

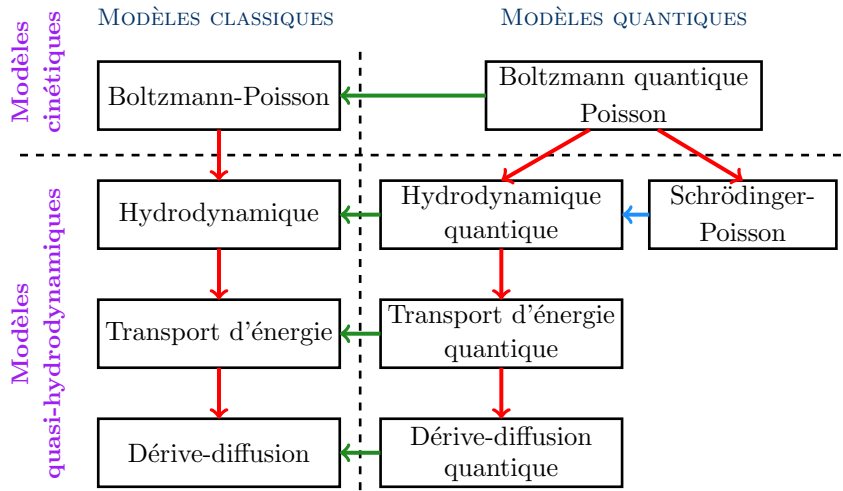
CHAPITRE 1. INTRODUCTION AUX MODÈLES, AUX PROBLÉMATIQUES ET AUX MÉTHODES

1 Motivations et problématiques

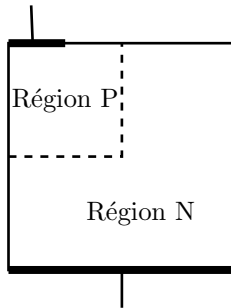
1.1 Exemple 1 : modèle de dérivation-diffusion

Modélisation des semi-conducteurs : hiérarchie de modèles

□ JÜNGEL, 2001



Modèle de dérivation-diffusion



Inconnues

- N, P : densités de charges
- Ψ : potentiel électrique

Données

- Profil de dopage : C
- Densités initiales : N_0, P_0
- Contacts ohmiques : N^D, P^D, Ψ^D

$$\begin{cases} \partial_t N + \operatorname{div}(J_N) = 0, & J_N = -\nabla r(N) + N \nabla \Psi, \\ \partial_t P + \operatorname{div}(J_P) = 0, & J_P = -\nabla r(P) - P \nabla \Psi, \\ -\lambda^2 \Delta \Psi = P - N + C. \end{cases}$$

- $r(s) = s^\gamma$, $\gamma \geq 1$ (isotherme : $\gamma = 1$, isentropique : $\gamma = 5/3$)
- λ : longueur de Debye (adimensionnée)

Exemples de propriétés qualitatives

Positivité des densités de charges

$$N_0, P_0 \geq 0, \quad N^D, P^D \geq 0$$

$$\Downarrow$$

$$N, P \geq 0.$$

Comportement en temps long (données à l'éq. thermique)

Convergence vers l'équilibre thermique

$$N(., t), P(., t), \Psi(., t) \Longrightarrow N^{eq}, P^{eq}, \Psi^{eq}$$

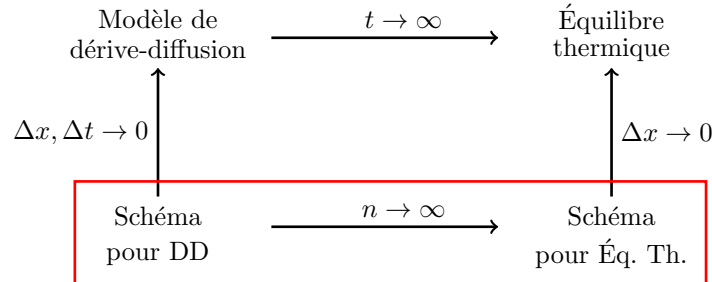
solution de

$$\begin{cases} -\nabla r(N^{eq}) + N^{eq} \nabla \Psi^{eq} = 0 \\ -\nabla r(P^{eq}) - P^{eq} \nabla \Psi^{eq} = 0 \\ -\lambda^2 \Delta \Psi^{eq} = P^{eq} - N^{eq} + C. \end{cases}$$

Problématique

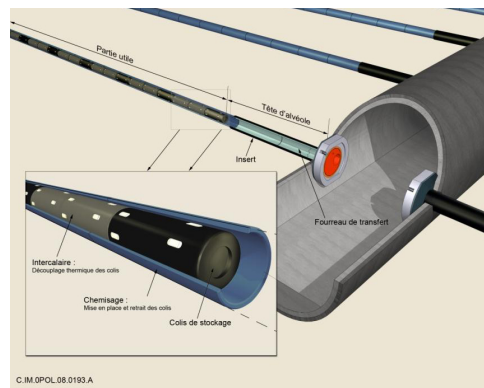
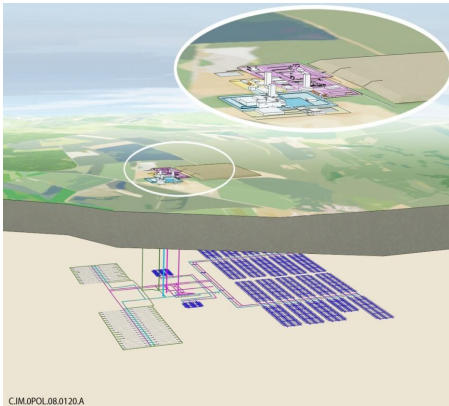
Proposer de “bons schémas” pour la simulation numérique du modèle de dérive-diffusion

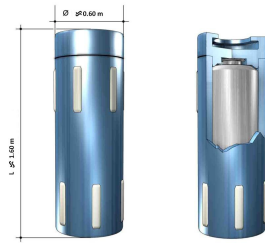
- Préservation de la positivité des densités
- Convergence
- Préservation du comportement en temps long



1.2 Exemple 2 : modèle de corrosion d'acier

Stockage des déchets nucléaires

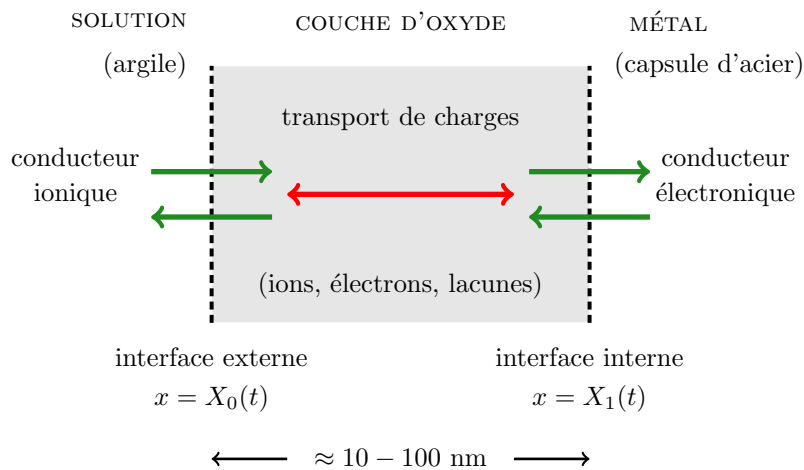




- Déchets vitrifiés placés dans une capsule métallique
- Tunnels de stockage
- Dans une couche d'argile
- En grande profondeur (500 m)

La couche d'oxyde

- protection par une couche d'oxyde de fer, dense
- analogie couche d'oxyde / matériau semiconducteur



Le “Diffusion Poisson Coupled Model”

Inconnues

- Densités d' e^- (N), de cations Fe^{3+} (P), de lacunes Vö (C)
- Potentiel électrique Ψ
- Position de la couche d'oxyde : X_0 , X_1

Équations

- Sur les densités de charge :
 - équations de convection-diffusion dans le domaine
 - électrochimie aux interfaces
- Sur le potentiel électrique
 - équation de Poisson
 - lois de Gauss-Helmholtz aux interfaces
- Évolution de la couche

Le modèle DPCM

- Modèle de type dérive-diffusion linéaire sur $[X_0, X_1]$

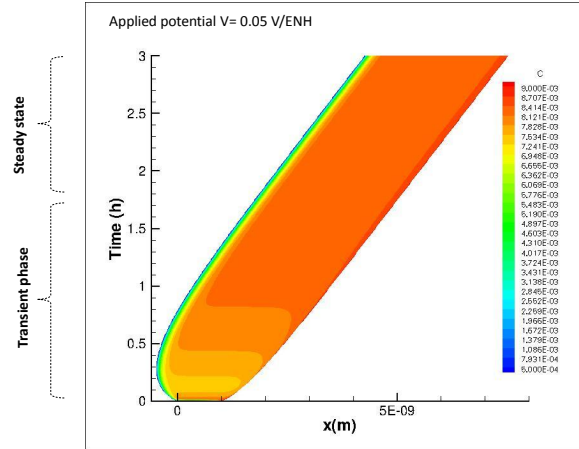
$$\begin{aligned}
 -\lambda^2 \partial_{xx}^2 \Psi &= 3P - N + 2C - 5 \\
 \partial_t P + \partial_x J_P &= 0, \quad J_P = -\partial_x P - 3P \partial_x \Psi \\
 \varepsilon \partial_t N + \partial_x J_N &= 0, \quad J_N = -\partial_x N + N \partial_x \Psi \\
 \partial_t C + \partial_x J_C &= 0, \quad J_C = -\partial_x C - 2C \partial_x \Psi
 \end{aligned}$$

- Conditions aux limites de type Robin couplées
- Déplacement des interfaces

$$\begin{aligned}
 \frac{dX_0}{dt} &= v_d^0 + \frac{dX_1}{dt} (1 - R_{pb}) \\
 \frac{dX_1}{dt} &= -4\mu J_C(X_1)
 \end{aligned}$$

Simulation numérique de DPCM : code CALIPSO

Évolution de la densité de lacunes
sur domaine mobile



Simulation numérique du modèle DPCM

Objectifs principaux

- Stabilité des méthodes par rapport aux paramètres λ, ε ,
 - ε : ratio des mobilités des cations fer et des électrons
 - $\Rightarrow \varepsilon \ll 1$
 - changement de variables pour revenir sur un domaine fixe
 - $\Rightarrow \lambda$ variable
- Stabilité en temps long

□ BATAILLON, BOUCHON, C.-H., FUHRMANN, HOARAU, TOUZANI, JCP 2012

□ BATAILLON, BOUCHON, C.-H., DESGRANGES, HOARAU, MARTIN, TUPIN, TALANDIER, ELECTROCH. ACTA 2010

1.3 Exemple 3 : modèle de diffusion non linéaire

Généralités

Équation des milieux poreux / diffusion rapide

$$\begin{cases} \partial_t u - \Delta(u^\beta) = 0, \text{ sur } \Omega = [0, 1]^d, \ t \geq 0, \ u(0) = u_0 \\ + \text{ CL Neumann } \nabla(u^\beta) \cdot \mathbf{n} = 0 \end{cases}$$

- $\beta = 1$: chaleur
- $0 < \beta < 1$: diffusion rapide, $\beta > 1$: milieux poreux

État stationnaire :

$$u_\infty : \text{ fonction constante telle que } u_\infty = \int_{\Omega} u_0.$$

Étude du comportement en temps long

- A-t-on $u(t) \rightarrow u_\infty$ quand $t \rightarrow +\infty$? En quel sens ?
- Vitesse de convergence ? (polynômiale ? exponentielle ?)
- Développement de schémas numériques ayant le même comportement

Méthode d'entropie-dissipation

$$\begin{cases} \partial_t u + Au = 0, \ t \geq 0, \ u(0) = u_0 \\ u_\infty : Au_\infty = 0 \end{cases}$$

Objectif : établir la convergence en entropie relative

$$\begin{aligned} E(u(t)) &\rightarrow E(u_\infty) \text{ quand } t \rightarrow +\infty. \\ \text{ou } E(u(t)|u_\infty) &\rightarrow 0 \text{ quand } t \rightarrow +\infty. \end{aligned}$$

Stratégie

- Définir une entropie E , fonction de Lyapunov convexe telle que

$$\frac{d}{dt} E(u) = -\langle Au, E'(u) \rangle \leq 0.$$

- Relier la dissipation d'entropie $D(u) = \langle Au, E'(u) \rangle$ à $E(u)$.
 - $D(u) \geq \lambda E(u)$: convergence exponentielle $\sim e^{-\lambda t}$
 - $D(u) \geq K E(u)^{1+\gamma}$: convergence polynômiale $\sim t^{-1/\gamma}$

Objectifs

Des résultats sur le problème continu

- Application de la méthode d'entropie-dissipation à l'équation des milieux poreux / diffusion rapide
- Pour des entropies d'ordre 0 et des entropies d'ordre 1
- Besoin d'inégalités fonctionnelles de type Beckner

Extension des résultats au niveau discret

- Développement d'un schéma numérique qui satisfasse un analogue discret de la méthode d'entropie-dissipation
- Besoin d'inégalités fonctionnelles discrètes

2 Introduction aux schémas volumes finis

2.1 Principes fondamentaux

Pour quel type d'équations ?

□ EYMARD, GALLOUËT, HERBIN, 2000

⇒ Discrétisation en espace de lois de conservation

$$\operatorname{div} \mathbf{J} = g.$$

⇒ Pour des équations d'évolution

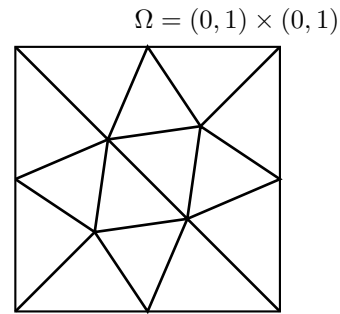
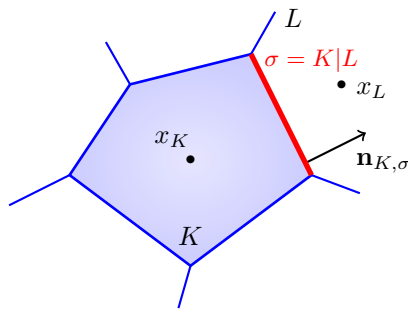
$$\partial_t u + \operatorname{div} \mathbf{J} = g,$$

méthode de différences finies pour la partie temporelle.

Flux

- Diffusion : $\mathbf{J} = \nabla u$, $\mathbf{J} = \nabla r(u)$, $\mathbf{J} = \mathbb{K} \nabla u, \dots$
- Convection : $\mathbf{J} = \mathbf{v} u$, $\mathbf{J} = \mathbf{v} f(u)$, $\mathbf{J} = \mathbf{F}(u), \dots$
- Toute combinaison...

