

École Doctorale Sciences Pour l'Ingénieur
Université de Lille 1 – Laboratoire Paul Painlevé

Thèse

Présentée pour l'obtention du grade de DOCTEUR
DE L'UNIVERSITE DE LILLE 1

par

Pierre-Louis COLIN

**Analyse numérique de modèles de
dérive-diffusion : convergence et
comportements asymptotiques**

Spécialité : Mathématiques

Soutenue le 27 juin 2016 devant un jury composé de :

Rapporteur	M. Yves COUDIÈRE	(Université de Bordeaux)
Rapporteur	M. Nicolas VAUCHELET	(Université Paris VI)
Présidente	M^{me} Magali RIBOT	(Université d'Orléans)
Directrice	M^{me} Claire CHAINAIS-HILLAIRET	(Université Lille 1)
Directrice	M^{me} Ingrid LACROIX-VIOLET	(Université Lille 1)



Thèse effectuée au sein du **Laboratoire Paul Painlevé (UMR CNRS 8524)**
de l'Université de Lille 1
Cité scientifique
59655 Villeneuve d'Ascq cedex
France

Résumé

Dans cette thèse, nous nous intéressons à un modèle simplifié de corrosion issu du modèle “Diffusion Poisson Coupled Model” (DPCM). Nous analysons de manière approfondie le schéma numérique qui a été implémenté dans le code CALIPSO utilisé par l’ANDRA. Il est de type Euler implicite en temps et volumes finis en espace, avec des flux numériques de Scharfetter-Gummel. Nous étudions notamment la convergence de ce schéma ainsi que son comportement asymptotique en différentes limites de paramètres. Enfin, nous explorons différentes possibilités pour augmenter l’ordre en temps.

Dans le premier chapitre, nous considérons la discrétisation d’un modèle de corrosion simplifié comportant deux espèces de porteurs de charge. Ce modèle est un modèle de dérive-diffusion complété par des conditions au bord de type Robin, impliquant un couplage supplémentaire. Nous démontrons la convergence de solutions approchées vers une solution faible du modèle de corrosion simplifié. De plus, nous observons numériquement, la stabilité du schéma lorsque le ratio des coefficients de diffusion tend vers 0.

Dans le deuxième chapitre, nous nous intéressons à cette asymptotique pour un modèle de dérive-diffusion classique dans le cadre des plasmas non magnétisés et pour lequel les conditions au bord sont différentes de celles du modèle de corrosion. Il s’agit de conditions au bord mixtes de type Dirichlet-Neumann n’impliquant pas de couplage supplémentaire. Nous prouvons la stabilité du schéma, lorsque la masse d’électrons tend vers 0. Comme dans le cas continu, la preuve est basée sur une estimation d’énergie associée à un contrôle de la dissipation d’énergie. De plus, nous illustrons numériquement cette stabilité du schéma.

Dans le dernier chapitre, nous développons des schémas numériques d’ordre au moins 2 en temps pour le modèle de dérive-diffusion linéaire. Nous comparons ces schémas sur plusieurs critères : la positivité des densités, la stabilité lorsque la masse d’électrons ou la longueur de Debye tendent vers 0, la stabilité en temps long et l’ordre de convergence en temps.

Mots-clé :

Modèle de corrosion, systèmes de convection-diffusion, schémas volumes finis, analyse de convergence, schéma préservant l’asymptotique.

Remerciements

Mes premiers remerciements vont à mes directrices de thèse Claire Chainais-Hillairet et Ingrid Lacroix-Violet. Elles m'ont initié à la recherche en me proposant un sujet passionnant. Je les remercie également d'avoir été très disponibles, patientes et impliquées.

Je remercie chaleureusement Yves Coudière et Nicolas Vauchelet pour avoir accepté le rôle de rapporteur de cette thèse. Je tiens également à remercier Magali Ribot d'avoir pris part au jury.

J'adresse un grand merci aux membres des équipes ANEDP (Laboratoire Paul Painlevé), MEPHYSTO et RAPSODI (Inria) pour leur accueil et leur gentillesse. Plus généralement, je remercie les membres du Laboratoire Paul Painlevé au sein duquel je me suis épanoui durant quatre ans.

Pendant cette thèse, j'ai eu le plaisir d'échanger dans la bonne humeur avec de nombreux doctorants parmi lesquels : Antoine, Antoine, Benjamin, Florian, Maxime, Pierre, Pierre, Roberta, Sara, Stefana. Comment oublier mes nombreux co-bureaux avec qui j'ai partagé de nombreuses pauses-café : Hubert, Matthieu, Roberto, James, Émilie, Flore et Ahmed. Les midis ont été particulièrement animés avec Landry, Najib et Jacques.

Je n'oublie ni les nombreux repas post-agreg avec Adrien, les Benjamin et Landry, ni les soirées bières avec Laurent et Hubert qui ponctuaient de longues journées de travail.

Je tiens à remercier mes amis de longue date : Matthieu et Rémi. Enfin, je remercie ceux qui ont toujours été là, ma famille : mamies et papis, marraines et parrains, tantes et oncles, cousines et cousins. Un très grand merci à mes parents : Isabelle et Jean-Louis, qui m'ont toujours soutenu dans mes choix et sans qui je ne serais pas là aujourd'hui. Je tiens à remercier mes sœurs : Anne-Charlotte et Mathilde. Je remercie également ma belle famille.

Je conclurais ces remerciements par celle qui illumine mes journées : Claire. Merci pour ton amour, ta compréhension, ton soutien et tes précieux conseils. Tu as fais de moi un homme comblé en devenant ma femme.

Table des matières

Introduction	1
1 Modélisation et simulation de la corrosion dans le cadre du stockage souterrain	1
1.1 Cadre général	1
1.2 Présentation du modèle DPCM	1
1.3 Simplification : le modèle à deux espèces	5
2 Modèles de dérive-diffusion pour les semi-conducteurs et les plasmas . .	9
2.1 Le modèle	9
2.2 Le schéma	11
3 Présentation des chapitres	12
1 Convergence d'un schéma volumes finis pour un modèle de corrosion *	17
1.1 Introduction	19
1.1.1 General framework of the study	19
1.1.2 Presentation of the model	20
1.1.3 Presentation of the numerical scheme	23
1.1.4 Main results	25
1.2 Existence result and discrete $L^2(0, T, H^1)$ -estimates	27
1.2.1 Proof of Proposition 1.1.1	27
1.2.2 Notations and preliminary results	28
1.2.3 Discrete $L^2(0, T, H^1(0, 1))$ estimates on P , N and Ψ	30
1.3 Compactness results and passage to the limit	33
1.3.1 Compactness of $(P_m)_m$ and $(N_m)_m$	34
1.3.2 Compactness of $(\Psi_m)_m$	36
1.3.3 Convergence of the traces	38
1.3.4 Passage to the limit	40
1.4 Numerical experiments	42

1.4.1	Presentation of the test case	42
1.4.2	Numerical results	43
1.5	Conclusion	43
2	Stabilité d'un schéma volumes finis pour un modèle de dérive-diffusion lorsque la masse d'électrons tend vers zéro	49
2.1	Introduction	51
2.1.1	Cadre général de l'étude	51
2.1.2	Résultats existants pour le problème continu	52
2.1.3	Organisation du chapitre	57
2.2	Schémas numériques $(\mathcal{S}_\varepsilon)$ et (\mathcal{S}_0)	58
2.2.1	Maillage et notations	58
2.2.2	Le schéma $(\mathcal{S}_\varepsilon)$ pour le modèle $(\mathcal{P}_\varepsilon)$	61
2.2.3	Le schéma (\mathcal{S}_0) pour le modèle (\mathcal{P}_0)	64
2.3	Limite de $(\mathcal{S}_\varepsilon)$ quand ε tend vers 0	68
2.4	Convergence du schéma (\mathcal{S}_0)	72
2.4.1	Estimations discrètes sur $\Psi_{h,\Delta t}$ et $P_{h,\Delta t}$	73
2.4.2	Estimation sur $\Psi_{h,\Delta t}$	73
2.4.3	Notations et résultats sur les espaces fonctionnels utilisés	79
2.4.4	Résultats de compacité	81
2.4.5	Passage à la limite	87
2.5	Expérimentations numériques	90
3	Comportements numériques de schémas volumes finis pour un mo- dèle de dérive-diffusion	97
3.1	Introduction	99
3.1.1	Cadre général de l'étude	99
3.1.2	Modèle continu	100
3.1.3	Schéma (\mathcal{S})	104
3.1.4	Organisation du chapitre	105
3.2	Présentation des méthodes numériques utilisées	106
3.2.1	Méthode de Crank-Nicolson	106
3.2.2	Méthode SDIRK (Singly Diagonally Implicit Runge-Kutta)	106
3.2.3	Méthode BDF2 (Backward differentiation formula 2)	108
3.3	Mise en place des schémas numériques pour le modèle de dérive-diffusion (\mathcal{P})	110
3.3.1	Schéma numérique (\mathcal{S}_{CN})	110

3.3.2	Schéma numérique (\mathcal{S}_{SDIRK})	111
3.3.3	Schéma numérique (\mathcal{S}_{BDF2})	114
3.4	Expérimentations numériques	118
3.4.1	Comportement des schémas numériques pour $\varepsilon, \lambda = 1$	118
3.4.2	Comportement des schémas numériques pour $\lambda = 1$ et ε tendant vers 0	128
3.4.3	Comportement des schémas numériques pour $\varepsilon = 1$ et λ tendant vers 0	135
3.4.4	Comportement des schémas numériques en temps long	142
3.4.5	Conclusion	146
	Conclusion et perspectives	149
	Bibliographie	155

Table des figures

1	Interface entre la capsule d'acier et l'argile.	2
2	Erreur L^2 en espace au temps final en fonction de ε pour les densités et le potentiel électrique avec différentes valeurs du pas de temps.	13
1	Convergence d'un schéma	17
1.1	L^2 errors with respect to the space step on the densities and the electric potential for different values of ε and at final time $T = 10^{-3}$	44
1.2	L^2 errors with respect to the time step on the densities and the electric potential for different values of ε and at final time $T = 10^{-3}$	45
1.3	L^2 error in space with respect to ε on the densities and the electric potential for different values of time step and at final time $T = 10^{-3}$	46
1.4	Densities and electric potential profiles for $\varepsilon = 0$, at final time $T = 1$	47
2	Stabilité d'un schéma	49
2.1	Diagramme de convergences des modèles $(\mathcal{P}_\varepsilon)$, (\mathcal{P}_0) et de leurs schémas numériques $(\mathcal{S}_\varepsilon)$, (\mathcal{S}_0)	58
2.2	Maillage admissible	59
2.3	Maillage dual	82
2.4	Cas test 1 : Ordre de convergence du schéma lorsque ε tend vers 0.	92
2.5	Cas test 1 : Étude de la précision du schéma en fonction de ε	93
2.6	Géométrie d'une diode jonction P-N.	94
2.7	Cas test 2 : Ordre de convergence du schéma lorsque ε tend vers 0.	95
2.8	Cas test 2 : Étude de la précision du schéma en fonction de ε	96
3	Comportements numériques	97
3.1	Tableau de Butcher.	107
3.2	Tableaux de Butcher des méthodes SDIRK A et B	108

3.3	Les différentes discrétisations temporelles pour le schéma (\mathcal{S}_{DBF2}) . . .	116
3.4	Tableau récapitulatif pour ($S_{BDF2}^{\Delta t}$) et ($S_{BDF2}^{\Delta t^2}$)	117
3.5	Géométrie d'une jonction P-N.	119
3.6	Cas test 1. Mise en évidence de l'ordre en temps des différents schémas	122
3.7	Cas test 2. Mise en évidence de l'ordre en temps des différents schémas.	123
3.8	Cas test 1. Temps CPU en secondes pour obtenir une erreur L^2 en espace au temps final T sur N inférieure à 10^{-7}	126
3.9	Cas test 2. Temps CPU en secondes pour obtenir une erreur L^2 en espace au temps final T sur N inférieure à 10^{-7}	126
3.10	Cas test 1. Ordre de convergence des différents schémas lorsque ε tend vers 0.	130
3.11	Cas test 2. Ordre de convergence des différents schémas lorsque ε tend vers 0.	131
3.12	Cas test 1. Étude de la précision des différents schémas en fonction de ε .	132
3.13	Cas test 2. Étude de la précision des différents schémas en fonction de ε .	133
3.14	Cas test 2. Ordre de convergence des différents schémas lorsque λ tend vers 0.	137
3.15	Cas test 3. Ordre de convergence des différents schémas lorsque λ tend vers 0.	138
3.16	Cas test 2. Étude de la précision des différents schémas en fonction de λ .	139
3.17	Cas test 3. Étude de la précision des différents schémas en fonction de λ .	140
3.18	Cas test 4. Comportement en temps long : évolution de l'énergie relative en fonction du temps.	144
3.19	Cas test 4. Comportement en temps long : évolution de $\ N - N^{eq}\ _2$ en fonction du temps.	145

Liste des tableaux

1	Convergence d'un schéma	17
1.1	Dimensionless parameters.	42
2	Stabilité d'un schéma	49
3	Comportements numériques	97
3.1	Cas test 1. Valeurs minimales de N obtenues pour différents pas de temps et pour chacun des schémas.	124
3.2	Cas test 2. Valeurs minimales de N obtenues pour différents pas de temps et pour chacun des schémas.	124
3.3	Cas test 1. Itérations pour lesquelles N prend des valeurs négatives et pourcentages de cellules atteintes, pour le schéma (\mathcal{S}_{SDIRKA}^-)	125
3.4	Cas test 2. Itérations pour lesquelles N prend des valeurs négatives et pourcentages de cellules atteintes, pour le schéma (\mathcal{S}_{SDIRKA}^-)	125
3.5	Pas de temps utilisés pour le calcul des temps CPU des figures 3.8a et 3.9a.	127
3.6	Cas test 1. Valeurs minimales de N obtenue en fonction de ε pour $\Delta t = 0.05/(10 \cdot 2^4)$	133
3.7	Cas test 2. Valeurs minimales de N obtenues en fonction de ε pour $\Delta t = 0.05/(10 \cdot 2^4)$	134
3.8	Cas test 2. Itérations pour lesquelles N prend des valeurs négatives et pourcentages de cellules atteintes, pour les schémas (\mathcal{S}_{CN}) et (\mathcal{S}_{SDIRKA}^+) avec $N_T = 160$	134
3.9	Cas test 2. Valeurs minimales de N obtenue en fonction de λ pour $\Delta t = 0.05/(10 \cdot 2^4)$	141

3.10 Cas test 3. Valeurs minimales de N obtenue en fonction de λ pour $\Delta t = 0.05/(10 \cdot 2^4)$	141
---	-----

Introduction

1 Modélisation et simulation de la corrosion dans le cadre du stockage souterrain

1.1 Cadre général

Une étude théorique préalable à l'enfouissement des déchets radioactifs en France est menée par l'Agence Nationale pour la gestion des Déchets Radioactifs (ANDRA). Dans le cadre de cette étude, plusieurs modèles mathématiques ont été développés (modèles d'écoulement en milieu poreux, modèle de corrosion,...) pour évaluer la sécurité en temps long des dépôts de déchets radioactifs (Haute Activité à Vie Longue). En France, le concept de stockage est le suivant : les déchets vitrifiés sont placés dans une capsule d'acier cylindrique puis déposés dans une couche d'argile à plusieurs centaines de mètres de profondeur. Lors de l'évaluation de la sécurité en temps long, il est nécessaire de prendre en compte la dégradation des capsules d'acier. Cette dégradation est due à un processus de corrosion : une couche d'oxyde se développe à l'interface entre l'acier et l'argile.

C. Bataillon *et al.* ont proposé le modèle « Diffusion Poisson Coupled Model » (DPCM) dans [3], décrivant ce processus de corrosion. Nous pouvons schématiser le dispositif par la figure 1.

1.2 Présentation du modèle DPCM

La couche d'oxyde est considérée comme un conducteur mixte, à la fois ionique et électrique. Il fait intervenir trois porteurs de charge : les électrons, les cations Fe^{3+} et les lacunes d'oxygènes. Le transport de ces charges induit un potentiel électrique. Les échanges intervenant entre la couche d'oxyde et l'argile ou la capsule d'acier conduisent au mouvement des interfaces $X_0(t)$ et $X_1(t)$ en fonction du temps. Dans le cadre du stockage des déchets, les capsules sont cylindriques. Cependant, la couche

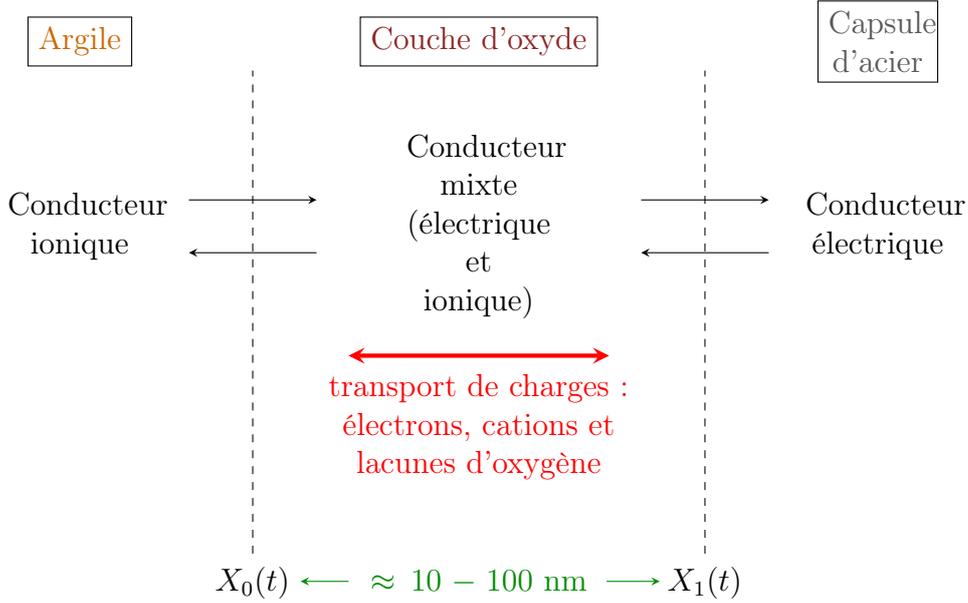


FIGURE 1: Interface entre la capsule d'acier et l'argile.

d'oxyde est très mince par rapport à la taille de la surface exposée et les hétérogénéités microscopiques ou macroscopiques ne sont pas prises en compte. Pour ces raisons, le modèle DPCM propose une modélisation 1D pour décrire le système physique.

La couche d'oxyde se comporte comme un semi-conducteur. En effet, les charges sont transportées par le champ électrique et le potentiel électrique est couplé aux densités de charges. Le modèle DPCM est composé d'équations de dérive-diffusion sur les densités de charges couplées avec une équation de Poisson sur le potentiel électrique. Les conditions au bord induites par les réactions électrochimiques aux interfaces sont de type Robin et introduisent un couplage supplémentaire. De plus, le système inclut des équations de déplacement des interfaces $X_0(t)$ et $X_1(t)$. Le modèle DPCM adimensionné développé dans [1, 3] s'écrit, pour tout $t \geq 0$:

— Équation et conditions au bord pour la densité de cations P

$$\partial_t P + \partial_x J_P = 0, \quad J_P = -\partial_x P - 3P\partial_x \Psi, \quad x \in (X_0(t), X_1(t)), \quad (1a)$$

$$J_P + PX'_0(t) = m_P^0(P^m - P)e^{-3b_P^0\Psi} - k_P^0Pe^{3a_P^0\Psi}, \quad x = X_0(t), \quad (1b)$$

$$J_P + PX'_1(t) = m_P^1Pe^{-3b_P^1(V-\Psi)} - k_P^1(P^m - P)e^{3a_P^1(V-\Psi)}, \quad x = X_1(t). \quad (1c)$$

— Équation et conditions au bord pour la densité d'électrons N

$$\frac{D_1}{D_2} \partial_t N + \partial_x J_N = 0, \quad J_N = -\partial_x N + N \partial_x \Psi, \quad x \in (X_0(t), X_1(t)), \quad (2a)$$

$$J_N + N X'_0(t) = m_N^0 e^{b_N^0 \Psi} - k_N^0 N e^{-a_N^0 \Psi} + n_N^0 e^{a_r^0 \Psi} - p_N^0 N e^{-b_r^0 \Psi}, \quad x = X_0(t), \quad (2b)$$

$$J_N + N X'_1(t) = m_N^1 N - k_N^1 N_{metal} \log(1 + e^{-(V-\Psi)}), \quad x = X_1(t). \quad (2c)$$

— Équation et conditions au bord pour la densité des lacunes d'oxygène C

$$\frac{D_1}{D_3} \partial_t C + \partial_x J_C = 0, \quad J_C = -\partial_x C - 2C \partial_x \Psi, \quad x \in (X_0(t), X_1(t)), \quad (3a)$$

$$J_C + C X'_0(t) = m_C^0 \left(1 - \frac{C}{4}\right) e^{-2b_C^0 \Psi} - k_C^0 \frac{C}{4} e^{2a_C^0 \Psi}, \quad x = X_0(t), \quad (3b)$$

$$J_C + C X'_1(t) = m_C^1 \frac{C}{4} e^{-3b_C^1 (V-\Psi)} - k_C^1 \left(1 - \frac{C}{4}\right) e^{3a_C^1 (V-\Psi)}, \quad x = X_1(t). \quad (3c)$$

— Équation et conditions au bord pour le potentiel électrique Ψ

$$-\lambda^2 \partial_{xx}^2 \Psi = 3P - N + 2C + \rho_{hl}, \quad x \in (X_0(t), X_1(t)), \quad (4a)$$

$$\Psi - \alpha_0 \partial_x \Psi = \Delta \Psi_0^{pzc}, \quad x = X_0(t), \quad (4b)$$

$$\Psi + \alpha_1 \partial_x \Psi = V - \Delta \Psi_1^{pzc}, \quad x = X_1(t). \quad (4c)$$

— Équations de déplacement des interfaces

$$\frac{dX_0}{dt} = v_d^0(t) + \frac{dX_1}{dt} \left(1 - \frac{\Omega_{ox}}{m\Omega_{Fe}}\right), \quad (5a)$$

$$\frac{dX_1}{dt} = -\frac{D_3}{4D_1} \frac{\Omega_{Fe}}{\Omega_{ox}} (J_C(X_1) + C X'_1(t)), \quad (5b)$$

$$\text{avec } v_d^0(t) = k_d^0 e^{-5a_d^0 \Psi(X_0(t))}. \quad (5c)$$

Le système est complété par des conditions initiales :

$$N(x, 0) = N^0(x), \quad P(x, 0) = P^0(x), \quad C(x, 0) = C^0(x), \quad x \in (0, 1), \quad (6a)$$

$$X_0(0) = 0, \quad X_1(0) = 1. \quad (6b)$$

Nous présentons les nombreux paramètres qui interviennent dans ce modèle :

— D_1 , D_2 et D_3 sont respectivement les coefficients de mobilité ou de diffusion des cations, des électrons et des lacunes d'oxygène. D_1 et D_3 ont le même ordre de grandeur, mais $D_1 \ll D_2$ à cause de la différence de taille entre les cations et les électrons qui induit une différence entre les mobilités.

- $(m_P^i, k_P^i)_{i=0,1}$, $(m_N^i, k_N^i)_{i=0,1}$, $(m_C^i, k_C^i)_{i=0,1}$, (n_N^0, n_P^0) et k_d sont des fonctions décrivant la cinétique aux interfaces. Nous supposons qu'elles sont constantes et strictement positives.
- (a_u^0, b_u^0) pour $u = P, N, C, r, d$ et (a_u^1, b_u^1) pour $u = P, C$ sont des coefficients de transfert positifs.
- P^m est l'occupation maximale pour les cations octaédriques dans le réseau hôte.
- N_{metal} est la densité d'électrons dans le métal (modèle de Friedel).
- ρ_{hl} est la densité de charge nette des espèces ioniques dans le réseau hôte. Nous supposons que ρ_{hl} est homogène.
- Ω_{ox} est le volume molaire de l'oxyde.
- Ω_{Fe} est le volume molaire du métal.
- m est le nombre de moles de fer par moles d'oxyde ($m = 3$ pour la magnétite).
- $\Delta\Psi_0^{pzc}$, $\Delta\Psi_1^{pzc}$ sont respectivement les tensions sortantes et entrantes à charge nulle.
- λ^2 , α_0 , α_1 sont des paramètres adimensionnés positifs.

Dans le système (1)-(5), V peut être considéré comme un potentiel appliqué (« cas potentiostatique ») ou donné par l'équation suivante assurant l'équilibre des charges entrantes (« cas galvanostatique »)

$$-3 \left(J_P + PX_1'(t) + \frac{D_3}{4D_1}(J_C + CX_1'(t)) \right) + \frac{D_2}{D_1}(J_N + NX_1'(t)) = \tilde{J}, \quad x = X_1(t). \quad (7)$$

Dans cette équation, V est présent dans les termes : $J_P + PX_1'(t)$, $J_C + CX_1'(t)$ et $J_N + NX_1'(t)$, comme nous pouvons le voir avec (1c), (2c) et (3c). Si $\tilde{J} = 0$, V est appelé « potentiel de corrosion libre ».

Remarque 1. Nous remarquons que les équations sur les densités P , N et C ainsi que leurs conditions au bord (1)-(3) sont de la même forme. Nous pouvons écrire pour $u \in \{P, N, C\}$ et pour tout $t \geq 0$

$$\varepsilon_u \partial_t u + \partial_x J_u = 0, \quad J_u = -\partial_x u - z_u u \partial_x \Psi, \quad x \in (X_0(t), X_1(t)), \quad (8a)$$

$$-J_u - uX_0'(t) = r_u^0(u(X_0(t)), \Psi(X_0(t))), \quad x = X_0(t), \quad (8b)$$

$$J_u + uX_1'(t) = r_u^1(u(X_1(t)), \Psi(X_1(t)), V), \quad x = X_1(t). \quad (8c)$$

Pour $u = P, N, C$, les nombres de charges sont $z_u = 3, -1, 2$ et nous avons

$\varepsilon_u = 1, \frac{D_1}{D_2}, \frac{D_1}{D_3}$. Les fonctions r_u^0 et r_u^1 sont de la forme suivante :

$$r_u^0(s, x) = \beta_u^0(x)s - \gamma_u^0(x), \quad (9a)$$

$$r_u^1(s, x, V) = \beta_u^1(V - x)s - \gamma_u^1(V - x), \quad (9b)$$

où $\beta_u^0, \beta_u^1, \gamma_u^0, \gamma_u^1$ sont des fonctions continues positives. Les fonctions r_u^0 et r_u^1 sont linéaires croissantes par rapport à leur première variable

Dans le but d'obtenir un schéma numérique associé au modèle DPCM sur un domaine fixe, C. Bataillon *et al.* procèdent à un changement de variable. À partir de cette réécriture du modèle DPCM, les auteurs ont développé un schéma numérique, dans [1]. Il a été utilisé dans le code de simulation CALIPSO, développé par l'ANDRA.

Les expérimentations numériques effectuées dans [1], reproduisent le comportement physique attendu. Le cas test utilisé est basé sur les conditions physiques réelles. Pour le système complet, la validation théorique du schéma est une question ouverte. La preuve de la convergence du schéma numérique est difficile. Les difficultés rencontrées proviennent du couplage supplémentaire, induit par les conditions au bord de type Robin, et des interfaces mobiles. Le comportement asymptotique du schéma lorsque $\varepsilon_N \rightarrow 0$ est une question ouverte importante puisque $\varepsilon_N \ll 1$.

Pour mieux comprendre la gestion des conditions aux limites de type Robin et le comportement asymptotique du schéma, lorsque ε_N tend vers 0, nous étudions un modèle simplifié de corrosion. Nous supposons que la densité de lacunes d'oxygène reste nulle, ce qui induit que le domaine reste fixe (le déplacement des interfaces étant dû au flux de lacunes d'oxygène). Ainsi, le modèle simplifié est un modèle à deux espèces (électrons et cations) sur domaine fixé.

1.3 Simplification : le modèle à deux espèces

1.3.1 Le modèle simplifié

Pour le modèle de corrosion simplifié, les inconnues sont les densités N et P d'électrons et de cations Fe^{3+} ainsi que le potentiel électrique Ψ . Les flux de densités notés J_N et J_P comportent une partie de convection et une partie de diffusion. Soit $T > 0$,

le modèle de corrosion simplifié s'écrit :

$$\partial_t P + \partial_x J_P = 0, \quad J_P = -\partial_x P - 3P\partial_x \Psi, \quad \text{dans } (0, 1) \times (0, T), \quad (10a)$$

$$\varepsilon \partial_t N + \partial_x J_N = 0, \quad J_N = -\partial_x N + N\partial_x \Psi, \quad \text{dans } (0, 1) \times (0, T), \quad (10b)$$

$$-\lambda^2 \partial_{xx}^2 \Psi = 3P - N + \rho_{hl}, \quad \text{dans } (0, 1) \times (0, T), \quad (10c)$$

où λ est la longueur de Debye adimensionnée, ρ_{hl} est une constante et ε est le ratio des coefficients de mobilité.

La cinétique des réactions électrochimiques aux interfaces est décrite par les lois de Butler-Volmer et mène à des conditions au bord de type Robin données pour $u = N$ et P par

$$-J_u = r_u^0(u, \Psi) \quad \text{sur } \{x = 0\} \times (0, T), \quad (11a)$$

$$J_u = r_u^1(u, \Psi, V) \quad \text{sur } \{x = 1\} \times (0, T), \quad (11b)$$

où V est un potentiel appliqué donné (dans le cas potentiostatique considéré). Les fonctions $(r_u^i)_{u \in \{N, P\}, i \in \{0, 1\}}$ sont définies par (9). Dans [16], la forme de ces fonctions joue un rôle important pour établir l'existence de solutions du modèle de corrosion simplifié. Ce sera également le cas pour l'analyse du schéma numérique. Les lois de Gauss et de Helmholtz mènent aux conditions au bord sur Ψ suivantes :

$$\Psi - \alpha_0 \partial_x \Psi = \Delta \Psi_0^{pzc}, \quad \text{sur } \{x = 0\} \times (0, T), \quad (12a)$$

$$\Psi + \alpha_1 \partial_x \Psi = V - \Delta \Psi_1^{pzc}, \quad \text{sur } \{x = 1\} \times (0, T), \quad (12b)$$

où $\Delta \Psi_0^{pzc}$, $\Delta \Psi_1^{pzc}$, α_0 et α_1 sont des constantes données.

Le système est complété par des conditions initiales données dans $L^\infty(0, 1)$

$$u(x, 0) = u^0(x), \quad \text{pour } u = P, N, \quad (13)$$

satisfaisant les estimations :

$$0 \leq u^0 \leq u^{max}, \quad \text{p.p. sur } (0, 1), \quad \text{pour } u = P, N. \quad (14)$$

Le modèle de corrosion simplifié à deux espèces est donné par (10)-(13). Ce modèle fait intervenir le même système d'équations que le modèle bien connu de dérive-diffusion linéaire utilisé dans le cadre des semi-conducteurs ou dans le cadre des plasmas. La différence réside dans les conditions au bord qui sont de type Dirichlet-

Neumann dans le cas des semi-conducteurs et des plasmas. Elles n'induisent donc pas de couplage supplémentaire contrairement à la condition (11) qui est de type Robin. Nous verrons dans la section 2 qu'il existe de nombreux résultats pour le modèle de dérive-diffusion à la fois au niveau continu et au niveau discret.

Contrairement au modèle de dérive-diffusion, seuls quelques résultats existent pour le modèle de corrosion simplifié. C. Chainais-Hillairet et I. Lacroix-Violet ont démontré l'existence de solutions pour ce modèle (pour $\varepsilon > 0$) et pour le modèle stationnaire dans [15, 16].

1.3.2 Le schéma

Le schéma pour le modèle simplifié à deux espèces est du même type que celui pour le modèle DPCM (voir [1]). Il est de type Euler implicite en temps et volumes finis en espace, les flux de convection-diffusion étant approchés par les flux numériques de Scharfetter-Gummel (voir [49]). Comme cela est montré dans [1], la discrétisation Euler implicite permet de s'affranchir de la condition $\Delta t \leq C\lambda^2$ nécessaire dans le cas d'une discrétisation Euler explicite en temps. Le choix de la discrétisation par volumes finis en espace est classique pour les équations de dérive-diffusion (voir [25]).

On considère un maillage \mathcal{T} du domaine $[0, 1]$ constitué d'une famille d'intervalles $(x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}})$, pour $i \in \llbracket 1, I \rrbracket$, avec

$$0 = x_{\frac{1}{2}} < x_{\frac{3}{2}} < \cdots < x_{I-\frac{1}{2}} < x_{I+\frac{1}{2}} = 1.$$

Nous définissons $x_i = \frac{x_{i-\frac{1}{2}} + x_{i+\frac{1}{2}}}{2}$, pour tout $i \in \llbracket 1, I \rrbracket$ et $x_0 = x_{\frac{1}{2}} = 0$, $x_{I+1} = x_{I+\frac{1}{2}} = 1$. De plus, nous posons :

$$\begin{aligned} h_i &= x_{i-\frac{1}{2}} - x_{i+\frac{1}{2}}, & \forall i \in \llbracket 1, I \rrbracket, \\ h_{i+\frac{1}{2}} &= x_i - x_{i+1}, & \forall i \in \llbracket 0, I \rrbracket. \end{aligned}$$

Nous notons Δt le pas de temps. Nous supposons qu'il existe un entier N_T tel que $N_T = T/\Delta t$. Nous considérons la suite $(t^n)_{0 \leq n \leq N_T}$ telle que $t^n = n\Delta t$. Le schéma pour le modèle de corrosion simplifié s'écrit, pour tout $u \in \{P, N\}$, $n \in \llbracket 0, N_T - 1 \rrbracket$ et

$i \in \llbracket 1, I \rrbracket$,

$$-\lambda^2 \left(d\Psi_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - d\Psi_{i-\frac{1}{2}}^{n+1} \right) = h_i \left(3P_i^{n+1} - N_i^{n+1} + \rho_{hl} \right), \quad (15a)$$

$$\varepsilon_u h_i \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + \mathcal{F}_{u,i+\frac{1}{2}}^{n+1} - \mathcal{F}_{u,i-\frac{1}{2}}^{n+1} = 0, \quad (15b)$$

où les flux numériques sont donnés pour tout $u \in \{P, N\}$, $n \in \llbracket 0, N_T - 1 \rrbracket$ et $i \in \llbracket 0, I \rrbracket$ par

$$d\Psi_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} = \frac{\Psi_{i+1}^{n+1} - \Psi_i^{n+1}}{h_{i+\frac{1}{2}}}, \quad (16a)$$

$$\mathcal{F}_{u,i+\frac{1}{2}}^{n+1} = \frac{B\left(z_u h_{i+\frac{1}{2}} d\Psi_{i+\frac{1}{2}}^{n+1}\right) u_i^{n+1} - B\left(-z_u h_{i+\frac{1}{2}} d\Psi_{i+\frac{1}{2}}^{n+1}\right) u_{i+1}^{n+1}}{h_{i+\frac{1}{2}}}. \quad (16b)$$

La fonction B est la fonction de Bernoulli :

$$B(x) = \frac{x}{e^x - 1}, \quad \forall x \neq 0 \quad \text{and} \quad B(0) = 1.$$

Les conditions au bord sont discrétisées de la façon suivante, pour tout $u \in \{P, N\}$ et $n \in \llbracket 0; N_T - 1 \rrbracket$,

$$\Psi_0^{n+1} - \alpha_0 d\Psi_{\frac{1}{2}}^{n+1} = \Delta \Psi_0^{pzc}, \quad (17a)$$

$$\Psi_{I+1}^{n+1} + \alpha_1 d\Psi_{I+\frac{1}{2}}^{n+1} = V - \Delta \Psi_1^{pzc}, \quad (17b)$$

$$-\mathcal{F}_{u,\frac{1}{2}}^{n+1} = \beta_u^0 \left(\Psi_0^{n+1} \right) u_0^{n+1} - \gamma_u^0 \left(\Psi_0^{n+1} \right), \quad (17c)$$

$$\mathcal{F}_{u,I+\frac{1}{2}}^{n+1} = \beta_u^1 \left(V - \Psi_{I+1}^{n+1} \right) u_{I+1}^{n+1} - \gamma_u^1 \left(V - \Psi_{I+1}^{n+1} \right). \quad (17d)$$

Les conditions initiales sont données, pour tout $u \in \{P, N\}$ et $i \in \llbracket 1; I \rrbracket$, par

$$u_i^0 = \frac{1}{h_i} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} u^0(x) dx, \quad \text{pour } u = P, N. \quad (18)$$

Le choix de la fonction de Bernoulli pour B correspond à l'approximation des flux de convection-diffusion par les flux numériques de Scharfetter-Gummel. Ces flux numériques ont été introduit par A. Il'in dans [35] et par D. Scharfetter et H. Gummel, dans [49] pour approcher numériquement le système de dérive-diffusion dans le cadre des semi-conducteurs. R. Lazarov, I. Mishev et P. Vassilevsky, dans [44] ont montré que cette discrétisation est d'ordre 2 en espace.

Remarque 2. Pour utiliser des flux classiques décentrés amont à la place des flux de Scharfetter-Gummel, il suffit de remplacer la fonction de Bernoulli par :

$$B(x) = 1 + \max(-x, 0), \quad \forall x \in \mathbb{R}.$$

Avec

$$B(x) = 1 - \frac{x}{2}, \quad \forall x \in \mathbb{R},$$

nous obtenons des flux centrés.

Dans [1], les auteurs démontrent l'existence de solution pour ce schéma numérique (pour $\varepsilon > 0$). Ils prouvent également la stabilité inconditionnelle du schéma. Ces résultats sont ensuite appliqués pour le schéma complet. Les cas tests physiques mis en place reproduisent les comportements physiques attendus.

2 Modèles de dérive-diffusion pour les semi-conducteurs et les plasmas

2.1 Le modèle

Comme nous l'avons souligné dans la section 1.3.1, le modèle de corrosion simplifié à deux espèces peut être mis en lien avec le modèle de dérive-diffusion linéaire utilisé dans le cadre des semi-conducteurs [27, 30, 46, 47] ou dans le cadre des plasmas [21]. Le modèle fait intervenir le même système d'équations. En effet, il est composé de deux équations de dérive-diffusion sur des densités de charges couplées à une équation de Poisson sur un potentiel électrique. Les conditions au bord du modèle de dérive-diffusion classique sont généralement de type Dirichlet-Neumann. Contrairement aux conditions au bord du modèle de corrosion, elles n'induisent pas de couplage supplémentaire. Ce modèle est considéré sur un domaine Ω fixe multidimensionnel et borné. Le modèle de dérive-diffusion pour les semi-conducteurs et les plasmas s'écrit :

$$\partial_t P + \operatorname{div} J_P = 0, \quad J_P = -\nabla P - P \nabla \Psi, \quad \text{dans } \Omega \times (0, T), \quad (19a)$$

$$\varepsilon \partial_t N + \operatorname{div} J_N = 0, \quad J_N = -\nabla N + N \nabla \Psi, \quad \text{dans } \Omega \times (0, T), \quad (19b)$$

$$-\lambda^2 \Delta \Psi = P - N + C, \quad \text{dans } \Omega \times (0, T), \quad (19c)$$

où $\lambda > 0$ est la longueur de Debye et C le profil de dopage. P et N sont respectivement les densités d'ions et d'électrons pour les plasmas (ou de trous et d'électrons

pour les semi-conducteurs) et Ψ est le potentiel électrique (voir [40, 42]). Dans le cadre des plasmas non magnétisés, le dopage est nul et ε est le ratio des masses d'électrons et de cations. Il est donc très petit, $\varepsilon \ll 1$, alors que pour les semi-conducteurs, ε est de l'ordre de 1. Le système est complété de conditions au bord mixtes (Dirichlet/Neumann) et de conditions initiales. Les conditions initiales sont données par :

$$P(x, 0) = P_0(x), \quad N(x, 0) = N_0(x), \quad \text{dans } \Omega. \quad (20)$$

Le bord $\Gamma = \partial\Omega$ du domaine Ω est séparé en deux parties disjointes $\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N$. Les conditions au bord sont de type Dirichlet sur Γ_D et de type Neumann homogène sur Γ_N ,

$$\Psi = \Psi^D, \quad P = P^D, \quad N = N^D \quad \text{sur } \Gamma_D \times (0, T), \quad (21a)$$

$$\nabla\Psi \cdot \nu = \nabla P \cdot \nu = \nabla N \cdot \nu = 0, \quad \text{sur } \Gamma_N \times (0, T). \quad (21b)$$

Ce modèle de dérive-diffusion a été largement étudié. L'existence et l'unicité d'une solution faible ont été prouvées dans [27, 30, 46, 47]. De plus, il est montré qu'il existe $m, M > 0$ telles que P et N vérifient le principe du maximum suivant, pour tout $t \in [0, T]$ et $x \in \Omega$,

$$m \leq P(x, t) \leq M, \quad m \leq N(x, t) \leq M.$$

Les comportements asymptotiques en temps long et en limite de paramètres pour le modèle (19)-(21) ont été étudiés. H. Gajewski et K. Gärtner ont montré dans [29], la convergence exponentielle de la solution du système en temps long vers un équilibre thermique. Sans obtenir ce taux, A. Jüngel a étendu ce résultat pour un modèle dégénéré avec une diffusion non linéaire. Dans le cadre des plasmas non magnétisés, A. Jüngel et Y.J. Peng dans [40], ont établi la convergence de la solution du modèle de dérive-diffusion lorsque la masse d'électrons tend vers 0. I. Gasser *et al.* ont établi la convergence du modèle lorsque la longueur de Debye tend vers 0, pour des conditions au bord de Neumann, dans [33]. Ce résultat a été étendu pour une diffusion isentropique (diffusion non linéaire particulière), dans le cadre des semi-conducteurs et dans le cadre des plasmas non magnétisés. En effet, dans [32], I. Gasser a établi cette convergence pour des conditions au bord de type Neumann (cadre des semi-conducteurs). Dans [42], A. Jüngel et Y.J. Peng ont démontré cette convergence pour des conditions au bord mixtes et un dopage nul.

2.2 Le schéma

Nous décrivons le schéma numérique utilisé pour approcher le modèle de dérive-diffusion classique. On utilise une discrétisation uniforme de l'intervalle de temps $(0, T)$ et un maillage $(\mathcal{T}, \mathcal{E}, (x_K)_{K \in \mathcal{T}})$ admissible de Ω (pour plus de détails voir la section 2.2.1). La famille \mathcal{T} est une famille de volumes de contrôle, \mathcal{E} une famille d'arêtes (ou de faces) et $(x_K)_{K \in \mathcal{T}}$ une famille de point vérifiant la Définition 5.1 de [25]. Nous notons que l'intégralité des notations sera présentée plus tard (voir le chapitre 2). Ce schéma présenté dans [6, 20] s'écrit, pour tout $K \in \mathcal{T}$ et $n \in \llbracket 0, N_T - 1 \rrbracket$,

$$-\lambda^2 \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \tau_\sigma D \Psi_{K,\sigma}^{n+1} = m(K) (P_K^{n+1} - N_K^{n+1} + C_K), \quad (22a)$$

$$m(K) \frac{P_K^{n+1} - P_K^n}{\Delta t} + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{F}_{K,\sigma}^{n+1} = 0, \quad (22b)$$

$$\varepsilon m(K) \frac{N_K^{n+1} - N_K^n}{\Delta t} + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{G}_{K,\sigma}^{n+1} = 0, \quad (22c)$$

avec pour tout $\sigma \in \mathcal{E}_K$

$$\mathcal{F}_{K,\sigma}^{n+1} = \tau_\sigma (B(D \Psi_{K,\sigma}^{n+1}) P_K^{n+1} - B(-D \Psi_{K,\sigma}^{n+1}) P_{K,\sigma}^{n+1}), \quad (23a)$$

$$\mathcal{G}_{K,\sigma}^{n+1} = \tau_\sigma (B(-D \Psi_{K,\sigma}^{n+1}) N_K^{n+1} - B(D \Psi_{K,\sigma}^{n+1}) N_{K,\sigma}^{n+1}). \quad (23b)$$

Le schéma est complété des conditions initiales (20) et des conditions au bord (21) discrétisées.

L'utilisation de la discrétisation Euler implicite en temps ainsi que l'utilisation des flux de Scharfetter-Gummel sont essentielles. En effet, elles permettent comme dans le cas continu, d'obtenir des estimations d'énergies discrètes associées à un contrôle de la dissipation d'énergie (voir [6, 20]). Ces estimations sont cruciales pour établir différentes propriétés du schéma. Elles sont utilisées pour montrer la convergence exponentielle en temps long vers un équilibre thermique (voir [5, 20]), la convergence lorsque la longueur de Debye tend vers 0 dans le cas d'un dopage nul (voir [6]) ainsi que la convergence lorsque la masse d'électrons tend vers 0 (voir le chapitre 2). Ce schéma permet de conserver le comportement asymptotique du modèle de dérive-diffusion.

3 Présentation des chapitres

Nous présentons maintenant le contenu de chacun des chapitres.

Chapitre 1 : Convergence d'un schéma volumes finis pour un modèle de corrosion

Dans le premier chapitre, nous considérons la discrétisation du modèle de corrosion simplifié à deux espèces. Nous démontrons la convergence d'une suite de solutions approchées données par le schéma vers une solution faible du modèle. De plus, nous observons numériquement, la stabilité du schéma lorsque le ratio ε tend vers 0. La difficulté dans la preuve de convergence est essentiellement due à la forme des conditions au bord. Plus précisément pour le modèle de corrosion donné par (10)-(13), nous démontrons plusieurs résultats préliminaires permettant d'établir la convergence de solutions approchées vers une solution faible. Nous établissons donc :

- l'existence d'une solution pour le schéma numérique et des estimations L^∞ pour les densités discrètes N et P , pour tout $\varepsilon \geq 0$ (voir la proposition 1.1.1),
- des estimations $L^2(0, T; H^1(0, 1))$ discrètes sur N , P et Ψ (voir les propositions 1.2.1 et 1.2.2),
- la convergence des traces des solutions approchées (voir le corollaire 1.3.1).

Le théorème principal démontré dans ce chapitre est le théorème 1.1.1 que nous énonçons ici.

Théorème. *Soient $\varepsilon > 0$, $\alpha_0 > 0$, $\alpha_1 > 0$. Sous certaines conditions données par (1.6), (1.7), (1.8), (1.11), (1.18) et (1.19) dans le chapitre 1, il existe P, N et $\Psi \in L^2(0, T; H^1(0, 1))$ tels que, à une sous-suite extraite près, lorsque $m \rightarrow +\infty$,*

$$\begin{aligned} P_m &\rightarrow P \quad \text{fortement dans } L^2(0, T; L^2(0, 1)), \\ N_m &\rightarrow N \quad \text{fortement dans } L^2(0, T; L^2(0, 1)), \\ \Psi_m &\rightarrow \Psi \quad \text{fortement dans } L^2(0, T; L^2(0, 1)), \end{aligned}$$

où (P, N, Ψ) est une solution faible de (10)-(13) au sens de la définition 1.1.1 donnée dans le chapitre 1.

Comme il est classique pour les schémas de volumes finis (voir [25]), la preuve de ce théorème de convergence est basée sur des estimations satisfaites par les solutions approchées et sur des résultats de compacité. De plus, à cause des conditions au bord de type Robin, nous avons besoin de résultats supplémentaires sur la convergence

des traces. Pour obtenir cette convergence, nous nous inspirons de la méthode décrite dans [7]. Les conditions au bord de type Robin entraînent aussi des complications dans l'obtention des estimations souhaitées. Pour contourner cette difficulté, nous nous inspirons des travaux de C. Chainais-Hillairet et I. Lacroix-Violet dans [16].

Comme pour le modèle DPCM, l'adimensionnement utilisé pour le modèle simplifié fait intervenir le ratio ε des coefficients de mobilité ou de diffusion des électrons et des cations. Ce ratio ε est très petit et intervient dans l'équation de dérive-diffusion sur la densité d'électrons. La convergence du schéma (théorème 1.1.1) n'est montrée que dans le cas $\varepsilon > 0$. Nous nous intéressons dans la dernière section du chapitre au comportement numérique du schéma lorsque ce ratio tend vers 0. Les expérimentations effectuées montrent la stabilité du schéma.

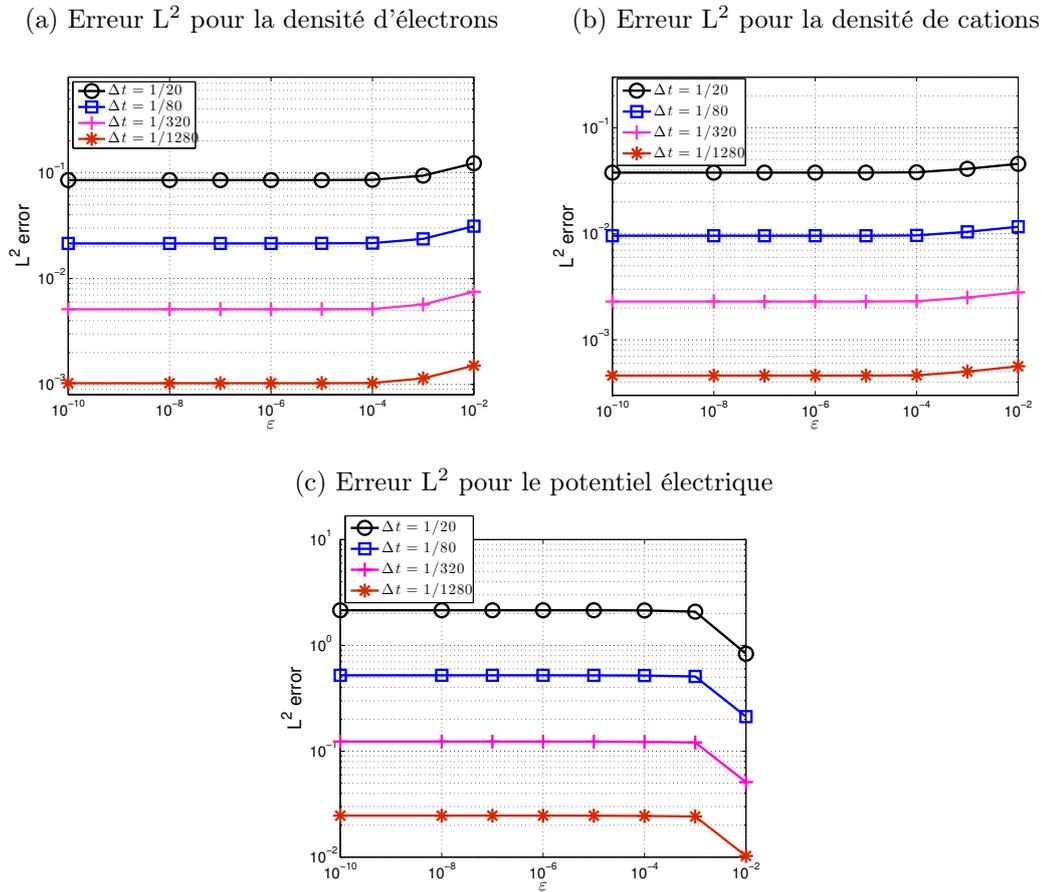


FIGURE 2: Erreur L^2 en espace au temps final en fonction de ε pour les densités et le potentiel électrique avec différentes valeurs du pas de temps.

En effet, nous pouvons remarquer sur la figure 2, que pour un pas de temps donné, les erreurs L^2 en espace au temps final des inconnues ne dépendent pas de ε . Le cas

test utilisé pour tracer les courbes de la figure 2 est développé dans le chapitre 1.

Chapitre 2 : Stabilité d'un schéma volumes finis pour un modèle de dérive-diffusion lorsque la masse d'électrons tend vers zéro

Dans le deuxième chapitre, nous nous intéressons à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$. Cependant, nous nous plaçons dans le cas du modèle de dérive-diffusion pour les plasmas non magnétisés ((19c) avec $C = 0$). Pour ce modèle, les conditions au bord sont de type Dirichlet-Neumann et n'impliquent pas de couplage supplémentaire, contrairement aux conditions de type Robin utilisées dans le chapitre 1. L'étude de la limite $\varepsilon \rightarrow 0$ pour le modèle continu a été réalisée dans [40]. Nous prouvons ici, la stabilité du schéma, lorsque la masse d'électrons tend vers 0. Comme dans le cas continu, la preuve est basée sur une estimation d'énergie associée à une dissipation d'énergie. De plus, nous illustrons numériquement cette stabilité.

Comme l'ont montré A. Jüngel et Y.J. Peng dans [40], le modèle (19)-(21) converge lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$, vers un modèle limite, sous certaines hypothèses ((H1)-(H4) données dans le chapitre 2). L'hypothèse principale est l'hypothèse de compatibilité (H4) liant N et Ψ sur le bord :

$$N^D = e^{\Psi^D}.$$

Dans [40], les auteurs ont établi une estimation d'énergie leur permettant de démontrer la convergence de solutions vers une solution du modèle limite donné par :

$$\partial_t P + \operatorname{div} J_P = 0, \quad J_P = -\nabla P - P \nabla \Psi, \quad \text{dans } \Omega \times (0, T), \quad (24a)$$

$$-\lambda^2 \Delta \Psi = P - e^{\Psi}, \quad \text{dans } \Omega \times (0, T). \quad (24b)$$

Ce modèle est complété de conditions au bord mixtes de type Dirichlet-Neumann sur P et Ψ et de conditions initiales sur P . Le schéma numérique associé, noté (\mathcal{S}_0) , est introduit dans le chapitre 2 (voir la section 2.2.3).

