

Développement et analyse de schémas volumes finis motivés par la préservation de comportements asymptotiques.

Application à des modèles issus
de la physique et de la biologie

Soutenance de thèse de doctorat de
Marianne Bessemoulin-Chatard
Sous la direction de Claire Chainais-Hillairet et Francis Filbet

Laboratoire de Mathématiques
Université Blaise Pascal

30 novembre 2012

Problème étudié

$$\begin{cases} \partial_t u = \operatorname{div}(f(u)\nabla V(x) + \nabla r(u)), & x \in \Omega, \quad t \geq 0, \\ u(x, 0) = u_0(x) \geq 0, & x \in \Omega, \end{cases}$$

où $u : \Omega \subset \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}_+$ densité, $f(u) \geq 0$, $r \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R}_+)$ tel que $r(0) = 0$, $r'(u) \geq 0$.

Hypothèse : $\exists h$ telle que $r'(s) = h'(s) f(s)$, H primitive de h .

$$\begin{aligned} \partial_t u &= \operatorname{div}(f(u)\nabla(V(x) + h(u))) \\ \implies \frac{dE(t)}{dt} &= -\mathcal{I}(t) \leq 0, \end{aligned}$$

avec

- **entropie :** $E(t) = \int_{\Omega} (V u + H(u)) dx$,
- **dissipation :** $\mathcal{I}(t) = \int_{\Omega} f(u) |\nabla(V + h(u))|^2 dx$.

Comportement en temps long

Carrillo, Jüngel, Markowich, Toscani, Unterreiter (2001).

$$\partial_t u = \operatorname{div}(u \nabla V(x) + \nabla r(u)), \quad x \in \Omega, \quad t > 0.$$

États stationnaires : $\operatorname{div}(u^{eq} \nabla (V + h(u^{eq}))) = 0$.

$u^{eq} \in L^1(\Omega)$ est un équilibre ssi
 u^{eq} minimise E dans $\mathcal{C} := \{u \in L^1_+(\Omega), \int_{\Omega} u = \int_{\Omega} u_0\}$.

$$\begin{aligned} \frac{dE(t)}{dt} = 0 &\Rightarrow u^{eq} \nabla (V + h(u^{eq})) = 0 \\ &\Rightarrow u^{eq} = 0 \text{ ou } V + h(u^{eq}) = C^{te}. \end{aligned}$$

- $\exists! u^{eq}$ si V et h sont suffisamment réguliers,
- décroissance exponentielle de l'entropie relative et de la dissipation.

Exemples

L'équation des milieux poreux

$$\partial_t u = \operatorname{div}(xu + \nabla u^\gamma) \quad \text{sur } \mathbb{R}^d \times (0, T).$$

$t \rightarrow +\infty$: Carrillo, Toscani (2000)

$$u^{eq}(x) = (\alpha - (\gamma - 1)|x|^2/\gamma)_+^{1/(\gamma-1)}.$$

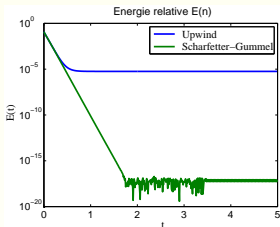
Le système de dérive-diffusion pour les semi-conducteurs

$$\begin{cases} \partial_t N &= \operatorname{div}(\nabla r(N) - N\nabla\Psi) \\ \partial_t P &= \operatorname{div}(\nabla r(P) + P\nabla\Psi) \\ \lambda^2 \Delta\Psi &= N - P - C \end{cases} \quad \text{sur } \Omega \times (0, T).$$

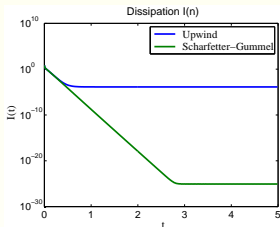
$t \rightarrow +\infty$: Jüngel (1995), Gajewski, Gärtner (1996)

$$\begin{cases} \lambda^2 \Delta\Psi^{eq} = g(\alpha_N + \Psi^{eq}) - g(\alpha_P - \Psi^{eq}) - C, \\ N^{eq} = g(\alpha_N + \Psi^{eq}), \quad P^{eq} = g(\alpha_P - \Psi^{eq}). \end{cases}$$

