

Analyse mathématique de schémas numériques pour un modèle de semi-conducteurs

Mémoire de Master 2 Recherche
« Mathématiques, Applications et Ingénierie Mathématique »
Encadrants : Claire Chainais-Hillairet et Francis Filbet
Université Claude Bernard Lyon 1

Marianne Chatard

Table des matières

1	Introduction	3
1.1	Le modèle de dérive-diffusion pour les semi-conducteurs	3
1.2	Schémas numériques	5
1.2.1	Discrétisation de $(0, 1) \times (0, T)$	5
1.2.2	Schéma pour le problème à l'équilibre thermique	6
1.2.3	Schémas pour le système évolutif	6
1.3	Résultats	8
2	Dépendance par rapport à λ^2 du schéma décentré semi-implicite	9
3	Schéma décentré amont implicite	12
3.1	Présentation du schéma	12
3.2	Estimations a priori	12
3.3	Existence	16
4	Etude du comportement asymptotique	19
4.1	Résultats préliminaires	20
4.2	Comportement asymptotique du schéma décentré avec diffusion non-linéaire	22
4.3	Le cas du schéma décentré amont	26
5	Résultats numériques	28
5.1	Stabilité	28
5.2	Comportement asymptotique	28
5.2.1	Le cas linéaire	28
5.2.2	Le cas non-linéaire	33
6	Conclusion	35

1 Introduction

Un **semi-conducteur** (comme par exemple le silicium ou le germanium) est un matériau dont la conductivité électrique est intermédiaire entre celle des métaux (conducteurs) et celle des isolants. Dans [8], P. Markowich expose les propriétés basiques des semi-conducteurs. Quand le niveau d'énergie d'un matériau semi-conducteur est légèrement augmenté, par exemple par application d'un champ électrique ou par augmentation de la température, un certain nombre d'électrons de valence deviennent des électrons de conduction. Chaque électron changeant ainsi d'état laisse un « **trou** » dans la structure du matériau, qui sera considéré comme une charge positive. Le mouvement des trous et des électrons crée un champ électrique. Au cours de la fabrication d'un semi-conducteur, on plante des impuretés dans le matériau. Ce processus augmente la conductivité, et permet de contrôler les propriétés électriques du cristal. La préconcentration en électrons ou en trous est appelée **dopage** et notée C . Dans les régions où la préconcentration en électrons domine (**régions P**), C est négatif, et dans les régions où la préconcentration en trous domine (**régions N**), C est positif. Un **appareil semi-conducteur** est un assemblage de matériaux semi-conducteurs de types « région P » et « région N » (exemple : la diode PN).

Il existe deux grandes catégories de modèles pour les semi-conducteurs :

- les modèles **cinétiques**, qui se placent à l'échelle de l'électron (par exemple l'équation de Boltzmann pour les semi-conducteurs)
- les modèles **fluides**, ou **quasi-hydrodynamiques**, qui assimilent l'ensemble des porteurs de charges à un fluide (par exemple le modèle hydrodynamique, le modèle de transport d'énergie, les modèles de dérive-diffusion).

Une hiérarchie de ces modèles est présentée dans [6].

Nous nous intéresserons ici au modèle de dérive-diffusion.

1.1 Le modèle de dérive-diffusion pour les semi-conducteurs

Le système évolutif

$$\begin{cases} \partial_t N - \operatorname{div}(\nabla r(N) - N\nabla V) = 0 & \text{si } (x, t) \in \Omega \times (0, T) \\ \partial_t P - \operatorname{div}(\nabla r(P) + P\nabla V) = 0 & \text{si } (x, t) \in \Omega \times (0, T) \\ \lambda^2 \Delta V = N - P - C & \text{si } (x, t) \in \Omega \times (0, T) \end{cases}$$

Ω étant un ouvert borné de \mathbb{R}^n , $T > 0$.

Ce système est composé de deux équations paraboliques pour la densité d'électrons N et la densité de trous P , et d'une équation elliptique de type Poisson pour le potentiel électrostatique V . C est le dopage du semi-conducteur, fonction connue. λ^2 est une constante, appelée longueur de Debye ; elle provient de l'adimensionnement du modèle physique. La fonction r représente la pression des électrons et des trous qui se comportent comme un

gaz (le modèle dérive-diffusion est un modèle fluide).

Les conditions aux limites sont de deux types :

- Dirichlet pour les contacts ohmiques,
- Neumann pour les parties isolées.

On décompose donc la frontière Γ de Ω en deux parties disjointes, Γ^D et Γ^N , et on note ν la normale à Γ extérieure à Ω .

Les conditions aux limites s'écrivent :

$$\begin{cases} N = N^D, & P = P^D, & V = V^D & \text{sur } \Gamma^D \times (0, T) \\ \nabla r(N) \cdot \nu = \nabla r(P) \cdot \nu = \nabla V \cdot \nu = 0 & & & \text{sur } \Gamma^N \times (0, T). \end{cases}$$

D'autre part, comme il s'agit d'un système évolutif, on le complète par les conditions initiales suivantes :

$$\begin{cases} N(x, 0) = N^0(x) & \text{si } x \in \Omega \\ P(x, 0) = P^0(x) & \text{si } x \in \Omega. \end{cases}$$

Hypothèses :

- r est de la forme $r(s) = s^\alpha$, $\alpha \geq 1$. $\alpha = 1$ correspond au modèle isotherme et $\alpha = \frac{5}{3}$ au modèle isentropique.
- N^0, P^0 sont à valeurs positives.
- Il existe des constantes $m > 0, M > 0$ telles que :

$$\begin{aligned} m &\leq N^0(x), P^0(x) \leq M, & x \in \Omega \\ m &\leq N^D(x), P^D(x) \leq M, & x \in \Gamma^D. \end{aligned}$$

L'existence de solutions au système évolutif est prouvé dans [4], ainsi que l'unicité dans certains cas.

Le système stationnaire Le système dérive-diffusion stationnaire s'écrit :

$$\begin{cases} -\text{div}(\nabla r(N) - N\nabla V) = 0 & \text{si } x \in \Omega \\ -\text{div}(\nabla r(P) + P\nabla V) = 0 & \text{si } x \in \Omega \\ \lambda^2 \Delta V = N - P - C & \text{si } x \in \Omega \end{cases}$$

avec les mêmes conditions au bord que pour le système évolutif.

On introduit la fonction enthalpie h définie par :

$$h(s) = \int_1^s \frac{r'(\tau)}{\tau} d\tau \tag{1}$$

et l'inverse généralisé g de h défini par :

$$g(s) = \begin{cases} h^{-1}(s) & \text{si } h(0^+) < s < \infty \\ 0 & \text{si } s \leq h(0^+). \end{cases}$$

Un cas particulier d'état stationnaire est l'**équilibre thermique**. C'est l'état pour lequel les courants d'électrons et de trous $(\nabla r(N) - N\nabla V)$ et $(\nabla r(P) + P\nabla V)$ s'annulent. Si les conditions au bord satisfont :

$$h(N^D) - V^D = \alpha_N \text{ et } h(P^D) + V^D = \alpha_P \text{ sur } \Gamma^D,$$

l'équilibre thermique est défini par :

$$\left\{ \begin{array}{l} N(x) = g(\alpha_N + V(x)) \text{ si } x \in \Omega \\ P(x) = g(\alpha_P - V(x)) \text{ si } x \in \Omega \\ \Delta V = g(\alpha_N + V) - g(\alpha_P - V) - C \text{ si } x \in \Omega \\ V(x) = V^D(x) \text{ sur } \Gamma^D, \quad \nabla V \cdot \nu = 0 \text{ sur } \Gamma^N. \end{array} \right.$$

Le comportement asymptotique des solutions du modèle dérive-diffusion a été étudié dans [5]. Il y est prouvé que la solution du système évolutif converge vers la solution à l'équilibre thermique quand $t \rightarrow \infty$ si les conditions au bord sont à l'équilibre thermique.

Dans toute la suite, on s'intéressera uniquement au problème en une dimension d'espace, sur l'ouvert $(0, 1)$, avec conditions au bord de Dirichlet :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \partial_t N - \partial_x(\partial_x r(N) - N \partial_x V) = 0 & \text{si } (x, t) \in (0, 1) \times (0, T) \\ \partial_t P - \partial_x(\partial_x r(P) + P \partial_x V) = 0 & \text{si } (x, t) \in (0, 1) \times (0, T) \\ \lambda^2 \partial_{xx}^2 V = N - P - C & \text{si } (x, t) \in (0, 1) \times (0, T), \end{array} \right. \quad (2)$$

$$\left\{ \begin{array}{ll} N(0, t) = N_0^D, \quad N(1, t) = N_1^D & t \in (0, T) \\ P(0, t) = P_0^D, \quad P(1, t) = P_1^D & t \in (0, T) \\ V(0, t) = V_0^D, \quad V(1, t) = V_1^D & t \in (0, T). \end{array} \right. \quad (3)$$

L'équilibre thermique correspondant est défini par :

$$\left\{ \begin{array}{ll} N(x) = g(\alpha_N + V(x)) & \text{si } x \in (0, 1) \\ P(x) = g(\alpha_P - V(x)) & \text{si } x \in (0, 1) \\ \partial_{xx}^2 V = g(\alpha_N + V) - g(\alpha_P - V) - C & \text{si } x \in (0, 1) \\ V(x) = V^D & \text{si } x \in \{0, 1\}. \end{array} \right. \quad (4)$$

1.2 Schémas numériques

1.2.1 Discrétisation de $(0, 1) \times (0, T)$

On définit un maillage de $(0, 1)$ de la manière suivante : on se donne L intervalles $(K_i)_{i=1, \dots, L}$ tels que $K_i =]x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}[$ avec $x_i = \frac{x_{i-\frac{1}{2}} + x_{i+\frac{1}{2}}}{2}$ et

$$0 = x_0 = x_{\frac{1}{2}} < x_1 < x_{\frac{3}{2}} < \dots < x_{i-\frac{1}{2}} < x_i < x_{i+\frac{1}{2}} < \dots < x_L < x_{L+\frac{1}{2}} = x_{L+1} = 1.$$

On pose :

$$\begin{aligned} h_i &= x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}} \text{ pour } 1 \leq i \leq L \\ h_{i+\frac{1}{2}} &= x_{i+1} - x_i \text{ pour } 1 \leq i \leq L \\ \Delta x &= \max_i h_i \end{aligned}$$

On note Δt le pas de temps. On pose $t^n = n\Delta t$. Une discrétisation de $]0, T[$ est alors donnée par la suite $(t^n)_{0 \leq n \leq M_T}$ où $M_T = E(T/\Delta t)$.

1.2.2 Schéma pour le problème à l'équilibre thermique

Le schéma correspondant au système stationnaire (4) s'écrit de la manière suivante : pour $i \in [1, L]$,

$$-\lambda^2(dV_{i+\frac{1}{2}} - dV_{i-\frac{1}{2}}) = h_i(g(\alpha_P - V_i) - g(\alpha_N + V_i) - C_i) \quad (5)$$

avec

$$\begin{aligned} V_0 &= V_0^D, \quad V_{L+1} = V_1^D, \\ C_i &= \frac{1}{h_i} \int_{K_i} C, \\ dV_{i+\frac{1}{2}} &= \frac{V_{i+1} - V_i}{h_{i+\frac{1}{2}}} \text{ pour } i = 0, \dots, L, \end{aligned}$$

et

$$N_i = g(\alpha_N + V_i), \quad P_i = g(\alpha_P - V_i). \quad (6)$$

Ce schéma conduit à un système d'équations non-linéaires. L'existence et l'unicité d'une solution à ce schéma numérique sont prouvées dans [2].

1.2.3 Schémas pour le système évolutif

De manière générale, un schéma numérique pour le modèle dérive-diffusion (2) avec conditions au bord de Dirichlet s'écrit :

– Schéma pour N

$$\frac{h_i}{\Delta t}(N_i^{n+1} - N_i^n) + (\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}}^n - \mathcal{F}_{i-\frac{1}{2}}^n) = 0, \quad 1 \leq i \leq L, \quad n \geq 0 \quad (7)$$

$$N_0^{n+1} = N_0^D, \quad n \geq 0 \quad (8)$$

$$N_{L+1}^{n+1} = N_1^D, \quad n \geq 0 \quad (9)$$

$$N_i^0 = N^0(x_i), \quad i = 0, \dots, L+1 \quad (10)$$

– Schéma pour P

$$\frac{h_i}{\Delta t}(P_i^{n+1} - P_i^n) + (\mathcal{G}_{i+\frac{1}{2}}^n - \mathcal{G}_{i-\frac{1}{2}}^n) = 0, \quad 1 \leq i \leq L, \quad n \geq 0 \quad (11)$$

$$P_0^{n+1} = P_0^D, \quad n \geq 0 \quad (12)$$

$$P_{L+1}^{n+1} = P_1^D, \quad n \geq 0 \quad (13)$$

$$P_i^0 = P^0(x_i), \quad i = 0, \dots, L+1 \quad (14)$$

– Schéma pour V

$$\lambda^2(dV_{i+\frac{1}{2}}^n - dV_{i-\frac{1}{2}}^n) = h_i(N_i^n - P_i^n - C_i), \quad 1 \leq i \leq L, \quad n \geq 0 \quad (15)$$

$$V_0^n = V_0^D, \quad n \geq 0 \quad (16)$$

$$V_{L+1}^n = V_1^D, \quad n \geq 0 \quad (17)$$

Différents schémas peuvent être ainsi définis, selon le choix que l'on fait pour les flux numériques $\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}}$ et $\mathcal{G}_{i+\frac{1}{2}}$. De plus, la discrétisation en temps peut s'effectuer de plusieurs manières :

Explicite : les termes intervenant dans les flux numériques sont pris à l'instant n dans (7)-(11)-(15). Ainsi, on a une expression explicite de N^{n+1} , P^{n+1} en fonction de N^n , P^n . La limite d'une telle discrétisation est due au fait qu'on a une condition de stabilité en $\frac{\Delta t}{\Delta x^2}$ (il s'agit d'un problème parabolique), qui peut donc être très contraignante.