Dans ce chapitre, nous utilisons le schéma numérique de dérive-diffusion classique (avec un dopage nul) développé dans [6] et présenté dans la section 1.3.2. Ce schéma est associé au modèle (19)-(21). La discrétisation des flux utilisée ainsi que la discrétisation Euler implicite sont très importantes pour obtenir une estimation discrète d'énergie associée à un contrôle de la dissipation d'énergie (voir [6]). Comme dans le cas continu, cette estimation est essentielle pour montrer la convergence du schéma vers un schéma limite associé au modèle limite (24) lorsque ε tend vers 0. Cette convergence est le résultat principal du chapitre 2 (Théorème 2.3.1).

Théorème. *Supposons vérifiées les hypothèses données par (H1)-(H4) dans le chapitre 2. Soit un maillage admissible de Ω satisfaisant (2.12) et $\Delta t > 0$.*

Soit $(N_{K,\varepsilon}^n, P_{K,\varepsilon}^n, \Psi_{K,\varepsilon}^n)_{K \in \mathcal{T}, 0 \leq n \leq N_T}$ une solution du schéma $(\mathcal{S}_\varepsilon)$. Alors, lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$, pour tout $n \in \llbracket 0, N_T \rrbracket$ et pour tout $K \in \mathcal{T}$

$$(N_{K,\varepsilon}^n, P_{K,\varepsilon}^n, \Psi_{K,\varepsilon}^n) \rightarrow (e^{\Psi_{K,0}^n}, P_{K,0}^n, \Psi_{K,0}^n),$$

où $(P_{K,0}^n, \Psi_{K,0}^n)_{K \in \mathcal{T}, 0 \leq n \leq N_T}$ est l'unique solution du schéma numérique (\mathcal{S}_0) vérifiant les estimations L^∞ suivantes, pour tout $K \in \mathcal{T}$

$$m \leq P_{0,K}^n \leq M, \quad \forall n \in \llbracket 0, N_T \rrbracket, \quad (25a)$$

$$m \leq e^{\Psi_{0,K}^n} \leq M, \quad \forall n \in \llbracket 0, N_T \rrbracket. \quad (25b)$$

Dans ce chapitre, nous prouvons également la convergence des solutions approchées du schéma limite vers une solution faible de (24) (Théorème 2.4.1). Comme dans le chapitre 1, la preuve de ce théorème de convergence est basée sur des estimations satisfaites par les solutions approchées et sur des résultats de compacité. La difficulté repose ici sur l'équation de Poisson non linéaire.

Chapitre 3 : Comportements numériques de schémas volumes finis pour un modèle de dérive-diffusion

Dans ce chapitre, nous voulons développer un schéma numérique ayant les mêmes propriétés que le schéma présenté dans la section 2.2, mais dont l'ordre de convergence en temps est supérieur à 2. En effet, le schéma de Scharfetter-Gummel est d'ordre 2 en espace ; il est donc légitime de chercher à obtenir un schéma d'ordre 2 en temps.

Nous considérons dans ce chapitre, le modèle de dérive-diffusion classique (19)-(21) et le schéma (22)-(23) présentés dans la section 2. Comme mentionné précédemment, ce schéma numérique respecte parfaitement différents comportements asymptotiques du modèle. De plus, il est inconditionnellement stable.

Nous mettons en place plusieurs schémas numériques d'ordre au moins 2 en temps à l'aide de méthodes numériques classiques : Crank-Nicolson, SDIRK à 2 étages et BDF2 (voir [34]). Ensuite, nous comparons numériquement ces différents schémas sur plusieurs critères : conservation de la positivité des densités, stabilité lorsque $\varepsilon, \lambda \rightarrow 0$, convergence en temps long avec un taux exponentiel vers un état d'équilibre et ordre de convergence en temps. Nous nous intéressons également au temps de calcul nécessaire à l'obtention d'une erreur donnée.

Nous établissons ainsi que le schéma utilisant une discrétisation BDF2 en temps

semble se comporter numériquement de la même façon que le schéma (22)-(23) tout en étant d'ordre 2 en temps.

Chapitre 1

Convergence d'un schéma volumes finis pour un modèle de corrosion *

Dans ce chapitre, nous étudions l'approximation numérique d'un système d'équations aux dérivées partielles décrivant les phénomènes de corrosion dans le cadre du stockage des déchets radioactifs. En particulier, nous nous intéressons à la convergence des solutions d'un schéma Euler implicite en temps et volumes finis en espace avec des flux numériques de Scharfetter-Gummel. Nous présentons également des simulations numériques montrant qu'il s'agit d'un schéma préservant l'asymptotique lorsque le ratio des coefficients de mobilité tend vers 0.

*. Ce chapitre est un article écrit en collaboration avec C. Chainais-Hillairet et I. Lacroix-Violet, *Convergence of a finite volume scheme for a corrosion model* [12], publié dans International Journal on Finite Volumes.

Sommaire

1.1	Introduction	19
1.1.1	General framework of the study	19
1.1.2	Presentation of the model	20
1.1.3	Presentation of the numerical scheme	23
1.1.4	Main results	25
1.2	Existence result and discrete $L^2(0, T, H^1)$-estimates	27
1.2.1	Proof of Proposition 1.1.1	27
1.2.2	Notations and preliminary results	28
1.2.3	Discrete $L^2(0, T, H^1(0, 1))$ estimates on P , N and Ψ	30
1.3	Compactness results and passage to the limit	33
1.3.1	Compactness of $(P_m)_m$ and $(N_m)_m$	34
1.3.2	Compactness of $(\Psi_m)_m$	36
1.3.3	Convergence of the traces	38
1.3.4	Passage to the limit	40
1.4	Numerical experiments	42
1.4.1	Presentation of the test case	42
1.4.2	Numerical results	43
1.5	Conclusion	43

1.1 Introduction

1.1.1 General framework of the study

At the request of the French nuclear waste management agency ANDRA, investigations are conducted to evaluate the long-term safety assessment of the geological repository of high-level radioactive waste. The concept of the storage under study in France is the following: the waste is confined in a glass matrix, placed into cylindrical steel canisters and stored in a claystone layer at a depth of several hundred of meters. The long-term safety assessment of the geological repository has to take into account the degradation of the carbon steel used for waste overpacks, which is mainly caused by generalized corrosion processes.

In this framework, the Diffusion Poisson Coupled Model (DPCM) has been proposed by C. Bataillon *et al.* in [3] in order to describe corrosion processes at the surface of the steel canisters. It assumes that the metal is covered by a dense oxide layer which is in contact with the claystone. The model describes the evolution of the dense oxide layer. In most industrial cases, the shape of metal pieces is not flat (container or pipe). But the oxide layer is very thin compared to the size of the exposed surface. In practice, the available data are averaged over the whole exposed surface and the microscopic or even macroscopic heterogeneities of materials are not taken into account. For these reasons, a 1D modeling has been proposed in order to describe the real system.

The oxide layer behaves as a semiconductor: charge carriers, like electrons, cations Fe^{3+} and oxygen vacancies, are convected by the electric field and the electric potential is coupled to the charge densities. The DPCM model is then made of drift-diffusion equations on the charge densities coupled with a Poisson equation on the electric potential. The boundary conditions induced by the electrochemical reactions at the interfaces are Robin boundary conditions. Moreover, the system includes moving boundary equations.

Numerical methods for the approximation of the DPCM model have been designed and studied by Bataillon *et al.* in [1]. Numerical experiments with real-life data shows the ability of the model to reproduce expected physical behaviors. However, the proof of convergence of the scheme is challenging. In this paper, we will focus on a simplified model with only two species: electrons and cations Fe^{3+} . As the displacement of the interfaces in the full DPCM model is due to the current of oxygen vacancies, which are not taken into account in this study, the simplified model will be posed on a fixed domain. These simplifications will permit us to show how to deal with the boundary

conditions for the numerical analysis of the scheme introduced in [1].

1.1.2 Presentation of the model

In this paper we focus on the simplified corrosion model already introduced in [1, 16]. The unknowns of the model are the densities of electrons N and cations Fe^{3+} P and the electric potential Ψ . The current densities are respectively denoted by J_N and J_P ; they contain both a drift and a diffusion part. Therefore, the model consists in two drift-diffusion equations on the densities, coupled with a Poisson equation on the electric potential. Let $T > 0$, the model is written as

$$\partial_t P + \partial_x J_P = 0, \quad J_P = -\partial_x P - 3P\partial_x \Psi, \quad \text{in } (0, 1) \times (0, T), \quad (1.1a)$$

$$\varepsilon \partial_t N + \partial_x J_N = 0, \quad J_N = -\partial_x N + N\partial_x \Psi, \quad \text{in } (0, 1) \times (0, T), \quad (1.1b)$$

$$-\lambda^2 \partial_{xx}^2 \Psi = 3P - N + \rho_{hl}, \quad \text{in } (0, 1) \times (0, T), \quad (1.1c)$$

where λ is the rescaled Debye length and ρ_{hl} the net charge density of the ionic species in the host lattice which is constant. The parameter ε stands for the ratio of the mobility coefficients of electrons and cations, then $\varepsilon \ll 1$.

As the equations (1.1a) and (1.1b) for charge carriers densities have the same form, we will use the following synthetical form:

$$\varepsilon_u \partial_t u + \partial_x J_u = 0, \quad J_u = -\partial_x u - z_u u \partial_x \Psi, \quad \text{in } (0, 1) \times (0, T). \quad (1.2)$$

For $u = P, N$, the charge numbers of the carriers are respectively $z_u = 3, -1$ and we respectively have $\varepsilon_u = 1, \varepsilon$.

Let us now focus on the boundary conditions. Charge carriers are created and consumed at both interfaces $x = 0$ and $x = 1$. The kinetics of the electrochemical reactions at the interfaces are described by Butler-Volmer laws. It leads to Robin boundary conditions on N and P . As in [1], we assume that the boundary conditions for P and N have exactly the same form. Therefore, for $u = P, N$, they are written as

$$-J_u = r_u^0(u, \Psi) \quad \text{on } \{x = 0\} \times (0, T), \quad (1.3a)$$

$$J_u = r_u^1(u, \Psi, V) \quad \text{on } \{x = 1\} \times (0, T), \quad (1.3b)$$

where V is a given applied potential (we just consider here the potentiostatic case) and r_u^0 and r_u^1 are linear and monotonically increasing functions with respect to their

first argument. More precisely, due to the electrochemical reactions at the interfaces, we have, for $u = P, N$:

$$r_u^0(s, x) = \beta_u^0(x)s - \gamma_u^0(x), \quad (1.4a)$$

$$r_u^1(s, x, V) = \beta_u^1(V - x)s - \gamma_u^1(V - x), \quad (1.4b)$$

where the functions $(\beta_u^i)_{i=0,1}, (\gamma_u^i)_{i=0,1}$ are given functions. These functions depend on many parameters: the interface kinetic coefficients $(m_u^i, k_u^i)_{i=0,1}$, the positive transfer coefficients $(a_u^i, b_u^i)_{i=0,1}$, the maximum occupancy for octahedral cations in the lattice P^{max} and the electron density in the state of metal N^{max} . For $u = P, N$, the functions $(\beta_u^i)_{i=0,1}, (\gamma_u^i)_{i=0,1}$ are written

$$\beta_u^i(x) = m_u^i e^{-z_u b_u^i x} + k_u^i e^{z_u a_u^i x}, \quad i = 0, 1, \quad (1.5a)$$

$$\gamma_u^0(x) = m_u^0 u^{max} e^{-z_u b_u^0 x}, \quad \gamma_u^1(x) = k_u^1 u^{max} e^{z_u a_u^1 x}. \quad (1.5b)$$

Throughout the paper, we will assume that the interface kinetic coefficients and the transfer coefficients are given constants which satisfy

$$m_u^0, k_u^0, m_u^1, k_u^1 > 0, \quad \text{for } u = P, N, \quad (1.6)$$

$$a_u^0, b_u^0, a_u^1, b_u^1 \in [0, 1], \quad \text{for } u = P, N. \quad (1.7)$$

We also assume that ρ_{hl} does not depend on x and that

$$3P^{max} - N^{max} + \rho_{hl} = 0. \quad (1.8)$$

Indeed, in the applications (see [3]), the scaling of the model leads to $\rho_{hl} = -5$, $P^{max} = 2$ and $N^{max} = 1$, so that the relation (1.8) is satisfied.

The boundary conditions for the Poisson equation take into account that the metal and the solution can be charged because they are respectively electronic and ionic conductors. Such an accumulation of charges induces a field given by the Gauss law. These accumulations of charges depend on the voltage drop at the interface given by the usual Helmholtz law which links the charge to the voltage drop through a capacitance. The parameters $\Delta\Psi_0^{pzc}$ and $\Delta\Psi_1^{pzc}$ are the voltage drop corresponding to no accumulation of charges respectively in the metal and in the solution. Finally,

the boundary conditions for the electric potential are written:

$$\Psi - \alpha_0 \partial_x \Psi = \Delta \Psi_0^{pzc}, \quad \text{on } \{x = 0\} \times (0, T), \quad (1.9a)$$

$$\Psi + \alpha_1 \partial_x \Psi = V - \Delta \Psi_1^{pzc}, \quad \text{on } \{x = 1\} \times (0, T), \quad (1.9b)$$

where α_0 and α_1 are positive dimensionless parameters arising in the scaling.

The system is supplemented with initial conditions, given in $L^\infty(0, 1)$:

$$u(x, 0) = u^0(x), \quad \text{for } u = P, N. \quad (1.10)$$

Moreover, we assume that these initial conditions satisfy

$$0 \leq u^0 \leq u^{max}, \quad \text{a.e. on } (0, 1), \quad \text{for } u = P, N. \quad (1.11)$$

In the remainder of the paper we will denote by (\mathcal{P}) the corrosion model defined by (1.1), (1.4), (1.5), (1.9) and (1.10). Let us first note that the system of equations (1.1) is the so-called linear drift-diffusion system. This model is currently used in the framework of semiconductors device modeling (see for instance [38, 45, 46, 50]) or plasma physics (see [21]). In this context the drift-diffusion model has been widely studied, from the analytical as from the numerical point of view. Let us refer to the pioneering work by Gajewski [27] about existence and uniqueness results. Further developments have been done in [24, 26, 28, 36]. The long-time behavior of solutions to the drift-diffusion system *via* an entropy method has been studied in [29, 37] and the stability at the quasi-neutral limit or at the zero-electron-mass limit in [32, 39, 40, 43]. Different methods have also been proposed for the approximation of the drift-diffusion system, and studied, see for instance [17, 19] for finite volume schemes, [48] for a mixed finite volume scheme and [8–10, 22] for finite element and mixed exponential fitting schemes.

In the modeling of semiconductor devices, the boundary conditions are generally mixed Dirichlet/Neumann boundary conditions (corresponding to the ohmic contacts and the insulated boundary segments of the device). Then, the originality of the corrosion model described in this paper lies in the boundary conditions (1.4), (1.9) which are of Robin type, and induce an additional coupling between the equations. Let us define the notion of weak solution to the corrosion model (\mathcal{P}) .

Definition 1.1.1. We say that $(P, N, \Psi) \in L^2(0, T; H^1(0, 1)) \cap L^\infty([0, T] \times [0, 1])$ is

a weak solution of (\mathcal{P}) , if for all φ in $L^2(0, T; H^1(0, 1))$,

$$\begin{aligned} & -\varepsilon_u \int_0^T \int_0^1 u \partial_t \varphi dx dt - \varepsilon_u \int_0^1 u_0(x) \varphi(x, 0) dx - \int_0^T \int_0^1 (-\partial_x u - z_u u \partial_x \Psi) \partial_x \varphi dx dt \\ & \quad + \int_0^T [(\beta_u^1(V - \Psi(1, t))u(1, t) - \gamma_u^1(V - \Psi(1, t))) \varphi(1, t) \\ & \quad + (\beta_u^0(\Psi(0, t))u(0, t) - \gamma_u^0(\Psi(0, t))) \varphi(0, t)] dt = 0, \text{ for } u = P, N, \end{aligned} \quad (1.12)$$

and

$$\begin{aligned} & \lambda^2 \int_0^T \int_0^1 \partial_x \Psi \partial_x \varphi dx dt - \int_0^T \frac{\lambda^2}{\alpha_1} (V - \Psi(1, t) - \Delta \Psi_1^{pzc}) \varphi(1, t) dt \\ & \quad + \int_0^T \frac{\lambda^2}{\alpha_0} (\Psi(0, t) - \Delta \Psi_0^{pzc}) \varphi(0, t) dt = \int_0^T \int_0^1 (3P - N + \rho_{hl}) \varphi dx dt. \end{aligned} \quad (1.13)$$

In [16], Chainais-Hillairet and Lacroix-Violet have proved, under some assumptions on the chemical and physical parameters, the existence of a weak solution to (\mathcal{P}) . This result is obtained by passing to the limit in an approximate solution given by a semi-discretization in time. Convergence of the sequence of approximate solutions is ensured by some estimates which yield compactness. In the current article, we apply the same ideas as in [16] to a full discretization of (\mathcal{P}) presented below.

1.1.3 Presentation of the numerical scheme

Some numerical schemes for the approximation of (\mathcal{P}) have been proposed by Bataillon *et al* in [1]. Their stability analysis is fulfilled but no convergence results are given. Here we are interested in the convergence analysis of the fully implicit scheme introduced in [1]. It is a backward Euler scheme in time and a finite volume scheme in space, with Scharfetter-Gummel approximation of the convection-diffusion fluxes.

Let us consider a mesh \mathcal{T} for the domain $[0, 1]$. It consists in a family of mesh cells denoted by $(x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}})$ for $i \in \llbracket 1; I \rrbracket$, with

$$0 = x_{1/2} < x_{3/2} < \cdots < x_{I-1/2} < x_{I+1/2} = 1.$$

Then, we define $x_i = \frac{x_{i+1/2} + x_{i-1/2}}{2}$, for $i \in \llbracket 1; I \rrbracket$ and $x_0 = x_{1/2} = 0$, $x_{I+1} = x_{I+1/2} = 1$.

Moreover, we set

$$\begin{aligned} h_i &= x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}, & \forall i \in \llbracket 1; I \rrbracket, \\ h_{i+\frac{1}{2}} &= x_{i+1} - x_i, & \forall i \in \llbracket 0; I \rrbracket. \end{aligned}$$

The mesh size is defined by $h = \max \{h_i, i \in \llbracket 1; I \rrbracket\}$.

Let us denote by Δt the time step. We will assume that there exists $K \in \mathbb{N}$ such that $K\Delta t = T$ (either, we would define K as the integer part of $T/\Delta t$). We consider the sequence $(t^k)_{0 \leq k \leq K}$ such that $t^k = k\Delta t$.

The scheme under study in this paper is written as follows. For $i \in \llbracket 1; I \rrbracket$, $k \in \llbracket 0; K-1 \rrbracket$,

$$-\lambda^2 \left(d\Psi_{i+\frac{1}{2}}^{k+1} - d\Psi_{i-\frac{1}{2}}^{k+1} \right) = h_i \left(3P_i^{k+1} - N_i^{k+1} + \rho h l \right), \quad (1.14a)$$

$$\varepsilon_u h_i \frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\Delta t} + \mathcal{F}_{u,i+\frac{1}{2}}^{k+1} - \mathcal{F}_{u,i-\frac{1}{2}}^{k+1} = 0, \text{ for } u = P, N, \quad (1.14b)$$

with the numerical fluxes defined for $i \in \llbracket 0; I \rrbracket$ by

$$d\Psi_{i+\frac{1}{2}}^{k+1} = \frac{\Psi_{i+1}^{k+1} - \Psi_i^{k+1}}{h_{i+\frac{1}{2}}}, \quad (1.15a)$$

$$\mathcal{F}_{u,i+\frac{1}{2}}^{k+1} = \frac{B \left(z_u h_{i+\frac{1}{2}} d\Psi_{i+\frac{1}{2}}^{k+1} \right) u_i^{k+1} - B \left(-z_u h_{i+\frac{1}{2}} d\Psi_{i+\frac{1}{2}}^{k+1} \right) u_{i+1}^{k+1}}{h_{i+\frac{1}{2}}}, \text{ for } u = P, N, \quad (1.15b)$$

where B is the Bernoulli function :

$$B(x) = \frac{x}{e^x - 1}, \quad \forall x \neq 0 \text{ and } B(0) = 1.$$

We supplement the scheme with the discretization of the boundary conditions: for $k \in \llbracket 0; K-1 \rrbracket$,

$$\Psi_0^{k+1} - \alpha_0 d\Psi_{\frac{1}{2}}^{k+1} = \Delta \Psi_0^{pzc}, \quad (1.16a)$$

$$\Psi_{I+1}^{k+1} + \alpha_1 d\Psi_{I+\frac{1}{2}}^{k+1} = V - \Delta \Psi_1^{pzc}, \quad (1.16b)$$

$$-\mathcal{F}_{u,\frac{1}{2}}^{k+1} = \beta_u^0 \left(\Psi_0^{k+1} \right) u_0^{k+1} - \gamma_u^0 \left(\Psi_0^{k+1} \right) \quad \text{for } u = P, N, \quad (1.16c)$$

$$\mathcal{F}_{u,I+\frac{1}{2}}^{k+1} = \beta_u^1 \left(V - \Psi_{I+1}^{k+1} \right) u_{I+1}^{k+1} - \gamma_u^1 \left(V - \Psi_{I+1}^{k+1} \right) \quad \text{for } u = P, N, \quad (1.16d)$$

and of the initial conditions: for $i \in \llbracket 1; I \rrbracket$,

$$u_i^0 = \frac{1}{h_i} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} u^0(x) dx, \quad \text{for } u = P, N. \quad (1.17)$$

The scheme (1.14)-(1.17) will be denoted in what follows by (\mathcal{S}) .

Remark 3. The choice of the Bernoulli function for B corresponds to a Scharfetter-Gummel approximation of the convection-diffusion fluxes. These numerical fluxes have been introduced by Il'in in [35] and Scharfetter and Gummel in [49] for the numerical approximation of the drift-diffusion system arising in semiconductor modelling. Lazarov, Mishev and Vassilevsky in [44] have established that they are second-order accurate in space. Dissipativity of the Scharfetter-Gummel scheme with a backward Euler time discretization for the classical drift-diffusion system was proved in [29] and Chatard in [20]. One crucial property of the Scharfetter-Gummel fluxes is that they generally preserve steady-states.

Remark 4. The scheme (\mathcal{S}) is written on a nonuniform discretization of the domain $[0, 1]$. Indeed, the numerical experiments done in [11] for the steady-state of (\mathcal{S}) show some boundary layers for the density profiles. Therefore, it seems relevant to use a mesh which is refined near the boundaries. We will use a Tchebychev mesh, already introduced in [11] and [1].

For the discretization in time, it is easier to deal with a fixed time step when studying the convergence. However, it would be also possible to introduce a variable time step. Adaptive time step strategy could also be taken into account, see [1].

1.1.4 Main results

The aim of this paper is to prove the convergence of a sequence of approximate solutions obtained with the numerical scheme (\mathcal{S}) to a solution of (\mathcal{P}) .

To this end, we first need to establish the existence of a solution to the scheme. Indeed, at each time step $k \in \llbracket 0; K - 1 \rrbracket$, the vector of discrete unknowns $(\mathbf{P}^{k+1}, \mathbf{N}^{k+1}, \mathbf{\Psi}^{k+1})$, with $\mathbf{P}^{k+1} = (P_i^{k+1})_{0 \leq i \leq I+1}$, $\mathbf{N}^{k+1} = (N_i^{k+1})_{0 \leq i \leq I+1}$, $\mathbf{\Psi}^{k+1} = (\Psi_i^{k+1})_{0 \leq i \leq I+1}$, is defined as a solution to the nonlinear system of equations (1.14)–(1.16). In [1], the existence of a solution has been proved only in the case where $\varepsilon > 0$. As stated in Proposition 1.1.1, the result holds even if $\varepsilon = 0$.

Proposition 1.1.1. *Let $\varepsilon \geq 0$, $\alpha_0 > 0$, $\alpha_1 > 0$ and the hypotheses (1.6), (1.7), (1.8),*

(1.11) hold. Let us assume that

$$-\frac{1}{3a_P^0} (1 + \log(\alpha_0 a_P^0 k_P^0)) \leq \Delta \Psi_0^{pzc} \leq \frac{1}{a_N^0} (1 + \log(\alpha_0 a_N^0 k_N^0)), \quad (1.18)$$

$$-\frac{1}{b_N^1} (1 + \log(\alpha_1 b_N^1 m_N^1)) \leq \Delta \Psi_1^{pzc} \leq \frac{1}{3b_P^1} (1 + \log(\alpha_1 b_P^1 m_P^1)). \quad (1.19)$$

Then there exist a solution $(\mathbf{P}^{k+1}, \mathbf{N}^{k+1}, \Psi^{k+1})_{0 \leq k \leq K-1}$ to the fully implicit scheme (\mathcal{S}) . Moreover, it satisfies the following stability property:

$$0 \leq P_i^k \leq P^{max} \quad \text{and} \quad 0 \leq N_i^k \leq N^{max}, \quad \forall i \in \llbracket 1; I+1 \rrbracket, \forall k \in \llbracket 0; K \rrbracket. \quad (1.20)$$

Based on the vector of discrete unknowns, we can define some approximate solutions, which are piecewise constant function in space and time, as it is usual for finite volume approximations. For a given mesh \mathcal{T} of size h and a given Δt , we define, for $w = N, P$ or Ψ ,

$$w_h^k = \sum_{i=1}^I w_i^k \mathbb{1}_{(x_{i-1/2}, x_{i+1/2})} + w_0^k \mathbb{1}_{\{x=0\}} + w_{I+1}^k \mathbb{1}_{\{x=1\}}, \quad \text{for } k \in \llbracket 0; K \rrbracket, \quad (1.21)$$

$$w_{h,\Delta t} = \sum_{k=0}^{K-1} w_h^{k+1} \mathbb{1}_{[t^k, t^{k+1})}. \quad (1.22)$$

For a sequence of meshes and time steps $(\mathcal{T}_m, \Delta t_m)_m$ such that $h_m \rightarrow 0$ and $\Delta t_m \rightarrow 0$ as $m \rightarrow +\infty$, we can define a sequence of approximate solutions $(P_m, N_m, \Psi_m)_m$ with $w_m = w_{h_m, \Delta t_m}$ for $w = P, N$ or Ψ . The main result of the paper is the convergence of such a sequence of approximate solutions to a weak solution of the corrosion model (\mathcal{P}) . It is given in Theorem 1.1.1.

Theorem 1.1.1. *Let $\varepsilon > 0$, $\alpha_0 > 0$, $\alpha_1 > 0$. Assuming (1.6), (1.7), (1.8), (1.11), (1.18) and (1.19), there exist P, N and $\Psi \in L^2(0, T; H^1(0, 1))$ such that, up to a subsequence, as $m \rightarrow +\infty$,*

$$P_m \rightarrow P \quad \text{strongly in } L^2(0, T; L^2(0, 1)),$$

$$N_m \rightarrow N \quad \text{strongly in } L^2(0, T; L^2(0, 1)),$$

$$\Psi_m \rightarrow \Psi \quad \text{strongly in } L^2(0, T; L^2(0, 1)),$$

where (P, N, Ψ) is a weak solution of (\mathcal{P}) in the sense of Definition 1.1.1.

As it is well known in the finite volume framework (see for instance [25]), the proof

of Theorem 1.1.1 will be based on estimates satisfied by the approximate solutions and on compactness results. Due to the particular boundary conditions, we also need some additional results on the convergence of traces. They will be obtained following the ideas of [7].

The paper is organized as follows. Section 2 is devoted to the proof of Proposition 1.1.1 and also to the proof of discrete $L^2(0, T, H^1)$ -estimates on the approximate densities and on the approximate potential. Then, in Section 3, we establish the compactness of the sequences of approximate solutions. We also obtain a convergence result for the traces on the boundaries. In Section 4 we conclude the proof of Theorem 1.1.1 by passing to the limit in the numerical scheme. Finally, Section 5 is devoted to the presentation of some numerical experiments.

1.2 Existence result and discrete $L^2(0, T, H^1)$ -estimates

1.2.1 Proof of Proposition 1.1.1

The proof of Proposition 1.1.1 for $\varepsilon > 0$ has already been done in [1]. Then, we only prove the result for $\varepsilon = 0$. To this end, we follow the ideas of [1] and [6].

Letting $\mu > 0$, we introduce a mapping $\mathcal{T}_\mu^k : \mathbb{R}^{I+2} \times \mathbb{R}^{I+2} \rightarrow \mathbb{R}^{I+2} \times \mathbb{R}^{I+2}$ such that $\mathcal{T}_\mu^k(P, N) = (\widehat{P}, \widehat{N})$. This mapping is based on a linearization of the scheme ; it is defined in two successive step. First, we compute Ψ as the solution to the linear system

$$-\lambda^2 \left(d\Psi_{i+\frac{1}{2}} - d\Psi_{i-\frac{1}{2}} \right) = h_i (3P_i - N_i + \rho_{hl}), \quad \forall i \in \llbracket 1; I \rrbracket,$$

with a definition of the numerical fluxes $d\Psi_{i+\frac{1}{2}}$ analog to (1.15a) and boundary conditions similar to (1.16a)-(1.16b). The matrix of the linear system is obviously invertible and Ψ is uniquely defined.

Then, we define \widehat{P} and \widehat{N} as the solution to the linear systems

$$\frac{h_i}{\Delta t} \left(\left(1 + \frac{\mu}{\lambda^2} \right) \widehat{P}_i - \frac{\mu}{\lambda^2} P_i - P_i^k \right) + \mathcal{F}_{P, i+\frac{1}{2}} - \mathcal{F}_{P, i-\frac{1}{2}} = 0, \quad \forall i \in \llbracket 1; I \rrbracket,$$

$$\frac{h_i}{\Delta t} \frac{\mu}{\lambda^2} \left(\widehat{N}_i - N_i \right) + \mathcal{F}_{N, i+\frac{1}{2}} - \mathcal{F}_{N, i-\frac{1}{2}} = 0, \quad \forall i \in \llbracket 1; I \rrbracket,$$

with a definition of the numerical fluxes $\mathcal{F}_{u, i+\frac{1}{2}}$ analog to (1.15b) and boundary conditions similar to (1.16c)-(1.16d). As shown for instance in [1], the matrices defined at this step are M-matrices. Therefore, they are invertible and, as in [1], we can deduce

that \mathcal{T}_μ^k preserves the set

$$\mathcal{K} = \{(\mathbf{P}, \mathbf{N}) \in \mathbb{R}^{I+2} \times \mathbb{R}^{I+2}; \quad 0 \leq P_i \leq P^{max}, \quad 0 \leq N_i \leq N^{max}, \quad \forall 0 \leq i \leq I+1\},$$

as long as (1.18)-(1.19) are satisfied and Δt verifies:

$$\Delta t \leq \mu \min \left(\frac{1}{9P^{max}}, \frac{1}{N^{max}} \right). \quad (1.23)$$

Finally, \mathcal{T}_μ^k is a continuous mapping from $\mathbb{R}^{I+2} \times \mathbb{R}^{I+2}$ to itself which preserves the set \mathcal{K} . Thanks to Brouwer's Theorem, we conclude that \mathcal{T}_μ^k has a fixed point in \mathcal{K} . This fixed point with the corresponding Ψ defines a solution to (S) with $\varepsilon = 0$ at time step $k+1$. Since μ is an arbitrary constant, we can choose it such that (1.23) is verified and a solution to the scheme (S) satisfies (1.20) without any condition on Δt .

1.2.2 Notations and preliminary results

In order to prove Theorem 1.1.1, we need to define some functional sets and norms and to establish some properties. This is the goal of this section.

First of all, let us define two sets of functions.

Definition 1.2.1. Let \mathcal{T} be a mesh of size h and Δt a discretization time step. We first define $\mathcal{H}_\mathcal{T}$ the set of piecewise constant functions in space as

$$\mathcal{H}_\mathcal{T} = \left\{ w_h : [0, 1] \mapsto \mathbb{R} \mid \exists (w_i)_{0 \leq i \leq I+1} \in \mathbb{R}^{I+2} \text{ such that} \right. \\ \left. w_h(x) = \sum_{i=1}^I w_i \mathbb{1}_{(x_{i-1/2}, x_{i+1/2})}(x) + w_0 \mathbb{1}_{\{x=0\}}(x) + w_{I+1} \mathbb{1}_{\{x=1\}}(x) \right\}, \quad (1.24)$$

Then, we define the set of piecewise constant functions in space and time as

$$\mathcal{H}_{\mathcal{T}, \Delta t} = \left\{ w_{h, \Delta t} : [0, 1] \times [0, T] \mapsto \mathbb{R} \mid \exists (w_h^{k+1})_{0 \leq k \leq K-1} \in (\mathcal{H}_\mathcal{T})^K \text{ such that} \right. \\ \left. w_{h, \Delta t}(x, t) = \sum_{k=0}^{K-1} w_h^{k+1}(x) \mathbb{1}_{[t^k, t^{k+1})}(t) \right\}. \quad (1.25)$$

Then, denoting by $\|\cdot\|_0$ the usual $L^2(0, 1)$ -norm, we remark that

$$\|w_h\|_0 = \left(\sum_{i=1}^I h_i w_i^2 \right)^{1/2}, \quad \forall w_h \in \mathcal{H}_\mathcal{T}.$$

Moreover, we define some norms on $\mathcal{H}_{\mathcal{T}}$ and $\mathcal{H}_{\mathcal{T}, \Delta t}$, which are discrete counterparts of $H^1(0, 1)$, $H^{-1}(0, 1)$ and $L^2(0, T, H^1(0, 1))$ -norms:

$$\begin{aligned} \|w_h\|_{1, \mathcal{T}} &= \left(\sum_{i=0}^I \frac{(w_{i+1} - w_i)^2}{h_{i+\frac{1}{2}}} + w_0^2 + w_{I+1}^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad \forall w_h \in \mathcal{H}_{\mathcal{T}}, \\ \|w_h\|_{-1,2, \mathcal{T}} &= \max \left\{ \int_0^1 w_h v_h \, dx, \, v_h \in \mathcal{H}_{\mathcal{T}} \text{ and } \|v_h\|_{1, \mathcal{T}} \leq 1 \right\}, \quad \forall w_h \in \mathcal{H}_{\mathcal{T}}, \\ \|w_{h, \Delta t}\|_{0;1, \mathcal{T}} &= \left(\sum_{n=0}^{K-1} \Delta t \|w_h^{k+1}\|_{1, \mathcal{T}}^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad \forall w_{h, \Delta t} \in \mathcal{H}_{\mathcal{T}, \Delta t}. \end{aligned}$$

As shown in [2], for all $w_h \in \mathcal{H}_{\mathcal{T}}$, we have:

$$(w_i)^2 \leq 2 \|w_h\|_{1, \mathcal{T}}^2, \quad \forall i \in \llbracket 1; I \rrbracket, \quad (1.26)$$

and, as a direct consequence, the following discrete Poincaré inequalities:

$$\|w_h\|_{0, \mathcal{T}} \leq \sqrt{2} \|w_h\|_{1, \mathcal{T}}, \quad \forall w_h \in \mathcal{H}_{\mathcal{T}}. \quad (1.27)$$

Finally, we end this section with some properties satisfied by the functional spaces. These properties will be crucial in order to apply some compactness results. More precisely, the following lemmas state that the hypotheses (H1) and (H2) of Lemma 3.1 in [31] hold for sequences $(\mathcal{H}_{\mathcal{T}_m})_m$ and $(w_{h_m})_m$ such that for all m , $w_{h_m} \in \mathcal{H}_{\mathcal{T}_m}$.

Lemma 1.2.1. *Let $(\mathcal{H}_{\mathcal{T}_m})_m$ be a sequence of finite-dimensional subspaces of $L^2(0, 1)$ defined by (1.24). Let $(w_{h_m})_m$ be a sequence such that $w_{h_m} \in \mathcal{H}_{\mathcal{T}_m}$ for all m and satisfying :*

$$\exists C > 0 \text{ such that } \forall m, \|w_{h_m}\|_{1, \mathcal{T}_m} \leq C.$$

Then, up to a subsequence, $(w_{h_m})_m$ converges to w_h in $L^2(0, 1)$ when m tends to $+\infty$.

The proof of this lemma is a consequence of a Kolmogorov's compactness Theorem (see for instance Theorem 10.3 in [25]).

Lemma 1.2.2. *Let $(\mathcal{H}_{\mathcal{T}_m})_m$ be a sequence of finite-dimensional subspaces of $L^2(0, 1)$ defined by (1.24). Let $(w_{h_m})_m$ be a sequence such that $w_{h_m} \in \mathcal{H}_{\mathcal{T}_m}$ for all m . If $(w_{h_m})_m$ converges to w in $L^2(0, 1)$ and $\|w_{h_m}\|_{-1,2, \mathcal{T}_m}$ converges to 0, then $w = 0$.*

Proof. We will obtain that $w = 0$, as a consequence of:

$$\forall \varphi \in \mathcal{C}_c^\infty([0, 1]), \quad \int_0^1 w \varphi \, dx = 0.$$

Thus, letting $\varphi \in \mathcal{C}_c^\infty([0, 1])$, we set $\varphi_i = \varphi(x_i)$ for all $i \in \llbracket 0; I + 1 \rrbracket$ and we define the associate $\varphi_{h_m} \in \mathcal{H}_{\mathcal{T}_m}$. Since w_{h_m} and $\varphi_{h_m} \in \mathcal{H}_{\mathcal{T}_m}$:

$$\left| \int_0^1 w_{h_m} \varphi_{h_m} \, dx \right| \leq \|w_{h_m}\|_{-1,2,\mathcal{T}_m} \|\varphi_{h_m}\|_{1,\mathcal{T}_m}. \quad (1.28)$$

But, thanks to the regularity of φ ,

$$\begin{aligned} \left| \int_0^1 w_{h_m} \varphi \, dx \right| &\leq \left| \int_0^1 w_{h_m} \varphi_{h_m} \, dx \right| + \left| \int_0^1 w_{h_m} (\varphi - \varphi_{h_m}) \, dx \right| \\ &\leq \|w_{h_m}\|_{-1,2,\mathcal{T}_m} \|\varphi_{h_m}\|_{1,\mathcal{T}_m} + \|w_{h_m}\|_0 C_\varphi h_m. \end{aligned}$$

Since $\|w_{h_m}\|_0$ is bounded independently of h_m , for all $\varphi \in \mathcal{C}_c^\infty([0, 1])$, we have

$$\int_0^1 w \varphi \, dx = \lim_{m \rightarrow +\infty} \int_0^1 w_{h_m} \varphi \, dx = 0,$$

and then $w = 0$. □

1.2.3 Discrete $L^2(0, T, H^1(0, 1))$ estimates on P , N and Ψ

In order to apply compactness results, we need some estimates on $P_{h,\Delta t}$, $N_{h,\Delta t}$ and $\Psi_{h,\Delta t}$. Let us begin with the estimate on $\Psi_{h,\Delta t}$.

Proposition 1.2.1. *Under the assumptions of Proposition 1.1.1, there exist a constant C depending only on the data and independent of Δt and h , such that:*

$$\|\Psi_h^{k+1}\|_{1,\mathcal{T}}^2 \leq C, \quad \forall k \geq 0, \quad (1.29)$$

$$\text{and } \|\Psi_{h,\Delta t}\|_{0;1,\mathcal{T}}^2 \leq CT. \quad (1.30)$$

The proof is left to the reader. It follows the line of the proof of Proposition 2 in [16]. It mainly uses (1.20) and (1.27).

Remark 5. Thanks to estimates (1.26) and (1.29), we have $\|\Psi_h^{k+1}\|_{L^\infty(0,1)} \leq C$ for all $k \geq 0$.

Let us now state the same result on $P_{h,\Delta t}$ and $N_{h,\Delta t}$.

Proposition 1.2.2. *Under the assumptions of Proposition 1.1.1, there exist a constant C depending only on the data and independent of Δt and h , such that:*

$$\|u_{h,\Delta t}\|_{0;1,\mathcal{T}}^2 \leq C, \quad \text{for } u = P, N. \quad (1.31)$$

Proof. The proof is based on a classical method, already applied in [25]. However, it requires to pay a special attention on the boundary conditions which induce a new difficulty.

Multiplying (1.14b) with $\Delta t u_i^{k+1}$ and summing over i and k , we obtain $A + B = 0$ with

$$A = \sum_{n=0}^{K-1} \sum_{i=1}^I \varepsilon_u h_i u_i^{k+1} (u_i^{k+1} - u_i^k) \quad \text{and} \quad B = \sum_{n=0}^{K-1} \sum_{i=1}^I \Delta t u_i^{k+1} \left(\mathcal{F}_{u,i+\frac{1}{2}}^{k+1} - \mathcal{F}_{u,i-\frac{1}{2}}^{k+1} \right).$$

It is easy to see that:

$$A \geq \sum_{n=0}^{K-1} \sum_{i=1}^I \frac{\varepsilon_u h_i}{2} (u_i^{k+1} - u_i^k)^2 - \sum_{i=1}^I \frac{\varepsilon_u h_i}{2} (u_i^0)^2. \quad (1.32)$$

Moreover, applying a discrete integration by parts to B and using the following decomposition of the numerical fluxes given in [4]:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{u,i+\frac{1}{2}}^{k+1} &= -z_u d\Psi_{i+\frac{1}{2}}^{k+1} \frac{u_i^{k+1} + u_{i+1}^{k+1}}{2} \\ &\quad + \frac{z_u d\Psi_{i+\frac{1}{2}}^{k+1}}{2} \coth \left(\frac{-z_u h_{i+\frac{1}{2}} d\Psi_{i+\frac{1}{2}}^{k+1}}{2} \right) (u_{i+1}^{k+1} - u_i^{k+1}), \end{aligned} \quad (1.33)$$

we can rewrite B as $B = B_1 + B_2 + B_3$ with

$$\begin{aligned} B_1 &= - \sum_{n=0}^{K-1} \sum_{i=0}^I \frac{\Delta t z_u}{2} d\Psi_{i+\frac{1}{2}}^{k+1} \coth \left(\frac{-z_u h_{i+\frac{1}{2}} d\Psi_{i+\frac{1}{2}}^{k+1}}{2} \right) (u_{i+1}^{k+1} - u_i^{k+1})^2, \\ B_2 &= \sum_{n=0}^{K-1} \sum_{i=0}^I \frac{\Delta t z_u}{2} d\Psi_{i+\frac{1}{2}}^{k+1} \left((u_{i+1}^{k+1})^2 - (u_i^{k+1})^2 \right), \\ B_3 &= \sum_{n=0}^{K-1} \Delta t \left(u_{I+\frac{1}{2}}^{k+1} \mathcal{F}_{u,I+\frac{1}{2}}^{k+1} - u_0^{k+1} \mathcal{F}_{u,\frac{1}{2}}^{k+1} \right). \end{aligned}$$

As $x \coth(x) \geq 1$ for all $x \in \mathbb{R}$, we have, as in [4],

$$B_1 \geq \sum_{n=0}^{K-1} \sum_{i=0}^I \frac{\Delta t}{h_{i+\frac{1}{2}}} (u_{i+1}^{k+1} - u_i^{k+1})^2. \quad (1.34)$$

Applying a discrete integration by parts and using the scheme (1.14), we get:

$$\begin{aligned} B_2 &= \sum_{n=0}^{K-1} \sum_{i=1}^I \frac{\Delta t z_u h_i}{2} \frac{z_P (P_i^{k+1} - P^{max}) + z_N (N_i^{k+1} - N^{max})}{\lambda^2} (u_i^{k+1})^2 \\ &\quad + \sum_{n=0}^{K-1} \frac{\Delta t z_u}{2} \left(d\Psi_{I+\frac{1}{2}}^{k+1} (u_{I+1}^{k+1})^2 - d\Psi_{\frac{1}{2}}^{k+1} (u_0^{k+1})^2 \right). \end{aligned}$$

Since $z_P z_N (u_i^{k+1} - u^{max}) (u_i^{k+1})^2 \geq 0$ for $u = N, P$, we have:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{K-1} \sum_{i=1}^I \frac{\Delta t z_u h_i}{2} \frac{z_P (P_i^{k+1} - P^{max}) + z_N (N_i^{k+1} - N^{max})}{\lambda^2} (u_i^{k+1})^2 \\ \geq \sum_{n=0}^{K-1} \sum_{i=1}^I \frac{\Delta t z_u^2 h_i}{2\lambda^2} (u_i^{k+1} - u^{max}) (u_i^{k+1})^2, \end{aligned}$$

which yields

$$B_2 \geq \sum_{n=0}^{K-1} \sum_{i=1}^I \frac{\Delta t z_u^2 h_i}{2\lambda^2} (u_i^{k+1} - u^{max}) (u_i^{k+1})^2 + B_4, \quad (1.35)$$

with

$$B_4 = \sum_{n=0}^{K-1} \frac{\Delta t z_u}{2} \left(d\Psi_{I+\frac{1}{2}}^{k+1} (u_{I+1}^{k+1})^2 - d\Psi_{\frac{1}{2}}^{k+1} (u_0^{k+1})^2 \right).$$

Using the boundary conditions (1.16), we may now rewrite $B_3 + B_4$ as

$$B_3 + B_4 = - \sum_{n=0}^{K-1} \Delta t ((f_u^0)^{k+1} + (f_u^1)^{k+1}),$$

with

$$\begin{aligned} (f_u^0)^{k+1} &= (u_0^{k+1})^2 \left[-\beta_u^0 (\psi_0^{k+1}) + \frac{z_u}{2} \frac{\psi_0^{k+1} - \Delta \psi_0^{pzc}}{\alpha_0} \right] + u_0^{k+1} \gamma_u^0 (\psi_0^{k+1}), \\ (f_u^1)^{k+1} &= (u_{I+1}^{k+1})^2 \left[-\beta_u^1 (V - \psi_{I+1}^{k+1}) - \frac{z_u}{2} \frac{V - \psi_{I+1}^{k+1} - \Delta \psi_1^{pzc}}{\alpha_1} \right] + u_{I+1}^{k+1} \gamma_u^1 (V - \psi_{I+1}^{k+1}). \end{aligned}$$

It remains to find an upper bound of $(f_u^0)^{k+1} + (f_u^1)^{k+1}$. To this end, we proceed as in [1] and [16]. We introduce:

$$\begin{aligned}\xi_u^0(x) &= \gamma_u^0(x) - u^{\max} \beta_u^0(x) + u^{\max} \frac{z_u}{\alpha_0} (x - \Delta \psi_0^{pzc}), & \forall x \in \mathbb{R}, \\ \xi_u^1(x) &= \gamma_u^1(x) - u^{\max} \beta_u^1(x) - u^{\max} \frac{z_u}{\alpha_1} (x - \Delta \psi_1^{pzc}), & \forall x \in \mathbb{R},\end{aligned}$$

which are nonpositive functions under the hypotheses (1.18)-(1.19) (see [1]). As

$$(f_u^0)^{k+1} = \frac{(u_0^{k+1})^2}{2u^{\max}} [\xi_u^0(\psi_0^{k+1}) - u^{\max} \beta_u^0(\psi_0^{k+1}) - \gamma_u^0(\psi_0^{k+1})] + \gamma_u^0(\psi_0^{k+1}) u_0^{k+1},$$

we clearly have: $(f_u^0)^{k+1} \leq \gamma_u^0(\psi_0^{k+1}) u_0^{k+1}$. Rewriting $(f_u^1)^{k+1}$ with the help of ξ_u^1 , we similarly prove: $(f_u^1)^{k+1} \leq \gamma_u^1(V - \psi_{I+1}^{k+1}) u_{I+1}^{k+1}$. Then, using the estimates (1.20) and (1.29) and the continuity of the functions γ_u^0 and γ_u^1 , we have

$$B_3 + B_4 \geq -C. \quad (1.36)$$

From (1.32), (1.34), (1.35) and (1.36), we deduce that

$$\sum_{n=0}^{K-1} \sum_{i=0}^I \Delta t \frac{(u_{i+1}^{k+1} - u_i^{k+1})^2}{h_{i+\frac{1}{2}}} + \frac{\varepsilon_u}{2} \sum_{n=0}^{K-1} \sum_{i=1}^I h_i (u_i^{k+1} - u_i^k)^2 \leq C, \quad (1.37)$$

with C depending only on P^{\max} , N^{\max} , α_0 , α_1 , V , $\Delta \Psi_0^{pzc}$, $\Delta \Psi_1^{pzc}$, λ , $(\beta_u^i, \gamma_u^i)_{i=0,1}$ and T . This ends the proof of Proposition 1.2.2. \square

Remark 6. Note that a direct consequence of (1.37) is

$$\varepsilon_u \sum_{n=0}^{K-1} \sum_{i=1}^I h_i (u_i^{k+1} - u_i^k)^2 \leq C, \quad (1.38)$$

with C a constant independent of h and Δt . This inequality will be used in Section 1.3.2.

1.3 Compactness results and passage to the limit

In this section, we prove the Theorem 1.1.1. Firstly, we establish the convergences of $(P_m)_m$ and $(N_m)_m$ using a Gallouët-Latché compactness Theorem (Theorem 3.4 in [31]), which is a discrete counterpart of the Aubin-Simon Lemma. Secondly, we prove

the convergence of $(\Psi_m)_m$ using a classical Kolmogorov Theorem. Then, we show the convergence of the traces on the boundaries following the ideas of [7]. Finally, passing to the limit in the scheme, we prove that $(P_m, N_m, \Psi_m)_m$ tends to a solution of (\mathcal{P}) in the sense of Definition 1.1.1.

1.3.1 Compactness of $(P_m)_m$ and $(N_m)_m$

The proof of compactness being analogous for $(P_m)_m$ and $(N_m)_m$, in all this section we use the notation $(u_m)_m$ where u can be replaced by P or N . To prove the compactness of the sequence $(u_m)_m$, we will use Theorem 3.4 in [31]. Therefore, for any function $w_{h,\Delta t} \in \mathcal{H}_{\mathcal{T},\Delta t}$, we define a discrete time derivative $\partial_{t,\mathcal{T}} w_{h,\Delta t}$ and a discrete space derivative $\partial_{x,\mathcal{T}} w_{h,\Delta t}$. There are piecewise constant function in space and time, defined by:

$$\begin{aligned} \partial_{t,\mathcal{T}} w_{h,\Delta t}(x, t) &= \partial_{t,\mathcal{T}}^k w_{h,\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} (w_h^{k+1} - w_h^k) \quad \text{on } [t_k, t_{k+1}), \\ \partial_{x,\mathcal{T}} w_{h,\Delta t}(x, t) &= \partial_{x,\mathcal{T}}^i w_{h,\Delta t} = \frac{w_{i+1}^{k+1} - w_i^{k+1}}{h_{i+1/2}}, \quad \text{on } (x_i, x_{i+1}) \times (t_k, t_{k+1}). \end{aligned}$$

Let us first establish an estimate on the discrete time derivative needed for the convergence proof.

Proposition 1.3.1. *Under the assumptions of Theorem 1.1.1, there exist a constant C depending only on the data such that:*

$$\sum_{k=0}^{K_m-1} \Delta t_m \|\partial_{t,\mathcal{T}_m}^k u_m\|_{-1,2,\mathcal{T}_m}^2 \leq C. \quad (1.39)$$

Proof. Let consider $v_{h_m} \in \mathcal{H}_{\mathcal{T}_m}$ such that $\|v_{h_m}\|_{1,\mathcal{T}_m} \leq 1$. By definition, we have:

$$\int_0^1 (\partial_{t,\mathcal{T}_m}^k u_m) v_{h_m} = \sum_{i=0}^I h_i \frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\Delta t} v_i.$$

Then, using the scheme (1.14b), a discrete integration by parts and the reformulation (1.33) of the fluxes, we get

$$\left| \int_0^1 (\partial_{t,\mathcal{T}_m}^k u_m) v_{h_m} dx \right| \leq A_1 + A_2 + A_3,$$

with

$$\begin{aligned} A_1 &= \frac{1}{\varepsilon_u} \sum_{i=0}^I |v_{i+1} - v_i| \left| z_u d\Psi_{i+\frac{1}{2}}^{k+1} \frac{u_{i+1}^{k+1} + u_i^{k+1}}{2} \right|, \\ A_2 &= \frac{1}{\varepsilon_u} \sum_{i=0}^I |v_{i+1} - v_i| \left| \frac{z_u d\Psi_{i+\frac{1}{2}}^{k+1}}{2} \coth \left(\frac{-z_u h_{i+\frac{1}{2}} d\Psi_{i+\frac{1}{2}}^{k+1}}{2} \right) (u_{i+1}^{k+1} - u_i^{k+1}) \right|, \\ A_3 &= \frac{1}{\varepsilon_u} \left| \mathcal{F}_{u, \frac{1}{2}}^{k+1} v_0 \right| + \frac{1}{\varepsilon_u} \left| \mathcal{F}_{u, I+\frac{1}{2}}^{k+1} v_{I+1} \right|. \end{aligned}$$

Using (1.20) and (1.29), we obtain:

$$A_1 \leq \frac{|z_u| u^{max}}{\varepsilon_u} \left(\sum_{i=0}^I \frac{(v_{i+1} - v_i)^2}{h_{i+\frac{1}{2}}} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{i=0}^I \frac{(\Psi_{i+1}^{k+1} - \Psi_i^{k+1})^2}{h_{i+\frac{1}{2}}} \right)^{\frac{1}{2}} \leq \frac{C}{\varepsilon_u} \|v_{h_m}\|_{1, \mathcal{T}_m}.$$

Since $x \mapsto x \coth(x)$ is a 1-Lipschitz continuous function and is equal to 1 in 0 and thanks to Cauchy-Schwarz inequality, we obtain:

$$\begin{aligned} A_2 &\leq \frac{1}{\varepsilon_u} \sum_{i=0}^I \frac{|v_{i+1} - v_i|}{h_{i+\frac{1}{2}}} \left| \frac{z_u h_{I+\frac{1}{2}} d\Psi_{i+\frac{1}{2}}^{k+1}}{2} \coth \left(\frac{-z_u h_{i+\frac{1}{2}} d\Psi_{i+\frac{1}{2}}^{k+1}}{2} \right) - 1 \right| |u_{i+1}^{k+1} - u_i^k| \\ &\quad + \frac{1}{\varepsilon_u} \sum_{i=0}^I \frac{|v_{i+1} - v_i|}{h_{i+\frac{1}{2}}} |u_{i+1}^{k+1} - u_i^k| \\ &\leq \left(\frac{C}{\varepsilon_u} \|\Psi_m^{k+1}\|_{1, \mathcal{T}_m} + \frac{1}{\varepsilon_u} \|u_m^{k+1}\|_{1, \mathcal{T}_m} \right) \|v_{h_m}\|_{1, \mathcal{T}_m}. \end{aligned}$$

Let us now consider the term A_3 containing the boundary conditions. Using (1.29) and the continuity of the functions $(\beta_u^i, \gamma_u^i)_{i=0,1}$, we have

$$\begin{aligned} \varepsilon_u A_3 &\leq (\gamma_u^0 (|\Psi_0^{k+1}|) + |u_0^{k+1}| \beta_u^0 (|\Psi_0^{k+1}|)) |v_0| \\ &\quad + (\gamma_u^1 (|V - \Psi_{I+1}^{k+1}|) + |u_{I+1}^{k+1}| \beta_u^1 (|V - \Psi_{I+1}^{k+1}|)) |v_{I+1}| \\ &\leq C (1 + |u_0^{k+1}| + |u_{I+1}^{k+1}|) (|v_0| + |v_{I+1}|) \\ &\leq C (1 + \|u_m^{k+1}\|_{1, \mathcal{T}_m}) \|v_{h_m}\|_{1, \mathcal{T}_m}. \end{aligned}$$

Therefore, we obtain:

$$\left| \int_0^1 (\partial_{t, \mathcal{T}_m}^k u_m) v_{h_m} dx \right| \leq \frac{C \|v_{h_m}\|_{1, \mathcal{T}_m}}{\varepsilon_u} (1 + \|u_m^{k+1}\|_{1, \mathcal{T}_m}),$$

which yields

$$\sum_{k=0}^{K-1} \Delta t_m \|\partial_{t, \mathcal{T}_m}^k u_m\|_{-1,2, \mathcal{T}_m}^2 \leq \frac{2C^2 T}{\varepsilon_u^2} + \frac{2C^2}{\varepsilon_u^2} \sum_{n=0}^{K-1} \Delta t_m \|u_m^{k+1}\|_{1, \mathcal{T}_m}^2.$$

Finally, the estimate (1.39) is a consequence of the $L^2(0, T, H^1(0, 1))$ estimate (1.31). \square

We are now able to prove the following convergence result.