Maillage : définitions et notations



- $\mathcal{T}$: ensemble de mailles K , ouverts polygonaux convexes de Ω

$$\bar{\Omega} = \bigcup_{K \in \mathcal{T}} \bar{K}, \quad h = \max_{K \in \mathcal{T}} \operatorname{diam}(K)$$
- $\mathcal{E}$: ensemble des arêtes σ
- $\mathcal{P}$: famille de points $x_K \in K$

Espace de solutions approchées

⇒ Reconstruction de solutions approchées constantes par mailles

Inconnues discrètes

$$(u_K)_{K \in \mathcal{T}}$$

Solution approchée

$$u_{\mathcal{T}} = \sum_{K \in \mathcal{T}} u_K \mathbf{1}_K$$

Espace de solutions approchées

$$X(\mathcal{T}) = \left\{ u_{\mathcal{T}} = \sum_{K \in \mathcal{T}} u_K \mathbf{1}_K \right\}$$

Principe du schéma volumes finis

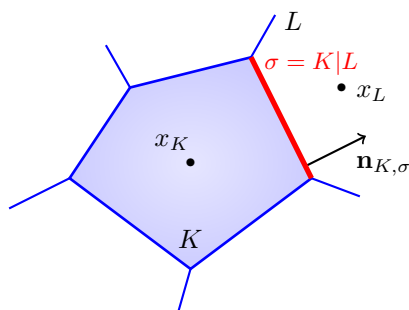


Schéma volumes finis

Intégration sur la maille K de

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{J} &= g \\ \Downarrow \\ \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \int_{\sigma} \mathbf{J} \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} &= \int_K g \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{F}_{K,\sigma} &= m(K)g_K \text{ pour tout } K \in \mathcal{T}, \\ \text{avec } \begin{cases} \mathcal{F}_{K,\sigma} \text{ "bonne" approximation de } \int_{\sigma} \mathbf{J} \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma}, \\ g_K = \frac{1}{m(K)} \int_K g \quad (\text{ou une approximation}). \end{cases} \end{aligned}$$

Propriétés des flux numériques

Conservativité des flux

$$\mathcal{F}_{K,\sigma} + \mathcal{F}_{L,\sigma} = 0 \quad \forall \sigma = K|L.$$

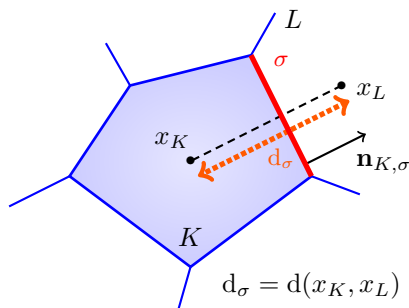
Consistance des flux

- $\tilde{\mathcal{F}}_{K,\sigma}$: évaluation du flux numérique pour une solution exacte régulière du problème considéré,
- $\tilde{\mathbf{J}}$: flux exact

$$\frac{1}{m(\sigma)} \left(\tilde{\mathcal{F}}_{K,\sigma} - \int_{\sigma} \tilde{\mathbf{J}} \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} \right) = O(h).$$

2.2 Quelques exemples

Flux de diffusion : $\mathbf{J} = -\nabla u$



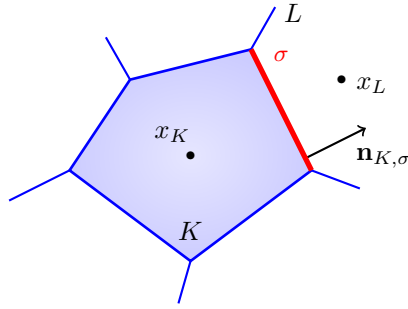
$$\begin{aligned} \mathbf{J} &= -\nabla u \\ \Downarrow \\ \int_{\sigma} \mathbf{J} \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} &= - \int_{\sigma} \nabla u \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} \end{aligned}$$

$$\mathcal{F}_{K,\sigma} = -m(\sigma) \frac{u_L - u_K}{d(x_K, x_L)} = -\frac{m(\sigma)}{d_{\sigma}} (u_L - u_K).$$

- Conservativité : OK
- Consistance : OK... si $(x_K x_L) \perp \sigma$

$\Rightarrow$ Notion de maillage admissible : $\forall \sigma = K|L, (x_K x_L) \perp \sigma$

Flux de convection : $\mathbf{J} = \mathbf{v}u$



$$\begin{aligned} \mathbf{J} &= \mathbf{v}u \\ \Downarrow \\ \int_{\sigma} \mathbf{J} \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} &= \int_{\sigma} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} u \end{aligned}$$

$$v_{K,\sigma} = \frac{1}{m(\sigma)} \int_{\sigma} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma}$$

Flux centrés

$$\mathcal{F}_{K,\sigma} = m(\sigma) v_{K,\sigma} \frac{u_K + u_L}{2}$$

Flux décentrés amont

$$\mathcal{F}_{K,\sigma} = m(\sigma) v_{K,\sigma} \begin{cases} u_K & \text{si } v_{K,\sigma} \geq 0 \\ u_L & \text{si } v_{K,\sigma} \leq 0 \end{cases}$$

Flux de convection : $\mathbf{J} = \mathbf{v}u$

Flux centrés

$$\mathcal{F}_{K,\sigma} = m(\sigma) v_{K,\sigma} \frac{u_K + u_L}{2}$$

Flux décentrés amont

$$\mathcal{F}_{K,\sigma} = m(\sigma) v_{K,\sigma} \begin{cases} u_K & \text{si } v_{K,\sigma} \geq 0 \\ u_L & \text{si } v_{K,\sigma} \leq 0 \end{cases}$$

— Conservativité OK ($v_{K,\sigma} + v_{L,\sigma} = 0$)

— Consistance OK

⇒ Sans hypothèse contraignante sur le maillage

⇒ Attention : Problèmes bien connus avec le schéma centré pour les équations de transport.

⇒ Nécessité d'une hypothèse supplémentaire de monotonie des flux

3 Étude du schéma VF pour le problème de Dirichlet

3.1 Remarques préliminaires

Rappels théoriques

Problème considéré

Ω ouvert borné régulier de $\mathbb{R}^d$, $f \in L^2(\Omega)$

$$\begin{cases} -\Delta u = f & \text{dans } \Omega, \\ u = 0 & \text{sur } \Gamma = \partial\Omega. \end{cases}$$

Théorème

Il existe un unique $u \in H_0^1(\Omega)$ tel que

$$\forall v \in H_0^1(\Omega) \quad \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v = \int_{\Omega} f v.$$

Démonstration : application du théorème de Lax-Milgram.

Rappels théoriques**Points clés**

→ Inégalité de Poincaré : $\exists C(\Omega)$ tel que $\forall u \in H_0^1(\Omega)$

$$\int_{\Omega} |u|^2 \leq C(\Omega) \int_{\Omega} |\nabla u|^2.$$

→ $|u|_{H_0^1(\Omega)} = \left(\int_{\Omega} |\nabla u|^2 \right)^{1/2}$ est une norme sur $H_0^1(\Omega)$.

Propriétés qualitatives

— Monotonie : $v = u^-$ dans la formulation faible

$$f \geq 0 \text{ p.p.} \implies u \geq 0 \text{ p.p.}$$

— Estimation d'énergie : $v = u$ dans la formulation faible

$$\int_{\Omega} |\nabla u|^2 \leq C$$

Éléments finis/Volumes finis**Éléments finis**

— Approximation de $H_0^1(\Omega)$ par des sous-espaces de dim. finie
 $(V_n)_{n \geq 0}$ tel que $V_n \subset H_0^1(\Omega) \forall n$

Schéma numérique :

$$\forall v_n \in V_n \quad \int_{\Omega} \nabla u_n \cdot \nabla v_n = \int_{\Omega} f v_n.$$

— L'inégalité de Poincaré s'applique.

— Injection compacte de $H^1(\Omega)$ dans $L^2(\Omega)$.

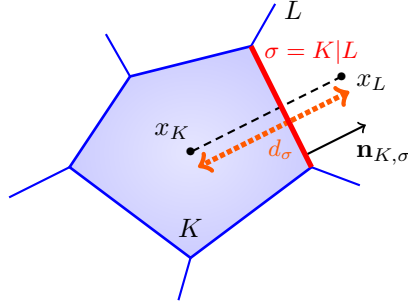
Volumes finis

$$X(\mathcal{T}) \not\subset H^1(\Omega)$$

— Contrepartie discrète de l'inégalité de Poincaré ?

— Arguments de compacité à adapter.

3.2 Présentation du schéma et premières propriétés**Le schéma**



$$\begin{cases} -\Delta u = f & \text{dans } \Omega, \\ u = 0 & \text{sur } \Gamma = \partial\Omega. \end{cases}$$

$$\mathcal{F}_{K,\sigma} \approx - \int_{\sigma} \nabla u \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma}$$

$$\sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{F}_{K,\sigma} = m(K)f_K \quad \forall K \in \mathcal{T},$$

$$\mathcal{F}_{K,\sigma} = \begin{cases} -\frac{m(\sigma)}{d_{\sigma}}(u_L - u_K) & \text{si } \sigma \in \mathcal{E}_{int}, \sigma = K|L, \\ -\frac{m(\sigma)}{d_{\sigma}}(0 - u_K) & \text{si } \sigma \in \mathcal{E}_{ext}. \end{cases}$$

$$(d_{\sigma} = d(x_K, \sigma) \text{ si } \sigma \in \mathcal{E}_{ext})$$

Mise sous forme matricielle

$$\begin{cases} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{F}_{K,\sigma} = m(K)f_K & \forall K \in \mathcal{T} \\ \mathcal{F}_{K,\sigma} = -\tau_{\sigma}(u_{K,\sigma} - u_K) & \forall K \in \mathcal{T}, \forall \sigma \in \mathcal{E}_K. \end{cases}$$

$$\text{avec } \tau_{\sigma} = \frac{m(\sigma)}{d_{\sigma}} \text{ et } u_{K,\sigma} = \begin{cases} u_L & \text{si } \sigma \in \mathcal{E}_{K,int}, \sigma = K|L, \\ 0 & \text{si } \sigma \in \mathcal{E}_{K,ext}. \end{cases}$$

Système linéaire $\mathbb{A}U = B$

- Inconnue : $U = (U_K)_{K \in \mathcal{T}}$,
- Second membre : $B = (B_K)_{K \in \mathcal{T}}$ avec $B_K = m(K)f_K$,
- Matrice : $\mathbb{A} = (\mathbb{A}_{K,L})_{K \in \mathcal{T}, L \in \mathcal{T}}$

$$\mathbb{A}_{K,K} = \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \tau_{\sigma}$$

$$\mathbb{A}_{K,L} = -\tau_{\sigma} \text{ si } \exists \sigma = K|L, 0 \text{ sinon}$$

Propriétés de la matrice A

Proposition 1 : A est symétrique définie positive

⇒ Calcul de $U^T A U$ pour $U \in \mathbb{R}^{|\mathcal{T}|}$

$$\begin{aligned} U^T A U &= \sum_{K \in \mathcal{T}} u_K (\mathbb{A}U)_K \\ &= \sum_{K \in \mathcal{T}} u_K \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{F}_{K,\sigma} \\ &= \sum_{K \in \mathcal{T}} u_K \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} (-\tau_{\sigma}(u_{K,\sigma} - u_K)) \\ &= \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E}_{int}, \\ \sigma = K|L}} \tau_{\sigma} (u_L - u_K)^2 + \sum_{K \in \mathcal{T}} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{K,ext}} \tau_{\sigma} u_K^2 \end{aligned}$$

⇒ $U^T A U \geq 0 \quad \forall U \in \mathbb{R}^{|\mathcal{T}|}$ et $U^T A U = 0 \implies U = 0$.

→ Existence d'une unique solution au schéma numérique.

Propriétés de la matrice A

Proposition 2 : A est monotone : $B \geq 0 \implies U \geq 0$

$\implies$ Calcul de $(U^-)^T AU$ pour $U \in \mathbb{R}^{|\mathcal{T}|}$ ($s^- = \min(s, 0)$)

$$\begin{aligned}
 (U^-)^T AU &= \sum_{K \in \mathcal{T}} u_K^- (\mathbb{A}U)_K \\
 &= \sum_{K \in \mathcal{T}} u_K^- \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{F}_{K,\sigma} \\
 &= \sum_{K \in \mathcal{T}} u_K^- \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} (-\tau_\sigma(u_{K,\sigma} - u_K)) \\
 &= \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E}_{int}, \\ \sigma=K|L}} \tau_\sigma(u_L^- - u_K^-)(u_L - u_K) \\
 &\quad + \sum_{K \in \mathcal{T}} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{K,ext}} \tau_\sigma(u_K^-)^2
 \end{aligned}$$

$\implies B \geq 0 \implies (U^-)^T B = (U^-)^T AU \leq 0 \implies U^- = 0$ et $U \geq 0$.

Version discrète de l'estimation d'énergie ?

$$AU = B \implies U^T AU = U^T B$$

$$\begin{aligned}
 \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E}_{int}, \\ \sigma=K|L}} \tau_\sigma(u_L - u_K)^2 + \sum_{K \in \mathcal{T}} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{K,ext}} \tau_\sigma u_K^2 &= \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) f_K u_K \\
 &\leq \left(\sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) f_K^2 \right)^{1/2} \left(\sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) u_K^2 \right)^{1/2}
 \end{aligned}$$

Inégalité de Poincaré discrète ? (admise pour l'instant)

$$\sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) u_K^2 \leq C \left(\sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E}_{int}, \\ \sigma=K|L}} \tau_\sigma(u_L - u_K)^2 + \sum_{K \in \mathcal{T}} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{K,ext}} \tau_\sigma u_K^2 \right)$$

Version discrète de l'estimation d'énergie ?

$(u_K)_{K \in \mathcal{T}}$ solution du schéma numérique vérifie :

$$\left(\sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E}_{int}, \\ \sigma=K|L}} \tau_\sigma(u_L - u_K)^2 + \sum_{K \in \mathcal{T}} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{K,ext}} \tau_\sigma u_K^2 \right)^{1/2} \leq C \|f\|_{L^2(\Omega)}.$$

Normes sur $X(\mathcal{T})$ $u_{\mathcal{T}} = \sum_{K \in \mathcal{T}} u_K \mathbf{1}_K$

$$\|u_{\mathcal{T}}\|_{L^2(\Omega)}^2 = \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) u_K^2$$

$$|u_{\mathcal{T}}|_{1,2,\Gamma,\mathcal{T}}^2 = \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E}_{int}, \\ \sigma = K|L}} \tau_{\sigma} (u_L - u_K)^2 + \sum_{K \in \mathcal{T}} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{K,ext}} \tau_{\sigma} u_K^2$$

→ Estimation H^1 discrète sur la solution approchée.

3.3 Étude de la convergence

Construction d'une suite de solutions approchées

Suite de maillages $(\mathcal{T}_n, \mathcal{E}_n, \mathcal{P}_n)_{n \geq 0}$

- Maillages admissibles,
- $\lim_{n \rightarrow \infty} h_n = 0$.

Suite de solutions approchées $(u_n)_{n \geq 0}$

$$u_n = u_{\mathcal{T}_n} \in X(\mathcal{T}_n).$$

Estimation H^1 discrète

Il existe C indépendante de n telle que

$$|u_n|_{1,2,\Gamma,\mathcal{T}_n} \leq C \quad \forall n \geq 0.$$

Résultat fondamental

Théorème

Soit

- $(\mathcal{T}_n, \mathcal{E}_n, \mathcal{P}_n)_{n \geq 0}$ une suite de maillages admissibles, avec $\lim h_n = 0$,
- $(u_n)_{n \geq 0}$ la suite de solutions approchées associées, obtenues avec le schémas volumes finis.