Semi-implicite : on discrétise les équations sur N et P de manière implicite, en gardant les termes en V à l'instant n , ce qui permet de découpler le système d'équations non-linéaires à résoudre. On peut espérer avoir plus de stabilité qu'avec un schéma explicite.

Implicite : les termes intervenant dans les flux sont pris à l'instant $n+1$. Pour calculer N^{n+1} , P^{n+1} à partir de N^n , P^n , on est donc amené à résoudre un système d'équations non-linéaires, ce qui peut vite alourdir les calculs. L'avantage d'un tel schéma est qu'il est inconditionnellement stable.

On présente ici différents flux numériques possibles, en considérant une discrétisation semi-implicite.

Le schéma décentré amont : on introduit les notations

$$x^+ = \max(x, 0), \quad x^- = -\min(x, 0), \quad \forall x \in \mathbb{R}.$$

Pour $i = 0, \dots, L$ et $n \geq 0$, les flux numériques sont définis par :

$$\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}}^n = -dr(N^{n+1})_{i+\frac{1}{2}} + (dV_{i+\frac{1}{2}}^n)^+ N_i^{n+1} - (dV_{i+\frac{1}{2}}^n)^- N_{i+1}^{n+1} \quad (18)$$

$$\mathcal{G}_{i+\frac{1}{2}}^n = -dr(P^{n+1})_{i+\frac{1}{2}} + (dV_{i+\frac{1}{2}}^n)^- P_i^{n+1} - (dV_{i+\frac{1}{2}}^n)^+ P_{i+1}^{n+1} \quad (19)$$

Le schéma décentré avec discrétisation non-linéaire de la partie diffusive : ce schéma est présenté dans [2]. En utilisant le fait que le système (2) se réécrit sous la forme :

$$\begin{cases} \partial_t N - \partial_x(N\partial_x h(N) - N\partial_x V) = 0 & \text{si } (x, t) \in (0, 1) \times (0, T) \\ \partial_t P - \partial_x(P\partial_x h(P) + P\partial_x V) = 0 & \text{si } (x, t) \in (0, 1) \times (0, T) \\ \lambda^2 \partial_{xx} V = N - P - C & \text{si } (x, t) \in (0, 1) \times (0, T), \end{cases}$$

les flux numériques de ce schéma sont donnés par :

$$\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}}^n = -\min(N_i^{n+1}, N_{i+1}^{n+1})dh(N^{n+1})_{i+\frac{1}{2}} + (dV_{i+\frac{1}{2}}^n)^+ N_i^{n+1} - (dV_{i+\frac{1}{2}}^n)^- N_{i+1}^{n+1} \quad (20)$$

$$\mathcal{G}_{i+\frac{1}{2}}^n = -\min(P_i^{n+1}, P_{i+1}^{n+1})dh(P^{n+1})_{i+\frac{1}{2}} + (dV_{i+\frac{1}{2}}^n)^- P_i^{n+1} - (dV_{i+\frac{1}{2}}^n)^+ P_{i+1}^{n+1} \quad (21)$$

pour $i = 0, \dots, L$ et $n \geq 0$.

Le schéma centré : pour $i = 0, \dots, L$ et $n \geq 0$, les flux numériques sont définis par :

$$\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}}^n = -dr(N^{n+1})_{i+\frac{1}{2}} + dV_{i+\frac{1}{2}}^n \frac{N_i^{n+1} + N_{i+1}^{n+1}}{2} \quad (22)$$

$$\mathcal{G}_{i+\frac{1}{2}}^n = -dr(P^{n+1})_{i+\frac{1}{2}} - dV_{i+\frac{1}{2}}^n \frac{P_i^{n+1} + P_{i+1}^{n+1}}{2} \quad (23)$$

Remarque 1. *L'utilisation du schéma centré se justifie car les équations que l'on considère sont supposées non-dégénérées ($N, P > 0$), donc on ne se trouve pas dans un contexte hyperbolique.*

Le schéma de Scharfetter-Gummel : il ne peut s'utiliser que dans le cas linéaire ($r(s) = s$). Ce schéma est donné par (7)-(11)-(15), avec pour flux numériques :

$$\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}}^n = \frac{B(-h_{i+\frac{1}{2}} dV_{i+\frac{1}{2}}^n) N_i^{n+1} - B(h_{i+\frac{1}{2}} dV_{i+\frac{1}{2}}^n) N_{i+1}^{n+1}}{h_i + \frac{1}{2}} \quad 0 \leq i \leq L, n \geq 0 \quad (24)$$

$$\mathcal{G}_{i+\frac{1}{2}}^n = \frac{B(h_{i+\frac{1}{2}} dV_{i+\frac{1}{2}}^n) P_i^{n+1} - B(-h_{i+\frac{1}{2}} dV_{i+\frac{1}{2}}^n) P_{i+1}^{n+1}}{h_i + \frac{1}{2}} \quad 0 \leq i \leq L, n \geq 0 \quad (25)$$

où B est la fonction de Bernoulli, définie sur \mathbb{R} par :

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

Propriétés de B :

$$\forall x \in \mathbb{R} \quad B(x) > 0 \text{ et } B(x) - B(-x) = -x.$$

On remarque que :

- le schéma décentré amont dans le cas linéaire s'écrit sous cette forme, avec $B(x) = 1 + x^-$, et cette fonction vérifie les mêmes propriétés que la fonction de Bernoulli ;
- le schéma centré dans le cas linéaire s'écrit sous cette forme, avec $B(x) = 1 - \frac{x}{2}$; on a $B(0) = 1$, $B(x) - B(-x) = -x$, mais $B(x) \leq 0$ dès que $x \geq 2$. Pour avoir la positivité de B , on doit donc remplir une condition sur Δx .

La solution approchée $(N_\delta, P_\delta, V_\delta)$ du problème (2) est la fonction constante par morceaux définie par :

$$N_\delta(t, x) = N_i^{n+1}, \quad P_\delta(t, x) = P_i^{n+1}, \quad V_\delta(t, x) = V_i^{n+1}, \quad (t, x) \in [t^n, t^{n+1}) \times K_i, \quad (26)$$

où $\{(N_i^n, P_i^n, V_i^n), i = 0, \dots, L+1, 0 \leq n \leq M_T + 1\}$ est solution du schéma (7),(11), (15).

1.3 Résultats

La convergence du schéma décentré amont a été prouvée dans [1] pour $\lambda^2 = 1$. Concernant le comportement asymptotique, il est prouvé dans [2] que pour $\lambda^2 = 1$ et $\Delta t < \frac{m}{M^2}$, la solution du schéma décentré avec discrétisation non-linéaire de la partie diffusive tend vers la solution du problème stationnaire discret (5), (6) quand $n \rightarrow \infty$.

Les objectifs de ce stage étaient dans un premier temps de mettre en évidence la dépendance en λ^2 de la stabilité des schémas semi-implicites, et dans un second temps de mettre au point des schémas numériques :

- restant valables pour des valeurs de λ^2 différentes de 1, en particulier pour des valeurs très petites,
- donnant des solutions ayant un comportement asymptotique cohérent, *i.e.* qui convergent vers la solution du problème stationnaire discret.

Dans toute la suite, on se place dans le cas d'un dopage nul ($C = 0$). Après avoir mis en évidence dans un premier temps les limites des schémas numériques semi-implicites pour des valeurs de λ proches de 0, on s'intéresse à une discrétisation entièrement implicite du problème.

Plus précisément, on étudie le schéma décentré amont, dont les flux sont donnés par (18)-(19). On montre l'existence et la stabilité L^∞ des solutions à ce schéma.

On s'intéresse ensuite au comportement en temps long des solutions numériques. Le but est d'obtenir une solution approchée $(N_\delta, P_\delta, V_\delta)$ qui converge vers la solution du schéma pour le problème stationnaire (6) quand $t \rightarrow +\infty$. On obtient un résultat partiel dans le cas linéaire à une espèce ($P = 0$). En considérant le schéma décentré avec discrétisation non-linéaire de la diffusion, donné par (20)-(21), on obtient un résultat plus général.

Enfin, on présente des résultats numériques obtenus avec les différents schémas numériques présentés précédemment.

2 Dépendance par rapport à λ^2 du schéma décentré semi-implicite

On utilise dans cette partie des résultats d'algèbre linéaire rappelés en annexe.

La proposition suivante met en évidence une condition sur Δt pour avoir la stabilité L^∞ du schéma décentré amont semi-implicite :

Proposition 1. *On se place sous les hypothèses énoncées dans l'introduction.*

Alors le schéma (7)-(11)-(15) décentré amont, dont les flux sont donnés par (18)-(19), admet une unique solution $\{(N_i^n, P_i^n, V_i^n), 0 \leq n \leq M_T + 1, 1 \leq i \leq L\}$.

Si de plus le pas de temps est tel que

$$\Delta t \leq \frac{\lambda^2}{M}, \quad (27)$$

alors on a :

$$0 \leq N_i^n, P_i^n \leq M, \quad \forall i = 0, \dots, L + 1, \quad \forall n \geq 0. \quad (28)$$

Preuve. Nous allons faire la preuve dans le cas linéaire ($r(s) = s$). Le schéma s'écrit alors :

$$\begin{aligned} & \frac{h_i}{\Delta t} (N_i^{n+1} - N_i^n) - \left(dN_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - dN_{i-\frac{1}{2}}^{n+1} \right) \\ & + (dV_{i+\frac{1}{2}}^n)^+ N_i^{n+1} - (dV_{i+\frac{1}{2}}^n)^- N_{i+1}^{n+1} - (dV_{i-\frac{1}{2}}^n)^+ N_{i-1}^{n+1} + (dV_{i-\frac{1}{2}}^n)^- N_i^{n+1} = 0 \end{aligned} \quad (29)$$

$$\begin{aligned} & \frac{h_i}{\Delta t} (P_i^{n+1} - P_i^n) - \left(dP_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - dP_{i-\frac{1}{2}}^{n+1} \right) \\ & + (dV_{i+\frac{1}{2}}^n)^- P_i^{n+1} - (dV_{i+\frac{1}{2}}^n)^+ P_{i+1}^{n+1} - (dV_{i-\frac{1}{2}}^n)^- P_{i-1}^{n+1} + (dV_{i-\frac{1}{2}}^n)^+ P_i^{n+1} = 0 \end{aligned} \quad (30)$$

et le schéma pour l'équation sur V est encore donné par (15).

Pour $n \geq 0$, (30) s'écrit sous forme matricielle de la manière suivante :

$$K_N^n N^{n+1} = S_N^n \quad (31)$$

$$\text{avec } N^{n+1} = (N_1^{n+1}, \dots, N_L^{n+1})' \in \mathbb{R}^L, S_N^n = \begin{pmatrix} \frac{h_1}{\Delta t} N_1^n + \left(\frac{1}{h_{\frac{1}{2}}} + (dV_{\frac{1}{2}}^n)^+ \right) N_0^D \\ \frac{h_2}{\Delta t} N_2^n \\ \vdots \\ \frac{h_{L-1}}{\Delta t} N_{L-1}^n \\ \frac{h_L}{\Delta t} N_L^n + \left(\frac{1}{h_{L+\frac{1}{2}}} + (dV_{L+\frac{1}{2}}^n)^- \right) N_1^D \end{pmatrix}$$

et $K_N^n \in M_L(\mathbb{R})$ tridiagonale telle que :

$$\begin{aligned} (K_N^n)_{i,i} &= \frac{h_i}{\Delta t} + \frac{1}{h_{i+\frac{1}{2}}} + \frac{1}{h_{i-\frac{1}{2}}} + (dV_{i+\frac{1}{2}}^n)^+ + (dV_{i-\frac{1}{2}}^n)^- \\ (K_N^n)_{i,i+1} &= -\frac{1}{h_{i+\frac{1}{2}}} - (dV_{i+\frac{1}{2}}^n)^- \\ (K_N^n)_{i,i-1} &= -\frac{1}{h_{i-\frac{1}{2}}} - (dV_{i-\frac{1}{2}}^n)^+. \end{aligned}$$

On constate que :

- K_N^n est une matrice à diagonale strictement dominante par rapport à ses colonnes,
- les coefficients diagonaux de K_N^n sont strictement positifs, et ses autres coefficients sont négatifs ou nuls.

Donc par la proposition 4, K_N^n est une M-matrice.

On en déduit que :

- puisque K_N^n est inversible, N^{n+1} existe, et est défini de manière unique,
- comme de plus $(K_N^n)^{-1} \geq 0$ (au sens où tous les coefficients de la matrice $(K_N^n)^{-1}$ sont positifs), si on a $N^n \geq 0$, alors $S_N^n \geq 0$ puisque par hypothèse les conditions au bord sont positives, et donc $N^{n+1} \geq 0$. Puisque la condition initiale N^0 est supposée positive, on montre par une récurrence immédiate que N^n est positif pour tout $n \geq 0$.

On prouve de la même manière que P^n est bien défini pour tout $n \geq 0$ et que P^n est positif pour tout $n \geq 0$.

Montrons maintenant par récurrence que sous la condition (27), $N_i^n, P_i^n \leq M \forall n \geq 0, \forall i = 0, \dots, L+1$.

Le cas $n = 0$ est clair par hypothèse sur les conditions initiales.

Soit $n \geq 0$. Supposons que $N_i^n \leq M$ et $P_i^n \leq M$, pour tout $i = 0, \dots, L+1$.

Notons $\mathbf{M} = (M, \dots, M)' \in \mathbb{R}^L$.

Comme $(K_N^n)^{-1} \geq 0$, si on montre que $K_N^{n+1}(N^{n+1} - \mathbf{M}) \leq 0$, on aura $N^{n+1} \leq \mathbf{M}$.