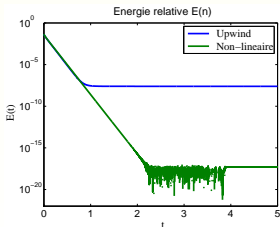
Motivations



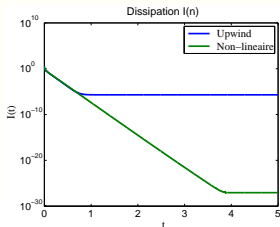
(a) Énergie relative, $r(s) = s$



(b) Dissipation, $r(s) = s$



(c) Énergie relative, $r(s) = s^2$



(d) Dissipation, $r(s) = s^2$

Motivations

- Équations de convection-diffusion non linéaires

$$\partial_t u = \operatorname{div}(f(u)\nabla V(x) + \nabla r(u)), \quad x \in \Omega, \quad t \geq 0.$$

- Comportements asymptotiques (estimations d'énergie–dissipation).

Objectif : construire et étudier des schémas numériques qui

- préservent les états stationnaires,
- permettent d'obtenir des estimations d'entropie discrètes.

Travaux effectués

1 Étude du schéma de Scharfetter-Gummel

- 1 Comportement en temps long.
- 2 Stabilité à la limite quasi-neutre.

2 Schémas préservant l'asymptotique en temps long pour des équations de convection-diffusion non linéaires

- 1 Extension du schéma de Scharfetter-Gummel.
- 2 Un schéma d'ordre 2 pour des équations paraboliques dégénérées.

3 Un schéma pour un modèle de chimiotactisme

- 1 Quelques inégalités fonctionnelles discrètes.
- 2 Un schéma pour un modèle de PKS avec diffusion croisée.

Plan de l'exposé

- 1 Extension du schéma de Scharfetter-Gummel
 - Construction du schéma
 - Convergence
 - Comportement en temps long
 - Simulations numériques
- 2 Construction d'un schéma d'ordre élevé
 - Présentation du schéma
 - Propriétés
 - Simulations numériques

Cadre général

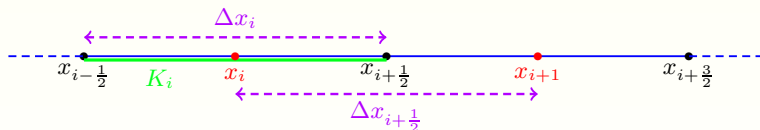
$$\partial_t u - \operatorname{div}(\nabla r(u) - \mathbf{q}u) = 0 \text{ pour } (x, t) \in \Omega \times (0, T).$$

But :

- généraliser le schéma de Scharfetter-Gummel,
- préserver le comportement en temps long.

Jüngel, Pietra (1997), Eymard, Fuhrmann, Gärtner (2006).

Schéma volumes finis



$$\Delta x_i \frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{\Delta t} + \mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}}^* - \mathcal{F}_{i-\frac{1}{2}}^* = 0,$$

où

$$\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}} \approx -(\partial_x r(u) - \mathbf{q}u)|_{x_{i+\frac{1}{2}}}.$$

Extension du flux de Scharfetter-Gummel

Diffusion linéaire : $r(s) = s$, $\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}} \approx -(\partial_x u - \mathbf{q}u)|_{x_{i+\frac{1}{2}}}$.

- Flux de Scharfetter-Gummel (1969)

$$\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}} \left(B \left(-\Delta x_{i+\frac{1}{2}} q_{i+\frac{1}{2}} \right) U_i - B \left(\Delta x_{i+\frac{1}{2}} q_{i+\frac{1}{2}} \right) U_{i+1} \right),$$

où $B(x) = \frac{x}{e^x - 1}$ si $x \neq 0$, $B(0) = 1$.

Extension du flux de Scharfetter-Gummel

Diffusion linéaire : $r(s) = \varepsilon s$, $\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}} \approx -\varepsilon \left(\partial_x u - \frac{\mathbf{q}}{\varepsilon} u \right) \Big|_{x_{i+\frac{1}{2}}}$.

- Flux de Scharfetter-Gummel (1969)

$$\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\varepsilon}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}} \left(B \left(\frac{-\Delta x_{i+\frac{1}{2}} q_{i+\frac{1}{2}}}{\varepsilon} \right) U_i - B \left(\frac{\Delta x_{i+\frac{1}{2}} q_{i+\frac{1}{2}}}{\varepsilon} \right) U_{i+1} \right).$$

$\varepsilon \rightarrow 0 \rightsquigarrow$ flux décentré amont.