Alors,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} u_n = u \text{ dans } L^2(\Omega)$$

avec

- $u \in H_0^1(\Omega)$,
- et u est l'unique solution faible du problème de Dirichlet :

$$\forall v \in H_0^1(\Omega) \quad \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v = \int_{\Omega} f v.$$

Démonstration du théorème : étapes de la preuve

⇒ Compacité :

- Conséquence de l'estimation H^1 -discrète,
- Application du théorème de Riesz-Fréchet-Kolmogorov.

⇒ Convergence d'une sous-suite dans $L^2(\Omega)$ fort.

- ⇒ Soit u la limite : $u \in H_0^1(\Omega)$.
- ⇒ Passage à la limite dans le schéma numérique, pour montrer que u est solution faible du problème.
- ⇒ Unicité de la solution $\implies$ convergence de toute la suite.

CHAPITRE 2. ÉLÉMENTS D'ANALYSE FONCTIONNELLE “DISCRÈTE”

4 Cadre fonctionnel

Espace de solutions approchées

- Ω ouvert borné polyédrique de $\mathbb{R}^N$,
- $(\mathcal{T}, \mathcal{E}, \mathcal{P})$ maillage de Ω

$$X(\mathcal{T}) = \left\{ u_{\mathcal{T}} = \sum_{K \in \mathcal{T}} u_K \mathbf{1}_K \right\} \subset L^1(\Omega).$$

Normes L^q

- Pour $1 \leq q < +\infty$,

$$\begin{aligned} \|u_{\mathcal{T}}\|_{0,q} &= \left(\int_{\Omega} |u_{\mathcal{T}}(x)|^q dx \right)^{1/q} \\ &= \left(\sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) |u_K|^q \right)^{1/q}. \end{aligned}$$

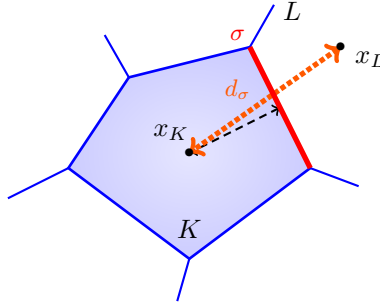
- $\|u_{\mathcal{T}}\|_{0,\infty} = \max_{K \in \mathcal{T}} |u_K|$.

Précisions sur le maillage

Régularité du maillage

- Chaque maille K est étoilée par rapport à x_K .
- Il existe $\xi > 0$ tel que

$$\forall K \in \mathcal{T}, \forall \sigma \in \mathcal{E}_K, d(x_K, \sigma) \geq \xi d_{\sigma}.$$



Normes $W^{1,p}$ discrètes

Cadre général

- Semi-norme $W^{1,p}$ discrète :

$$|u_{\mathcal{T}}|_{1,p,\mathcal{T}}^p = \sum_{\sigma=K|L} m(\sigma) d_{\sigma} \frac{|u_L - u_K|^p}{d_{\sigma}^p}.$$

- Norme $W^{1,p}$ discrète : $\|u_{\mathcal{T}}\|_{1,p,\mathcal{T}} = \|u_{\mathcal{T}}\|_{0,p} + |u_{\mathcal{T}}|_{1,p,\mathcal{T}}$.

Prise en compte de C.L. de Dirichlet sur $\Gamma^0 \subset \Gamma$

$$|u_{\mathcal{T}}|_{1,p,\Gamma^0,\mathcal{T}}^p = \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} m(\sigma) d_{\sigma} \frac{(D_{\sigma} u)^p}{d_{\sigma}^p}$$

$$\text{où } D_{\sigma} u = \begin{cases} |u_K - u_L| & \text{si } \sigma = K|L, \\ |u_K| & \text{si } \sigma \subset \Gamma^0, \\ 0 & \text{si } \sigma \subset \Gamma \setminus \Gamma^0. \end{cases}$$

Liens entre les normes

Pour $1 \leq s \leq p$, pour tout $u_{\mathcal{T}} \in X(\mathcal{T})$,

$$\|u_{\mathcal{T}}\|_{0,s} \leq m(\Omega)^{\frac{p-s}{ps}} \|u_{\mathcal{T}}\|_{0,p},$$

et

$$|u_{\mathcal{T}}|_{1,s,\mathcal{T}} \leq \left(\frac{dm(\Omega)}{\xi} \right)^{\frac{p-s}{ps}} |u_{\mathcal{T}}|_{1,p,\mathcal{T}}$$

Preuve

- Application de l'inégalité Hölder avec $p' = \frac{p}{s}$ et $q' = \frac{p}{p-s}$
- + Utilisation de la régularité du maillage :

$$\sum_{\sigma=K|L} m(\sigma) d_{\sigma} \leq \frac{1}{\xi} \sum_{K \in \mathcal{T}} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} m(\sigma) d(x_K, \sigma) = \frac{dm(\Omega)}{\xi}.$$

L'espace $L^1 \cap BV(\Omega)$

Variation totale

Soit Ω un ouvert de $\mathbb{R}^N$ et $u \in L^1(\Omega)$. On définit :

$$TV_{\Omega}(u) = \sup \left\{ \int_{\Omega} u(x) \operatorname{div} \phi(x) dx; \phi \in \mathcal{C}_c^1(\Omega, \mathbb{R}^N), \|\phi\|_{\infty} \leq 1 \right\}$$

$L^1 \cap BV(\Omega)$

On définit alors

$$L^1 \cap BV(\Omega) = \{u \in L^1(\Omega); TV_{\Omega}(u) < +\infty\}.$$

L'espace est muni de la norme

$$\|u\|_{BV(\Omega)} = \|u\|_{L^1(\Omega)} + TV_{\Omega}(u).$$

Lien entre $X(\mathcal{T})$ et $L^1 \cap BV(\Omega)$

Variation totale de $u_{\mathcal{T}} \in X(\mathcal{T})$

$$TV_{\Omega}(u_{\mathcal{T}}) = \sum_{\sigma=K|L} m(\sigma) |u_K - u_L| = \|u_{\mathcal{T}}\|_{1,1,\mathcal{T}}.$$

Inclusion

Pour tout $u_{\mathcal{T}} \in X(\mathcal{T})$, on a $\|u_{\mathcal{T}}\|_{1,1,\mathcal{T}} < +\infty$. Par conséquent :

$$X(\mathcal{T}) \subset L^1 \cap BV(\Omega).$$

5 Inégalités de Poincaré-Sobolev : du continu au discret

Références (non exhaustives !)

- HERBIN, 1995
- COUDIERE, VILA, VLLEDIEU, 1999
- EYMARD, GALLOUËT, HERBIN, 1999, 2000, 2010
- GALLOUËT, HERBIN, VIGNAL, 2000
- COUDIERE, GALLOUËT, HERBIN, 2001
- DRONIOU, GALLOUËT, HERBIN, 2003
- ANDREIANOV, GUTNIC, WITTBOLD, 2004
- FILBET, 2006
- GLITZKY, GRIEPENTROG, 2010
- ANDREIANOV, BENDAHMANE, RUIZ BAIER, 2011

- BESSEMOULIN-CHATARD, C.-H., FILBET

5.1 Le cas général

Inégalité de Poincaré-Sobolev

Théorème

Soit Ω un ouvert borné de $\mathbb{R}^N$, $N \geq 2$.

- Si $1 \leq p < N$, soit $1 \leq q \leq p^* = \frac{pN}{N-p}$.
- Si $p \geq N$, soit $1 \leq q < +\infty$.

Il existe une constante $C > 0$, dépendant uniquement de p , q , N et Ω telle que

$$\|u\|_{L^q(\Omega)} \leq C \|u\|_{W^{1,p}(\Omega)} \quad \forall u \in W^{1,p}(\Omega).$$

- ADAMS, 1975
- BRÉZIS, 2010

Inégalité de Poincaré-Sobolev discrète

Théorème (PSdis)

Soit Ω un ouvert borné polyédrique de $\mathbb{R}^N$, $N \geq 2$.

Soit $(\mathcal{T}, \mathcal{E}, \mathcal{P})$ un maillage régulier de Ω , de paramètre ξ .

- Si $1 \leq p < N$, soit $1 \leq q \leq p^* = \frac{pN}{N-p}$.
- Si $p \geq N$, soit $1 \leq q < +\infty$.

Il existe une constante $C > 0$, dépendant uniquement de p , q , N et Ω telle que

$$\|u_{\mathcal{T}}\|_{0,q} \leq \frac{C}{\xi^{(p-1)/p}} \|u_{\mathcal{T}}\|_{1,p,\mathcal{T}} \quad \forall u_{\mathcal{T}} \in X(\mathcal{T}).$$

Point de départ de la démonstration

- AMBROSIO, FUSCO, PALLARA, 2000
- ZIEMER, 1989

Théorème

Soit Ω un ouvert borné lipschitzien de $\mathbb{R}^N$, $N \geq 2$.

Il existe une constante $C > 0$, dépendant uniquement de Ω telle que

$$\left(\int_{\Omega} |u|^{\frac{N}{N-1}} \right)^{\frac{N-1}{N}} \leq C \|u\|_{BV(\Omega)} \quad \forall u \in L^1 \cap BV(\Omega).$$

$L^1 \cap BV(\Omega) \subset L^{N/(N-1)}(\Omega)$ avec injection continue.

Un lemme important

Lemme

Soit Ω un ouvert borné polyédrique de $\mathbb{R}^N$, $N \geq 2$.

Soit $(\mathcal{T}, \mathcal{E}, \mathcal{P})$ un maillage régulier de Ω , de régularité ξ .

Pour tout $s > 1$, $p > 1$, on a :

$$\|u_{\mathcal{T}}\|_{0,sN/(N-1)}^s \leq \frac{C}{\xi^{(p-1)/p}} \|u_{\mathcal{T}}\|_{0,(s-1)p/(p-1)}^{(s-1)} \|u_{\mathcal{T}}\|_{1,p,\mathcal{T}} \quad \forall u_{\mathcal{T}} \in X(\mathcal{T}).$$

Démonstration

⇒ application du théorème sur $L^1 \cap BV$ à $v_{\mathcal{T}} = |u_{\mathcal{T}}|^s$.

$$\Rightarrow l_h s \leq C \left(\frac{1}{\xi^{(p-1)/p}} \|u_{\mathcal{T}}\|_{1,p,\mathcal{T}} \|u_{\mathcal{T}}\|_{0,(s-1)p/(p-1)}^{(s-1)} + \|u_{\mathcal{T}}\|_{0,s}^s \right)$$

$$\Rightarrow \text{Interpolation : } \|u_{\mathcal{T}}\|_{0,s} \leq \|u_{\mathcal{T}}\|_{0,p}^{1/s} \|u_{\mathcal{T}}\|_{0,(s-1)p/(p-1)}^{(s-1)/s}.$$

Les points clés de la preuve de (PSdis)

$p = 1$

— Conséquence immédiate du théorème d'injection :

$$\|u_{\mathcal{T}}\|_{0,N/(N-1)} \leq C \|u_{\mathcal{T}}\|_{1,1,\mathcal{T}}.$$

— $p^* = \frac{N}{N-1} \Rightarrow$ résultat encore vrai $\forall 1 \leq q \leq p^*$.

$1 < p < N$

— Soit $s = \frac{(N-1)p}{N-p}$. On a donc :

$$s > 1, \quad \frac{(s-1)p}{p-1} = \frac{sN}{N-1} \quad \text{et} \quad \frac{sN}{N-1} = \frac{Np}{N-p}.$$

— Application du lemme :

$$\|u_{\mathcal{T}}\|_{0,pN/(N-p)} \leq \frac{C}{\xi^{(p-1)/p}} \|u_{\mathcal{T}}\|_{1,p,\mathcal{T}}.$$

— Résultat $\forall 1 \leq q \leq p^* = \frac{pN}{N-p}$.

$p = N$

— Application du lemme avec $p = N$:

$$\|u_{\mathcal{T}}\|_{0,sN/(N-1)}^s \leq \frac{C}{\xi^{(N-1)/N}} \|u_{\mathcal{T}}\|_{0,(s-1)N/(N-1)}^{(s-1)} \|u_{\mathcal{T}}\|_{1,N,\mathcal{T}}.$$

— Mais $L^{sN/(N-1)}(\Omega) \subset L^{(s-1)N/(N-1)}(\Omega)$, d'où

$$\|u_{\mathcal{T}}\|_{0,(s-1)N/(N-1)} \leq \frac{C}{\xi^{(N-1)/N}} \|u_{\mathcal{T}}\|_{1,N,\mathcal{T}}$$

— $s = 1 + (N-1)q/N$.

$p > N$

— On a alors : $\|u_{\mathcal{T}}\|_{1,N,\mathcal{T}} \leq \frac{C}{\xi^{(p-N)/(pN)}} \|u_{\mathcal{T}}\|_{1,p,\mathcal{T}}$.

— On utilise le résultat pour $p = N$.

5.2 Prise en compte des conditions aux bords

Position du problème

Ω ouvert borné polyédrique de $\mathbb{R}^N$, de bord Γ ,

$\Gamma^0 \subset \Gamma$ une partie du bord telle que $m(\Gamma^0) > 0$.

— Discrétisation d'un problème avec conditions aux limites de Dirichlet sur Γ^0 .

— Prise en compte la nullité au bord dans le calcul des $(u_K)_{K \in \mathcal{T}}$.

— Mais ces valeurs ne servent pas à la reconstruction de la fonction $u_{\mathcal{T}} \in X(\mathcal{T})$.

Rappel de la définition de la semi-norme discrète

$$|u_{\mathcal{T}}|_{1,p,\Gamma^0,\mathcal{T}}^p = \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} m(\sigma) d_{\sigma} \frac{(D_{\sigma} u)^p}{d_{\sigma}^p}$$

Inégalité de Poincaré-Sobolev sur $W_{\Gamma^0}^{1,p}(\Omega)$

Théorème

Soit Ω un ouvert borné de $\mathbb{R}^N$, $N \geq 2$.

Soit $\Gamma^0 \subset \Gamma$, $m(\Gamma^0) > 0$.

— Si $1 \leq p < N$, soit $1 \leq q \leq p^* = \frac{pN}{N-p}$.

— Si $p \geq N$, soit $1 \leq q < +\infty$.

Il existe une constante $C > 0$, dépendant uniquement de p , q , N et Ω telle que

$$\|u\|_{L^q(\Omega)} \leq C \|u\|_{W_{\Gamma^0}^{1,p}(\Omega)} \quad \forall u \in W_{\Gamma^0}^{1,p}(\Omega).$$

$$W_{\Gamma^0}^{1,p}(\Omega) = \{u \in W^{1,p}(\Omega); u = 0 \text{ sur } \Gamma^0\}.$$

Inégalité de Poincaré-Sobolev discrète, cas Dirichlet

Théorème (PSdis-cD)

Soit Ω un ouvert borné polyédrique de $\mathbb{R}^N$, $N \geq 2$.

Soit $\Gamma^0 \subset \Gamma$, $m(\Gamma^0) > 0$.

Soit $(\mathcal{T}, \mathcal{E}, \mathcal{P})$ un maillage régulier de Ω , de paramètre ξ .