Calculons $K_N^n \mathbf{M}$:

$$\begin{aligned} (K_N^n \mathbf{M})_1 &= M \frac{h_1}{\Delta t} + M \frac{1}{h_{1+\frac{1}{2}}} + M \frac{1}{h_{\frac{1}{2}}} + M(dV_{1+\frac{1}{2}}^n)^+ + M(dV_{\frac{1}{2}}^n)^- - M \frac{1}{h_{1+\frac{1}{2}}} - M(dV_{1+\frac{1}{2}}^n)^- \\ &= M \frac{h_1}{\Delta t} + M \frac{1}{h_{\frac{1}{2}}} + M dV_{1+\frac{1}{2}}^n + M(dV_{\frac{1}{2}}^n)^- \end{aligned}$$

pour $i = 2, \dots, L-1$,

$$\begin{aligned} (K_N^n \mathbf{M})_i &= M \frac{h_i}{\Delta t} + M \frac{1}{h_{i+\frac{1}{2}}} + M \frac{1}{h_{i-\frac{1}{2}}} + M(dV_{i+\frac{1}{2}}^n)^+ + M(dV_{i-\frac{1}{2}}^n)^- \\ &\quad - M \frac{1}{h_{i+\frac{1}{2}}} - M(dV_{i+\frac{1}{2}}^n)^- - M \frac{1}{h_{i-\frac{1}{2}}} - M(dV_{i-\frac{1}{2}}^n)^+ \\ &= M \frac{h_i}{\Delta t} + M dV_{i+\frac{1}{2}}^n - M dV_{i-\frac{1}{2}}^n \\ &= M \frac{h_i}{\Delta t} + M \frac{h_i}{\lambda^2} (N_i^n - P_i^n) \end{aligned}$$

$$(K_N^n \mathbf{M})_L = M \frac{h_L}{\Delta t} + M \frac{1}{h_{L+\frac{1}{2}}} - M dV_{L-\frac{1}{2}}^n + M(dV_{L+\frac{1}{2}}^n)^+$$

En écrivant $N_i^n - P_i^n = (N_i^n - M) - (P_i^n - M)$, on obtient :

$$\begin{aligned} (K_N^n (N^{n+1} - \mathbf{M}))_1 &= \frac{h_1}{\Delta t} N_1^n + \left(\frac{1}{h_{\frac{1}{2}}} + (dV_{\frac{1}{2}}^n)^+ \right) N_0^D - M \frac{h_1}{\Delta t} - M \frac{1}{h_{\frac{1}{2}}} - M dV_{1+\frac{1}{2}}^n - M(dV_{\frac{1}{2}}^n)^- \\ &\leq \frac{h_1}{\Delta t} (N_1^n - M) + \frac{1}{h_{\frac{1}{2}}} (N_0^D - M) + M(dV_{\frac{1}{2}}^n - dV_{1+\frac{1}{2}}^n) \\ &\leq \frac{h_1}{\Delta t} (N_1^n - M) + \frac{1}{h_{\frac{1}{2}}} (N_0^D - M) + \frac{M}{\lambda^2} (P_1^n - N_1^n) \\ &\leq 0, \end{aligned}$$

pour $i = 2, \dots, L-1$,

$$\begin{aligned} (K_N^n (N^{n+1} - \mathbf{M}))_i &= \frac{h_i}{\Delta t} N_i^n - M \frac{h_i}{\Delta t} \\ &\quad - M \frac{h_i}{\lambda^2} ((N_i^n - M) - (P_i^n - M)) \\ &= \left(\frac{h_i}{\Delta t} - M \frac{h_i}{\lambda^2} \right) (N_i^n - M) + M \frac{h_i}{\lambda^2} (P_i^n - M) \\ &\leq 0 \text{ d'après la condition (27)} \end{aligned}$$

et enfin, en procédant comme pour $(K_N^n(N^{n+1} - \mathbf{M}))_1$,

$$(K_N^n(N^{n+1} - \mathbf{M}))_L \leq 0.$$

□

Remarque 2. *Pour la démonstration dans le cas non-linéaire, on écrit le schéma (7) sous la forme d'un système d'équations non-linéaires $f(N^{n+1}) = F_N$, où f est une application de \mathbb{R}^L dans \mathbb{R}^L et $F_N \in \mathbb{R}^L$. Comme dans [1], on démontre l'unicité et la stabilité de la solution en appliquant les propositions 5 et 6 à la jacobienne J de f . Quant à la preuve de l'existence, elle utilise un argument de degré topologique.*

On a donc la stabilité L^∞ du schéma dès que $\Delta t \leq \frac{\lambda^2}{M}$. Pour $\lambda^2 \ll 1$, cette condition sur le pas de temps est très restrictive.

On va donc s'intéresser à une discrétisation entièrement implicite, qui nous permettra de ne pas avoir une telle contrainte sur Δt .

3 Schéma décentré amont implicite

3.1 Présentation du schéma

On s'intéresse dans cette partie au schéma suivant, où tous les termes sont discrétisés de manière implicite :

$$\begin{aligned} & \frac{h_i}{\Delta t} (N_i^{n+1} - N_i^n) - \left(dr(N_{i+\frac{1}{2}}^{n+1}) - dr(N_{i-\frac{1}{2}}^{n+1}) \right) + (dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1})^+ N_i^{n+1} \\ & - (dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1})^- N_{i+1}^{n+1} - (dV_{i-\frac{1}{2}}^{n+1})^+ N_{i-1}^{n+1} + (dV_{i-\frac{1}{2}}^{n+1})^- N_i^{n+1} = 0 \end{aligned} \quad (32)$$

$$\begin{aligned} & \frac{h_i}{\Delta t} (P_i^{n+1} - P_i^n) - \left(dr(P_{i+\frac{1}{2}}^{n+1}) - dr(P_{i-\frac{1}{2}}^{n+1}) \right) + (dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1})^- P_i^{n+1} \\ & - (dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1})^+ P_{i+1}^{n+1} - (dV_{i-\frac{1}{2}}^{n+1})^- P_{i-1}^{n+1} + (dV_{i-\frac{1}{2}}^{n+1})^+ P_i^{n+1} = 0 \end{aligned} \quad (33)$$

$$-\lambda^2 (dV_{i+\frac{1}{2}}^n - dV_{i-\frac{1}{2}}^n) = h_i (N_i^n - P_i^n) \quad (34)$$

3.2 Estimations a priori

Proposition 2. *On se place sous les hypothèses énoncées dans l'introduction.*

S'il existe une solution $\{(N_i^n, P_i^n, V_i^n), 0 \leq n \leq M_T + 1, 0 \leq i \leq L + 1\}$ au schéma (32), (33), (34), alors on a :

$$0 < m \leq N_i^n, P_i^n \leq M, \forall 0 \leq i \leq L + 1, \forall n \geq 0.$$

Preuve. Cette preuve est une adaptation dans le cadre discret de la preuve faite dans [7].
On procède par récurrence sur $n \geq 0$.

$n = 0$: on a bien le résultat par hypothèse sur les conditions initiales.

Soit $n \geq 0$: supposons que $m \leq N^n$, $P^n \leq M$ et montrons que $m \leq N^{n+1}$, $P^{n+1} \leq M$.

En multipliant (32) par $-(N_i^{n+1} - m)^-$, en sommant sur i et en utilisant le fait que $m \leq N_0^D$, N_1^D (ce qui annule les termes de bord lors des intégrations par parties discrètes), on obtient :

$$\begin{aligned} & \sum_{i=0}^L \frac{h_i}{\Delta t} ((N_i^{n+1} - m)^-)^2 + \sum_{i=0}^L \frac{h_i}{\Delta t} (N_i^n - m)(N_i^{n+1} - m)^- \\ & - \sum_{i=0}^L h_{i+\frac{1}{2}} dr(N^{n+1})_{i+\frac{1}{2}} d((N^{n+1} - m)^-)_{i+\frac{1}{2}} = \\ & \sum_{i=0}^L h_{i+\frac{1}{2}} (dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1})^+ N_i^{n+1} d((N^{n+1} - m)^-)_{i+\frac{1}{2}} \\ & + \sum_{i=0}^L h_{i+\frac{1}{2}} (dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1})^- N_{i+1}^{n+1} d((N^{n+1} - m)^-)_{i+\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

Or, $(N_i^n - m)(N_i^{n+1} - m)^- \geq 0$ pour tout i (car $N_i^n - m \geq 0$ par hypothèse de récurrence),

donc $\sum_0^L \frac{h_i}{\Delta t} (N_i^n - m)(N_i^{n+1} - m)^- \geq 0$.

On a aussi $\sum_0^L h_{i+\frac{1}{2}} dr(N^{n+1})_{i+\frac{1}{2}} d((N^{n+1} - m)^-)_{i+\frac{1}{2}} \geq 0$.

En effet : par la formule de Taylor, pour tout i , il existe θ_i compris entre N_i^{n+1} et N_{i+1}^{n+1} tel que $r(N_{i+1}^{n+1}) - r(N_i^{n+1}) = r'(\theta_i)(N_{i+1}^{n+1} - N_i^{n+1})$. Donc :

$$\begin{aligned} & - \sum_0^L h_{i+\frac{1}{2}} dr(N^{n+1})_{i+\frac{1}{2}} d((N^{n+1} - m)^-)_{i+\frac{1}{2}} = \\ & - \sum_0^L r'(\theta_i) ((N_{i+1}^{n+1} - m) - (N_i^{n+1} - m)) d((N^{n+1} - m)^-)_{i+\frac{1}{2}} = \\ & - \sum_0^L r'(\theta_i) h_{i+\frac{1}{2}} d(N^{n+1} - m)_{i+\frac{1}{2}} d((N^{n+1} - m)^-)_{i+\frac{1}{2}} = \\ & - \sum_0^L r'(\theta_i) h_{i+\frac{1}{2}} \left(d((N^{n+1} - m)^-)_{i+\frac{1}{2}} \right)^2 \geq 0. \end{aligned}$$

Ainsi, on obtient :

$$\sum_0^L \frac{h_i}{\Delta t} ((N_i^{n+1} - m)^-)^2 \leq A_N$$

avec

$$\begin{aligned}
A_N &= -\sum_0^L h_{i+\frac{1}{2}} (dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1})^+ N_i^{n+1} d((N^{n+1} - m)^-)_{i+\frac{1}{2}} \\
&\quad + \sum_0^L h_{i+\frac{1}{2}} (dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1})^- N_{i+1}^{n+1} d((N^{n+1} - m)^-)_{i+\frac{1}{2}} \\
&= -\sum_0^L h_{i+\frac{1}{2}} (dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1})^+ (N_i^{n+1} - m) d((N^{n+1} - m)^-)_{i+\frac{1}{2}} \\
&\quad - m \sum_0^L h_{i+\frac{1}{2}} (dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1})^+ d((N^{n+1} - m)^-)_{i+\frac{1}{2}} \\
&\quad + \sum_0^L h_{i+\frac{1}{2}} (dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1})^- (N_{i+1}^{n+1} - m) d((N^{n+1} - m)^-)_{i+\frac{1}{2}} \\
&\quad + m \sum_0^L h_{i+\frac{1}{2}} (dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1})^- d((N^{n+1} - m)^-)_{i+\frac{1}{2}}.
\end{aligned}$$

Or, on a :

$$-(N_i^{n+1} - m) d((N^{n+1} - m)^-)_{i+\frac{1}{2}} \leq \frac{1}{2} d(((N^{n+1} - m)^-)^2)_{i+\frac{1}{2}}$$

et de même

$$(N_{i+1}^{n+1} - m) d((N^{n+1} - m)^-)_{i+\frac{1}{2}} \leq -\frac{1}{2} d(((N^{n+1} - m)^-)^2)_{i+\frac{1}{2}}.$$

Donc

$$\begin{aligned}
A_N &\leq \frac{1}{2} \sum_0^L h_{i+\frac{1}{2}} dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} d(((N^{n+1} - m)^-)^2)_{i+\frac{1}{2}} \\
&\quad - m \sum_0^L h_{i+\frac{1}{2}} dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} d((N^{n+1} - m)^-)_{i+\frac{1}{2}}.
\end{aligned}$$

En effectuant une intégration par parties discrète, on obtient :

$$\begin{aligned}
A_N &\leq -\frac{1}{2} \sum_0^L (dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - dV_{i-\frac{1}{2}}^{n+1}) ((N_i^{n+1} - m)^-)^2 \\
&\quad + m \sum_0^L (dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - dV_{i-\frac{1}{2}}^{n+1}) (N_i^{n+1} - m)^-.
\end{aligned}$$

En utilisant le schéma (34), on obtient finalement :

$$\begin{aligned}
A_N &\leq -\frac{1}{2\lambda^2} \sum_0^L h_i (N_i^{n+1} - P_i^{n+1}) ((N_i^{n+1} - m)^-)^2 \\
&\quad + \frac{m}{\lambda^2} \sum_0^L h_i (N_i^{n+1} - P_i^{n+1}) (N_i^{n+1} - m)^-.
\end{aligned}$$

Ainsi,

$$\begin{aligned} \sum_0^L \frac{h_i}{\Delta t} ((N_i^{n+1} - m)^-)^2 &\leq \\ -\frac{1}{\lambda^2} \sum_0^L h_i (N_i^{n+1} - P_i^{n+1}) &\left(\frac{1}{2} ((N_i^{n+1} - m)^-)^2 - m(N_i^{n+1} - m)^- \right). \end{aligned} \quad (35)$$

En procédant de la même manière pour P , on obtient :

$$\begin{aligned} \sum_0^L \frac{h_i}{\Delta t} ((P_i^{n+1} - m)^-)^2 &\leq \\ \frac{1}{\lambda^2} \sum_0^L h_i (N_i^{n+1} - P_i^{n+1}) &\left(\frac{1}{2} ((P_i^{n+1} - m)^-)^2 - m(P_i^{n+1} - m)^- \right). \end{aligned} \quad (36)$$

Sommons (35) et (36) :

$$\begin{aligned} \sum_0^L \frac{h_i}{\Delta t} ((N_i^{n+1} - m)^-)^2 + \sum_0^L \frac{h_i}{\Delta t} ((P_i^{n+1} - m)^-)^2 &\leq \\ -\frac{1}{\lambda^2} \sum_0^L h_i (N_i^{n+1} - P_i^{n+1}) (f(N_i^{n+1}) - f(P_i^{n+1})) \end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned} f(s) &= \frac{1}{2} ((s - m)^-)^2 - m(s - m)^- \\ &= -\frac{1}{2} (s - m)^- (s + m). \end{aligned}$$

Puisque $x \mapsto x^- = -\min(0, x)$ est décroissante, f est croissante. Donc

$$\sum_0^L \frac{h_i}{\Delta t} ((N_i^{n+1} - m)^-)^2 + \sum_0^L \frac{h_i}{\Delta t} ((P_i^{n+1} - m)^-)^2 \leq 0,$$

d'où $N_i^{n+1} \geq m$ et $P_i^{n+1} \geq m$ pour tout i . Pour montrer que $N_i^{n+1} \leq M$ et $P_i^{n+1} \leq M$, on procède exactement de la même manière, mais en multipliant par $(N_i^{n+1} - M)^+$ et $(P_i^{n+1} - M)^+$.