Proposition 1.3.2. *Under the assumptions of Theorem 1.1.1, there exist $u \in L^2(0, T; H^1(0, 1))$ such that, up to a subsequence,*

$$\begin{aligned} u_m &\rightarrow u \quad \text{strongly in } L^2(0, T; L^2(0, 1)), \text{ when } m \rightarrow +\infty, \\ \partial_{x, \mathcal{T}_m} u_m &\rightharpoonup \partial_x u \quad \text{weakly in } L^2(0, T; L^2(0, 1)) \text{ when } m \rightarrow +\infty. \end{aligned}$$

Proof. The sequence $(\mathcal{H}_{\mathcal{T}_m, \Delta t_m})_m$ is a sequence of finite-dimensional subspaces of $L^2(0, 1)$. Each subspace $\mathcal{H}_{\mathcal{T}_m, \Delta t_m}$ can be endowed either with the norm $\|\cdot\|_{1, \mathcal{T}_m}$ or with the norm $\|\cdot\|_{-1,2, \mathcal{T}_m}$. These two norms verify Lemma 1.2.1 and Lemma 1.2.2 which correspond to the hypotheses of Theorem 3.4 in [31].

Then, thanks to Proposition 1.2.2 and 1.3.1, we can apply Theorem 3.4 in [31] : up to a subsequence, $u_m \rightarrow u$ strongly in $L^2(0, T, L^2(0, 1))$. Moreover, Proposition 1.2.2 implies that $u \in L^2(0, T, H^1(0, 1))$. Finally the weak convergence of $\partial_{x, \mathcal{T}_m} u_m$ in $L^2(0, T; L^2(0, 1))$ is also a consequence of Proposition 1.2.2. \square

1.3.2 Compactness of $(\Psi_m)_m$

The convergence of the sequence $(\Psi_m)_m$ will be obtained as a consequence of the Kolmogorov compactness Theorem, as it is done for instance in [25].

Let us first rem that the following estimate on the space translates of $\Psi_{h, \Delta t}$ is a consequence of the estimate (1.30).

Lemma 1.3.1. *Under the assumptions of Theorem 1.1.1, there exist a constant C such that for all $\eta < h$:*

$$\|\Psi_{h, \Delta t}(\cdot + \eta, \cdot) - \Psi_{h, \Delta t}(\cdot, \cdot)\|_{L^2(0, T, L^2(0, 1-\eta))}^2 \leq C\eta.$$

Then, we can also establish an estimate on the time translates of $\Psi_{h, \Delta t}$.

Lemma 1.3.2. *Under the assumptions of Theorem 1.1.1, there exist a constant C such that for all $\tau < \Delta t$:*

$$\|\Psi_{h,\Delta t}(\cdot, \cdot + \tau) - \Psi_{h,\Delta t}(\cdot, \cdot)\|_{L^2(0, T-\tau, L^2(0,1))}^2 \leq C\tau.$$

Proof. Using (1.14a), (1.16a) and (1.16b), we have, for $i \in \llbracket 1; I \rrbracket$,

$$\begin{cases} -\lambda^2 \left(d\Psi_{i+\frac{1}{2}}^{k+2} - d\Psi_{i+\frac{1}{2}}^{k+1} - d\Psi_{i-\frac{1}{2}}^{k+2} + d\Psi_{i-\frac{1}{2}}^{k+1} \right) = \\ \quad h_i \left(3 \left(P_i^{k+2} - P_i^{k+1} \right) - \left(N_i^{k+2} - N_i^{k+1} \right) \right), \\ \Psi_0^{k+2} - \Psi_0^{k+1} = \alpha_0 \left(d\Psi_{\frac{1}{2}}^{k+2} - d\Psi_{\frac{1}{2}}^{k+1} \right), \\ \Psi_{I+1}^{k+2} - \Psi_{I+1}^{k+1} = -\alpha_1 \left(d\Psi_{I+\frac{1}{2}}^{k+2} - d\Psi_{I+\frac{1}{2}}^{k+1} \right). \end{cases}$$

Multiplying by $(\Psi_i^{k+2} - \Psi_i^{k+1})$ and summing over i and k , we obtain $A = B$ with

$$\begin{aligned} A &= \sum_{n=0}^{K-1} \sum_{i=1}^I -\lambda^2 \left(d\Psi_{i+\frac{1}{2}}^{k+2} - d\Psi_{i-\frac{1}{2}}^{k+2} - d\Psi_{i+\frac{1}{2}}^{k+1} + d\Psi_{i-\frac{1}{2}}^{k+1} \right) (\Psi_i^{k+2} - \Psi_i^{k+1}), \\ B &= \sum_{n=0}^{K-1} \sum_{i=1}^I h_i \left(3 \left(P_i^{k+2} - P_i^{k+1} \right) - \left(N_i^{k+2} - N_i^{k+1} \right) \right) (\Psi_i^{k+2} - \Psi_i^{k+1}). \end{aligned}$$

Using the boundary conditions, in a same way as in the proof of Proposition 1.2.1, we get:

$$A \geq \lambda^2 \alpha \sum_{n=0}^{K-1} \|\Psi_h^{k+2} - \Psi_h^{k+1}\|_{1, \mathcal{T}}^2,$$

with $\alpha = \min(1, 1/\alpha_0, 1/\alpha_1)$. Then, using Young's inequality, (1.27) and Remark 6, we also have:

$$B \leq \frac{\lambda^2 \alpha}{2} \sum_{n=0}^{K-1} \|\Psi_h^{k+2} - \Psi_h^{k+1}\|_{1, \mathcal{T}}^2 + C.$$

Then, we obtain

$$\sum_{n=0}^{K-1} \|\Psi_h^{k+2} - \Psi_h^{k+1}\|_{1, \mathcal{T}}^2 \leq C,$$

with C a constant independent of τ and Δt . With (1.27), this yields the expected

result, since

$$\|\Psi_{h,\Delta t}(\cdot, \cdot + \tau) - \Psi_{h,\Delta t}(\cdot, \cdot)\|_{L^2(0, T-\tau, L^2(0,1))}^2 = \tau \sum_{k=0}^{K-1} \|\Psi_h^{k+2} - \Psi_h^{k+1}\|_{0, \mathcal{T}}^2.$$

□

Finally, we deduce from Lemmas 1.3.1 and 1.3.2 the following convergence result for the sequence $(\Psi_m)_m$.

Proposition 1.3.3. *Under the assumptions of Theorem 1.1.1, there exist $\Psi \in L^2(0, T; H^1(0, 1))$ such that, up to a subsequence,*

$$\begin{aligned} \Psi_m &\rightarrow \Psi \quad \text{strongly in } L^2(0, T; L^2(0, 1)), \text{ when } m \rightarrow +\infty, \\ \partial_{x, \mathcal{T}_m} \Psi_m &\rightharpoonup \partial_x \Psi \quad \text{weakly in } L^2(0, T; L^2(0, 1)), \text{ when } m \rightarrow +\infty. \end{aligned}$$

1.3.3 Convergence of the traces

Up to now, we have proved the existence of P , N and Ψ belonging to $L^2(0, T; H^1(0, 1))$, such that, up to a subsequence, $(P_m)_m$, $(N_m)_m$ and $(\Psi_m)_m$ converge respectively to P , N and Ψ . It remains to prove that (P, N, Ψ) is a solution to the corrosion model in the sense of Definition 1.1.1. Therefore, we will pass to the limit in the scheme, see Section 1.3.4. But, at this stage, we will have to pass to the limit in some boundary terms. Therefore, we need the convergence of different traces.

For $w = N, P$, or Ψ , we have established that $w \in L^2(0, T; H^1(0, 1))$. Due to the compact embedding of $H^1(0, 1)$ into $\mathcal{C}([0, 1])$ in 1D, it is clear that the trace of w in 0 and 1 is equal respectively to $w(0, \cdot)$ and $w(1, \cdot)$, which belong to $L^2(0, T)$.

For a given function $w_{h,\Delta t} \in \mathcal{H}_{\mathcal{T}, \Delta t}$, the usual trace, denoted by $\gamma w_{h,\Delta t}$ is a piecewise constant function of time defined by

$$\gamma w_{h,\Delta t}(0, t) = w_1^{k+1} \quad \text{and} \quad \gamma w_{h,\Delta t}(1, t) = w_I^{k+1}, \quad \forall t \in [t^k, t^{k+1}).$$

But, it will be easier to deal with an approximate trace $\tilde{\gamma} w_{h,\Delta t}$ defined by

$$\tilde{\gamma} w_{h,\Delta t}(0, t) = w_0^{k+1} \quad \text{and} \quad \tilde{\gamma} w_{h,\Delta t}(1, t) = w_{I+1}^{k+1}, \quad \forall t \in [t^k, t^{k+1}).$$

Proposition 1.3.4. *For $w = N, P$, or Ψ , the sequence $(\tilde{\gamma} w_m(0, \cdot))_m$ (resp. $(\tilde{\gamma} w_m(1, \cdot))_m$) converges towards $w(0, \cdot)$ (resp. $w(1, \cdot)$) strongly in $L^1(0, T)$, up to a subsequence.*

Proof. To prove this Proposition we follow the ideas presented in the proof of lemma 4.8 of [7]. More precisely, for all $\varrho > 0$, we write:

$$\int_0^T |\tilde{\gamma} w_m(0, t) - w(0, t)| dt = \frac{1}{\varrho} \int_0^{\varrho} \int_0^T |\tilde{\gamma} w_m(0, t) - w(0, t)| dt dy \leq T_1 + T_2 + T_3, \quad (1.40)$$

with

$$\begin{aligned} T_1 &= \frac{1}{\varrho} \int_0^{\varrho} \int_0^T |\tilde{\gamma} w_m(0, t) - w_m(y, t)| dt dy, \\ T_2 &= \frac{1}{\varrho} \int_0^{\varrho} \int_0^T |w_m(y, t) - w(y, t)| dt dy, \\ T_3 &= \frac{1}{\varrho} \int_0^{\varrho} \int_0^T |w(y, t) - w(0, t)| dt dy. \end{aligned}$$

Let us first note that $T_3 \rightarrow 0$ when $\varrho \rightarrow 0$, as $w(0, t)$ is the trace on $x = 0$ of $w(\cdot, t)$.

Let us now show that T_1 and T_2 converge also to 0.

Let us define $K_\varrho = \left\lfloor \frac{\varrho}{h_m} \right\rfloor + 1$. We can show:

$$T_1 \leq \frac{1}{\varrho} \sum_{n=0}^{K-1} \Delta t_m \sum_{p=1}^{K_\varrho} h_p |w_0^{k+1} - w_p^{k+1}| \leq \frac{1}{\varrho} \sum_{n=0}^{K-1} \Delta t_m \sum_{p=1}^{K_\varrho} h_p \sum_{i=0}^{p-1} |w_{i+1}^{k+1} - w_i^{k+1}|.$$

Using Cauchy-Schwarz inequality and (1.30) or (1.31)

$$T_1 \leq C \sqrt{T} \frac{(h_m + \varrho)^{\frac{3}{2}}}{\varrho} \xrightarrow{h_m \rightarrow 0} C \sqrt{T} \varrho^{\frac{1}{2}}. \quad (1.41)$$

Moreover,

$$T_2 \leq \frac{\sqrt{T}}{\sqrt{\varrho}} \left(\int_0^{\varrho} \int_0^T (w_m(y, t) - w(y, t))^2 dt dy \right)^{\frac{1}{2}} \xrightarrow{h_m \rightarrow 0} 0, \quad (1.42)$$

which gives with (1.40), (1.41), (1.42) and ρ tends to 0,

$$\lim_{h_m \rightarrow 0} \int_0^T |\tilde{\gamma} w_m(0, t) - w(0, t)| dt = 0.$$

This concludes the proof. \square

Corollary 1.3.1. *Up to a subsequence, the sequence $(\tilde{\gamma}w_m(0, \cdot))_m$ (resp. $(\tilde{\gamma}w_m(1, \cdot))_m$) converges towards $w(0, \cdot)$ (resp. $w(1, \cdot)$) strongly in $L^2(0, T)$, for $w = P, N$ or Ψ .*

Proof. The sequence $(\tilde{\gamma}w_m(0, \cdot))_m$ (resp. $(\tilde{\gamma}w_m(1, \cdot))_m$) converges almost everywhere on $(0, T)$. Moreover, $\tilde{\gamma}w_m(0, \cdot)$ (resp. $\tilde{\gamma}w_m(1, \cdot)$) is uniformly bounded thanks to the Propositions 1.1.1 and 1.2.1. Then, we obtain the strong convergence in $L^2(0, T)$. \square

1.3.4 Passage to the limit

We end the proof of Theorem 1.1.1. Indeed, it remains to prove that the limit P, N, Ψ , defined in Propositions 1.3.2 and 1.3.3 is a solution of (\mathcal{P}) in the sense of Definition 1.1.1. To this end, we follow the method used in [4] and [17].

First of all we prove that (P, N, Ψ) satisfy (1.12). For $u = P, N$ and $\varphi \in \mathcal{D}([0, 1] \times [0, T])$, we define

$$\begin{aligned} A_{10}(m) &= - \left(\int_0^T \int_0^1 \varepsilon_u u_m(x, t) (\partial_t \varphi(x, t)) \, dx dt + \int_0^1 \varepsilon_u u_m(x, 0) \varphi(x, 0) \, dx \right), \\ A_{20}(m) &= \int_0^T \int_0^1 (\partial_x \tau_m u_m(x, t)) (\partial_x \varphi(x, t)) \, dx dt, \\ A_{30}(m) &= \int_0^T \int_0^1 z_u u_m(x, t) (\partial_x \tau_m \Psi_m(x, t)) (\partial_x \varphi(x, t)) \, dx dt, \\ A_{40}(m) &= \int_0^T (\beta_u^1(V - \tilde{\gamma} \Psi_m(1, t)) \tilde{\gamma} u_m(1, t) - \gamma_u^1(V - \tilde{\gamma} \Psi_m(1, t))) \varphi(1, t) \, dt, \\ &\quad + \int_0^T (\beta_u^0(\tilde{\gamma} \Psi_m(0, t)) \tilde{\gamma} u_m(0, t) - \gamma_u^0(\tilde{\gamma} \Psi_m(0, t))) \varphi(0, t) \, dt, \\ \varepsilon_A(m) &= -A_{10}(m) - A_{20}(m) - A_{30}(m) - A_{40}(m). \end{aligned}$$

Due to Propositions 1.3.2, 1.3.3 and Corollary 1.3.1, we have:

$$\begin{aligned} \varepsilon_A(m) &\xrightarrow{m \rightarrow +\infty} \int_0^T \int_0^1 \varepsilon_u u (\partial_t \varphi) \, dx dt + \int_0^1 \varepsilon_u u(x, 0) \varphi(x, 0) \, dx + \int_0^T \int_0^1 J_u (\partial_x \varphi) \, dx dt \\ &\quad - \int_0^T (\beta_u^1(V - \Psi(1, t)) u(1, t) - \gamma_u^1(V - \Psi(1, t))) \varphi_1(1, t) \, dt \\ &\quad - \int_0^T (\beta_u^0(\Psi(0, t)) u(0, t) - \gamma_u^0(\Psi(0, t))) \varphi_1(0, t) \, dt. \end{aligned}$$

Thus, it remains to prove that $\varepsilon_A(m) \rightarrow 0$, when $m \rightarrow +\infty$. To this end, we multiply the scheme (1.14b) by $\Delta t \varphi_i^k$, with $\varphi_i^k = \varphi(x_i, t^k)$, and sum over i and k . Using the

fluxes decomposition (1.33) and the boundary conditions (1.16), we obtain:

$$A_1(m) + A_2(m) + A_3(m) + A_4(m) = 0,$$

with

$$\begin{aligned} A_1(m) &= \sum_{n=0}^{K-1} \sum_{i=1}^I \varepsilon_u h_i (u_i^{k+1} - u_i^k) \varphi_i^k \\ &= -\varepsilon_u \sum_{k=0}^{K-1} \sum_{i=1}^I \int_{t^k}^{t^{k+1}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} u_i^{k+1} \partial_t \varphi(x_i, t) \, dx dt - \varepsilon_u \sum_{i=1}^I \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} u_i^0 \varphi(x_i, 0) \, dx, \\ A_2(m) &= -\sum_{n=0}^{K-1} \sum_{i=0}^I \Delta t_m \frac{z_u d\Psi_{i+\frac{1}{2}}^{k+1}}{2} \coth\left(\frac{-z_u h_{i+\frac{1}{2}} d\Psi_{i+\frac{1}{2}}^{k+1}}{2}\right) (u_{i+1}^{k+1} - u_i^{k+1}) (\varphi_{i+1}^k - \varphi_i^k), \\ A_3(m) &= \sum_{n=0}^{K-1} \sum_{i=0}^I \Delta t_m z_u d\Psi_{i+\frac{1}{2}}^{k+1} \frac{u_{i+1}^{k+1} + u_i^{k+1}}{2} (\varphi_{i+1}^k - \varphi_i^k), \\ &= z_u \sum_{n=0}^{K-1} \sum_{i=0}^I \frac{u_{i+1}^{k+1} + u_i^{k+1}}{2} d\Psi_{i+\frac{1}{2}}^{k+1} \int_{t^k}^{t^{k+1}} (\varphi(x_{i+1}, t^k) - \varphi(x_i, t^k)) \, dt, \\ A_4(m) &= \sum_{n=0}^{K-1} \Delta t_m [(\beta_u^1(V - \Psi_{I+1}^{k+1})u_{I+1}^{k+1} - \gamma_u^1(V - \Psi_{I+1}^{k+1})) \varphi_{I+1}^k \\ &\quad + (\beta_u^0(\Psi_0^{k+1})u_0^{k+1} - \gamma_u^0(\Psi_0^{k+1})) \varphi_0^k]. \end{aligned}$$

Following the standard method used in [4], we can prove that

$$|A_i - A_{i0}| \xrightarrow{m \rightarrow +\infty} 0, \quad \text{for } i \in \llbracket 1, 3 \rrbracket.$$

The only difference with the standard method concerns the terms related to the boundary conditions.

Then, let us compare A_4 with A_{40} . We can rewrite A_{40} under the form:

$$\begin{aligned} A_{40}(m) &= \sum_{n=0}^{K-1} (\beta_u^1(V - \Psi_{I+1}^{k+1})u_{I+1}^{k+1} - \gamma_u^1(V - \Psi_{I+1}^{k+1})) \int_{t^k}^{t^{k+1}} \varphi(1, t) \, dt \\ &\quad - \sum_{n=0}^{K-1} (\beta_u^0(\Psi_0^{k+1})u_0^{k+1} - \gamma_u^0(\Psi_0^{k+1})) \int_{t^k}^{t^{k+1}} \varphi(0, t) \, dt, \end{aligned}$$

and, using the continuity of the functions $(\beta_u^i, \gamma_u^i)_{i=0,1}$, the regularity of φ , (1.20) and

(1.26), we obtain:

$$|A_4(m) - A_{40}(m)| \leq C \|\varphi\|_{C^2((0,T) \times [0,1])} \Delta t_m \xrightarrow{m \rightarrow +\infty} 0.$$

Finally, $\varepsilon_A(m) \xrightarrow{m \rightarrow +\infty} 0$ and P, N, Ψ satisfy (1.12). In the same way, we can prove that P, N and Ψ satisfy (1.13). This concludes the proof of Theorem 1.1.1.

1.4 Numerical experiments

In this Section, we present some numerical results for a test case close to the real case given in [1]. Indeed, we have modified some data of the real case in order to have a simplified model which is close to the DPCM model. For the DPCM and simplified models, it was performed a scaling relative to the characteristic time of the cations. This gives a very small value for the coefficient ε . Therefore, even if we have proved the convergence of the scheme only for $\varepsilon > 0$, we want to study numerically the behavior of the scheme for different values of ε . More precisely, we are interested in its behaviour in the limit $\varepsilon \rightarrow 0$.

1.4.1 Presentation of the test case

The test case, introduced here, is inspired by the real case given in [1]. Starting from the data given in [1], we have built a test case which is adapted for the simplified model. We only consider a potentiostatic case, which means that V is an applied potential. For the different experiments, we will consider the numerical values for the dimensionless simplified model given in Table 1.1.

Table 1.1: Dimensionless parameters.

λ^2	α_0	α_1	P^m	N^m	k_P^0	k_N^0	k_P^1	k_N^1
$1.1 \cdot 10^{-3}$	0.177	0.089	2	1	10^8	10^{-18}	10^{11}	26.8
m_P^0	m_N^0	m_P^1	m_N^1	a_P^0	a_N^0	b_P^0	b_N^0	a_P^1
0	$1.45 \cdot 10^{-24}$	10^8	26.8	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
a_N^1	b_P^1	b_N^1	$\Delta\Psi_0^{pzc}$	$\Delta\Psi_1^{pzc}$	V	ρ_{hl}		
0.5	0.5	0.5	-0.866	0	0.5	-5		

Let us remark that for such a choice of coefficients all the hypotheses ((1.6), (1.7), (1.8), α_0 and α_1 positive, (1.18) and (1.19)) are satisfied except for the right inequality

in (1.19). Nevertheless, we observe that numerically (1.20) still holds.

As mentioned in the introduction, a scaling relative to the characteristic time gives a very small coefficient ε , which is the quotient of the mobilities of the densities. In practice, ε is close to 10^{-14} . Then, for the experiments, we will consider different small values of ε , $\varepsilon \in \{0, 10^{-6}, 10^{-4}, 10^{-2}\}$ in order to verify that the scheme is asymptotic preserving in the limit ε tends to zero.

1.4.2 Numerical results

First, we want to illustrate numerically the convergence of the scheme, for different values of ε and its asymptotic preserving behavior in the limit ε tends to zero. Since the exact solution of this problem is not available, we compute a reference solution on a uniform mesh made of 4000 cells with a time step $\Delta t = 10^{-6}$ for each values of ε . For the simplified model, there is a stationary state in long-time. Thus, it is important to take a small time T in order to compute a solution different from the stationary state. Then, for Figures 1.1, 1.2 and 1.3, the L^2 -norms in space are computed at the final time $T = 10^{-3}$.

Figure 1.1 shows the L^2 -convergence rate in space of the scheme for different values of ε . We observe that the convergence rate is independent of ε and the scheme has an order 2 in space, even for $\varepsilon = 0$. It is due to the choice of Scharfetter-Gummel fluxes for the numerical approximation of the convection-diffusion fluxes. Figure 1.2 shows the L^2 -convergence rate in time for different values of ε . We observe that this convergence rate is also independent of ε and the scheme has an order 1 in time as expected.

In Figure 1.3 we present, for different values of the time step, the L^2 error in space at the final time $T = 10^{-3}$ with respect to ε . The asymptotic preserving behavior of the scheme, in the limit ε tends to zero, clearly appears.

In Figure 1.4, we present the profiles of the two densities and the electric potential, in the case $\varepsilon = 0$. In order to reach the stationary state, we use as final time $T = 1$. The solution is computed on a uniform mesh with 2000 cells in space and with a time step $\Delta t = 10^{-3}$. We obtain the expected behavior for the densities and the electric potential.

1.5 Conclusion

In this paper, we prove the convergence of a numerical scheme consisting in an

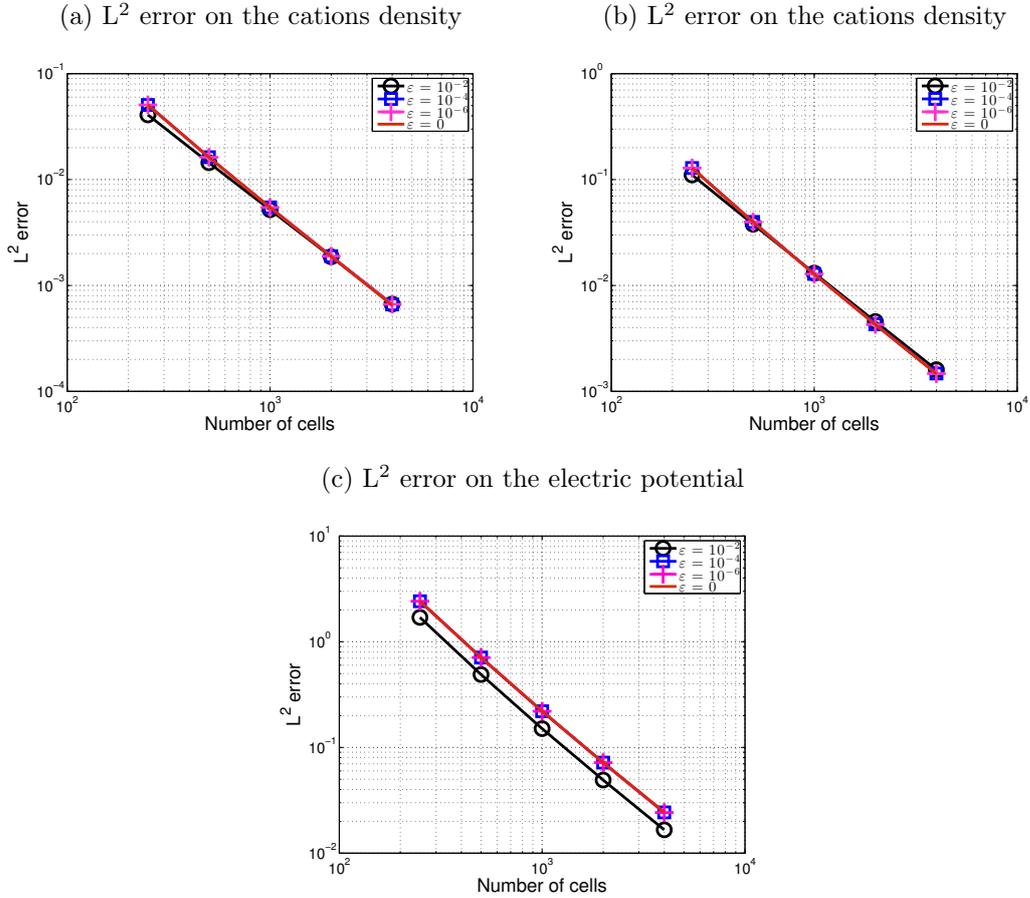


Figure 1.1: L^2 errors with respect to the space step on the densities and the electric potential for different values of ε and at final time $T = 10^{-3}$.

implicit Euler scheme in time and a Scharfetter-Gummel finite volume scheme in space for a corrosion model. The convergence proof is only valuable for $\varepsilon > 0$. But, as mentioned in the introduction, the dimensionless parameter ε is the ratio of the mobility coefficients for cations and electrons and it is therefore very small. It should be set to 0 in the practical applications. As seen in the numerical experiments, the scheme is robust with respect to the value of ε . It seems to be asymptotic preserving in the limit $\varepsilon \rightarrow 0$ (Figures 1.1, 1.2 and 1.3). In practice, we can set $\varepsilon = 0$ and obtain the expected behavior for the densities and the potential (Figure 1.4).

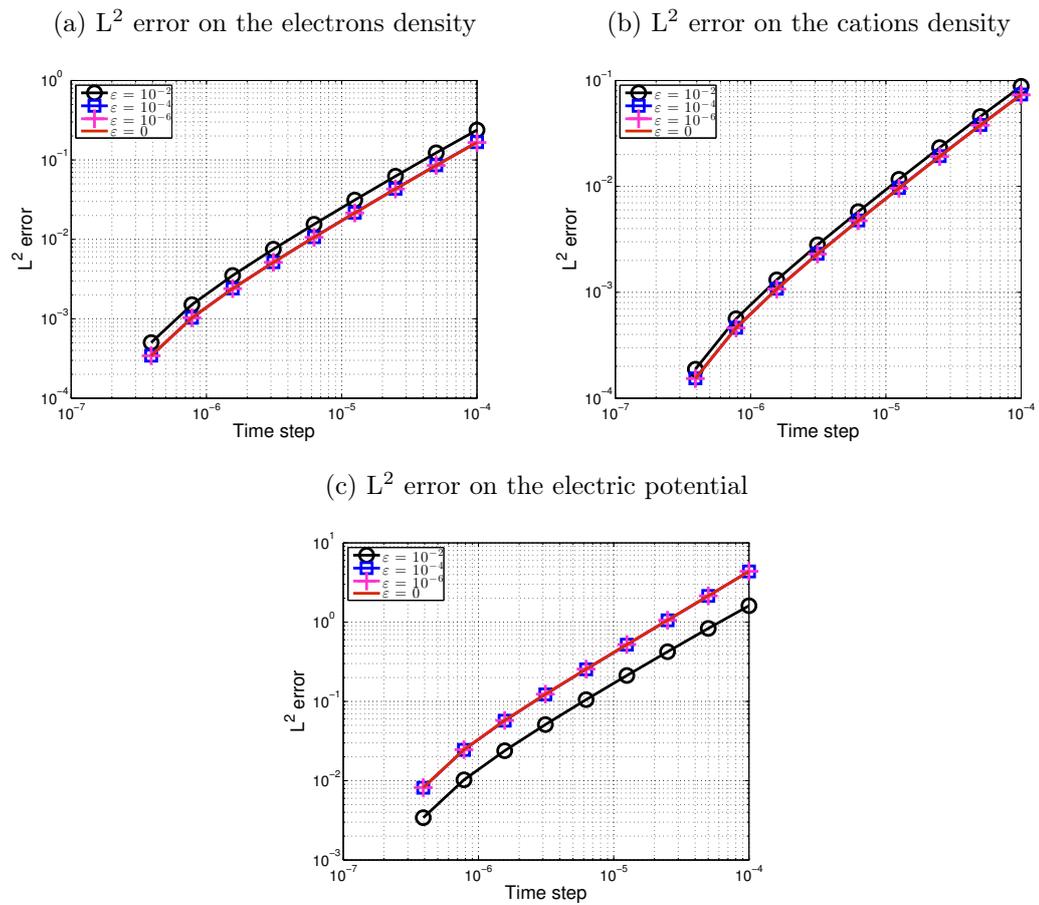


Figure 1.2: L^2 errors with respect to the time step on the densities and the electric potential for different values of ε and at final time $T = 10^{-3}$.

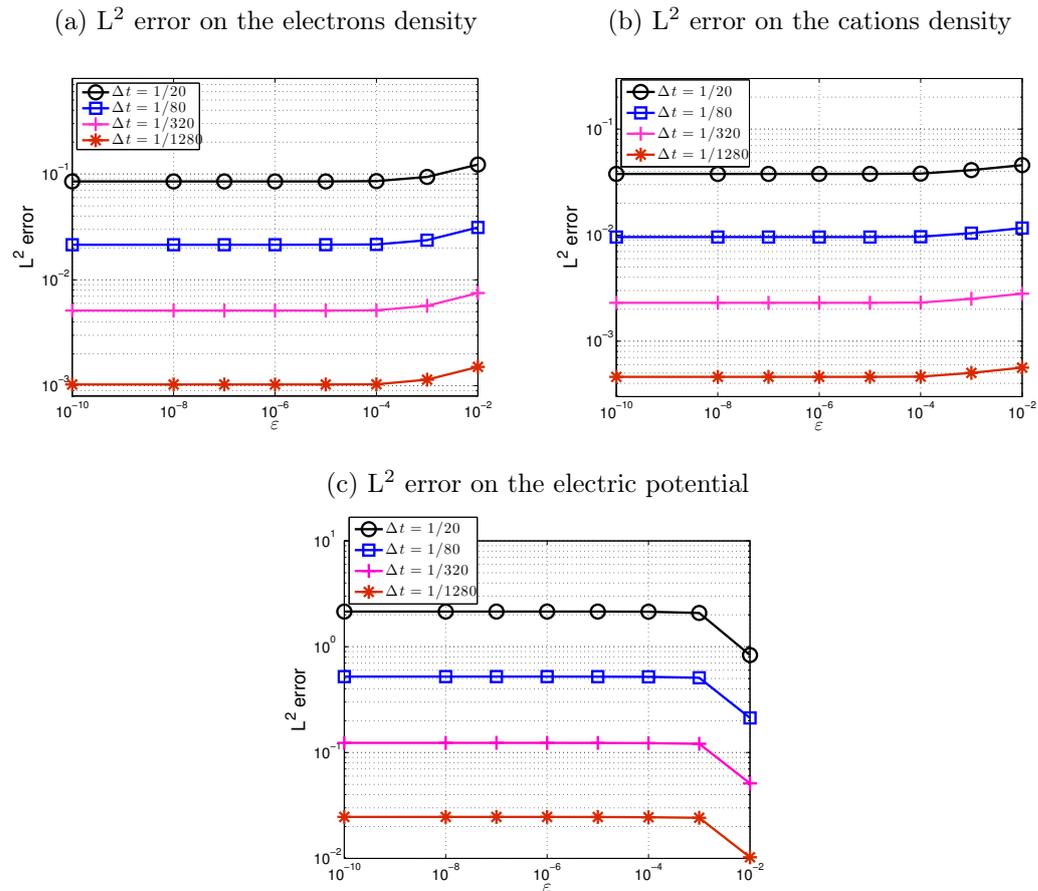


Figure 1.3: L^2 error in space with respect to ε on the densities and the electric potential for different values of time step and at final time $T = 10^{-3}$.

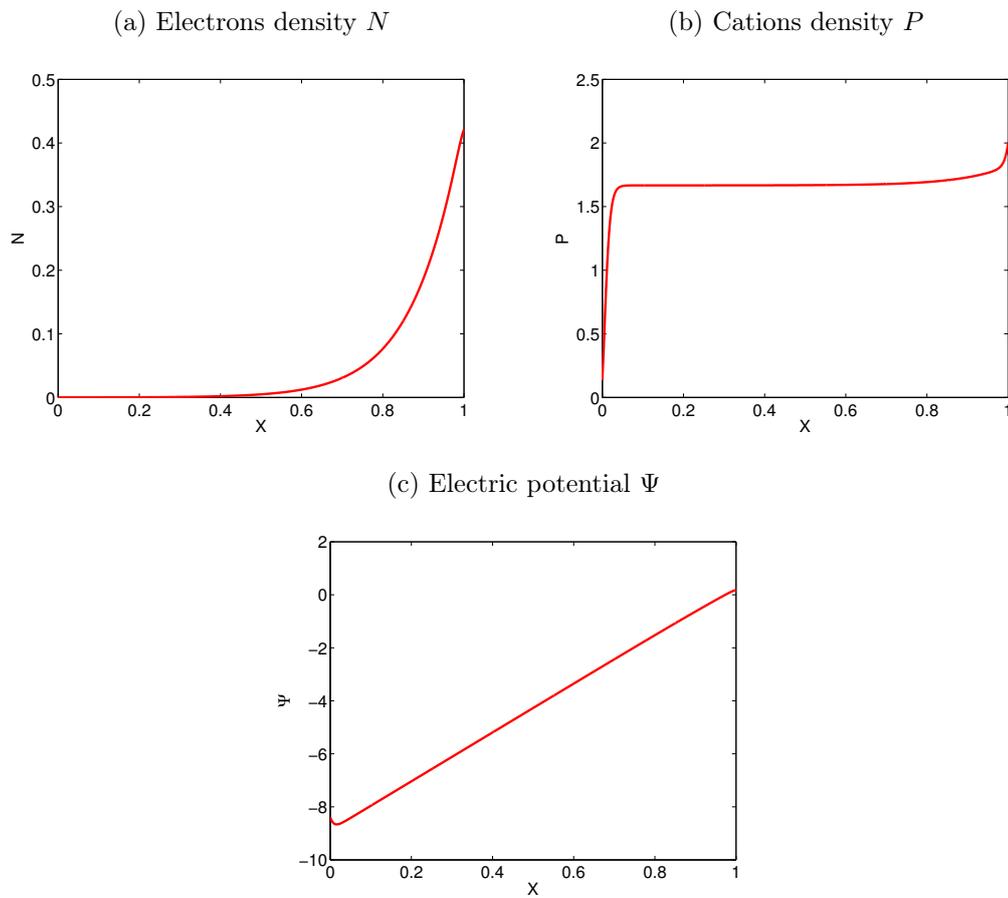


Figure 1.4: Densities and electric potential profiles for $\varepsilon = 0$, at final time $T = 1$.

Chapitre 2

Stabilité d'un schéma volumes finis
pour un modèle de dérive-diffusion
lorsque la masse d'électrons tend vers
zéro

Sommaire

2.1	Introduction	51
2.1.1	Cadre général de l'étude	51
2.1.2	Résultats existants pour le problème continu	52
2.1.3	Organisation du chapitre	57
2.2	Schémas numériques (\mathcal{S}_ε) et (\mathcal{S}_0)	58
2.2.1	Maillage et notations	58
2.2.2	Le schéma (\mathcal{S}_ε) pour le modèle (\mathcal{P}_ε)	61
2.2.3	Le schéma (\mathcal{S}_0) pour le modèle (\mathcal{P}_0)	64
2.3	Limite de (\mathcal{S}_ε) quand ε tend vers 0	68
2.4	Convergence du schéma (\mathcal{S}_0)	72
2.4.1	Estimations discrètes sur $\Psi_{h,\Delta t}$ et $P_{h,\Delta t}$	73
2.4.2	Estimation sur $\Psi_{h,\Delta t}$	73
2.4.3	Notations et résultats sur les espaces fonctionnels utilisés	79
2.4.4	Résultats de compacité	81
2.4.5	Passage à la limite	87
2.5	Expérimentations numériques	90

2.1 Introduction

2.1.1 Cadre général de l'étude

Dans le chapitre 1, nous avons étudié un schéma volumes finis pour un modèle de corrosion. Nous avons obtenu un résultat de convergence de solutions ainsi que des résultats numériques de stabilité quand le ratio des coefficients de mobilité tend vers 0. Les conditions limites qui sont de type Robin, et qui amènent un couplage supplémentaire, rendent très difficile la démonstration de cette propriété du schéma. Nous allons donc, dans ce chapitre, nous placer dans un cadre simplifié.

Nous considérons donc un modèle plus simple de plasmas non magnétisés qui se compose de deux équations de dérive-diffusion et d'une équation de Poisson, mais qui est complété de conditions au bord mixtes de type Dirichlet-Neumann. La différence principale réside donc dans les conditions au bord. Pour ce modèle, la masse d'électrons est très petite par rapport aux autres grandeurs considérées et le comportement du modèle lorsqu'elle tend vers zéro, est connu. Dans ce chapitre, nous présentons un schéma numérique ayant le même comportement lorsque la masse d'électrons tend vers zéro.

Pour le modèle continu de dérive-diffusion pour les plasmas non magnétisés, un certain nombre de résultats existent ; nous en citons quelques uns. Dans [40], A. Jüngel et Y.J. Peng donnent une hiérarchie de modèles hydrodynamiques. En particulier, ils étudient la convergence du modèle de dérive-diffusion pour les plasmas non magnétisés vers un modèle limite lorsque la masse d'électrons tend vers zéro. Dans cet article, ils montrent également la convergence du modèle limite vers une équation de Poisson lorsque la masse d'ions tend vers zéro.

Dans [41], les mêmes auteurs considèrent un modèle d'Euler-Poisson adimensionné pour les plasmas non magnétisés. En faisant tendre le temps de relaxation vers zéro, ils prouvent que celui-ci converge vers le modèle de dérive-diffusion pour les plasmas non magnétisés. Ils démontrent également un résultat semblable pour le modèle limite lorsque la masse d'électrons tend vers zéro.

Dans [42], les mêmes auteurs montrent la convergence du modèle de dérive-diffusion lorsque la longueur de Debye adimensionnée tend vers zéro. Cette limite est appelée limite quasi-neutre. Dans le cadre des semi-conducteurs, I. Gasser prouve, dans [32], un résultat similaire lorsque les conditions au bord sont de type Neumann homogènes pour un dopage nul. Ce dernier est étendu au cas d'un dopage régulier dans [33].

Chronologiquement, la convergence en temps long vers un équilibre thermique pour un système de dérive-diffusion est la première convergence à avoir été démontrée. Dans

[29], H. Gajewski et K. Gärtner montrent cette convergence avec un taux exponentiel. A. Jüngel étend cette convergence pour un modèle dégénéré avec une diffusion non linéaire dans [37] mais sans obtenir le taux exponentiel.

D'un point de vue numérique, il est important de développer des méthodes numériques préservant le comportement asymptotique en différentes limites de paramètres. De tels schémas numériques existent déjà. Dans [20], M. Chatard montre la convergence en temps long de solutions numériques associées à un modèle de dérive-diffusion pour les semi-conducteurs vers une approximation de l'équilibre thermique. Ce résultat a été complété récemment dans [5]; M. Bessemoulin-Chatard et C. Chainais-Hillairet ont obtenu le taux exponentiel. Dans [6], M. Bessemoulin-Chatard, C. Chainais-Hillairet et M.H. Vignal prouvent la stabilité d'un schéma numérique pour le modèle de dérive-diffusion lorsque la longueur de Debye adimensionnée tend vers zéro. Cependant, aucun résultat semblable n'existe dans le cas où la limite de masse d'électrons tend vers zéro. Dans ce chapitre, nous proposons donc d'utiliser le même schéma numérique que M. Bessemoulin-Chatard, C. Chainais-Hillairet et M.H. Vignal. Il s'agit d'un schéma utilisant la même discrétisation que le schéma de corrosion simplifié du chapitre 1.

Notons que le point commun des démonstrations de ces résultats de convergence est l'utilisation d'une estimation d'énergie associée à un contrôle de la dissipation d'énergie. Une telle estimation n'est pas connue pour le modèle de corrosion présenté au chapitre 1, les conditions aux limites de type Robin étant très difficiles à traiter. C'est pour cela que nous nous sommes placés ici dans le cadre des modèles de dérive-diffusion pour les plasmas non magnétisés pour lequel le schéma présenté dans [6] permet d'obtenir cette estimation.

2.1.2 Résultats existants pour le problème continu

Les résultats et les démonstrations étant similaires dans le cas continu et dans le cas discret, nous présentons maintenant plus en détails ce qui est connu dans le cas continu. Nous notons, comme précédemment, N la densité d'électrons, P celle d'ions et Ψ le potentiel électrique. Pour simplifier les notations, nous supposons que les électrons sont de charge -1 et que les cations sont de charge $+1$. Nous appelons $(\mathcal{P}_\varepsilon)$ le modèle suivant qui est constitué d'une équation de Poisson sur le potentiel

électrique et de deux équations de dérive-diffusion sur les densités :

$$-\lambda^2 \Delta \Psi = P - N, \quad \text{dans } \Omega \times (0, T), \quad (2.1a)$$

$$\partial_t P + \operatorname{div} J_P = 0, \quad J_P = -\nabla P - P \nabla \Psi, \quad \text{dans } \Omega \times (0, T), \quad (2.1b)$$

$$\varepsilon \partial_t N + \operatorname{div} J_N = 0, \quad J_N = -\nabla N + N \nabla \Psi, \quad \text{dans } \Omega \times (0, T), \quad (2.1c)$$

où Ω est un domaine borné de \mathbb{R}^q , $q = 2, 3$ et $\lambda > 0$ est la longueur de Debye adimensionnée. Le paramètre ε est la masse d'électrons, il est considéré très petit par rapport aux autres grandeurs.

Nous complétons ce modèle avec les conditions initiales suivantes :

$$P(0, x) = P_0(x), \quad N(0, x) = N_0(x), \quad \text{dans } \Omega. \quad (2.2)$$

Le bord $\Gamma = \partial\Omega$ du domaine Ω est séparé en deux parties disjointes $\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N$. Les conditions au bord sont de type Dirichlet sur Γ_D et de type Neumann homogène sur Γ_N ,

$$\Psi = \Psi^D, \quad P = P^D, \quad N = N^D \quad \text{sur } \Gamma_D \times (0, T), \quad (2.3a)$$

$$\nabla \Psi \cdot \nu = \nabla P \cdot \nu = \nabla N \cdot \nu = 0, \quad \text{sur } \Gamma_N \times (0, T), \quad (2.3b)$$

où le vecteur ν est la normale unité extérieure à Ω . Ce modèle de dérive-diffusion pour les plasmas non magnétisés ressemble fortement au modèle de corrosion présenté dans le chapitre 1. Les principales différences entre les deux modèles, sont les suivantes :

- Le domaine Ω est multidimensionnel pour le modèle de plasma contrairement au modèle de corrosion où Ω est de dimension 1.
- Les conditions au bord mixtes de type Dirichlet-Neumann remplacent les conditions de type Robin et sont plus simples à traiter.
- Les charges des espèces sont $q_P = +1$ et $q_N = -1$.
- Le modèle de plasma non magnétisé considère un dopage nul dans l'équation de Poisson.

Remarque 7. Les théorèmes présentés dans cette section sont des versions simplifiées de théorèmes démontrés dans [40]. En effet, A. Jüngel et Y.J. Peng établissent ces résultats pour une diffusion non linéaire. Comme le modèle $(\mathcal{P}_\varepsilon)$ l'indique, nous considérons dans ce chapitre une diffusion linéaire.

Dans [40], un résultat d'existence de solution pour le modèle $(\mathcal{P}_\varepsilon)$ a été démontré sous les hypothèses suivantes :

- (H1) Le domaine Ω est un sous-ensemble ouvert et borné de \mathbb{R}^2 (ou \mathbb{R}^3), $\Gamma = \Gamma_N \cup \Gamma_D$ avec $\Gamma_N \cap \Gamma_D = \emptyset$ et $m(\Gamma_D) \neq 0$,
- (H2) Les conditions initiales vérifient :
- (H2P) $P_0 \in L^\infty(\Omega)$ telle que $0 < m \leq P_0 \leq M$ p.p. sur Ω ,
- (H2N) $N_0 \in L^\infty(\Omega)$ telle que $0 < m \leq N_0 \leq M$ p.p. sur Ω ,
- (H3) Les conditions au bord N^D , P^D et Ψ^D sont les traces de certaines fonctions définies sur le domaine entier Ω , que nous notons encore N^D , P^D et Ψ^D , avec
- (H3Ψ) $\Psi^D \in H^1(\Omega)$,
- (H3P) $P^D \in L^\infty(\Omega) \cap H^1(\Omega)$ telle que $m \leq P^D \leq M$ p.p. sur Ω ,
- (H3N) $N^D \in L^\infty(\Omega) \cap H^1(\Omega)$ telle que $m \leq N^D \leq M$ p.p. sur Ω .

Théorème 2.1.1. *En supposant les hypothèses (H1)-(H3) vérifiées, le problème $(\mathcal{P}_\varepsilon)$ admet une solution faible (P, N, Ψ) telle que $P, N \in L^\infty(\Omega \times (0, T))$, $P - P^D$, $N - N^D$, $\Psi - \Psi^D \in L^2(0, T; \mathcal{V})$, avec $\mathcal{V} = \{v \in H^1(\Omega); v = 0 \text{ presque partout sur } \Gamma_D\}$ et pour tout $T > 0$.*

De plus, P et N vérifient pour presque tout $t \in [0, T]$ et $x \in \Omega$

$$0 < m \leq P(x, t), N(x, t) \leq M.$$

Notons que la définition de solution faible utilisée ici est présentée dans [40].

En faisant tendre formellement ε vers 0 dans l'équation (2.1c), nous obtenons :

$$\nabla N - N \nabla \Psi = N \nabla (\ln(N) - \Psi) = C.$$

En supposant que les conditions au bord pour N traduisent l'équilibre thermique ($\ln N^D - \Psi^D = cste$), la constante est nulle. Donc, $\log(N) - \Psi$ est une fonction constante dans $\Omega \times (0, T)$, puisque $N \geq m > 0$ d'après le Théorème 2.1.1. Sans perte de généralité, la constante d'intégration peut être choisie égale à zéro, ce qui conduit finalement à

$$N(x, t) = e^{\Psi(x, t)}, \quad \text{dans } \Omega \times (0, T). \quad (2.4)$$

Grâce à (2.4), la limite formelle du modèle $(\mathcal{P}_\varepsilon)$ est un modèle (\mathcal{P}_0) . Celui-ci se compose d'une équation de Poisson non linéaire sur Ψ et d'une équation de dérive-diffusion sur P ,

$$-\lambda^2 \Delta \Psi = P - e^\Psi, \quad \text{dans } \Omega \times (0, T), \quad (2.5a)$$

$$\partial_t P + \operatorname{div} J_P = 0, \quad J_P = -\nabla P - P \nabla \Psi, \quad \text{dans } \Omega \times (0, T). \quad (2.5b)$$

Nous complétons le modèle avec la condition initiale et les conditions au bord suivantes (issues de (2.2)-(2.3)) :

$$P(x, 0) = P_0(x), \quad \text{dans } \Omega, \quad (2.6)$$

$$\Psi = \Psi^D, \quad P = P^D \quad \text{sur } \Gamma_D \times (0, T), \quad (2.7a)$$

$$\nabla \Psi \cdot \nu = \nabla P \cdot \nu = 0, \quad \text{sur } \Gamma_N \times (0, T), \quad (2.7b)$$

Pour avoir un résultat d'existence de solution du modèle (\mathcal{P}_0) , nous avons besoin d'une nouvelle hypothèse sur Ψ au bord,

(H3 Ψ') $\Psi^D \in L^\infty(\Omega) \cap H^1(\Omega)$ telle que $m \leq e^{\Psi^D} \leq M$ p.p. sur Ω .

Nous définissons la notion de solution faible liée au modèle (\mathcal{P}_0) , celle-ci étant utilisée, dans la section 2.4.5, dans le cadre de la convergence d'une suite de solutions approchées définies par un schéma numérique vers une solution du modèle (\mathcal{P}_0) .

Définition 2.1.1. Une solution faible de (\mathcal{P}_0) est définie par : $P \in L^\infty(\Omega \times [0, T])$, $e^\Psi \in L^\infty(\Omega \times (0, T])$, $P - P^D, \Psi - \Psi^D \in L^2(0, T; \mathcal{V})$ et pour toute fonction test $\varphi \in C^\infty(\bar{\Omega} \times [0, T])$ telle que $\varphi(x, t) = 0$ pour presque tout $(x, t) \in \Gamma_D \times [0, T)$ et

$$\int_0^T \int_\Omega (P \partial_t \varphi - \nabla P \cdot \nabla \varphi - P \nabla \Psi \cdot \nabla \varphi) \, dx \, dt + \int_\Omega P_0(x) \varphi(0, x) \, dx = 0, \quad (2.8a)$$

$$\lambda^2 \int_0^T \int_\Omega \nabla \Psi \cdot \nabla \varphi \, dx \, dt = \int_0^T \int_\Omega (P - e^\Psi) \varphi \, dx \, dt. \quad (2.8b)$$

L'hypothèse (H3 Ψ') et la définition 2.1.1 nous permettent alors d'énoncer un théorème d'existence et d'unicité pour le modèle (\mathcal{P}_0) , aussi démontré dans [40] (Théorème 4.1 et Théorème 5.1).

Théorème 2.1.2. *En supposant les hypothèses (H1), (H2P), (H3P) et (H3 Ψ') vérifiées, le problème (\mathcal{P}_0) admet une unique solution faible au sens de la Définition 2.1.1. De plus, P et Ψ vérifient pour presque tout $t \in [0, T]$ et $x \in \Omega$*

$$m \leq P(x, t) \leq M, \quad m \leq e^{\Psi(x, t)} \leq M.$$

Dans [40], les auteurs ont montré théoriquement la convergence d'une solution du modèle $(\mathcal{P}_\varepsilon)$ vers une solution de (\mathcal{P}_0) , lorsque ε tend vers zéro. Pour montrer ce résultat, une condition de compatibilité liant la densité au bord N^D et le potentiel électrique au bord Ψ^D est nécessaire,

(H4) *Condition de compatibilité* : $N^D = e^{\Psi^D}$.