- Si $1 \leq p < N$, soit $1 \leq q \leq p^* = \frac{pN}{N-p}$.
- Si $p \geq N$, soit $1 \leq q < +\infty$.

Il existe une constante $C > 0$, dépendant uniquement de p , q , N , Γ^0 et Ω telle que

$$\|u_{\mathcal{T}}\|_{0,q} \leq \frac{C}{\xi^{(p-1)/p}} |u_{\mathcal{T}}|_{1,p,\Gamma^0,\mathcal{T}} \quad \forall u_{\mathcal{T}} \in X(\mathcal{T}).$$

La preuve

Adaptation du point de départ ?

$$\|u_{\mathcal{T}}\|_{0,N/(N-1)} \leq C |u_{\mathcal{T}}|_{1,1,\Gamma^0,\mathcal{T}} \quad \forall u_{\mathcal{T}} \in X(\mathcal{T}).$$

Pour y arriver

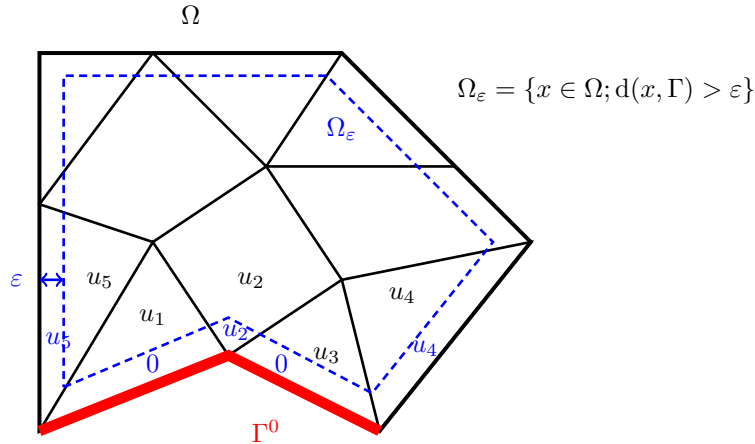
- Pour tout $u \in L^1 \cap BV(\Omega)$ avec $u = 0$ sur Γ_0

$$\|u\|_{L^{N/(N-1)}(\Omega)} \leq C TV_{\Omega}(u).$$

- Problèmes :

- $u_{\mathcal{T}} \in X(\mathcal{T})$ n'a pas de raison de vérifier $u_{\mathcal{T}} = 0$ sur Γ^0 .
- Les valeurs au bord ne sont pas prises en compte dans $TV_{\Omega}(u_{\mathcal{T}})$.

Idée : modification du maillage



- nouvelle fonction u_{ε} , qui vérifie $\|u_{\varepsilon}\|_{0,N/(N-1)} \leq C TV_{\Omega}(u_{\varepsilon})$,
- passage à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$:

$$\|u_{\mathcal{T}}\|_{0,N/(N-1)} \leq C |u_{\mathcal{T}}|_{1,1,\Gamma^0,\mathcal{T}} \quad \forall u_{\mathcal{T}} \in X(\mathcal{T}).$$

5.3 Poincaré-Wirtinger

Inégalité de Poincaré-Wirtinger discrète

Théorème (PWdis)

Soit Ω un ouvert borné polyédrique de $\mathbb{R}^N$, $N \geq 2$.

Soit $(\mathcal{T}, \mathcal{E}, \mathcal{P})$ un maillage régulier de Ω , de paramètre ξ .

Pour tout $1 \leq p < +\infty$, il existe une constante $C > 0$, dépendant uniquement de p , N et Ω telle que

$$\|u_{\mathcal{T}} - \bar{u}_{\mathcal{T}}\|_{0,p} \leq \frac{C}{\xi^{(p-1)/p}} |u_{\mathcal{T}}|_{1,p,\mathcal{T}} \quad \forall u_{\mathcal{T}} \in X(\mathcal{T}),$$

où

$$\bar{u}_{\mathcal{T}} = \frac{1}{\text{m}(\Omega)} \int_{\Omega} u_{\mathcal{T}}.$$

6 Des résultats de compacité

Rappel

Prérequis

Estimations sur la solution approchée $u_{\mathcal{T}}$ indépendantes du pas du maillage

Par exemple

— Schéma étudié lors du premier cours :

$$|u_{\mathcal{T}}|_{1,2,\Gamma,\mathcal{T}} \leq C$$

— Pour d'autres problèmes :

$$\|u_{\mathcal{T}}\|_{1,p,\mathcal{T}} \leq C$$

ou $|u_{\mathcal{T}}|_{1,p,\Gamma^0,\mathcal{T}} \leq C$

Compacité

Théorème de compacité de Kolmogorov

Soit Ω un ouvert borné de $\mathbb{R}^N$, $N \geq 1$.

Soit $A \subset L^q(\Omega)$, $1 \leq q < +\infty$.

A est relativement compact dans $L^q(\Omega)$ si et seulement si il existe $\{p(u), u \in A\} \subset L^q(\mathbb{R}^N)$ tel que :

1. $p(u) = u$ p.p. sur Ω , pour tout $u \in A$,
2. $\{p(u), u \in A\}$ est borné dans $L^q(\mathbb{R}^N)$,
3. $\|p(u)(\cdot + \eta) - p(u)(\cdot)\|_{L^q(\mathbb{R}^N)} \longrightarrow 0$ quand η tend vers 0, uniformément en $u \in A$.

Application au schéma pour le problème de Dirichlet

$A = \{u_{\mathcal{T}}; \text{ solution du schéma obtenue sur } (\mathcal{T}, \mathcal{E}, \mathcal{P})\} \subset L^2(\Omega)$

$$p(u_{\mathcal{T}}) = \begin{cases} u_{\mathcal{T}} & \text{sur } \Omega \\ 0 & \text{sur } \mathbb{R}^N \setminus \Omega \end{cases}$$

1. vérifié par définition

2. $\{p(u_{\mathcal{T}}), u_{\mathcal{T}} \in A\}$ est borné dans $L^2(\mathbb{R}^N)$:

$$\|p(u_{\mathcal{T}})\|_{L^2(\mathbb{R}^N)} = \|u_{\mathcal{T}}\|_{L^2(\mathbb{R}^N)}$$

3. On montre

$$\|p(u_{\mathcal{T}})(\cdot + \eta) - p(u_{\mathcal{T}})(\cdot)\|_{L^2(\mathbb{R}^N)}^2 \leq |\eta|(|\eta| + 2h)|u_{\mathcal{T}}|_{1,2,\Gamma,\mathcal{T}}^2.$$

□ EYMARD, GALLOUËT, HERBIN, 2000

Extension au problèmes évolutifs ?

Schéma VF pour l'équation de la chaleur

$$\begin{cases} \partial_t u - \Delta u = 0, \text{ sur } \Omega = [0, 1]^d, t \geq 0, u(0) = u_0 \\ + \text{CL Neumann} \end{cases}$$

$$\begin{cases} m(K) \frac{u_K^{n+1} - u_K^n}{\Delta t} + \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E}_{\text{int}}, \\ \sigma = K|L}} \tau_{\sigma} ((u_K^{n+1}) - (u_L^{n+1})) = 0, \forall K, \forall n \geq 0 \\ u_K^0 = \frac{1}{m(K)} \int_K u_0, \forall K \end{cases}$$

Solution approchée

$$u_{\mathcal{T}}^n = \sum_{K \in \mathcal{T}} u_K^n \mathbf{1}_K \in X(\mathcal{T})$$

$$u_{\mathcal{T}, \Delta t}(x, t) = u_{\mathcal{T}}^n(x) \text{ si } t \in [t^n, t^{n+1})$$

Extension au problèmes évolutifs ?

Compacité d'une suite de solutions approchées $(u_{\mathcal{T}_m, \Delta t_m})_{m \geq 0}$?

□ EYMARD, GALLOUËT, HERBIN, 2000

⇒ Estimations sur les translatées en temps

⇒ en réutilisant le schéma numérique

□ GALLOUËT, LATCHÉ, 2013

⇒ Application d'une version discrète du Théorème d'Aubin-Simon

7 D'autres inégalités fonctionnelles

7.1 Inégalités de Gagliardo-Nirenberg-Sobolev

Inégalité de Gagliardo-Nirenberg-Sobolev

Théorème

Soit Ω un ouvert borné de $\mathbb{R}^N$, $N \geq 2$.

- Si $1 \leq p < N$, soit $1 \leq s \leq m \leq p^* = \frac{pN}{N-p}$.
- Si $p \geq N$, soit $1 \leq s \leq m < +\infty$.

Il existe une constante $C > 0$, dépendant uniquement de p, s, m, N et Ω telle que

$$\|u\|_{L^m(\Omega)} \leq C \|u\|_{W^{1,p}(\Omega)}^\theta \|u\|_{L^s(\Omega)}^{1-\theta} \quad \forall u \in W^{1,p}(\Omega),$$

avec

$$\theta = \frac{\frac{1}{s} - \frac{1}{m}}{\frac{1}{s} + \frac{1}{N} - \frac{1}{p}}.$$

□ NIRENBERG, 1959

□ FRIEDMAN, 1969

Analogie discret

Théorème (GNSdis)

Soit Ω un ouvert borné polyédrique de $\mathbb{R}^N$, $N \geq 2$.

Soit $(\mathcal{T}, \mathcal{E}, \mathcal{P})$ un maillage régulier de Ω , de paramètre ξ .

- Si $1 \leq p < N$, soit $1 \leq s \leq m \leq p^* = \frac{pN}{N-p}$.
- Si $p \geq N$, soit $1 \leq s \leq m < +\infty$.

Il existe une constante $C > 0$, dépendant uniquement de p, s, m, N et Ω telle que

$$\|u_{\mathcal{T}}\|_{0,m} \leq \frac{C}{\xi^{(p-1)\theta/p}} \|u_{\mathcal{T}}\|_{1,p,\mathcal{T}}^\theta \|u_{\mathcal{T}}\|_{0,s}^{1-\theta} \quad \forall u_{\mathcal{T}} \in X(\mathcal{T}),$$

avec

$$\theta = \frac{\frac{1}{s} - \frac{1}{m}}{\frac{1}{s} + \frac{1}{N} - \frac{1}{p}}.$$

Idée de la preuve de (GNSdis)

$1 \leq p < N$

- Pour $1 \leq s \leq m \leq p^*$, on a

$$\frac{1}{m} = \frac{\theta}{p^*} + \frac{1-\theta}{s}.$$

- Résultat d'interpolation : $\|u_{\mathcal{T}}\|_{0,m} \leq \|u_{\mathcal{T}}\|_{0,p^*}^\theta \|u_{\mathcal{T}}\|_{0,s}^{1-\theta}$.
- + Application de (PSdis).

$p \geq N$

— Preuve par récurrence sur $k \in \mathbb{N}$, tel que

$$1 \leq s + k \leq m \leq s + k + 1.$$

□ BESSEMOULIN-CHATARD, C.-H., FILBET

□ BESSEMOULIN-CHATARD, JÜNGEL, 2014

7.2 Inégalité de Sobolev logarithmique

Motivation

Équation de la chaleur ($m(\Omega) = 1$)

$$\begin{cases} \partial_t u - \Delta u = 0, \text{ sur } \Omega = [0, 1]^d, \ t \geq 0, \ u(0) = u_0 \\ + \text{ CL Neumann ou CL périodiques} \end{cases}$$

— Conservation de la masse : $\int_{\Omega} u(\cdot, t) = \int_{\Omega} u_0$.

— Positivité : $u_0 \geq 0 \implies u(\cdot, t) \geq 0$. [3mm]

— État stationnaire : u_{∞} , fonction constante telle que $u_{\infty} = \int_{\Omega} u_0$

Étude du comportement en temps long

$$u(\cdot, t) \longrightarrow u_{\infty} \text{ quand } t \rightarrow +\infty ?$$

Méthode d'entropie-dissipation

Entropie : $E(u) = \int_{\Omega} u \log(u/u_{\infty})$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} E(u) &= \int_{\Omega} \left(\log\left(\frac{u}{u_{\infty}}\right) + 1 \right) \Delta u \\ &= - \int_{\Omega} \nabla u \cdot \frac{\nabla u}{u} = -4 \int_{\Omega} |\nabla \sqrt{u}|^2 \end{aligned}$$

Dissipation d'entropie : $D(u) = 4 \int_{\Omega} |\nabla \sqrt{u}|^2$

Lien entropie/dissipation : Inégalité de Sobolev logarithmique

$$\int_{\Omega} f^2 \log \frac{f^2}{\|f\|_{L^2(\Omega)}^2} \leq C \int_{\Omega} |\nabla f|^2 \quad \forall f \in H^1(\Omega) \quad (m(\Omega) = 1)$$

— $D(u) \geq \lambda E(u)$

— Convergence exponentielle de $E(u)$ vers 0

Inégalité de Sobolev logarithmique discrète

□ BESSEMOULIN-CHATARD, JÜNGEL, 2014

Théorème (ISdis)

Soit Ω un ouvert borné polyédrique de $\mathbb{R}^N$, $N \geq 2$.

Soit $(\mathcal{T}, \mathcal{E}, \mathcal{P})$ un maillage régulier de Ω , de paramètre ξ .

Il existe une constante $C > 0$, dépendant uniquement de N , ξ et Ω telle que

$$\int_{\Omega} u_{\mathcal{T}}^2 \log \frac{u_{\mathcal{T}}^2}{(\mathfrak{m}(\Omega))^{-1} \|u_{\mathcal{T}}\|_{0,2}^2} \leq C |u_{\mathcal{T}}|_{1,2,\mathcal{T}}^2 \quad \forall u_{\mathcal{T}} \in X(\mathcal{T}).$$

Démonstration

$$m = \mathfrak{m}(\Omega), \quad \bar{u}_{\mathcal{T}} = \frac{1}{m} \int_{\Omega} u_{\mathcal{T}}, \quad v_{\mathcal{T}} = \frac{\sqrt{m}(u_{\mathcal{T}} - \bar{u}_{\mathcal{T}})}{\|u_{\mathcal{T}} - \bar{u}_{\mathcal{T}}\|_{0,2}}$$

— Inégalité de Jensen :

$$\frac{2}{q-2} \int_{\Omega} \log(v_{\mathcal{T}}^{q-2})(m^{-1}v_{\mathcal{T}}^2 dx) \leq \frac{2}{q-2} \log \left(\int_{\Omega} v_{\mathcal{T}}^{q-2}(m^{-1}v_{\mathcal{T}}^2 dx) \right)$$

— D'où, avec $\log x \leq x - 1$,

$$\int_{\Omega} (u_{\mathcal{T}} - \bar{u}_{\mathcal{T}})^2 \log \frac{(u_{\mathcal{T}} - \bar{u}_{\mathcal{T}})^2}{m^{-1} \|u_{\mathcal{T}} - \bar{u}_{\mathcal{T}}\|_{0,2}^2} \leq \frac{q}{q-2} (\|u_{\mathcal{T}} - \bar{u}_{\mathcal{T}}\|_{0,q}^2 - \|u_{\mathcal{T}} - \bar{u}_{\mathcal{T}}\|_{0,2}^2).$$

— Application des théorèmes de Poincaré-Sobolev discret et de Poincaré-Wirtinger discret

— + une inégalité due à GUIONNET, ZEGARLINSKI, 2003

CHAPITRE 3. COMPORTEMENT EN TEMPS LONG POUR UNE ÉQUATION DE DIFFUSION NON LINÉAIRE

8 Introduction

Méthode d'entropie-dissipation

□ ARNOLD, CARRILLO, DESVILLETES, DOLBEAUT, JÜNGEL, LEDERMAN, MARKOWICH, TOSCANI, VILLANI, 2004

Généralités

- Outil pour l'étude qualitative de modèles physiques
- Convergence vers un état d'équilibre de systèmes de particules en interaction
- Principes physiques
 - ⇒ les interactions entre particules font croître l'entropie
 - ⇒ l'état d'équilibre est l'état qui maximise l'entropie

Problème considéré

$$\begin{cases} \partial_t u - \Delta(u^\beta) = 0, \text{ sur } \Omega = [0, 1]^d, t \geq 0, u(0) = u_0 \geq 0 \\ + \text{ CL Neumann } \nabla(u^\beta) \cdot \mathbf{n} = 0 \end{cases}$$

- $0 < \beta < 1$: diffusion rapide
- $\beta = 1$: chaleur
- $\beta > 1$: milieux poreux

Propriétés qualitatives

- Conservation de la masse : $\int_{\Omega} u(\cdot, t) = \int_{\Omega} u_0$.
- Positivité : $u_0 \geq 0 \implies u(\cdot, t) \geq 0$.