□

Remarque 3. *On constate que la solution numérique (si elle existe) est inconditionnellement stable (on n'a plus de contrainte sur Δt en fonction de λ^2).*

Remarque 4. *Il semble qu'on peut obtenir un résultat analogue pour le schéma de Scharfetter-Gummel.*

3.3 Existence

Théorème 1. *On se place sous les hypothèses énoncées dans l'introduction.*

Alors il existe une solution $\{(N_i^n, P_i^n, V_i^n), 0 \leq n \leq M_T + 1, 0 \leq i \leq L + 1\}$ au schéma (32), (33), (34).

Preuve. La preuve est basée sur l'utilisation du théorème de Brouwer. Elle s'effectue par récurrence sur $n \geq 0$.

Soit $n \geq 1$. Supposons avoir montré l'existence de $(N^{n-1}, P^{n-1}, V^{n-1})$, et montrons celle de (N^n, P^n, V^n) .

Soit $\alpha > 0$ un réel fixé.

Notons $\phi : \mathbb{R}^{2L+4} \rightarrow \mathbb{R}^{L+2}$ l'application définie par $\phi(N, P) = V$ avec $\lambda^2(dV_{i+\frac{1}{2}} - dV_{i-\frac{1}{2}}) = h_i(N_i - P_i)$ et $V_0 = V_0^D, V_{L+1} = V_1^D$. V s'obtient à partir de (N, P) par résolution du système linéaire $AV = \frac{h'}{\lambda^2}(N - P)$ où h est le vecteur $(h_i)_{i=1, \dots, L}$ et A est la matrice tri-diagonale telle que $A_{i,i} = -\frac{1}{h_{i+\frac{1}{2}}} - \frac{1}{h_{i-\frac{1}{2}}}, A_{i,i+1} = \frac{1}{h_{i+\frac{1}{2}}}, A_{i,i-1} = \frac{1}{h_{i-\frac{1}{2}}}$. La matrice A étant inversible, V est uniquement défini. Donc l'application ϕ est bien définie, et de plus elle est continue.

Notons T l'application de \mathbb{R}^{2L+4} dans \mathbb{R}^{2L+4} telle que $T(N, P) = (\tilde{N}, \tilde{P})$ où

$$\begin{aligned} & \frac{h_i}{\Delta t} \left(1 + \frac{\alpha}{\lambda^2}\right) \tilde{N}_i - \left(dr(\tilde{N}_{i+\frac{1}{2}}) - dr(\tilde{N}_{i-\frac{1}{2}})\right) \\ & + \left(d(\phi(\tilde{N}, \tilde{P}))_{i+\frac{1}{2}}\right)^+ \tilde{N}_i - \left(d(\phi(\tilde{N}, \tilde{P}))_{i+\frac{1}{2}}\right)^- \tilde{N}_{i+1} - \\ & \left(d(\phi(\tilde{N}, \tilde{P}))_{i-\frac{1}{2}}\right)^+ \tilde{N}_{i-1} + \left(d(\phi(\tilde{N}, \tilde{P}))_{i-\frac{1}{2}}\right)^- \tilde{N}_i = \\ & \frac{h_i}{\Delta t} N_i^{n-1} + \frac{h_i}{\Delta t} \frac{\alpha}{\lambda^2} N_i \end{aligned} \quad (37)$$

$$\tilde{N}_0 = N_0^D, \tilde{N}_{L+1} = N_1^D$$

et

$$\begin{aligned} & \frac{h_i}{\Delta t} \left(1 + \frac{\alpha}{\lambda^2}\right) \tilde{P}_i - \left(dr(\tilde{P}_{i+\frac{1}{2}}) - dr(\tilde{P}_{i-\frac{1}{2}})\right) \\ & + \left(d(\phi(\tilde{N}, \tilde{P}))_{i+\frac{1}{2}}\right)^- \tilde{P}_i - \left(d(\phi(\tilde{N}, \tilde{P}))_{i+\frac{1}{2}}\right)^+ \tilde{P}_{i+1} - \\ & \left(d(\phi(\tilde{N}, \tilde{P}))_{i-\frac{1}{2}}\right)^- \tilde{P}_{i-1} + \left(d(\phi(\tilde{N}, \tilde{P}))_{i-\frac{1}{2}}\right)^+ \tilde{P}_i = \\ & \frac{h_i}{\Delta t} P_i^{n-1} + \frac{h_i}{\Delta t} \frac{\alpha}{\lambda^2} P_i \end{aligned} \quad (38)$$

$$\tilde{P}_0 = P_0^D, \tilde{P}_{L+1} = P_1^D.$$

L'application T est bien définie, *i.e.* si (N, P) est donné, il existe un unique couple (\tilde{N}, \tilde{P}) vérifiant (37)-(38). Pour le montrer, on procède comme dans la preuve de la proposition 1, en suivant [1].

Stabilité On montre maintenant que $T([0, M]^{2L+4}) \subset [0, M]^{2L+4}$. Pour simplifier les notations, on pose désormais $\phi(\tilde{N}, \tilde{P}) = V$. (37) s'écrit : $f(\tilde{N}) = F_N$, avec $F_N =$

$$\begin{pmatrix} \frac{h_1}{\Delta t}(N_1^{n-1} + \frac{\alpha}{\lambda^2}N_1) + (dV_{\frac{1}{2}})^+N_0^D + \frac{r(N_0^D)}{h_{\frac{1}{2}}} \\ \frac{h_2}{\Delta t}(N_2^{n-1} + \frac{\alpha}{\lambda^2}N_2) \\ \vdots \\ \frac{h_{L-1}}{\Delta t}(N_{L-1}^{n-1} + \frac{\alpha}{\lambda^2}N_{L-1}) \\ \frac{h_L}{\Delta t}(N_L^{n-1} + \frac{\alpha}{\lambda^2}N_L) + (dV_{L+\frac{1}{2}})^-N_1^D + \frac{r(N_1^D)}{h_{L+\frac{1}{2}}} \end{pmatrix}$$

pour $i = 2, \dots, L-1$,

$$\begin{aligned} (f(\tilde{N}))_i &= \frac{h_i}{\Delta t} \left(1 + \frac{\alpha}{\lambda^2}\right) \tilde{N}_i - \left(dr(\tilde{N})_{i+\frac{1}{2}} - dr(\tilde{N})_{i-\frac{1}{2}}\right) \\ &\quad + (dV_{i+\frac{1}{2}})^+ \tilde{N}_i - (dV_{i+\frac{1}{2}})^- \tilde{N}_{i+1} \\ &\quad - (dV_{i-\frac{1}{2}})^+ \tilde{N}_{i-1} + (dV_{i-\frac{1}{2}})^- \tilde{N}_i \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} (f(\tilde{N}))_1 &= \frac{h_1}{\Delta t} \left(1 + \frac{\alpha}{\lambda^2}\right) \tilde{N}_1 - dr(\tilde{N})_{1+\frac{1}{2}} + \frac{r(\tilde{N}_1)}{h_{\frac{1}{2}}} \\ &\quad + (dV_{1+\frac{1}{2}})^+ \tilde{N}_1 - (dV_{1+\frac{1}{2}})^- \tilde{N}_2 + (dV_{\frac{1}{2}})^- \tilde{N}_1, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (f(\tilde{N}))_L &= \frac{h_L}{\Delta t} \left(1 + \frac{\alpha}{\lambda^2}\right) \tilde{N}_L + \frac{r(\tilde{N}_L)}{h_{L+\frac{1}{2}}} + dr(\tilde{N})_{L-\frac{1}{2}} \\ &\quad + (dV_{L+\frac{1}{2}})^+ \tilde{N}_L - (dV_{L-\frac{1}{2}})^+ \tilde{N}_{L-1} + (dV_{L-\frac{1}{2}})^- \tilde{N}_{L-1}. \end{aligned}$$

La fonction f est de classe \mathcal{C}^1 . Notons $J(\tilde{N})$ sa matrice jacobienne en \tilde{N} . $J(\tilde{N}) \in M_L(\mathbb{R})$ est tridiagonale :

$$(J(\tilde{N}))_{i,i} = \frac{h_i}{\Delta t} \left(1 + \frac{\alpha}{\lambda^2}\right) + \frac{r'(\tilde{N}_i)}{h_{i+\frac{1}{2}}} + \frac{r'(\tilde{N}_i)}{h_{i-\frac{1}{2}}} + (dV_{i+\frac{1}{2}})^+ + (dV_{i-\frac{1}{2}})^-$$

$$(J(\tilde{N}))_{i,i+1} = -\frac{r'(\tilde{N}_{i+1})}{h_{i+\frac{1}{2}}} - (dV_{i+\frac{1}{2}})^- \leq 0$$

$$(J(\tilde{N}))_{i,i-1} = -\frac{r'(\tilde{N}_{i-1})}{h_{i-\frac{1}{2}}} - (dV_{i-\frac{1}{2}})^+ \leq 0.$$

$J(\tilde{N})$ étant à diagonale strictement dominante par rapport à ses colonnes, c'est donc une M-matrice.

De plus, puisque $f(0) = 0$ et $f(\tilde{N}) = F_N \geq 0$ (car $N^{n-1} \geq 0$ et $N \geq 0$), on a $f(\tilde{N}) - f(0) \geq 0$, donc en appliquant les propositions 5 et 6, on obtient $\tilde{N} \geq 0$.

Montrons maintenant que $\tilde{N} \leq M$. Pour cela, montrons que $f(\tilde{N}) - f(\mathbf{M}) \leq 0$, et utilisons à nouveau les propositions 5 et 6 pour en déduire le résultat.

On a pour $i = 2, \dots, L - 1$:

$$(f(\tilde{N}) - f(\mathbf{M}))_i = \frac{h_i}{\Delta t}(N_i^{n-1} - M) + M \frac{h_i}{\lambda^2}(P_i - M) + \frac{h_i}{\lambda^2} \left(\frac{\alpha}{\Delta t} - M \right) (N_i - M)$$

et

$$\begin{aligned} (f(\tilde{N}) - f(\mathbf{M}))_1 &= \frac{h_1}{\Delta t}(N_1^{n-1} - M) + \frac{h_1}{\Delta t} \frac{\alpha}{\lambda^2}(N_1 - M) \\ &\quad + (dV_{\frac{1}{2}})^+ N_0^D - (dV_{\frac{1}{2}})^- M - dV_{1+\frac{1}{2}} M \\ &\quad + \frac{1}{h_{\frac{1}{2}}}(r(N_0^D) - r(M)) \\ &\leq \frac{h_1}{\Delta t}(N_1^{n-1} - M) + M \frac{h_1}{\lambda^2}(P_1 - M) + \frac{h_1}{\lambda^2} \left(\frac{\alpha}{\Delta t} - M \right) (N_1 - M) \\ &\quad + \frac{1}{h_{\frac{1}{2}}}(r(N_0^D) - r(M)) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (f(\tilde{N}) - f(\mathbf{M}))_L &\leq \frac{h_L}{\Delta t}(N_L^{n-1} - M) + M \frac{h_L}{\lambda^2}(P_L - M) + \frac{h_L}{\lambda^2} \left(\frac{\alpha}{\Delta t} - M \right) (N_L - M) \\ &\quad + \frac{1}{h_{L+\frac{1}{2}}}(r(N_1^D) - r(M)). \end{aligned}$$

Or, on sait que $N_i - M \leq 0$, $P_i - M \leq 0$ et $N_i^{n-1} - M \leq 0$. On a donc $f(\tilde{N}) - f(\mathbf{M}) \leq 0$ dès que $\Delta t \leq \frac{\alpha}{\lambda^2}$, et comme α est arbitrairement grand, on peut toujours le choisir de sorte que cette condition soit vérifiée.

Bilan T est une application continue, et on a vu que $T([0, M]^{2L+4}) \subset [0, M]^{2L+4}$. Par le théorème de point fixe de Brouwer, T admet donc un point fixe. Ceci prouve l'existence de $(N^n, P^n) \in [0, M]^{2L+4}$. □

Remarque 5. *L'unicité de (N^n, P^n, V^n) satisfaisant (32), (33), (34) n'est pas claire.*

Remarque 6. *La clé de la preuve du théorème 1 réside dans l'étude du schéma découplé (semi-implicite) :*

- *l'existence et l'unicité d'une solution à ce schéma assurent la bonne définition de l'application T ,*
- *on déduit de la stabilité L^∞ de cette solution que T stabilise $[0, M]^{2L+4}$.*

Ceci permet alors d'appliquer le théorème de Brouwer à T .

On pourra donc à l'avenir envisager d'appliquer ceci aux autres schémas présentés dans l'introduction.

Mise en oeuvre numérique Pour mettre en oeuvre le schéma entièrement implicite, on peut soit utiliser la méthode de Newton, soit se servir de l'algorithme de point fixe suivant, adapté de celui présenté dans [9] en éléments finis :

soit $\alpha \geq 0$ et $\theta > 0$.

1. Soit (N^0, P^0) donné.

Pour $n \geq 1$, on pose $(N^{n,0}, P^{n,0}) := (N^{n-1}, P^{n-1})$ et $l = 0$.