Cette condition signifie que la densité au bord N^D est à l'équilibre thermique. Comme nous l'avons vu elle permet d'obtenir formellement l'égalité (2.4). Elle est également utile dans la démonstration du théorème suivant, donnant la convergence d'une suite de solutions du modèle $(\mathcal{P}_\varepsilon)$ vers une solution du modèle (\mathcal{P}_0) , lorsque ε tend vers zéro.

Théorème 2.1.3. *Nous supposons les hypothèses (H1)-(H4) vérifiées.*

Soit $(N^\varepsilon, P^\varepsilon, \Psi^\varepsilon)$ une solution du modèle $(\mathcal{P}_\varepsilon)$. Alors, nous obtenons, lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$

$$P^\varepsilon \rightarrow P \text{ dans } L^2(0, T; L^2(\Omega)),$$

$$\Psi^\varepsilon \rightarrow \Psi \text{ dans } L^2(0, T; H^1(\Omega)),$$

$$N^\varepsilon \rightarrow e^\Psi \text{ dans } L^2(0, T; L^2(\Omega)),$$

où $(P, \Psi) \in L^\infty(\Omega \times (0, T))$ est l'unique solution du modèle (\mathcal{P}_0) .

Ce théorème est prouvé dans [40]. Sa preuve utilise une estimation d'énergie associée à une dissipation d'énergie. La fonction d'énergie utilisée est la suivante :

$$E(t) = \int_{\Omega} \left(H(N_\varepsilon) - H(N^D) - \log(N^D)(N_\varepsilon - N^D) + H(P_\varepsilon) - H(P^D) - \log(P^D)(P_\varepsilon - P^D) + \frac{\lambda^2}{2} |\nabla \Psi_\varepsilon - \nabla \Psi^D|^2 \right) dx, \quad (2.9)$$

où $H(x) = \int_1^x \log(s) ds = x \log(x) - x + 1$. La dissipation d'énergie associée est :

$$I(t) = \int_{\Omega} \left(\frac{1}{\varepsilon} N_\varepsilon |\nabla(\log N_\varepsilon - \Psi_\varepsilon)|^2 + P_\varepsilon |\nabla(\log P_\varepsilon + \Psi_\varepsilon)|^2 \right) dx. \quad (2.10)$$

Pour prouver rigoureusement la limite d'une suite de solutions $(N^\varepsilon)_\varepsilon$ vers e^Ψ , lorsque ε tend vers 0, l'inégalité d'énergie

$$\frac{dE}{dt}(t) + \frac{1}{2}I(t) \leq C^D, \quad (2.11)$$

est prouvée dans [40], où $C^D > 0$ est indépendante de ε . La convexité de la fonction H nous permet d'obtenir la positivité de $E(t)$, pour tout $t \geq 0$. Ce qui implique après une intégration de 2.11 sur $[0, t]$ et grâce aux hypothèses (H2) et (H3),

$$\frac{1}{2} \int_0^t I(s) ds \leq C^D.$$

Puisque $N, P \geq m > 0$, nous en déduisons que

$$m \int_0^t \int_{\Omega} |\nabla(\log N_{\varepsilon} - \Psi)|^2 dx ds \leq \int_0^t \int_{\Omega} N_{\varepsilon} |\nabla(\log N_{\varepsilon} - \Psi)|^2 dx ds \leq \varepsilon C^D.$$

Après un passage à la limite lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$ et sous la condition de compatibilité (H4), nous pouvons appliquer l'inégalité de Poincaré et montrer que $N_0(x, t) = e^{\Psi_0(x, t)}$ p.p. dans $\Omega \times (0, T)$.

Nous verrons dans la section 2.3 que la version discrète du Théorème 2.3.1 utilise les mêmes arguments et donne la même conclusion.

Dans la section suivante, nous présentons l'organisation du chapitre.

2.1.3 Organisation du chapitre

Le but de ce chapitre est de démontrer qu'une solution du schéma numérique ($\mathcal{S}_{\varepsilon}$) présenté dans [6] et associé au problème continu ($\mathcal{P}_{\varepsilon}$) converge vers une solution d'un schéma numérique (\mathcal{S}_0) associé à (\mathcal{P}_0). Le schéma numérique utilisé permet d'obtenir une estimation discrète d'énergie associée à un contrôle de la dissipation d'énergie. Comme pour le cas continu, cette estimation jouera un rôle important dans l'étude de la limite $\varepsilon \rightarrow 0$. Dans [20] et [6], une telle estimation d'énergie associée à un contrôle de la dissipation d'énergie est établie puis utilisée pour montrer différentes stabilités dans le cadre des semi-conducteurs. C'est pour cette raison que notre étude est basée sur le même schéma numérique. Il s'agit d'un schéma d'Euler implicite en temps et volumes finis en espace. Les flux de dérive-diffusion sont approchés par des flux numériques de Scharfetter-Gummel. Nous présentons plus en détail ce schéma, noté ($\mathcal{S}_{\varepsilon}$), dans la section 2.2. La discrétisation temporelle et la discrétisation des flux en flux de Scharfetter-Gummel sont les deux éléments permettant d'obtenir l'estimation d'énergie souhaitée. Cette dernière permet alors de démontrer la convergence d'une solution du schéma ($\mathcal{S}_{\varepsilon}$) vers une solution du schéma (\mathcal{S}_0) associé au problème limite (\mathcal{P}_0), lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$. Il s'agit du résultat principal de ce chapitre, celui-ci est représenté par ③ dans le diagramme présenté à la figure 2.1. Il sera prouvé dans la section 2.3. Dans la section 2.4, nous étudions la convergence d'une suite de solutions approchées par le schéma (\mathcal{S}_0) vers une solution de (\mathcal{P}_0), représentée par ④. Cette convergence nous permet d'obtenir le diagramme commutatif présenté à la figure 2.1. En effet, la convergence d'une suite de solutions de ($\mathcal{P}_{\varepsilon}$) vers une solution de (\mathcal{P}_0), lorsque ε tend vers 0, est représentée par ② et donnée par le Théorème 2.1.3 dans la section 2.1.2. De plus, la convergence d'une suite de solutions approchées donnée par le schéma ($\mathcal{S}_{\varepsilon}$)

vers une solution de $(\mathcal{P}_\varepsilon)$ est représentée par ① et donnée par le Théorème 2.2.2 dans la section 2.2.2. Cette convergence n'a pas été démontrée mais tous les éléments composant la preuve sont connus, comme nous le verrons dans la section 2.2.2.

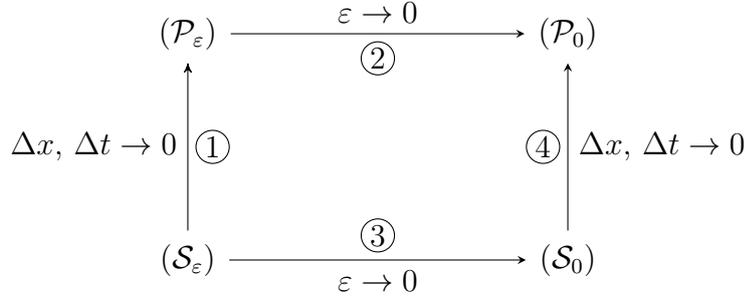


FIGURE 2.1: Diagramme de convergences des modèles $(\mathcal{P}_\varepsilon)$, (\mathcal{P}_0) et de leurs schémas numériques $(\mathcal{S}_\varepsilon)$, (\mathcal{S}_0) .

2.2 Schémas numériques $(\mathcal{S}_\varepsilon)$ et (\mathcal{S}_0)

À partir de maintenant et pour le reste de ce chapitre, nous considérons un domaine Ω polygonal ou polyédrique. Nous présentons les schémas $(\mathcal{S}_\varepsilon)$ et (\mathcal{S}_0) correspondant aux modèles précédents $(\mathcal{P}_\varepsilon)$ et (\mathcal{P}_0) . Les schémas numériques $(\mathcal{S}_\varepsilon)$ et (\mathcal{S}_0) considérés sont de types Euler implicite en temps et volumes finis en espace. De plus, les flux de convection-diffusion sont approchés par les flux numériques de Scharfetter-Gummel.

2.2.1 Maillage et notations

Un maillage admissible est donné par une famille \mathcal{T} de volumes de contrôle (polygones ou polyèdres ouverts et convexes), une famille \mathcal{E} d'arêtes (ou de faces) et une famille de points $(x_K)_{K \in \mathcal{T}}$ qui satisfait la Définition 5.1 de [25]. Cela implique que la ligne droite reliant deux centres (x_K, x_L) de cellules voisines est orthogonale à l'arête $\sigma = K|L$, comme représenté par la figure 2.2.

Dans l'ensemble des arêtes \mathcal{E} , nous distinguons les arêtes intérieures $\sigma \in \mathcal{E}_{int}$ et les arêtes de bord $\sigma \in \mathcal{E}_{ext}$. De plus, nous divisons \mathcal{E}_{ext} en $\mathcal{E}_{ext}^D \cup \mathcal{E}_{ext}^N$ où \mathcal{E}_{ext}^D est l'ensemble des arêtes de bord Dirichlet ($\sigma \in \mathcal{E}_{ext}$ et $\sigma \subset \Gamma_D$) et \mathcal{E}_{ext}^N est l'ensemble des arêtes de bord Neumann ($\sigma \in \mathcal{E}_{ext}$ et $\sigma \subset \Gamma_N$). Pour un volume de contrôle $K \in \mathcal{T}$, nous notons \mathcal{E}_K l'ensemble de ses arêtes, qui est divisé en $\mathcal{E}_K = \mathcal{E}_{K,int} \cup \mathcal{E}_{K,ext}^D \cup \mathcal{E}_{K,ext}^N$. Nous notons par d les distances dans \mathbb{R}^q et m la mesure dans \mathbb{R}^q . Nous avons besoin

de la condition de régularité suivante sur le maillage :

$$\exists \xi > 0, \quad d(x_K, \sigma) \geq \xi d(x_K, x_L) \text{ pour } K \in \mathcal{T}, \text{ pour } \sigma = K|L \in \mathcal{E}_{K,int}. \quad (2.12)$$

Elle évite que certains volumes de contrôle du maillage ne dégénèrent.

Pour tout $\sigma \in \mathcal{E}$, nous définissons le coefficient de transmissibilité $\tau_\sigma = m(\sigma)/d_\sigma$, où $d_\sigma = d(x_K, x_L)$ pour $\sigma = x_K|x_L \in \mathcal{E}_{int}$ et $d_\sigma = d(x_K, \sigma)$ pour $\sigma \in \mathcal{E}_{ext}$.

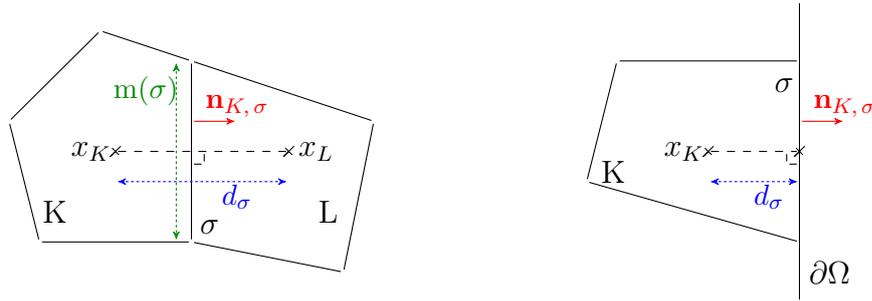


FIGURE 2.2: Maillage admissible

Dans le but de créer une discrétisation espace-temps \mathcal{D} de $\Omega \times (0, T)$, nous définissons $(\mathcal{T}, \mathcal{E}, (x_K)_{K \in \mathcal{T}})$ une discrétisation admissible de Ω de taille $h = \max_{K \in \mathcal{T}}(\text{diam}(K))$, un pas de temps Δt , $N_T \Delta t = T$ (nous choisissons Δt tel que N_T soit un entier) et une suite croissante $(t^n)_{0 \leq n \leq N_T}$, où $t^n = n \Delta t$. Pour chaque volume de contrôle $K \in \mathcal{T}$ et pour tout $\sigma \in \mathcal{E}_K$, nous définissons $\mathbf{n}_{K,\sigma}$ la normale unité extérieure à K .

Les conditions initiales (2.2) et (2.6) sont approchées par les valeurs moyennes de P_0 et N_0 sur chaque cellule K , pour $U \in \{N, P\}$,

$$U_K^0 = \frac{1}{m(K)} \int_K U_0(x) dx. \quad (2.13)$$

Les conditions numériques au bord $(N_K^D, P_K^D, \Psi_K^D)_{K \in \mathcal{T}}$ et $(N_\sigma^D, P_\sigma^D, \Psi_\sigma^D)_{\sigma \in \mathcal{E}_{ext}^D}$ sont aussi données par les valeurs moyennes de (N^D, P^D, Ψ^D) sur K et σ , pour $U \in \{N, P, \Psi\}$,

$$U_\sigma^D = \frac{1}{m(\sigma)} \int_\sigma U^D(\gamma) d\gamma, \quad \sigma \in \mathcal{E}_{ext}^D,$$

$$U_K^D = \frac{1}{m(K)} \int_K U^D(x) dx, \quad K \in \mathcal{T}.$$

Comme pour les problèmes continus, les conditions au bord sont données pour chaque

pas de temps par

$$N_\sigma^n = N_\sigma^D, P_\sigma^n = P_\sigma^D, \Psi_\sigma^n = \Psi_\sigma^D, \forall \sigma \in \mathcal{E}_{ext}^D, \forall n \in \llbracket 0, N_T \rrbracket. \quad (2.14)$$

Pour chaque vecteur $(U_K)_{K \in \mathcal{T}}$, nous introduisons la notation suivante, pour tout $K \in \mathcal{T}$ et $\sigma \in \mathcal{E}$,

$$U_{K,\sigma} = \begin{cases} U_L & \text{si } \sigma = K|L \in \mathcal{E}_{K,int}, \\ U_\sigma^D & \text{si } \sigma \in \mathcal{E}_{K,ext}^D, \\ U_K & \text{si } \sigma \in \mathcal{E}_{K,ext}^N. \end{cases}$$

De plus, pour toute fonction donnée f , pour tout $K \in \mathcal{T}$ et $\sigma \in \mathcal{E}_K$, nous définissons,

$$Df(U)_{K,\sigma} = f(U_{K,\sigma}) - f(U_K).$$

Pour simplifier les notations, nous définissons la semi-norme H^1 discrète suivante, pour tout vecteur $\mathbf{U} = ((U_K)_{K \in \mathcal{T}})$,

$$|\mathbf{U}|_{1,\mathcal{T},\Gamma_D,U^D} = \left(\sum_{\sigma \in \mathcal{E}} \tau_\sigma (DU_{K,\sigma})^2 \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Lors de l'élaboration d'un schéma volumes finis, nous devons définir des flux numériques $\mathcal{J}_{K,\sigma}$ qui sont des approximations consistantes des flux exacts à travers les arêtes $\int_\sigma \mathbf{J} \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma}$, où $\mathbf{n}_{K,\sigma}$ est la normale unité extérieure à K en σ comme représentée par la Figure 2.2. Nous imposons la conservation des flux numériques $\mathcal{J}_{K,\sigma} + \mathcal{J}_{L,\sigma} = 0$ pour $\sigma = K|L$, exigeant qu'ils s'annulent sur le bord de Neumann, $\mathcal{J}_{K,\sigma} = 0$ pour $\sigma \in \mathcal{E}_{K,\sigma}^N$. Alors la formule d'intégration par partie discrète se reformule :

$$\sum_{K \in \mathcal{T}} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{J}_{K,\sigma} U_K = - \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} \mathcal{J}_{K,\sigma} DU_{K,\sigma} + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{ext}^D} \mathcal{J}_{K,\sigma} U_{K,\sigma}. \quad (2.15)$$

Nous avons tous les éléments pour définir des schémas numériques associés aux modèles $(\mathcal{P}_\varepsilon)$ et (\mathcal{P}_0) .

2.2.2 Le schéma (\mathcal{S}_ε) pour le modèle (\mathcal{P}_ε)

2.2.2.1 Présentation du schéma

Le schéma numérique (\mathcal{S}_ε) associé au modèle (\mathcal{P}_ε) est défini, pour tout $K \in \mathcal{T}$ et $n \in \llbracket 0, N_T - 1 \rrbracket$, par :

$$-\lambda^2 \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \tau_\sigma D\Psi_{K,\sigma}^{n+1} = m(K) (P_K^{n+1} - N_K^{n+1}), \quad (2.16a)$$

$$m(K) \frac{P_K^{n+1} - P_K^n}{\Delta t} + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{F}_{K,\sigma}^{n+1} = 0, \quad (2.16b)$$

$$\varepsilon m(K) \frac{N_K^{n+1} - N_K^n}{\Delta t} + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{G}_{K,\sigma}^{n+1} = 0, \quad (2.16c)$$

avec pour tout $\sigma \in \mathcal{E}_K$

$$\mathcal{F}_{K,\sigma}^{n+1} = \tau_\sigma (B(D\Psi_{K,\sigma}^{n+1})P_K^{n+1} - B(-D\Psi_{K,\sigma}^{n+1})P_{K,\sigma}^{n+1}), \quad (2.17a)$$

$$\mathcal{G}_{K,\sigma}^{n+1} = \tau_\sigma (B(-D\Psi_{K,\sigma}^{n+1})N_K^{n+1} - B(D\Psi_{K,\sigma}^{n+1})N_{K,\sigma}^{n+1}), \quad (2.17b)$$

où B est la fonction de Bernoulli définie par :

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

Le schéma (\mathcal{S}_ε) est complété avec les conditions initiales (2.13) et les conditions au bords (2.14).

Les flux utilisés ici ont été introduits par D.L. Scharfetter et H.K. Gummel dans [49] pour l'approximation numérique des termes de convection-diffusion où la diffusion est linéaire. Dans [6], avec ce choix de flux et l'utilisation de la discrétisation Euler implicite en temps, les auteurs ont montré une estimation d'énergie qui contrôle la dissipation d'énergie. Cette estimation est une version discrète de (2.11). Comme dans la version continue, elle nous sera très utile pour montrer la convergence d'une solution du schéma (\mathcal{S}_ε) vers une solution de (\mathcal{S}_0), lorsque ε tend vers 0.

Pour simplifier les notations, nous définissons les vecteurs $\mathbf{P}^n = (P_K^n)_{K \in \mathcal{T}}$, $\mathbf{N}^n = (N_K^n)_{K \in \mathcal{T}}$ et $\mathbf{\Psi}^n = (\Psi_K^n)_{K \in \mathcal{T}}$, pour tout $n \in \llbracket 0, N_T \rrbracket$. Nous n'avons pas fait apparaître la dépendance en ε . Néanmoins, quand cela sera nécessaire, une solution de ce schéma sera notée $(\mathbf{P}_\varepsilon^n, \mathbf{N}_\varepsilon^n, \mathbf{\Psi}_\varepsilon^n)_{0 \leq n \leq N_T}$.

2.2.2.2 Théorème d'existence

L'existence d'une solution pour ce schéma $(\mathcal{S}_\varepsilon)$ a été prouvée dans [6] (Théorème 1.3) pour $\varepsilon = 1$. Sa preuve suit le même raisonnement que la preuve de la Proposition 1.1.1. La seule différence se situe dans les conditions au bord. Cependant ces dernières de type mixte (Dirichlet-Neumann) sont plus simples à gérer que les conditions de type Robin du modèle de corrosion. La preuve reste toutefois valable pour $\varepsilon > 0$.

Théorème 2.2.1. *Supposons les hypothèses (H1)-(H3) vérifiées. Soit un maillage admissible de Ω satisfaisant (2.12) et $\Delta t > 0$. Alors, il existe une solution $(\mathbf{P}_\varepsilon^n, \mathbf{N}_\varepsilon^n, \Psi_\varepsilon^n)_{0 \leq n \leq N_T}$ du schéma $(\mathcal{S}_\varepsilon)$ dont les densités vérifient les estimations L^∞ suivantes :*

$$0 < m \leq P_K^n, N_K^n \leq M, \quad \forall K \in \mathcal{T}, \forall n \in \llbracket 0, N_T \rrbracket. \quad (2.18)$$

2.2.2.3 Convergence du schéma $(\mathcal{S}_\varepsilon)$ lorsque $h, \Delta t \rightarrow 0$

Il est possible de reconstruire une solution approchée pour le modèle $(\mathcal{P}_\varepsilon)$ à partir des solutions du schéma $(\mathcal{S}_\varepsilon)$. Un résultat semblable pour le schéma (\mathcal{S}_0) et le modèle (\mathcal{P}_0) sera établi dans la section 2.4.

Nous définissons, à l'aide des vecteurs des solutions $(\mathbf{P}_\varepsilon^n, \mathbf{N}_\varepsilon^n, \Psi_\varepsilon^n)_{0 \leq n \leq N_T}$ du schéma numérique $(\mathcal{S}_\varepsilon)$, des solutions approchées de $(\mathcal{P}_\varepsilon)$. Ces solutions approchées sont des fonctions constantes par morceaux en temps et en espace. Pour un maillage \mathcal{T} de taille h et un pas de temps Δt donnés, nous définissons, pour $w = P_\varepsilon, N_\varepsilon$ ou Ψ_ε ,

$$w_h^n = \sum_{K \in \mathcal{T}} w_K^n \mathbb{1}_K, \quad \forall n \in \llbracket 0, N_T \rrbracket, \quad (2.19)$$

$$w_{h, \Delta t} = \sum_{n=0}^{N_T-1} w_h^n \mathbb{1}_{[t^n, t^{n+1})}. \quad (2.20)$$

Pour une suite de maillages et de pas de temps $(\mathcal{T}_\eta, \Delta t_\eta)_\eta$ telle que $h_\eta \rightarrow 0$ et $\Delta_\eta t \rightarrow 0$ quand $\eta \rightarrow +\infty$, nous pouvons alors définir une suite de solutions approchées $(P_{\varepsilon, \eta}, N_{\varepsilon, \eta}, \Psi_{\varepsilon, \eta})_\eta$ avec $w_\eta = w_{h_\eta, \Delta t_\eta}$ pour $w = P_\varepsilon, N_\varepsilon$ ou Ψ_ε . Le théorème suivant donne la convergence d'une telle suite de solutions approchées vers une solution faible du modèle $(\mathcal{P}_\varepsilon)$, la solution faible utilisée ici étant celle présentée dans [40].

Théorème 2.2.2. *Supposons les hypothèses (H1), (H2P), (H3P) et (H3Ψ') vérifiées et que $m(\Gamma_N) = 0$. Soit une suite de maillages admissibles $(\mathcal{T}_\eta)_\eta$ satisfaisants (2.12)*

et une suite de pas de temps $(\Delta t_\eta)_\eta$ avec $\Delta t_\eta > 0$ vérifiant $(h_\eta, \Delta t_\eta) \rightarrow (0, 0)$, lorsque η tend vers $+\infty$. Alors, à une sous-suite extraite près, quand η tend vers $+\infty$,

$$P_{\varepsilon, \eta} \rightarrow P_\varepsilon \text{ fortement dans } L^2(0, T, L^2(\Omega)),$$

$$N_{\varepsilon, \eta} \rightarrow N_\varepsilon \text{ fortement dans } L^2(0, T, L^2(\Omega)),$$

$$\Psi_{\varepsilon, \eta} \rightarrow \Psi_\varepsilon \text{ fortement dans } L^2(0, T, L^2(\Omega)),$$

où $(P_\varepsilon, N_\varepsilon, \Psi_\varepsilon) \in (L^2(0, T, H^1(\Omega)))^3$ est une solution faible du modèle $(\mathcal{P}_\varepsilon)$.

Nous ne détaillons pas la preuve de ce résultat, tous les éléments qui la constituent existant dans la littérature [4, 19]. Cette preuve suit le même raisonnement que la preuve du Théorème 2.4.1 dans la section 2.4. Pour démontrer ce résultat, des estimations sur $\Psi_{h, \Delta t}$, $P_{h, \Delta t}$ et $N_{h, \Delta t}$ sont donc nécessaires. Le lemme 4.1 dans [19] et la proposition 2 dans [4] nous donnent respectivement les estimations sur $\Psi_{h, \Delta t}$, $P_{h, \Delta t}$ et $N_{h, \Delta t}$. L'utilisation de théorèmes de compacité des suites, comme dans la section 2.4.4, permet d'obtenir la convergence souhaitée. Les passages à la limite effectués dans [19] (Théorème 5.1) et dans [4] (Théorème 1) permettent de montrer que la limite $(P_\varepsilon, N_\varepsilon, \Psi_\varepsilon) \in L^2(0, T, H^1(\Omega))^3$ est une solution faible du modèle $(\mathcal{P}_\varepsilon)$.

Remarque 8. Le théorème présenté ici n'est pas complet. En effet, nous pouvons reconstruire une suite de gradients approchés convergeant faiblement dans $L^2(0, T, L^2(\Omega))$ vers les gradients des fonctions limites du théorème 2.2.2.

2.2.2.4 Estimation d'énergie-dissipation

Comme pour le modèle $(\mathcal{P}_\varepsilon)$, il est possible d'établir une version discrète de (2.11) pour le schéma $(\mathcal{S}_\varepsilon)$. Pour cela, nous définissons les versions discrètes de (2.9) et de (2.10), introduites par exemple dans [40] et rappelées dans la section 2.1.2.

La fonction d'énergie discrète E^n du schéma $(\mathcal{S}_\varepsilon)$ est définie par

$$\begin{aligned} E^n = & \frac{1}{\varepsilon} \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) (H(N_K^n) - H(N_K^D) - \log(N_K^D)(N_K^n - N_K^D)) \\ & + \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) (H(P_K^n) - H(P_K^D) - \log(P_K^D)(P_K^n - P_K^D)) \\ & + \frac{\lambda^2}{2} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} \tau_\sigma D(\Psi^n - \Psi^D)_{K, \sigma}, \quad \forall n \in \llbracket 0, N_T - 1 \rrbracket. \end{aligned}$$

La dissipation d'entropie I^n du schéma $(\mathcal{S}_\varepsilon)$ est donnée par

$$I^n = \frac{1}{\varepsilon} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{int} \cup \mathcal{E}_{ext}^D} \tau_\sigma \min(N_K^n, N_{K,\sigma}^n) \left(D(\log N^n - \Psi^n)_{K,\sigma} \right)^2 \\ + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{int} \cup \mathcal{E}_{ext}^D} \tau_\sigma \min(P_K^n, P_{K,\sigma}^n) \left(D(\log P^n - \Psi^n)_{K,\sigma} \right)^2, \quad \forall n \in \llbracket 0, N_T \rrbracket.$$

Une estimation d'énergie discrète associée à un contrôle de la dissipation discrète d'énergie pour les solutions de $(\mathcal{S}_\varepsilon)$ peut alors être montrée.

Proposition 2.2.1. *Supposons les hypothèses (H1)-(H3) vérifiées. Soit un maillage admissible de Ω satisfaisant (2.12) et $\Delta t > 0$. Alors, il existe une constante ne dépendant que des données $\Omega, T, m, M, N^D, P^D, \Psi^D, N_0, P_0$, telle que pour tout $\varepsilon > 0$,*

$$\frac{E^{n+1} - E^n}{\Delta t} + \frac{1}{2} I^{n+1} \leq C, \quad \forall n \in \llbracket 0, N_T - 1 \rrbracket. \quad (2.21)$$

La preuve de cette proposition est faite dans [6] (théorème 1.4) pour $\varepsilon = 1$. La discrétisation du modèle $(\mathcal{P}_\varepsilon)$ par une méthode de type Euler implicite en temps et l'utilisation des flux numériques de Scharfetter-Gummel en espace sont essentielles pour arriver à montrer cette estimation.

Cette estimation est primordiale, pour démontrer la convergence d'une suite de solutions de $(\mathcal{S}_\varepsilon)$ vers une solution du schéma (\mathcal{S}_0) , le schéma associé à (\mathcal{P}_0) et présenté ci-dessous.

2.2.3 Le schéma (\mathcal{S}_0) pour le modèle (\mathcal{P}_0)

2.2.3.1 Présentation du schéma

Le schéma numérique (\mathcal{S}_0) correspondant au modèle (\mathcal{P}_0) est défini par :

$$-\lambda^2 \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \tau_\sigma D\Psi_{K,\sigma}^{n+1} = m(K) \left(P_K^{n+1} - e^{\Psi_K^{n+1}} \right), \quad K \in \mathcal{T}, \quad n \in \llbracket 0, N_T - 1 \rrbracket, \quad (2.22a)$$

$$m(K) \frac{P_K^{n+1} - P_K^n}{\Delta t} + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{F}_{K,\sigma}^{n+1} = 0, \quad K \in \mathcal{T}, \quad n \in \llbracket 0, N_T - 1 \rrbracket, \quad (2.22b)$$

avec pour tout $\sigma \in \mathcal{E}_K$

$$\mathcal{F}_{K,\sigma}^{n+1} = \tau_\sigma \left(B(D\Psi_{K,\sigma}^{n+1}) P_K^{n+1} - B(-D\Psi_{K,\sigma}^{n+1}) P_{K,\sigma}^{n+1} \right). \quad (2.23a)$$

Le schéma (\mathcal{S}_0) est complété avec les conditions initiales (2.13) et les conditions au bords (2.14).

Pour simplifier, nous n'avons pas fait intervenir le fait que $\varepsilon = 0$ dans le schéma numérique (\mathcal{S}_0). Néanmoins, une solution de ce schéma numérique sera notée $(\mathbf{P}_0^n, \mathbf{N}_0^n, \Psi_0^n)_{0 \leq n \leq N_T}$.

L'existence d'une solution pour ce schéma numérique est démontrée dans la section 2.3 (théorème 2.3.1).

2.2.3.2 Unicité de solution pour (\mathcal{S}_0)

En supposant l'existence de solutions pour le schéma numérique (\mathcal{S}_0) et des estimations L^∞ sur ces solutions, nous pouvons obtenir un résultat d'unicité pour ce schéma. Ce résultat dépend toutefois d'une condition restrictive sur le pas de temps.

Proposition 2.2.2. *Supposons les hypothèses (H1)-(H3) vérifiées. Soit un maillage admissible de Ω satisfaisant (2.12) et $\Delta t > 0$. De plus, supposons que le schéma numérique (\mathcal{S}_0) possède au moins une solution vérifiant les estimations L^∞ suivantes :*

$$m \leq P_{0,K}^n \leq M, \quad \forall n \in \llbracket 0, N_T \rrbracket, \quad (2.24a)$$

$$m \leq e^{\Psi_{0,K}^n} \leq M, \quad \forall n \in \llbracket 0, N_T \rrbracket. \quad (2.24b)$$

Si Δt vérifie :

$$\Delta t \leq \frac{16\lambda^4}{8\lambda^2(M-m) + (3M-m)^2 C_1^2}, \quad (2.25)$$

où C_1 est la constante associée à l'inégalité de Poincaré discrète, alors la solution du schéma (\mathcal{S}_0) est unique.

Démonstration. Nous utilisons ici un raisonnement par récurrence sur n . Pour $n = 0$, la solution du schéma est définie de façon unique par (2.13). Étant donné (\mathbf{P}^n, Ψ^n) pour $n \geq 0$, montrons que (2.22) admet une unique solution. Pour cela, raisonnons par l'absurde en supposant avoir deux solutions (\mathbf{P}_1, Ψ_1) et (\mathbf{P}_2, Ψ_2) .

Puisque $(\mathbf{P}_i, \Psi_i)_{i \in \{1,2\}}$ sont solutions de (2.22), en utilisant l'hypothèse de récurrence, nous obtenons pour tout $K \in \mathcal{T}$

$$-\lambda^2 \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \tau_\sigma D(\Psi_1 - \Psi_2)_{K,\sigma} = m(K) ((P_{1,K} - P_{2,K}) - (e^{\Psi_{1,K}} - e^{\Psi_{2,K}})), \quad (2.26a)$$

$$\frac{m(K)}{\Delta t} (P_{1,K} - P_{2,K}) + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} (\mathcal{F}_{1,K,\sigma} - \mathcal{F}_{2,K,\sigma}) = 0, \quad (2.26b)$$

avec

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_{1,K,\sigma} &= \tau_\sigma (\mathbb{B}(D\Psi_{1,K,\sigma})P_{1,K} - \mathbb{B}(-D\Psi_{1,K,\sigma})P_{1,K,\sigma}), \\ \mathcal{F}_{2,K,\sigma} &= \tau_\sigma (\mathbb{B}(D\Psi_{2,K,\sigma})P_{2,K} - \mathbb{B}(-D\Psi_{2,K,\sigma})P_{2,K,\sigma}).\end{aligned}$$

En multipliant (2.26b) par $(P_{1,K} - P_{2,K})$ et en sommant sur K , nous obtenons $S + T = 0$, avec

$$T = \sum_{K \in \mathcal{T}} \frac{m(K)}{\Delta t} (P_{1,K} - P_{2,K})^2,$$

et

$$S = \sum_{K \in \mathcal{T}} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} (\mathcal{F}_{1,K,\sigma} - \mathcal{F}_{2,K,\sigma}) (P_{1,K} - P_{2,K}).$$

Intéressons nous à S . En utilisant l'intégration par parties discrète (2.15) et le fait que $(P_1 - P_2)_{K,\sigma} = 0$ pour tout $\sigma \in \mathcal{E}_{K,ext}^D$, nous avons

$$S = - \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} (\mathcal{F}_{1,K,\sigma} - \mathcal{F}_{2,K,\sigma}) D (P_1 - P_2)_{K,\sigma}.$$

Grâce à la formule centrée du flux numérique donné dans [14], pour $i \in \{1, 2\}$,

$$\mathcal{F}_{i,K,\sigma}^{n+1} = \tau_\sigma \left(-D\Psi_{i,K,\sigma} \frac{P_{i,K,\sigma} + P_{i,K}}{2} - \mathbb{B}^s(D\Psi_{i,K,\sigma}) DP_{i,K,\sigma} \right),$$

où $\mathbb{B}^s = \frac{\mathbb{B}(x) + \mathbb{B}(-x)}{2}$, nous obtenons

$$\begin{aligned}-\mathcal{F}_{1,K,\sigma}^{n+1} + \mathcal{F}_{2,K,\sigma}^{n+1} &= \tau_\sigma \left(D\Psi_{1,K,\sigma} \frac{P_{1,K,\sigma} + P_{1,K}}{2} + \mathbb{B}^s(D\Psi_{1,K,\sigma}) DP_{1,K,\sigma} \right) \\ &\quad - \tau_\sigma \left(D\Psi_{2,K,\sigma} \frac{P_{2,K,\sigma} + P_{2,K}}{2} + \mathbb{B}^s(D\Psi_{2,K,\sigma}) DP_{2,K,\sigma} \right).\end{aligned}$$

Nous obtenons donc $S = S_1 + S_2 + S_3 + S_4$ avec

$$\begin{aligned}S_1 &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} \tau_\sigma D\Psi_{1,K,\sigma} (P_{1,K,\sigma} + P_{1,K} - P_{2,K,\sigma} - P_{2,K}) D (P_1 - P_2)_{K,\sigma}, \\ S_2 &= \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} \tau_\sigma \mathbb{B}^s(D\Psi_{1,K,\sigma}) \left(D (P_1 - P_2)_{K,\sigma} \right)^2, \\ S_3 &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} \tau_\sigma (D\Psi_1 - D\Psi_2)_{K,\sigma} (P_{2,K,\sigma} + P_{2,K}) D (P_1 - P_2)_{K,\sigma}, \\ S_4 &= \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} \tau_\sigma (\mathbb{B}^s(D\Psi_{1,K,\sigma}) - \mathbb{B}^s(D\Psi_{2,K,\sigma})) DP_{2,K,\sigma} D (P_1 - P_2)_{K,\sigma}.\end{aligned}$$

Commençons par minorer S_1 . Grâce à (2.15), comme $P_{1,K\sigma} - P_{2,K\sigma} = 0$ pour tout $\sigma \in \mathcal{E}_{K,ext}^D$ et en utilisant (2.22a) et (2.24), nous obtenons

$$\begin{aligned} S_1 &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} \tau_\sigma D\Psi_{1,K,\sigma} D[(P_1 - P_2)^2]_{K,\sigma} \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{K \in \mathcal{T}} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \tau_\sigma D\Psi_{1,K,\sigma} (P_{1,K} - P_{2,K})^2 \\ &= \frac{1}{2\lambda^2} \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) (P_{1,K} - P_{2,K})^2 (P_{1,K} - e^{\Psi_{1,K}}) \\ &\geq \frac{m-M}{2\lambda^2} \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) (P_{1,K} - P_{2,K})^2. \end{aligned}$$

Avant de poursuivre l'estimation de S , revenons à (2.26a). En multipliant par $\Psi_{1,K} - \Psi_{2,K}$, en sommant sur K puis par (2.15), comme $\Psi_{1,K,\sigma} - \Psi_{2,K,\sigma} = 0$ pour tout $\sigma \in \mathcal{E}_{ext}^D$, nous obtenons

$$\begin{aligned} \lambda^2 \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} \tau_\sigma \left(D(\Psi_1 - \Psi_2)_{K,\sigma} \right)^2 &= \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) (P_{1,K} - P_{2,K}) (\Psi_{1,K} - \Psi_{2,K}) \\ &\quad - \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) (e^{\Psi_{1,K}} - e^{\Psi_{2,K}}) (\Psi_{1,K} - \Psi_{2,K}). \end{aligned}$$

En utilisant la croissance de l'exponentielle, nous avons

$$\lambda^2 \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} \tau_\sigma \left(D(\Psi_1 - \Psi_2)_{K,\sigma} \right)^2 \leq \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) (P_{1,K} - P_{2,K}) (\Psi_{1,K} - \Psi_{2,K}).$$

Enfin, en utilisant l'inégalité de Cauchy-Schwarz et une inégalité de Poincaré discrète de constante C_1 , nous avons

$$\left(\sum_{\sigma \in \mathcal{E}} \tau_\sigma \left(D(\Psi_1 - \Psi_2)_{K,\sigma} \right)^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq \frac{C_1}{\lambda^2} \left(\sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) (P_{1,K} - P_{2,K})^2 \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.27)$$

Revenons à S . En utilisant (2.24) et le fait que la fonction B^s est $\frac{1}{2}$ -lipschitzienne, nous obtenons

$$|S_3 + S_4| \leq \frac{3M-m}{2} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} \tau_\sigma \left| D(\Psi_1 - D\Psi_2)_{K,\sigma} \right| \left| D(P_1 - P_2)_{K,\sigma} \right|.$$

Grâce à l'inégalité de Young et à (2.27), nous avons

$$\begin{aligned} |S_3 + S_4| &\leq \frac{(3M - m)^2}{16} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} \tau_\sigma \left(D(\Psi_1 - D\Psi_2)_{K,\sigma} \right)^2 + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} \tau_\sigma \left(D(P_1 - P_2)_{K,\sigma} \right)^2 \\ &\leq \frac{(3M - m)^2 C_1^2}{16\lambda^4} \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) (P_{1,K} - P_{2,K})^2 + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} \tau_\sigma \left(D(P_1 - P_2)_{K,\sigma} \right)^2. \end{aligned}$$

Pour finir, comme $T + S_1 + S_2 + S_3 + S_4 = 0$, nous obtenons

$$\begin{aligned} &\left(\frac{1}{\Delta t} - \frac{M - m}{2\lambda^2} - \frac{(3M - m)^2 C_1^2}{16\lambda^4} \right) \sum_{K \in \mathcal{T}} (P_{1,K} - P_{2,K})^2 \\ &\quad + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}} \tau_\sigma (B^s(D\Psi_{1,K,\sigma}) - 1) \left(D(P_1 - P_2)_{K,\sigma} \right)^2 \leq 0. \end{aligned}$$

Puisque $B^s(x) \geq 1$, $\forall x \in \mathbb{R}$, si la condition (2.25) est vérifiée, nous en déduisons

$$\sum_{K \in \mathcal{T}} (P_{1,K}^{n+1} - P_{2,K}^{n+1})^2 \leq 0,$$

ceci donne $\mathbf{P}_1 = \mathbf{P}_2$, qui implique en utilisant (2.27), $\Psi_1 = \Psi_2$. □

Dans la prochaine section, nous énonçons et démontrons la convergence d'une solution du schéma $(\mathcal{S}_\varepsilon)$ vers une solution du schéma (\mathcal{S}_0) , lorsque ε tend vers 0.

2.3 Limite de $(\mathcal{S}_\varepsilon)$ quand ε tend vers 0

Le but de notre étude est d'établir un résultat de convergence des solutions du schéma $(\mathcal{S}_\varepsilon)$ vers une solution de (\mathcal{S}_0) , lorsque ε tend vers 0. Ce résultat est un des principaux résultats de ce chapitre. Il peut être mis en lien dans le cas des modèles continus avec le Théorème 2.1.3 de la section 2.1.2. Comme pour la preuve du Théorème 2.1.3, une estimation d'énergie discrète associée à un contrôle de la dissipation d'énergie (2.21), rappelée dans la section 2.2.2.4, est nécessaire.

Théorème 2.3.1. *Supposons les hypothèses (H1)-(H4) vérifiées. Soit un maillage admissible de Ω satisfaisant (2.12) et $\Delta t > 0$. Soit $(\mathbf{N}_\varepsilon^n, \mathbf{P}_\varepsilon^n, \Psi_\varepsilon^n)_{0 \leq n \leq N_T}$ une solution du schéma $(\mathcal{S}_\varepsilon)$. Alors, lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$, pour tout $n \in \llbracket 0, N_T \rrbracket$*

$$(\mathbf{N}_\varepsilon^n, \mathbf{P}_\varepsilon^n, \Psi_\varepsilon^n) \rightarrow (e^{\Psi_0^n}, \mathbf{P}_0^n, \Psi_0^n),$$

où $(\mathbf{P}_0^n, \Psi_0^n)_{0 \leq n \leq N_T}$ est l'unique solution du schéma numérique (\mathcal{S}_0) vérifiant les estimations L^∞ suivantes, pour tout $K \in \mathcal{T}$

$$m \leq P_{0,K}^n \leq M, \quad \forall n \in \llbracket 0, N_T \rrbracket, \quad (2.28a)$$

$$m \leq e^{\Psi_{0,K}^n} \leq M, \quad \forall n \in \llbracket 0, N_T \rrbracket. \quad (2.28b)$$

Remarque 9. Soient $l = \log(m)$ et $L = \log(M)$. Grâce à la continuité de la fonction exponentielle et à l'estimation (2.28b), nous avons

$$l \leq \Psi_{0,K}^n \leq L, \quad \forall K \in \mathcal{T}, \forall n \in \llbracket 0, N_T \rrbracket. \quad (2.29)$$

Démonstration. Nous commençons par montrer, pour tout $n \in \llbracket 0, N_T \rrbracket$, la convergence des suites de vecteurs $(\mathbf{N}_\varepsilon^n)_\varepsilon$, $(\mathbf{P}_\varepsilon^n)_\varepsilon$ et $(\Psi_\varepsilon^n)_\varepsilon$, à sous-suites extraites près, vers les vecteurs \mathbf{N}_0^n , \mathbf{P}_0^n et Ψ_0^n , lorsque ε tend vers 0. Nous prouvons ensuite, pour tout $n \in \llbracket 0, N_T \rrbracket$, que $\mathbf{N}_0^n = e^{\Psi_0^n}$. Nous finissons par démontrer que $(\mathbf{P}_0^n, \Psi_0^n)_{0 \leq n \leq N_T}$ est solution du schéma numérique (\mathcal{S}_0) .

Pour établir que, pour tout $n \in \llbracket 0, N_T \rrbracket$, les suites $(\mathbf{N}_\varepsilon^n)_\varepsilon$, $(\mathbf{P}_\varepsilon^n)_\varepsilon$ et $(\Psi_\varepsilon^n)_\varepsilon$ convergent à des sous-suites extraites près, nous montrons qu'elles sont bornées. D'après l'estimation (2.18) du Théorème 2.2.1, les suites $(\mathbf{N}_\varepsilon^n)_\varepsilon$ et $(\mathbf{P}_\varepsilon^n)_\varepsilon$ sont bornées dans \mathbb{R}^θ pour tout $n \in \llbracket 0, N_T \rrbracket$. Il existe donc, pour tout $n \in \llbracket 0, N_T \rrbracket$, des sous-suites extraites encore notées $(\mathbf{N}_\varepsilon^n)_\varepsilon$ et $(\mathbf{P}_\varepsilon^n)_\varepsilon$ qui convergent vers des vecteurs notés \mathbf{N}_0^n et \mathbf{P}_0^n . Pour démontrer la convergence de la suite $(\Psi_\varepsilon^n)_\varepsilon$, pour tout $n \in \llbracket 0, N_T \rrbracket$, nous avons besoin de l'estimation (2.30) donnée par le Lemme ci-après.

Lemme 2.3.1. *Supposons les hypothèses (H1)-(H3) vérifiées. Soit un maillage admissible satisfaisant (2.12) et $\Delta t > 0$. Soit $(\mathbf{P}_\varepsilon^n, \mathbf{N}_\varepsilon^n, \Psi_\varepsilon^n)_{0 \leq n \leq N_T}$ une solution de $(\mathcal{S}_\varepsilon)$. Alors, il existe $C \in \mathbb{R}$ telle que*

$$|\Psi_\varepsilon^n|_{1, \mathcal{T}, \Gamma_D, \Psi^D} \leq C, \quad \forall n \in \llbracket 0, N_T \rrbracket. \quad (2.30)$$

La preuve de ce lemme est une conséquence directe des estimations (2.18), comme prouvé dans [18] (Lemme 4.1, estimation (4.1)). Cette estimation va nous permettre de montrer que, pour tout $n \in \llbracket 0, N_T \rrbracket$, la suite $(\Psi_\varepsilon^n)_\varepsilon$ est donc bornée dans \mathbb{R}^θ .

En effet, grâce à (2.30), au Lemme 9.4 de [25] et à (HΨ3) nous avons, pour tout $n \in \llbracket 0, N_T - 1 \rrbracket$,

$$|\Psi_\varepsilon^{n+1} - \Psi^D|_{1, \mathcal{T}, \Gamma_D, 0} \leq |\Psi_\varepsilon^{n+1}|_{1, \mathcal{T}, \Gamma_D, \Psi^D} + |\Psi^D|_{1, \mathcal{T}, \Gamma_D, \Psi^D} \leq C.$$

Par l'hypothèse (H1), le bord Γ_D est non vide. Ceci nous permet d'utiliser l'inégalité discrète de Poincaré (voir [25]) et d'obtenir, pour tout $n \in \llbracket 0, N_T - 1 \rrbracket$,

$$\sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) (\Psi_{\varepsilon, K}^{n+1} - \Psi_K^D)^2 \leq C.$$

Donc pour tout $K \in \mathcal{T}$, nous avons $m(K) (\Psi_{\varepsilon, K}^{n+1} - \Psi_K^D)^2 \leq C$. Puisque nous travaillons à maillage fixé, il existe $\underline{m} > 0$ telle que $m(K) \geq \underline{m}$, pour tout $K \in \mathcal{T}$, ce qui implique que pour tout $K \in \mathcal{T}$ et $n \in \llbracket 0, N_T - 1 \rrbracket$,

$$(\Psi_{\varepsilon, K}^{n+1} - \Psi_K^D)^2 \leq \frac{C}{\underline{m}}.$$

En utilisant (H3N) et (H4), nous obtenons pour tout $K \in \mathcal{T}$ et $n \in \llbracket 0, N_T - 1 \rrbracket$,

$$|\Psi_{\varepsilon, K}^{n+1}| \leq C_h.$$

Nous avons donc établi que pour tout $n \in \llbracket 0, N_T \rrbracket$, Ψ_ε^n est borné dans \mathbb{R}^θ . On notera que la borne dépend du maillage mais que nous travaillons à maillage fixé.

La suite $(\Psi_\varepsilon^n)_\varepsilon$ est donc bornée dans \mathbb{R}^θ , pour tout $n \in \llbracket 0, N_T \rrbracket$. Il existe alors une sous-suite encore notée $(\Psi_\varepsilon^n)_\varepsilon$ qui converge vers un vecteur noté Ψ_0^n , pour tout $n \in \llbracket 0, N_T \rrbracket$.

En effectuant un passage à la limite dans les équations (2.16b) et (2.16a) vérifiées par $(\mathbf{P}_\varepsilon^n, \mathbf{N}_\varepsilon^n, \Psi_\varepsilon^n)_{0 \leq n \leq N_T}$, lorsque ε tend vers 0, nous obtenons pour tout $K \in \mathcal{T}$ et pour tout $n \in \llbracket 0, N_T - 1 \rrbracket$,

$$-\lambda^2 \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \tau_\sigma D \Psi_{0, K, \sigma}^{n+1} = m(K) (P_{0, K}^{n+1} - N_{0, K}^{n+1}), \quad (2.31a)$$

$$m(K) \frac{P_{0, K}^{n+1} - P_{0, K}^n}{\Delta t} + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{F}_{0, K, \sigma}^{n+1} = 0. \quad (2.31b)$$

Le système (2.31) est très proche de (\mathcal{S}_0) . En montrant que $\mathbf{N}_0^n = e^{\Psi_0^n}$, pour tout $n \in \llbracket 0, N_T \rrbracket$, nous aurons $(\mathbf{P}_0^{n+1}, \Psi_0^{n+1})_{0 \leq n \leq N_T}$ solution de (\mathcal{S}_0) . Le Lemme suivant nous donne cette égalité.

Lemme 2.3.2. *Supposons les hypothèses (H1)-(H4) vérifiées. Soit un maillage admissible satisfaisant (2.12) et $\Delta t > 0$. Soit $(\mathbf{P}_\varepsilon^n, \mathbf{N}_\varepsilon^n, \Psi_\varepsilon^n)_{0 \leq n \leq N_T}$ une suite de solutions de $(\mathcal{S}_\varepsilon)$ convergeant vers $(\mathbf{P}_0^n, \mathbf{N}_0^n, \Psi_0^n)_{0 \leq n \leq N_T}$, lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$. Alors l'égalité suivante $\mathbf{N}_0^n = e^{\Psi_0^n}$ est vérifiée pour tout $n \in \llbracket 0, N_T \rrbracket$.*

Démonstration. Pour prouver ce lemme, nous utilisons comme point de départ l'inégalité d'énergie (2.21) de la même façon que pour la preuve du Théorème 2.2 dans [40].

En multipliant (2.21) par Δt et en sommant sur n , nous obtenons

$$E^{N_T} + \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t I^{n+1} \leq CT + E^0.$$

La fonction H étant convexe, nous avons $E^{N_T} \geq 0$. De plus, grâce aux hypothèses (H2) et (H3), nous obtenons

$$\frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N_T} \Delta t I^{n+1} \leq CT + E^0 \leq C.$$

On déduit de (2.18) que $\min(P_{\varepsilon, K}^{n+1}, P_{\varepsilon, K, \sigma}^{n+1}) \geq 0$ et $\min(N_{\varepsilon, K}^{n+1}, N_{\varepsilon, K, \sigma}^{n+1}) \geq m > 0$, $\forall n \in \llbracket 0, N_T - 1 \rrbracket$, $\forall K \in \mathcal{T}$ et $\forall \sigma \in \mathcal{E}_K$, ce qui implique que pour tout $n \in \llbracket 0, N_T \rrbracket$,

$$\frac{m}{\varepsilon} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{int} \cup \mathcal{E}_{ext}^D} \tau_\sigma \left(D \left(\log(N_\varepsilon^{n+1}) - \Psi_\varepsilon^{n+1} \right)_{K, \sigma} \right)^2 \leq I^{n+1}.$$

D'où nous obtenons

$$\sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{int} \cup \mathcal{E}_{ext}^D} \tau_\sigma \left(D \left(\log(N_\varepsilon^{n+1}) - \Psi_\varepsilon^{n+1} \right)_{K, \sigma} \right)^2 \leq C\varepsilon.$$

Par passage à la limite dans l'inégalité précédente, quand $\varepsilon \rightarrow 0$ et par positivité des termes de la somme, nous obtenons

$$\sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{int} \cup \mathcal{E}_{ext}^D} \tau_\sigma \left(D \left(\log(N_0^{n+1}) - \Psi_0^{n+1} \right)_{K, \sigma} \right)^2 = 0.$$

La condition de compatibilité (H4) nous permet d'utiliser l'inégalité discrète de Poincaré et d'obtenir

$$\sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) \left(\log(N_{0, K}^{n+1}) - \Psi_{0, K}^{n+1} \right)^2 = 0.$$

Nous avons donc $\mathbf{N}_0^n = e^{\Psi_0^n}$, $\forall n \in \llbracket 0, N_T \rrbracket$. □

En remplaçant \mathbf{N}_0^n dans le système (2.31) pour tout $n \in \llbracket 0, N_T \rrbracket$, nous obtenons

que la limite $(\mathbf{P}_0^n, \Psi_0^n)_{0 \leq n \leq N_T}$ est solution du schéma (\mathcal{S}_0) .

De plus, en passant à limite dans les estimations (2.18) lorsque ε tend vers 0 et en utilisant le Lemme 2.3.2, nous en déduisons (2.28). □

Remarque 10. Nous venons de montrer $(\mathbf{P}_0^n, \Psi_0^n)_{0 \leq n \leq N_T}$ est solution du schéma (\mathcal{S}_0) vérifiant (2.28). Nous pouvons donc appliquer la proposition 2.2.2 et en déduire que $(\mathbf{P}_0^n, \Psi_0^n)_{0 \leq n \leq N_T}$ est l'unique solution de (\mathcal{P}_0) . Ainsi, nous en déduisons la convergence de toute la suite $(\mathbf{P}_\varepsilon^n, \mathbf{N}_\varepsilon^n, \Psi_\varepsilon^n)_{0 \leq n \leq N_T}$.

2.4 Convergence du schéma (\mathcal{S}_0)

Cette section est consacrée à l'étude de la convergence d'une solution approchée de (\mathcal{S}_0) vers une solution du modèle (\mathcal{P}_0) . Ce résultat est similaire au Théorème 2.2.2 présenté dans la section 2.2.2.