État stationnaire ($m(\Omega) = 1$)

u_{∞} : fonction constante telle que $u_{\infty} = \int_{\Omega} u_0$

Entropies considérées

Ordre 0

$$E_{\alpha}[u] = \frac{1}{\alpha + 1} \left(\int_{\Omega} u^{\alpha+1} dx - \left(\int_{\Omega} u dx \right)^{\alpha+1} \right)$$

Ordre 1

$$F_{\alpha}[u] = \frac{1}{2} \int_{\Omega} |\nabla u^{\alpha/2}|^2 dx$$

□ C.-H., JÜNGEL, SCHUCHNIGG

9 Résultats obtenus sur le problème continu

Équation des milieux poreux / diffusion rapide

$$\begin{cases} \partial_t u - \Delta(u^\beta) = 0, \text{ sur } \Omega = [0, 1]^d, \ t \geq 0, \ u(0) = u_0 \\ u_\infty : \text{ fonction constante telle que } u_\infty = \int_\Omega u_0. \end{cases}$$

$$\begin{aligned} - E_\alpha[u] &= \frac{1}{\alpha + 1} \left(\int_\Omega u^{\alpha+1} dx - \left(\int_\Omega u dx \right)^{\alpha+1} \right) \\ \frac{d}{dt} E_\alpha[u] &= \int_\Omega u^\alpha \partial_t u = \int_\Omega u^\alpha \Delta(u^\beta) \\ &= - \int_\Omega \nabla u^\alpha \cdot \nabla u^\beta \\ &= - \frac{4\alpha\beta}{(\alpha + \beta)^2} \int_\Omega |\nabla u^{(\alpha+\beta)/2}|^2. \end{aligned}$$

$$- D_\alpha[u] = \frac{4\alpha\beta}{(\alpha + \beta)^2} \int_\Omega |\nabla u^{(\alpha+\beta)/2}|^2.$$

Avec Poincaré-Wirtinger ?

Inégalité de Poincaré-Wirtinger $f \in H^1(\Omega)$ ($m(\Omega) = 1$)

$$\begin{aligned} \int_\Omega \left(f - \frac{1}{m(\Omega)} \int_\Omega f \right)^2 &\leq C_P^2 \|\nabla f\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ \|f\|_{L^2(\Omega)}^2 - \|f\|_{L^1(\Omega)}^2 &\leq C_P^2 \|\nabla f\|_{L^2(\Omega)}^2 \end{aligned}$$

Application $f = u^{(\alpha+\beta)/2}$

$$\begin{aligned} -D_\alpha[u] &= - \frac{4\alpha\beta}{(\alpha + \beta)^2} \int_\Omega |\nabla u^{(\alpha+\beta)/2}|^2 \\ &\leq - \frac{4\alpha\beta}{C_P^2(\alpha + \beta)^2} \left(\int_\Omega |u^{(\alpha+\beta)/2}|^2 - \left(\int_\Omega |u^{(\alpha+\beta)/2}| \right)^2 \right) \\ &\leq ??? - K (E_\alpha[u])^\kappa \end{aligned}$$

Inégalité de Beckner

□ BECKNER 1989

$$\int_\Omega |f|^2 - \left(\int_\Omega |f|^{2/r} \right)^r \leq C_B^0(r) \|\nabla f\|_{L^2(\Omega)}^2, \quad 1 \leq r \leq 2$$

Démonstration

- $f \in H^1(\Omega)$, $m(\Omega) = 1$
- Inégalité de Poincaré-Wirtinger :

$$\|f\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq C_P^2 \|\nabla f\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|f\|_{L^1(\Omega)}^2$$

— Inégalité de Jensen ($x \mapsto x^{2/r}$ est convexe) :

$$\begin{aligned} \left(\int_{\Omega} |f(x)| dx \right)^{2/r} &\leq \int_{\Omega} |f(x)|^{2/r} dx \\ \implies \|f\|_{L^1(\Omega)}^2 &\leq \left(\int_{\Omega} |f(x)|^{2/r} dx \right)^r \end{aligned}$$

Généralisation

Inégalité de Beckner généralisée I $f \in H^1(\Omega)$

$$\int_{\Omega} |f|^q - \left(\int_{\Omega} |f|^{1/p} \right)^{pq} \leq C_B(p, q) \|\nabla f\|_{L^2(\Omega)}^q, \quad 0 \leq q < 2, \quad pq \geq 1.$$

Démonstration

— Généralisation de Poincaré-Wirtinger :

$$\|f\|_{L^2(\Omega)}^q \leq C_P^q \|\nabla f\|_{L^2(\Omega)}^q + \|f\|_{L^q(\Omega)}^q$$

— Généralisation de l'inégalité de Sobolev logarithmique :

$$\int_{\Omega} |f|^q \log \frac{|f|^q}{\|f\|_{L^q(\Omega)}^q} \leq \frac{2C_P^q}{2-q} \|\nabla f\|_{L^2(\Omega)}^2.$$

— Convexité de la fonction $G(r) = r \log \int_{\Omega} |f|^{q/r} dx$.

Lien entropie/dissipation

$$\int_{\Omega} |f|^q - \left(\int_{\Omega} |f|^{1/p} \right)^{pq} \leq C_B(p, q) \|\nabla f\|_{L^2(\Omega)}^q, \quad 0 \leq q < 2, \quad pq \geq 1$$

Application : $f = u^{\frac{\alpha+\beta}{2}}, p = \frac{\alpha+\beta}{2}, q = \frac{2(\alpha+1)}{\alpha+\beta}$

$$\int_{\Omega} u^{\alpha+1} - \left(\int_{\Omega} u \right)^{\alpha+1} \leq C_B(p, q) \left\| \nabla u^{(\alpha+\beta)/2} \right\|_{L^2(\Omega)}^{\frac{2(\alpha+1)}{\alpha+\beta}} \text{ pour } \alpha > 0, \beta > 1.$$

Conséquence

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} E_{\alpha}[u] &= -\frac{4\alpha\beta}{(\alpha+\beta)^2} \int_{\Omega} |\nabla u^{(\alpha+\beta)/2}|^2 \\ &\leq -\frac{4\alpha\beta}{(\alpha+\beta)^2} \left(\frac{\alpha+1}{C_B(p, q)} \right)^{\frac{\alpha+\beta}{\alpha+1}} (E_{\alpha}[u])^{\frac{\alpha+\beta}{\alpha+1}}. \end{aligned}$$

Décroissance polynomiale de l'entropie

Théorème

- $\alpha > 0, \beta > 1$ (milieux poreux)
- $u_0 \in L^\infty(\Omega), \inf_\Omega u_0 \geq 0$
- u solution régulière (positive) du problème

Alors

$$E_\alpha[u(t)] \leq \frac{1}{\left(C_1 t + C_2\right)^{\frac{\alpha+1}{\beta-1}}}.$$

avec

$$C_1 = \frac{4\alpha\beta(\beta-1)}{(\alpha+1)(\alpha+\beta)^2} \left(\frac{\alpha+1}{C_B(p,q)} \right)^{(\alpha+\beta)/(\alpha+1)},$$

$$C_2 = E_\alpha[u_0]^{-(\beta-1)/(\alpha+1)}$$

Vers une décroissance exponentielle, pour $\beta > 1$

Inégalité de Beckner généralisée II

$$\|f\|_{L^q(\Omega)}^{2-q} \left(\int_\Omega |f|^q - \left(\int_\Omega |f|^{1/p} \right)^{pq} \right) \leq C'_B(p,q) \|\nabla f\|_{L^2(\Omega)}^2, \quad 0 \leq q < 2, pq \geq 1$$

Application : $f = u^{\frac{\alpha+\beta}{2}}, p = \frac{\alpha+\beta}{2}, q = \frac{2(\alpha+1)}{\alpha+\beta}$

$$\|u\|_{L^{\alpha+1}}^{\beta-1} \left(\int_\Omega u^{\alpha+1} - \left(\int_\Omega u \right)^{\alpha+1} \right) \leq C'_B(p,q) \left\| \nabla u^{(\alpha+\beta)/2} \right\|_{L^2(\Omega)}^2$$

Conséquence $(\|u\|_{L^{\alpha+1}(\Omega)} \geq \|u\|_{L^1(\Omega)} = \|u_0\|_{L^1(\Omega)})$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} E_\alpha[u] &= -\frac{4\alpha\beta}{(\alpha+\beta)^2} \int_\Omega |\nabla u^{(\alpha+\beta)/2}|^2 \\ &\leq -\frac{4\alpha\beta(\alpha+1)}{(\alpha+\beta)^2} \frac{\|u_0\|_{L^1(\Omega)}^{\beta-1}}{C'_B(p,q)} E_\alpha(u) \end{aligned}$$

Vers une décroissance exponentielle, pour $0 < \beta < 1$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} E_\alpha[u] &= -\int_\Omega \nabla u^\alpha \cdot \nabla u^\beta = -\alpha\beta \int_\Omega u^{\beta-1} u^{\alpha-1} \nabla u \cdot \nabla u \\ &= -\frac{4\alpha\beta}{(\alpha+1)^2} \int_\Omega u^{\beta-1} \left| \nabla u^{(\alpha+1)/2} \right|^2 \\ &\leq -\frac{4\alpha\beta}{(\alpha+1)^2} \inf_\Omega (u_0^{\beta-1}) \int_\Omega \left| \nabla u^{(\alpha+1)/2} \right|^2. \end{aligned}$$

Inégalité de Beckner

$$\int_\Omega |f|^2 - \left(\int_\Omega |f|^{2/r} \right)^r \leq C_B^0(r) \|\nabla f\|_{L^2(\Omega)}^2, \quad 1 \leq r \leq 2$$

Application Avec $f = u^{\frac{\alpha+1}{2}}$, $r = \alpha + 1$, pour $0 < \alpha \leq 1$:

$$\frac{d}{dt} E_\alpha[u] \leq -\frac{4\alpha\beta}{C_B^0(\alpha+1)(\alpha+1)} \inf_\Omega (u_0^{\beta-1}) E_\alpha[u].$$

Décroissance exponentielle de l'entropie

Théorème

- $0 < \alpha \leq 1$, $\beta > 0$ (diffusion rapide et milieux poreux)
- $u_0 \in L^\infty(\Omega)$, $\inf_\Omega u_0 \geq 0$
- u solution régulière (positive) du problème

Alors

$$E_\alpha[u(t)] \leq E_\alpha[u_0] e^{-\Lambda t}.$$

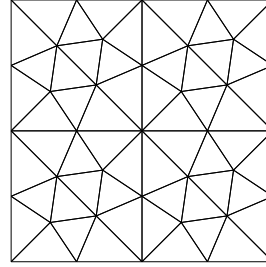
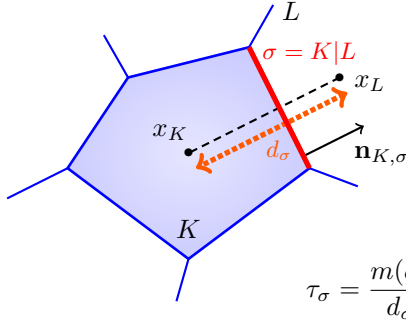
avec

$$\Lambda = \frac{4\alpha\beta}{C_B^0(\alpha+1)(\alpha+1)} \inf_\Omega (u_0^{\beta-1}) \text{ pour } \beta > 0$$

$$\Lambda = \frac{4\alpha\beta(\alpha+1)}{C'_B(p,q)(\alpha+\beta)^2} \|u_0\|_{L^1(\Omega)}^{\beta-1} \text{ pour } \beta > 1$$

10 Résultats obtenus sur le problème discret

Notations



- $\mathcal{T}$: ensemble de mailles K , ouverts polygonaux convexes de Ω
- $\mathcal{E}$: ensemble des arêtes σ , $\mathcal{E}_{int}$: arêtes intérieures
- $\mathcal{P}$: famille de points $x_K \in K$ tels que $(x_K, x_L) \perp \sigma$ si $\sigma = K|L$
- Pour les inégalités fonctionnelles discrètes :

$$\exists \zeta > 0 \text{ tel que } d(x_K, \sigma) \geq \zeta d_\sigma, \quad \forall K \in \mathcal{T}, \forall \sigma \in \mathcal{E}_K.$$

Schéma numérique

$$\begin{cases} m(K) \frac{u_K^{n+1} - u_K^n}{\Delta t} + \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E}_{int}, \\ \sigma = K|L}} \tau_\sigma ((u_K^{n+1})^\beta - (u_L^{n+1})^\beta) = 0, \forall K, \forall n \geq 0, \\ u_K^0 = \frac{1}{m(K)} \int_K u_0, \forall K. \end{cases}$$

Existence, unicité, stabilité

□ EYMARD, GALLOUËT, HERBIN, 2000

Proposition

- $\beta > 0$ (diffusion rapide et milieux poreux)
- $u_0 \in L^\infty(\Omega)$, $0 \leq m \leq u_0 \leq M$
- $\mathcal{T}$ maillage admissible

Alors, le schéma admet une unique solution $(u_K^n)_{K \in \mathcal{T}, 0 \leq n \leq N}$ et

$$m \leq u_K^n \leq M, \quad \text{pour tout } K \in \mathcal{T}, 0 \leq n \leq N,$$

$$\sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) u_K^n = \|u_0\|_{L^1(\Omega)}, \quad \text{pour tout } 0 \leq n \leq N.$$

Définition des entropies discrètes

Au niveau continu

$$E_\alpha[u] = \frac{1}{\alpha + 1} \left(\int_\Omega u^{\alpha+1} dx - \left(\int_\Omega u dx \right)^{\alpha+1} \right)$$

$$F_\alpha[u] = \frac{1}{2} \int_\Omega \left| \nabla u^{\alpha/2} \right|^2 dx$$

