) |\psi_p|^2 \frac{dp}{2\pi\hbar} + \sum_{\lambda_k < A_0} \exp(-\lambda_k) |\psi_k|^2.$$

- **Remarque** : On a maintenant un problème aux valeurs propres à résoudre ET une infinité d'équations de type Schrödinger stationnaire à résoudre  $\Rightarrow$  Runge Kutta.
- On résout le problème stationnaire (QDD+Poisson) avec **Gummel** (algorithme classique pour Schrödinger-Poisson).
- On résout le modèle instationnaire avec Newton (nouveau à notre connaissance), nécessité de dériver le spectre continu par rapport au potentiel  $A$ . On a utilisé pour cela formellement des outils de la théorie du scattering.



## Conditions aux Bords Transparentes pour QDD (suite)

$$n = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{p^2}{2} - A_0\right) |\psi_p|^2 \frac{dp}{2\pi\hbar} + \sum_{\lambda_k < A_0} \exp(-\lambda_k) |\psi_k|^2.$$

- **Remarque** : On a maintenant un problème aux valeurs propres à résoudre ET une infinité d'équations de type Schrödinger stationnaire à résoudre  $\Rightarrow$  Runge Kutta.
- On résout le problème stationnaire (QDD+Poisson) avec **Gummel** (algorithme classique pour Schrödinger-Poisson).
- On résout le modèle instationnaire avec Newton (nouveau à notre connaissance), nécessité de dériver le spectre continu par rapport au potentiel  $A$ . On a utilisé pour cela formellement des outils de la théorie du scattering.





# Plan

- 1 Introduction
  - Quelques Modèles de Transport de Particules
  - Modèle Fluide Quantique pour Une Particule : Madelung
  - Modèles Fluides Quantiques pour Plusieurs Particules
- 2 Dérive-Diffusion Quantique (QDD)
  - QDD en domaine fermé : présentation et schémas
  - QDD en domaine ouvert : simulations numériques et prise en compte du spectre continu
- 3 Euler Quantique Isotherme
  - Présentation du modèle et simplifications
  - Limites asymptotiques et simulations numériques
- 4 Conclusion
  - Résumé
  - A Propos des Modèles Non Isothermes
  - Perspectives



## Présentation du Modèle : $T$ température fixe

$$\partial_t n + \nabla \cdot nu = 0,$$



## Présentation du Modèle : $T$ température fixe

$$\begin{aligned}\partial_t n + \nabla \cdot nu &= 0, \\ \partial_t(nu) + \nabla \cdot \Pi + n\nabla V &= -\frac{nu}{\tau},\end{aligned}$$



## Présentation du Modèle : $T$ température fixe

$$\begin{aligned}\partial_t n + \nabla \cdot nu &= 0, \\ \partial_t(nu) + \nabla \cdot \Pi + n\nabla V &= -\frac{nu}{\tau},\end{aligned}$$

Dans le cas **Classique**, on aurait simplement :  $\Pi = (nu \otimes u) + nT \text{Id}$ ,



## Présentation du Modèle : $T$ température fixe

$$\begin{aligned}\partial_t n + \nabla \cdot nu &= 0, \\ \partial_t(nu) + \nabla \cdot \Pi + n\nabla V &= -\frac{nu}{\tau},\end{aligned}$$

Dans le cas **Classique**, on aurait simplement :  $\Pi = (nu \otimes u) + nT \text{Id}$ ,

Dans le cas **Quantique**, c'est plus complexe et on a :



Présentation du Modèle :  $T$  température fixe

$$\begin{aligned}\partial_t n + \nabla \cdot nu &= 0, \\ \partial_t(nu) + \nabla \cdot \Pi + n\nabla V &= -\frac{nu}{\tau},\end{aligned}$$

Dans le cas **Classique**, on aurait simplement :  $\Pi = (nu \otimes u) + nT \text{Id}$ ,

Dans le cas **Quantique**, c'est plus complexe et on a :

$$\Pi(A, B) = \int p \otimes p \mathcal{E}xp \left( -\frac{1}{T} \left( \frac{1}{2}(p - B)^2 + A \right) \right) \frac{dp}{(2\pi\hbar)^3},$$



Présentation du Modèle :  $T$  température fixe

$$\partial_t n + \nabla \cdot nu = 0,$$

$$\partial_t(nu) + \nabla \cdot \Pi + n\nabla V = -\frac{nu}{\tau},$$

avec  $n(A, B) = \int \mathcal{E}xp \left( -\frac{1}{T} \left( \frac{1}{2}(p - B)^2 + A \right) \right) \frac{dp}{(2\pi\hbar)^3},$

$$\Pi(A, B) = \int p \otimes p \mathcal{E}xp \left( -\frac{1}{T} \left( \frac{1}{2}(p - B)^2 + A \right) \right) \frac{dp}{(2\pi\hbar)^3},$$



Présentation du Modèle :  $T$  température fixe

$$\partial_t n + \nabla \cdot nu = 0,$$

$$\partial_t(nu) + \nabla \cdot \Pi + n\nabla V = -\frac{nu}{\tau},$$

$$\text{avec } n(A, B) = \int \mathcal{E}xp \left( -\frac{1}{T} \left( \frac{1}{2}(p - B)^2 + A \right) \right) \frac{dp}{(2\pi\hbar)^3},$$

$$(nu)(A, B) = \int p \mathcal{E}xp \left( -\frac{1}{T} \left( \frac{1}{2}(p - B)^2 + A \right) \right) \frac{dp}{(2\pi\hbar)^3},$$

$$\Pi(A, B) = \int p \otimes p \mathcal{E}xp \left( -\frac{1}{T} \left( \frac{1}{2}(p - B)^2 + A \right) \right) \frac{dp}{(2\pi\hbar)^3},$$





Présentation du Modèle :  $T$  température fixe

$$\partial_t n + \nabla \cdot nu = 0,$$

$$\partial_t(nu) + \nabla \cdot \Pi + n \nabla V = -\frac{nu}{\tau},$$

$$\text{avec } n(A, B) = \int \mathcal{E}xp \left( -\frac{1}{T} \left( \frac{1}{2}(p - B)^2 + A \right) \right) \frac{dp}{(2\pi\hbar)^3},$$

$$(nu)(A, B) = \int p \mathcal{E}xp \left( -\frac{1}{T} \left( \frac{1}{2}(p - B)^2 + A \right) \right) \frac{dp}{(2\pi\hbar)^3},$$

$$\Pi(A, B) = \int p \otimes p \mathcal{E}xp \left( -\frac{1}{T} \left( \frac{1}{2}(p - B)^2 + A \right) \right) \frac{dp}{(2\pi\hbar)^3},$$

$$\text{Hyp : } H(A, B) = W^{-1} \left( \frac{1}{2}(p - B)^2 + A \right) = \frac{1}{2} (-i\hbar\nabla - B)^2 + A$$

a un spectre discret  $(\lambda_p(A, B), \psi_p(A, B))$



Présentation du Modèle :  $T$  température fixe

$$\partial_t n + \nabla \cdot nu = 0,$$

$$\partial_t(nu) + \nabla \cdot \Pi + n \nabla V = -\frac{nu}{\tau},$$

$$\text{avec } n(A, B) = \sum_{p \in \mathbb{N}} \exp\left(-\frac{\lambda_p(A, B)}{T}\right) |\psi_p(A, B)|^2,$$