Extension du flux de Scharfetter-Gummel

Diffusion linéaire : $r(s) = \varepsilon s$, $\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}} \approx -\varepsilon \left(\partial_x u - \frac{\mathbf{q}}{\varepsilon} u \right) \Big|_{x_{i+\frac{1}{2}}}$.

- Flux de Scharfetter-Gummel (1969)

$$\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\varepsilon}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}} \left(B \left(\frac{-\Delta x_{i+\frac{1}{2}} q_{i+\frac{1}{2}}}{\varepsilon} \right) U_i - B \left(\frac{\Delta x_{i+\frac{1}{2}} q_{i+\frac{1}{2}}}{\varepsilon} \right) U_{i+1} \right).$$

$\varepsilon \rightarrow 0 \rightsquigarrow$ flux décentré amont.

Diffusion non linéaire (par exemple $r(s) = s^\gamma$, $\gamma > 1$).

- Extension du flux de Scharfetter-Gummel

$$\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}} \approx -(\partial_x r(u) - \mathbf{q}u) \Big|_{x_{i+\frac{1}{2}}} = -(\mathbf{r}'(u) \partial_x u - \mathbf{q}u) \Big|_{x_{i+\frac{1}{2}}},$$

$$dr_{i+\frac{1}{2}} \approx r' \left(u \left(x_{i+\frac{1}{2}} \right) \right),$$

$$\Rightarrow \mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{dr_{i+\frac{1}{2}}}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}} \left(B \left(\frac{-\Delta x_{i+\frac{1}{2}} q_{i+\frac{1}{2}}}{dr_{i+\frac{1}{2}}} \right) U_i - B \left(\frac{\Delta x_{i+\frac{1}{2}} q_{i+\frac{1}{2}}}{dr_{i+\frac{1}{2}}} \right) U_{i+1} \right).$$

Calcul de $dr_{i+\frac{1}{2}}$

- **Un choix possible :** $dr_{i+\frac{1}{2}} = r' \left(\frac{U_i + U_{i+1}}{2} \right)$.
- **But :** Déterminer $dr_{i+\frac{1}{2}}$ tel que le flux préserve l'équilibre.

$$\text{Équilibre : } \partial_x r(u) - \mathbf{q}u = 0.$$

$$r'(s) = sh'(s) \Rightarrow u(\partial_x h(u) - \mathbf{q}) = 0.$$

$$u \neq 0 \Rightarrow \partial_x h(u) - \mathbf{q} = 0 \Rightarrow \frac{h(U_{i+1}) - h(U_i)}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}} = q_{i+\frac{1}{2}}.$$

$$\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}} = 0 \Leftrightarrow \boxed{dr_{i+\frac{1}{2}} = \frac{h(U_{i+1}) - h(U_i)}{\log(U_{i+1}) - \log(U_i)}}$$

Définition du schéma

$$dr_{i+\frac{1}{2}} = \begin{cases} \frac{h(U_{i+1}) - h(U_i)}{\log(U_{i+1}) - \log(U_i)} & \text{si } U_i, U_{i+1} > 0 \text{ et } U_i \neq U_{i+1}, \\ r' \left(\frac{U_i + U_{i+1}}{2} \right) & \text{sinon.} \end{cases}$$

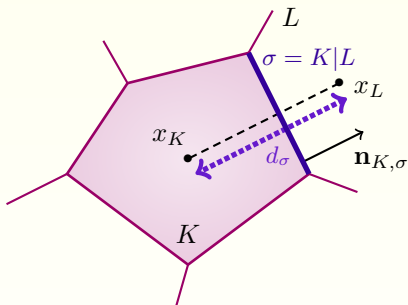
Discrétisation temporelle :

$$\Delta x_i \frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{\Delta t} + \mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - \mathcal{F}_{i-\frac{1}{2}}^{n+1} = 0,$$

avec

$$\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} = \frac{dr_{i+\frac{1}{2}}^n}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}} \left(B \left(-\frac{q_{i+\frac{1}{2}} \Delta x_{i+\frac{1}{2}}}{dr_{i+\frac{1}{2}}^n} \right) U_i^{n+1} - B \left(\frac{q_{i+\frac{1}{2}} \Delta x_{i+\frac{1}{2}}}{dr_{i+\frac{1}{2}}^n} \right) U_{i+1}^{n+1} \right).$$

Généralisation au cas 2D



Construction : intégration de

$$\partial_t u - \operatorname{div}(\nabla r(u) - \mathbf{q}u) = 0$$

sur chaque maille K .