Au niveau discret $(u_{\mathcal{T}} \in X(\mathcal{T}), \text{ on note } u = u_{\mathcal{T}})$

$$E_\alpha^d[u] = \frac{1}{\alpha + 1} \left(\sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) u_K^{\alpha+1} - \left(\sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) u_K \right)^{\alpha+1} \right),$$

$$F_\alpha^d[u] = \frac{1}{2} \left| u^{\alpha/2} \right|_{1,2,\mathcal{T}}^2.$$

Décroissance des entropies d'ordre 0

$$E_\alpha^d[u^{n+1}] - E_\alpha^d[u^n] = \frac{1}{\alpha + 1} \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) ((u_K^{n+1})^{\alpha+1} - (u_K^n)^{\alpha+1})$$

$$\text{[convexité]} \leq \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) (u_K^{n+1})^\alpha (u_K^{n+1} - u_K^n)$$

$$\text{[schéma]} \leq -\Delta t \sum_{K \in \mathcal{T}} \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E}_{\text{int}}, \\ \sigma = K|L}} \tau_\sigma (u_K^{n+1})^\alpha ((u_K^{n+1})^\beta - (u_L^{n+1})^\beta)$$

$$\text{[IPP]} \leq -\Delta t \sum_{\substack{\sigma \in \mathcal{E}_{\text{int}}, \\ \sigma = K|L}} \tau_\sigma ((u_K^{n+1})^\alpha - (u_L^{n+1})^\alpha) \cdot ((u_K^{n+1})^\beta - (u_L^{n+1})^\beta)$$

$$\leq -\frac{4\alpha\beta\Delta t}{(\alpha + \beta)^2} \left| (u^{n+1})^{(\alpha+\beta)/2} \right|_{1,2,\mathcal{T}}^2,$$

car

$$(y^\alpha - x^\alpha)(y^\beta - x^\beta) \geq \frac{4\alpha\beta}{(\alpha + \beta)^2} (y^{(\alpha+\beta)/2} - x^{(\alpha+\beta)/2})^2, \quad \forall x, y \geq 0$$

Lien entropie/dissipation : Beckner discret**Inégalité de Beckner discrète I** $f_{\mathcal{T}} \in X(\mathcal{T})$

$$\int_{\Omega} |f_{\mathcal{T}}|^q dx - \left(\int_{\Omega} |f_{\mathcal{T}}|^{1/p} dx \right)^{pq} \leq C_b(p, q) |f_{\mathcal{T}}|_{1,2,\mathcal{T}}^q \quad 0 < q < 2, \quad pq > 1 \text{ ou } q = 2, \quad 0 < p \leq 1.$$

Inégalité de Beckner discrète II $f_{\mathcal{T}} \in X(\mathcal{T})$

$$\|f_{\mathcal{T}}\|_{0,q}^{2-q} \left(\int_{\Omega} |f_{\mathcal{T}}|^q dx - \left(\int_{\Omega} |f_{\mathcal{T}}|^{1/p} dx \right)^{pq} \right) \leq C'_b(p, q) |f_{\mathcal{T}}|_{1,2,\mathcal{T}}^2, \quad 0 < q < 2, \quad pq \geq 1.$$

Point de départ : inégalité de Poincaré-Wirtinger discrète

Comportement polynomial**Application de Beckner discret I**

$$\begin{aligned} E_{\alpha}^d[u^{n+1}] - E_{\alpha}^d[u^n] &\leq -\frac{4\alpha\beta\Delta t}{(\alpha + \beta)^2} \left| (u^{n+1})^{(\alpha+\beta)/2} \right|_{1,2,\mathcal{T}}^2 \\ &\leq -\frac{4\alpha\beta\Delta t}{(\alpha + \beta)^2} \left(\frac{\alpha + 1}{C_b(p, q)} \right)^{\frac{\alpha+\beta}{\alpha+1}} E_{\alpha}^d[u^{n+1}]^{\frac{\alpha+\beta}{\alpha+1}} \end{aligned}$$

Lemme de Gronwall discretSoit (x_n) suite de réels positifs tels que

$$x_{n+1} - x_n + \tau x_{n+1}^{\gamma} \leq 0, \forall n.$$

Alors

$$x_n \leq \frac{1}{(x_0^{1-\gamma} + c\tau n)^{1/(\gamma-1)}}, \quad n \in \mathbb{N},$$

avec $c = (\gamma - 1)/(1 + \gamma\tau x_0^{\gamma-1})$.**Comportement polynomial****Théorème**

- $\alpha > 0, \beta > 1$ (milieux poreux)
- $u_0 \in L^{\infty}(\Omega), \inf_{\Omega} u_0 \geq 0$
- Maillage admissible
- $(u_K^n)_{K \in \mathcal{T}, n \geq 0}$ solution du schéma numérique

Alors

$$E_{\alpha}^d[u^n] \leq \frac{1}{(c_1 n \Delta t + c_2)^{\frac{\alpha+1}{\beta-1}}}, \quad \forall n \geq 0.$$

Comportement exponentiel

Théorème

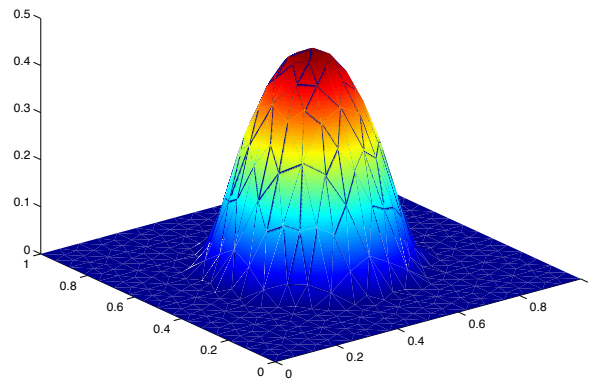
- $0 < \alpha \leq 1, \beta > 0$
- $u_0 \in L^\infty(\Omega), \inf_\Omega u_0 \geq 0$
- Maillage admissible
- $(u_K^n)_{K \in \mathcal{T}, n \geq 0}$ solution du schéma numérique

Alors

$$E_\alpha^d[u^n] \leq E_\alpha^d[u^0] e^{-\lambda n \Delta t}, \quad \forall n \geq 0.$$

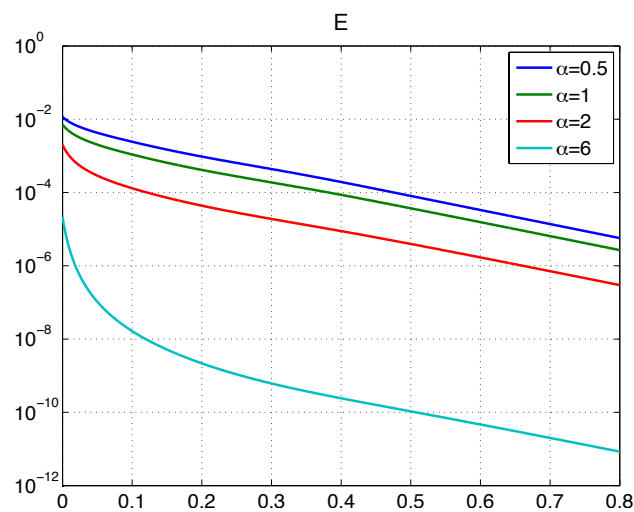
Simulations numériques, $\beta = 2$

Profil initial de Barenblatt



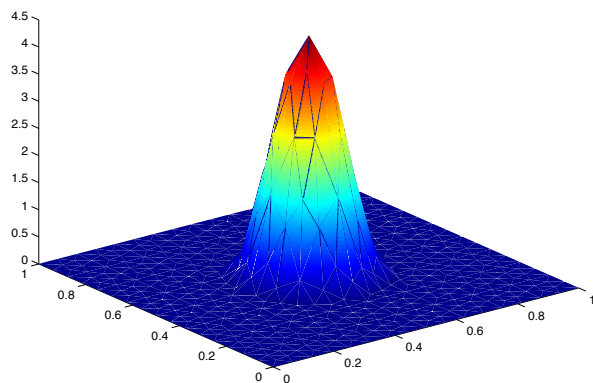
Simulations numériques, $\beta = 2$

Entropies d'ordre 0



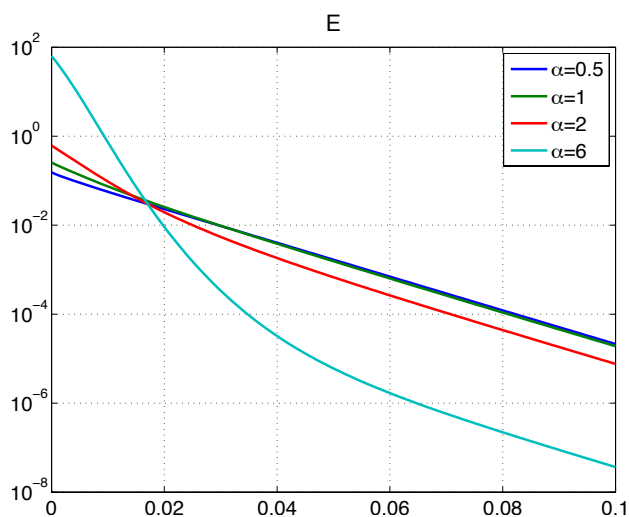
Simulations numériques, $\beta = 1/2$

Profil initial



Simulations numériques, $\beta = 1/2$

Entropies d'ordre 0



Pour finir : les entropies d'ordre 1

□ JÜNGEL, MATTHES, 2006

— Équation de diffusion avec CL périodiques (sur $\mathbb{T}^d$)

— Restriction sur les paramètres α et β

Alors,

— Décroissance exponentielle de F_α

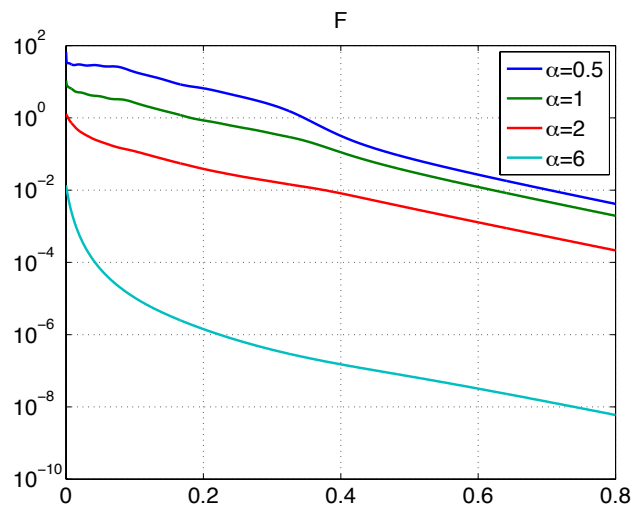
en dimension 1 et en dimension supérieure

— Décroissance de F_α^d

— Décroissance exponentielle de F_α^d en dimension 1

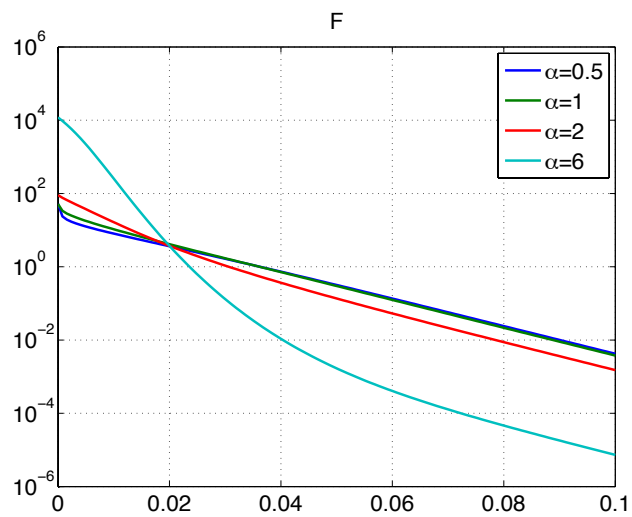
Simulations numériques, $\beta = 2$

Entropies d'ordre 1



Simulations numériques, $\beta = 1/2$

Entropies d'ordre 1



CHAPITRE 4. COMPORTEMENTS ASYMPTOTIQUES POUR LE MODÈLE DE DÉRIVE-DIFFUSION

11 Résultats sur le problème continu

Retour sur le système de dérive-diffusion

Le système

$$\begin{cases} \partial_t N + \operatorname{div}(-\nabla r(N) + N \nabla \Psi) = 0 \\ \partial_t P + \operatorname{div}(-\nabla r(P) - P \nabla \Psi) = 0 \\ -\lambda^2 \Delta \Psi = P - N + C \end{cases}$$

Conditions initiales

$$N_0, P_0$$

Conditions aux limites Dirichlet/Neumann

$$\begin{aligned} N &= N^D, P = P^D, \Psi = \Psi^D \text{ sur } \Gamma^D, \\ \nabla r(N) \cdot \mathbf{n} &= \nabla r(P) \cdot \mathbf{n} = \nabla \Psi \cdot \mathbf{n} \text{ sur } \Gamma^N. \end{aligned}$$

Résultats d'existence d'une solution faible

- GAJEWSKI, 1985 ($\gamma = 1$)
- JÜNGEL, 1994 (cas dégénéré)

Hypothèses

- $N_0, P_0 \in L^\infty(\Omega)$,
- $N^D, P^D \in L^\infty \cap H^1(\Omega)$, $\Psi^D \in H^1(\Omega)$,
- $C \in L^\infty(\Omega)$,
- $\exists m > 0, M > 0$ tels que

$$m \leq N_0, P_0, N^D, P^D \leq M \text{ p.p. dans } \Omega.$$

- $r(s) = s^\gamma$, $\gamma \geq 1$.