Hyp :  $H(A, B) = W^{-1} \left( \frac{1}{2}(p - B)^2 + A \right) = \frac{1}{2} (-i\hbar \nabla - B)^2 + A$   
a un spectre discret  $(\lambda_p(A, B), \psi_p(A, B))$



Présentation du Modèle :  $T$  température fixe

$$\partial_t n + \nabla \cdot nu = 0,$$

$$\partial_t(nu) + \nabla \cdot \Pi + n \nabla V = -\frac{nu}{\tau},$$

$$\text{avec } n(A, B) = \sum_{p \in \mathbb{N}} \exp\left(-\frac{\lambda_p(A, B)}{T}\right) |\psi_p(A, B)|^2,$$

$$(nu)(A, B) = \hbar \sum_{p \in \mathbb{N}} \exp\left(-\frac{\lambda_p(A, B)}{T}\right) \text{Im} \left( \nabla \psi_p(A, B) \overline{\psi_p(A, B)} \right),$$

$$\text{Hyp : } H(A, B) = W^{-1} \left( \frac{1}{2}(p - B)^2 + A \right) = \frac{1}{2} (-i\hbar \nabla - B)^2 + A$$

a un spectre discret  $(\lambda_p(A, B), \psi_p(A, B))$



## Présentation du Modèle : $T$ température fixe

$$\partial_t n + \nabla \cdot nu = 0,$$

$$\partial_t(nu) + \nabla \cdot \Pi + n \nabla V = -\frac{nu}{\tau},$$

avec  $n(A, B) = \sum_{p \in \mathbb{N}} \exp\left(-\frac{\lambda_p(A, B)}{T}\right) |\psi_p(A, B)|^2,$

$$(nu)(A, B) = \hbar \sum_{p \in \mathbb{N}} \exp\left(-\frac{\lambda_p(A, B)}{T}\right) \operatorname{Im} \left( \nabla \psi_p(A, B) \overline{\psi_p(A, B)} \right),$$

$$\Pi(A, B) = \frac{\hbar^2}{2} \sum_{p \in \mathbb{N}} \exp\left(-\frac{\lambda_p}{T}\right) \operatorname{Re} \left( \nabla \psi_p \otimes \nabla \overline{\psi_p} - \overline{\psi_p} \nabla \otimes \nabla \psi_p \right),$$

Hyp :  $H(A, B) = W^{-1} \left( \frac{1}{2}(p - B)^2 + A \right) = \frac{1}{2} (-i\hbar \nabla - B)^2 + A$

a un spectre discret  $(\lambda_p(A, B), \psi_p(A, B))$



## Simplifications du Modèle

$$\partial_t n + \nabla \cdot nu = 0,$$

$$\partial_t(nu) + \nabla \cdot \Pi + n \nabla V = -\frac{nu}{\tau},$$

avec  $n(A, B) = \sum_{p \in \mathbb{N}} \exp\left(-\frac{\lambda_p(A, B)}{T}\right) |\psi_p(A, B)|^2,$

$$(nu)(A, B) = \hbar \sum_{p \in \mathbb{N}} \exp\left(-\frac{\lambda_p(A, B)}{T}\right) \operatorname{Im} \left( \nabla \psi_p(A, B) \overline{\psi_p(A, B)} \right),$$

$$\Pi(A, B) = \frac{\hbar^2}{2} \sum_{p \in \mathbb{N}} \exp\left(-\frac{\lambda_p}{T}\right) \operatorname{Re} \left( \nabla \psi_p \otimes \nabla \overline{\psi_p} - \overline{\psi_p} \nabla \otimes \nabla \psi_p \right),$$

Hyp :  $H(A, B) = W^{-1} \left( \frac{1}{2}(p - B)^2 + A \right) = \frac{1}{2} (-i\hbar \nabla - B)^2 + A$

a un spectre discret  $(\lambda_p(A, B), \psi_p(A, B))$



## Simplifications du Modèle

$$\partial_t n + \nabla \cdot nu = 0,$$

$$\partial_t(nu) + \nabla \cdot \Pi + n \nabla V = -\frac{nu}{\tau},$$

avec  $n(A, B) = \sum_{p \in \mathbb{N}} \exp\left(-\frac{\lambda_p(A, B)}{T}\right) |\psi_p(A, B)|^2,$

$$(nu)(A, B) = \hbar \sum_{p \in \mathbb{N}} \exp\left(-\frac{\lambda_p(A, B)}{T}\right) \operatorname{Im} \left( \nabla \psi_p(A, B) \overline{\psi_p(A, B)} \right),$$

$$\Pi(A, B) = \frac{\hbar^2}{2} \sum_{p \in \mathbb{N}} \exp\left(-\frac{\lambda_p}{T}\right) \operatorname{Re} \left( \nabla \psi_p \otimes \nabla \overline{\psi_p} - \overline{\psi_p} \nabla \otimes \nabla \psi_p \right),$$

Hyp :  $H(A, B) = W^{-1} \left( \frac{1}{2}(p - B)^2 + A \right) = \frac{1}{2} (-i\hbar \nabla - B)^2 + A$

a un spectre discret  $(\lambda_p(A, B), \psi_p(A, B))$



## Simplifications du Modèle

$$\partial_t n + \nabla \cdot nu = 0,$$

$$\partial_t(nu) + \nabla \cdot (nu \otimes B) + n(\nabla B) \cdot (u - B) + n\nabla(V - A) = -\frac{nu}{\tau},$$

$$\text{avec } n(A, B) = \sum_{p \in \mathbb{N}} \exp\left(-\frac{\lambda_p(A, B)}{T}\right) |\psi_p(A, B)|^2,$$

$$(nu)(A, B) = \hbar \sum_{p \in \mathbb{N}} \exp\left(-\frac{\lambda_p(A, B)}{T}\right) \operatorname{Im} \left( \nabla \psi_p(A, B) \overline{\psi_p(A, B)} \right),$$

$$\Pi(A, B) = \frac{\hbar^2}{2} \sum_{p \in \mathbb{N}} \exp\left(-\frac{\lambda_p}{T}\right) \operatorname{Re} \left( \nabla \psi_p \otimes \nabla \overline{\psi_p} - \overline{\psi_p} \nabla \otimes \nabla \psi_p \right),$$

$$\text{Hyp : } H(A, B) = W^{-1} \left( \frac{1}{2}(p - B)^2 + A \right) = \frac{1}{2} (-i\hbar \nabla - B)^2 + A$$

a un spectre discret  $(\lambda_p(A, B), \psi_p(A, B))$

## Simplifications du Modèle

$$\partial_t n + \nabla \cdot nu = 0,$$

$$\partial_t(nu) + \nabla \cdot (nu \otimes B) + n(\nabla B) \cdot (u - B) + n\nabla(V - A) = -\frac{nu}{\tau},$$

$$\text{avec } n(A, B) = \sum_{p \in \mathbb{N}} \exp\left(-\frac{\lambda_p(A, B)}{T}\right) |\psi_p(A, B)|^2,$$