À partir de maintenant, pour simplifier la preuve de convergence, nous supposons que $m(\Gamma_N) = 0$. Les conditions au bord pour (\mathcal{P}_0) et (\mathcal{S}_0) sont toutes de Dirichlet. Nous gardons les mêmes notations pour ces nouvelles conditions au bord.

Afin d'énoncer le théorème de convergence, nous définissons à l'aide du vecteur des solutions $(\mathbf{P}^n, \Psi^n)_{0 \leq n \leq N_T}$ du schéma numérique (\mathcal{S}_0) , des solutions approchées de (\mathcal{P}_0) . Ces solutions approchées sont des fonctions constantes par morceaux en temps et en espace. Pour un maillage \mathcal{T} de taille h et un pas de temps Δt donnés, nous définissons, pour $w = P$ ou Ψ ,

$$w_h^n = \sum_{K \in \mathcal{T}} w_K^n \mathbb{1}_K, \quad \forall n \in \llbracket 0, N_T \rrbracket, \quad (2.32)$$

$$w_{h, \Delta t} = \sum_{n=0}^{N_T-1} w_h^n \mathbb{1}_{[t^n, t^{n+1})}. \quad (2.33)$$

Pour une suite de maillages et de pas de temps $(\mathcal{T}_\eta, \Delta t_\eta)_\eta$ telle que $h_\eta \rightarrow 0$ et $\Delta t_\eta \rightarrow 0$ quand $\eta \rightarrow +\infty$, nous pouvons alors définir une suite de solutions approchées $(P_\eta, \Psi_\eta)_\eta$ avec $w_\eta = w_{h_\eta, \Delta t_\eta}$ pour $w = P$ ou Ψ . Le théorème suivant donne la convergence d'une telle suite de solutions approchées vers une solution faible du modèle (\mathcal{P}_0) au sens de la Définition 2.1.1.

Théorème 2.4.1. *Supposons les hypothèses (H1), (H2P), (H3P) et (H3Ψ') vérifiées. Soit une suite de maillages admissibles $(\mathcal{T}_\eta)_\eta$ satisfaisants (2.12) et une suite de pas*

de temps $(\Delta t_\eta)_\eta$ tels que $\Delta t_\eta > 0$ et $(h_\eta, \Delta t_\eta) \rightarrow (0, 0)$, lorsque η tend vers $+\infty$. Supposons également que $m(\Gamma_N) = 0$. Alors, à une sous-suite extraite près, quand η tend vers $+\infty$,

$$P_\eta \rightarrow P \text{ fortement dans } L^2(0, T; L^2(\Omega)),$$

et

$$\Psi_\eta \rightarrow \Psi \text{ fortement dans } L^2(0, T; L^2(\Omega)),$$

où $(P, \Psi) \in (L^2(0, T; H^1(\Omega)))^2$ est une solution faible du modèle (\mathcal{P}_0) au sens de la Définition 2.1.1. De plus, à une sous-suite extraite près, nous avons

$$\nabla_{\mathcal{T}_\eta} P_\eta \rightharpoonup \nabla P \text{ faiblement dans } L^2(0, T; L^2(\Omega)) \text{ quand } \eta \rightarrow +\infty,$$

et

$$\nabla_{\mathcal{T}_\eta} \Psi_\eta \rightharpoonup \nabla \Psi \text{ faiblement dans } L^2(0, T; L^2(\Omega)) \text{ quand } \eta \rightarrow +\infty,$$

où $(\nabla_{\mathcal{T}_\eta} P_\eta, \nabla_{\mathcal{T}_\eta} \Psi_\eta)_\eta$ est une suite de gradients approchés définis dans la section 2.4.4 par (2.46).

Pour démontrer ce Théorème, la méthode utilisée est assez classique. Nous commençons par établir certaines estimations sur les solutions approchées P_η et Ψ_η . Ensuite, nous utilisons ces estimations ainsi que certains théorèmes de compacité, pour démontrer la convergence de la suite de solutions approchées. Pour finir, nous prouvons que la limite de cette suite de solutions approchées est une solution du modèle (\mathcal{P}_0).

2.4.1 Estimations discrètes sur $\Psi_{h, \Delta t}$ et $P_{h, \Delta t}$

Nous avons besoin d'établir certaines estimations sur les solutions approchées pour montrer la convergence de celles-ci en utilisant des théorèmes de compacité des suites. Les deux paragraphes suivants énoncent et démontrent ces estimations pour $\Psi_{h, \Delta t}$ et $P_{h, \Delta t}$.

Remarque 11. Les estimations énoncées et prouvées dans cette section restent inchangées dans le cas où $m(\Gamma_N) \neq 0$. Leurs démonstrations sont également identiques.

2.4.2 Estimation sur $\Psi_{h, \Delta t}$

Proposition 2.4.1. *Supposons les hypothèses (H1), (H2P), (H3P) et (H3Ψ') vérifiées. Soit un maillage admissible de Ω satisfaisant (2.12) et $\Delta t > 0$. Alors, il existe*

une constante C réelle dépendante de Ω , M , m , λ et Ψ^D , et indépendante de Δt et h telle que

$$|\Psi_h^n|_{1,\mathcal{T},\Gamma_D,\Psi^D}^2 \leq C, \quad \forall n \in \llbracket 1, N_T \rrbracket, \quad (2.34)$$

$$\sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t |\Psi_h^{n+1}|_{1,\mathcal{T},\Gamma_D,\Psi^D}^2 \leq CT. \quad (2.35)$$

Démonstration. Nous nous concentrons, ici, sur la preuve de l'estimation (2.34), puisque l'estimation (2.35) est une conséquence directe de celle-ci. En multipliant l'équation (2.22a) par $\Psi_K^{n+1} - \Psi_K^D$ et en sommant sur K , pour tout $n \in \llbracket 0, N_T - 1 \rrbracket$, nous obtenons $A = B$, avec

$$A = -\lambda^2 \sum_{K \in \mathcal{T}} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \tau_\sigma (D\Psi_{K,\sigma}^{n+1}) (\Psi_K^{n+1} - \Psi_K^D),$$

et

$$B = \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) \left(P_K^{n+1} - e^{\Psi_K^{n+1}} \right) (\Psi_K^{n+1} - \Psi_K^D).$$

Nous nous intéressons tout d'abord à l'expression A . Grâce à l'intégration par partie discrète (2.15) et comme $(\Psi^{n+1} - \Psi^D)_{K,\sigma} = 0$ pour tout $\sigma \in \mathcal{E}_{K,ext}^D$, nous obtenons, pour tout $n \in \llbracket 0, N_T - 1 \rrbracket$,

$$A = \lambda^2 |\Psi_h^{n+1}|_{1,\mathcal{T},\Gamma_D,\Psi^D}^2 - \lambda^2 \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{int} \cup \mathcal{E}_{ext}^D} \tau_\sigma (D\Psi_{K,\sigma}^{n+1}) (D\Psi_{K,\sigma}^D).$$

L'inégalité de Young donne, pour tout $n \in \llbracket 0, N_T - 1 \rrbracket$,

$$\lambda^2 \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{int} \cup \mathcal{E}_{ext}^D} \tau_\sigma (D\Psi_{K,\sigma}^{n+1}) (D\Psi_{K,\sigma}^D) \leq \frac{\lambda^2}{2} (|\Psi_h^{n+1}|_{1,\mathcal{T},\Gamma_D,\Psi^D}^2 + |\Psi_h^D|_{1,\mathcal{T},\Gamma_D,\Psi^D}^2),$$

d'où

$$A \geq \frac{\lambda^2}{2} |\Psi_h^{n+1}|_{1,\mathcal{T},\Gamma_D,\Psi^D}^2 - \frac{\lambda^2}{2} |\Psi_h^D|_{1,\mathcal{T},\Gamma_D,\Psi^D}^2.$$

Après une inégalité de Young sur B , grâce à l'hypothèse (H3 Ψ') et à l'estimation (2.29), nous obtenons, pour tout $n \in \llbracket 0, N_T - 1 \rrbracket$,

$$\begin{aligned} B &\leq \sum_{K \in \mathcal{T}} \frac{m(K)}{2} \left(P_K^{n+1} - e^{\Psi_K^{n+1}} \right)^2 + \sum_{K \in \mathcal{T}} \frac{m(K)}{2} (\Psi_K^{n+1} - \Psi_K^D)^2 \\ &\leq 2M^2 m(\Omega) + 2 \max(|l|, |L|)^2 m(\Omega). \end{aligned}$$

Par le Lemme 9.4 de [25] et l'hypothèse (H3 Ψ'), on en déduit donc (2.34), ce qui termine la preuve de la Proposition 2.4.1. \square

Un résultat similaire est nécessaire sur $P_{h,\Delta t}$, il est donné dans le paragraphe suivant.

2.4.2.1 Estimation sur $P_{h,\Delta t}$

Proposition 2.4.2. *Supposons les hypothèses (H1), (H2P), (H3P) et (H3Ψ') vérifiées. Soit un maillage admissible satisfaisant (2.12) et $\Delta t > 0$. Alors, il existe une constante C réelle dépendante de $\Omega, M, m, \lambda, T, \Psi^D$ et P^D , et indépendante de Δt et h telle que*

$$\sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t |\mathbf{P}_h^{n+1}|_{1,\mathcal{T},\Gamma_D,P^D}^2 \leq C. \quad (2.36)$$

Démonstration. Pour établir cette estimation, nous allons utiliser la même méthode que dans [4]. La différence majeure réside dans le couplage de (2.22b) avec Ψ et donc dans la manière de gérer les termes liés à celui-ci. Nous posons

$$w_K^{n+1} = P_K^{n+1} - P_K^D, \quad \forall K \in \mathcal{T}, \forall n \in \llbracket 0, N_T \rrbracket.$$

Alors, en multipliant l'équation (2.22b) par w_K^{n+1} et en sommant sur K et n , on obtient $A + B = 0$, avec

$$A = \sum_{n=0}^{N_T-1} \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) (P_K^{n+1} - P_K^n) w_K^{n+1},$$

et

$$B = \sum_{n=0}^{N_T-1} \sum_{K \in \mathcal{T}} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \Delta t \mathcal{F}_{K,\sigma}^{n+1} w_K^{n+1}.$$

Comme $(P_K^{n+1} - P_K^n) w_K^{n+1} = \frac{1}{2} \left((P_K^{n+1} - P_K^n)^2 + (w_K^{n+1})^2 - (w_K^n)^2 \right)$, nous obtenons

$$A \geq \sum_{n=0}^{N_T-1} \sum_{K \in \mathcal{T}} \frac{m(K)}{2} (P_K^{n+1} - P_K^n)^2 - \sum_{K \in \mathcal{T}} \frac{m(K)}{2} (w_K^0)^2.$$

Grâce à l'intégration par parties (2.15) et au fait que $w_{K,\sigma}^{n+1} = 0, \forall \sigma \in \mathcal{E}_{K,ext}^D, \forall n \geq 0$, nous avons

$$B = - \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{int} \cup \mathcal{E}_{ext}^D} \mathcal{F}_{K,\sigma}^{n+1} D w_{K,\sigma}^{n+1}.$$

On écrit $B = B' - B^D$, avec

$$B' = \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{int} \cup \mathcal{E}_{ext}^D} \mathcal{F}_{K,\sigma}^{n+1} (P_K^{n+1} - P_{K,\sigma}^{n+1}),$$

et

$$B^D = - \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{int} \cup \mathcal{E}_{ext}^D} \mathcal{F}_{K,\sigma}^{n+1} (P_{K,\sigma}^D - P_K^D).$$

En utilisant la décomposition centrée du flux numérique donné dans [14],

$$\mathcal{F}_{K,\sigma}^{n+1} = \tau_\sigma \left(-D\Psi_{K,\sigma}^{n+1} \frac{P_{K,\sigma}^{n+1} + P_K^{n+1}}{2} - B^s (D\Psi_{K,\sigma}^{n+1}) DP_{K,\sigma}^{n+1} \right), \quad (2.37)$$

où $B^s = \frac{B(x) + B(-x)}{2}$, nous séparons B^D en $B^D = B_1^D + B_2^D$, avec

$$B_1^D = \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{int} \cup \mathcal{E}_{ext}^D} \tau_\sigma D\Psi_{K,\sigma}^{n+1} \frac{P_{K,\sigma}^{n+1} + P_K^{n+1}}{2} (P_{K,\sigma}^D - P_K^D),$$

et

$$B_2^D = \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{int} \cup \mathcal{E}_{ext}^D} \tau_\sigma B^s (D\Psi_{K,\sigma}^{n+1}) (P_{K,\sigma}^{n+1} - P_K^{n+1}) (P_{K,\sigma}^D - P_K^D).$$

Par (2.28),

$$|B_1^D| \leq M \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{int} \cup \mathcal{E}_{ext}^D} \tau_\sigma |D\Psi_{K,\sigma}^{n+1}| |P_{K,\sigma}^D - P_K^D|,$$

qui donne grâce à l'inégalité de Young

$$|B_1^D| \leq \frac{M}{2} \left(\sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t |\Psi_h^{n+1}|_{1,\mathcal{T},\Gamma_D,\Psi^D}^2 + \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t |\mathbf{P}_h^D|_{1,\mathcal{T},\Gamma_D,P^D}^2 \right).$$

Grâce au Lemme 9.4 de [25], à l'hypothèse (H3P) et à l'estimation (2.35), nous avons

$$|B_1^D| \leq C. \quad (2.38)$$

Maintenant, en utilisant à nouveau l'inégalité de Young, pour tout $\alpha > 0$

$$\begin{aligned} |B_2^D| &\leq \frac{\alpha}{2} \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{int} \cup \mathcal{E}_{ext}^D} \tau_\sigma (\mathbb{B}^s(D\Psi_{K,\sigma}^{n+1}))^2 (P_{K,\sigma}^{n+1} - P_K^{n+1})^2 \\ &\quad + \frac{1}{2\alpha} \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t |\mathbf{P}_h^D|_{1,\mathcal{T},\Gamma_D,P^D}^2. \end{aligned}$$

De plus, grâce à (2.29) et (H3 Ψ'), nous avons

$$|D\Psi_{K,\sigma}^{n+1}| \leq 2 \max(|l|, |L|), \quad \forall K \in \mathcal{T}, \forall \sigma \in \mathcal{E}_K,$$

et comme la fonction \mathbb{B}^s est continue sur \mathbb{R} , nous obtenons

$$(\mathbb{B}^s(D\Psi_{K,\sigma}^{n+1}))^2 \leq C.$$

On en déduit donc que

$$|B_2^D| \leq \frac{\alpha}{2} C \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t |\mathbf{P}_h^{n+1}|_{1,\mathcal{T},\Gamma_D,P^D}^2 + \frac{1}{2\alpha} \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t |\mathbf{P}_h^D|_{1,\mathcal{T},\Gamma_D,P^D}^2.$$

Grâce au Lemme 9.4 de [25] et à l'hypothèse (H3P), nous avons

$$|B_2^D| \leq \frac{\alpha}{2} C \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t |\mathbf{P}_h^{n+1}|_{1,\mathcal{T},\Gamma_D,P^D}^2 + CT. \quad (2.39)$$

Nous revenons maintenant à l'estimation de B' , en utilisant à nouveau la décomposition (2.37) de $\mathcal{F}_{K,\sigma}^{n+1}$, nous avons, $\forall n \geq 0, \forall K \in \mathcal{T}$ et $\sigma \in \mathcal{E}_K$,

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{K,\sigma}^{n+1} (P_K^{n+1} - P_{K,\sigma}^{n+1}) &= -\tau_\sigma \frac{D\Psi_{K,\sigma}^{n+1}}{2} (P_{K,\sigma}^{n+1} + P_K^{n+1}) (P_K^{n+1} - P_{K,\sigma}^{n+1}) \\ &\quad + \tau_\sigma \mathbb{B}^s(D\Psi_{K,\sigma}^{n+1}) (P_{K,\sigma}^{n+1} - P_K^{n+1})^2. \end{aligned}$$

Alors, puisque $\mathbb{B}^s(x) \geq 1, \forall x \in \mathbb{R}$, nous obtenons

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{K,\sigma}^{n+1} (P_K^{n+1} - P_{K,\sigma}^{n+1}) &\geq -\tau_\sigma \frac{D\Psi_{K,\sigma}^{n+1}}{2} (P_{K,\sigma}^{n+1} + P_K^{n+1}) (P_K^{n+1} - P_{K,\sigma}^{n+1}) \\ &\quad + \tau_\sigma (P_K^{n+1} - P_{K,\sigma}^{n+1})^2, \end{aligned}$$

d'où

$$B' \geq \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t |\mathbf{P}_h^{n+1}|_{1, \mathcal{T}, \Gamma_D, P^D}^2 - B'_1,$$

avec

$$B'_1 = \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{int} \cup \mathcal{E}_{ext}^D} \tau_\sigma \frac{D\Psi_{K,\sigma}^{n+1}}{2} (P_{K,\sigma}^{n+1} + P_K^{n+1}) (P_K^{n+1} - P_{K,\sigma}^{n+1}).$$

En utilisant l'estimation (2.28a) et l'inégalité de Young, nous avons, $\forall \alpha > 0$,

$$|B'_1| \leq \frac{M}{2} \left(\frac{1}{\alpha} \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t |\Psi_h^{n+1}|_{1, \mathcal{T}, \Gamma_D, \Psi^D}^2 + \alpha \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t |\mathbf{P}_h^{n+1}|_{1, \mathcal{T}, \Gamma_D, P^D}^2 \right).$$

Grâce à l'estimation (2.35), nous avons

$$|B'_1| \leq \frac{M}{2} \left(\frac{CT}{\alpha} + \alpha \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t |\mathbf{P}_h^{n+1}|_{1, \mathcal{T}, \Gamma_D, P^D}^2 \right). \quad (2.40)$$

Enfin, en utilisant $A + B = 0$ et les estimations (2.38), (2.39) et (2.40), nous obtenons, $\forall \alpha > 0$,

$$\begin{aligned} & \sum_{n=0}^{N_T-1} \sum_{K \in \mathcal{T}} \frac{m(K)}{2} (P_K^{n+1} - P_K^n)^2 \\ & + \left(1 - \frac{\alpha(M+C)}{2} \right) \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t |\mathbf{P}_h^{n+1}|_{1, \mathcal{T}, \Gamma_D, P^D}^2 \leq C. \end{aligned} \quad (2.41)$$

Donc pour $\alpha < \frac{2}{M+C}$, nous obtenons l'estimation (2.36). □

Remarque 12. Notons qu'une conséquence directe de (2.41) est

$$\sum_{n=0}^{N_T-1} \sum_{K \in \mathcal{T}} \frac{m(K)}{2} (P_K^{n+1} - P_K^n)^2 \leq C, \quad (2.42)$$

où C est une constante indépendante de h et Δt . Cette inégalité sera utilisée dans la section 2.4.4.2 pour prouver la compacité de la suite $(\Psi_\eta)_\eta$.

Les estimations sur $\Psi_{h,\Delta t}$ et $P_{h,\Delta t}$ étant acquises, dans la suite, nous appliquons des théorèmes de compacité pour montrer la convergence de la suite de solutions

approchées. Dans ce but, nous définissons quelques notations ainsi que des résultats utiles à l'application des théorèmes de compacité.

2.4.3 Notations et résultats sur les espaces fonctionnels utilisés

Dans le but de démontrer le Théorème 2.4.1, nous avons besoin de définir certains espaces de fonctions ainsi que certaines normes. Ceci servira de cadre pour l'application des théorèmes de compacité.

Les solutions approchées étant des fonctions constantes par morceaux en espace et en temps, nous définissons les deux espaces fonctionnels suivants.

Définition 2.4.1. Soient \mathcal{T} un maillage de taille h et Δt le pas de temps d'une discrétisation. Nous définissons l'espace $\tilde{\mathcal{H}}_{\mathcal{T}}$ des fonctions constantes par maille en espace par

$$\tilde{\mathcal{H}}_{\mathcal{T}} = \left\{ w_h : \Omega \mapsto \mathbb{R} \mid \exists (w_K)_{K \in \mathcal{T}} \in \mathbb{R}^\theta \text{ tel que } w_h(x) = \sum_{K \in \mathcal{T}} w_K \mathbf{1}_K(x) \right\}. \quad (2.43)$$

Ensuite, nous définissons l'espace $\tilde{\mathcal{H}}_{\mathcal{T}, \Delta t}$ des fonctions constantes en espace et en temps par

$$\tilde{\mathcal{H}}_{\mathcal{T}, \Delta t} = \left\{ w_{h, \Delta t} : \Omega \times [0, T] \mapsto \mathbb{R} \mid \exists (w_h^{n+1})_{0 \leq n \leq N_T-1} \in \left(\tilde{\mathcal{H}}_{\mathcal{T}} \right)^{N_T} \text{ tel que} \right. \\ \left. w_{h, \Delta t}(x, t) = \sum_{n=0}^{N_T-1} w_h^{n+1}(x) \mathbf{1}_{[t^n, t^{n+1})}(t) \right\}. \quad (2.44)$$

Nous notons $\|\cdot\|_0$ la norme usuelle sur $L^2(\Omega)$ et nous remarquons que

$$\|w_h\|_0 = \left(\sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) w_K^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad \forall w_h \in \tilde{\mathcal{H}}_{\mathcal{T}}.$$

De plus, nous définissons une norme- H_0^1 discrète sur $\tilde{\mathcal{H}}_{\mathcal{T}}$

$$|w_h|_{1, \mathcal{T}, \Gamma}^2 = \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{int}} \tau_\sigma (Dw_{K, \sigma})^2 + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{ext}^D} \tau_\sigma w_K^2, \quad \forall w_h \in \tilde{\mathcal{H}}_{\mathcal{T}},$$

et nous lui associons une norme duale

$$|w_h|_{-1; 2, \mathcal{T}, \Gamma} = \max \left\{ \int_{\Omega} w_h v_h \, dx, v_h \in \tilde{\mathcal{H}}_{\mathcal{T}} \text{ et } |v_h|_{1, \mathcal{T}, \Gamma} \leq 1 \right\}, \quad \forall w_h \in \tilde{\mathcal{H}}_{\mathcal{T}}.$$

Nous définissons également une norme discrète sur $\tilde{\mathcal{H}}_{\mathcal{T}, \Delta t}$

$$|w_{h, \Delta t}|_{0; 1, \mathcal{T}, \Gamma} = \left(\sum_{n=0}^{N_{\mathcal{T}}-1} \Delta t (|w_h^{n+1}|_{1, \mathcal{T}, \Gamma})^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad \forall w_{h, \Delta t} \in \tilde{\mathcal{H}}_{\mathcal{T}, \Delta t}.$$

Pour montrer la convergence de la suite de solutions approchées $(P_\eta, \Psi_\eta)_\eta$ construite à partir de (\mathcal{S}_0) , nous utilisons pour $(\Psi_\eta)_\eta$, le Théorème de Kolmogorov, donné par exemple par le Théorème 3.9 dans [25] et pour $(P_\eta)_\eta$, nous utilisons un Théorème de type Aubin-Simon discret (Théorème 3.4 dans [31]). Des propriétés sur les espaces fonctionnels précédents sont nécessaires pour appliquer ce dernier Théorème.

Plus précisément, les Lemmes suivants correspondent aux hypothèses (H1) et (H2) du Lemme 3.1 dans [31].

Lemme 2.4.1. *Soit une suite de maillages et de pas de temps $(\mathcal{T}_\eta, \Delta t_\eta)$ telle que $(h_\eta, \Delta t_\eta) \rightarrow (0, 0)$, lorsque η tend vers $+\infty$. Soit $(\tilde{\mathcal{H}}_{\mathcal{T}_\eta})_\eta$ la suite de sous-espaces de $L^2(\Omega)$ définis par (2.43). Soit $(w_{h_\eta})_\eta$ une suite telle que $w_{h_\eta} \in \tilde{\mathcal{H}}_{\mathcal{T}_\eta}$ pour tout η et satisfaisant*

$$\exists C > 0 \text{ telle que } \forall \eta, |w_{h_\eta}|_{1, \mathcal{T}_\eta, \Gamma} \leq C.$$

Alors, à une sous-suite extraite près, w_{h_η} converge vers w dans $L^2(\Omega)$ quand η tend vers $+\infty$.

La preuve de ce lemme est une conséquence d'un théorème de compacité de Kolmogorov (voir par exemple le Théorème 10.3 de [25]).

Lemme 2.4.2. *Soit une suite de maillages et de pas de temps $(\mathcal{T}_\eta, \Delta t_\eta)$ telle que $(h_\eta, \Delta t_\eta) \rightarrow (0, 0)$, lorsque η tend vers $+\infty$. Soit $(\tilde{\mathcal{H}}_{\mathcal{T}_\eta})_\eta$ une suite de sous-espaces de $L^2(\Omega)$ définis par (2.43). Soit $(w_{h_\eta})_\eta$ une suite telle que $w_{h_\eta} \in \tilde{\mathcal{H}}_{\mathcal{T}_\eta}$ pour tout η . Si $(w_{h_\eta})_\eta$ converge vers w dans $L^2(\Omega)$ et $|w_{h_\eta}|_{-1; 2, \mathcal{T}_\eta, \Gamma}$ converge vers 0, alors $w = 0$.*

Démonstration. Nous obtenons $w = 0$ comme conséquence de

$$\forall \varphi \in \mathcal{C}_c^\infty(\Omega), \int_{\Omega} w \varphi \, dx = 0.$$

Soit $\varphi \in \mathcal{C}_c^\infty$. Nous posons $\varphi_K = \varphi(x_K)$ et nous définissons la fonction associée $\varphi_{h_\eta} \in \tilde{\mathcal{H}}_{\mathcal{T}_\eta}$. Puisque w_{h_η} et $\varphi_{h_\eta} \in \tilde{\mathcal{H}}_{\mathcal{T}_\eta}$, on a

$$\left| \int_{\Omega} w_{h_\eta} \varphi_{h_\eta} \, dx \right| \leq |w_{h_\eta}|_{-1; 2, \mathcal{T}_\eta, \Gamma} |\varphi_{h_\eta}|_{1, \mathcal{T}_\eta, \Gamma}.$$

Grâce à la régularité de φ , nous obtenons

$$\begin{aligned} \left| \int_{\Omega} w_{h_\eta} \varphi \, dx \right| &\leq \left| \int_{\Omega} w_{h_\eta} \varphi_{h_\eta} \, dx \right| + \left| \int_{\Omega} w_{h_\eta} (\varphi - \varphi_{h_\eta}) \, dx \right| \\ &\leq |w_{h_\eta}|_{-1,2,\mathcal{T}_\eta,\Gamma} |\varphi_{h_\eta}|_{1,\mathcal{T}_\eta,\Gamma} + \|w_{h_\eta}\|_0 C_\varphi h_\eta. \end{aligned}$$

Puisque $\|w_{h_\eta}\|_0$ est bornée indépendamment de h_η , nous en déduisons $\forall \varphi \in \mathcal{C}_c^\infty$,

$$\int_{\Omega} w \varphi \, dx = \lim_{\eta \rightarrow +\infty} \int_{\Omega} w_{h_\eta} \varphi \, dx = 0,$$

et donc, $w = 0$. □

Nous pouvons maintenant appliquer les théorèmes de compacité pour obtenir la convergence de la suite de solutions approchées $(\mathcal{P}_\eta, \Psi_\eta)_\eta$.

2.4.4 Résultats de compacité

Dans cette section, nous prouvons la première partie du Théorème 2.4.1. Nous commençons par prouver la convergence de la suite $(P_\eta)_\eta$ grâce à un Théorème de compacité de type Aubin-Simon discret (Théorème 3.4 dans [31]). Pour finir, nous établissons la convergence de la suite $(\Psi_\eta)_\eta$ en utilisant un théorème classique de Kolmogorov.

2.4.4.1 Compacité de P_η

Dans la Définition 2.1.1, on a le produit $P\nabla\Psi$. Pour montrer la convergence de la suite de solutions approchées vers une solution de (\mathcal{P}_0) , nous devons donc avoir la convergence forte d'un des deux termes. Nous montrons ici la convergence forte de la suite $(P_\eta)_\eta$.

Pour prouver la compacité de la suite $(P_\eta)_\eta$, nous allons utiliser un Théorème de type Aubin-Simon discret de [31]. Dans ce but, pour chaque fonction $w_{h,\Delta t} \in \tilde{\mathcal{H}}_{\mathcal{T}}$, nous définissons une dérivée discrète en temps $\partial_{t,\mathcal{T}} w_{h,\Delta t}$ et un gradient discret $\nabla_{\mathcal{T}} w_{h,\Delta t}$. Les fonctions de $\tilde{\mathcal{H}}_{\mathcal{T}}$ sont des fonctions constantes en espace et en temps, nous définissons alors la dérivée par rapport au temps par

$$\partial_{t,\mathcal{T}} w_{h,\Delta t}(x,t) = \partial_{t,\mathcal{T}}^n w_{h,\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} (w_h^{n+1} - w_h^n), \quad \text{sur } [t^n, t^{n+1}). \quad (2.45)$$

Pour définir le gradient de ces fonctions, nous introduisons un maillage dual. Pour $K \in \mathcal{T}$ et $\sigma \in \mathcal{E}^K$, nous définissons la maille $T_{K,\sigma}$, illustrée par la Figure 2.3,

- si $\sigma \in \mathcal{E}_{K,int}$, alors $T_{K,\sigma}$ est la cellule formée par les sommets x_K , x_L et ceux de l'arête σ ,
- si $\sigma \in \mathcal{E}_{K,ext}$, alors $T_{K,\sigma}$ est la cellule formée par le sommet x_K et ceux de l'arête σ .

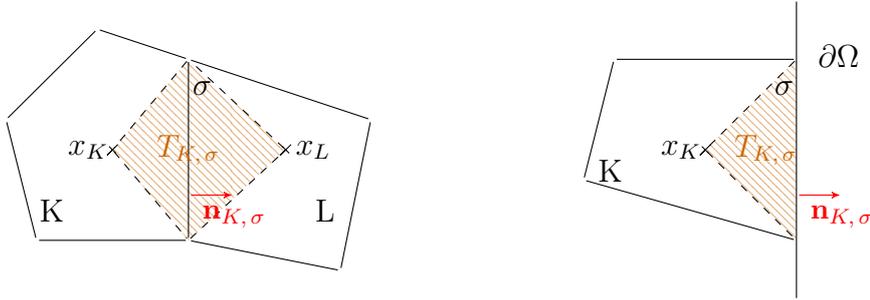


FIGURE 2.3: Maillage dual

La famille $\left((T_{K,\sigma})_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \right)_{K \in \mathcal{T}}$ définit alors une partition de Ω . Nous pouvons définir les gradients des fonctions de $\tilde{\mathcal{H}}_{\mathcal{T}}$ par

$$\nabla_{\mathcal{T}} w_{h,\Delta t}(x,t) = \frac{m(\sigma)}{m(T_{K,\sigma})} (Dw_{K,\sigma}) \mathbf{n}_{K,\sigma}, \quad \text{sur } T_{K,\sigma} \times (t^n, t^{n+1}). \quad (2.46)$$

La proposition suivante donne une estimation de la dérivée discrète en temps qui sera utile pour prouver la convergence de la suite $(P_\eta)_\eta$ grâce au Théorème de type Aubin-Simon discret de [31].

Proposition 2.4.3. *Supposons les hypothèses (H1), (H2P), (H3P) et (H3Ψ') vérifiées. Soit une suite de maillages admissibles $(\mathcal{T}_\eta)_\eta$ satisfaisants (2.12) et une suite de pas de temps $(\Delta t_\eta)_\eta$ tels que $\Delta t_\eta > 0$ et $(h_\eta, \Delta t_\eta) \rightarrow (0,0)$, lorsque η tend vers $+\infty$. Alors, il existe une constante C réelle indépendante de Δt_η et h_η telle que*

$$\sum_{n=0}^{N_{T,\eta}-1} \Delta t_\eta |\partial_{t,\tau_\eta}^n (P_\eta - P_\eta^D)|_{-1;2,\tau_\eta,\Gamma}^2 \leq C. \quad (2.47)$$

Démonstration. Soit $v_{h_\eta} \in \tilde{\mathcal{H}}_{\mathcal{T}_\eta}$. La définition donnée par (2.45) donne, pour tout

$$n \in \llbracket 0, N_{T,\eta} - 1 \rrbracket,$$

$$\int_{\Omega} \left(\partial_{t,\tau_\eta}^n (P_\eta - P_\eta^D) \right) v_{h_\eta} \, dx = \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) \frac{P_K^{n+1} - P_K^n}{\Delta t} v_K.$$

En utilisant l'équation (2.22b), l'intégration par parties discrète (2.15) et le fait que $v_\sigma = 0$, $\forall \sigma \in \mathcal{E}_{ext}^D$, nous obtenons, pour tout $n \in \llbracket 0, N_{T,\eta} - 1 \rrbracket$,

$$\int_{\Omega} \left(\partial_{t,\tau_\eta}^n (P_\eta - P_\eta^D) \right) v_{h_\eta} \, dx = \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{int} \cup \mathcal{E}_{ext}^D} \mathcal{F}_{K,\sigma}^{n+1} Dv_{K,\sigma}.$$

De plus, la reformulation (2.37) des flux donne, pour tout $n \in \llbracket 0, N_{T,\eta} - 1 \rrbracket$,

$$\left| \int_{\Omega} \left(\partial_{t,\tau_\eta}^n (P_\eta - P_\eta^D) \right) v_{h_\eta} \, dx \right| \leq A + B,$$

avec

$$A = \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{int} \cup \mathcal{E}_{ext}^D} \tau_\sigma |Dv_{K,\sigma}| \left| D\Psi_{K,\sigma}^{n+1} \frac{P_{K,\sigma}^{n+1} + P_K^{n+1}}{2} \right|,$$

et

$$B = \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{int} \cup \mathcal{E}_{ext}^D} \tau_\sigma |Dv_{K,\sigma}| |B^s(D\Psi_{K,\sigma}^{n+1})(DP_{K,\sigma}^{n+1})|.$$

En utilisant l'estimation (2.28b) puis l'hypothèse (H3 Ψ') et l'estimation (2.34), nous obtenons, pour tout $n \in \llbracket 0, N_{T,\eta} \rrbracket$,

$$A \leq M \left(\sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{int} \cup \mathcal{E}_{ext}^D} \tau_\sigma (D\Psi_{K,\sigma}^{n+1})^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{int} \cup \mathcal{E}_{ext}^D} \tau_\sigma (Dv_{K,\sigma})^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq C |v_{h_\eta}|_{1, \mathcal{T}_\eta, \Gamma}.$$

Grâce à l'hypothèse (H3 Ψ'), à la continuité de la fonction B^s et à (2.29), nous avons

$$B \leq C |P_{h_\eta}^{n+1}|_{1, \mathcal{T}_\eta, \Gamma, P^D} |v_{h_\eta}|_{1, \mathcal{T}_\eta, \Gamma}.$$

D'où :

$$\begin{aligned} \left| \int_{\Omega} \left(\partial_{t,\tau_\eta}^n (P_\eta - P_\eta^D) \right) v_{h_\eta} \, dx \right| &\leq C |v_{h_\eta}|_{1, \mathcal{T}_\eta, \Gamma} \left(1 + |P_{h_\eta}^{n+1}|_{1, \mathcal{T}_\eta, \Gamma, P^D} \right) \\ &\leq C \left(1 + |P_{h_\eta}^{n+1}|_{1, \mathcal{T}_\eta, \Gamma_D, P^D} \right), \end{aligned}$$

ce qui implique

$$\sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t |\partial_{t, \mathcal{T}_\eta}^n (P_\eta - P_\eta^D)|_{-1; 2, \mathcal{T}_\eta, \Gamma^D}^2 \leq 2C^2 T + 2C^2 \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t |P_{h_\eta}|_{1, \mathcal{T}_\eta, \Gamma^D, P^D}^2.$$

Finalement, en utilisant (2.36), on obtient (2.47). \square

Nous pouvons désormais démontrer le résultat de convergence suivant, pour la suite $(P_\eta)_\eta$.

Proposition 2.4.4. *Supposons les hypothèses (H1), (H2P), (H3P) et (H3Ψ') vérifiées. Soit une suite de maillages admissibles $(\mathcal{T}_\eta)_\eta$ satisfaisants (2.12) et une suite de pas de temps $(\Delta t_\eta)_\eta$ tels que $\Delta t_\eta > 0$ et $(h_\eta, \Delta t_\eta) \rightarrow (0, 0)$, lorsque η tend vers $+\infty$. Alors, il existe $P \in L^2(0, T; H^1(\Omega))$ tel que, à une sous-suite extraite près,*

$$\begin{aligned} P_\eta &\rightarrow P \text{ fortement dans } L^2(0, T; L^2(\Omega)) \text{ quand } \eta \rightarrow +\infty, \\ \nabla_{\mathcal{T}_\eta} P_\eta &\rightharpoonup \nabla P \text{ faiblement dans } L^2(0, T; L^2(\Omega)) \text{ quand } \eta \rightarrow +\infty. \end{aligned}$$

Démonstration. Notre but ici est d'appliquer le Théorème d'Aubin-Simon discret donné dans [31].

Nous considérons la suite $(\tilde{\mathcal{H}}_{\mathcal{T}_\eta})_\eta$ de sous-espaces de Banach de dimension finie de $(L^2(\Omega), \|\cdot\|_0)$.

$|\cdot|_{1, \mathcal{T}_\eta, \Gamma}$ et $|\cdot|_{-1; 2, \mathcal{T}_\eta, \Gamma}$ vérifient les lemmes 2.4.1 et 2.4.2 qui correspondent au Lemme 3.1 de [31] nécessaire à l'application du Théorème 3.4 de ce même article.

Nous allons appliquer le Théorème 3.4 de [31] pour la suite de solutions approchées $(P_\eta - P_\eta^D)_\eta$ ce qui permet d'avoir une suite de solutions nulle au bord.

Grâce au Lemme 9.4 de [25], à l'hypothèse (H3P) et à la Proposition 2.4.2, nous en déduisons qu'il existe une constante C réelle indépendante de Δt_η et de h_η telle que

$$\sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t |P_\eta^{n+1} - P_\eta^D|_{1, \mathcal{T}_\eta, \Gamma}^2 \leq C.$$

Cette dernière estimation ainsi que la Proposition 2.4.3 nous permettent d'appliquer le Théorème 3.4 de [31]. Donc il existe une fonction $P \in L^2(0, T; L^2(\Omega))$ telle que, à une sous-suite extraite près, $(P_\eta - P^D)$ converge fortement vers $(P - P^D)$ dans $L^2(0, T; L^2(\Omega))$.

De plus, la Proposition 2.4.2 et l'hypothèse (H3P) implique que $P - P^D \in L^2(0, T; H^1(\Omega))$. Finalement, la convergence faible de $\nabla_{\mathcal{T}_\eta} P_\eta$ dans $L^2(0, T; L^2(\Omega))$ est aussi une conséquence de la Proposition 2.4.2. \square

Nous montrons, maintenant la convergence de la suite $(\Psi_\eta)_\eta$, grâce à un Théorème de Kolmogorov.

2.4.4.2 Compacité de Ψ_η

La convergence de la suite $(\Psi_\eta)_\eta$ est obtenue comme conséquence du Théorème de compacité de Kolmogorov, qui est donné par exemple par le Théorème 3.9 dans [25].

Pour utiliser ce théorème de compacité, nous devons établir des estimations sur les translattées en espace et en temps de la suite $(\Psi_\eta)_\eta$. Pour cela, nous définissons $\widehat{\Psi}_\eta$ par $\widehat{\Psi}_\eta = \Psi_\eta - \Psi_\eta^D$ *p.p.* sur $\Omega \times (0, T)$ et $\widehat{\Psi}_\eta = 0$ *p.p.* sur $\mathbb{R}^{\theta+1} \setminus (\Omega \times (0, T))$.

En suivant la preuve du Lemme 4.2 dans [25], nous pouvons estimer les translattées en espace de $\widehat{\Psi}_\eta$ par rapport à $\sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t |\Psi_h^{n+1} - \Psi_h^D|_{1, \mathcal{T}_\eta, \Gamma}^2$. Donc l'estimation suivante sur les translattées en espace de $\widehat{\Psi}_\eta$ est une conséquence de l'estimation (2.35) et de l'hypothèse (H3 Ψ').

Lemme 2.4.3. *Supposons les hypothèses (H1), (H2P), (H3P) et (H3 Ψ') vérifiées. Soit une suite de maillages admissibles $(\mathcal{T}_\eta)_\eta$ satisfaisants (2.12) et une suite de pas de temps $(\Delta t_\eta)_\eta$ tels que $\Delta t_\eta > 0$ et $(h_\eta, \Delta t_\eta) \rightarrow (0, 0)$, lorsque η tend vers $+\infty$. Alors, il existe une constante C réelle indépendante de Δt_η et h_η telle que, pour $\nu < h_\eta$,*

$$\int_0^T \int_\Omega \left| \widehat{\Psi}_\eta(x + \nu, t) - \widehat{\Psi}_\eta(x, t) \right| dx dt \leq C |\nu| (|\nu| + h_\eta). \quad (2.48)$$

Pour compléter cette estimation, nous démontrons également l'estimation sur les translattés en temps de $\widehat{\Psi}_\eta$ suivante.

Lemme 2.4.4. *Supposons les hypothèses (H1), (H2P), (H3P) et (H3 Ψ') vérifiées. Soit une suite de maillages admissibles $(\mathcal{T}_\eta)_\eta$ satisfaisants (2.12) et une suite de pas de temps $(\Delta t_\eta)_\eta$ tels que $\Delta t_\eta > 0$ et $(h_\eta, \Delta t_\eta) \rightarrow (0, 0)$, lorsque η tend vers $+\infty$. Alors, il existe une constante C réelle indépendante de Δt_η et h_η telle que, pour $\mu < \Delta t_\eta$,*

$$\int_0^T \int_\Omega \left| \widehat{\Psi}_\eta(x, t) - \widehat{\Psi}_\eta(x, t + \mu) \right| dx dt \leq C |\mu|. \quad (2.49)$$

Démonstration. En soustrayant l'équation (2.22a) à deux instants consécutifs : $n + 1$ et $n + 2$, en multipliant par $\Psi_K^{n+1} - \Psi_K^{n+2}$ et en sommant sur K et n , nous obtenons $A = B$, avec

$$A = -\lambda^2 \sum_{n=0}^{N_T-1} \sum_{K \in \mathcal{T}} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \tau_\sigma (D\Psi_{K,\sigma}^{n+2} - D\Psi_{K,\sigma}^{n+1}) (\Psi_K^{n+2} - \Psi_K^{n+1}),$$

et

$$B = \sum_{n=0}^{N_T-1} \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) \left((P_K^{n+2} - P_K^{n+1}) - \left(e^{\Psi_K^{n+2}} - e^{\Psi_K^{n+1}} \right) \right) (\Psi_K^{n+2} - \Psi_K^{n+1}).$$

Intéressons nous, tout d'abord, à A . Par l'intégration par parties discrète (2.15) et grâce à $(\Psi^{n+2} - \Psi^{n+1})_{K,\sigma} = 0, \forall \sigma \in \mathcal{E}_{K,ext}^D$, nous avons

$$A = \lambda^2 \sum_{n=0}^{N_T-1} |\Psi_h^{n+2} - \Psi_h^{n+1}|_{1,\mathcal{T}_\eta,\Gamma}^2.$$

Passons maintenant à B . En utilisant la croissance de la fonction exponentielle, nous obtenons

$$B \leq \sum_{n=0}^{N_T-1} \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) (P_K^{n+2} - P_K^{n+1}) (\Psi_K^{n+2} - \Psi_K^{n+1}).$$

Alors, l'inégalité de Young et l'inégalité de Poincaré discrète de constante $C_1 > 0$ donnent

$$B \leq \sum_{n=0}^{N_T-1} \left(\sum_{K \in \mathcal{T}} \frac{m(K)C_1}{2\lambda^2} (P_K^{n+2} - P_K^{n+1})^2 + \frac{\lambda^2}{2} |\Psi_h^{n+2} - \Psi_h^{n+1}|_{1,\mathcal{T},\Gamma}^2 \right).$$

Enfin, la remarque 12 nous donne

$$\sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t |\Psi_h^{n+2} - \Psi_h^{n+1}|_{1,\mathcal{T},\Gamma}^2 \leq C,$$

où C est une constante indépendante de μ et Δt_η . De la même façon que pour la preuve du Lemme 4.6 dans [25], nous pouvons obtenir l'estimation suivante et donc le résultat souhaité,

$$\int_0^{T-\mu} \int_\Omega \left| \widehat{\Psi}_\eta(x,t) - \widehat{\Psi}_\eta(x,t+\mu) \right| dx dt \leq |\mu| \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t |\Psi_h^{n+2} - \Psi_h^{n+1}|_{1,\mathcal{T},\Gamma}^2.$$

□

Finalement, nous déduisons des lemmes 2.4.3 et 2.4.4, le résultat de convergence suivant, pour la suite $(\Psi_\eta)_\eta$.

Proposition 2.4.5. *Supposons les hypothèses (H1), (H2P), (H3P) et (H3Ψ') vérifiées. Soit une suite de maillages admissibles $(\mathcal{T}_\eta)_\eta$ satisfaisants (2.12) et une suite de*

pas de temps $(\Delta t_\eta)_\eta$ tels que $\Delta t_\eta > 0$ et $(h_\eta, \Delta t_\eta) \rightarrow (0, 0)$, lorsque η tend vers $+\infty$. Alors, il existe $\Psi \in L^2(0, T; H^1(\Omega))$ tel que, à une sous-suite extraite près,

$$\begin{aligned} \Psi_\eta &\rightarrow \Psi \text{ fortement dans } L^2(0, T; L^2(\Omega)) \text{ quand } \eta \rightarrow +\infty, \\ \nabla_{\tau_\eta} \Psi_\eta &\rightharpoonup \nabla \Psi \text{ faiblement dans } L^2(0, T; L^2(\Omega)) \text{ quand } \eta \rightarrow +\infty. \end{aligned}$$

Démonstration. En utilisant les estimations (2.48) et (2.49) et en appliquant le Théorème de Kolmogorov, donné par exemple par le Théorème 3.9 dans [25], nous obtenons la convergence forte de $(\Psi_\eta - \Psi^D)_\eta$ vers $(\Psi - \Psi^D)$ dans $L^2(0, T; L^2(\Omega))$. De plus, le Lemme 9.4 de [25], l'hypothèse (H3 Ψ') et la Proposition 2.4.1 implique que $\Psi - \Psi^D \in L^2(0, T; H^1(\Omega))$.

Le résultat sur $\nabla_{\tau_\eta} \Psi_\eta$ est prouvé dans [18]. \square

Maintenant que nous avons montré la convergence de la suite de solutions approchées, nous montrons que sa limite est bien solution du modèle (\mathcal{P}_0).

2.4.5 Passage à la limite

Nous finissons cette section par la preuve de la deuxième partie du Théorème 2.4.1, la limite (P, Ψ) définie dans les Propositions 2.4.4 et 2.4.5 est solution du modèle (\mathcal{P}_0). Pour cela nous suivons la méthode utilisée dans [4, 18] et au chapitre 1.

Pour commencer, nous prouvons que (P, Ψ) satisfait (2.8a).

Pour $\varphi \in \mathcal{C}^\infty(\bar{\Omega} \times [0, T])$ telle que $\varphi(t, x) = 0$ pour tout $(t, x) \in \Gamma_D \times [0, T]$, nous définissons

$$\begin{aligned} A_{10}(\eta) &= - \left(\int_0^T \int_\Omega P_\eta(x, t) (\partial_t \varphi(x, t)) \, dx \, dt + \int_\Omega P_\eta(x, 0) \varphi(x, 0) \, dx \right), \\ A_{20}(\eta) &= \int_0^T \int_\Omega (\nabla_{\tau_\eta} P_\eta(x, t)) \cdot \nabla \varphi(x, t) \, dx \, dt, \\ A_{30}(\eta) &= \int_0^T \int_\Omega P_\eta(x, t) (\nabla_{\tau_\eta} \Psi_\eta(x, t)) \cdot \nabla \varphi(x, t) \, dx \, dt, \\ \varepsilon_A(\eta) &= -A_{10}(\eta) - A_{20}(\eta) - A_{30}(\eta). \end{aligned}$$

Grâce aux Propositions 2.4.4 et 2.4.5, nous avons

$$\varepsilon_A(\eta) \xrightarrow{\eta \rightarrow +\infty} \int_0^T \int_\Omega P (\partial_t \varphi) \, dx \, dt + \int_\Omega P(x, 0) \varphi(x, 0) \, dx + \int_0^T \int_\Omega J_P \cdot \nabla \varphi \, dx \, dt.$$

En multipliant le schéma (2.22b) par $\Delta t \varphi_K^n$, où $\varphi_K^n = \varphi(t^n, x_K)$, en sommant sur

K et n et en utilisant la décomposition des flux (2.37), nous obtenons

$$A_1(\eta) + A_2(\eta) + A_3(\eta) = 0,$$

avec

$$\begin{aligned} A_1(\eta) &= \sum_{n=0}^{N_T-1} \sum_{K \in \mathcal{T}} m(K) (P_K^{n+1} - P_K^n) \varphi_K^n \\ &= - \sum_{n=0}^{N_T-1} \sum_{K \in \mathcal{T}} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_K P_K^{n+1} \partial_t \varphi(x_K, t) \, dx \, dt - \sum_{K \in \mathcal{T}} \int_K P_K^0 \varphi(x_K, 0) \, dx, \\ A_2(\eta) &= - \sum_{n=0}^{N_T-1} \sum_{K \in \mathcal{T}} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \Delta t \tau_\sigma B^s(D\Psi_{K,\sigma}^{n+1}) (P_{K,\sigma}^{n+1} - P_{K,\sigma}^n) \varphi_K^n, \\ A_3(\eta) &= - \sum_{n=0}^{N_T-1} \sum_{K \in \mathcal{T}} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \Delta t \tau_\sigma D\Psi_{K,\sigma}^{n+1} \frac{P_{K,\sigma}^{n+1} + P_{K,\sigma}^n}{2} \varphi_K^n. \end{aligned}$$

Il suffit donc de montrer que $\varepsilon_A(\eta) \xrightarrow{\eta \rightarrow +\infty} 0$ pour prouver que (P, Ψ) vérifie (2.8a).

Pour cela, nous démontrons que $|A_i(\eta) - A_{i0}(\eta)| \xrightarrow{\eta \rightarrow +\infty} 0$.

Comme dans [4], nous avons

$$|A_1(\eta) - A_{10}(\eta)| \leq (T+1)m(\Omega)M\|\varphi\|_{C^2(\Omega \times (0,T))} h_\eta \xrightarrow{\eta \rightarrow +\infty} 0.$$

Par l'intégration par parties discrète (2.15) et le fait que $\varphi_{K,\sigma}^n = 0$ pour tout $\sigma \in \mathcal{E}_{K,ext}^D$, nous réécrivons $A_2(\eta) = A_{21}(\eta) + A_{22}(\eta)$, avec

$$\begin{aligned} A_{21}(\eta) &= \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{int}} \tau_\sigma D P_{K,\sigma}^{n+1} D \varphi_{K,\sigma}^n, \\ A_{22}(\eta) &= \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{int}} \tau_\sigma (B^s(D\Psi_{K,\sigma}^{n+1}) - 1) D P_{K,\sigma}^{n+1} D \varphi_{K,\sigma}^n. \end{aligned}$$

Nous avons

$$A_{20}(\eta) = \sum_{n=0}^{N_T-1} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{int}} \frac{m(\sigma)}{m(T_{K,\sigma})} D P_{K,\sigma}^{n+1} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{T_{K,\sigma}} \nabla \varphi(x, t) \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} \, dx \, dt.$$

En utilisant les mêmes calculs que dans [4], nous pouvons déduire de (2.36) que

$$|A_{21}(\eta) - A_{20}(\eta)| \xrightarrow{\eta \rightarrow +\infty} 0.$$

Puisque B^s est une fonction $\frac{1}{2}$ -lipschitzienne et égale à 1 en 0, nous avons

$$|A_{22}(\eta)| \leq \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{int}} \frac{\tau_\sigma}{2} |D\Psi_{K,\sigma}^{n+1}| |DP_{K,\sigma}^{n+1}| |D\varphi_{K,\sigma}^n|.$$

Alors, en utilisant la régularité de φ , l'inégalité de Cauchy-Schwarz et les estimations (2.35) et (2.36), nous obtenons

$$|A_{22}(\eta)| \leq C \|\varphi\|_{C^1(\Omega \times (0,T))} h_\eta \xrightarrow{\eta \rightarrow +\infty} 0.$$

En procédant comme dans [4], par intégration par parties et puisque $\varphi_{K,\sigma}^n = 0$ pour tout $\sigma \in \mathcal{E}_{K,ext}^D$, nous pouvons réécrire $A_3(\eta) = A_{31}(\eta) + A_{32}(\eta)$, avec

$$A_{31}(\eta) = - \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{int}} \tau_\sigma D\Psi_{K,\sigma} \frac{DP_{K,\sigma}^{n+1}}{2} D\varphi_{K,\sigma}^n,$$

$$A_{32}(\eta) = - \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{int}} \tau_\sigma D\Psi_{K,\sigma} P_K^{n+1} D\varphi_{K,\sigma}^n.$$

Nous réécrivons également $A_{30}(\eta) = A_{301}(\eta) + A_{302}(\eta)$, avec

$$A_{301}(\eta) = - \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{int}} m(\sigma) D\Psi_{K,\sigma} DP_{K,\sigma}^{n+1} \frac{1}{m(T_{K,\sigma})} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{T_{K,\sigma} \cap L} \varphi \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} dx dt,$$

$$A_{302}(\eta) = - \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{int}} m(\sigma) D\Psi_{K,\sigma} P_K^{n+1} \frac{1}{m(T_{K,\sigma})} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{T_{K,\sigma}} \varphi \cdot \mathbf{n}_{K,\sigma} dx dt.$$

En utilisant la régularité de φ , il existe une constante C_φ indépendante de h_η telle que

$$|A_{32}(\eta) - A_{302}(\eta)| \leq C_\varphi h_\eta \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{int}} m(\sigma) P_K^{n+1} D\Psi_{K,\sigma}^{n+1}.$$

Grâce à l'estimation (2.28), à une inégalité de Cauchy-Schwarz et aux estimations (2.35) et (2.36), nous obtenons

$$|A_{32}(\eta) - A_{302}(\eta)| \leq CC_\varphi h_\eta \xrightarrow{\eta \rightarrow +\infty} 0.$$

De plus, nous avons

$$\begin{aligned} |A_{31}(\eta)| &\leq \frac{h_\eta}{2} \|\varphi\|_{C^1(\Omega \times (0, T))} \sum_{n=0}^{N_T-1} \Delta t \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_{int}} \tau_\sigma D\Psi_{K, \sigma} DP_{K, \sigma}^{n+1} \\ &\leq C \|\varphi\|_{C^1(\Omega \times (0, T))} h_\eta \xrightarrow{\eta \rightarrow +\infty} 0. \end{aligned}$$

De même, nous pouvons montrer que $|A_{301}(\eta)| \rightarrow 0$ lorsque $h_\eta \rightarrow 0$.