$$\Rightarrow m(K) \frac{U_K^{n+1} - U_K^n}{\Delta t} + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{F}_{K,\sigma}^{n+1} = 0,$$

où

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{K,\sigma} &\approx - \int_{\sigma} (\nabla r(u) - \mathbf{q}u) \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} \\ &= \frac{m(\sigma)}{d_{\sigma}} dr_{K,\sigma}^n \left(B \left(\frac{-d_{\sigma} q_{K,\sigma}}{dr_{K,\sigma}^n} \right) U_K^{n+1} - B \left(\frac{d_{\sigma} q_{K,\sigma}}{dr_{K,\sigma}^n} \right) U_L^{n+1} \right). \end{aligned}$$

Propriétés du schéma

Proposition

- Existence, unicité et positivité d'une solution au schéma.

Si $\operatorname{div}(\mathbf{q}) = 0$ et $\exists m, M > 0$ tels que $m \leq u^D, u_0 \leq M$, on a :

- estimation L^∞ :

$$0 < m \leq U_K^n \leq M, \quad \forall K \in \mathcal{T}, \quad \forall n \geq 0,$$

- estimation $L^2(0, T; H^1)$:

$$\begin{aligned} \|U_\delta\|_{1, \mathcal{D}}^2 &= \sum_{n=0}^{N_T} \Delta t \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E}_{int} \\ \sigma = K|L}} \tau_\sigma |U_L^{n+1} - U_K^{n+1}|^2 \\ &+ \sum_{n=0}^{N_T} \Delta t \sum_{K \in \mathcal{T}} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{ext, K}^D} \tau_\sigma |U_\sigma^{n+1} - U_K^{n+1}|^2 \leq C. \end{aligned}$$

Convergence du schéma

Théorème

On suppose que $\operatorname{div}(\mathbf{q}) = 0$ et $m \leq u^D, u_0 \leq M$.

- Il existe $u \in L^\infty(0, T; H^1)$ et une sous-suite $(U_\delta)_{\delta>0}$ tels que

$$\begin{aligned} U_\delta &\xrightarrow{\delta \rightarrow 0} u \text{ dans } L^2(\Omega \times (0, T)), \\ \nabla^\delta U_\delta &\xrightarrow{\delta \rightarrow 0} \nabla u \text{ faiblement dans } (L^2(\Omega \times (0, T)))^d. \end{aligned}$$

- u est solution faible de l'équation de convection-diffusion :
 $u - u^D \in L^2(0, T; H_0^1(\Omega))$ et $\forall \psi \in \mathcal{D}(\Omega \times [0, T])$,

$$\int_0^T \int_\Omega (u \partial_t \psi - \nabla(r(u)) \cdot \nabla \psi + u \mathbf{q} \cdot \nabla \psi) dx dt + \int_\Omega u(x, 0) \psi(x, 0) dx = 0.$$

Idée de la preuve

- Estimation $L^2(0, T; H^1) \Rightarrow$ continuité des translatées de U_δ .
- Théorème de Riesz-Fréchet-Kolmogorov \Rightarrow Compacité relative de $(U_\delta)_{\delta>0}$ dans $L^2(\Omega \times (0, T))$.
- Passage à la limite dans le schéma : on réécrit le flux

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{K,\sigma} &= \frac{m(\sigma)}{d_\sigma} dr_{K,\sigma} \left(B \left(\frac{-d_\sigma q_{K,\sigma}}{dr_{K,\sigma}} \right) U_K - B \left(\frac{d_\sigma q_{K,\sigma}}{dr_{K,\sigma}} \right) U_L \right) \\ &= m(\sigma) q_{K,\sigma} \frac{U_K + U_\sigma}{2} - \frac{m(\sigma) q_{K,\sigma}}{2} \coth \left(\frac{d_\sigma q_{K,\sigma}}{2 dr_{K,\sigma}} \right) (U_\sigma - U_K). \end{aligned}$$

Le système de dérive-diffusion

- **Système évolutif**

$$\begin{cases} \partial_t N - \operatorname{div}(\nabla r(N) - N \nabla \Psi) = 0 \\ \partial_t P - \operatorname{div}(\nabla r(P) + P \nabla \Psi) = 0 \\ \Delta \Psi = N - P - C \end{cases} \quad \text{sur } \Omega \times (0, T).$$

- **Equilibre thermique**

$$\begin{cases} N^{eq} = g(\alpha_N + \Psi^{eq}), & P^{eq} = g(\alpha_P - \Psi^{eq}) \\ \Delta \Psi^{eq} = g(\alpha_N + \Psi^{eq}) - g(\alpha_P - \Psi^{eq}) - C \end{cases} \quad \text{sur } \Omega.$$

$N(t) \rightarrow N^{eq}$, $P(t) \rightarrow P^{eq}$, $\nabla \Psi(t) \rightarrow \nabla \Psi^{eq}$ dans $L^2(\Omega)$ quand $t \rightarrow \infty$.