$nu = nB$  pour les écoulements irrotationnels ( $\nabla \times u = 0$ )

$$\cancel{\Pi(A, B)} = \frac{\hbar^2}{2} \sum_{p \in \mathbb{N}} \exp\left(-\frac{\lambda_p}{T}\right) \operatorname{Re}(\nabla \psi_p \otimes \nabla \bar{\psi}_p - \bar{\psi}_p \nabla \otimes \nabla \psi_p),$$

$$\text{Hyp : } H(A, B) = W^{-1} \left( \frac{1}{2}(p - B)^2 + A \right) = \frac{1}{2}(-i\hbar \nabla - B)^2 + A$$

a un spectre discret ( $\lambda_p(A, B), \psi_p(A, B)$ )





## Simplifications du Modèle

$$\partial_t n + \nabla \cdot nu = 0,$$

$$\partial_t(nu) + \nabla \cdot (nu \otimes u) + \cancel{n(\nabla B) \cdot (u - B)} + n\nabla(V - A) = -\frac{nu}{\tau},$$

$$\text{avec } n(A, B) = \sum_{p \in \mathbb{N}} \exp\left(-\frac{\lambda_p(A, B)}{T}\right) |\psi_p(A, B)|^2,$$

$nu = nB$  pour les écoulements irrotationnels ( $\nabla \times u = 0$ )

$$\cancel{\Pi(A, B)} = \frac{\hbar^2}{2} \sum_{p \in \mathbb{N}} \exp\left(-\frac{\lambda_p}{T}\right) \operatorname{Re}(\nabla \psi_p \otimes \nabla \bar{\psi}_p - \bar{\psi}_p \nabla \otimes \nabla \psi_p),$$

$$\text{Hyp : } H(A, B) = W^{-1} \left( \frac{1}{2}(p - B)^2 + A \right) = \frac{1}{2}(-i\hbar\nabla - B)^2 + A$$

a un spectre discret ( $\lambda_p(A, B), \psi_p(A, B)$ )



## Simplifications du Modèle

$$\partial_t n + \nabla \cdot nu = 0,$$

$$\partial_t(nu) + \nabla \cdot (nu \otimes u) + \cancel{n(\nabla B) \cdot (u - B)} + n \nabla(V - A) = -\frac{nu}{\tau},$$

$$\text{avec } n(A, \cancel{B}) = \sum_{p \in \mathbb{N}} \exp\left(-\frac{\lambda_p(A, \cancel{B})}{T}\right) |\psi_p(A, \cancel{B})|^2,$$

$nu = nB$  pour les écoulements irrotationnels ( $\nabla \times u = 0$ )

$$\cancel{\Pi(A, B)} = \frac{\hbar^2}{2} \sum_{p \in \mathbb{N}} \exp\left(-\frac{\lambda_p}{T}\right) \operatorname{Re}(\nabla \psi_p \otimes \nabla \bar{\psi}_p - \bar{\psi}_p \nabla \otimes \nabla \psi_p),$$

$$\text{Hyp : } H(A, \cancel{B}) = W^{-1} \left( \frac{1}{2} (p - \cancel{B})^2 + A \right) = \frac{1}{2} (-i\hbar \nabla - \cancel{B})^2 + A$$

a un spectre discret ( $\lambda_p(A, \cancel{B}), \psi_p(A, \cancel{B})$ )



## Écoulements Irrotationnels : résumé

$$\partial_t n + \nabla \cdot nu = 0,$$

$$\partial_t(nu) + \nabla \cdot (nu \otimes u) + n\nabla(V - A) = -\frac{nu}{\tau},$$

$$\text{avec } n(A, 0) = \sum_{p \in \mathbb{N}} \exp\left(-\frac{\lambda_p(A, 0)}{T}\right) |\psi_p(A)|^2,$$

et  $(\lambda_p(A, 0), \psi_p(A, 0))_{p \in \mathbb{N}}$  éléments propres de  $H(A, 0) = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta + A$ .

### Avantages

- On s'est débarrassé de  $B$ .
- On a plus que le lien non local entre  $A$  et  $n$ .
- Cas particulier : 1D.
- Ces simplifications nous ont permis de proposer un schéma numérique en s'inspirant du schéma proposé pour QDD.

## Écoulements Irrotationnels : résumé

$$\partial_t n + \nabla \cdot nu = 0,$$

$$\partial_t(nu) + \nabla \cdot (nu \otimes u) + n\nabla(V - A) = -\frac{nu}{\tau},$$

$$\text{avec } n(A, 0) = \sum_{p \in \mathbb{N}} \exp\left(-\frac{\lambda_p(A, 0)}{T}\right) |\psi_p(A)|^2,$$

et  $(\lambda_p(A, 0), \psi_p(A, 0))_{p \in \mathbb{N}}$  éléments propres de  $H(A, 0) = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta + A$ .

### Avantages

- On s'est débarrassé de  $B$ .
- On a plus que le lien non local entre  $A$  et  $n$ .
- Cas particulier : 1D.
- Ces simplifications nous ont permis de proposer un schéma numérique en s'inspirant du schéma proposé pour QDD.

## Écoulements Irrotationnels : résumé

$$\partial_t n + \nabla \cdot nu = 0,$$

$$\partial_t(nu) + \nabla \cdot (nu \otimes u) + n\nabla(V - A) = -\frac{nu}{\tau},$$

$$\text{avec } n(A, 0) = \sum_{p \in \mathbb{N}} \exp\left(-\frac{\lambda_p(A, 0)}{T}\right) |\psi_p(A)|^2,$$

et  $(\lambda_p(A, 0), \psi_p(A, 0))_{p \in \mathbb{N}}$  éléments propres de  $H(A, 0) = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta + A$ .

### Avantages

- On s'est débarrassé de  $B$ .
- On a plus que le lien non local entre  $A$  et  $n$ .
- Cas particulier : 1D.
- Ces simplifications nous ont permis de proposer un schéma numérique en s'inspirant du schéma proposé pour QDD.

## Écoulements Irrotationnels : résumé

$$\partial_t n + \nabla \cdot nu = 0,$$

$$\partial_t(nu) + \nabla \cdot (nu \otimes u) + n\nabla(V - A) = -\frac{nu}{\tau},$$

$$\text{avec } n(A, 0) = \sum_{p \in \mathbb{N}} \exp\left(-\frac{\lambda_p(A, 0)}{T}\right) |\psi_p(A)|^2,$$

et  $(\lambda_p(A, 0), \psi_p(A, 0))_{p \in \mathbb{N}}$  éléments propres de  $H(A, 0) = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta + A$ .