2. Pour $l \geq 1$, on calcule $(N^{n,l}, P^{n,l}, V^{n,l})$ de la manière suivante :

$$\begin{aligned} & \frac{h_i}{\Delta t} \left(1 + \frac{\alpha}{\lambda^2}\right) N_i^{n,l} - \left(dr(N_{i+\frac{1}{2}}^{n,l}) - dr(N_{i-\frac{1}{2}}^{n,l})\right) + (dV_{i+\frac{1}{2}}^{n,l-1})^+ N_i^{n,l} \\ & - (dV_{i+\frac{1}{2}}^{n,l-1})^- N_{i+1}^{n,l} - (dV_{i-\frac{1}{2}}^{n,l-1})^+ N_{i-1}^{n,l} + (dV_{i-\frac{1}{2}}^{n,l-1})^- N_i^{n,l} = \\ & \frac{h_i}{\Delta t} N_i^{n-1} + \frac{h_i}{\Delta t} \frac{\alpha}{\lambda^2} N_i^{n,l-1} \end{aligned} \quad (39)$$

$$N_0^{n,l} = N_0^D, N_{L+1}^{n,l} = N_1^D$$

$$\begin{aligned} & \frac{h_i}{\Delta t} \left(1 + \frac{\alpha}{\lambda^2}\right) P_i^{n,l} - \left(dr(P_{i+\frac{1}{2}}^{n,l}) - dr(P_{i-\frac{1}{2}}^{n,l})\right) + (dV_{i+\frac{1}{2}}^{n,l-1})^- P_i^{n,l} \\ & - (dV_{i+\frac{1}{2}}^{n,l-1})^+ P_{i+1}^{n,l} - (dV_{i-\frac{1}{2}}^{n,l-1})^- P_{i-1}^{n,l} + (dV_{i-\frac{1}{2}}^{n,l-1})^+ P_i^{n,l} = \\ & \frac{h_i}{\Delta t} P_i^{n-1} + \frac{h_i}{\Delta t} \frac{\alpha}{\lambda^2} P_i^{n,l-1} \end{aligned} \quad (40)$$

$$P_0^{n,l} = P_0^D, P_{L+1}^{n,l} = P_1^D$$

$$\lambda^2 (dV_{i+\frac{1}{2}}^{n,l} - dV_{i-\frac{1}{2}}^{n,l}) = h_i (N_i^{n,l} - P_i^{n,l}) \quad (41)$$

$$V_0^{n,l} = V_0^D, V_{L+1}^{n,l} = V_1^D$$

3. On arrête si

$$\|dV^{n,l} - dV^{n,l-1}\| + \frac{1}{\Delta t} (\|P^{n,l} - P^{n,l-1}\| + \|N^{n,l} - N^{n,l-1}\|) \leq \theta$$

on pose $(N^n, P^n, V^n) := (N^{n,l}, P^{n,l}, V^{n,l})$, et on va à 4.

Sinon, on fait $l \leftarrow l + 1$ et on retourne à 2.

4. On arrête si $n = M$. Sinon, on fait $n \leftarrow n + 1$ et on retourne à 1.

4 Etude du comportement asymptotique

Dans cette section, on s'intéresse à des schémas implicites. On rappelle que la fonction enthalpie h a été définie par (1). On note $H(s) = \int_1^s h(\tau) d\tau$, $0 \leq s$.

Pour tout $n \geq 0$, pour tout $i = 1, \dots, L$, on note $(N_i^{n+1}, P_i^{n+1}, V_i^{n+1})$ la solution du schéma (7)-(11)-(15), et pour tout $i = 1, \dots, L$, on note (N_i^e, P_i^e, V_i^e) la solution du schéma (5)-(6) à l'équilibre thermique.

On définit pour $n \geq 0$:

– l'énergie \mathcal{E}^n

$$\begin{aligned} \mathcal{E}^n &= \sum_0^L h_i (H(N_i^n) - H(N_i^e) - h(N_i^e)(N_i^n - N_i^e)) \\ &\quad + \sum_0^L h_i (H(P_i^n) - H(P_i^e) - h(P_i^e)(P_i^n - P_i^e)) \\ &\quad + \frac{\lambda^2}{2} |V^n - V^e|_1^2 \end{aligned} \quad (42)$$

$$\text{où } |V|_1^2 = \sum_0^L h_{i+\frac{1}{2}} |dV_{i+\frac{1}{2}}|^2,$$

– la dissipation d'énergie \mathcal{I}^n

$$\begin{aligned} \mathcal{I}^n &= \sum_0^L h_{i+\frac{1}{2}} \left(\min(N_i^n, N_{i+1}^n) (d(h(N^n) - V^n)_{i+\frac{1}{2}})^2 \right) \\ &\quad + \sum_0^L h_{i+\frac{1}{2}} \left(\min(P_i^n, P_{i+1}^n) (d(h(P^n) + V^n)_{i+\frac{1}{2}})^2 \right). \end{aligned} \quad (43)$$

Les résultats de cette section sont une adaptation dans le cadre discret de la preuve faite par A. Jüngel dans [5], et utilisent des éléments donnés dans [2] pour le schéma décentré non-linéaire semi-implicite.

4.1 Résultats préliminaires

Le contenu de cette partie est valable pour tous les schémas implicites de la forme (7)-(11)-(15) présentés dans l'introduction.

Lemme 1. *Sous les hypothèses énoncées dans l'introduction, on a pour tout $n \geq 0$:*

$$\mathcal{E}^{n+1} - \mathcal{E}^n \leq T_1 + T_2 + T_3, \quad (44)$$

où

$$\begin{aligned} T_1 &= \sum_0^L h_i (h(N_i^{n+1}) - \alpha_N - V_i^{n+1})(N_i^{n+1} - N_i^n) \\ T_2 &= \sum_0^L h_i (h(P_i^{n+1}) - \alpha_P + V_i^{n+1})(P_i^{n+1} - P_i^n) \\ T_3 &= \sum_0^L h_i ((V_i^{n+1} - V_i^e)(N_i^{n+1} - N_i^n - P_i^{n+1} + P_i^n)) \\ &\quad + \sum_0^L h_{i+\frac{1}{2}} \left(\frac{\lambda^2}{2} (d(V^{n+1} - V^e)_{i+\frac{1}{2}})^2 - \frac{\lambda^2}{2} (d(V^n - V^e)_{i+\frac{1}{2}})^2 \right). \end{aligned}$$

Preuve. Soit $n \geq 0$.

$$\begin{aligned}\mathcal{E}^{n+1} - \mathcal{E}^n &= \sum_0^L h_i \left((H(N_i^{n+1}) - H(N_i^n)) - h(N_i^e)(N_i^{n+1} - N_i^n) \right) \\ &+ \sum_0^L h_i \left((H(P_i^{n+1}) - H(P_i^n)) - h(P_i^e)(P_i^{n+1} - P_i^n) \right) \\ &+ \sum_0^L h_{i+\frac{1}{2}} \frac{\lambda^2}{2} \left((d(V^{n+1} - V^e)_{i+\frac{1}{2}})^2 - (d(V^n - V^e)_{i+\frac{1}{2}})^2 \right).\end{aligned}$$

En utilisant la convexité de la fonction H , on obtient :

$$\begin{aligned}\mathcal{E}^{n+1} - \mathcal{E}^n &\leq \sum_0^L h_i (h(N_i^{n+1}) - h(N_i^e))(N_i^{n+1} - N_i^n) \\ &+ \sum_0^L h_i (h(P_i^{n+1}) - h(P_i^e))(P_i^{n+1} - P_i^n) \\ &+ \sum_0^L h_{i+\frac{1}{2}} \frac{\lambda^2}{2} \left((d(V^{n+1} - V^e)_{i+\frac{1}{2}})^2 - (d(V^n - V^e)_{i+\frac{1}{2}})^2 \right).\end{aligned}$$

Par (6),

$$\begin{aligned}\mathcal{E}^{n+1} - \mathcal{E}^n &\leq \sum_0^L h_i (h(N_i^{n+1}) - \alpha_N - V_i^e)(N_i^{n+1} - N_i^n) \\ &+ \sum_0^L h_i (h(P_i^{n+1}) - \alpha_P + V_i^e)(P_i^{n+1} - P_i^n) \\ &+ \sum_0^L h_{i+\frac{1}{2}} \frac{\lambda^2}{2} \left((d(V^{n+1} - V^e)_{i+\frac{1}{2}})^2 - (d(V^n - V^e)_{i+\frac{1}{2}})^2 \right),\end{aligned}$$

et ainsi on a :

$$\mathcal{E}^{n+1} - \mathcal{E}^n \leq T_1 + T_2 + T_3$$

en écrivant

$$\begin{aligned}h(N_i^{n+1}) - \alpha_N - V_i^e &= h(N_i^{n+1}) - \alpha_N - V_i^{n+1} + V_i^{n+1} - V_i^e \\ h(P_i^{n+1}) - \alpha_P + V_i^e &= h(P_i^{n+1}) - \alpha_P + V_i^{n+1} - V_i^{n+1} + V_i^e.\end{aligned}$$

□

Lemme 2. *En reprenant les notations du lemme 1, on a $T_3 \leq 0$.*

Preuve. En utilisant le schéma (15), on trouve :

$$\begin{aligned}T_3 &= \sum_0^L \lambda^2 (V_i^{n+1} - V_i^e) \left(dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - dV_{i+\frac{1}{2}}^n - (dV_{i-\frac{1}{2}}^{n+1} - dV_{i-\frac{1}{2}}^n) \right) \\ &+ \sum_0^L h_{i+\frac{1}{2}} \frac{\lambda^2}{2} \left((d(V^{n+1} - V^e)_{i+\frac{1}{2}})^2 - (d(V^n - V^e)_{i+\frac{1}{2}})^2 \right).\end{aligned}$$

En faisant une intégration par parties discrète et en utilisant le fait que $V_0^e = V_0^{n+1} = V_0^D$ et $V_{L+1}^e = V_{L+1}^{n+1} = V_1^D$ (ce qui annule les termes de bord), on en déduit :

$$\begin{aligned} T_3 &= \sum_0^L \lambda^2 h_{i+\frac{1}{2}} d(V^{n+1} - V^e)_{i+\frac{1}{2}} d(V^{n+1} - V^n)_{i+\frac{1}{2}} \\ &\quad + \sum_0^L h_{i+\frac{1}{2}} \frac{\lambda^2}{2} \left((d(V^{n+1} - V^e)_{i+\frac{1}{2}})^2 - (d(V^n - V^e)_{i+\frac{1}{2}})^2 \right) \\ &= -\frac{\lambda^2}{2} \sum_0^L h_{i+\frac{1}{2}} (dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - dV_{i+\frac{1}{2}}^n)^2. \end{aligned}$$

Donc $T_3 \leq 0$. □

4.2 Comportement asymptotique du schéma décentré avec diffusion non-linéaire

On s'intéresse dans cette partie à la version entièrement implicite du schéma étudié dans [2]. Les flux numériques sont donnés par :

$$\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} = -\min(N_i^{n+1}, N_{i+1}^{n+1}) dh(N^{n+1})_{i+\frac{1}{2}} + (dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1})^+ N_i^{n+1} - (dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1})^- N_{i+1}^{n+1} \quad (45)$$

$$\mathcal{G}_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} = -\min(P_i^{n+1}, P_{i+1}^{n+1}) dh(P^{n+1})_{i+\frac{1}{2}} + (dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1})^- P_i^{n+1} - (dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1})^+ P_{i+1}^{n+1} \quad (46)$$

L'étude de ce schéma (existence d'une solution, stabilité,...) reste à faire. On supposera donc dans ce qui suit qu'il existe une solution $\{(N_i^n, P_i^n, V_i^n), 0 \leq n \leq M_T + 1, 0 \leq i \leq L + 1\}$ et qu'elle vérifie l'estimation suivante :

$$0 < m \leq N_i^n, P_i^n \leq M. \quad (47)$$

Proposition 3. *Sous les hypothèses ci-dessus,*

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

Plus précisément, on a pour tout $n \geq 0$:

$$0 \leq \mathcal{E}^{n+1} + \Delta t \mathcal{I}^{n+1} \leq \mathcal{E}^n. \quad (48)$$

Preuve. D'après le lemme 1, $\mathcal{E}^{n+1} - \mathcal{E}^n \leq T_1 + T_2 + T_3$ (toujours en utilisant les mêmes notations), et d'après le lemme 2, puisque $T_3 \leq 0$, on a $\mathcal{E}^{n+1} - \mathcal{E}^n \leq T_1 + T_2$. En utilisant le schéma (7), on a :

$$T_1 = -T_4 - T_5$$

avec

$$\begin{aligned} T_4 &= -\Delta t \sum_0^L (\min(N_i^{n+1}, N_{i+1}^{n+1}) dh(N^{n+1})_{i+\frac{1}{2}} \\ &\quad - \min(N_{i-1}^{n+1}, N_i^{n+1}) dh(N^{n+1})_{i-\frac{1}{2}}) (h(N_i^{n+1}) - \alpha_N - V_i^{n+1}) \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} T_5 &= \Delta t \sum_0^L ((dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1})^+ N_i^{n+1} - (dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1})^- N_{i+1}^{n+1} \\ &\quad - (dV_{i-\frac{1}{2}}^{n+1})^+ N_{i-1}^{n+1} + (dV_{i-\frac{1}{2}}^{n+1})^- N_i^{n+1}) (h(N_i^{n+1}) - \alpha_N - V_i^{n+1}). \end{aligned}$$

On fait une intégration par parties discrète de T_4 , en utilisant la définition de α_N pour annuler les termes de bord :

$$T_4 = \Delta t \sum_0^L h_{i+\frac{1}{2}} \min(N_i^{n+1}, N_{i+1}^{n+1}) dh(N^{n+1})_{i+\frac{1}{2}} d(h(N^{n+1}) - V^{n+1})_{i+\frac{1}{2}},$$

et de même

$$T_5 = -\Delta t \sum_0^L h_{i+\frac{1}{2}} \left((dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1})^+ N_i^{n+1} - (dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1})^- N_{i+1}^{n+1} \right) d(h(N^{n+1}) - V^{n+1})_{i+\frac{1}{2}}.$$

On pose

$$T_5^* = -\Delta t \sum_0^L h_{i+\frac{1}{2}} \min(N_i^{n+1}, N_{i+1}^{n+1}) dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} d(h(N^{n+1}) - V^{n+1})_{i+\frac{1}{2}}.$$

Montrons que $T_5 \geq T_5^*$:

$$T_5 - T_5^* = -\Delta t \sum_0^L h_{i+\frac{1}{2}} D_i$$

avec

$$\begin{aligned} D_i &= ((dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1})^+ N_i^{n+1} - (dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1})^- N_{i+1}^{n+1} \\ &\quad - \min(N_i^{n+1}, N_{i+1}^{n+1}) dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1}) d(h(N^{n+1}) - V^{n+1})_{i+\frac{1}{2}} \\ &= dh(N^{n+1})_{i+\frac{1}{2}} (dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1})^+ (N_i^{n+1} - \min(N_i^{n+1}, N_{i+1}^{n+1})) \\ &\quad - dh(N^{n+1})_{i+\frac{1}{2}} (dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1})^- (N_{i+1}^{n+1} - \min(N_i^{n+1}, N_{i+1}^{n+1})) \\ &\quad - dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} (dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1})^+ (N_i^{n+1} - \min(N_i^{n+1}, N_{i+1}^{n+1})) \\ &\quad + dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} (dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1})^- (N_{i+1}^{n+1} - \min(N_i^{n+1}, N_{i+1}^{n+1})). \end{aligned}$$

Comme la fonction h est croissante, les deux premiers termes de D_i sont négatifs, et par définition des fonctions $x \mapsto x^+$ et $x \mapsto x^-$, les deux derniers termes de D_i sont eux aussi négatifs.