Nous venons de démontrer que $\varepsilon_A(\eta) \xrightarrow{\eta \rightarrow +\infty} 0$ et donc de prouver que (P, Ψ) vérifie (2.8a).

De manière identique à ce qui vient d'être fait, nous pouvons démontrer que (P, Ψ) satisfait (2.8b) sans aucune difficulté supplémentaire.

2.5 Expérimentations numériques

Dans cette section, nous illustrons numériquement la convergence du schéma $(\mathcal{S}_\varepsilon)$ pour différentes valeurs de ε ainsi que son comportement asymptotique lorsque ε tend vers 0. Dans le but de vérifier numériquement que la stabilité du schéma lorsque ε tend vers 0, nous considérons dans ces expérimentations, différentes valeurs de ε , $\varepsilon \in \{0, 10^{-9}, 10^{-6}, 10^{-3}, 10^{-1}\}$.

Pour les deux cas tests que nous présentons, le domaine Ω considéré est le carré $(0; 1)^2$. Puisque la solution exacte du modèle $(\mathcal{P}_\varepsilon)$ n'est pas connue, nous calculons une solution de référence sur un maillage triangulaire admissible composé de 896 triangles avec un pas de temps $\Delta t = 0.05/(10 \times 2^{10}) \approx 4.9 \cdot 10^{-6}$, pour chaque valeur de ε . Pour le modèle $(\mathcal{P}_\varepsilon)$, il existe un état stationnaire en temps long. Donc, il est important de prendre un petit temps T dans le but de calculer une solution différente de l'état stationnaire. Pour l'ensemble des figures présentées, les normes L^2 en espace sont alors considérées au temps final $T = 0.05$.

Nous proposons deux cas tests pour les expérimentations numériques. Le premier cas test entre dans le cadre de notre étude sur le modèle de dérive-diffusion des plasmas non magnétisés. Le second cas test, présent dans [6] et [13], est un cas test plus général qui est classique pour les modèles de semi-conducteurs.

Cas test 1. Nous proposons tout d'abord un cas test entrant dans le cadre du modèle de dérive-diffusion des plasmas non magnétisés. Ce cas test vérifie la condition de compatibilité au bord (H4) qui est nécessaire pour établir le Théorème 2.3.1.

Les conditions au bord vérifiant la condition de compatibilité (H4) sont les suivantes :

$$N^D(x, y) = \begin{cases} 0.9, & \forall (x, y) \in [0, 1] \times \{0\}, \\ 0.1, & \forall (x, y) \in [0, 1] \times \{1\}, \end{cases}$$

$$P^D(x, y) = \begin{cases} 0.9, & \forall (x, y) \in [0, 1] \times \{0\}, \\ 0.1, & \forall (x, y) \in [0, 1] \times \{1\}, \end{cases}$$

$$\Psi^D(x, y) = \ln(N^D(x, y)).$$

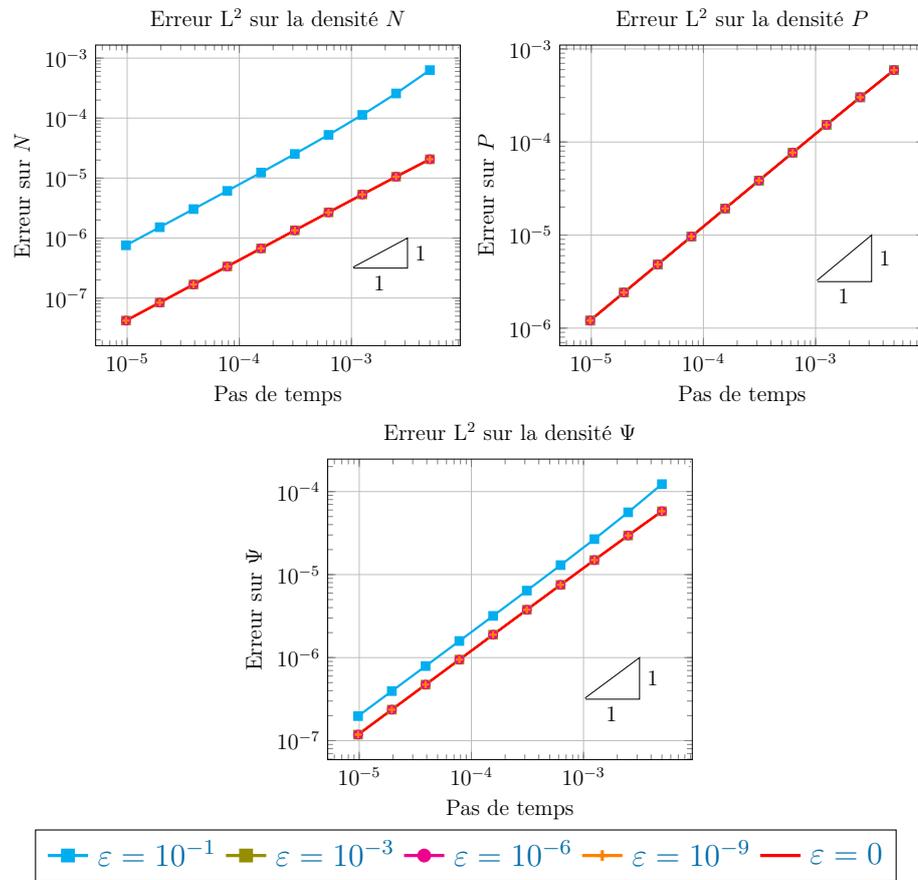
Les conditions initiales sont les suivantes :

$$N^{init}(x, y) = 0.9 - 0.8y, \quad \forall (x, y) \in (0, 1)^2,$$

$$P^{init}(x, y) = 0.9 - 0.8y, \quad \forall (x, y) \in (0, 1)^2.$$

La Figure 2.4 montre l'ordre de convergence en norme L^2 en temps pour les différentes valeurs de ε . Toutes les courbes référencées par la légende sont présentes sur les graphiques. Cependant, la superposition des courbes rend difficile la lecture. Nous pouvons, tout de même remarquer que l'ordre de convergence est indépendant de ε et que le schéma est d'ordre 1, comme escompté. Pour mieux visualiser le comportement de l'erreur L^2 en espace au temps final, nous représentons, par la Figure 2.5, cette erreur par rapport à ε pour différentes valeurs du pas de temps. La stabilité de l'erreur, lorsque ε tend vers 0, apparaît clairement sur ces figures.

Remarque 13. Nous précisons que, pour ces expérimentations numériques, nous avons utilisé $\varepsilon = 0$ dans le schéma $(\mathcal{S}_\varepsilon)$ ce qui revient à utiliser le schéma (\mathcal{S}_0) .

FIGURE 2.4: Cas test 1 : Ordre de convergence du schéma lorsque ε tend vers 0.

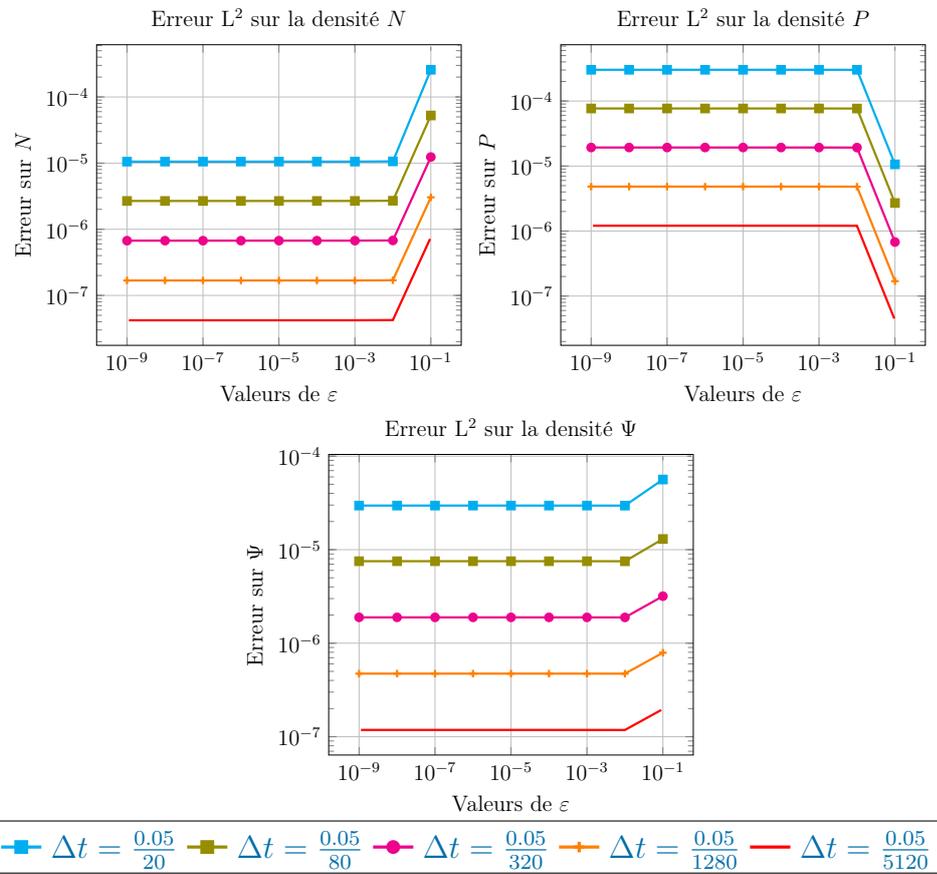


FIGURE 2.5: Cas test 1 : Étude de la précision du schéma en fonction de ε .

Cas test 2. Nous proposons un cas test classique pour les modèles de semi-conducteurs, présent dans [6] et [13]. Il est important de remarquer que ce cas test ne correspond pas exactement au modèle $(\mathcal{P}_\varepsilon)$ présenté dans la section 2.1.2, puisqu'il y a un terme de dopage dans l'équation de Poisson. Ce cas test a une géométrie correspondant à une jonction P-N (voir la figure 2.6). Le dopage est donné par la fonction C suivante :

$$C(x, y) = \begin{cases} -0.8, & \forall (x, y) \in (0, 0.5) \times (0.5, 1), \\ 0.8, & \forall (x, y) \in \Omega \setminus ((0, 0.5) \times (0.5, 1)). \end{cases}$$

Les conditions au bord sont les suivantes :

$$N^D(x, y) = \begin{cases} 0.9, & \forall (x, y) \in [0, 1] \times \{0\}, \\ 0.1, & \forall (x, y) \in [0, 0.25] \times \{1\}, \end{cases}$$

$$P^D(x, y) = \begin{cases} 0.1, & \forall (x, y) \in [0, 1] \times \{0\}, \\ 0.9, & \forall (x, y) \in [0, 0.25] \times \{1\}, \end{cases}$$

$$\Psi^D(x, y) = \frac{\ln(N^D(x, y)) - \ln(P^D(x, y))}{2}.$$

On notera qu'elles ne vérifient pas la condition de compatibilité (H4).

Les conditions initiales sont les suivantes :

$$N^{init}(x, y) = \frac{1 + C(x, y)}{2}, \quad \forall (x, y) \in (0, 1)^2,$$

$$P^{init}(x, y) = \frac{1 - C(x, y)}{2}, \quad \forall (x, y) \in (0, 1)^2.$$

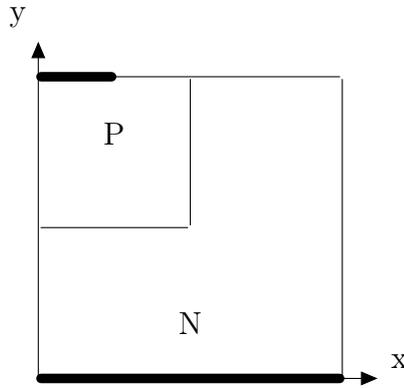


FIGURE 2.6: Géométrie d'une diode jonction P-N.

Les figures 2.7 et 2.8 montrent que les courbes d'erreur L^2 se comportent de la

même façon que celles du cas test 1. Il semble, au vu des résultats, que la stabilité du schéma numérique, lorsque que ε tend vers 0, ne dépende ni de la condition de compatibilité (H4) ni du dopage.

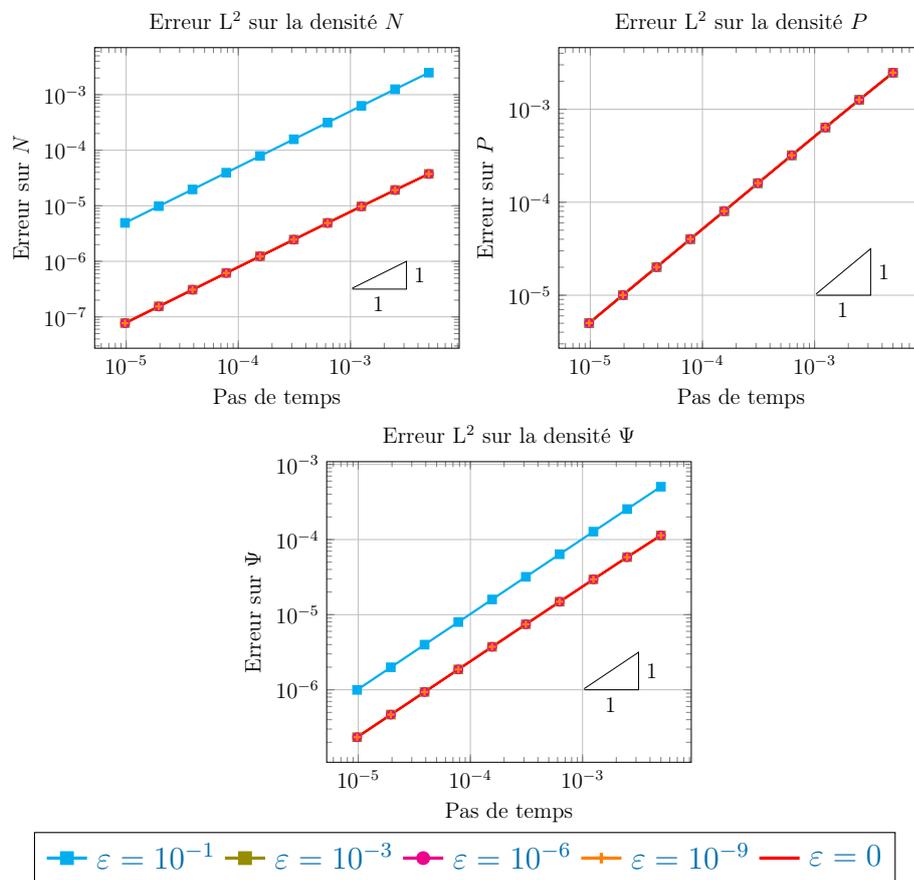
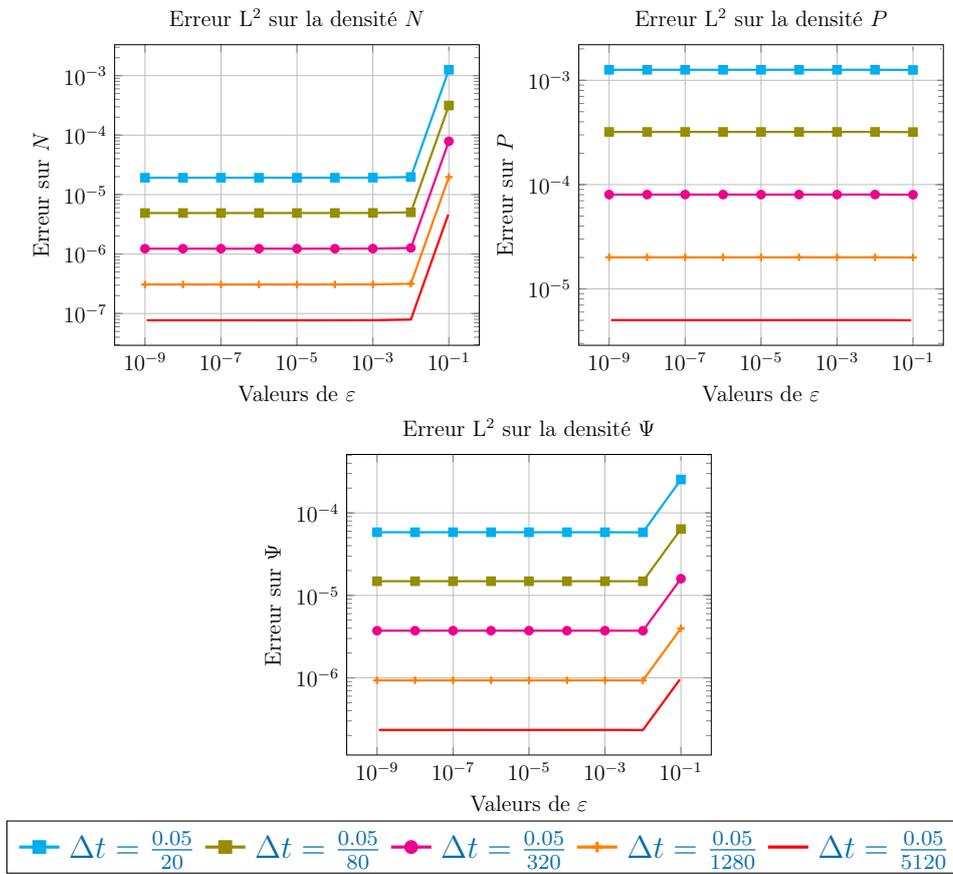


FIGURE 2.7: Cas test 2 : Ordre de convergence du schéma lorsque ε tend vers 0.

FIGURE 2.8: Cas test 2 : Étude de la précision du schéma en fonction de ε .

Chapitre 3

Comportements numériques de
schémas volumes finis pour un modèle
de dérive-diffusion

Sommaire

3.1	Introduction	99
3.1.1	Cadre général de l'étude	99
3.1.2	Modèle continu	100
3.1.3	Schéma (\mathcal{S})	104
3.1.4	Organisation du chapitre	105
3.2	Présentation des méthodes numériques utilisées	106
3.2.1	Méthode de Crank-Nicolson	106
3.2.2	Méthode SDIRK (Singly Diagonally Implicit Runge-Kutta)	106
3.2.3	Méthode BDF2 (Backward differentiation formula 2)	108
3.3	Mise en place des schémas numériques pour le modèle de dérive-diffusion (\mathcal{P})	110
3.3.1	Schéma numérique (\mathcal{S}_{CN})	110
3.3.2	Schéma numérique (\mathcal{S}_{SDIRK})	111
3.3.3	Schéma numérique (\mathcal{S}_{BDF2})	114
3.4	Expérimentations numériques	118
3.4.1	Comportement des schémas numériques pour $\varepsilon, \lambda = 1$	118
3.4.2	Comportement des schémas numériques pour $\lambda = 1$ et ε tendant vers 0	128
3.4.3	Comportement des schémas numériques pour $\varepsilon = 1$ et λ tendant vers 0	135
3.4.4	Comportement des schémas numériques en temps long	142
3.4.5	Conclusion	146

3.1 Introduction

3.1.1 Cadre général de l'étude

Dans les chapitres 1 et 2, nous avons étudié un schéma volumes finis en espace et Euler implicite en temps pour le modèle de corrosion ou de plasmas non magnétisés. Nous avons obtenu des résultats de convergence de solutions ainsi que la stabilité du schéma pour les plasmas non magnétisés lorsque la masse d'électrons tend vers 0. De plus, nous avons montré, numériquement, cette stabilité pour le schéma associé au modèle de corrosion simplifié. Par construction et comme l'illustrent les figures de convergence des chapitres 1 et 2, les schémas étudiés jusqu'à présent sont d'ordre 1 en temps.

Dans ce chapitre, nous considérons le modèle de dérive-diffusion classique, avec des conditions au bord mixtes de Dirichlet-Neumann. Le but de ce chapitre est de proposer différents schémas dont l'ordre de convergence en temps est supérieur à 2. Nous proposons de comparer les différents schémas développés à l'aide de plusieurs cas tests. Les différents cas tests proposés rentrent dans le cadre du modèle de dérive-diffusion pour les plasmas non magnétisés (voir le chapitre 2) ou dans le cadre du modèle de dérive-diffusion pour les semi-conducteurs. La différence entre ces deux modèles est la présence, ou non, du profile de dopage dans l'équation de Poisson. Plusieurs points de comparaison seront utilisés pour mettre en lumière les différences entre les schémas. Ils permettront de définir celui qui préserve le mieux les propriétés du modèle de dérive-diffusion.

De nombreux résultats théoriques existent pour le modèle de dérive-diffusion. Nous souhaitons comparer les schémas sur des cas tests nous permettant d'observer s'ils vérifient certaines propriétés essentielles du modèle. L'existence et l'unicité d'une solution faible pour ce modèle ont été étudiées dans [27, 30, 46, 47]. Nous y trouvons également que les densités P et N vérifient le principe du maximum. Certains cas tests permettront de vérifier si les schémas développés préservent bien ce principe du maximum pour les densités discrètes.

Le but principal de ce chapitre est de comparer le comportement des schémas en différentes limites de paramètres. En effet, il est possible pour le modèle de dérive-diffusion de montrer des convergences par rapport à certains paramètres. H. Gajewski et K. Gärtner ont montré dans [29], la convergence en temps long de la solution du modèle de dérive-diffusion vers un équilibre thermique avec un taux exponentiel. Sans obtenir ce taux, A. Jüngel a étendu, dans [37], cette convergence pour un modèle dégénéré avec une diffusion non linéaire. Dans [5], M. Bessemoulin-Chatard et

C. Chainais-Hillairet ont montré récemment cette convergence en temps long avec un taux exponentiel pour la solution d'un schéma numérique associé au modèle de dérive-diffusion. Ce schéma est de type Euler implicite en temps et volumes finis en espace, avec une discrétisation des flux numériques par des flux de Scharfetter-Gummel. Grâce aux cas tests, nous observerons si les schémas permettent d'obtenir un état d'équilibre thermique en temps long avec une décroissance exponentielle.

Nous avons vu, dans le chapitre 2, que A. Jüngel et Y.J. Peng ont montré, dans [40], la convergence de solutions du modèle de dérive-diffusion à dopage nul lorsque la masse d'électrons tend vers 0. Nous avons montré, dans le chapitre 2, la stabilité du schéma $(\mathcal{S}_\varepsilon)$ d'ordre 1 en temps, lorsque la masse d'électrons tend vers 0 (Théorème 2.3.1). Nous étudierons sur les cas tests, le comportement des schémas lorsque la masse d'électrons tend vers 0.

Il est possible de montrer la convergence du modèle de dérive-diffusion par rapport à un dernier paramètre. En effet, pour le modèle de dérive-diffusion avec des conditions au bord de Neumann, I. Gasser *et al.* ont montré dans [33], la convergence de solutions du modèle lorsque la longueur de Debye adimensionnée tend vers 0. I. Gasser a également obtenu, dans [32], des résultats pour le modèle de dérive-diffusion isentropique (cas particulier d'un flux de diffusion non linéaire) avec les mêmes conditions au bord. De plus, A. Jüngel et Y.J. Peng ont obtenu, dans [42], des résultats pour ce modèle isentropique avec des conditions au bord mixtes mais avec un dopage nul. Donc, nous étudierons numériquement le comportement des schémas lorsque la longueur de Debye adimensionnée tend vers 0.

Un dernier point de comparaison sera la vitesse de calcul en temps CPU pour une erreur donnée.

3.1.2 Modèle continu

Dans ce chapitre, l'objectif est de comparer plusieurs schémas numériques associés au modèle de dérive-diffusion (\mathcal{P}) . Nous rappelons le modèle en gardant les mêmes notations que dans les chapitres précédents. Comme précédemment, N et P sont les densités d'électrons et de cations et Ψ le potentiel électrique :

$$-\lambda^2 \Delta \Psi = P - N + C, \quad \text{dans } \Omega \times (0, T), \quad (3.1a)$$

$$\partial_t P + \operatorname{div} J_P = 0, \quad J_P = -\nabla P - P \nabla \Psi, \quad \text{dans } \Omega \times (0, T), \quad (3.1b)$$

$$\varepsilon \partial_t N + \operatorname{div} J_N = 0, \quad J_N = -\nabla N + N \nabla \Psi, \quad \text{dans } \Omega \times (0, T), \quad (3.1c)$$

où $\lambda > 0$ est la longueur de Debye et $C(x)$ le profil de dopage donné. Dans le cas des plasmas non magnétisés, le profil de dopage est nul (voir chapitre 2) et ε correspond au ratio des masses d'électrons et de cations. Il est donc très petit, $\varepsilon \ll 1$. Dans le cadre des semi-conducteurs, ε est de l'ordre de 1. Le système est complété de conditions au bord mixtes (Dirichlet/Neumann) et de conditions initiales. Les conditions initiales sont données par :

$$P(x, 0) = P_0(x), \quad N(x, 0) = N_0(x), \quad \text{dans } \Omega. \quad (3.2)$$

Le bord $\Gamma = \partial\Omega$ du domaine Ω est séparé en deux parties disjointes $\Gamma = \Gamma_D \cup \Gamma_N$. Les conditions au bord sont de type Dirichlet sur Γ_D et de type Neumann homogène sur Γ_N ,

$$\Psi = \Psi^D, \quad P = P^D, \quad N = N^D \quad \text{sur } \Gamma_D \times (0, T), \quad (3.3a)$$

$$\nabla\Psi \cdot \nu = \nabla P \cdot \nu = \nabla N \cdot \nu = 0, \quad \text{sur } \Gamma_N \times (0, T). \quad (3.3b)$$

Nous pouvons trouver dans [46], sous certaines conditions, un théorème d'existence et d'unicité d'une solution faible pour (\mathcal{P}) . De plus, les densités N et P vérifient le principe du maximum. En particulier, la positivité des densités est conservée.

Le but de ce chapitre est de développer des schémas numériques associés au modèle (\mathcal{P}) dont l'ordre en temps est supérieur à 2. Le comportement des schémas en différentes limites de paramètres sera étudié sur plusieurs cas tests. Nous rappelons le comportement du modèle (\mathcal{P}) en ces différentes asymptotiques.

3.1.2.1 Comportement en temps long de (\mathcal{P})

Le comportement en temps long du modèle (\mathcal{P}) a été étudié dans [29]. H. Gajewski et K. Gärtner ont montré que la solution pour $\varepsilon = 1$ converge avec un taux exponentiel vers l'état d'équilibre thermique, lorsque $t \rightarrow \infty$, sous certaines hypothèses sur les conditions au bord. L'équilibre thermique est un état stable tel que

$$-\nabla N + N\nabla\Psi = -\nabla P - P\nabla\Psi = 0.$$

L'existence d'un équilibre thermique pour (\mathcal{P}) a été étudié dans [45, 46].

Si les conditions au bord de Dirichlet vérifient $N^D, P^D > 0$ et sont à l'équilibre thermique

$$\log(N^D) - \Psi^D = \alpha_N \quad \text{et} \quad \log(P^D) + \Psi^D = \alpha_P \quad \text{sur } \Gamma_D, \quad (\text{H}^{eq})$$

alors, l'état d'équilibre est défini par

$$-\lambda^2 \Delta \Psi^{eq} = \exp(\alpha_P - \Psi^{eq}) + \exp(\alpha_N + \Psi^{eq}) + C, \quad \text{dans } \Omega \quad (3.4a)$$

$$P^{eq} = \exp(\alpha_P - \Psi^{eq}), \quad \text{dans } \Omega, \quad (3.4b)$$

$$N^{eq} = \exp(\alpha_N + \Psi^{eq}), \quad \text{dans } \Omega, \quad (3.4c)$$

complété par les conditions au bord 3.3.

La preuve de convergence vers l'équilibre thermique est basée sur une estimation d'énergie. Elle est donnée pour tout $t \geq 0$ par :

$$0 \leq E^{eq}(t) + \int_0^t I^{eq}(s) ds \leq E^{eq}(0), \quad (3.5)$$

où E^{eq} est une énergie relative définie par

$$\begin{aligned} E^{eq}(t) = \int_{\Omega} & \left(H(N) - H(N^{eq}) - \log(N^{eq})(N - N^{eq}) \right. \\ & + H(P) - H(P^{eq}) - \log(P^{eq})(P - P^{eq}) \\ & \left. + \frac{\lambda^2}{2} |\nabla(\Psi - \Psi^{eq})|^2 \right) ds, \end{aligned} \quad (3.6)$$

avec $H(x) = \int_1^x \log(s) ds$, et où la dissipation d'énergie associée est donnée par

$$I^{eq}(t) = \int_{\Omega} (N |\nabla(\log(N) - \Psi)|^2 + P |\nabla(\log(P) - \Psi)|^2) dx. \quad (3.7)$$

3.1.2.2 Comportement de (\mathcal{P}) lorsque $\lambda \rightarrow 0$

Pour un dopage nul et $\varepsilon = 1$, dans [42], A. Jüngel et Y.J. Peng ont établi la convergence des solutions de (\mathcal{P}) complété de conditions au bord mixtes, vers la solution d'un modèle limite $(\mathcal{P}_{\lambda=0})$ lorsque λ tend vers 0. Formellement, le modèle limite $(\mathcal{P}_{\lambda=0})$ s'écrit

$$N = P, \quad \text{dans } \Omega \times (0, T), \quad (3.8a)$$

$$\partial_t N - \Delta N = 0, \quad \text{dans } \Omega \times (0, T), \quad (3.8b)$$

$$-\text{div}(N \nabla \Psi) = 0, \quad \text{dans } \Omega \times (0, T). \quad (3.8c)$$

Sous les hypothèses de quasi-neutralité sur les conditions initiales et les conditions au bord, ie :

$$\begin{aligned} N_0 &= P_0, & \text{sur } \Omega, \\ N^D &= P^D, & \text{sur } \Gamma_D \times (0, T), \end{aligned} \quad (\text{H}^{\lambda \rightarrow 0})$$

A. Jüngel et Y.J. Peng ont montré la convergence de solutions du modèle lorsque λ tend vers 0. Une fois de plus, la preuve est basée sur une estimation d'énergie. Celle-ci est donnée pour tout $t \geq 0$ par

$$\frac{dE}{dt}(t) + \frac{1}{2}I(t) \leq K_D, \quad (3.9)$$

où K_D est une constante ne dépendant que des données. E est une énergie relative définie par

$$\begin{aligned} E(t) &= \int_{\Omega} \left(H(N) - H(N^D) - \log(N^D)(N - N^D) \right. \\ &\quad \left. + H(P) - H(P^D) - \log(P^D)(P - P^D) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\lambda^2}{2} |\nabla(\Psi - \Psi^D)|^2 \right) ds, \end{aligned} \quad (3.10)$$

et la dissipation d'énergie I associée est semblable à I^{eq} . Elle prend en compte ε :

$$I(t) = \int_{\Omega} \left(\frac{1}{\varepsilon} N |\nabla(\log(N) - \Psi)|^2 + P |\nabla(\log(P) - \Psi)|^2 \right) dx. \quad (3.11)$$

3.1.2.3 Comportement de (\mathcal{P}) lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$

Dans [40], A. Jüngel et Y.J. Peng ont démontré la convergence des solutions de (\mathcal{P}) pour un dopage nul vers une solution d'un modèle limite $(\mathcal{P}_{\varepsilon=0})$, lorsque ε tend vers 0. Formellement, à la limite, l'équation (3.1a) devient

$$\nabla N - N \nabla \Psi = N \nabla(\log(N) - \Psi) = C.$$

En supposant que la condition au bord pour N vérifie

$$N^D = \exp(\Psi^D), \quad (\text{H}^{\varepsilon \rightarrow 0})$$

la constante C est nulle. Donc $\log(N) - \Psi$ est une fonction constante dans $\Omega \times (0, T)$, en utilisant la stricte positivité de N (voir Théorème 2.1 [40]). Sans perte de généralité,

la constante d'intégration peut être choisie égale à zéro, ce qui conduit à

$$N(x, t) = e^{\Psi(x, t)}, \quad \text{dans } \Omega \times (0, T).$$

D'où, formellement, le modèle limite ($\mathcal{P}_{\varepsilon=0}$) se réécrit

$$-\lambda^2 \Delta \Psi = P - e^\Psi + C, \quad \text{dans } \Omega \times (0, T), \quad (3.12a)$$

$$\partial_t P + \operatorname{div} J_P = 0, \quad J_P = -\nabla P - P \nabla \Psi, \quad \text{dans } \Omega \times (0, T), \quad (3.12b)$$

complété par la condition initiale sur P de (3.2) et les conditions au bord sur P et Ψ de (3.3).

La preuve de A. Jüngel et Y.J. Peng pour la convergence de solutions de (\mathcal{P}) avec dopage nul lorsque ε tend vers 0 est encore une fois basée sur l'estimation d'énergie (3.9).

3.1.3 Schéma (\mathcal{S})

Nous présentons le schéma numérique (\mathcal{S}) associé à (\mathcal{P}). Ce schéma a été donné en partie dans le chapitre 2, dans le cadre des plasmas non magnétisés. En considérant les mêmes notations que dans la section 2.2.1, le schéma (\mathcal{S}) est donné par

$$-\lambda^2 \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \tau_\sigma D \Psi_{K,\sigma}^{n+1} = m(K) (P_K^{n+1} - N_K^{n+1} + C_K), \quad (3.13a)$$

$$m(K) \frac{P_K^{n+1} - P_K^n}{\Delta t} + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{F}_{K,\sigma}^{n+1} = 0, \quad (3.13b)$$

$$\varepsilon m(K) \frac{N_K^{n+1} - N_K^n}{\Delta t} + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{G}_{K,\sigma}^{n+1} = 0, \quad (3.13c)$$

avec pour tout $\sigma \in \mathcal{E}_K$

$$\mathcal{F}_{K,\sigma}^{n+1} = \tau_\sigma (B(D \Psi_{K,\sigma}^{n+1}) P_K^{n+1} - B(-D \Psi_{K,\sigma}^{n+1}) P_{K,\sigma}^{n+1}), \quad (3.14a)$$

$$\mathcal{G}_{K,\sigma}^{n+1} = \tau_\sigma (B(-D \Psi_{K,\sigma}^{n+1}) N_K^{n+1} - B(D \Psi_{K,\sigma}^{n+1}) N_{K,\sigma}^{n+1}), \quad (3.14b)$$

où B est la fonction de Bernoulli définie par :

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

Le schéma (\mathcal{S}) est complété par les conditions initiales (3.2) discrétisées et les conditions au bords (3.3) discrétisées.

Ce schéma, d'ordre 1 en temps et 2 en espace, conserve toutes les propriétés du modèle (\mathcal{P}) énoncées dans les sections précédentes.

En effet, la discrétisation des flux introduite dans [49] ainsi que la discrétisation Euler implicite en temps ont permis de montrer les versions discrètes de (3.5) et (3.9). Dans [20], M. Chatard a montré la convergence en temps long du schéma (\mathcal{S}) grâce à la version discrète de (3.5). De plus, dans [5], M. Bessemoulin-Chatard et C. Chainais-Hillairet ont obtenu la décroissance exponentielle de l'énergie relative discrète et de l'erreur relative L^2 pour N , P et Ψ . Dans [6], M Bessemoulin-Chatard, C. Chainais-Hillairet et M.H. Vignal ont démontré la convergence de (\mathcal{S}) avec un dopage nul, lorsque λ tend vers 0, grâce à la version discrète de (3.9). Dans le chapitre 2, nous avons établi la convergence de (\mathcal{S}) avec un dopage nul lorsque ε tend vers 0 à l'aide de cette même estimation d'énergie.

3.1.4 Organisation du chapitre

Nous développons dans la suite des schémas numériques de type implicite en temps et d'ordre supérieur à 2. Ces schémas auront la même discrétisation en espace que le schéma (\mathcal{S}) . Nous commençons par présenter les méthodes numériques d'ordre 2 sur un problème de Cauchy, dans la section 3.2. Elles seront ensuite utilisées pour la discrétisation en temps du modèle (\mathcal{P}) (section 3.3). Les méthodes de discrétisation temporelle choisies sont assez classiques : la méthode de Crank-Nicolson, des méthodes SDIRK à 2 étages et la méthode BDF2. Nous pouvons trouver ces différentes méthodes dans [34].

La section 3.3 est consacrée à la mise en place des différents schémas numériques. Nous appliquons au modèle (\mathcal{P}) , les méthodes de discrétisation en temps développées dans la section 3.2. Des points communs et des différences liés à l'implémentation des schémas numériques seront mis en avant.

La section 3.4 est dédiée aux expérimentations numériques. Dans cette section, nous proposons de vérifier que les schémas développés dans la section 3.3 répondent aux critères que nous nous sommes fixés dans la section 3.1.1. Nous commençons par observer pour $(\varepsilon = 1, \lambda = 1)$, l'ordre de convergence, la positivité des densités et la vitesse de calcul pour une erreur donnée. Pour finir, nous nous intéressons à la stabilité des schémas numériques aussi bien lorsque ε, λ tendent vers 0 qu'en temps long.

3.2 Présentation des méthodes numériques utilisées

Nous présentons ici, des méthodes d'approximation sur le problème de Cauchy suivant.

On cherche $y : [0, T] \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ tel que :

$$\begin{cases} y'(t) = f(t, y(t)), & \forall t \in [0, T], \\ y(0) = y_0, \end{cases} \quad (3.15)$$

où $f : [0, T] \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ est une fonction donnée et y_0 une donnée initiale.

En se plaçant dans les conditions du théorème de Cauchy-Lipschitz global (voir [23]), il existe une unique solution $y(t)$ de (3.15) définie sur $[0, T]$.

Nous définissons $(t_n)_{0 \leq n \leq N_T}$ une suite de $N_T + 1$ points tels que $t_n = n\Delta t$ pour Δt donné. Le pas de temps sera choisi de sorte que $N_T = T/\Delta t$ soit un entier. On approche alors $y(t^n)$ par une valeur y_n donnée par une méthode numérique pour tout $n \in \llbracket 0, N_T \rrbracket$.

3.2.1 Méthode de Crank-Nicolson

Nous commençons par présenter la méthode de Crank-Nicolson, qui est une méthode numérique à un pas assez classique. Cette méthode est obtenue grâce à une formule d'intégration numérique. Cependant, elle peut être vue comme la combinaison des itérations des méthodes d'Euler explicite et implicite. La méthode de Crank-Nicolson est alors donnée par :

$$y_{n+1} = y_n + \frac{\Delta t}{2} (f(t^n, y_n) + f(t^{n+1}, y_{n+1})), \quad \forall n \in \llbracket 0, N_T - 1 \rrbracket.$$

Nous rappelons que cette méthode est d'ordre 2. Ceci est une conséquence directe de l'erreur de convergence de la formule des trapèzes.

3.2.2 Méthode SDIRK (Singly Diagonally Implicit Runge-Kutta)

Comme son nom l'indique, la méthode SDIRK est une méthode de Runge-Kutta. Celle-ci est donc une méthode numérique à un pas : pour approcher $y(t^{n+1})$ nous utilisons uniquement l'approximation y_n de $y(t^n)$.

Nous rappelons qu'une solution numérique de l'équation différentielle (3.15) par

une méthode générale de Runge-Kutta à s étages est donnée par :

$$y_{n+1} = y_n + \Delta t \sum_{i=1}^s b_i k_i,$$

où

$$k_i = f \left(t^n + c_i \Delta t, y_n + \Delta t \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j \right), \quad i \in \llbracket 1, s \rrbracket,$$

et

$$c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}, \quad i \in \llbracket 1, s \rrbracket.$$

Cette formulation peut alors s'exprimer de manière plus compacte, sous la forme d'un tableau de Butcher, comme représenté par la figure 3.1.

c_1	a_{11}	\cdots	a_{1s}
\vdots	\vdots	\ddots	\vdots
c_s	a_{s1}	\cdots	a_{ss}
	b_1	\cdots	b_s

FIGURE 3.1: Tableau de Butcher.

Des conditions nécessaires et suffisantes sur les coefficients $(c_i, a_{ij}, b_j)_{1 \leq i, j \leq s}$ permettent de définir l'ordre de la méthode. Nous rappelons ces conditions (voir par exemple le théorème 2.13 et la Table 2.2 de [34]) dans la proposition suivante.

Proposition 3.2.1. *La méthode de Runge-Kutta définie par le tableau de Butcher représenté par la figure 3.1 est :*

— au moins d'ordre 1 ssi

$$\sum_{j=1}^s b_j = 1,$$

— au moins d'ordre 2 ssi la méthode est au moins d'ordre 1 et

$$\sum_{j=1}^s b_j c_j = \frac{1}{2},$$

— au moins d'ordre 3 ssi la méthode est au moins d'ordre 2 et

$$\sum_{j=1}^s b_j c_j^2 = \frac{1}{3}, \quad \sum_{i,j=1}^s b_i a_{i,j} c_j = \frac{1}{6}.$$

Nous souhaitons développer des méthodes implicites pour éviter les restrictions trop importantes sur les pas de temps. Les méthodes de Runge-Kutta totalement implicites ayant un coût de calcul important, nous avons opté pour les méthodes SDIRK. La méthode SDIRK est un cas particulier de la méthode numérique DIRK (Diagonally Implicit Runge-Kutta) pour laquelle les éléments diagonaux sont identiques. Les coefficients vérifient alors les hypothèses suivantes :

- $a_{ij} = 0$ pour $1 \leq i < j \leq s$,
- $a_{ii} = \gamma \neq 0$ pour $i \in \llbracket 1, s \rrbracket$.

Dans la suite, nous nous intéressons à des méthodes SDIRK à 2 étages, dont les tableaux de Butcher sont donnés par la figure 3.2.

(a) SDIRK A.	(b) SDIRK B.
$\begin{array}{c cc} \gamma & \gamma & 0 \\ 1 - \gamma & 1 - 2\gamma & \gamma \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array}$	$\begin{array}{c cc} \gamma & \gamma & 0 \\ 1 & 1 - \gamma & \gamma \\ \hline & 1 - \gamma & \gamma \end{array}$

FIGURE 3.2: Tableaux de Butcher des méthodes SDIRK A et B

La méthode SDIRK A est une méthode d'ordre au moins 2. Mais pour un choix judicieux de γ ($\gamma = \frac{3 \pm \sqrt{3}}{6}$), elle est même d'ordre 3. La méthode SDIRK B n'est d'ordre 2 que si $\gamma = \frac{2 \pm \sqrt{2}}{2}$. Dans la suite nous noterons SDIRK A $^\pm$ la méthode SDIRK A avec $\gamma = \frac{3 \pm \sqrt{3}}{6}$ et SDIRK B $^\pm$ la méthode SDIRK B avec $\gamma = \frac{2 \pm \sqrt{2}}{2}$.

3.2.3 Méthode BDF2 (Backward differentiation formula 2)

Les méthodes BDF sont des méthodes numériques multi-pas. Pour ces méthodes, le principe est de considérer le polynôme d'interpolation de Lagrange P de degré k vérifiant $P(t^{n+j}) = y(t^{n+j})$ pour tout $0 \leq j \leq k$. Les méthodes BDF s'obtiennent alors en approchant $y'(t^{n+k})$ par la dérivée du polynôme d'interpolation P au temps t^{n+k} .

Nous nous intéressons ici à la méthode numérique BDF2, qui est une méthode à deux pas. Nous considérons donc le polynôme d'interpolation de Lagrange de degré 2

vérifiant les conditions suivantes :

$$\begin{aligned} P(t^{n+2}) &= y(t^{n+2}), \\ P(t^{n+1}) &= y(t^{n+1}), \\ P(t^n) &= y(t^n). \end{aligned}$$

Le polynôme d'interpolation P s'écrit alors :

$$\begin{aligned} P(x) &= \frac{y(t^{n+2})}{2\Delta t^2}(x - t^{n+1})(x - t^n) - \frac{y(t^{n+1})}{\Delta t^2}(x - t^{n+2})(x - t^n) \\ &\quad + \frac{y(t^n)}{2\Delta t^2}(x - t^{n+2})(x - t^{n+1}). \end{aligned}$$

La dérivée du polynôme P étant :

$$\begin{aligned} P'(x) &= \frac{y(t^{n+2})}{2\Delta t^2}(2x - t^{n+1} - t^n) - \frac{y(t^{n+1})}{\Delta t^2}(2x - t^{n+2} - t^n) \\ &\quad + \frac{y(t^n)}{2\Delta t^2}(2x - t^{n+2} - t^{n+1}), \end{aligned}$$

nous obtenons

$$P'(t^{n+2}) = \frac{3}{2\Delta t}y(t^{n+2}) - \frac{2}{\Delta t}y(t^{n+1}) + \frac{1}{2\Delta t}y(t^n).$$

Grâce à l'équation différentielle (3.15), nous avons :

$$f(t^{n+2}, y(t^{n+2})) \approx \frac{3}{2\Delta t}y(t^{n+2}) - \frac{2}{\Delta t}y(t^{n+1}) + \frac{1}{2\Delta t}y(t^n).$$

La méthode numérique BDF2 s'en déduit directement :

$$\frac{3}{2}y_{n+2} - 2y_{n+1} + \frac{1}{2}y_n = \Delta t f(t^{n+2}, y_{n+2}), \quad \forall 0 \leq n \leq N_T, \quad (3.16)$$

où y_{n+2} , y_{n+1} et y_n sont respectivement des approximations de $y(t^{n+2})$, $y(t^{n+1})$ et $y(t^n)$.

Les méthodes BDF sont stables jusqu'à $k = 6$ et instables pour $k \geq 7$ (voir le théorème 3.4 de [34]). L'ordre de convergence est alors donné par le degré k du polynôme d'interpolation P , d'après la formule (1.22) de [34]. Pour la méthode BDF2, l'ordre de convergence est donc 2.

La méthode BDF2 décrite par (3.16), n'est valable que pour une discrétisation temporelle uniforme. En effet, pour une discrétisation non uniforme, les coefficients

ne sont pas les mêmes. Si $t^{n+2} - t^{n+1} = \Delta t_2^n$ et $t^{n+1} - t^n = \Delta t_1^n$, alors en utilisant la méthode développée précédemment, nous obtenons la méthode numérique BDF2 générale

$$\frac{1 + 2w^n}{1 + w^n} y_{n+2} - (1 + w^n) y_{n+1} + \frac{(w^n)^2}{1 + w^n} y_n = \Delta t_2^n f(t^{n+2}, y_{n+2}), \quad \forall 0 \leq n \leq N_T, \quad (3.17)$$

où $w^n = \frac{\Delta t_2^n}{\Delta t_1^n}$. En prenant $\Delta t_2^n = \Delta t_1^n$, nous retrouvons la formule (3.16).

3.3 Mise en place des schémas numériques pour le modèle de dérive-diffusion (\mathcal{P})

Nous présentons ici les schémas numériques qui seront comparés dans la section 3.4. Pour l'approximation en espace, nous utilisons toujours le même schéma que dans les chapitres 1 et 2 de type volumes finis. Pour la discrétisation temporelle, nous appliquons les méthodes exposées dans la section 3.2 : Crank-Nicolson, SDIRK à 2 étages et BDF2.

3.3.1 Schéma numérique (\mathcal{S}_{CN})

Nous commençons par présenter le schéma Crank-Nicolson associé au modèle (\mathcal{P}). Il sera noté (\mathcal{S}_{CN}) dans la suite. L'utilisation de la méthode de Crank-Nicolson en temps ainsi que la discrétisation en espace nous conduisent au schéma totalement discrétisé suivant :

soient $K \in \mathcal{T}$ et $n \in \llbracket 0, N_T - 1 \rrbracket$,

$$-\frac{\lambda^2}{2} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \tau_\sigma D(\Psi^{n+1} + \Psi^n)_{K,\sigma} = \frac{m(K)}{2} (P_K^{n+1} - N_K^{n+1} + P_K^n - N_K^n + 2C_K), \quad (3.18a)$$

$$\frac{m(K)}{\Delta t} (P_K^{n+1} - P_K^n) + \frac{1}{2} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} (\mathcal{F}_{K,\sigma}^{n+1} + \mathcal{F}_{K,\sigma}^n) = 0, \quad (3.18b)$$

$$\varepsilon \frac{m(K)}{\Delta t} (N_K^{n+1} - N_K^n) + \frac{1}{2} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} (\mathcal{G}_{K,\sigma}^{n+1} + \mathcal{G}_{K,\sigma}^n) = 0, \quad (3.18c)$$

avec pour tout $\sigma \in \mathcal{E}_K$,

$$\mathcal{F}_{K,\sigma}^n = \tau_\sigma (B(D\Psi_{K,\sigma}^n)P_K^n - B(-D\Psi_{K,\sigma}^n)P_{K,\sigma}^n), \quad (3.19a)$$

$$\mathcal{G}_{K,\sigma}^n = \tau_\sigma (B(-D\Psi_{K,\sigma}^n)N_K^n - B(D\Psi_{K,\sigma}^n)N_{K,\sigma}^n). \quad (3.19b)$$

Le schéma numérique (\mathcal{S}_{CN}) est évidemment complété avec les conditions au bord et les conditions initiales discrétisées. De plus, nous introduisons Ψ^0 comme solution du système suivant, pour tout $K \in \mathcal{T}$

$$-\lambda^2 \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \tau_\sigma D\Psi_{K,\sigma}^0 = m(K) (P_K^0 - N_K^0 + C_K). \quad (3.20)$$

Ce schéma est assez simple à implémenter. En effet, il est similaire au schéma (\mathcal{S}). Nous calculons la solution $(\mathbf{P}^{n+1}, \mathbf{N}^{n+1}, \Psi^{n+1})$ à chaque itération $n \in \llbracket 0, N_T - 1 \rrbracket$ à l'aide de la méthode de Newton comme pour (\mathcal{S}). Notons que les seconds membres supplémentaires et la présence du coefficient $1/2$ dans la matrice jacobienne associée au système sont des changements faciles à opérer.

3.3.2 Schéma numérique (\mathcal{S}_{SDIRK})

Nous présentons maintenant les différents schémas SDIRK associés au modèle (\mathcal{P}) et notés (\mathcal{S}_{SDIRK}). Pour simplifier la présentation, nous utilisons les coefficients généraux du tableau de Butcher pour la méthode SDIRK à 2 étages. Pour obtenir les schémas (\mathcal{S}_{SDIRKA}^\pm) et (\mathcal{S}_{SDIRKB}^\pm), il suffira d'utiliser les coefficients correspondant aux différentes méthodes.

Comme toutes les méthodes de Runge-Kutta à 2 étages, les méthodes SDIRK étudiées se décomposent en trois étapes. Les deux premières étapes permettent, à chaque itération $n \in \llbracket 0, N_T - 1 \rrbracket$, de calculer des solutions intermédiaires $(\mathbf{P}^{i,n}, \mathbf{N}^{i,n}, \Psi^{i,n})_{i \in \{1,2\}}$ à l'aide de systèmes non linéaires dans notre cas. La dernière étape permet de reconstruire de manière explicite les solutions $(\mathbf{P}^{n+1}, \mathbf{N}^{n+1}, \Psi^{n+1})$. Ces trois étapes sont répétées à chaque itération.

1^{re} étape : Résolution du premier système (\mathcal{S}_{SDIRK}^1)

À chaque itération $n \in \llbracket 0, N_T - 1 \rrbracket$, cette première étape permet d'obtenir une solution intermédiaire $(\mathbf{P}^{1,n}, \mathbf{N}^{1,n}, \Psi^{1,n})_{0 \leq n \leq N_T - 1}$ qui est une solution du système suivant

noté (\mathcal{S}_{SDIRK}^1) : soient $K \in \mathcal{T}$ et $n \in \llbracket 0, N_T - 1 \rrbracket$

$$-\lambda^2 \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \tau_\sigma D\Psi_{K,\sigma}^{n,1} = m(K) (P_K^{n,1} - N_K^{n,1} + C_K), \quad (3.21a)$$

$$\frac{m(K)}{\Delta t} (P_K^{n,1} - P_K^n) + a_{11} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{F}_{K,\sigma}^{n,1} = 0, \quad (3.21b)$$

$$\varepsilon \frac{m(K)}{\Delta t} (N_K^{n,1} - N_K^n) + a_{11} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{G}_{K,\sigma}^{n,1} = 0, \quad (3.21c)$$

avec pour tout $\sigma \in \mathcal{E}_K$

$$\mathcal{F}_{K,\sigma}^{n,1} = \tau_\sigma (B(D\Psi_{K,\sigma}^{n,1})P_K^{n,1} - B(-D\Psi_{K,\sigma}^{n,1})P_K^{n,1}), \quad (3.22a)$$

$$\mathcal{G}_{K,\sigma}^{n,1} = \tau_\sigma (B(-D\Psi_{K,\sigma}^{n,1})N_K^{n,1} - B(D\Psi_{K,\sigma}^{n,1})N_K^{n,1}). \quad (3.22b)$$

Ce système est complété par les conditions au bord et les conditions initiales discrétisées.

Le système (\mathcal{S}_{SDIRK}^1) est similaire à (\mathcal{S}) . La présence du coefficient a_{11} dans la matrice jacobienne associée au système, amène une modification mineure du code.