### Avantages

- On s'est débarrassé de  $B$ .
- On a plus que le lien non local entre  $A$  et  $n$ .
- Cas particulier : 1D.
- Ces simplifications nous ont permis de proposer un schéma numérique en s'inspirant du schéma proposé pour QDD.

## Écoulements Irrotationnels : résumé

$$\partial_t n + \nabla \cdot nu = 0,$$

$$\partial_t(nu) + \nabla \cdot (nu \otimes u) + n\nabla(V - A) = -\frac{nu}{\tau},$$

$$\text{avec } n(A, 0) = \sum_{p \in \mathbb{N}} \exp\left(-\frac{\lambda_p(A, 0)}{T}\right) |\psi_p(A)|^2,$$

et  $(\lambda_p(A, 0), \psi_p(A, 0))_{p \in \mathbb{N}}$  éléments propres de  $H(A, 0) = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta + A$ .

### Avantages

- On s'est débarrassé de  $B$ .
- On a plus que le lien non local entre  $A$  et  $n$ .
- Cas particulier : 1D.
- Ces simplifications nous ont permis de proposer un schéma numérique en s'inspirant du schéma proposé pour QDD.

## Limites asymptotiques

On a montré formellement 3 limites :

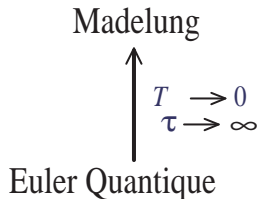
Euler Quantique





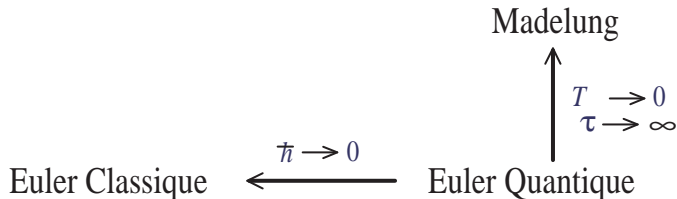
## Limites asymptotiques

On a montré formellement 3 limites :



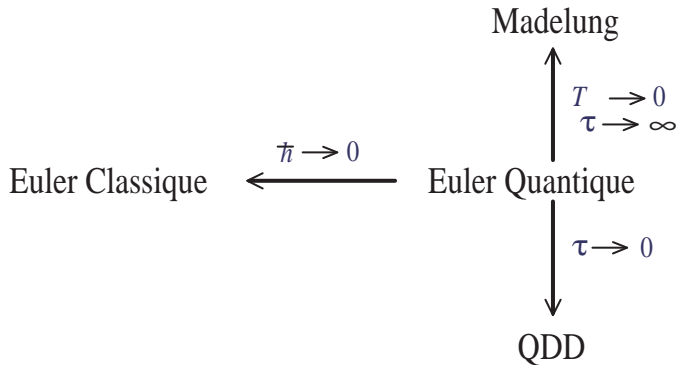
## Limites asymptotiques

On a montré formellement 3 limites :



## Limites asymptotiques

On a montré formellement 3 limites :



Limite Température nulle ( $\tau \rightarrow \infty, T \rightarrow 0$ )

$$\partial_t n + \nabla \cdot nu = 0,$$

$$\partial_t(nu) + \nabla \cdot (nu \otimes B) + n(\nabla B) \cdot (u - B) + n\nabla(V - A) = -\frac{nu}{\tau},$$

On peut montrer formellement que les facteurs d'occupation vérifient

$$\lim_{T \rightarrow 0} \exp\left(-\frac{\lambda_1}{T}\right) = 1 \quad ; \quad \lim_{T \rightarrow 0} \exp\left(-\frac{\lambda_p}{T}\right) = 0 \quad \forall p > 1.$$

L'état du système est alors décrit par la première fonction propre  $\psi_1$  qui minimise  $(H(A, B)\psi, \psi)_{L^2}$  sous contrainte que  $\|\psi\|_{L^2} = 1$ . Les équations d'Euler-Lagrange sont données par :

$$A = \frac{\hbar^2}{2} \frac{\Delta\sqrt{n}}{\sqrt{n}} - Cte, \quad B = u.$$



Limite Température nulle ( $\tau \rightarrow \infty, T \rightarrow 0$ )

$$\partial_t n + \nabla \cdot nu = 0,$$

$$\partial_t(nu) + \nabla \cdot (nu \otimes B) + n(\nabla B) \cdot (u - B) + n\nabla(V - A) = -\frac{nu}{\tau},$$

On peut montrer formellement que les facteurs d'occupation vérifient

$$\lim_{T \rightarrow 0} \exp\left(-\frac{\lambda_1}{T}\right) = 1 \quad ; \quad \lim_{T \rightarrow 0} \exp\left(-\frac{\lambda_p}{T}\right) = 0 \quad \forall p > 1.$$

L'état du système est alors décrit par la première fonction propre  $\psi_1$  qui minimise  $(H(A, B)\psi, \psi)_{L^2}$  sous contrainte que  $\|\psi\|_{L^2} = 1$ . Les équations d'Euler-Lagrange sont données par :

$$A = \frac{\hbar^2}{2} \frac{\Delta\sqrt{n}}{\sqrt{n}} - Cte, \quad B = u.$$



Limite Température nulle ( $\tau \rightarrow \infty, T \rightarrow 0$ )

$$\partial_t n + \nabla \cdot nu = 0,$$

$$\partial_t(nu) + \nabla \cdot (nu \otimes B) + n(\nabla B) \cdot (u - B) + n\nabla(V - A) = -\frac{nu}{\tau},$$

On peut montrer formellement que les facteurs d'occupation vérifient

$$\lim_{T \rightarrow 0} \exp\left(-\frac{\lambda_1}{T}\right) = 1 \quad ; \quad \lim_{T \rightarrow 0} \exp\left(-\frac{\lambda_p}{T}\right) = 0 \quad \forall p > 1.$$

L'état du système est alors décrit par la première fonction propre  $\psi_1$  qui minimise  $(H(A, B)\psi, \psi)_{L^2}$  sous contrainte que  $\|\psi\|_{L^2} = 1$ . Les équations d'Euler-Lagrange sont données par :

$$A = \frac{\hbar^2}{2} \frac{\Delta\sqrt{n}}{\sqrt{n}} - Cte, \quad B = u.$$



Limite Température nulle ( $\tau \rightarrow \infty, T \rightarrow 0$ )

$$\partial_t n + \nabla \cdot nu = 0,$$

$$\partial_t(nu) + \nabla \cdot (nu \otimes u) + \cancel{n(\nabla B) \cdot (u - B)} + n \nabla \left( V - \frac{\hbar^2}{2} \frac{\Delta \sqrt{n}}{\sqrt{n}} \right) = 0,$$