Ainsi, $T_5 \geq T_5^*$, d'où $T_1 \leq -T_4 - T_5^*$, ce qui s'écrit encore :

$$T_1 \leq -\Delta t \sum_0^L h_{i+\frac{1}{2}} \min(N_i^{n+1}, N_{i+1}^{n+1}) \left(d(h(N^{n+1}) - V^{n+1})_{i+\frac{1}{2}} \right)^2. \quad (49)$$

En faisant exactement le même raisonnement sur T_2 que sur T_1 , on obtient :

$$T_2 \leq -\Delta t \sum_0^L h_{i+\frac{1}{2}} \min(P_i^{n+1}, P_{i+1}^{n+1}) \left(d(h(P^{n+1}) + V^{n+1})_{i+\frac{1}{2}} \right)^2. \quad (50)$$

Ainsi, on a :

$$\mathcal{E}^{n+1} - \mathcal{E}^n \leq T_1 + T_2 = -\Delta t \mathcal{I}^{n+1}$$

donc finalement

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

□

Le théorème suivant nous renseigne sur le comportement asymptotique de la solution du schéma décentré avec diffusion non-linéaire :

Théorème 2. *Sous les hypothèses ci-dessus, la solution $(N_\delta, P_\delta, V_\delta)$ donnée par le schéma volume fini (7)-(11)-(15) de flux (45)-(46) satisfait pour tout $i = 0, \dots, L+1$:*

$$\begin{aligned} (N_i^n, P_i^n) &\rightarrow (N_i^e, P_i^e) \text{ quand } n \rightarrow \infty \\ V_i^n &\rightarrow V_i^e \text{ quand } n \rightarrow \infty \end{aligned}$$

où (N_i^e, P_i^e, V_i^e) est une approximation de la solution du système stationnaire donnée par (5)-(6).

Preuve. En utilisant (48), on obtient que pour tout $n \geq 0$,

$$0 \leq \mathcal{E}^{n+1} + \Delta t \sum_0^n \mathcal{I}^{k+1} \leq \mathcal{E}^0.$$

La série $\sum_k \mathcal{I}^{k+1}$ est donc bornée, et $\mathcal{I}^{k+1} \geq 0$, donc

$$\mathcal{I}^{k+1} \rightarrow 0 \text{ quand } k \rightarrow \infty. \quad (51)$$

Soit $\delta > 0$.

En utilisant l'inégalité de Cauchy-Schwarz, on a :

$$\begin{aligned} &\frac{\delta}{2} \sum_0^L h_i |N_i^{n+1} - N_i^e|^2 + \frac{1}{2\delta} \sum_0^L h_i |h(N_i^{n+1}) - V_i^{n+1} - \alpha_N|^2 \geq \\ &\left(\sum_0^L h_i |N_i^{n+1} - N_i^e|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_0^L h_i |h(N_i^{n+1}) - V_i^{n+1} - \alpha_N|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \geq \\ &\sum_0^L h_i (N_i^{n+1} - N_i^e) (h(N_i^{n+1}) - V_i^{n+1} - \alpha_N) \\ &= \sum_0^L h_i (N_i^{n+1} - N_i^e) (h(N_i^{n+1}) - h(N_i^e) + V_i^e - V_i^{n+1}) \end{aligned}$$

par définition de α_N .

Il existe $c > 0$ tel que pour tous $x, y \in [m, M]$:

$$(x - y)(h(x) - h(y)) \geq c(x - y)^2.$$

En appliquant cette inégalité, on aboutit finalement à :

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{2} \sum_0^L h_i |N_i^{n+1} - N_i^e|^2 + \frac{1}{2\delta} \sum_0^L h_i |h(N_i^{n+1}) - V_i^{n+1} - \alpha_N|^2 &\geq \\ c \sum_0^L h_i |N_i^{n+1} - N_i^e|^2 + \sum_0^L h_i (N_i^{n+1} - N_i^e)(V_i^e - V_i^{n+1}). &\end{aligned} \quad (52)$$

En faisant la même chose pour P , on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{2} \sum_0^L h_i |P_i^{n+1} - P_i^e|^2 + \frac{1}{2\delta} \sum_0^L h_i |h(P_i^{n+1}) + V_i^{n+1} - \alpha_P|^2 &\geq \\ c \sum_0^L h_i |P_i^{n+1} - P_i^e|^2 - \sum_0^L h_i (P_i^{n+1} - P_i^e)(V_i^e - V_i^{n+1}). &\end{aligned} \quad (53)$$

Sommons (52) et (53) :

$$\begin{aligned} &\left(c - \frac{\delta}{2}\right) \sum h_i (|N_i^{n+1} - N_i^e|^2 + |P_i^{n+1} - P_i^e|^2) \\ &+ \sum h_i (V_i^e - V_i^{n+1})(N_i^{n+1} - N_i^e - P_i^{n+1} + P_i^e) \\ &\leq \frac{1}{2\delta} \sum h_i (|h(N_i^{n+1}) - V_i^{n+1} - \alpha_N|^2 + |h(P_i^{n+1}) + V_i^{n+1} - \alpha_P|^2). \end{aligned}$$

Or, d'après les schémas (15) et (5) et par intégration par parties discrète :

$$\begin{aligned} &\sum h_i (V_i^e - V_i^{n+1})(N_i^{n+1} - N_i^e - P_i^{n+1} + P_i^e) = \\ &-\sum \lambda^2 (V_i^{n+1} - V_i^e)(dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - dV_{i-\frac{1}{2}}^{n+1} - dV_{i+\frac{1}{2}}^e + dV_{i-\frac{1}{2}}^e) = \\ &\lambda^2 \sum h_{i+\frac{1}{2}} \left(d(V^{n+1} - V^e)_{i+\frac{1}{2}}\right)^2. \end{aligned}$$

Donc

$$\begin{aligned} &\left(c - \frac{\delta}{2}\right) \sum h_i (|N_i^{n+1} - N_i^e|^2 + |P_i^{n+1} - P_i^e|^2) \\ &+ \lambda^2 \sum h_{i+\frac{1}{2}} (d(V^{n+1} - V^e)_{i+\frac{1}{2}})^2 \\ &\leq \frac{1}{2\delta} \sum h_i (|h(N_i^{n+1}) - V_i^{n+1} - \alpha_N|^2 + |h(P_i^{n+1}) + V_i^{n+1} - \alpha_P|^2). \end{aligned} \quad (54)$$

On a l'inégalité de Poincaré discrète suivante : il existe une constante C_0 telle que pour tout vecteur $v = (v_i)_{i=0, \dots, L+1}$,

$$\sum h_i v_i^2 \leq C_0 |v|_1^2.$$

En appliquant cette inégalité au second membre de (54), on obtient :

$$\begin{aligned} &\left(c - \frac{\delta}{2}\right) \sum h_i (|N_i^{n+1} - N_i^e|^2 + |P_i^{n+1} - P_i^e|^2) \\ &+ \lambda^2 \sum h_{i+\frac{1}{2}} (d(V^{n+1} - V^e)_{i+\frac{1}{2}})^2 \\ &\leq \frac{C_0}{2\delta} \sum h_{i+\frac{1}{2}} (|d(h(N^{n+1}) - V^{n+1})_{i+\frac{1}{2}}|^2 + |d(h(P^{n+1}) + V^{n+1})_{i+\frac{1}{2}}|^2). \end{aligned}$$

Enfin, en utilisant (47), on a :

$$\mathcal{I}^{n+1} \geq m \sum h_{i+\frac{1}{2}} (|d(h(N^{n+1}) - V^{n+1})_{i+\frac{1}{2}}|^2 + |d(h(P^{n+1}) + V^{n+1})_{i+\frac{1}{2}}|^2) \geq 0. \quad (55)$$

Comme $\mathcal{I}^{n+1} \rightarrow 0$ quand $n \rightarrow \infty$, on en déduit que

$$\sum h_{i+\frac{1}{2}} (|d(h(N^{n+1}) - V^{n+1})_{i+\frac{1}{2}}|^2 + |d(h(P^{n+1}) + V^{n+1})_{i+\frac{1}{2}}|^2) \rightarrow 0$$

et finalement que pour tout $i = 0, \dots, L+1$, $N_i^n \rightarrow N_i^e$, $P_i^n \rightarrow P_i^e$ et $V_i^n \rightarrow V_i^e$ quand $n \rightarrow \infty$. □

Remarque 7. *Pour le schéma semi-implicite, on a besoin de la condition $\Delta t < \frac{m}{M^2}$ pour montrer la convergence en temps long vers l'équilibre thermique. Ici, l'utilisation d'une discrétisation entièrement implicite nous permet d'obtenir un résultat inconditionnel en Δt .*

4.3 Le cas du schéma décentré amont

On voudrait montrer un résultat analogue au théorème 2 pour le schéma décentré amont, de flux (18)-(19). Si on établit que l'inégalité (48) est vraie pour ce schéma, la preuve du comportement asymptotique sera exactement la même que pour le schéma décentré à diffusion non-linéaire.

Etude dans le cas linéaire à une espèce On se place sous les hypothèses suivantes :

- $r(s) = s$, donc $h(s) = \log(s)$,
- $P^n = 0 \quad \forall n \geq 0$,
- $0 < m \leq N^n \leq M \quad \forall n \geq 0$.

Le schéma s'écrit donc :

$$\begin{aligned} & \frac{h_i}{\Delta t} (N_i^{n+1} - N_i^n) - (dN_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - dN_{i-\frac{1}{2}}^{n+1}) \\ & + (dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1})^+ N_i^{n+1} - (dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1})^- N_{i+1}^{n+1} - (dV_{i-\frac{1}{2}}^{n+1})^+ N_{i-1}^{n+1} + (dV_{i-\frac{1}{2}}^{n+1})^- N_i^{n+1} = 0 \end{aligned} \quad (56)$$

$$\lambda^2 (dV_{i+\frac{1}{2}}^n - dV_{i-\frac{1}{2}}^n) = h_i N_i^n. \quad (57)$$

On a par les lemmes 1 et 2

$$\mathcal{E}^{n+1} - \mathcal{E}^n \leq \tilde{T}_1 = \sum_i h_i (\log(N_i^{n+1}) - V_i^{n+1} - \alpha_N) (N_i^{n+1} - N_i^n).$$

En multipliant (56) par $\Delta t (\log(N_i^{n+1}) - V_i^{n+1} - \alpha_N)$ et en sommant sur $i = 0, \dots, L$, on obtient

$$\tilde{T}_1 = -T_4 - T_5 \quad (58)$$

avec

$$\begin{aligned}
T_4 &= -\Delta t \sum_i (dN_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - dN_{i-\frac{1}{2}}^{n+1})(\log(N_i^{n+1}) - V_i^{n+1} - \alpha_N), \\
T_5 &= \Delta t \sum_i \left((dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1})^+ N_i^{n+1} - (dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1})^- N_{i+1}^{n+1} - (dV_{i-\frac{1}{2}}^{n+1})^+ N_{i-1}^{n+1} + (dV_{i-\frac{1}{2}}^{n+1})^- N_i^{n+1} \right) \\
&\quad \times (\log(N_i^{n+1}) - V_i^{n+1} - \alpha_N).
\end{aligned}$$

On effectue une intégration par parties sur T_4 (les termes de bord sont nuls par définition de α_N) :

$$T_4 = \Delta t \sum_i h_{i+\frac{1}{2}} dN_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} d(\log(N^{n+1}) - V^{n+1})_{i+\frac{1}{2}}.$$

Par la formule de Taylor, pour tout $i = 0, \dots, L$, il existe $t_{i+\frac{1}{2}} \in (0, 1)$ tel que :

$$\log(N_{i+1}^{n+1}) - \log(N_i^{n+1}) = \frac{N_{i+1}^{n+1} - N_i^{n+1}}{t_{i+\frac{1}{2}} N_i^{n+1} + (1 - t_{i+\frac{1}{2}}) N_{i+1}^{n+1}} \quad (59)$$

Donc

$$T_4 = \Delta t \sum_i h_{i+\frac{1}{2}} d(\log(N^{n+1}))_{i+\frac{1}{2}} (t_{i+\frac{1}{2}} N_i^{n+1} + (1 - t_{i+\frac{1}{2}}) N_{i+1}^{n+1}) d(\log(N^{n+1}) - V^{n+1})_{i+\frac{1}{2}} \quad (60)$$

On effectue ensuite une intégration par partie de T_5 :

$$T_5 = -\Delta t \sum_i h_{i+\frac{1}{2}} \left((dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1})^+ N_i^{n+1} - (dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1})^- N_{i+1}^{n+1} \right) d(\log(N^{n+1}) - V^{n+1})_{i+\frac{1}{2}}$$

Posons

$$T_5^* = -\Delta t \sum_i h_{i+\frac{1}{2}} (t_{i+\frac{1}{2}} N_i^{n+1} + (1 - t_{i+\frac{1}{2}}) N_{i+1}^{n+1}) dV_{i+\frac{1}{2}} d(\log(N^{n+1}) - V^{n+1})_{i+\frac{1}{2}}$$

On voudrait étudier le signe de $T_5 - T_5^*$.

$$T_5 - T_5^* = T_6 + T_7 \quad (61)$$

avec

$$\begin{aligned}
T_6 &= \Delta t \sum_i h_{i+\frac{1}{2}} d(\log(N^{n+1}))_{i+\frac{1}{2}} (N_{i+1}^{n+1} - N_i^{n+1}) \left((dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1})^+ (1 - t_{i+\frac{1}{2}}) - (dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1})^- t_{i+\frac{1}{2}} \right), \\
T_7 &= -\Delta t \sum_i h_{i+\frac{1}{2}} dV_{i+\frac{1}{2}} (N_{i+1}^{n+1} - N_i^{n+1}) \left((dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1})^+ (1 - t_{i+\frac{1}{2}}) - (dV_{i+\frac{1}{2}}^{n+1})^- t_{i+\frac{1}{2}} \right).
\end{aligned}$$

Puisque la fonction \log est croissante et que $t_{i+\frac{1}{2}} \in (0, 1)$, on a clairement que $T_6 \geq 0$. Il nous reste maintenant à étudier le signe de T_7 . Si on parvient à montrer que T_7 est positif, on aura alors $\mathcal{E}^{n+1} - \mathcal{E}^n \leq \Delta t \mathcal{I}^n$.