2^e étape : Résolution du deuxième système (\mathcal{S}_{SDIRK}^2)

À chaque itération $n \in \llbracket 0, N_T - 1 \rrbracket$, cette deuxième étape permet d'obtenir une seconde solution intermédiaire $(\mathbf{P}^{2,n}, \mathbf{N}^{2,n}, \Psi^{2,n})_{0 \leq n \leq N_T - 1}$ qui est solution du système suivant noté (\mathcal{S}_{SDIRK}^2) . Cette solution dépend de la solution de (\mathcal{S}_{SDIRK}^1) à l'itération n . Soient $K \in \mathcal{T}$ et $n \in \llbracket 0, N_T - 1 \rrbracket$

$$-\lambda^2 \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \tau_\sigma D\Psi_{K,\sigma}^{n,2} = m(K) (P_K^{n,2} - N_K^{n,2} + C_K),$$

$$\frac{m(K)}{\Delta t} (P_K^{n,2} - P_K^n) + a_{11} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{F}_{K,\sigma}^{n,2} + a_{21} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{F}_{K,\sigma}^{n,1} = 0,$$

$$\varepsilon \frac{m(K)}{\Delta t} (N_K^{n,2} - N_K^n) + a_{11} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{G}_{K,\sigma}^{n,2} + a_{21} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{G}_{K,\sigma}^{n,1} = 0,$$

avec pour tout $\sigma \in \mathcal{E}_K$

$$\mathcal{F}_{K,\sigma}^{n,2} = \tau_\sigma (B(D\Psi_{K,\sigma}^{n,2})P_K^{n,2} - B(-D\Psi_{K,\sigma}^{n,2})P_K^{n,1}),$$

$$\mathcal{G}_{K,\sigma}^{n,2} = \tau_\sigma (B(-D\Psi_{K,\sigma}^{n,2})N_K^{n,2} - B(D\Psi_{K,\sigma}^{n,2})N_K^{n,1}).$$

Ce système est complété par les conditions au bord et les conditions initiales discrétisées.

tisées.

Remarque 14. La solution $(\mathbf{P}^{1,n}, \mathbf{N}^{1,n}, \Psi^{1,n})$ étant connue, grâce à (3.21b) et à (3.21c), nous pouvons remplacer les flux par

$$\sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{F}_{K,\sigma}^{n,1} = -\frac{m(K)}{a_{11}\Delta t} (P_K^{n,1} - P_K^n),$$

et

$$\sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{G}_{K,\sigma}^{n,1} = -\varepsilon \frac{m(K)}{a_{11}\Delta t} (N_K^{n,1} - N_K^n).$$

Le système à résoudre peut donc se réécrire de la manière suivante : soient $K \in \mathcal{T}$ et $n \in \llbracket 0, N_T - 1 \rrbracket$

$$-\lambda^2 \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \tau_\sigma D\Psi_{K,\sigma}^{n,2} = m(K) (P_K^{n,2} - N_K^{n,2} + C_K), \quad (3.25a)$$

$$\frac{m(K)}{\Delta t} (P_K^{n,2} - P_K^n) + a_{11} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{F}_{K,\sigma}^{n,2} = \frac{a_{21}}{a_{11}} \cdot \frac{m(K)}{\Delta t} (P_K^{n,1} - P_K^n), \quad (3.25b)$$

$$\varepsilon \frac{m(K)}{\Delta t} (N_K^{n,2} - N_K^n) + a_{11} \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{G}_{K,\sigma}^{n,2} = \varepsilon \frac{a_{21}}{a_{11}} \cdot \frac{m(K)}{\Delta t} (N_K^{n,1} - N_K^n), \quad (3.25c)$$

avec pour tout $\sigma \in \mathcal{E}_K$

$$\mathcal{F}_{K,\sigma}^{n,2} = \tau_\sigma (B(D\Psi_{K,\sigma}^{n,2})P_K^{n,2} - B(-D\Psi_{K,\sigma}^{n,2})P_K^{n,1}), \quad (3.26a)$$

$$\mathcal{G}_{K,\sigma}^{n,2} = \tau_\sigma (B(-D\Psi_{K,\sigma}^{n,2})N_K^{n,2} - B(D\Psi_{K,\sigma}^{n,2})N_K^{n,1}). \quad (3.26b)$$

Le système (\mathcal{S}_{SDIRK}^2) est similaire à (\mathcal{S}) . Les changements effectués sont mineurs.

3^e étape : Résolution du système (\mathcal{S}_{SDIRK})

À chaque itération $n \in \llbracket 0, N_T - 1 \rrbracket$, cette dernière étape permet d'obtenir la solution $(\mathbf{P}^{n+1}, \mathbf{N}^{n+1}, \Psi^{n+1})_{0 \leq n \leq N_T - 1}$ du système suivant noté (\mathcal{S}_{SDIRK}) . Cette solution dépend des solutions de $(\mathcal{S}_{SDIRK}^j)_{j \in \{1,2\}}$. Soient $K \in \mathcal{T}$ et $n \in \llbracket 0, N_T - 1 \rrbracket$

$$\begin{aligned} \frac{m(K)}{\Delta t} (P_K^{n+1} - P_K^n) + b_1 \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{F}_{K,\sigma}^{n,1} + b_2 \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{F}_{K,\sigma}^{n,2} &= 0, \\ \varepsilon \frac{m(K)}{\Delta t} (N_K^{n+1} - N_K^n) + b_1 \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{G}_{K,\sigma}^{n,1} + b_2 \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{G}_{K,\sigma}^{n,2} &= 0, \\ -\lambda^2 \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \tau_\sigma D\Psi_{K,\sigma}^{n+1} &= m(K) (P_K^{n+1} - N_K^{n+1} + C_K). \end{aligned}$$

Ce système est complété par les conditions au bord et les conditions initiales discrétisée.

Remarque 15. La solution $(\mathbf{P}^{2,n}, \mathbf{N}^{2,n}, \Psi^{2,n})$ étant connue, grâce à (3.25b) et à (3.25c), nous pouvons remplacer les flux par

$$\sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{F}_{K,\sigma}^{n,2} = -\frac{m(K)}{a_{11}\Delta t} (P_K^{n,2} - P_K^n) + \frac{a_{21}}{a_{11}^2} \cdot \frac{m(K)}{\Delta t} (P_K^{n,1} - P_K^n),$$

et

$$\sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{G}_{K,\sigma}^{n,2} = -\varepsilon \frac{m(K)}{a_{11}\Delta t} (N_K^{n,2} - N_K^n) + \varepsilon \frac{a_{21}}{a_{11}^2} \cdot \frac{m(K)}{\Delta t} (N_K^{n,1} - N_K^n).$$

Grâce aux remarques 14 et 15, nous pouvons réécrire le système de la façon suivante : soient $K \in \mathcal{T}$ et $n \in \llbracket 0, N_T - 1 \rrbracket$

$$(P_K^{n+1} - P_K^n) = \frac{b_1 a_{11} - b_2 a_{21}}{a_{11}^2} (P_K^{1,n} - P_K^n) + \frac{b_2}{a_{11}} (P_K^{2,n} - P_K^n), \quad (3.28a)$$

$$(N_K^{n+1} - N_K^n) = \frac{b_1 a_{11} - b_2 a_{21}}{a_{11}^2} (N_K^{1,n} - N_K^n) + \frac{b_2}{a_{11}} (N_K^{2,n} - N_K^n), \quad (3.28b)$$

$$-\lambda^2 \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \tau_\sigma D\Psi_{K,\sigma}^{n+1} = m(K) (P_K^{n+1} - N_K^{n+1} + C_K). \quad (3.28c)$$

L'obtention de (\mathbf{P}^{n+1}) et (\mathbf{N}^{n+1}) est alors explicite. (\mathbf{P}^{n+1}) et (\mathbf{N}^{n+1}) étant connus, nous pouvons calculer facilement (Ψ^{n+1}) .

Donc contrairement au schéma (\mathcal{S}_{CN}) et au schéma d'Euler implicite (\mathcal{S}) présenté dans la section 3.1.3, pour calculer la solution d'un schéma (\mathcal{S}_{SDIRK}) , nous devons résoudre deux systèmes non linéaires à chaque itération. Le coût de calcul est donc plus grand que pour le schéma (\mathcal{S}_{CN}) . Cependant, dans le cas des schémas (\mathcal{S}_{SDIRKA}) , l'ordre en temps est plus élevé. Ces schémas peuvent donc être malgré tout plus efficaces.

3.3.3 Schéma numérique (\mathcal{S}_{BDF2})

Nous présentons pour finir le schéma BDF2 associé au modèle (\mathcal{P}) et noté (\mathcal{S}_{BDF2}) . La méthode numérique BDF2 étant une méthode à deux pas, il n'est pas suffisant de connaître les conditions initiales. En effet, nous devons également calculer une première itération grâce à une méthode numérique à un pas pour pouvoir initialiser correctement la méthode BDF2. Nous développons les systèmes à résoudre à chaque itération.

1^{re} itération

Nous utilisons pour initialiser notre méthode, un schéma d'Euler implicite. La solution $(\mathbf{P}^1, \mathbf{N}^1, \Psi^1)$ de la première itération est donc la solution du système suivant : soient $K \in \mathcal{T}$ et $\Delta t_1 > 0$

$$-\lambda^2 \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \tau_\sigma D\Psi_{K,\sigma}^1 = m(K) (P_K^1 - N_K^1 + C_K), \quad (3.29a)$$

$$\frac{m(K)}{\Delta t_1} (P_K^1 - P_K^0) + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{F}_{K,\sigma}^1 = 0, \quad (3.29b)$$

$$\varepsilon \frac{m(K)}{\Delta t_1} (N_K^1 - N_K^0) + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{G}_{K,\sigma}^1 = 0, \quad (3.29c)$$

avec pour tout $\sigma \in \mathcal{E}_K$

$$\mathcal{F}_{K,\sigma}^1 = \tau_\sigma (B(D\Psi_{K,\sigma}^1)P_K^1 - B(-D\Psi_{K,\sigma}^1)P_{K,\sigma}^1), \quad (3.30a)$$

$$\mathcal{G}_{K,\sigma}^1 = \tau_\sigma (B(-D\Psi_{K,\sigma}^1)N_K^1 - B(D\Psi_{K,\sigma}^1)N_{K,\sigma}^1), \quad (3.30b)$$

Ce système est complété par les conditions au bord et les conditions initiales discrétisées.

Connaissant la solution $(\mathbf{P}^1, \mathbf{N}^1, \Psi^1)$, nous pouvons maintenant utiliser la méthode numérique BDF2 pour les itérations suivantes.

i^e itération, $2 \leq i \leq N_T$

Comme nous l'avons vu dans la section 3.2.3, pour une discrétisation temporelle non uniforme, les coefficients sont différents de la méthode standard. Pour simplifier les notations, nous notons les coefficients de la méthode BDF2 $a_2^i, a_1^i, a_0^i \in \mathbb{R}$. La méthode BDF2 appliquée au problème de Cauchy s'écrit alors :

$$a_2^i y_i + a_1^i y_{i-1} + a_0^i y_{i-2} = \Delta t_2^i f(t^i, y_i),$$

où $\Delta t_2^i = t^i - t^{i-1}$.

La solution $(\mathbf{P}^i, \mathbf{N}^i, \Psi^i)_{2 \leq i \leq N_T}$ est la solution du système suivant noté (\mathcal{S}_{BDF2}^i) :

pour tout $K \in \mathcal{T}$, pour tout $i \in \llbracket 2, N_T \rrbracket$ et pour $\Delta t_2^n > 0$

$$-\lambda^2 \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \tau_\sigma D\Psi_{K,\sigma}^i = m(K) (P_K^i - N_K^i + C_K), \quad (3.31a)$$

$$\frac{m(K)}{\Delta t_2^i} (a_2^i P_K^i + a_1^i P_K^{i-1} + a_0^i P_K^{i-2}) + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{F}_{K,\sigma}^i = 0, \quad (3.31b)$$

$$\varepsilon \frac{m(K)}{\Delta t_2^i} (a_2^i N_K^i + a_1^i N_K^{i-1} + a_0^i N_K^{i-2}) + \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \mathcal{G}_{K,\sigma}^i = 0, \quad (3.31c)$$

avec pour tout $\sigma \in \mathcal{E}_K$

$$\mathcal{F}_{K,\sigma}^i = \tau_\sigma (B(D\Psi_{K,\sigma}^i)P_K^i - B(-D\Psi_{K,\sigma}^i)P_{K,\sigma}^i), \quad (3.32a)$$

$$\mathcal{G}_{K,\sigma}^i = \tau_\sigma (B(-D\Psi_{K,\sigma}^i)N_K^i - B(D\Psi_{K,\sigma}^i)N_{K,\sigma}^i). \quad (3.32b)$$

Ce système est complété par les conditions au bord et initiales discrétisées.

Le schéma ($\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t}$)

Nous pouvons utiliser une discrétisation uniforme de l'intervalle de temps $[0, T]$, comme le montre la figure 3.3a. Cette discrétisation se traduit pour tout $i \in \llbracket 2, N_T \rrbracket$, par l'égalité $\Delta t_1 = \Delta t_2^i = T/N_T$, où N_T est le nombre d'itérations. Elle implique l'utilisation, à chaque itération, des coefficients classiques pour la méthode BDF2 (3.16), développés dans la section 3.2.3, $\forall i \in \llbracket 2, N_T \rrbracket$

$$(a_2^i, a_1^i, a_0^i) = \left(\frac{3}{2}, -2, \frac{1}{2} \right). \quad (3.33)$$

Le schéma est alors noté ($\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t}$). Un tableau récapitulant chaque étape du schéma est donné par la figure 3.4.

(a) Discrétisation de l'intervalle $[0, T]$ pour une première itération avec ($\mathcal{S}_{EI}^{1, \Delta t}$)

$$\begin{array}{cccccccc} 0 & t^1 & t^2 & t^3 & t^4 & & t^{N_T-1} & T \\ \times & \times & \times & \times & \times & \dots & \times & \times \\ \Delta t_1 & \Delta t_1 & \Delta t_1 & \Delta t_1 & & \dots & & \Delta t_1 \end{array}$$

(b) Discrétisation de l'intervalle $[0, T]$ pour une première itération avec ($\mathcal{S}_{EI}^{1, \Delta t^2}$)

$$\begin{array}{cccccccc} 0 & t^1 & t^2 & t^3 & t^4 & & t^{N_T-1} & T \\ \times & \times & \times & \times & \times & \dots & \times & \times \\ \Delta t_2^2 & \Delta t_2 & \Delta t_2 & \Delta t_2 & & \dots & & \Delta t_2 \end{array}$$

FIGURE 3.3: Les différentes discrétisations temporelles pour le schéma (\mathcal{S}_{DBF2})

Le schéma ($\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t^2}$)

Nous pouvons aussi utiliser une discrétisation non uniforme de l'intervalle de temps $[0, T]$, comme le montre la figure 3.3b. Cette discrétisation se traduit par les égalités $\Delta t_1 = \Delta t_2^2$ et $\Delta t_2^2 + (N_T - 1)\Delta t_2 = T$, où N_T est le nombre d'itérations. En utilisant cette discrétisation, lors de la deuxième itération, la discrétisation temporelle étant non uniforme, nous devons utiliser les coefficients de la méthode BDF2 générale (3.17), présentée dans 3.2.3, ie :

$$(a_2^2, a_1^2, a_0^2) = \left(\frac{\Delta t_2 + 2}{\Delta t_2 + 1}, -\frac{\Delta t_2 + 1}{\Delta t_2}, \frac{1}{\Delta t_2(\Delta t_2 + 1)} \right). \quad (3.34)$$

À partir de la troisième itération, nous pouvons utiliser les coefficients classiques (3.33). Le schéma est alors noté ($\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t^2}$). Le récapitulatif de la mise en place de ce schéma est donné par la figure 3.4.

	$(\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t})$	$(\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t^2})$
Conditions initiales données	(P_0, N_0)	(P_0, N_0)
1 ^{re} itération : (3.29) et (3.30) avec utilisation de	$\Delta t_1 = \Delta t_2$	$\Delta t_1 = \Delta t_2^2$
Calcul de (P_1, N_1, Ψ_1) à l'instant	Δt_1	Δt_2^2
2 ^e itération : (3.31) et (3.32) avec utilisation de	(3.33)	(3.34)
Calcul de (P_2, N_2, Ψ_2) à l'instant	$2\Delta t_1$	$\Delta t_2^2 + \Delta t_2$
n ^e itération : (3.31) et (3.32) avec utilisation de	(3.33)	(3.33)
Calcul de (P_n, N_n, Ψ_n) à l'instant	$n\Delta t_1$	$\Delta t_2^2 + (n - 1)\Delta t_2$

FIGURE 3.4: Tableau récapitulatif pour ($\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t}$) et ($\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t^2}$)

Par le tableau récapitulatif de la figure 3.4, nous observons plus facilement que les solutions des schémas ($\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t}$) et ($\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t^2}$) s'obtiennent par la résolution d'un système non linéaire à chaque itération.

Les schémas ($\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t^2}$) et ($\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t}$) ont une première itération d'ordre 1 en temps. Cependant, en choisissant $\Delta t_1 = \Delta t_2^2$ pour le schéma ($\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t}$), l'erreur induite est alors en Δt_2^2 . Nous verrons dans la section 3.4 que les deux schémas ont des comportements

semblables. Cependant, les coefficients de la méthode BDF2 générale (3.17) dépendent du pas de temps. Comme nous le verrons dans la section 3.4, pour de petits pas de temps, le schéma $(\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t^2})$ induit une erreur plus importante que le schéma $(\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t})$.

3.4 Expérimentations numériques

Comparons maintenant les différents schémas numériques présentés dans la section 3.3. Nous définissons pour cela plusieurs points de comparaison. Nous voulons que les schémas respectent différentes propriétés du modèle (\mathcal{P}) . Nous souhaitons que les schémas préservent la positivité des densités, l'asymptotique par rapport à ε et par rapport à λ ainsi que le comportement en temps long du modèle. De plus, le but de ce chapitre est d'obtenir des schémas d'ordre au moins 2 en temps, ce qui nous donne un autre point de comparaison. Un point de comparaison supplémentaire lié à la montée en ordre semble intéressant : le temps de calcul. Dans un premier temps, nous commençons par comparer les schémas pour $\varepsilon = \lambda = 1$. Ensuite, nous nous intéressons aux limites $\varepsilon, \lambda \rightarrow 0$ indépendamment l'une de l'autre. Pour finir, nous observerons le comportement en temps long des schémas.

Remarque 16. Pour l'ensemble des cas tests effectués dans cette section, le critère d'arrêt utilisé pour la méthode de Newton est la norme L^2 en espace de la différence entre deux itérés de point fixe consécutifs. Nous arrêtons la méthode de Newton lorsque cette erreur est inférieure à 10^{-8} .

3.4.1 Comportement des schémas numériques pour $\varepsilon, \lambda = 1$

Dans cette section, nous illustrons numériquement le comportement des schémas numériques présentés dans la section 3.3 pour $\varepsilon, \lambda = 1$. Nous comparons les schémas sur plusieurs critères qui sont l'ordre en temps, la préservation de la positivité et la vitesse de calcul. Dans le but d'illustrer le comportement des schémas sur ces critères, nous présentons deux cas tests.

Le domaine Ω considéré pour les deux cas tests est le carré $(0, 1)^2$. Puisque la solution exacte de (\mathcal{P}) pour $\varepsilon, \lambda = 1$ n'est pas connue, nous calculons une solution de référence pour chacun des schémas numériques. Le calcul de cette solution s'effectue sur un maillage triangulaire admissible composé de 896 triangles avec un pas de temps $\Delta t = 0.05/(10 \times 2^{10}) \approx 4.9 \cdot 10^{-6}$. Pour le schéma $(\mathcal{S}_{SDIRK}^{\Delta t^2})$, la formule $\Delta t^2 + (10 \times 2^{10} - 1)\Delta t = 0.05$ donne un pas de temps semblable $\Delta t \approx 4.9 \cdot 10^{-6}$. Comme nous l'avons vu dans la section 3.1.2, le modèle (\mathcal{P}) converge vers un état stationnaire

en temps long. Donc, il est important de prendre un temps final T petit afin de calculer une solution différente de l'état stationnaire. Dans toutes nos simulations, les normes L^2 en espace sont alors considérées au temps final $T = 0.05$.

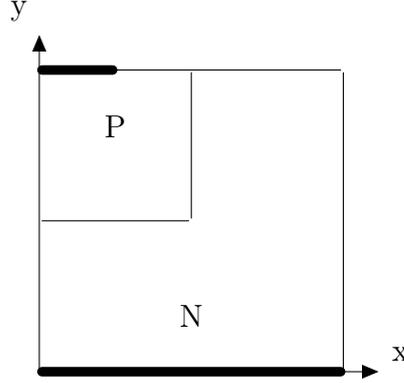


FIGURE 3.5: Géométrie d'une jonction P-N.

Cas test 1. Le premier cas test que nous considérons correspond à une jonction P-N (figure 3.5) dans le cadre des semi-conducteurs. Cependant, comme nous considérons un dopage nul, il entre également dans le cadre du théorème 2.3.1. En effet, pour ce cas test, les conditions au bord que nous considérons, vérifient à la fois les conditions $(H^{\varepsilon \rightarrow 0})$ et $(H^{\lambda \rightarrow 0})$ données dans la section 3.1.2.

Elles sont données par :

$$N^D(x, y) = \begin{cases} 0.9, & \forall (x, y) \in [0, 1] \times \{0\}, \\ 0.1, & \forall (x, y) \in [0, 0.25] \times \{1\}, \end{cases}$$

$$P^D(x, y) = \begin{cases} 0.9, & \forall (x, y) \in [0, 1] \times \{0\}, \\ 0.1, & \forall (x, y) \in [0, 0.25] \times \{1\}, \end{cases}$$

$$\Psi^D(x, y) = \ln(N^D(x, y)).$$

De plus, nous considérons des conditions au bord vérifiant la condition $(H^{\lambda \rightarrow 0})$:

$$N^{init}(x, y) = 0.9 - 0.8y, \quad \forall (x, y) \in (0, 1)^2,$$

$$P^{init}(x, y) = 0.9 - 0.8y, \quad \forall (x, y) \in (0, 1)^2.$$

Cas test 2. Nous proposons un cas test classique pour les modèles de semi-conducteurs, présent dans [6] et [13]. Le dopage de ce cas test n'est pas nul. La géométrie reste la même (jonction P-N) que pour le premier cas test.

Le dopage est donné par la fonction C suivante :

$$C(x, y) = \begin{cases} -0.8, & \forall (x, y) \in (0, 0.5) \times (0.5, 1), \\ 0.8, & \forall (x, y) \in \Omega \setminus ((0, 0.5) \times (0.5, 1)). \end{cases}$$

Les conditions au bord vérifient à la fois les conditions (H^{eq}) et $(H^{\lambda \rightarrow 0})$:

$$N^D(x, y) = \begin{cases} 0.9, & \forall (x, y) \in [0, 1] \times \{0\}, \\ 0.1, & \forall (x, y) \in [0, 0.25] \times \{1\}, \end{cases}$$

$$P^D(x, y) = \begin{cases} 0.1, & \forall (x, y) \in [0, 1] \times \{0\}, \\ 0.9, & \forall (x, y) \in [0, 0.25] \times \{1\}, \end{cases}$$

$$\Psi^D(x, y) = \frac{\ln(N^D(x, y)) - \ln(P^D(x, y))}{2}.$$

De plus, nous considérons des conditions initiales vérifiant la condition $(H^{\lambda \rightarrow 0})$:

$$N^{init}(x, y) = \frac{1 + C(x, y)}{2}, \quad \forall (x, y) \in (0, 1)^2,$$

$$P^{init}(x, y) = \frac{1 - C(x, y)}{2}, \quad \forall (x, y) \in (0, 1)^2.$$

Nous présentons dans les figures 3.6 et 3.7, les erreurs L^2 en espace calculées au temps final des densités N et P et du potentiel électrique Ψ pour chacun des schémas. Nous remarquons que les schémas $(\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t})$, $(\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t^2})$, (\mathcal{S}_{CN}) et $(\mathcal{S}_{SDIRKB}^{\pm})$ sont d'ordre 2 en temps et que les schémas $(\mathcal{S}_{SDIRKA}^{\pm})$ sont d'ordre 3. Malgré un ordre de convergence identique, nous pouvons remarquer que le schéma (\mathcal{S}_{SDIRKB}^-) est plus précis que le schéma (\mathcal{S}_{SDIRKB}^+) pour un pas de temps fixé. De même, pour les pas de temps supérieurs à 10^{-3} , le schéma (\mathcal{S}_{SDIRKA}^+) est beaucoup plus précis que le schéma (\mathcal{S}_{SDIRKA}^-) .

Les tableaux 3.1 et 3.2 donnent la valeur minimale de N sur l'ensemble des itérations par rapport à différents pas de temps. Nous pouvons observer que seul le schéma (\mathcal{S}_{SDIRKA}^-) ne garantit pas la positivité de N . En effet, pour les deux plus grands pas de temps, N peut prendre des valeurs négatives. Pour chacun d'eux, nous recensons les itérations pour lesquelles N est négatif ainsi que le pourcentage de cellules touchées dans les tableaux 3.3 et 3.4.

Dans les figures 3.8 et 3.9, nous présentons les diagrammes des temps CPU en secondes nécessaire pour obtenir une erreur L^2 en espace au temps final pour la den-

sité N inférieure à 10^{-7} . Notons que pour chaque schéma le pas de temps utilisé est différent : il est choisi comme étant le plus grand permettant d'atteindre le niveau d'erreur souhaité. Les tableaux 3.5 donnent les pas de temps pour chaque schéma. Les diagrammes donnés par les figures 3.8a et 3.9a montrent clairement que le schéma (\mathcal{S}_{SDIRKB}^+) est beaucoup plus lent que les autres schémas pour obtenir l'erreur demandée. Ceci peut être mis en lien avec le manque de précision relevé précédemment. En enlevant le schéma (\mathcal{S}_{SDIRKB}^+) des diagrammes, nous pouvons mieux visualiser les temps CPU donnés par les figures 3.8b et 3.9b. Nous pouvons alors observer que les schémas $(\mathcal{S}_{SDIRKA}^\pm)$ sont plus rapides que les autres. Malgré une complexité plus importante (deux systèmes non linéaires à résoudre à chaque itération), leur ordre de convergence plus élevé leur permet d'être des méthodes plus rapides.

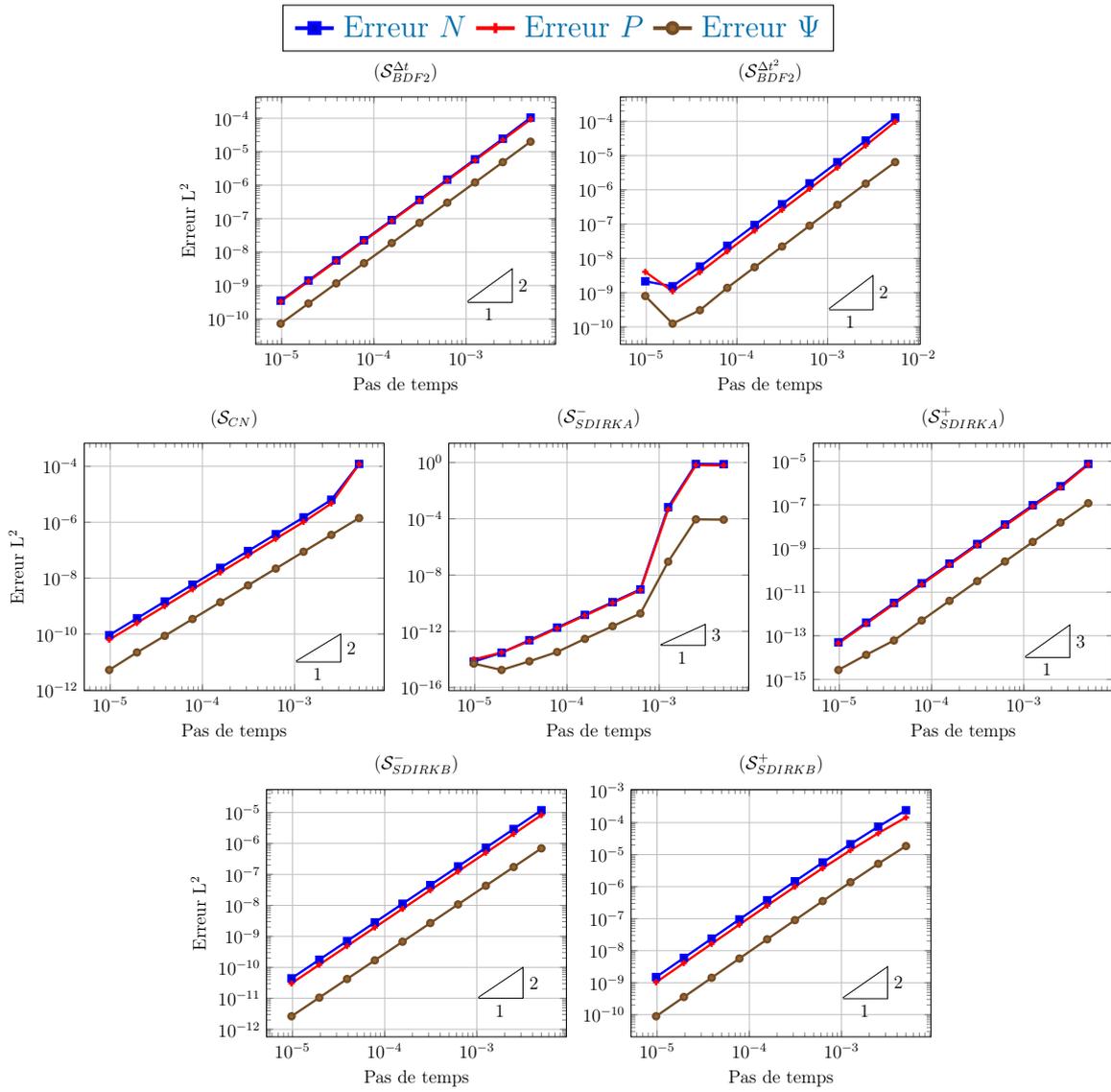


FIGURE 3.6: Cas test 1. Mise en évidence de l'ordre en temps des différents schémas

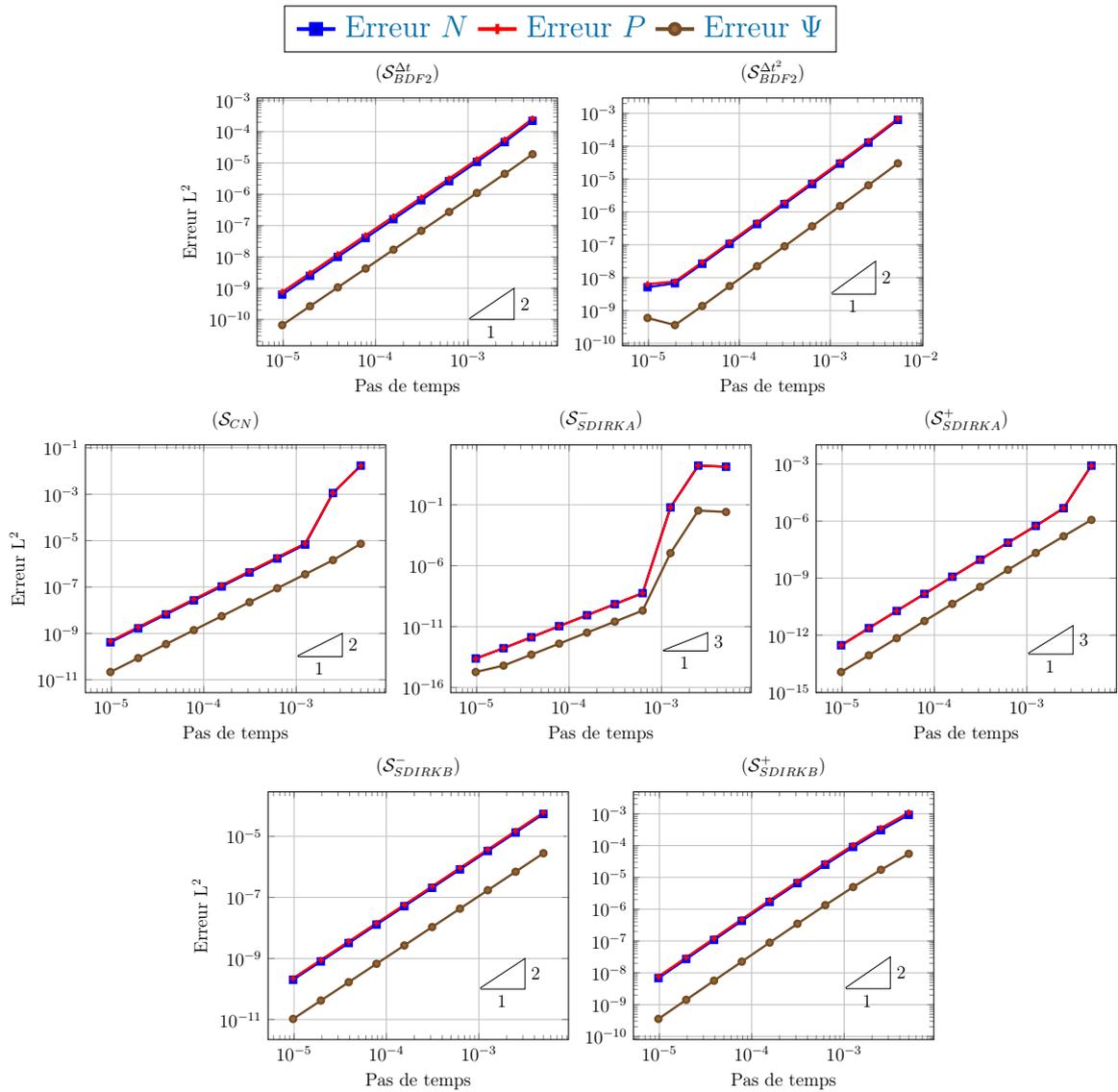


FIGURE 3.7: Cas test 2. Mise en évidence de l'ordre en temps des différents schémas.

TABLE 3.3: Cas test 1. Itérations pour lesquelles N prend des valeurs négatives et pourcentages de cellules atteintes, pour le schéma (\mathcal{S}_{SDIRKA}^-).

(a) $N_T = 10$		(b) $N_T = 20$	
Itération n°	%	Itération n°	%
9	0.67	13	0.11
10	2.23	14	0.33
		15	0.89
		16	1.34
		17	1.79
		18	2.68
		19	3.46
		20	4.58

TABLE 3.4: Cas test 2. Itérations pour lesquelles N prend des valeurs négatives et pourcentages de cellules atteintes, pour le schéma (\mathcal{S}_{SDIRKA}^-).

(a) $N_T = 10$		(b) $N_T = 20$			
Itération n°	%	Itération n°	%	Itération n°	%
1	1.34	2	1	12	7.14
2	1.79	3	1.56	13	9.04
3	1.79	4	2.34	14	9.6
4	4.24	5	2.68	15	9.6
5	4.46	6	3.68	16	10.27
6	5.8	7	4.91	17	12.05
7	6.92	8	5.36	18	14.62
8	7.59	9	6.03	19	15.51
9	8.37	10	6.92	20	15.07
10	12.17	11	6.92	–	–

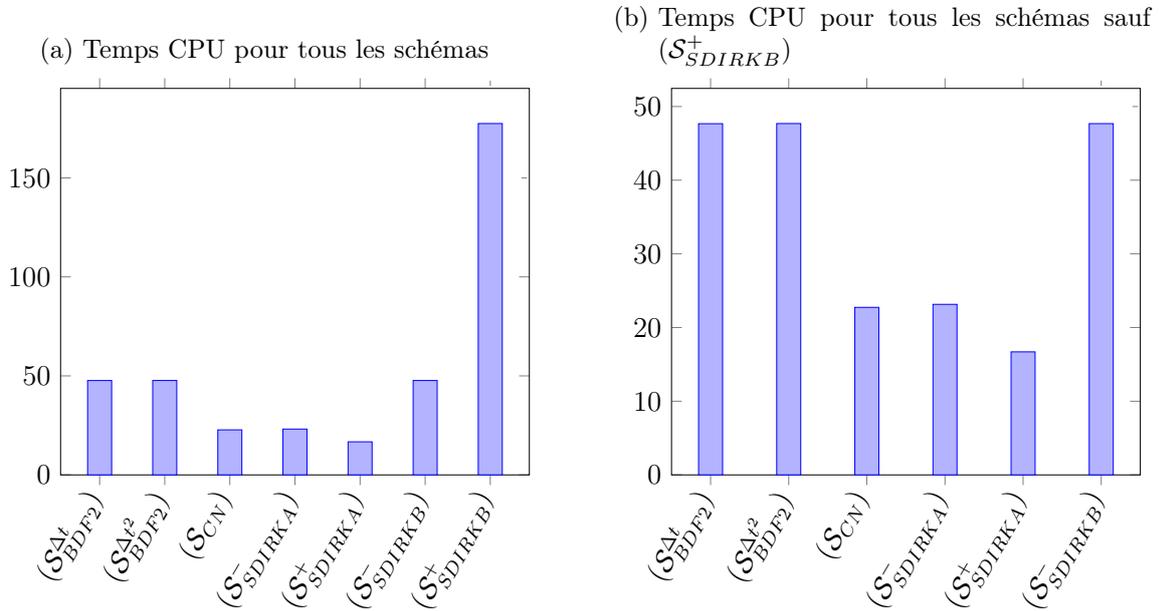


FIGURE 3.8: Cas test 1. Temps CPU en secondes pour obtenir une erreur L^2 en espace au temps final T sur N inférieure à 10^{-7} .

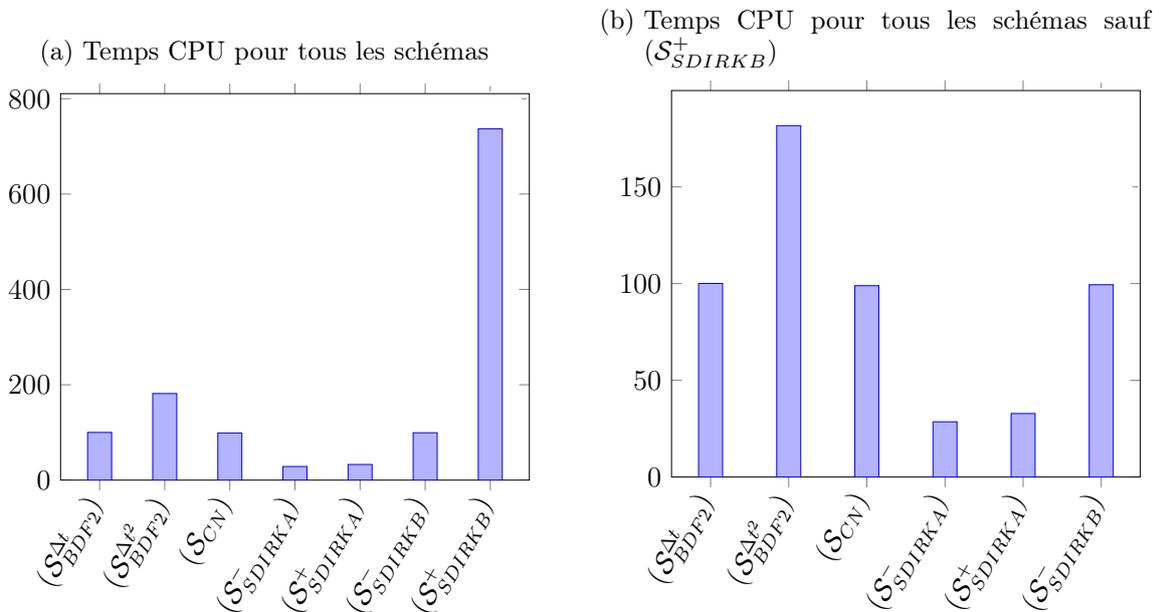


FIGURE 3.9: Cas test 2. Temps CPU en secondes pour obtenir une erreur L^2 en espace au temps final T sur N inférieure à 10^{-7} .

TABLE 3.5: Pas de temps utilisés pour le calcul des temps CPU des figures 3.8a et 3.9a.

(a) Cas test 1.		(b) Cas test 2.	
Schéma	Δt	Schéma	Δt
$(\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t})$	$1.56e-4$	$(\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t})$	$7.81e-5$
$(\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t^2})$	$1.57e-4$	$(\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t^2})$	$3.91e-5$
(\mathcal{S}_{CN})	$3.13e-4$	(\mathcal{S}_{CN})	$7.81e-5$
(\mathcal{S}_{DIRKA}^-)	$6.25e-4$	(\mathcal{S}_{DIRKA}^-)	$6.25e-4$
(\mathcal{S}_{DIRKA}^+)	$1.25e-3$	(\mathcal{S}_{DIRKA}^+)	$6.25e-4$
(\mathcal{S}_{DIRKB}^-)	$3.13e-4$	(\mathcal{S}_{DIRKB}^-)	$1.56e-4$
(\mathcal{S}_{DIRKB}^+)	$7.81e-5$	(\mathcal{S}_{DIRKB}^+)	$1.95e-5$

3.4.2 Comportement des schémas numériques pour $\lambda = 1$ et ε tendant vers 0

Intéressons nous maintenant, au comportement des schémas numériques lorsque ε tend vers 0. Notre but est d'observer le comportement AP (« asymptotic preserving ») ou non des différents schémas lorsque ε tend vers 0. Nous nous plaçons dans les mêmes conditions que dans la section 3.4.1. En effet, les études suivantes sont établies à partir des cas tests 1 et 2 de cette section. La seule différence par rapport à la section précédente réside dans le choix de ε . Ici, nous faisons varier ε , $\varepsilon \in \{0, 10^{-9}, 10^{-6}, 10^{-3}, 10^{-1}\}$.

Notons que dans les figures, nous ne présentons pas de courbe pour le schéma (\mathcal{S}_{SDIRKA}^-) . En effet, sur la plage de pas de temps considérée, ce schéma ne permet pas de calculer des solutions. Une condition de stabilité liant le paramètre ε et le pas de temps doit intervenir pour l'existence d'une solution. Nous avons constaté une erreur assez élevée pour le schéma (\mathcal{S}_{SDIRKA}^-) avec ε , $\lambda = 1$ dans la section 3.4.1, pour les pas de temps les plus grands.

Nous présentons dans les figures 3.10 et 3.11, les courbes de convergence de N par rapport au temps pour plusieurs valeurs de ε et pour chacun des schémas. Les erreurs sont calculées au temps final en utilisant une norme L^2 en espace. De plus, pour mieux visualiser le comportement de l'erreur L^2 en espace au temps final, nous présentons, par les figures 3.12 et 3.13, cette erreur par rapport à ε pour différentes valeurs du pas de temps. Des courbes similaires peuvent être tracées pour P et Ψ .

Pour les schémas $(\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t})$ et $(\mathcal{S}_{SDIRKB}^{\pm})$, nous pouvons observer que les courbes correspondantes gardent le même comportement lorsque ε décroît vers 0. En effet, les ordres de convergence en temps donnés par les pentes des courbes, restent 2 pour chaque valeur de ε . De plus, aucune instabilité n'apparaît sur les courbes. Nous constatons également la stabilité de l'erreur à pas de temps constant.

Pour le schéma $(\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t^2})$, les ordres de convergence en temps pour chaque valeur de ε sont 2. Cependant, une instabilité apparaît pour les pas de temps petits. Sur la figure 3.12, nous remarquons la stabilité de l'erreur à pas constant. Cependant, l'erreur pour le plus petit pas de temps est plus grande que l'erreur du pas de temps précédent. Ce comportement peut s'expliquer par la construction du schéma. En effet, lors de la deuxième itération du schéma, les coefficients de la méthode BDF2 dépendent du pas de temps, ce qui peut induire une erreur supplémentaire.

Pour le schéma (\mathcal{S}_{CN}) , une condition de stabilité liant le pas de temps et le paramètre ε doit intervenir pour la convergence en temps. En effet, nous obtenons la

convergence du schéma à partir d'un certain pas de temps conditionnellement au paramètre ε .

Enfin pour le schéma (\mathcal{S}_{SDIRKA}^+) , nous pouvons observer une dégénérescence de l'ordre de convergence en temps lorsque ε diminue. En effet, pour ε petit, le schéma n'est plus que d'ordre 2 au lieu de 3.

Les tableaux 3.6 et 3.7 donnent la valeur minimale de N sur l'ensemble des itérations d'un schéma numérique par rapport à ε pour $\Delta t = 0.05/(10 \cdot 2^4)$. Pour le cas test 2, nous pouvons observer que les schémas (\mathcal{S}_{CN}) et (\mathcal{S}_{SDIRKA}^+) ne conservent pas la positivité de N pour toutes les valeurs de ε . Pour chacun d'eux et pour la plus grande valeur de ε affectée, nous recensons les itérations pour lesquelles N est négatif ainsi que le pourcentage de cellules touchées dans le tableau 3.8. Nous nous apercevons que ce pourcentage ne cesse de diminuer lors des itérations.

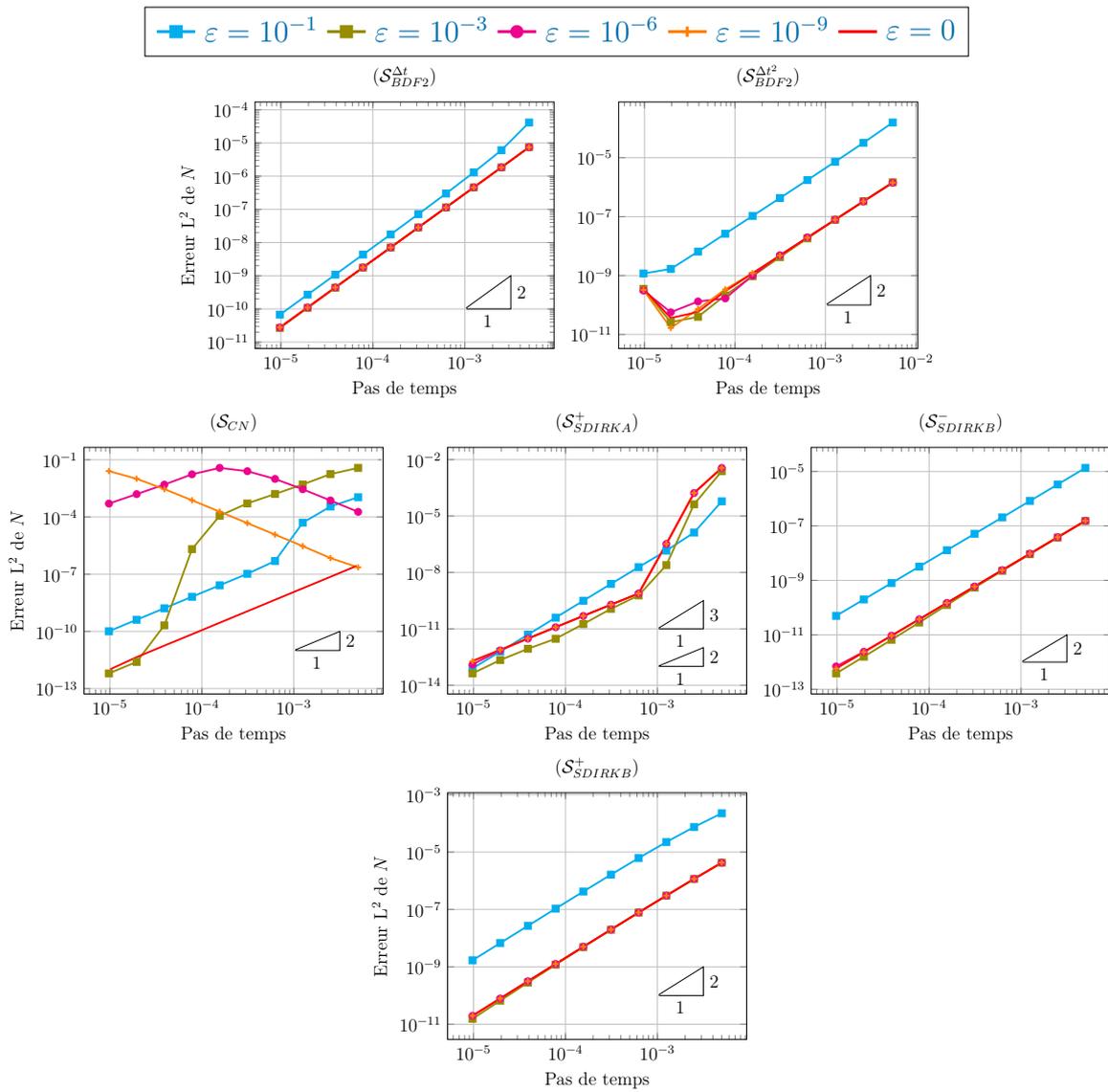


FIGURE 3.10: Cas test 1. Ordre de convergence des différents schémas lorsque ε tend vers 0.

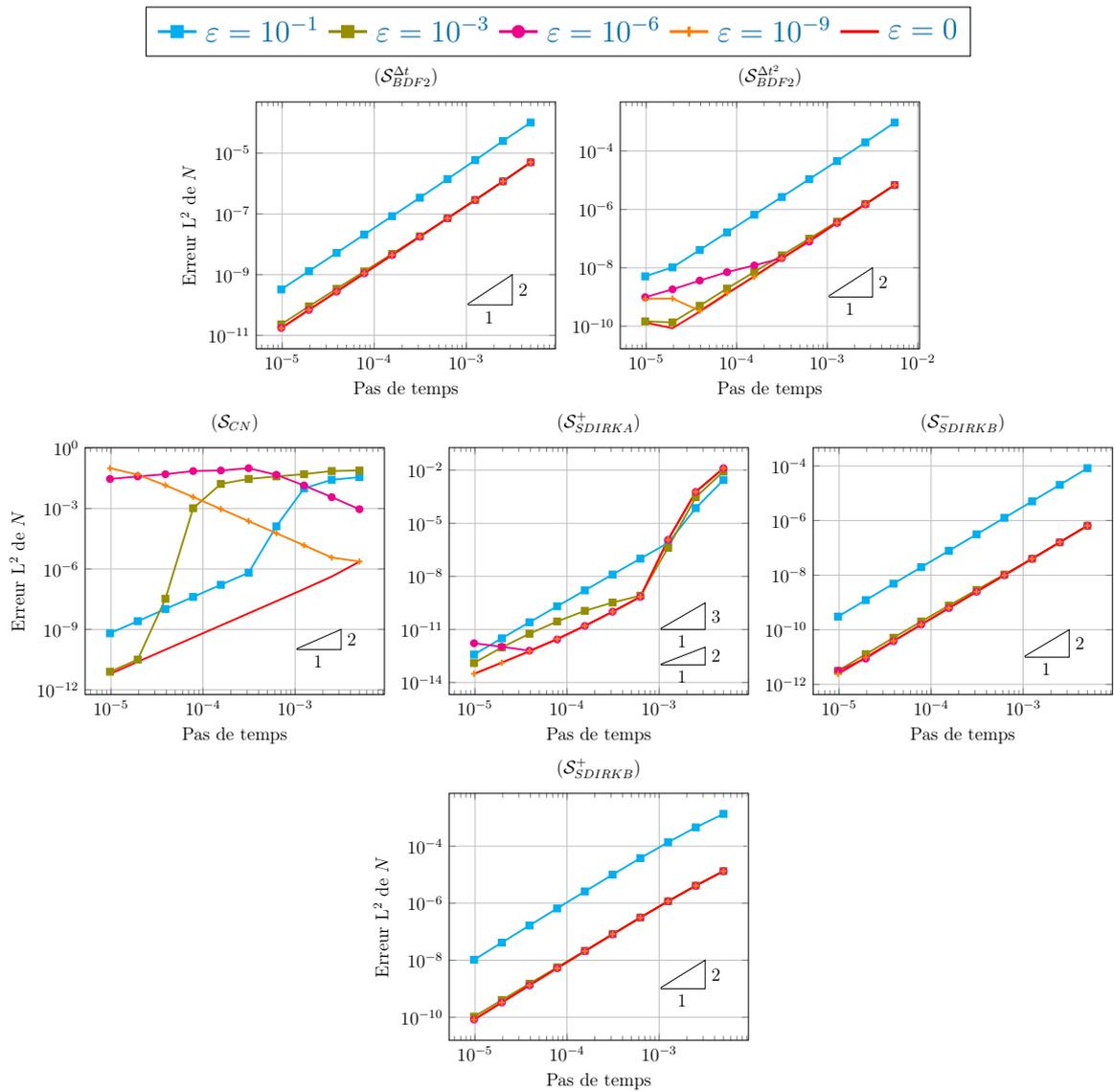


FIGURE 3.11: Cas test 2. Ordre de convergence des différents schémas lorsque ϵ tend vers 0.