Cas où le dopage C est nul

$$m \leq N(\cdot, t), P(\cdot, t) \leq M \text{ p.p. dans } \Omega.$$

11.1 Comportement en temps grand

État d'équilibre : l'équilibre thermique

Définition

$$\begin{cases} \nabla r(N) - N \nabla \Psi = N \nabla (h(N) - \Psi) = 0 \\ \nabla r(P) + P \nabla \Psi = P \nabla (h(P) + \Psi) = 0 \\ \lambda^2 \Delta \Psi = N - P - C \end{cases} \quad (h'(s) = \frac{r'(s)}{s})$$

avec des conditions aux limites Dirichlet/Neumann

Résultats

Existence d'un équilibre thermique + unicité sous les conditions :

$$h(N) - \Psi \begin{cases} = \alpha_n & \text{si } N > 0 \\ \geq \alpha_n & \text{si } N = 0 \end{cases} \quad h(P) + \Psi \begin{cases} = \alpha_p & \text{si } P > 0 \\ \geq \alpha_p & \text{si } P = 0 \end{cases} \quad (*)$$

$$h(N^D) + h(P^D) = \alpha_n + \alpha_p \text{ et } (*) \text{ pour } N^D, P^D, \Psi^D$$

□ MARKOWICH, UNTERREITER, 1993

□ UNTERREITER, 1994

État d'équilibre : l'équilibre thermique

(*) + définition d'un inverse généralisé g

$$\implies N = g(\alpha_n + \Psi), P = g(\alpha_p - \Psi)$$

Re-définition

$$\begin{cases} N = g(\alpha_n + \Psi), P = g(\alpha_p - \Psi) \\ \lambda^2 \Delta \Psi = g(\alpha_n + \Psi) - g(\alpha_p - \Psi) - C \\ \Psi = \Psi^D \text{ sur } \Gamma^D, \quad \nabla \Psi \cdot \nu = 0 \text{ sur } \Gamma^N \end{cases}$$

avec

$$\begin{aligned} \alpha_n &= h(N^D) - \Psi^D \\ \alpha_p &= h(P^D) + \Psi^D \end{aligned}$$

$\implies$ solution notée N^e, P^e, Ψ^e

Convergence vers l'équilibre thermique

□ GAJEWSKI, GÄRTNER, 1996 (cas linéaire)

□ JÜNGEL, 1995 (cas non linéaire)

Energie relative et dissipation d'énergie

$$H(u) = \int_1^u h(s) ds, \text{ convexe}$$

$$\mathbb{E}(t) = \int_{\Omega} \left(H(N) - H(N^e) - h(N^e)(N - N^e) + \dots + \frac{\lambda^2}{2} |\nabla(\Psi - \Psi^e)|^2 \right) \geq 0$$

$$\mathbb{I}(t) = \int_{\Omega} \left(N |\nabla(h(N) - \Psi)|^2 + P |\nabla(h(P) + \Psi)|^2 \right) \geq 0$$

Point clé de la preuve : estimation énergie/dissipation

$$\mathbb{E}(t_2) + \int_{t_1}^{t_2} \mathbb{I}(t) dt \leq \mathbb{E}(t_1)$$

Démonstration

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\mathbb{E}(t) &= \int_{\Omega} \partial_t N(h(N) - h(N^e)) + \partial_t P(h(P) - h(P^e)) \\ &\quad + \lambda^2 \int_{\Omega} \partial_t \nabla \Psi \cdot \nabla (\Psi - \Psi^e) - \lambda^2 \int_{\Omega} \partial_t \Delta \Psi (\Psi - \Psi^e) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\mathbb{E}(t) &= \int_{\Omega} \partial_t N(h(N) - h(N^e)) + \partial_t P(h(P) - h(P^e)) \\ &\quad - \lambda^2 \int_{\Omega} \partial_t \Delta \Psi (\Psi - \Psi^e) + \int_{\Omega} (\partial_t P - \partial_t N)(\Psi - \Psi^e) \\ &= \int_{\Omega} \partial_t N(h(N) - \Psi - (h(N^e) - \Psi^e)) \\ &\quad + \int_{\Omega} \partial_t P(h(P) + \Psi - (h(P^e) + \Psi^e)) \\ &= - \int_{\Omega} N \nabla (h(N) - \Psi) \cdot \nabla (h(N) - \Psi - (h(N^e) - \Psi^e)) \\ &\quad - \int_{\Omega} P \nabla (h(P) + \Psi) \cdot \nabla (h(P) + \Psi - (h(P^e) + \Psi^e)) \\ &= - \int_{\Omega} N |\nabla (h(N) - \Psi)|^2 - \int_{\Omega} P |\nabla (h(P) + \Psi)|^2 \end{aligned}$$

Point clé

$$\frac{d}{dt}\mathbb{E}(t) = -\mathbb{I}(t).$$

11.2 Limite quasi-neutre

Limite formelle ($C = 0$)

$$(DD)_{\lambda} \begin{cases} \partial_t N + \operatorname{div}(-\nabla N + N \nabla \Psi) = 0 \\ \partial_t P + \operatorname{div}(-\nabla P - P \nabla \Psi) = 0 \\ -\lambda^2 \Delta \Psi = P - N \end{cases}$$

Formellement $\lambda \rightarrow 0$

$$\begin{cases} \partial_t N + \operatorname{div}(-\nabla N + N \nabla \Psi) = 0 \\ \partial_t P + \operatorname{div}(-\nabla P - P \nabla \Psi) = 0 \\ \mathbf{0} = P - N \end{cases}$$

Réécriture :

$$(DD)_{\mathbf{0}} \begin{cases} \partial_t N - \Delta N = 0 \\ -\operatorname{div}(N \nabla \Psi) = 0 \\ P = N \end{cases}$$

Preuve rigoureuse : $(DD)_\lambda \rightarrow (DD)_0$

$$(N^\lambda, P^\lambda, \Psi^\lambda) \longrightarrow (N^0, P^0, \Psi^0)$$

□ JÜNGEL, PENG, 2001

□ GASSER, LEVERMORE, MARKOWICH, SCHMEISER, 2001

□ GASSER, 2001

Énergie libre et dissipation d'énergie

Avec $H(x) = x \log x - x + 1$ ($H'(x) = \log x$),

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(t) = \int_{\Omega} & \left(H(N) - H(N^D) - \log(N^D)(N - N^D) \right. \\ & \left. + H(P) - H(P^D) - \log(P^D)(P - P^D) + \frac{\lambda^2}{2} |\nabla \Psi - \nabla \Psi^D|^2 \right) dx, \end{aligned}$$

$$\mathbb{I}(t) = \int_{\Omega} \left(N |\nabla(\log N - \Psi)|^2 + P |\nabla(\log P + \Psi)|^2 \right) dx.$$

Estimation d'énergie / méthode d'entropie

$$\mathbb{E}(t) = \int_{\Omega} \left(H(N) - H(N^D) - \log(N^D)(N - N^D) + \dots + \frac{\lambda^2}{2} |\nabla \Psi - \nabla \Psi^D|^2 \right) dx,$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathbb{E}(t) = \int_{\Omega} & \left(\partial_t N (\log N - \log N^D) + \partial_t P (\log P - \log P^D) \right) \\ & + \lambda^2 \int_{\Omega} \partial_t \nabla \Psi \cdot \nabla (\Psi - \Psi^D) - \lambda^2 \int_{\Omega} \partial_t \Delta \Psi (\Psi - \Psi^D) \end{aligned}$$

$$(DD)_\lambda \begin{cases} \partial_t N = \operatorname{div}(N \nabla(\log N - \Psi)) \\ \partial_t P = \operatorname{div}(P \nabla(\log P + \Psi)) \\ -\lambda^2 \Delta \Psi = P - N \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathbb{E}(t) &= \int_{\Omega} \left(\partial_t N (\log N - \log N^D) + \partial_t P (\log P - \log P^D) \right) \\ &\quad - \lambda^2 \int_{\Omega} \partial_t \Delta \Psi (\Psi - \Psi^D) + \int_{\Omega} (\partial_t P - \partial_t N) (\Psi - \Psi^D) \\ &= \int_{\Omega} \partial_t N (\log N - \Psi - (\log N^D - \Psi^D)) \\ &\quad + \int_{\Omega} \partial_t P (\log P + \Psi - (\log P^D + \Psi^D)) \\ &= - \int_{\Omega} N \nabla(\log N - \Psi) \cdot \nabla(\log N - \Psi - (\log N^D - \Psi^D)) \\ &\quad - \int_{\Omega} P \nabla(\log P + \Psi) \cdot \nabla(\log P + \Psi - (\log P^D + \Psi^D)) \end{aligned}$$

Point clé

$$\frac{d}{dt} \mathbb{E}(t) + \frac{1}{2} \mathbb{I}(t) \leq K^D.$$

Conséquences de l'estimation d'énergie

$$\frac{d}{dt}\mathbb{E}(t) + \frac{1}{2}\mathbb{I}(t) \leq K^D.$$

Conséquences

$$- \int_0^T \int_{\Omega} \left(N |\nabla(\log N - \Psi)|^2 + P |\nabla(\log P + \Psi)|^2 \right) dx \leq K$$

— D'où

$$\frac{\nabla N - N \nabla \Psi}{\sqrt{N}}, \frac{\nabla P + P \nabla \Psi}{\sqrt{P}} \in L^2(\Omega \times (0, T))$$

— Puis :

$$\frac{N - P}{\lambda}, \sqrt{N} \nabla \Psi, \sqrt{P} \nabla \Psi, \frac{\nabla N}{\sqrt{N}}, \frac{\nabla P}{\sqrt{P}} \in L^2(\Omega \times (0, T))$$

Toutes ces estimations sont uniformes en λ !

12 Schémas numériques pour le système de dérive-diffusion

12.1 Schéma V.F. pour une équation de convection-diffusion

Forme générique

Problème de départ

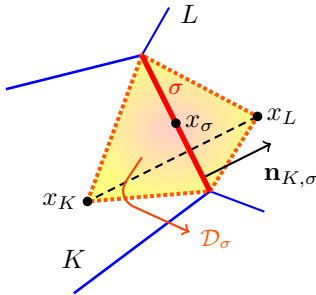
$$\begin{cases} \partial_t u + \operatorname{div} J = 0, & J = -\nabla u + \mathbf{v}u \\ u(x, 0) = u_0(x) \\ + \text{conditions aux limites} \end{cases}$$

Schéma (explicite/implicite)

$$\begin{cases} m(K) \frac{u_K^{n+1} - u_K^n}{\Delta t} + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{F}_{K,\sigma}^{n/n+1} = 0 \\ u_K^0 = \int_K u_0(x) dx. \\ \mathcal{F}_{K,\sigma} \approx \int_{\sigma} (-\nabla u + \mathbf{v}u) \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma}. \end{cases}$$

Flux numériques (centrés) / (décentrés amont)

$$\mathcal{F}_{K,\sigma} \approx \int_{\sigma} -\nabla u \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} + \int_{\sigma} u \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma}$$



Approximation de $\mathbf{V} \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma}$ sur σ :

$$\begin{aligned} - & v_{K,\sigma} = \frac{1}{m(\mathcal{D}_{\sigma})} \int_{\mathcal{D}_{\sigma}} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma}, \\ - & v_{K,\sigma} = \frac{1}{m(\sigma)} \int_{\sigma} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma}, \\ - & v_{K,\sigma} = \mathbf{v}(x_{\sigma}) \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} \end{aligned}$$

Flux centrés

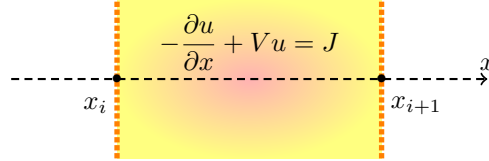
$$\mathcal{F}_{K,\sigma} = \frac{m(\sigma)}{d_\sigma} (u_K - u_L) + m(\sigma) v_{K,\sigma} \frac{u_K + u_L}{2}.$$

Flux décentrés amont

$$\mathcal{F}_{K,\sigma} = \frac{m(\sigma)}{d_\sigma} (u_K - u_L) + m(\sigma) (v_{K,\sigma}^+ u_K + v_{K,\sigma}^- u_L).$$

Flux numériques (SG)

— SCHARFETTER, GUMMEL, 1969



⇒ Résolution de l'équation différentielle

$$\begin{cases} -\frac{\partial u}{\partial x} + Vu = J, & x \in [x_i, x_{i+1}], \\ u(x_i) = u_i. \end{cases}$$

$$\Rightarrow u(x) = \frac{J}{V} (1 - e^{V(x-x_i)}) + u_i e^{V(x-x_i)}.$$

$$\Rightarrow J \text{ s'obtient en imposant } u(x_{i+1}) = u_{i+1}$$

$$\Rightarrow u_{i+1} = \frac{J}{V} (1 - e^{V(x_{i+1}-x_i)}) + u_i e^{V(x_{i+1}-x_i)}.$$

$$\Rightarrow J = V \frac{u_{i+1} - u_i e^{V(x_{i+1}-x_i)}}{1 - e^{V(x_{i+1}-x_i)}}$$

$$\Rightarrow J = \frac{-V}{e^{-V(x_{i+1}-x_i)} - 1} u_i - \frac{V}{e^{V(x_{i+1}-x_i)} - 1} u_{i+1}$$

D'où

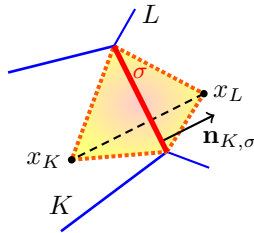
$$J = \frac{1}{x_{i+1} - x_i} \left(B(-V(x_{i+1} - x_i)) u_i - B(V(x_{i+1} - x_i)) u_{i+1} \right),$$

avec

$$B(s) = \frac{s}{e^s - 1}.$$

Flux numériques (SG)

$$\mathcal{F}_{K,\sigma} \approx \int_\sigma \mathbf{J} \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} \text{ avec } \mathbf{J} = -\nabla u + \mathbf{V}u$$



Raisonnement 1D dans la direction normale aux arêtes

Flux de Scharfetter-Gummel

$$\mathcal{F}_{K,\sigma} = \frac{m(\sigma)}{d_\sigma} \left(B_{sg}(-v_{K,\sigma} d_\sigma) u_K - B_{sg}(v_{K,\sigma} d_\sigma) u_L \right)$$

où B_{sg} est la fonction de Bernoulli :

$$B_{sg}(s) = \frac{s}{e^s - 1}.$$

Forme générique des flux numériques

Flux de Scharfetter-Gummel

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{K,\sigma} &= \frac{m(\sigma)}{d_\sigma} \left(B_{sg}(-v_{K,\sigma} d_\sigma) u_K - B_{sg}(v_{K,\sigma} d_\sigma) u_L \right) \\ \text{avec } B_{sg}(s) &= \frac{s}{e^s - 1}. \end{aligned}$$

Flux centrés

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{K,\sigma} &= \frac{m(\sigma)}{d_\sigma} (u_K - u_L) + m(\sigma) v_{K,\sigma} \frac{u_K + u_L}{2} \\ &= \frac{m(\sigma)}{d_\sigma} \left(B_{ce}(-v_{K,\sigma} d_\sigma) u_K - B_{ce}(v_{K,\sigma} d_\sigma) u_L \right) \end{aligned}$$

avec

$$B_{ce}(s) = 1 - \frac{s}{2}.$$

Flux décentrés amont

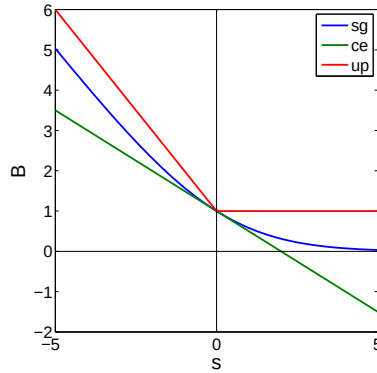
$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{K,\sigma} &= \frac{m(\sigma)}{d_\sigma} (u_K - u_L) + m(\sigma) (v_{K,\sigma}^+ u_K + v_{K,\sigma}^- u_L) \\ &= \frac{m(\sigma)}{d_\sigma} \left(B_{up}(-v_{K,\sigma} d_\sigma) u_K - B_{up}(v_{K,\sigma} d_\sigma) u_L \right) \end{aligned}$$

avec

$$B_{up}(s) = 1 - s^-.$$

Forme générique des flux numériques

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{K,\sigma} &= \frac{m(\sigma)}{d_\sigma} \left(B(-v_{K,\sigma} d_\sigma) u_K - B(v_{K,\sigma} d_\sigma) u_L \right) \\ B_{sg}(s) &= \frac{s}{e^s - 1}, \quad B_{ce}(s) = 1 - \frac{s}{2}, \quad B_{up}(s) = 1 - s^-. \end{aligned}$$