On peut montrer formellement que les facteurs d'occupation vérifient

$$\lim_{T \rightarrow 0} \exp\left(-\frac{\lambda_1}{T}\right) = 1 \quad ; \quad \lim_{T \rightarrow 0} \exp\left(-\frac{\lambda_p}{T}\right) = 0 \quad \forall p > 1.$$

L'état du système est alors décrit par la première fonction propre  $\psi_1$  qui minimise  $(H(A, B)\psi, \psi)_{L^2}$  sous contrainte que  $\|\psi\|_{L^2} = 1$ . Les équations d'Euler-Lagrange sont données par :

$$A = \frac{\hbar^2}{2} \frac{\Delta \sqrt{n}}{\sqrt{n}} - Cte, \quad B = u.$$



## Limite semi-classique ( $\hbar \rightarrow 0$ )

$$\partial_t n + \nabla \cdot nu = 0,$$

$$\partial_t(nu) + \nabla \cdot (nu \otimes B) + n(\nabla B) \cdot (u - B) + n\nabla(V - A) = -\frac{nu}{\tau},$$





Limite semi-classique ( $\hbar \rightarrow 0$ )

$$\partial_t n + \nabla \cdot nu = 0,$$

$$\partial_t(nu) + \nabla \cdot (nu \otimes B) + n(\nabla B) \cdot (u - B) + n\nabla(V - A) = -\frac{nu}{\tau},$$

Grâce à un **développement** en  $\hbar$  de  $\mathcal{E}xp$ , il est possible d'obtenir les développements suivants :

$$A = T \ln n_0 - T \ln n + \frac{\hbar^2}{6} \frac{\Delta \sqrt{n}}{\sqrt{n}} - \frac{\hbar^2}{24} |\omega|^2 + \mathcal{O}(\hbar^2),$$

$$nB = nu + \frac{\hbar^2}{12} \nabla \times (n\omega) + \mathcal{O}(\hbar^2),$$

avec  $n_0 = \left(\frac{T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}$  et  $\omega = \nabla \times u$ .



## Limite semi-classique ( $\hbar \rightarrow 0$ )

$$\partial_t n + \nabla \cdot nu = 0,$$

$$\begin{aligned} \partial_t(nu) + \nabla \cdot (nu \otimes u) + T\nabla n + n\nabla(V - \frac{\hbar^2}{6} \frac{\Delta\sqrt{n}}{\sqrt{n}}) + \\ + \frac{\hbar^2}{12} \omega \times (\nabla \times n\omega) + \frac{\hbar^2}{24} n\nabla|\omega|^2 = -\frac{nu}{\tau} + \mathcal{O}(\hbar^2). \end{aligned}$$

Grâce à un **développement** en  $\hbar$  de  $\mathcal{E}xp$ , il est possible d'obtenir les développements suivants :

$$A = T \ln n_0 - T \ln n + \frac{\hbar^2}{6} \frac{\Delta\sqrt{n}}{\sqrt{n}} - \frac{\hbar^2}{24} |\omega|^2 + \mathcal{O}(\hbar^2),$$

$$nB = nu + \frac{\hbar^2}{12} \nabla \times (n\omega) + \mathcal{O}(\hbar^2),$$

avec  $n_0 = \left(\frac{T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}$  et  $\omega = \nabla \times u$ .



Limite semi-classique ( $\hbar \rightarrow 0$ )

$$\partial_t n + \nabla \cdot nu = 0,$$

$$\begin{aligned} \partial_t(nu) + \nabla \cdot (nu \otimes u) + T\nabla n + n\nabla(V - \frac{\hbar^2}{6} \frac{\Delta\sqrt{n}}{\sqrt{n}}) + \\ + \frac{\hbar^2}{12} \omega \times (\nabla \times n\omega) + \frac{\hbar^2}{24} n\nabla|\omega|^2 = -\frac{nu}{\tau} + \mathcal{O}(\hbar^4). \end{aligned}$$

Grâce à un **développement** en  $\hbar$  de  $\mathcal{E}_{xp}$ , il est possible d'obtenir les développements suivants :

$$A = T \ln n_0 - T \ln n + \frac{\hbar^2}{6} \frac{\Delta\sqrt{n}}{\sqrt{n}} - \frac{\hbar^2}{24} |\omega|^2 + \mathcal{O}(\hbar^4),$$

$$nB = nu + \frac{\hbar^2}{12} \nabla \times (n\omega) + \mathcal{O}(\hbar^4),$$

avec  $n_0 = \left(\frac{T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}$  et  $\omega = \nabla \times u$ .



## Limite semi-classique ( $\hbar \rightarrow 0$ )

$$\partial_t n + \nabla \cdot nu = 0,$$

$$\partial_t(nu) + \nabla \cdot (nu \otimes u) + T\nabla n + n\nabla(V - \frac{\hbar^2}{6} \frac{\Delta\sqrt{n}}{\sqrt{n}}) +$$

$$+ \frac{\hbar^2}{12} \omega \times (\nabla \times n\omega) + \frac{\hbar^2}{24} n \nabla |\omega|^2 = -\frac{nu}{\tau} + \mathcal{O}(\hbar^4).$$

Grâce à un **développements** en  $\hbar$  de  $\mathcal{E}_{xp}$ , il est possible d'obtenir les développements suivants :

$$A = T \ln n_0 - T \ln n + \frac{\hbar^2}{6} \frac{\Delta\sqrt{n}}{\sqrt{n}} - \frac{\hbar^2}{24} |\omega|^2 + \mathcal{O}(\hbar^4),$$

$$nB = nu + \frac{\hbar^2}{12} \nabla \times (n\omega) + \mathcal{O}(\hbar^4),$$

avec  $n_0 = \left(\frac{T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}$  et  $\omega = \nabla \times u$ .



Limite diffusive ( $\tau \rightarrow 0$ )

$$\partial_t n + \nabla \cdot nu = 0,$$

$$\partial_t(nu) + \nabla \cdot (nu \otimes B) + n(\nabla B) \cdot (u - B) + n\nabla(V - A) = -\frac{nu}{\tau},$$

$$\text{avec } n(A, B) = \sum_{p \in \mathbb{N}} \exp\left(-\frac{\lambda_p(A, B)}{T}\right) |\psi_p(A, B)|^2,$$

$$(nu)(A, B) = \hbar \sum_{p \in \mathbb{N}} \exp\left(-\frac{\lambda_p(A, B)}{T}\right) \text{Im} \left( \nabla \psi_p(A, B) \overline{\psi_p(A, B)} \right),$$

- On opère d'abord un **rescaling du temps** :  $t' = \tau t$ .
- On multiplie la 2ème eq. par  $\tau$  pour voir que  $nu = \mathcal{O}(\tau)$ .
- Puisqu'à la limite le fluide est irrotationnel, on a aussi  $B = \mathcal{O}(\tau)$ .
- A la limite  $\tau \rightarrow 0$ , on retrouve QDD en notant  $j = \frac{nu}{\tau}$ .