Point clé : estimation d'énergie avec contrôle de la dissipation.

$$0 \leq \mathcal{E}(t) + \int_0^t \mathcal{I}(\tau) d\tau \leq \mathcal{E}(0).$$

Gajewski, Gärtner (1996), Jüngel (1995).

Schémas numériques (cas linéaire)

- **Système évolutif**

$$\left\{ \begin{array}{l} m(K) \frac{N_K^{n+1} - N_K^n}{\Delta t} + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{F}_{K,\sigma}^{n+1} = 0, \\ m(K) \frac{P_K^{n+1} - P_K^n}{\Delta t} + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{G}_{K,\sigma}^{n+1} = 0, \\ \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \frac{m(\sigma)}{d_\sigma} D\Psi_{K,\sigma}^n = m(K) (N_K^n - P_K^n - C_K), \end{array} \right.$$

avec

$$\mathcal{F}_{K,\sigma}^{n+1} = \frac{m(\sigma)}{d_\sigma} \left(B \left(-D\Psi_{K,\sigma}^{n+1} \right) N_K^{n+1} - B \left(D\Psi_{K,\sigma}^{n+1} \right) N_\sigma^{n+1} \right).$$

- **Système à l'équilibre**

$$\sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \frac{m(\sigma)}{d_\sigma} D\Psi_{K,\sigma}^{eq} = m(K) \left(\exp(\alpha_N + \Psi_K^{eq}) - \exp(\alpha_P - \Psi_K^{eq}) - C_K \right).$$

Résultats (cas linéaire)

Proposition

On suppose que $\log(N^D) - \Psi^D = \alpha_N$ et $\log(P^D) + \Psi^D = \alpha_P$ sur Γ^D . Alors on a

$$0 \leq \mathcal{E}^{n+1} + \Delta t \mathcal{I}^{n+1} \leq \mathcal{E}^n.$$

Théorème

On suppose que

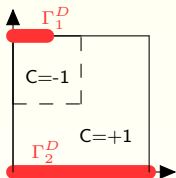
- $0 < m \leq N_0, P_0, N^D, P^D \leq M,$
- $\log(N^D) - \Psi^D = \alpha_N$ et $\log(P^D) + \Psi^D = \alpha_P$ sur $\Gamma^D,$
- $C = 0$ sur $\Omega.$

Alors on a pour tout $K \in \mathcal{T}$

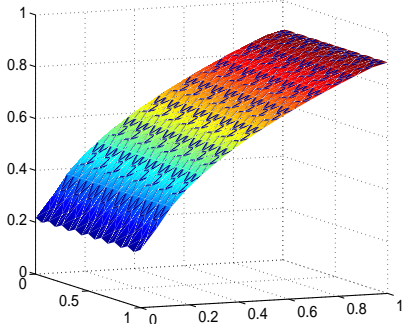
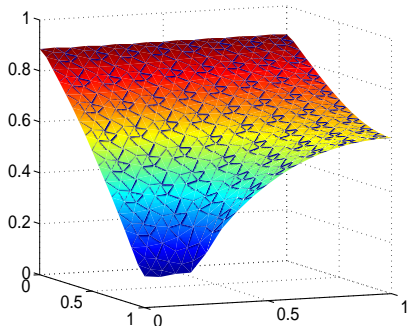
$$(N_K^n, P_K^n, \Psi_K^n) \longrightarrow (N_K^{eq}, P_K^{eq}, \Psi_K^{eq}) \text{ quand } n \rightarrow +\infty.$$

↪ Généralisation immédiate de ces résultats au cas non linéaire.

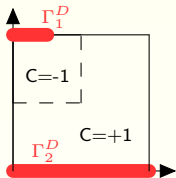
Le système de dérive-diffusion



$\Delta t = 5 \cdot 10^{-4}$, $T = 0.05$,
 maillage admissible de 896 triangles,
 $r(s) = s^{5/3}$,
 $N^D = 0.1$, $P^D = 0.9$ sur Γ_1^D ,
 $N^D = 0.9$, $P^D = 0.1$ sur Γ_2^D .