Cas particulier où $\mathbf{v}$ dérive d'un potentiel

$$\begin{aligned}\mathbf{v} &= \nabla \Phi \\ \mathbf{J} &= -\nabla u + u \nabla \Phi\end{aligned}$$

“Équilibre thermique”

$$u = c \exp(\Phi) \implies \mathbf{J} = 0.$$

Au niveau discret

- Choix de $v_{K,\sigma} = \Phi(x_L) - \Phi(x_K)$
- Pour les flux numériques de Scharfetter-Gummel : $u_K = c \exp(\Phi(x_K)) \forall K \implies \mathcal{F}_{K,\sigma} = 0 \forall \sigma$

Autre choix pour le flux numérique

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_{K,\sigma} &\approx \int_{\sigma} (-\nabla u + u \nabla \Phi) \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} \\ &\approx \int_{\sigma} (-u \nabla \log u + u \nabla \Phi) \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma}\end{aligned}$$

$$\mathcal{F}_{K,\sigma} = \frac{m(\sigma)}{d_{\sigma}} \left(-\min(u_K, u_L)(\log u_L - \log u_K) + (\Psi_L - \Psi_K)^+ u_K + (\Psi_L - \Psi_K)^- u_L \right)$$

$\implies$ Préserve également l'équilibre thermique

□ C.-H., FILBET, 2007

12.2 Discrétisation du système de dérive-diffusion

Un schéma découplé

$$\begin{cases} \partial_t N + \operatorname{div}(-\nabla r(N) + N \nabla \Psi) = 0 \\ \partial_t P + \operatorname{div}(-\nabla r(P) - P \nabla \Psi) = 0 \\ -\lambda^2 \Delta \Psi = P - N \end{cases}$$

Discrétisation en temps

Implicite pour les équations paraboliques, mais découplage :

$$\dots \longrightarrow N^n, P^n \longrightarrow \Psi^n \longrightarrow N^{n+1}, P^{n+1} \longrightarrow \Psi^{n+1} \dots$$

Discrétisation en espace

- schéma classique à deux points pour la diffusion,
- décentrement des termes de convection

Condition de stabilité : $\Delta t \leq \frac{1}{M} \lambda^2$ (corrosion : $\Delta t \leq \frac{\varepsilon \lambda^2}{M}$)

□ C.-H., LIU, PENG, 2003

Un schéma totalement implicite

$$\begin{cases} \partial_t N + \operatorname{div}(-\nabla N + N\nabla\Psi) = 0 \\ \partial_t P + \operatorname{div}(-\nabla P - P\nabla\Psi) = 0 \\ -\lambda^2 \Delta\Psi = P - N \end{cases}$$

Discrétisation en temps

$$\dots \longrightarrow N^n, P^n, \Psi^n \longrightarrow N^{n+1}, P^{n+1}, \Psi^{n+1} \longrightarrow \dots$$

Discretisation en espace flux de Scharfetter-Gummel

- Approximation d'ordre 2 des flux de convection-diffusion
- Préservation des états stationnaires

Le schéma $(\mathcal{S}_\lambda)$

$$\begin{cases} m(K) \frac{N_K^{n+1} - N_K^n}{\Delta t} + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{F}_{K,\sigma}^{n+1} = 0, & K \in \mathcal{T}, n \geq 0, \\ m(K) \frac{P_K^{n+1} - P_K^n}{\Delta t} + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{G}_{K,\sigma}^{n+1} = 0, & K \in \mathcal{T}, n \geq 0, \\ -\lambda^2 \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \tau_\sigma D\Psi_{K,\sigma}^n = m(K)(P_K^n - N_K^n), & K \in \mathcal{T}, n \geq 0. \end{cases}$$

avec :

$$\begin{aligned} D\Psi_{K,\sigma}^n &= \Psi_{K,\sigma}^n - \Psi_K^n, & (D_\sigma \Psi^n &= |D\Psi_{K,\sigma}^n|) \\ \mathcal{F}_{K,\sigma}^{n+1} &= \tau_\sigma \left(B(-D\Psi_{K,\sigma}^{n+1}) N_K^{n+1} - B(D\Psi_{K,\sigma}^{n+1}) N_{K,\sigma}^{n+1} \right), \\ \mathcal{G}_{K,\sigma}^{n+1} &= \tau_\sigma \left(B(D\Psi_{K,\sigma}^{n+1}) P_K^{n+1} - B(-D\Psi_{K,\sigma}^{n+1}) P_{K,\sigma}^{n+1} \right), \end{aligned}$$

Premiers résultats

Existence d'une solution à chaque pas de temps

- Linéarisation du système ($\rightarrow$ vers le schéma découplé)
- Estimations L^∞ sur les densités approchées
- Utilisation d'un théorème de point fixe.

Estimations L^∞

$$m \leq N_K^n, P_K^n \leq M, \quad \forall K \in \mathcal{T}, \forall n \geq 0.$$

sans condition sur Δt !

Les résultats sont valables pour tout $\lambda \geq 0$.

13 Étude des comportements asymptotiques

13.1 Comportement en temps long

Énergie et dissipation d'énergie discrètes

Cas continu

$$\begin{aligned}\mathbb{E}(t) &= \int_{\Omega} \left(H(N) - H(N^e) - h(N^e)(N - N^e) + \dots \right. \\ &\quad \left. + \frac{\lambda^2}{2} |\nabla(V - V^e)|^2 \right) \\ \mathbb{I}(t) &= \int_{\Omega} \left(N |\nabla(h(N) - V)|^2 + P |\nabla(h(P) + V)|^2 \right)\end{aligned}$$

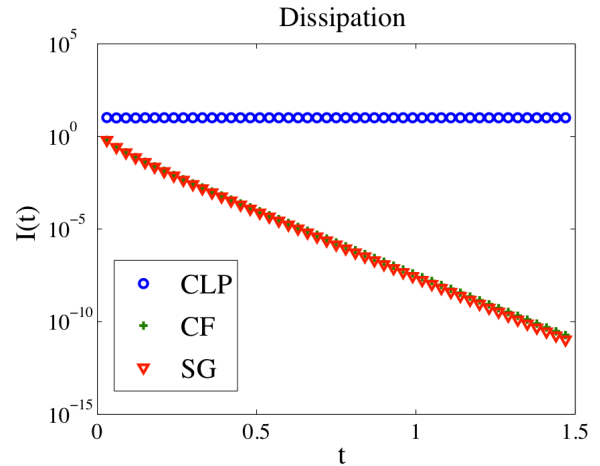
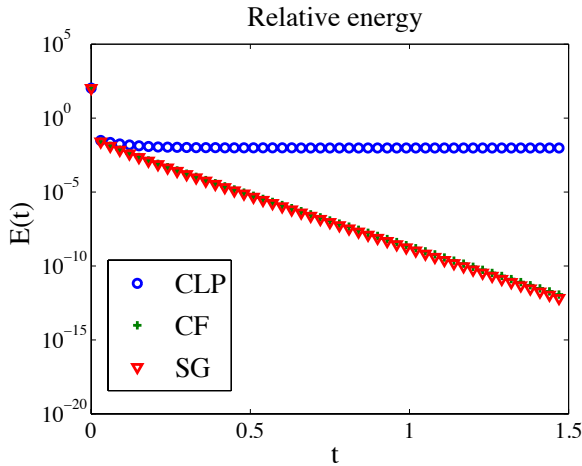
Cas discret

$$\begin{aligned}\mathbb{E}^n &= \sum_K m(K) \left(H(N_K^n) - H(N_K^e) - h(N_K^e)(N_K^n - N_K^e) + \dots \right) \\ &\quad + \frac{\lambda^2}{2} \sum_{\sigma} \tau_{\sigma} \left(DV_{K,\sigma} - DV_{K,\sigma}^e \right)^2 \\ \mathbb{I}^n &= \sum_{\sigma} \tau_{\sigma} \min(N_K^n, N_L^n) \left(D(h(N^n) - V^n)_{K,\sigma} \right)^2 \\ &\quad + \sum_{\sigma} \tau_{\sigma} \min(P_K^n, P_L^n) \left(D(h(P^n) + V^n)_{K,\sigma} \right)^2\end{aligned}$$

Inégalité d'entropie/dissipation discrète

Avec les flux de Scharfetter-Gummel ou les flux “non linéaires”, on peut démontrer :

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



13.2 Comportement en limite quasi-neutre

Le schéma ($\mathcal{S}_0$)

$$(DD)_0 \begin{cases} \partial_t N - \Delta N = 0 \\ -\operatorname{div}(N \nabla \Psi) = 0 \\ P = N \end{cases}$$

$$\begin{cases} m(K) \frac{N_K^{n+1} - N_K^n}{\Delta t} \\ - \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \tau_\sigma \frac{B(D\Psi_{K,\sigma}^{n+1}) + B(-D\Psi_{K,\sigma}^{n+1})}{2} D N_{K,\sigma}^{n+1} = 0, \quad K \in \mathcal{T}, n \geq 0, \\ - \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \tau_\sigma D\Psi_{K,\sigma}^{n+1} (N_K^{n+1} + N_{K,\sigma}^{n+1}) = 0, \quad K \in \mathcal{T}, n \geq 0, \\ P_K^n - N_K^n = 0, \quad K \in \mathcal{T}, n \geq 0. \end{cases}$$

Hypothèses supplémentaires

- Quasi-neutralité des conditions initiales : $P_0 - N_0 = 0$
- Quasi-neutralité des conditions aux limites : $P^D - N^D = 0$

Version discrète de l'énergie et de la dissipation d'énergie

Entropie discrète

$$\begin{aligned} \mathbb{E}^n = \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) (H(N_K^n) - H(N_K^D) - \log(N_K^D) (N_K^n - N_K^D)) \\ + \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) (H(P_K^n) - H(P_K^D) - \log(P_K^D) (P_K^n - P_K^D)) + \frac{\lambda^2}{2} |\Psi_{\mathcal{T}}^n - \Psi_{\mathcal{T}}^D|_{1,\mathcal{T}}^2, \end{aligned}$$

Dissipation d'énergie

$$\mathbb{I}^n = \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} \left[\tau_\sigma \min(N_K^n, N_{K,\sigma}^n) (D_\sigma (\log N^n - \Psi^n))^2 + \tau_\sigma \min(P_K^n, P_{K,\sigma}^n) (D_\sigma (\log P^n + \Psi^n))^2 \right]$$

Contrepartie discrète de l'estimation d'énergie

Théorème

- Hypothèses sur les données
- Admissibilité et régularité du maillage

$\exists K_E \geq 0$ tel que, pour tout $\lambda \geq 0$, une solution de $(\mathcal{S}_\lambda)$ vérifie :

$$\frac{\mathbb{E}^{n+1} - \mathbb{E}^n}{\Delta t} + \frac{1}{2} \mathbb{I}^{n+1} \leq K_E \quad \forall n \geq 0$$

De plus, si N^0 et P^0 satisfont l'hypothèse de quasi-neutralité,

$$\sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \mathbb{I}^{n+1} \leq K_E (1 + \lambda^2).$$

□ BESSEMOULIN-CHATARD, C.-H., VIGNAL, 2014

Propriétés des flux de Scharfetter-Gummel

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\mathbb{E}(t) &= \int_{\Omega} \partial_t N (\log N - \Psi - (\log N^D - \Psi^D)) + \dots \\ &= - \int_{\Omega} N \nabla (\log N - \Psi) \cdot \nabla (\log N - \Psi - (\log N^D - \Psi^D)) + \dots\end{aligned}$$

$$\mathcal{F}_{K,\sigma} D(\log N - \Psi)_{K,\sigma} \leq -\tau_{\sigma} \min(N_K, N_{K,\sigma}) (D_{\sigma}(\log N - \Psi))^2$$

$$\mathcal{G}_{K,\sigma} D(\log P + \Psi)_{K,\sigma} \leq -\tau_{\sigma} \min(P_K, P_{K,\sigma}) (D_{\sigma}(\log P + \Psi))^2$$

et

$$|\mathcal{F}_{K,\sigma}| \leq \tau_{\sigma} \max(N_K, N_{K,\sigma}) D_{\sigma}(\log N - \Psi)$$

$$|\mathcal{G}_{K,\sigma}| \leq \tau_{\sigma} \max(P_K, P_{K,\sigma}) D_{\sigma}(\log P + \Psi)$$

Conséquences de l'estimation d'énergie discrète

Hypothèses

- Hypothèses sur les données,
- Admissibilité et régularité du maillage,
- Quasi-neutralité des conditions initiales et aux limites.

Estimations a priori nécessaires pour la convergence

- Estimations BV-faibles sur N et P ,
- Estimations $L^2(0, T, H^1)$ sur N et P ,
- Estimation $L^2(0, T, H^1)$ sur Ψ .

Toutes les estimations sont indépendantes de $\lambda \geq 0$.

Conclusion

Convergence

- Des estimations nécessaires pour obtenir la compacité d'une suite de solutions approchées satisfaites uniformément en λ .
- Passage à la limite classique.

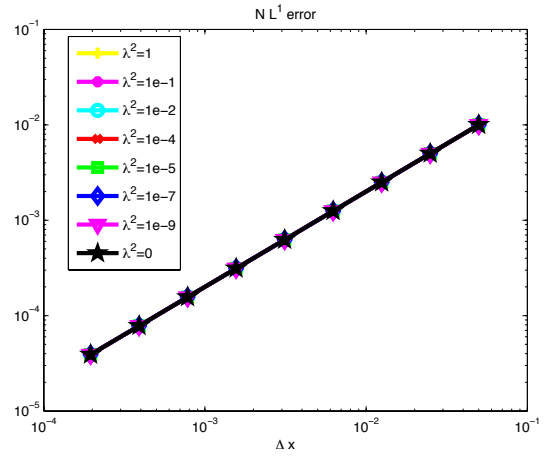
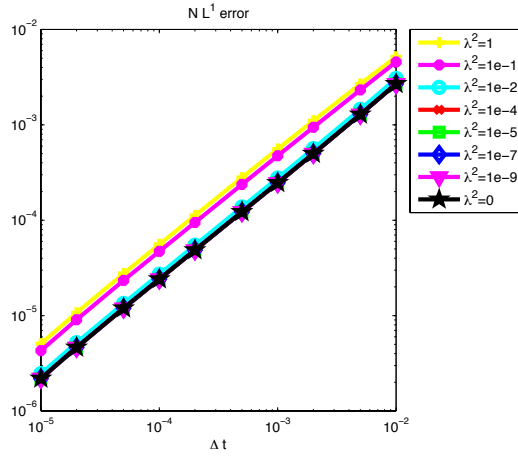
□ BESSEMOULIN-CHATARD, 2012

Limite quasi-neutre

- Le schéma préserve la limite asymptotique $\lambda \rightarrow 0$.

$$\begin{array}{ccc} (DD)_{\lambda} & \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} & (DD)_0 \\ \uparrow \Delta x, \Delta t \rightarrow 0 & & \uparrow \Delta x, \Delta t \rightarrow 0 \\ (\mathcal{S}_{\lambda}) & \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} & (\mathcal{S}_0) \end{array}$$

Conclusion : convergence



Conclusion : stabilité en limite quasi-neutre