Limite diffusive ( $\tau \rightarrow 0$ )

$$\tau \partial_t n + \nabla \cdot nu = 0,$$

$$\tau \partial_t (nu) + \nabla \cdot (nu \otimes B) + n(\nabla B) \cdot (u - B) + n \nabla (V - A) = -\frac{nu}{\tau},$$

$$\text{avec } n(A, B) = \sum_{p \in \mathbb{N}} \exp\left(-\frac{\lambda_p(A, B)}{T}\right) |\psi_p(A, B)|^2,$$

$$(nu)(A, B) = \hbar \sum_{p \in \mathbb{N}} \exp\left(-\frac{\lambda_p(A, B)}{T}\right) \text{Im} \left( \nabla \psi_p(A, B) \overline{\psi_p(A, B)} \right),$$

- On opère d'abord un **rescaling du temps** :  $t' = \tau t$ .
- On multiplie la 2ème eq. par  $\tau$  pour voir que  $nu = \mathcal{O}(\tau)$ .
- Puisqu'à la limite le fluide est irrotationnel, on a aussi  $B = \mathcal{O}(\tau)$ .
- A la limite  $\tau \rightarrow 0$ , on retrouve QDD en notant  $j = \frac{nu}{\tau}$ .



Limite diffusive ( $\tau \rightarrow 0$ )

$$\tau \partial_t n + \nabla \cdot nu = 0,$$

$$\tau \partial_t (nu) + \nabla \cdot (nu \otimes B) + n(\nabla B) \cdot (u - B) + n \nabla (V - A) = -\frac{nu}{\tau},$$

$$\text{avec } n(A, B) = \sum_{p \in \mathbb{N}} \exp\left(-\frac{\lambda_p(A, B)}{T}\right) |\psi_p(A, B)|^2,$$

$$(nu)(A, B) = \hbar \sum_{p \in \mathbb{N}} \exp\left(-\frac{\lambda_p(A, B)}{T}\right) \text{Im} \left( \nabla \psi_p(A, B) \overline{\psi_p(A, B)} \right),$$

- On opère d'abord un **rescaling du temps** :  $t' = \tau t$ .
- On multiplie la 2ème eq. par  $\tau$  pour voir que  $nu = \mathcal{O}(\tau)$ .
- Puisqu'à la limite le fluide est irrotationnel, on a aussi  $B = \mathcal{O}(\tau)$ .
- A la limite  $\tau \rightarrow 0$ , on retrouve QDD en notant  $j = \frac{nu}{\tau}$ .



Limite diffusive ( $\tau \rightarrow 0$ )

$$\tau \partial_t n + \nabla \cdot nu = 0,$$

$$\tau \partial_t (nu) + \nabla \cdot (nu \otimes B) + n(\nabla B) \cdot (u - B) + n \nabla (V - A) = -\frac{nu}{\tau},$$

$$\text{avec } n(A, B) = \sum_{p \in \mathbb{N}} \exp\left(-\frac{\lambda_p(A, B)}{T}\right) |\psi_p(A, B)|^2,$$

$$(nu)(A, B) = \hbar \sum_{p \in \mathbb{N}} \exp\left(-\frac{\lambda_p(A, B)}{T}\right) \text{Im} \left( \nabla \psi_p(A, B) \overline{\psi_p(A, B)} \right),$$

- On opère d'abord un **rescaling du temps** :  $t' = \tau t$ .
- On multiplie la 2ème eq. par  $\tau$  pour voir que  $nu = \mathcal{O}(\tau)$ .
- Puisqu'à la limite le fluide est irrotationnel, on a aussi  $B = \mathcal{O}(\tau)$ .
- A la limite  $\tau \rightarrow 0$ , on retrouve QDD en notant  $j = \frac{nu}{\tau}$ .





Limite diffusive ( $\tau \rightarrow 0$ )

$$\tau \partial_t n + \nabla \cdot nu = 0,$$

$$\mathcal{O}(\tau^2) + n \nabla(V - A) = -\frac{nu}{\tau},$$

$$\text{avec } n(A, B) = \sum_{p \in \mathbb{N}} \exp\left(-\frac{\lambda_p(A, B)}{T}\right) |\psi_p(A, B)|^2,$$

$$(nu)(A, B) = \hbar \sum_{p \in \mathbb{N}} \exp\left(-\frac{\lambda_p(A, B)}{T}\right) \text{Im} \left( \nabla \psi_p(A, B) \overline{\psi_p(A, B)} \right),$$

- On opère d'abord un **rescaling du temps** :  $t' = \tau t$ .
- On multiplie la 2ème eq. par  $\tau$  pour voir que  $nu = \mathcal{O}(\tau)$ .
- Puisqu'à la limite le fluide est irrotationnel, on a aussi  $B = \mathcal{O}(\tau)$ .
- A la limite  $\tau \rightarrow 0$ , on retrouve QDD en notant  $j = \frac{nu}{\tau}$ .



Limite diffusive ( $\tau \rightarrow 0$ )

$$\partial_t n + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0,$$

$$n \nabla(V - A) = -\mathbf{j},$$

$$\text{avec } n(A, 0) = \sum_{p \in \mathbb{N}} \exp\left(-\frac{\lambda_p(A, 0)}{T}\right) |\psi_p(A, 0)|^2,$$

$$(nu)(A, 0) = 0,$$

- On opère d'abord un **rescaling du temps** :  $t' = \tau t$ .
- On multiplie la 2ème eq. par  $\tau$  pour voir que  $nu = \mathcal{O}(\tau)$ .
- Puisqu'à la limite le fluide est irrotationnel, on a aussi  $B = \mathcal{O}(\tau)$ .
- A la limite  $\tau \rightarrow 0$ , on retrouve QDD en notant  $\mathbf{j} = \frac{nu}{\tau}$ .



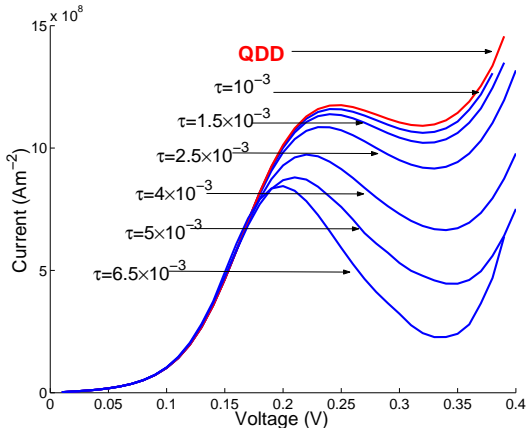
## Illustration de la limite diffusive

Tous ces résultats ont été publiés dans [SIAM Multiscale Modeling and Simulation 6 \(2007\)](#).



## Illustration de la limite diffusive

Tous ces résultats ont été publiés dans *SIAM Multiscale Modeling and Simulation* **6** (2007).