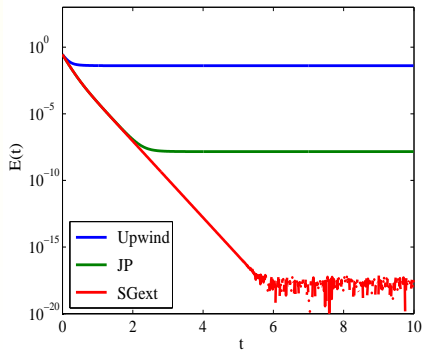
Density of electrons $N(0)$ Density of electrons N^{eq} 

Le système de dérive-diffusion

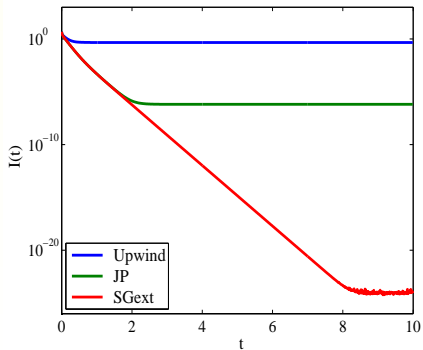


$\Delta t = 10^{-2}$, $T = 10$,
 maillage admissible de 896 triangles,
 $r(s) = s^{5/3}$,
 $N^D = 0.1$, $P^D = 0.9$ sur Γ_1^D ,
 $N^D = 0.9$, $P^D = 0.1$ sur Γ_2^D .

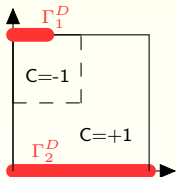
Energie relative



Dissipation



Le système de dérive-diffusion



$$\Delta t = 10^{-2}, T = 10,$$

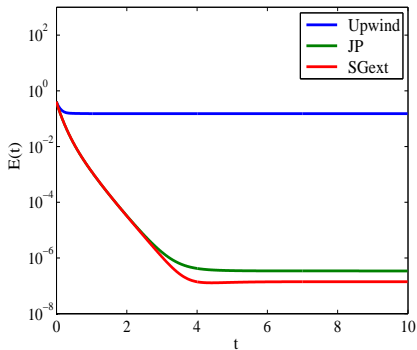
maillage admissible de 896 triangles,

$$r(s) = s^{5/3},$$

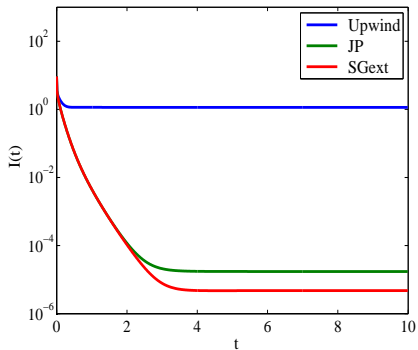
$$N^D = \mathbf{0}, P^D = 1 \text{ sur } \Gamma_1^D,$$

$$N^D = 1, P^D = \mathbf{0} \text{ sur } \Gamma_2^D.$$

Energie relative



Dissipation



1 Extension du schéma de Scharfetter-Gummel

- Construction du schéma
- Convergence
- Comportement en temps long
- Simulations numériques

2 Construction d'un schéma d'ordre élevé

- Présentation du schéma
- Propriétés
- Simulations numériques

Construction du nouveau flux

$$\partial_t u - \partial_x (u \partial_x V(x) + \partial_x r(u)) = 0, \quad x \in \Omega, \quad t > 0$$

$$-(u \partial_x V + \partial_x r(u)) = \underbrace{-\partial_x (V + h(u))}_{\text{"vitesse"}} u.$$

$$-\partial_x (V + h(u)) |_{x_{i+\frac{1}{2}}} \approx A_{i+\frac{1}{2}} = -dV_{i+\frac{1}{2}} - dh(U)_{i+\frac{1}{2}},$$

avec

$$dV_{i+\frac{1}{2}} = \frac{V(x_{i+1}) - V(x_i)}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}}, \quad dh(U)_{i+\frac{1}{2}} = \frac{h(U_{i+1}) - h(U_i)}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}}$$

Flux upwind classique \Rightarrow $\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}} = A_{i+\frac{1}{2}}^+ U_i - A_{i+\frac{1}{2}}^- U_{i+1}$

où $x^+ = \max(0, x)$, $x^- = \max(0, -x)$.