Cependant, cette étude n'a à ce jour pas encore abouti.

5 Résultats numériques

Dans toute cette partie, on utilise les données suivantes :

- $T = 1.5$
- $h_i = \Delta x = 0.05$ (maillage à pas constant)
- Conditions initiales :

$$N^0(x) = 0.1 + 0.8\sqrt{x}$$

$$P^0(x) = 0.9 - 0.8\sqrt{x}$$

- Conditions au bord de Dirichlet :

$$N^D(0) = 0.1, N^D(1) = 0.9$$

$$P^D(0) = 0.9, P^D(1) = 0.1$$

$$V^D(0) = \frac{1}{2} (h(N^D(0)) - h(P^D(0))), V^D(1) = \frac{1}{2} (h(N^D(1)) - h(P^D(1)))$$

5.1 Stabilité

On choisit pour les tests de ce paragraphe $\Delta t = 0.01$. On s'intéresse à la stabilité du schéma décentré amont semi-implicite dont les flux sont donnés par (18)-(19). Sur la figure 1, N est représenté au temps $T = 1.5$ pour différentes valeurs de λ^2 : 1, 0.04, 0.008. Conformément au résultat de la proposition 1, on a bien stabilité dans les deux premiers cas, quand $\Delta t \leq \lambda^2$. Dans le troisième cas $\Delta t > \lambda^2$, et on constate que N prend des valeurs extérieures à $[0.1, 0.9]$.

Comme on peut le voir sur la figure 2, ce problème ne se pose plus si on utilise le schéma entièrement implicite.

En fait, on voit en comparant les figures 1 et 2 que dès la valeur $\lambda^2 = 0.04$, même si la solution obtenue avec le schéma semi-implicite reste comprise dans l'intervalle $[0.1, 0.9]$, elle ne nous fournit pas une approximation satisfaisante de la solution de (2).

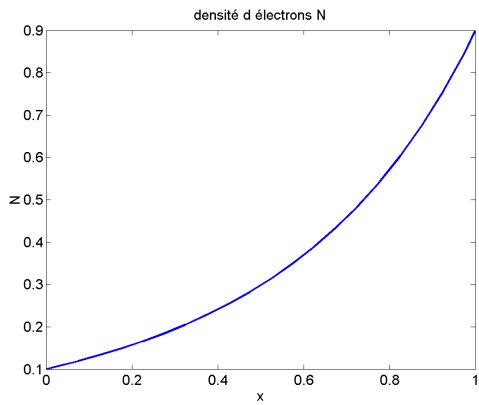
5.2 Comportement asymptotique

Tous les schémas considérés dans cette partie sont entièrement implicites.

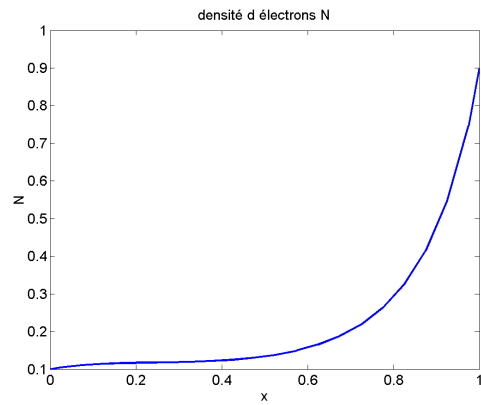
5.2.1 Le cas linéaire

Dans tout ce paragraphe, on s'intéresse au cas linéaire : $r(s) = s$. On a alors $h(s) = \log(s)$. On choisit $\lambda^2 = 0.008$.

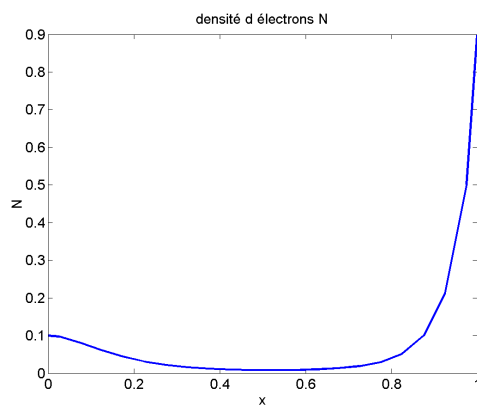
Schéma décentré amont : Les résultats obtenus avec le schéma (32), (33), (34) sont représentés sur la figure 3. On a pris $\Delta t = 0.01$. On constate une décroissance de l'énergie \mathcal{E}^n et de la dissipation d'énergie \mathcal{I}^n , mais la convergence vers 0 de ces quantités ne semble pas claire.



(a) $\lambda^2 = 1$



(b) $\lambda^2 = 0.04$



(c) $\lambda^2 = 0.008$

FIGURE 1 – Schéma décentré amont semi-implicite : N au temps $T = 1.5$ pour $\lambda^2 = 1, 0.04, 0.008$.

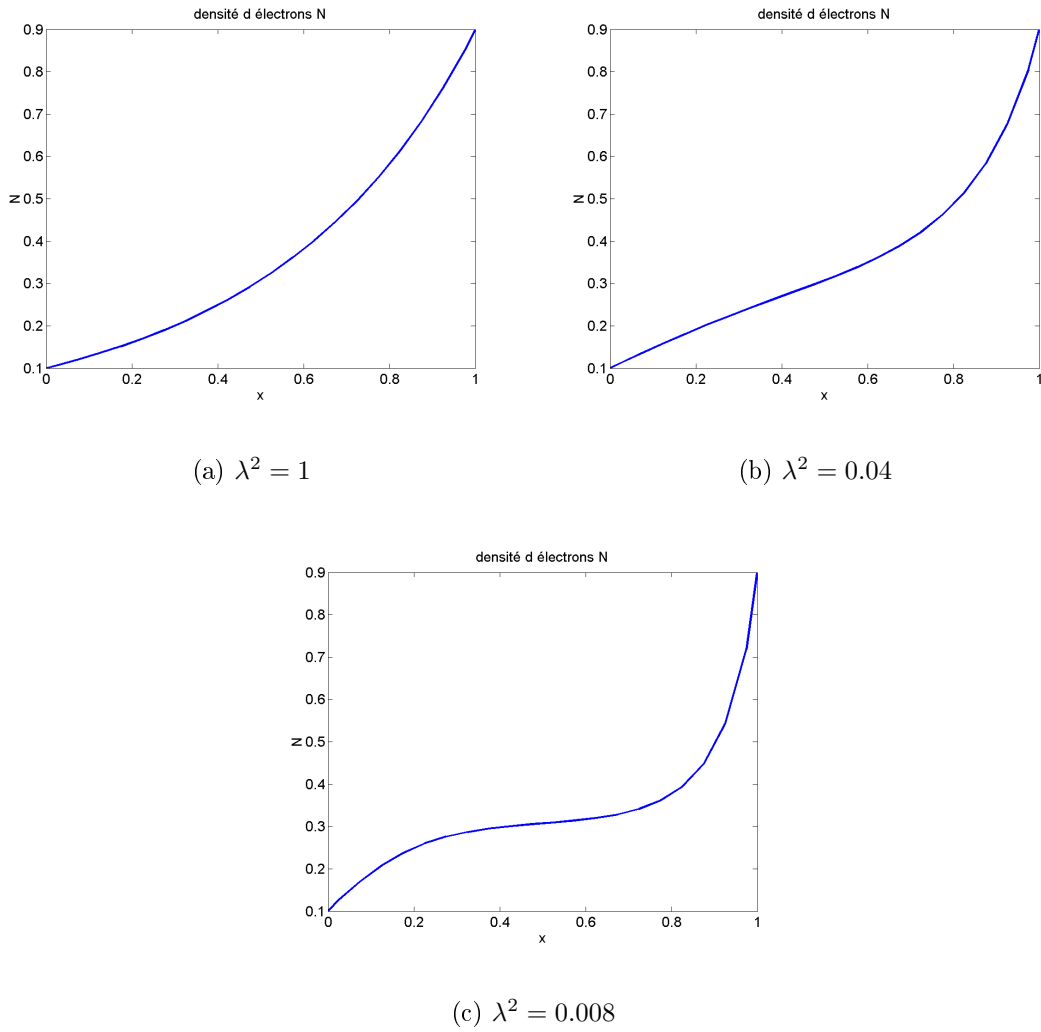


FIGURE 2 – Schéma décentré amont implicite : N au temps $T = 1.5$ pour $\lambda^2 = 0.008$.

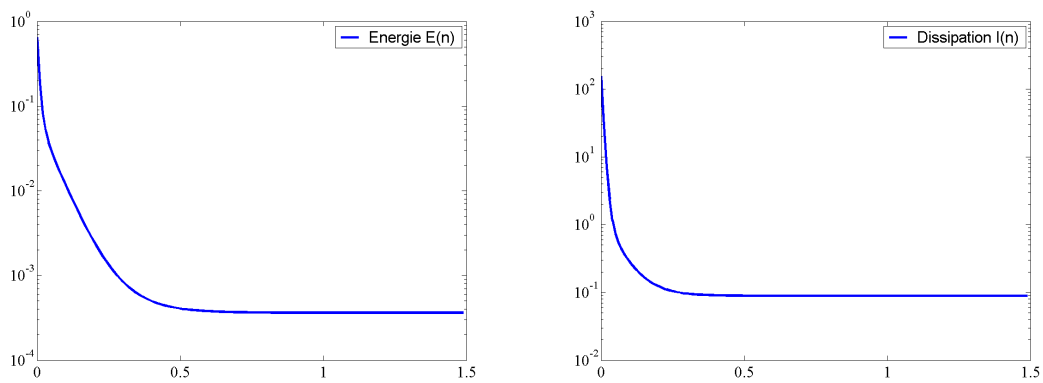


FIGURE 3 – Schéma décentré amont : évolution de l'énergie \mathcal{E}^n et de sa dissipation \mathcal{I}^n .

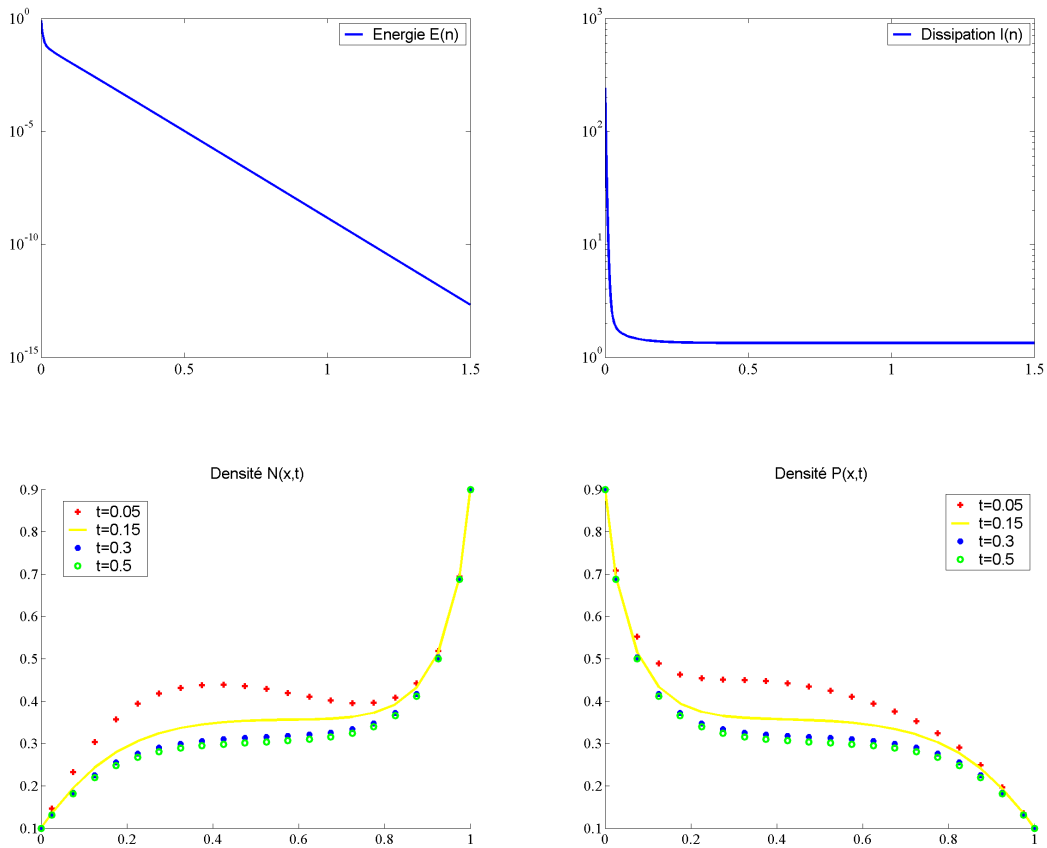


FIGURE 4 – **Schéma décentré avec diffusion non-linéaire** : évolution de l'énergie \mathcal{E}^n , de sa dissipation \mathcal{I}^n , et des densités N et P , pour $n \geq 1$.

Schéma décentré avec discrétisation non-linéaire de la partie diffusive : on s'intéresse ici au schéma dont les flux sont donnés par (45)-(46). On prend $\Delta t = 10^{-4}$. Le comportement asymptotique observé sur la figure 4 est conforme au théorème 2 : la solution numérique converge bien vers la solution à l'équilibre thermique, et on a décroissance vers 0 de l'énergie.