# Limite Semi-classique : Euler Classique vs. Euler Quantique

Euler Classique

Euler Quantique ( $\hbar = 0.2$ )



# Plan

- 1 Introduction
  - Quelques Modèles de Transport de Particules
  - Modèle Fluide Quantique pour Une Particule : Madelung
  - Modèles Fluides Quantiques pour Plusieurs Particules
- 2 Dérive-Diffusion Quantique (QDD)
  - QDD en domaine fermé : présentation et schémas
  - QDD en domaine ouvert : simulations numériques et prise en compte du spectre continu
- 3 Euler Quantique Isotherme
  - Présentation du modèle et simplifications
  - Limites asymptotiques et simulations numériques
- 4 Conclusion
  - Résumé
  - A Propos des Modèles Non Isothermes
  - Perspectives



## Résumé

- On a proposé une discrétisation en temps puis en espace pour le modèle QDD sur un domaine fermé puis ouvert.
- On a pris en compte des conditions transparentes pour le modèle QDD.
- On a effectué des simulations numériques sur une diode à effet tunnel et on a fait des comparaisons avec d'autres modèles.
- On a écrit des simplifications pour le modèle d'Euler Quantique Isotherme puis on l'a discrétisé. Et on a montré les liens qui existent avec d'autres modèles.

### Remarque

Modification des schémas proposés pour QDD et Euler Quantique permettent de simuler leurs homologues classiques en changeant le lien entre  $A$  et  $n$ .



## Résumé

- On a proposé une discrétisation en temps puis en espace pour le modèle QDD sur un domaine fermé puis ouvert.
- On a pris en compte des conditions transparentes pour le modèle QDD.
- On a effectué des simulations numériques sur une diode à effet tunnel et on a fait des comparaisons avec d'autres modèles.
- On a écrit des simplifications pour le modèle d'Euler Quantique Isotherme puis on l'a discrétisé. Et on a montré les liens qui existent avec d'autres modèles.

### Remarque

Modification des schémas proposés pour QDD et Euler Quantique permettent de simuler leurs homologues classiques en changeant le lien entre  $A$  et  $n$ .



## Résumé

- On a proposé une discrétisation en temps puis en espace pour le modèle QDD sur un domaine fermé puis ouvert.
- On a pris en compte des conditions transparentes pour le modèle QDD.
- On a effectué des simulations numériques sur une diode à effet tunnel et on a fait des comparaisons avec d'autres modèles.
- On a écrit des simplifications pour le modèle d'Euler Quantique Isotherme puis on l'a discrétisé. Et on a montré les liens qui existent avec d'autres modèles.

### Remarque

Modification des schémas proposés pour QDD et Euler Quantique permettent de simuler leurs homologues classiques en changeant le lien entre  $A$  et  $n$ .

## Résumé

- On a proposé une discrétisation en temps puis en espace pour le modèle QDD sur un domaine fermé puis ouvert.
- On a pris en compte des conditions transparentes pour le modèle QDD.
- On a effectué des simulations numériques sur une diode à effet tunnel et on a fait des comparaisons avec d'autres modèles.
- On a écrit des simplifications pour le modèle d'Euler Quantique Isotherme puis on l'a discrétisé. Et on a montré les liens qui existent avec d'autres modèles.

### Remarque

Modification des schémas proposés pour QDD et Euler Quantique permettent de simuler leurs homologues classiques en changeant le lien entre  $A$  et  $n$ .



## Résumé

- On a proposé une discrétisation en temps puis en espace pour le modèle QDD sur un domaine fermé puis ouvert.
- On a pris en compte des conditions transparentes pour le modèle QDD.
- On a effectué des simulations numériques sur une diode à effet tunnel et on a fait des comparaisons avec d'autres modèles.
- On a écrit des simplifications pour le modèle d'Euler Quantique Isotherme puis on l'a discrétisé. Et on a montré les liens qui existent avec d'autres modèles.

### Remarque

Modification des schémas proposés pour QDD et Euler Quantique permettent de simuler leurs homologues classiques en changeant le lien entre  $A$  et  $n$ .

## A Propos des Modèles Non Isothermes : QHD et QET

- Contrairement aux modèles isothermes, on ne peut pas écrire les tenseurs de pression ( $\Pi$ ) et les flux d'énergie ( $\Phi$ ) avec des expressions différentielles faisant intervenir  $n, nu, \mathcal{W}$  et  $A, B, C$  (même pour une température faiblement variable).
- On a écrit des contraintes différentielles qui lient les moments ( $n, nu, \mathcal{W}, \Pi, \Phi$ ) aux variables thermodynamiques ( $A, B, C$ ).
- Calculs basés sur des résultats de calculs pseudodifférentiels :

$$[\lambda p^\alpha, \mu p^\beta]_{\hbar} = W \left( \left[ W^{-1} (\lambda p^\alpha), W^{-1} (\mu p^\beta) \right] \right).$$

- On a écrit des simplifications pour les modèles 1D (basées sur des invariances de Jauge).

Résultats publiés dans [Communications in Mathematical Sciences](#) (2007).



# A Propos des Modèles Non Isothermes : QHD et QET

- Contrairement aux modèles isothermes, on ne peut pas écrire les tenseurs de pression ( $\Pi$ ) et les flux d'énergie ( $\Phi$ ) avec des expressions différentielles faisant intervenir  $n, nu, \mathcal{W}$  et  $A, B, C$  (même pour une température faiblement variable).
- On a écrit des contraintes différentielles qui lient les moments ( $n, nu, \mathcal{W}, \Pi, \Phi$ ) aux variables thermodynamiques ( $A, B, C$ ).
- Calculs basés sur des résultats de calculs pseudodifférentiels :

$$[\lambda p^\alpha, \mu p^\beta]_{\hbar} = W \left( \left[ W^{-1} (\lambda p^\alpha), W^{-1} (\mu p^\beta) \right] \right).$$

- On a écrit des simplifications pour les modèles 1D (basées sur des invariances de Jauge).

Résultats publiés dans *Communications in Mathematical Sciences* (2007).



# A Propos des Modèles Non Isothermes : QHD et QET

- Contrairement aux modèles isothermes, on ne peut pas écrire les tenseurs de pression ( $\Pi$ ) et les flux d'énergie ( $\Phi$ ) avec des expressions différentielles faisant intervenir  $n, nu, \mathcal{W}$  et  $A, B, C$  (même pour une température faiblement variable).
- On a écrit des contraintes différentielles qui lient les moments ( $n, nu, \mathcal{W}, \Pi, \Phi$ ) aux variables thermodynamiques ( $A, B, C$ ).
- Calculs basés sur des résultats de calculs pseudodifférentiels :

$$[\lambda p^\alpha, \mu p^\beta]_{\hbar} = W \left( \left[ W^{-1} (\lambda p^\alpha), W^{-1} (\mu p^\beta) \right] \right).$$

- On a écrit des simplifications pour les modèles 1D (basées sur des invariances de Jauge).