Passage à l'ordre 2

$$U_i \leftarrow U_{i+\frac{1}{2},-}, \quad U_{i+1} \leftarrow U_{i+\frac{1}{2},+}, \text{ avec}$$

$$U_{i+\frac{1}{2},-} = U_i + \frac{1}{2}\phi(\theta_i)(U_{i+1} - U_i),$$

$$U_{i+\frac{1}{2},+} = U_{i+1} - \frac{1}{2}\phi(\theta_{i+1})(U_{i+2} - U_{i+1}),$$

où $\theta_i = \frac{U_i - U_{i-1}}{U_{i+1} - U_i}$, et ϕ limiteur de pente :

- $\phi = 0 \rightsquigarrow$ Upwind, ordre 1,
- $\phi(\theta) = \frac{\theta + |\theta|}{1 + |\theta|} \rightsquigarrow$ Van Leer, ordre 2.

Généralisation

$$\partial_t u - \partial_x (\mathbf{f}(u)) \partial_x V(x) + \partial_x r(u) = 0, \quad x \in \Omega, \quad t > 0$$

$$- (f(u)\partial_x V + \partial_x r(u)) = -\partial_x (V + h(u)) f(u),$$

où $h(u)$ est tel que $h'(u)f(u) = r'(u)$.

Flux de Lax-Friedrichs local \Rightarrow

$$\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{A_{i+\frac{1}{2}}}{2} (f(U_i) + f(U_{i+1})) - \frac{|A_{i+\frac{1}{2}}| \alpha_{i+\frac{1}{2}}}{2} (U_{i+1} - U_i),$$

avec

$$A_{i+\frac{1}{2}} = -dV_{i+\frac{1}{2}} - dh(U)_{i+\frac{1}{2}},$$

et

$$\alpha_{i+\frac{1}{2}} = \max(|f'(u)|), \quad u \text{ entre } U_i \text{ et } U_{i+1}.$$

Ordre 2 : $U_i \leftarrow U_{i+\frac{1}{2},-}$, $U_{i+1} \leftarrow U_{i+\frac{1}{2},+}$.

Propriétés

Schéma semi-discret : $\frac{d}{dt}U_i + \frac{1}{\Delta x_i} \left(\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}} - \mathcal{F}_{i-\frac{1}{2}} \right) = 0.$

► **Résultats** :

- préservation de la positivité,
- préservation de l'équilibre : $dh(U)_{i+\frac{1}{2}} + dV_{i+\frac{1}{2}} = 0 \implies \mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}} = 0,$
- estimation d'entropie : $\forall 0 < t_1 \leq t_2 < +\infty,$

$$0 \leq \mathcal{E}_\Delta(t_2) + \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{I}_\Delta(t) dt \leq \mathcal{E}_\Delta(t_1).$$

Schéma complètement discret : $\frac{1}{\Delta t}(U_i^{n+1} - U_i^n) + \frac{1}{\Delta x_i} \left(\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}}^n - \mathcal{F}_{i-\frac{1}{2}}^n \right) = 0.$

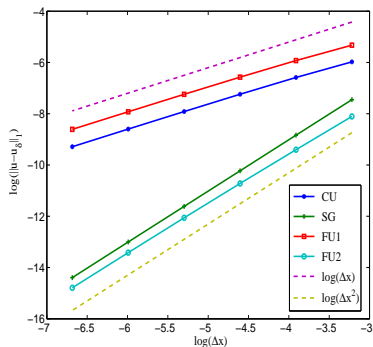
► **Résultats** :

- préservation de l'équilibre,
- préservation de la positivité sous la condition CFL

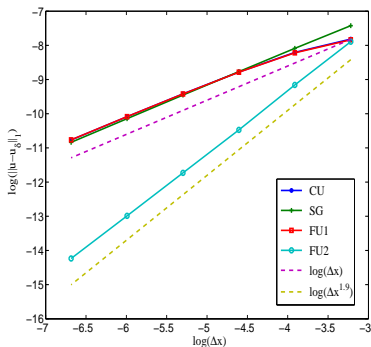
$$\Delta t \max_i |V(x_{i+1}) - V(x_i) - h(U_{i+1}^n) + h(U_i^n)| \leq \frac{1}{2} \min_i \Delta x_i^2.$$

Ordre de convergence

$\Omega = (-1, 1)$, $T = 0.1$, $\partial_x V = 1$, $f(s) = s$.
 $\Delta t = 10^{-8}$, $\Delta x = 0.04 \times 2^{-j}$, $j = 0, \dots, 5$.