Schéma de Scharfetter-Gummel : On choisit $\Delta t = 0.01$. Comme annoncé dans la remarque 4, la solution numérique est stable (bien que $\Delta t > \lambda^2$). On constate de plus numériquement que la solution converge en temps long vers la solution du problème à l'équilibre thermique (5)-(6). Comme on peut l'observer sur la figure 5, on a bien convergence vers 0 de \mathcal{E}^n et \mathcal{I}^n quand $n \rightarrow +\infty$.

Schéma centré : Les résultats obtenus pour ce schéma avec $\Delta t = 0.01$ sont présentés sur la figure 6. Il semble que la solution converge en temps long vers la solution du problème à l'équilibre thermique (5)-(6). Il pourrait donc être intéressant d'étudier plus précisément les propriétés de ce schéma.

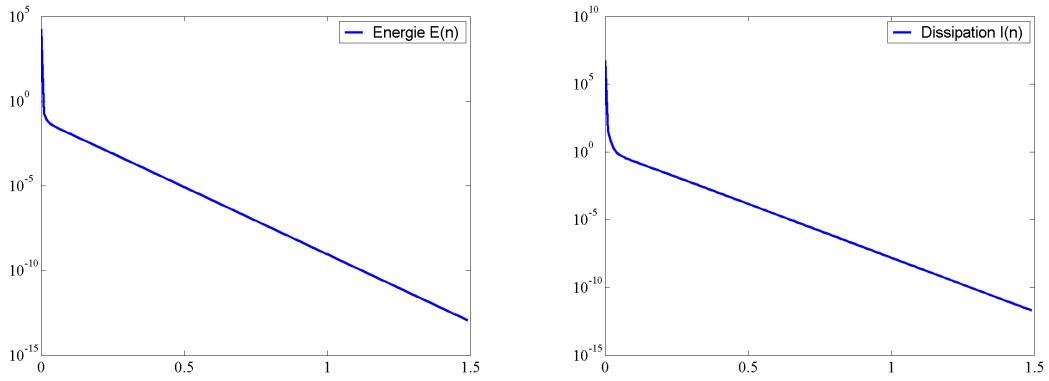


FIGURE 5 – Schéma de Scharfetter-Gummel : évolution de l'énergie \mathcal{E}^n et de sa dissipation \mathcal{I}^n .

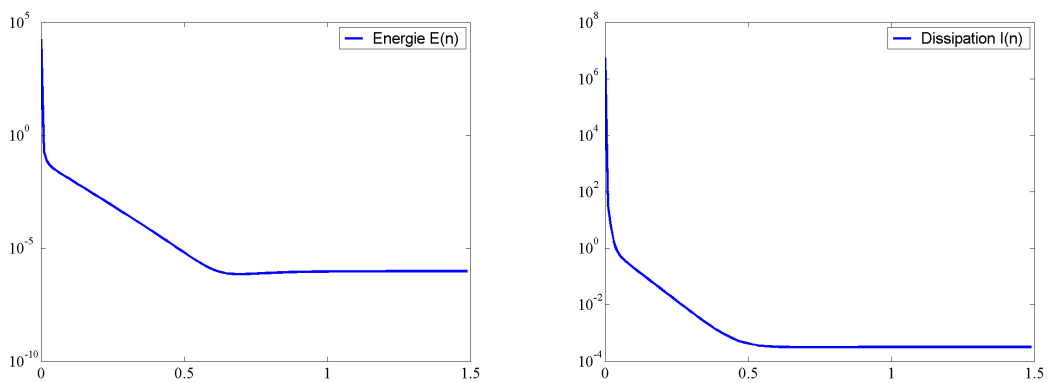


FIGURE 6 – Schéma centré : évolution de l'énergie \mathcal{E}^n et de sa dissipation \mathcal{I}^n .

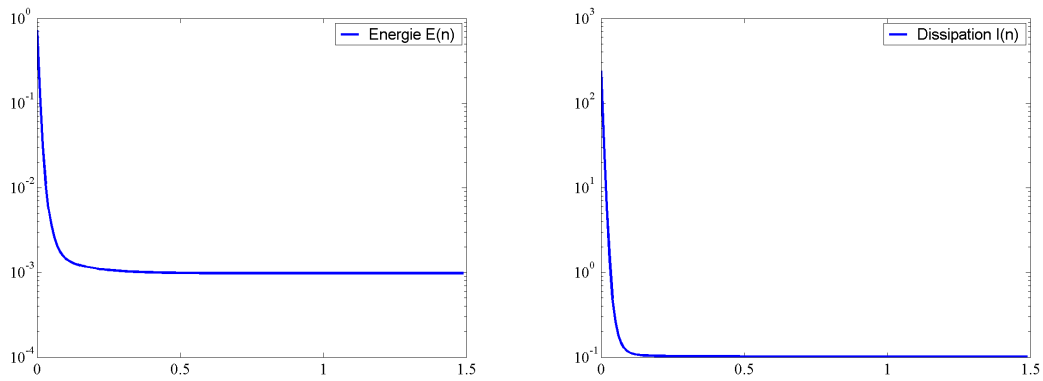


FIGURE 7 – **Schéma décentré amont** : évolution de l'énergie \mathcal{E}^n et de sa dissipation \mathcal{I}^n .

5.2.2 Le cas non-linéaire

Dans toute cette partie, on prend $r(s) = s^2$. On a alors $h(s) = 2s$.

Sur les figures 7 et 8, on présente les résultats obtenus avec respectivement le schéma décentré amont pour $\Delta t = 0.01$ et le schéma décentré à diffusion non-linéaire pour $\Delta t = 10^{-4}$. Les constatations sont les mêmes que dans le cas linéaire.

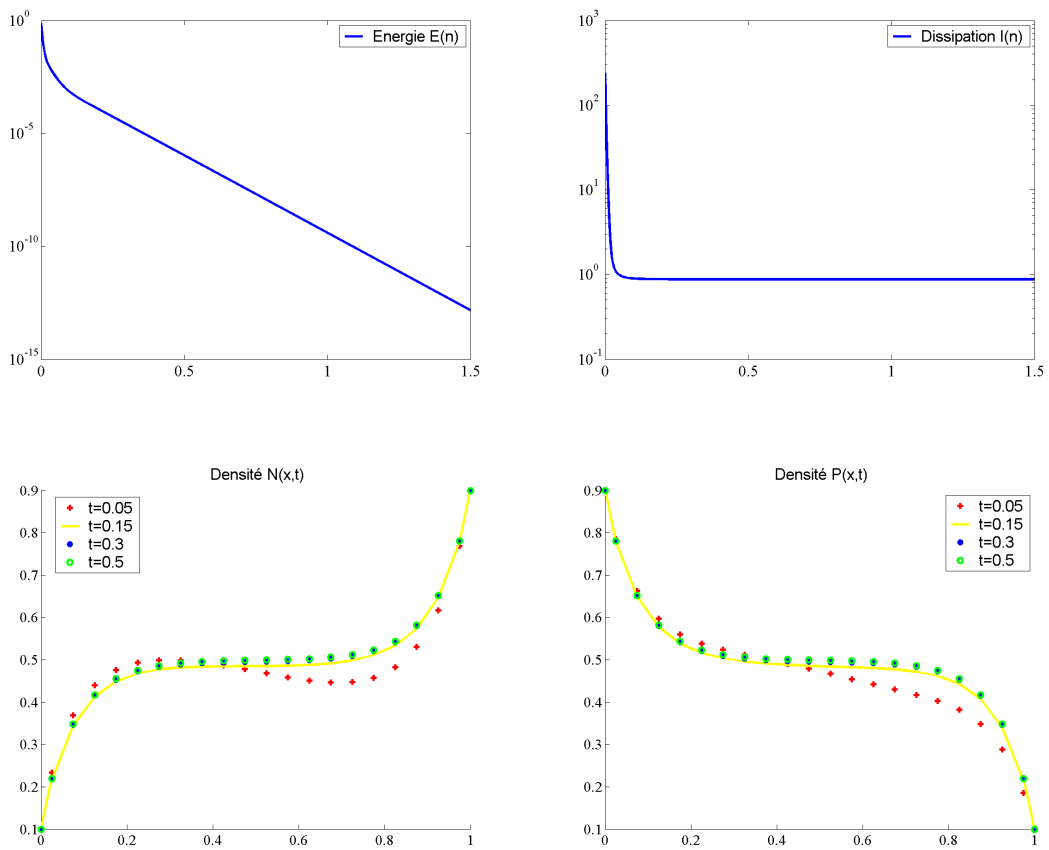


FIGURE 8 – Schéma décentré avec diffusion non-linéaire : évolution de l'énergie \mathcal{E}^n , de sa dissipation \mathcal{I}^n , et des densités N et P , pour $n \geq 1$.

6 Conclusion

Durant ce stage, on a mis au point des schémas remplissant partiellement nos objectifs.

D'une part, on a prouvé que le schéma décentré amont implicite restait valable pour des valeurs de λ^2 même très petites. Cependant, il ne semble pour l'instant pas absolument clair que la solution obtenue converge en temps long vers la solution du problème stationnaire discret, même si cette conjecture paraît se vérifier numériquement. On essaiera donc à l'avenir de valider théoriquement ce comportement asymptotique.

D'autre part, on a montré que la solution du schéma décentré avec diffusion non-linéaire a un comportement asymptotique cohérent, et ce fait a bien été vérifié numériquement. L'étude de ce schéma (existence d'une solution stable, convergence) reste à faire et on pourra pour cela essayer d'adapter les démonstrations obtenues dans le cas du schéma décentré amont classique.

Enfin, vu les résultats numériques obtenus dans le cas linéaire avec le schéma de Scharfetter-Gummel, il semblerait pertinent de s'intéresser plus précisément à son étude.

Annexe : quelques résultats d'algèbre linéaire

On rappelle ici quelques définitions et résultats d'algèbre linéaire . La preuve des propositions 4, 5, 6 peuvent se trouver dans [10] et [3].

Définition 1. Pour $x = (x_1, \dots, x_n)'$, $y = (y_1, \dots, y_n)' \in \mathbb{R}^n$, on dit que $x \leq y$ si $x_i \leq y_i$ pour tout $1 \leq i \leq n$.

Pour $A = (A_{i,j})_{1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq p}$, $B = (B_{i,j})_{1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq p}$, on dit que $A \leq B$ si $A_{i,j} \leq B_{i,j}$ pour tous $1 \leq i \leq n$, $1 \leq j \leq p$.

Une matrice $A \in \mathcal{M}_{n,p}(\mathbb{R})$ est positive si $A \geq 0$.

Définition 2. Une matrice $A \in \mathcal{M}_{n,n}(\mathbb{R})$ est une M-matrice si A est inversible, $A^{-1} \geq 0$ et $A_{i,j} \leq 0$ pour tous (i, j) , $i \neq j$.

La proposition suivante donne une caractérisation des M-matrices.

Proposition 4. Soit $A \in \mathcal{M}_{n,n}(\mathbb{R})$ une matrice à diagonale strictement dominante (i.e. $|A_{i,i}| > \sum_{j \neq i} |A_{i,j}|$ ou $|A_{i,i}| > \sum_{j \neq i} |A_{j,i}|$), et supposons que $A_{i,j} \leq 0$ pour tous (i, j) , $i \neq j$, et que $A_{i,i} > 0$ pour tout $1 \leq i \leq n$.

Alors A est une M-matrice.

On utilise aussi les deux propositions suivantes :

Proposition 5. Soit $A : x \in \mathbb{R}^n \mapsto A(x) \in \mathcal{M}_{n,n}(\mathbb{R})$ une fonction continue satisfaisant : pour tout $x \in \mathbb{R}^n$, $A(x)$ est une M-matrice. Alors :

$$\forall a, b \in \mathbb{R}^n \quad \int_0^1 A(a + t(b - a)) dt \text{ est une M-matrice.}$$

Proposition 6. Soit $f : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^n$ une fonction continument différentiable, de matrice Jacobienne $Jf(x)$ pour $x \in \mathbb{R}^n$. Soient $a, b \in \mathbb{R}^n$. Si

$$\int_0^1 Jf(a + t(b - a)) dt \text{ est inversible et d'inverse positive}$$

alors

$$\begin{aligned} f(a) - f(b) \geq 0 &\implies a \geq b, \\ f(a) - f(b) \leq 0 &\implies a \leq b. \end{aligned}$$

Références

- [1] C. Chainais and Y. J. Peng. Convergence of a finite volume scheme for the drift-diffusion equations in 1-D. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 23, 2003.
- [2] C. Chainais-Hillairet and F. Filbet. Asymptotic behavior of a finite volume scheme for the transient drift-diffusion model, journal = IMA Journal of Numerical Analysis. 2005.
- [3] J. Fuhrmann and H. Langmach. Stability and existence of solutions of time-implicit finite volume schemes for viscous nonlinear conservation laws. *Appl. Numer. Math.*, 37 :201–230, 2001.
- [4] A. Jüngel. On the existence and uniqueness of transient solutions of a degenerate nonlinear drift-diffusion model for semiconductors. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, pages 677–703, 1994.
- [5] A. Jüngel. Qualitative behavior of solutions of a degenerate nonlinear drift-diffusion model for semiconductors. *Math. Mod. and Meth. in Appl. Sci.*, pages 497–518, 1995.
- [6] A. Jüngel. *Quasi-hydrodynamic semiconductor equations*, volume 41 of *Progress in nonlinear differential equations and their applications*. Birkhäuser, 2001.
- [7] A. Jüngel and Y. J. Peng. A hierarchy of hydrodynamic models for plasmas. Zero-electron-mass limits in the drift-diffusion equations. *Ann. Inst. Henri Poincaré, Analyse non-linéaire*, 17(1) :83–118, 2000.
- [8] P. Markowich. *The stationary semiconductor device equations*. Springer-Verlag, Vienna, 1986.
- [9] A. Prohl and M. Schmuck. Convergent discretizations for the Nernst-Planck-Poisson system. *Numer. Math.*, 2008.
- [10] R. S. Varga. *Matrix iterative analysis*. Prentice-Hall Inc., Englewood Cliffs, N.J., 1962.