Résultats publiés dans [Communications in Mathematical Sciences](#) (2007).



# A Propos des Modèles Non Isothermes : QHD et QET

- Contrairement aux modèles isothermes, on ne peut pas écrire les tenseurs de pression ( $\Pi$ ) et les flux d'énergie ( $\Phi$ ) avec des expressions différentielles faisant intervenir  $n, nu, \mathcal{W}$  et  $A, B, C$  (même pour une température faiblement variable).
- On a écrit des contraintes différentielles qui lient les moments ( $n, nu, \mathcal{W}, \Pi, \Phi$ ) aux variables thermodynamiques ( $A, B, C$ ).
- Calculs basés sur des résultats de calculs pseudodifférentiels :

$$[\lambda p^\alpha, \mu p^\beta]_{\hbar} = W \left( \left[ W^{-1} (\lambda p^\alpha), W^{-1} (\mu p^\beta) \right] \right).$$

- On a écrit des simplifications pour les modèles 1D (basées sur des invariances de Jauge).

Résultats publiés dans [Communications in Mathematical Sciences](#) (2007).



# A Propos des Modèles Non Isothermes : QHD et QET

- Contrairement aux modèles isothermes, on ne peut pas écrire les tenseurs de pression ( $\Pi$ ) et les flux d'énergie ( $\Phi$ ) avec des expressions différentielles faisant intervenir  $n, nu, \mathcal{W}$  et  $A, B, C$  (même pour une température faiblement variable).
- On a écrit des contraintes différentielles qui lient les moments ( $n, nu, \mathcal{W}, \Pi, \Phi$ ) aux variables thermodynamiques ( $A, B, C$ ).
- Calculs basés sur des résultats de calculs pseudodifférentiels :

$$[\lambda p^\alpha, \mu p^\beta]_{\hbar} = W \left( \left[ W^{-1} (\lambda p^\alpha), W^{-1} (\mu p^\beta) \right] \right).$$

- On a écrit des simplifications pour les modèles 1D (basées sur des invariances de Jauge).

Résultats publiés dans [Communications in Mathematical Sciences](#) (2007).





# A Propos des Modèles Non Isothermes : QHD et QET

- Contrairement aux modèles isothermes, on ne peut pas écrire les tenseurs de pression ( $\Pi$ ) et les flux d'énergie ( $\Phi$ ) avec des expressions différentielles faisant intervenir  $n, nu, \mathcal{W}$  et  $A, B, C$  (même pour une température faiblement variable).
- On a écrit des contraintes différentielles qui lient les moments ( $n, nu, \mathcal{W}, \Pi, \Phi$ ) aux variables thermodynamiques ( $A, B, C$ ).
- Calculs basés sur des résultats de calculs pseudodifférentiels :

$$[\lambda p^\alpha, \mu p^\beta]_{\hbar} = W \left( \left[ W^{-1} (\lambda p^\alpha), W^{-1} (\mu p^\beta) \right] \right).$$

- On a écrit des simplifications pour les modèles 1D (basées sur des invariances de Jauge).

Résultats publiés dans [Communications in Mathematical Sciences](#) (2007).



# A Propos des Modèles Non Isothermes : QHD et QET

- Contrairement aux modèles isothermes, on ne peut pas écrire les tenseurs de pression ( $\Pi$ ) et les flux d'énergie ( $\Phi$ ) avec des expressions différentielles faisant intervenir  $n, nu, \mathcal{W}$  et  $A, B, C$  (même pour une température faiblement variable).
- On a écrit des contraintes différentielles qui lient les moments ( $n, nu, \mathcal{W}, \Pi, \Phi$ ) aux variables thermodynamiques ( $A, B, C$ ).
- Calculs basés sur des résultats de calculs pseudodifférentiels :

$$[\lambda p^\alpha, \mu p^\beta]_{\hbar} = W \left( \left[ W^{-1} (\lambda p^\alpha), W^{-1} (\mu p^\beta) \right] \right).$$

- On a écrit des simplifications pour les modèles 1D (basées sur des invariances de Jauge).

Résultats publiés dans [Communications in Mathematical Sciences](#) (2007).



# A Propos des Modèles Non Isothermes : QHD et QET

- Contrairement aux modèles isothermes, on ne peut pas écrire les tenseurs de pression ( $\Pi$ ) et les flux d'énergie ( $\Phi$ ) avec des expressions différentielles faisant intervenir  $n, nu, \mathcal{W}$  et  $A, B, C$  (même pour une température faiblement variable).
- On a écrit des contraintes différentielles qui lient les moments ( $n, nu, \mathcal{W}, \Pi, \Phi$ ) aux variables thermodynamiques ( $A, B, C$ ).
- Calculs basés sur des résultats de calculs pseudodifférentiels :

$$[\lambda p^\alpha, \mu p^\beta]_{\hbar} = W \left( \left[ W^{-1} (\lambda p^\alpha), W^{-1} (\mu p^\beta) \right] \right).$$

- On a écrit des simplifications pour les modèles 1D (basées sur des invariances de Jauge).

Résultats publiés dans [Communications in Mathematical Sciences](#) (2007).



## Perspectives

- Pour Euler Quantique, faire le même programme que pour QDD (étude du schéma numérique, comparaison avec d'autres modèles, prise en compte des conditions aux bords transparentes...).
- Pour les modèles non isothermes, proposer une discrétisation et tester sur la diode à effet tunnel.
- Inclure de nouvelles statistiques dans les modèles (Fermi-Dirac,...), faire du multiD.
- Dériver de nouveaux modèles avec des moments d'ordre supérieur.



## Perspectives

- Pour Euler Quantique, faire le même programme que pour QDD (étude du schéma numérique, comparaison avec d'autres modèles, prise en compte des conditions aux bords transparentes...).
- Pour les modèles non isothermes, proposer une discrétisation et tester sur la diode à effet tunnel.
- Inclure de nouvelles statistiques dans les modèles (Fermi-Dirac,...), faire du multiD.
- Dériver de nouveaux modèles avec des moments d'ordre supérieur.



## Perspectives

- Pour Euler Quantique, faire le même programme que pour QDD (étude du schéma numérique, comparaison avec d'autres modèles, prise en compte des conditions aux bords transparentes...).
- Pour les modèles non isothermes, proposer une discrétisation et tester sur la diode à effet tunnel.
- Inclure de nouvelles statistiques dans les modèles (Fermi-Dirac,...), faire du multiD.
- Dériver de nouveaux modèles avec des moments d'ordre supérieur.



## Perspectives

- Pour Euler Quantique, faire le même programme que pour QDD (étude du schéma numérique, comparaison avec d'autres modèles, prise en compte des conditions aux bords transparentes...).
- Pour les modèles non isothermes, proposer une discrétisation et tester sur la diode à effet tunnel.
- Inclure de nouvelles statistiques dans les modèles (Fermi-Dirac,...), faire du multiD.
- Dériver de nouveaux modèles avec des moments d'ordre supérieur.