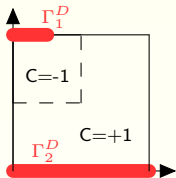


(e) $r(s) = s^2$



(f) $r(s) = (s - 1)_+^3$

Le système de dérive-diffusion



$$\Delta t = 10^{-4}, T = 10,$$

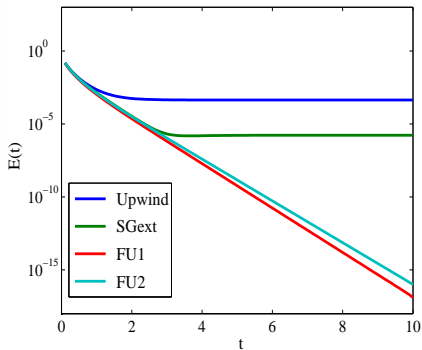
$$\text{maillage cartésien } 32 \times 32,$$

$$r(s) = s^{5/3},$$

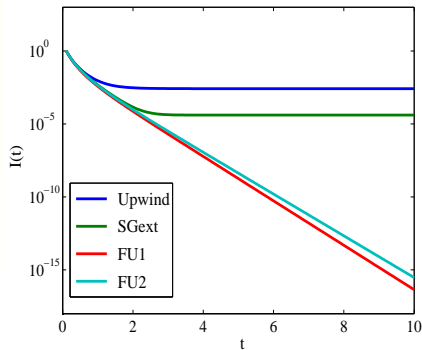
$$N^D = 0, P^D = 1 \text{ sur } \Gamma_1^D,$$

$$N^D = 1, P^D = 0 \text{ sur } \Gamma_2^D.$$

Energie relative



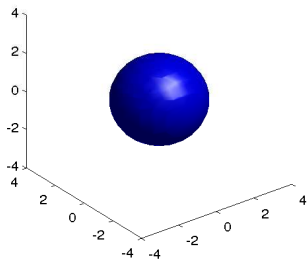
Dissipation



Équation pour les fermions

$$\partial_t u = \operatorname{div}(xu(1-u) + \nabla u),$$

$$\Omega = (-8, 8)^3, \text{ maillage cartésien } 40 \times 40 \times 40, \\ \Delta t = 10^{-4}, T = 3.$$



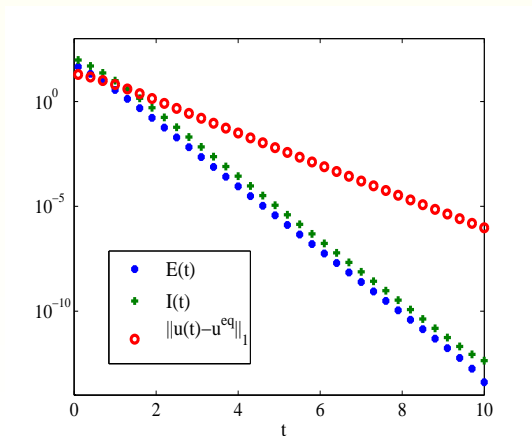
Évolution de $u(t, x, y, z) = 0.1$.

Équilibre $u^{eq}(t, x, y, z) = 0.1$.

Équation pour les fermions

$$\partial_t u = \operatorname{div}(xu(1-u) + \nabla u),$$

$\Omega = (-8, 8)^3$, maillage cartésien $40 \times 40 \times 40$,
 $\Delta t = 10^{-4}$, $T = 10$.



Conclusion

- Extension du schéma de Scharfetter-Gummel pour une diffusion non linéaire :
 - ▶ convergence dans le cas non dégénéré,
 - ▶ étude du comportement en temps long pour le système de dérive-diffusion,
 - ▶ limites du schéma dans le cas dégénéré.

- Construction d'un schéma d'ordre 2 :
 - ▶ définition valable pour une convection non linéaire,
 - ▶ inégalité d'entropie–dissipation,
 - ▶ validation numérique.

Perspectives

- Étude du comportement en temps long au niveau discret pour les autres modèles (équation des milieux poreux, équation pour les fermions et bosons).
- Étude du taux de décroissance de l'entropie relative.
- Inégalités de Sobolev logarithmiques.
- Application de ces schémas à des modèles de chimiotactisme.
- Généralisation à des maillages non structurés.