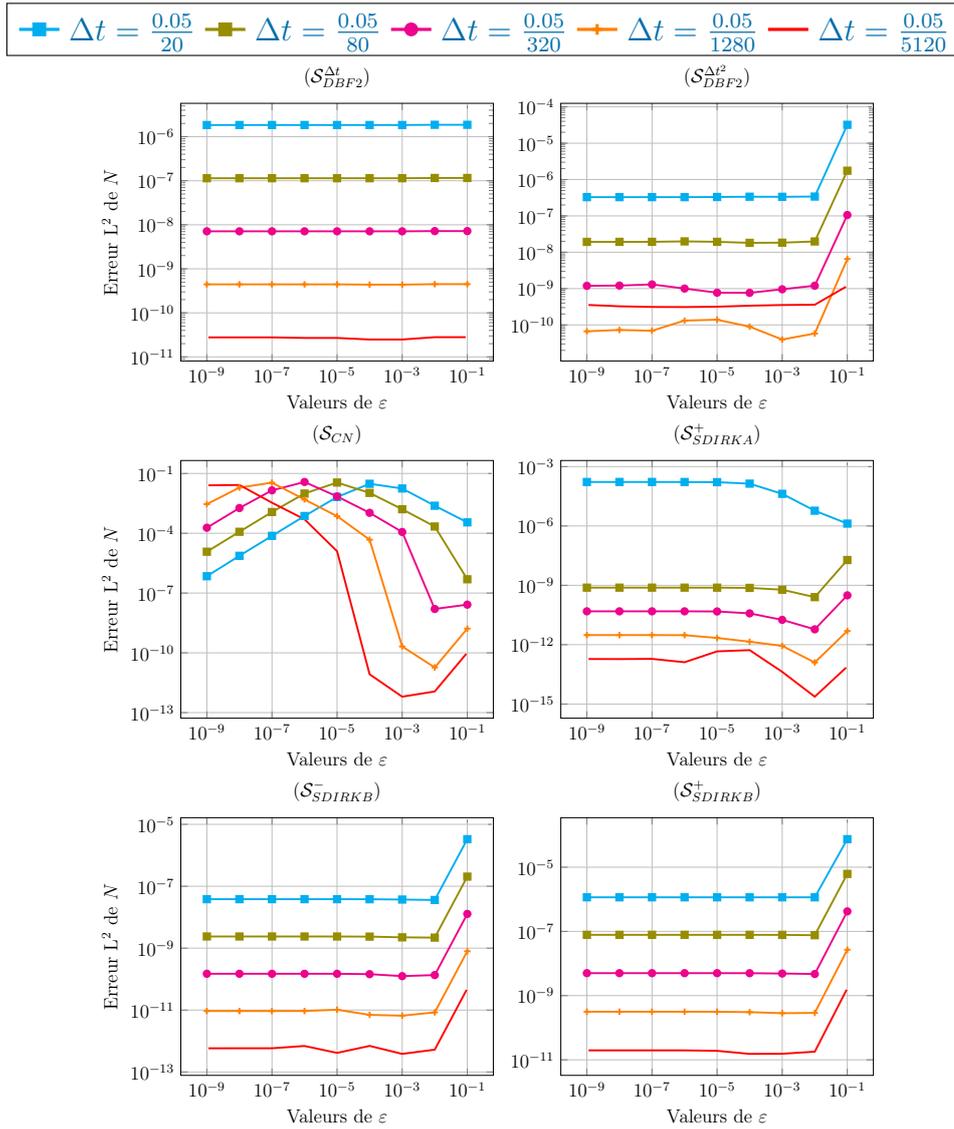


FIGURE 3.12: Cas test 1. Étude de la précision des différents schémas en fonction de ε .

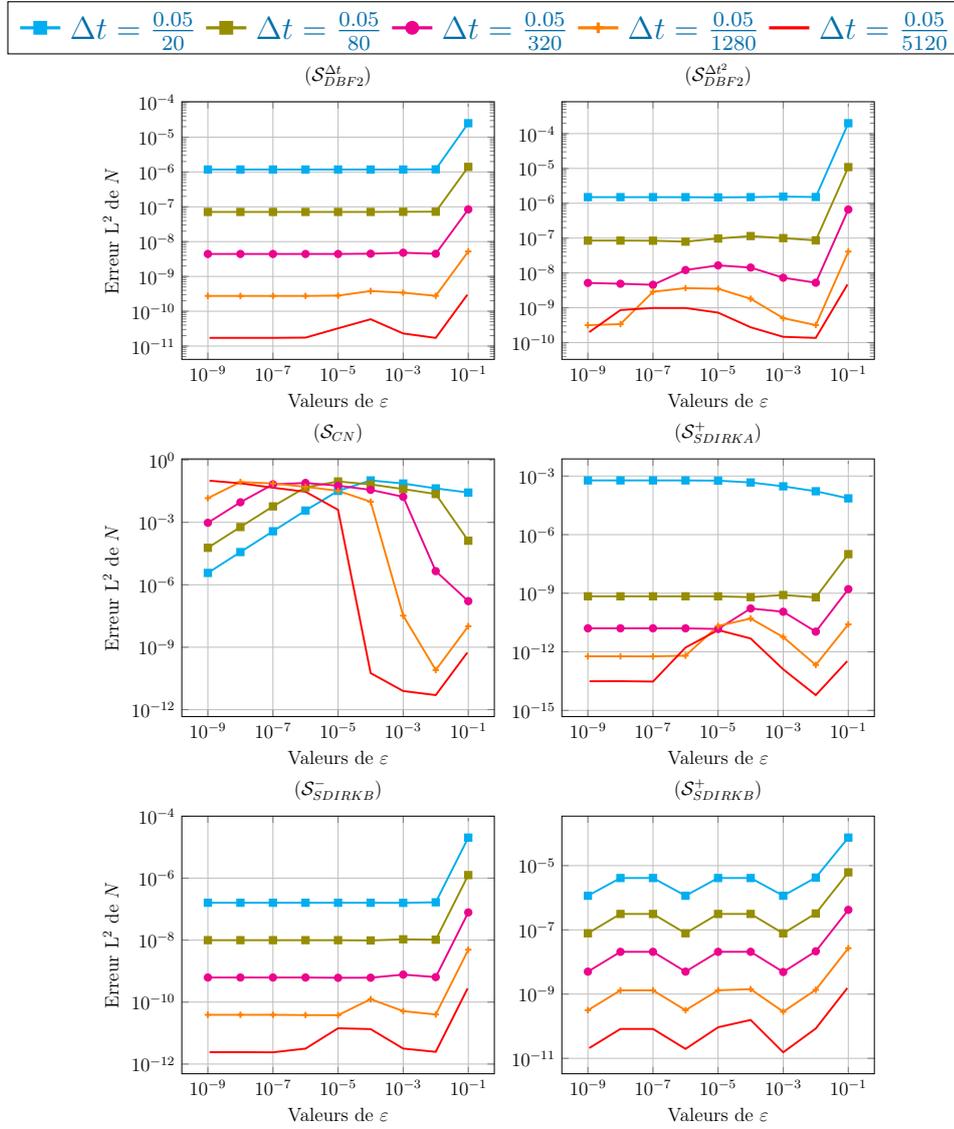


FIGURE 3.13: Cas test 2. Étude de la précision des différents schémas en fonction de ε .

TABLE 3.6: Cas test 1. Valeurs minimales de N obtenue en fonction de ε pour $\Delta t = 0.05/(10 \cdot 2^4)$.

ε	$(\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t})$	$(\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t^2})$	(\mathcal{S}_{CN})	(\mathcal{S}_{DIRKA}^+)	(\mathcal{S}_{DIRKB}^-)	(\mathcal{S}_{DIRKB}^+)
$1.0e-1$	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
$1.0e-3$	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
$1.0e-6$	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
$1.0e-9$	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1

TABLE 3.7: Cas test 2. Valeurs minimales de N obtenues en fonction de ε pour $\Delta t = 0.05/(10 \cdot 2^4)$.

ε	$(\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t})$	$(\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t^2})$	(\mathcal{S}_{CN})	(\mathcal{S}_{SDIRKA}^+)	(\mathcal{S}_{SDIRKB}^-)	(\mathcal{S}_{SDIRKB}^-)
$1.0e-1$	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
$1.0e-3$	0.1	0.03	-0.08	0.08	0.1	0.1
$1.0e-6$	0.1	0.1	-0.25	-0.1	0.1	0.1
$1.0e-9$	0.1	0.1	-0.25	-0.1	0.1	0.1

TABLE 3.8: Cas test 2. Itérations pour lesquelles N prend des valeurs négatives et pourcentages de cellules atteintes, pour les schémas (\mathcal{S}_{CN}) et (\mathcal{S}_{SDIRKA}^+) avec $N_T = 160$.

(a) $\varepsilon = 10^{-3}$ et (\mathcal{S}_{CN})				(b) $\varepsilon = 10^{-6}$ et (\mathcal{S}_{SDIRKA}^+)	
Itération n°	%	Itération n°	%	Itération n°	%
1	0.22	24	0.22	1	2.57
2	2.46	25	0.11		
3	0.78	26	0.22		
4	0.78	27	0.11		
5	0.67	28	0.11		
6	0.67	29	0.11		
7	0.45	30	0.11		
8	0.56	31	0.11		
9	0.45	32	0.11		
10	0.45	33	0.11		
11	0.45	34	0.11		
12	0.22	35	0.11		
13	0.45	36	0.11		
14	0.22	37	0.11		
15	0.33	38	0.11		
16	0.22	39	0.11		
17	0.33	40	0.11		
18	0.22	41	0.11		
19	0.22	42	0.11		
20	0.22	43	0.11		
21	0.22	44	0.11		
22	0.22	45	0.11		
23	0.11	46	0.11		

3.4.3 Comportement des schémas numériques pour $\varepsilon = 1$ et λ tendant vers 0

Intéressons nous maintenant, au comportement des schémas lorsque λ tend vers 0. Nous nous plaçons dans les mêmes conditions que dans la section 3.4.1. En effet, les études sont établies à partir du cas test 2 et du cas test 3 défini ci-dessous. La seule différence avec la section 3.4.1 réside dans le choix de λ . Ici nous faisons varier λ , $\lambda \in \{10^{-1}, 10^{-2}, 10^{-3}, 10^{-4}, 10^{-6}\}$.

Cas test 3 Le domaine Ω considéré est le carré $(0, 1)^2$. Ce cas test a une géométrie correspondant à une jonction P-N (voir la figure 3.5). Nous calculons une solution de référence pour chacun des schémas. Le calcul de cette solution s'effectue sur un maillage triangulaire admissible composé de 896 triangles avec un pas de temps $\Delta t = 0.05/(10 \times 2^{10}) \approx 4.9 \cdot 10^{-6}$. Nous considérons comme temps final $T = 0.05$. Dans ce cas test, nous considérons un dopage nul.

Les conditions au bord vérifient la condition ($H^{\lambda \rightarrow 0}$) :

$$N^D(x, y) = \begin{cases} 0, & \forall (x, y) \in [0, 1] \times \{0\}, \\ 1, & \forall (x, y) \in [0, 0.25] \times \{1\}, \end{cases}$$

$$P^D(x, y) = \begin{cases} 0, & \forall (x, y) \in [0, 1] \times \{0\}, \\ 1, & \forall (x, y) \in [0, 0.25] \times \{1\}, \end{cases}$$

$$\Psi^D(x, y) = \begin{cases} 0, & \forall (x, y) \in [0, 1] \times \{0\}, \\ 4, & \forall (x, y) \in [0, 0.25] \times \{1\}, \end{cases}$$

Les conditions initiales que nous considérons, vérifient aussi la condition ($H^{\lambda \rightarrow 0}$) :

$$N^{init}(x, y) = 0.5, \quad \forall (x, y) \in (0, 1)^2,$$

$$P^{init}(x, y) = 0.5, \quad \forall (x, y) \in (0, 1)^2.$$

Notons que dans les figures, nous ne présentons pas de courbe pour les schémas ($\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t^2}$) et (\mathcal{S}_{SDIRKA}^-). En effet, sur la plage de pas de temps considérée, le schéma (\mathcal{S}_{SDIRKA}^-) ne permet pas de calculer de solution. Une condition de stabilité liant le paramètre λ et le pas de temps doit intervenir pour l'existence d'une solution. Le schéma ($\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t^2}$) est quant à lui moins bon que le schéma ($\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t}$) pour les petits pas de temps (voir les figures 3.10 et 3.11).

Nous présentons dans les figures 3.14 et 3.15, les courbes de convergence de N par

rapport au temps pour plusieurs valeurs de λ et pour chacun des schémas. Les erreurs sont calculées au temps final en utilisant une norme L^2 en espace. De plus, pour mieux visualiser le comportement de l'erreur L^2 en espace au temps final, nous présentons, dans les figures 3.16 et 3.17, cette erreur par rapport à λ^2 pour différentes valeurs du pas de temps. Des courbes similaires peuvent être tracées pour P et Ψ .

Pour le cas test 2, nous notons l'apparition de palier dépendant de la valeur de λ . Ces paliers apparaissent au même niveau pour chaque schéma. De plus, ils n'apparaissent pas pour le cas test 3. Nous en déduisons qu'ils sont dus au dopage non nul.

Cependant, pour les schémas $(\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t})$, $(\mathcal{S}_{SDIRKB}^{\pm})$ et (\mathcal{S}) , nous pouvons observer avant l'apparition des paliers que les ordres de convergence en temps donnés par les pentes des courbes de la figure 3.14, sont 2 ou 1 pour chaque valeur de λ .

Pour le schéma (\mathcal{S}_{CN}) , une condition de stabilité liant le pas de temps et le paramètre λ doit intervenir pour la convergence en temps. En effet, nous obtenons la convergence du schéma à partir d'un certain pas de temps conditionnellement au paramètre λ .

Pour le schéma (\mathcal{S}_{SDIRKA}^+) , il est difficile de se prononcer sur l'ordre de convergence au vu des courbes.

Pour le cas test 3 et les schémas $(\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t})$, (\mathcal{S}_{SDIRKA}^+) et $(\mathcal{S}_{SDIRKB}^{\pm})$, nous observons la stabilité des courbes correspondantes lorsque $\lambda \rightarrow 0$. Ce comportement apparaît plus clairement sur la figure 3.17. Cependant, le schéma (\mathcal{S}_{SDIRKB}^-) ne permet pas de calculer des solutions pour les grands pas de temps lorsque la valeur de λ est petite.

Le schéma (\mathcal{S}_{CN}) se comporte moins bien que les autres. En effet, pour un pas de temps fixé, l'erreur L^2 en espace au temps final augmente pour les plus petites valeurs de λ comme le montre la figure 3.17. De plus, le schéma (\mathcal{S}_{CN}) ne permet pas de calculer des solutions pour les grands pas de temps.

Les tableaux 3.9 et 3.10 donnent la valeur minimale de N sur l'ensemble des itérations pour chaque schéma numérique par rapport à λ pour $\Delta t = 0.05/(10 \cdot 2^4)$. Pour les deux cas tests, nous pouvons observer que tous les schémas conservent la positivité de N pour toutes les valeurs de λ .

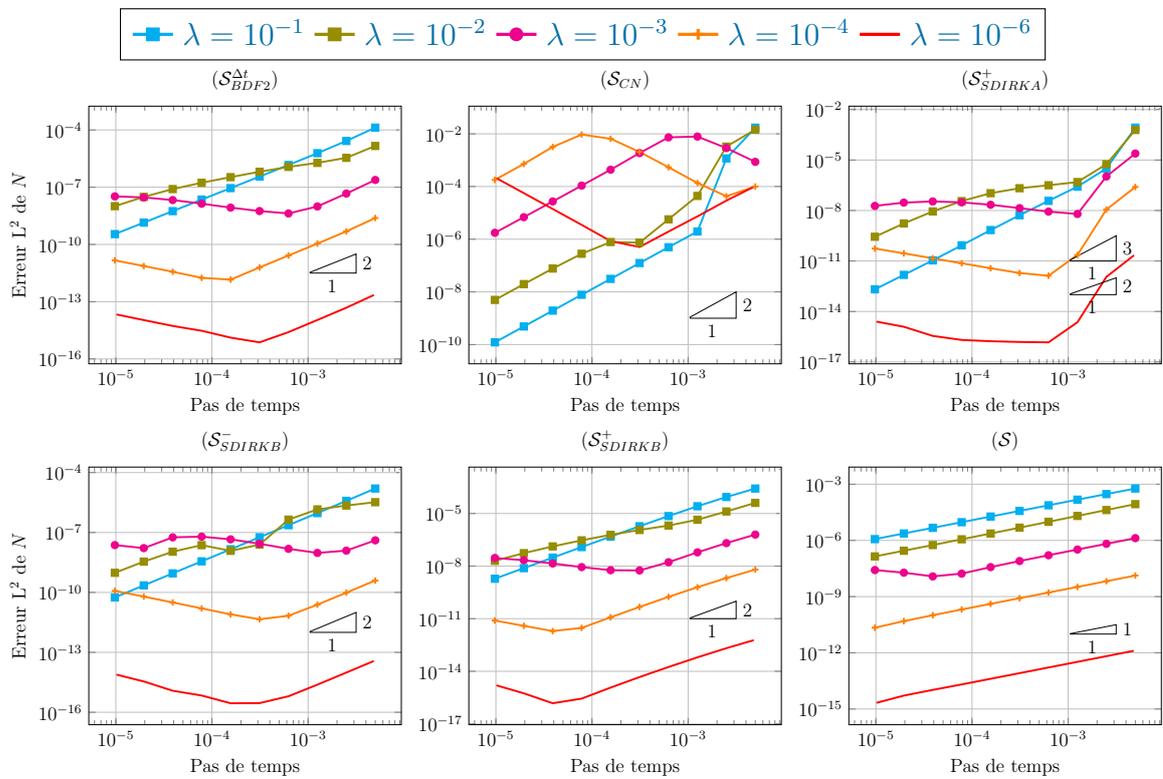


FIGURE 3.14: Cas test 2. Ordre de convergence des différents schémas lorsque λ tend vers 0.

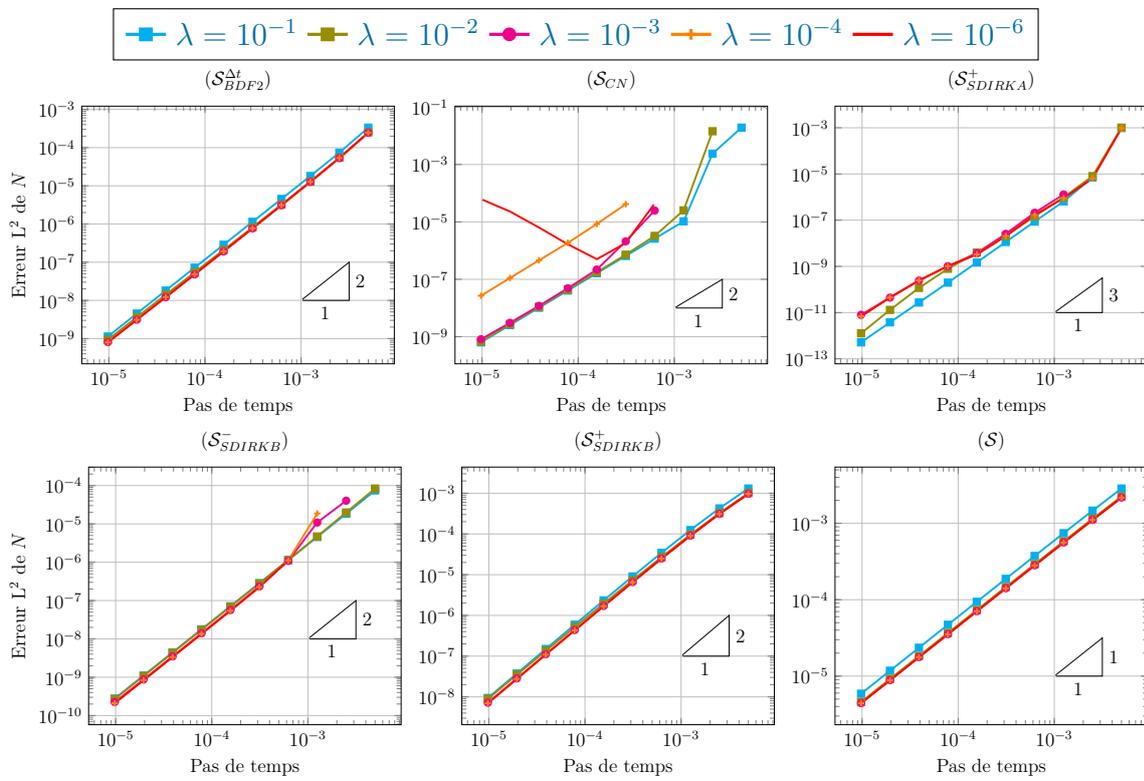


FIGURE 3.15: Cas test 3. Ordre de convergence des différents schémas lorsque λ tend vers 0.

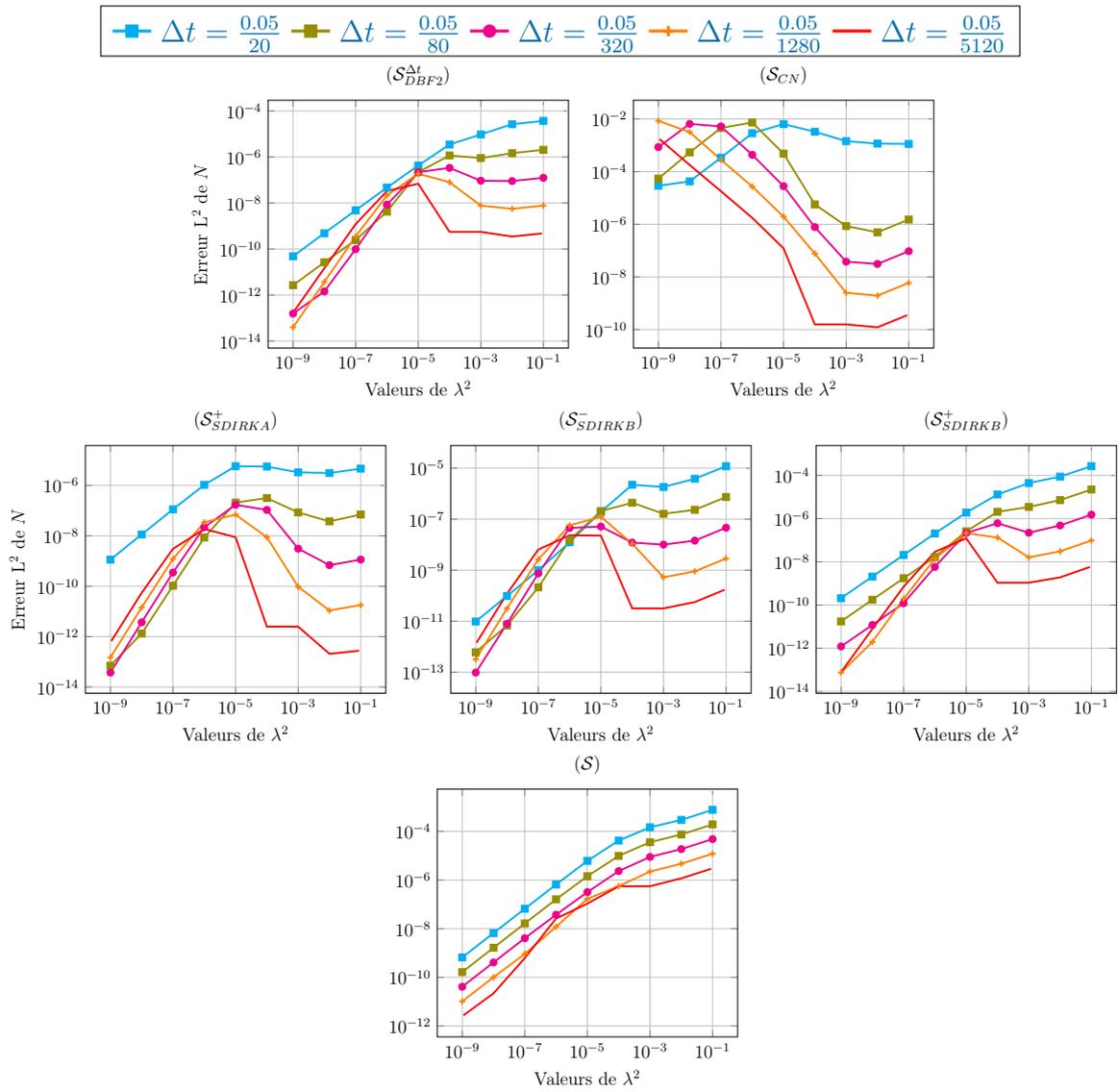


FIGURE 3.16: Cas test 2. Étude de la précision des différents schémas en fonction de λ .

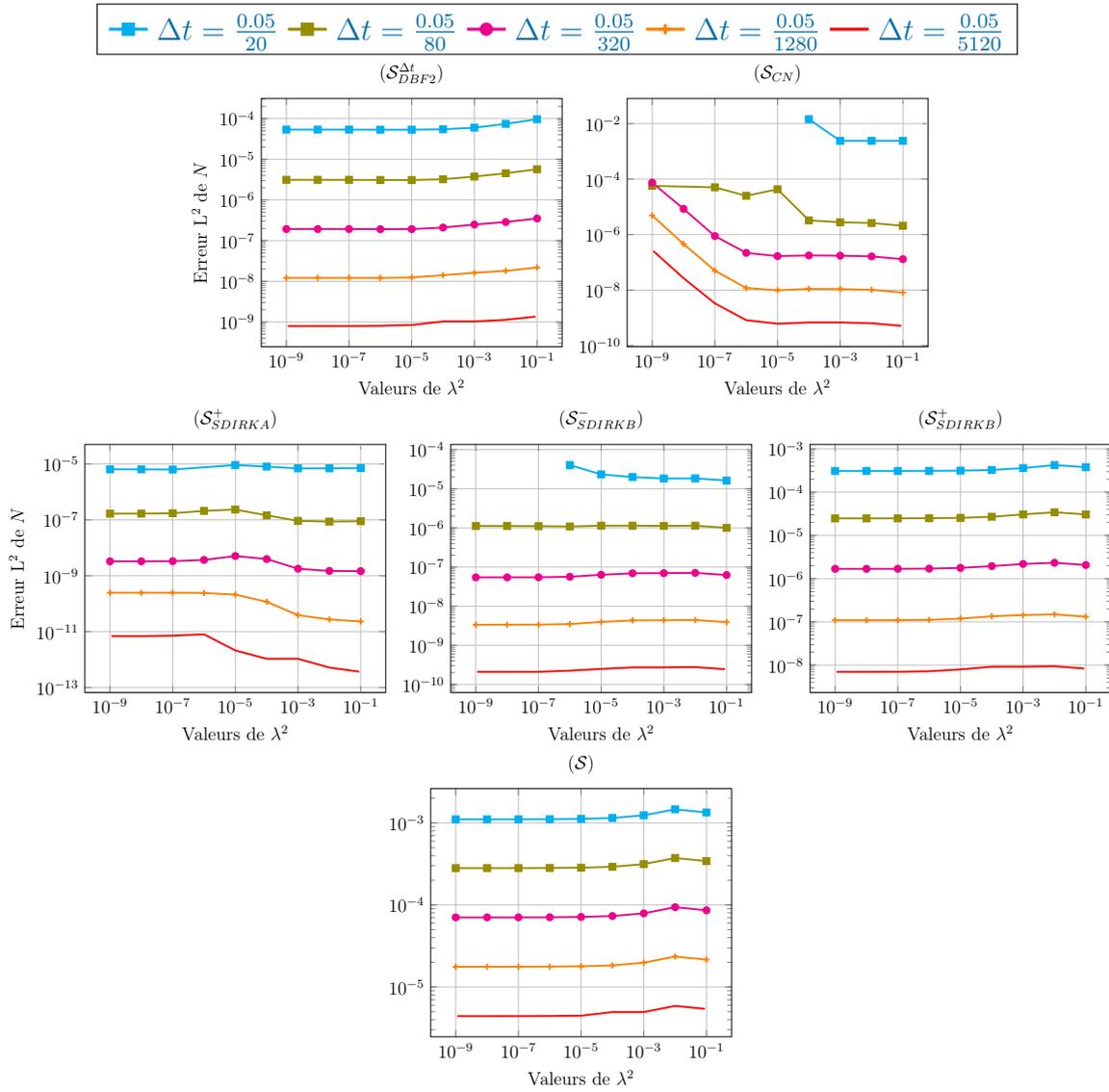


FIGURE 3.17: Cas test 3. Étude de la précision des différents schémas en fonction de λ .

TABLE 3.9: Cas test 2. Valeurs minimales de N obtenue en fonction de λ pour $\Delta t = 0.05/(10 \cdot 2^4)$

λ	$(\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t})$	(\mathcal{S}_{CN})	(\mathcal{S}_{SDIRKA}^+)	(\mathcal{S}_{SDIRKB}^-)	(\mathcal{S}_{SDIRKB}^-)
1e-1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
1e-2	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
1e-3	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
1e-4	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
1e-6	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1

TABLE 3.10: Cas test 3. Valeurs minimales de N obtenue en fonction de λ pour $\Delta t = 0.05/(10 \cdot 2^4)$

λ	$(\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t})$	(\mathcal{S}_{CN})	(\mathcal{S}_{SDIRKA}^+)	(\mathcal{S}_{SDIRKB}^-)	(\mathcal{S}_{SDIRKB}^-)
1e-1	3.2e-3	3.2e-3	3.2e-3	3.2e-3	3.2e-3
1e-2	3.5e-3	3.5e-3	3.5e-3	3.5e-3	3.5e-3
1e-3	5.46e-3	5.46e-3	5.46e-3	5.46e-3	5.47e-3
1e-4	7.32e-3	7.28e-3	7.32e-3	7.32e-3	7.32e-3
1e-6	7.36e-3	6.91e-3	7.36e-3	7.36e-3	7.36e-3

3.4.4 Comportement des schémas numériques en temps long

Dans cette section, nous nous intéressons au comportement en temps long des schémas pour $\varepsilon, \lambda = 1$. Notre but est d'observer la décroissance exponentielle de l'énergie relative discrète et de l'erreur relative L^2 en espace. La version discrète de l'énergie relative (3.6) est donnée dans [5]. Nous avons choisi un cas test défini et présenté dans [5] pour vérifier le comportement des schémas.

Cas test 4 Le domaine Ω considéré est le carré $(0, 1)^2$. Ce cas test a une géométrie correspondant à une jonction P-N (voir la figure 3.5). Nous calculons une solution approchée de l'équilibre thermique, grâce au schéma présenté ci-dessous, et une solution du modèle (\mathcal{P}) sur un maillage composé de 896 triangles avec un pas de temps $\Delta t = 10^{-3}$, jusqu'au temps final $T = 10$.

Le dopage est donné par la fonction C suivante :

$$C(x, y) = \begin{cases} -1, & \forall (x, y) \in (0, 0.5) \times (0.5, 1), \\ 1, & \forall (x, y) \in \Omega \setminus ((0, 0.5) \times (0.5, 1)). \end{cases}$$

Pour ce cas test, les conditions au bord, que nous considérons, vérifient la condition (H^{eq}). Elles sont données par :

$$N^D(x, y) = \begin{cases} e, & \forall (x, y) \in [0, 1] \times \{0\}, \\ 1, & \forall (x, y) \in [0, 0.25] \times \{1\}, \end{cases}$$

$$P^D(x, y) = \begin{cases} e^{-1}, & \forall (x, y) \in [0, 1] \times \{0\}, \\ 1, & \forall (x, y) \in [0, 0.25] \times \{1\}, \end{cases}$$

$$\Psi^D(x, y) = \frac{\ln(N^D(x, y)) - \ln(P^D(x, y))}{2}.$$

Les conditions initiales que nous considérons, sont les suivantes :

$$N^{init}(x, y) = 1 + (e - 1)(1 - \sqrt{y}), \quad \forall (x, y) \in (0, 1)^2,$$

$$P^{init}(x, y) = 1 + (e^{-1} - 1)(1 - \sqrt{y}), \quad \forall (x, y) \in (0, 1)^2.$$

Remarque 17. Nous notons que le cas test vérifie bien la condition (H^{eq}) donnée dans la section 3.1.2. En effet, le cas test vérifie $\alpha_N = \alpha_P = \frac{\ln(N^D(x, y)) - \ln(P^D(x, y))}{2}$.

Pour calculer l'énergie relative discrète et l'erreur relative L^2 en espace, nous devons d'abord calculer l'équilibre thermique lié à notre cas test. Pour cela, nous approchons

le système (3.4) non linéaire. La discrétisation utilisée est de type volumes finis. Le schéma à résoudre, donné dans [5] est le suivant : $\forall K \in \mathcal{T}$

$$-\lambda^2 \sum_{\sigma \in \mathcal{E}_K} \tau_\sigma D\Psi_{K,\sigma}^{eq} = m(K) \exp(\alpha_P - \Psi_K^{eq}) + \exp(\alpha_N + \Psi_K^{eq}) + C_K,$$

$$P_K^{eq} = \exp(\alpha_P - \Psi_K^{eq}),$$

$$N_K^{eq} = \exp(\alpha_N + \Psi_K^{eq}).$$

Le schéma est complété par les conditions au bord (3.3) discrétisées.

La solution de ce schéma s'obtient en résolvant l'équation non linéaire vérifiée par Ψ^{eq} puis en déduisant les valeurs de P^{eq} et N^{eq} .

Dans la figure 3.18, nous représentons l'évolution temporelle des énergies relatives discrètes pour chacun des schémas. Nous obtenons les mêmes résultats que ceux obtenus par M. Bessemoulin-Chatard et C. Chainais-Hillairet dans [5]. En effet, nous observons une décroissance exponentielle vers l'état d'équilibre. Nous représentons également dans la figure 3.19, l'évolution temporelle de la norme L^2 en espace de $N^n - N^{eq}$, pour tout $n \in \llbracket 0, N_T \rrbracket$, avec $N_T = T/\Delta t$. Celle-ci a aussi le comportement souhaité.

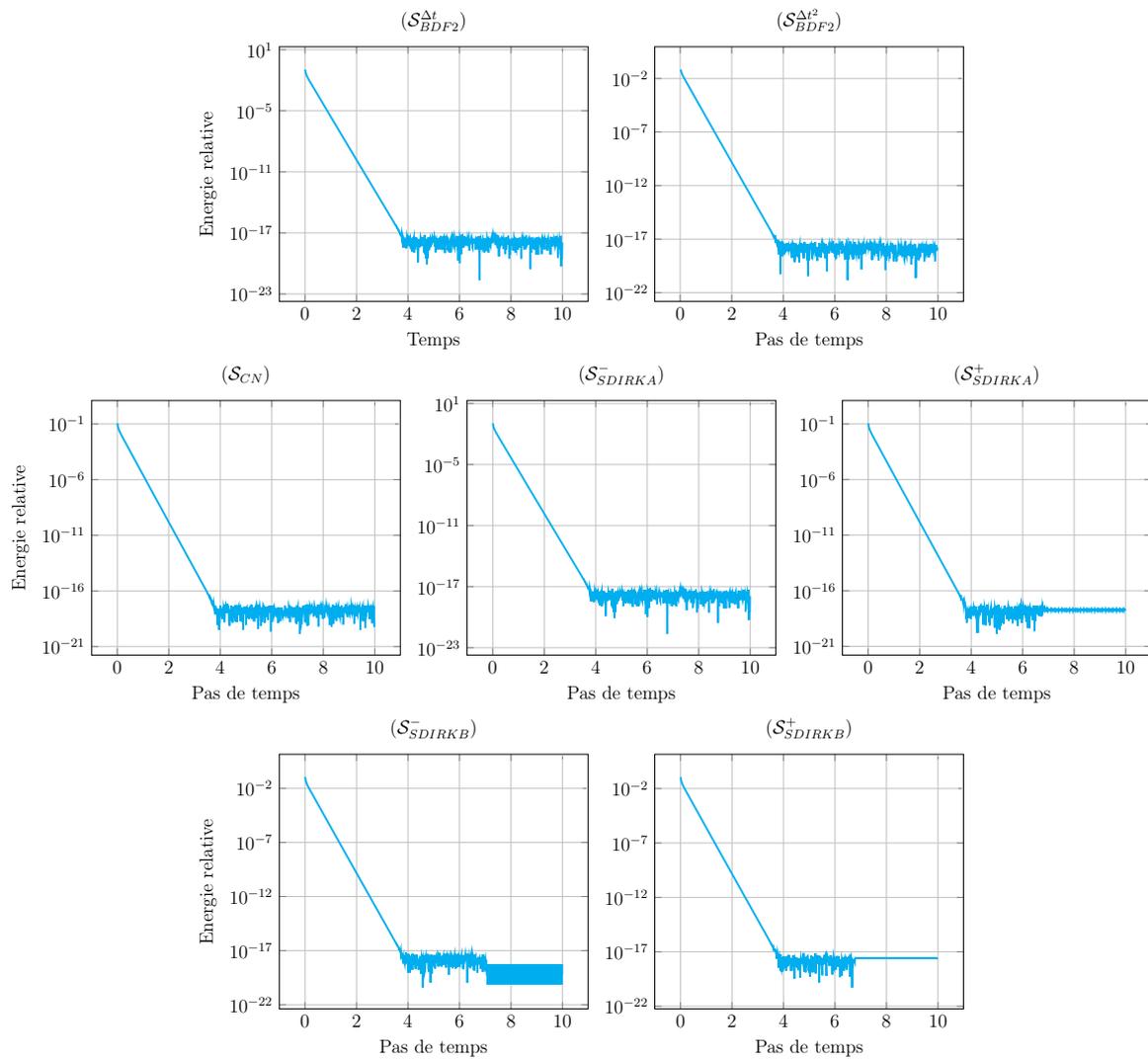


FIGURE 3.18: Cas test 4. Comportement en temps long : évolution de l'énergie relative en fonction du temps.

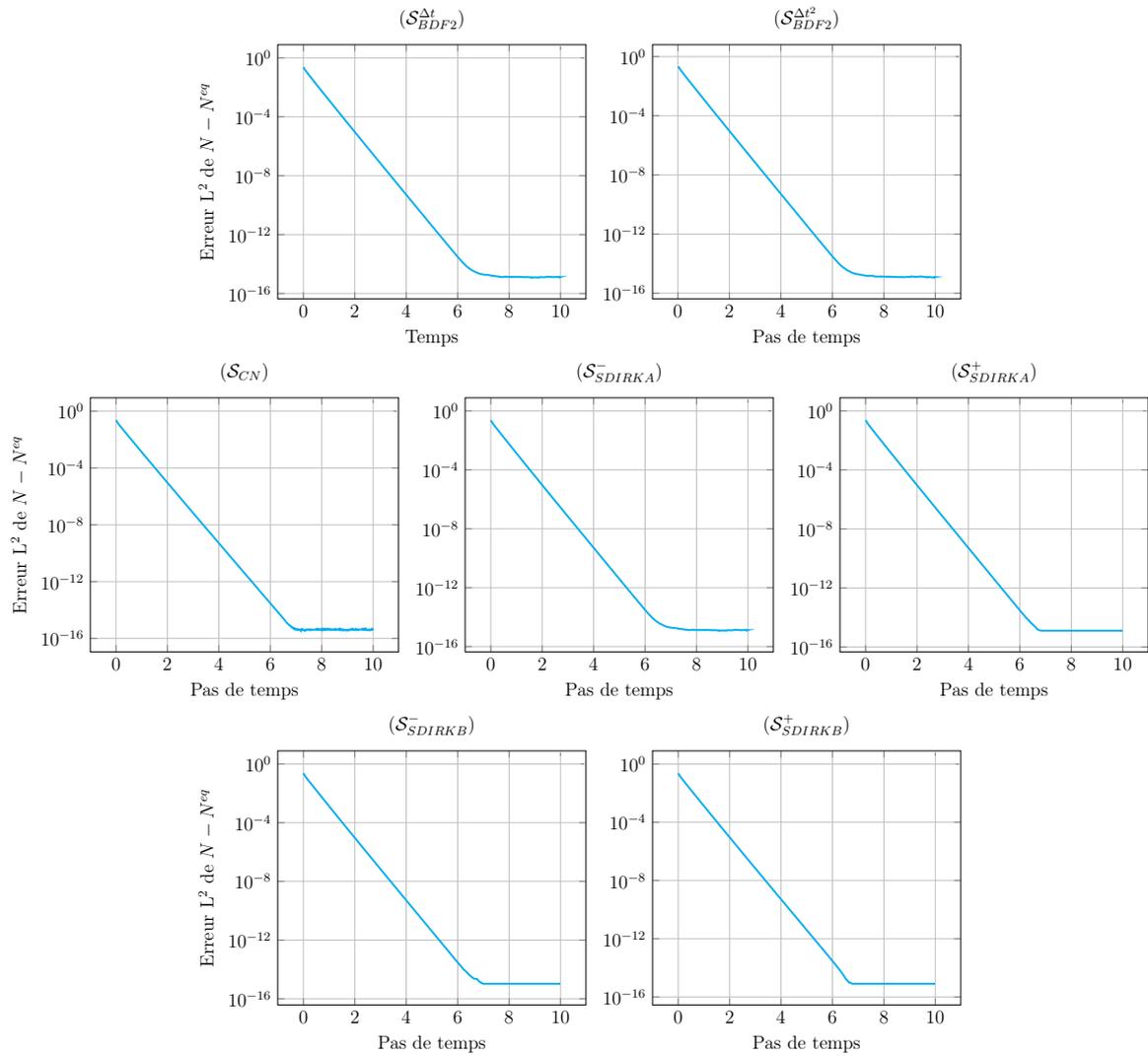


FIGURE 3.19: Cas test 4. Comportement en temps long : évolution de $\|N - N^{eq}\|_2$ en fonction du temps.

3.4.5 Conclusion

Les expérimentations numériques nous donnent une idée assez précise du comportement de chaque schéma. Nous rappelons les résultats obtenus sur chacun des critères observés.

Pour $\varepsilon, \lambda = 1$, nous avons observé que les schémas $(\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t})$, $(\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t^2})$, (\mathcal{S}_{CN}) et $(\mathcal{S}_{SDIRKB}^{\pm})$ sont d'ordre 2 en temps et les schémas $(\mathcal{S}_{SDIRKA}^{\pm})$ d'ordre 3. Seul le schéma $(\mathcal{S}_{SDIRKA}^{-})$ ne conserve pas la positivité des densités discrètes pour ce choix de paramètres. Pour obtenir une erreur donnée L^2 en espace au temps final, le schéma $(\mathcal{S}_{SDIRKB}^{+})$ est beaucoup moins efficace que les autres. De plus, les schémas $(\mathcal{S}_{SDIRKA}^{\pm})$ sont les plus rapides malgré leur nombre de systèmes non linéaires à résoudre plus importants.

Tous les schémas numériques ont le comportement souhaité en temps long. En effet, nous avons observé les décroissances exponentielles de l'énergie relative et de $\|N - N^{eq}\|_2$ au cours du temps.

Pour $\lambda = 1$ et $\varepsilon \rightarrow 0$, nous avons observé que $(\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t})$, $(\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t^2})$ et $(\mathcal{S}_{SDIRKB}^{\pm})$ conservent l'ordre 2. Cependant, nous avons constaté que le schéma $(\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t^2})$ était moins précis que le schéma $(\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t})$ pour les pas de temps les plus petits. L'ordre de $(\mathcal{S}_{SDIRKA}^{+})$ devient 2 pour les valeurs de ε les plus petites. La convergence du schéma (\mathcal{S}_{CN}) dépend conditionnellement de ε . Enfin, sur la plage de pas de temps considérée, le schéma $(\mathcal{S}_{SDIRKA}^{-})$ ne permet pas de calculer de solution. La stabilité de l'erreur n'est clairement pas obtenue pour le schéma (\mathcal{S}_{CN}) , contrairement aux autres schémas. De plus, pour ce choix de paramètres, (\mathcal{S}_{CN}) et $(\mathcal{S}_{SDIRKA}^{+})$ ne préservent pas la positivité de P et N .

Pour $\varepsilon = 1$ et $\lambda \rightarrow 0$, nous avons observé un comportement particulier pour le cas test 2. Nous en avons déduit l'influence du dopage sur le comportement asymptotique des schémas lorsque $\lambda \rightarrow 0$. Pour le cas test 3 (sans dopage), les schémas $(\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t})$ et $(\mathcal{S}_{SDIRKB}^{\pm})$ conservent un ordre de convergence égal à 2. Cependant, pour le plus grand pas de temps et les plus petites valeurs de λ , le schéma $(\mathcal{S}_{SDIRKB}^{-})$ ne permet pas de calculer de solution. Le schéma $(\mathcal{S}_{SDIRKA}^{+})$ semble avoir un ordre de convergence compris entre 2 et 3. L'existence de solutions pour le schéma (\mathcal{S}_{CN}) semble dépendre d'une condition de stabilité liant le pas de temps et le paramètre λ . La stabilité de l'erreur n'est pas observée pour le schéma (\mathcal{S}_{CN}) . Avec ce choix de paramètre, la positivité est conservée pour tous les schémas.

En conclusion, les schémas $(\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t})$ et $(\mathcal{S}_{SDIRKB}^{+})$ semblent être les schémas d'ordre 2 en temps les plus adaptés pour conserver les propriétés souhaitées. Cependant, le schéma $(\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t})$ est plus efficace en temps de calcul que le schéma $(\mathcal{S}_{SDIRKB}^{+})$.

À l'avenir, il serait donc intéressant d'étudier théoriquement le schéma $(\mathcal{S}_{BDF_2}^{\Delta t})$: existence de solutions, comportement asymptotique en temps long ou lorsque $\varepsilon, \lambda \rightarrow 0$, convergence de solutions approchées vers une solution du modèle de dérive-diffusion.

Conclusion et perspectives

Dans les chapitres 1 et 2, nous nous sommes intéressés à un schéma numérique de type Euler implicite en temps et volumes finis en espace pour des modèles de type dérive-diffusion. Dans le chapitre 1, nous avons considéré un modèle de corrosion simplifié et dans le chapitre 2, le modèle de dérive-diffusion linéaire pour les plasmas non magnétisés. Dans le chapitre 3, nous avons comparé des schémas numériques d'ordre 2 en temps pour le modèle de dérive-diffusion dans le cadre des semi-conducteurs.

Les modèles considérés comportent deux équations de dérive-diffusion couplées à une équation de Poisson (avec ou sans dopage). La différence principale entre le modèle de corrosion simplifié et le modèle de dérive-diffusion réside dans les conditions au bord : de type Robin pour le premier et de type mixte Dirichlet-Neumann pour le second. Notons que les conditions de Robin impliquent un couplage supplémentaire contrairement aux conditions Dirichlet-Neumann.

Chapitre 1 : Convergence d'un schéma volumes finis pour un modèle de corrosion

Dans ce chapitre, nous avons obtenu la convergence de solutions approchées vers une solution du modèle de corrosion simplifié. Ce résultat a été obtenu pour $\varepsilon > 0$.

Il serait intéressant d'établir ce résultat pour $\varepsilon = 0$ puisque dans la pratique $\varepsilon \ll 1$. Dans ce cas, la méthode utilisée dans la section 1.3.1 pour montrer la convergence forte de la suite $(N_m)_m$ de solutions approchées n'est plus valable. Cette convergence forte ou celle de la suite $(\partial_x \Psi_m)_m$ sont essentielles pour le passage à la limite à cause du produit $N \partial_x \Psi$ dans la définition 1.1.1 de la solution faible.

Le comportement AP (« asymptotic preserving ») que nous avons constaté lors des expérimentations numériques (voir la section 1.4), est important. Mais la limite du schéma lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$, semble difficile à obtenir pour l'instant, sans l'utilisation d'estimations d'énergie associées à une dissipation d'énergie.

Chapitre 2 : Stabilité d'un schéma volumes finis pour un modèle de dérive-diffusion lorsque la masse d'électrons tend vers zéro

Dans ce chapitre, nous avons démontré la stabilité lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$ du schéma associé au modèle de dérive-diffusion pour les plasmas non magnétisés.

Les expérimentations numériques effectuées dans ce chapitre semblent montrer que cette stabilité ne dépend ni de la condition de compatibilité ($N^D = e^{\Psi^D}$) ni du dopage nul pour les cas tests choisis. Il serait intéressant d'approfondir cette étude aussi bien théoriquement que numériquement.

Chapitre 3 : Comportements numériques de schémas volumes finis pour un modèle de dérive-diffusion

Dans ce chapitre, nous avons comparé plusieurs schémas associés au modèle de dérive-diffusion linéaire classique pour les semi-conducteurs. Notre but était d'obtenir des schémas d'ordre 2 en temps qui conservaient les propriétés asymptotiques du modèle. Cette montée en ordre est importante pour obtenir un même ordre en temps et en espace. Nous rappelons que la discrétisation en espace de tous les schémas présentés ici est la même que celle utilisée dans les chapitres 1 et 2.

Nous avons commencé par introduire sur une équation différentielle ordinaire du premier ordre, les méthodes numériques d'ordre 2 sélectionnées : Crank-Nicolson, SDIRK à 2 étages et BDF2. Après la présentation des schémas pour le modèle de dérive-diffusion linéaire, nous les avons comparés sur plusieurs critères : positivité des densités, ordre en temps, stabilité en temps long ou lorsque $\varepsilon, \lambda \rightarrow 0$. Nous avons aussi regardé le temps CPU des algorithmes pour l'obtention d'une erreur L^2 donnée.

Nous sommes arrivés à la conclusion que le schéma ($\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t}$) correspond le mieux aux critères fixés.

Aucune étude du schéma ($\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t}$) associé au modèle de dérive-diffusion linéaire ne semble avoir été effectuée. S'intéresser à l'existence de solutions, à la convergence de solutions approchées, à la stabilité en temps long ou lorsque $\varepsilon, \lambda \rightarrow 0$ pour le schéma ($\mathcal{S}_{BDF2}^{\Delta t}$) serait une suite logique à ces travaux.

Bibliographie

- [1] C. Bataillon, F. Bouchon, C. Chainais-Hillairet, J. Fuhrmann, E. Hoarau, and R. Touzani. Numerical methods for the simulation of a corrosion model with moving oxide layer. *J. Comput. Phys.*, 231(18) :6213–6231, 2012.
- [2] C. Bataillon and C. Chainais-Hillairet. Mathematical and numerical study of a corrosion model. *Numer. Math.*, 110(1) :1–25, 2008.
- [3] C. Bataillon, C. Chainais-Hillairet, C. Desgranges, E. Hoarau, F. Martin, S. Perrin, M. Turpin, and J. Talandier. Corrosion modelling of iron based alloy in nuclear waste repository. *Electrochimica Acta*, 55(15) :4451–4467, 2010.
- [4] M. Bessemoulin-Chatard. A finite volume scheme for convection-diffusion equations with nonlinear diffusion derived from the Scharfetter-Gummel scheme. *Numer. Math.*, 121(4) :637–670, 2012.
- [5] M. Bessemoulin-Chatard and C. Chainais-Hillairet. Exponential decay of a finite volume scheme to the thermal equilibrium for drift–diffusion systems. working paper or preprint, Jan. 2016.
- [6] M. Bessemoulin-Chatard, C. Chainais-Hillairet, and M.-H. Vignal. Study of a finite volume scheme for the drift-diffusion system. Asymptotic behavior in the quasi-neutral limit. *SIAM J. Numer. Anal.*, 52(4) :1666–1691, 2014.
- [7] K. Brenner, C. Cancès, and D. Hilhorst. Finite volume approximation for an immiscible two-phase flow in porous media with discontinuous capillary pressure. *Comput. Geosci.*, 17(3) :573–597, 2013.
- [8] F. Brezzi, L. D. Marini, and P. Pietra. Méthodes d’éléments finis mixtes et schéma de Scharfetter-Gummel. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 305(13) :599–604, 1987.

-
- [9] F. Brezzi, L. D. Marini, and P. Pietra. Numerical simulation of semiconductor devices. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 75 :493–514, 1989.
- [10] F. Brezzi, L. D. Marini, and P. Pietra. Two-dimensional exponential fitting and applications to drift-diffusion models. *SIAM J. Numer. Anal.*, 26(6) :1342–1355, 1989.
- [11] C. Chainais-Hillairet and C. Bataillon. Mathematical and numerical study of a corrosion model. *Numerische Mathematik*, 110(1) :1–25, 2008.
- [12] C. Chainais-Hillairet, P.-L. Colin, and I. Lacroix-Violet. Convergence of a finite volume scheme for a corrosion model. *Int. J. Finite Vol.*, 12 :27, 2015.
- [13] C. Chainais-Hillairet and F. Filbet. Asymptotic behaviour of a finite-volume scheme for the transient drift-diffusion model. *IMA J. Numer. Anal.*, 27(4) :689–716, 2007.
- [14] C. Chainais-Hillairet, A. Jüngel, and P. Shpartko. A finite-volume scheme for a spinorial matrix drift-diffusion model for semiconductors. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, pages n/a–n/a, 2015.
- [15] C. Chainais-Hillairet and I. Lacroix-Violet. The existence of solutions to a corrosion model. *Appl. Math. Lett.*, 25(11) :1784–1789, 2012.
- [16] C. Chainais-Hillairet and I. Lacroix-Violet. On the existence of solutions for a drift-diffusion system arising in corrosion modeling. *Discrete Contin. Dyn. Syst. Ser. B*, 20(1) :77–92, 2015.
- [17] C. Chainais-Hillairet, J. G. Liu, and Y. J. Peng. Finite volume scheme for multi-dimensional drift-diffusion equations and convergence analysis. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 37 :319–338, 2003.
- [18] C. Chainais-Hillairet, J.-G. Liu, and Y.-J. Peng. Finite volume scheme for multi-dimensional drift-diffusion equations and convergence analysis. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 37(2) :319–338, 2003.
- [19] C. Chainais-Hillairet and Y.-J. Peng. Convergence of a finite-volume scheme for the drift-diffusion equations in 1D. *IMA J. Numer. Anal.*, 23(1) :81–108, 2003.
- [20] M. Chatard. Asymptotic behavior of the Scharfetter-Gummel scheme for the drift-diffusion model. In *Finite volumes for complex applications. VI. Problems*

- Et perspectives. Volume 1, 2*, volume 4 of *Springer Proc. Math.*, pages 235–243. Springer, Heidelberg, 2011.
- [21] F. Chen. *Introduction to plasma physics and controlled fusion*. Plenum Press, New-York, 1984.
- [22] Z. Chen and B. Cockburn. Analysis of a finite element method for the drift-diffusion semiconductor device equations : the multidimensional case. *Numer. Math.*, 71(1) :1–28, 1995.
- [23] M. Crouzeix and A. L. Mignot. *Analyse numérique des équations différentielles*. Collection Mathématiques Appliquées pour la Maîtrise. [Collection of Applied Mathematics for the Master’s Degree]. Masson, Paris, 1984.
- [24] H. Da Veiga. On the semiconductor drift-diffusion equations. *Differ. Int. Eqs.*, 9 :729–744, 1996.
- [25] R. Eymard, T. Gallouët, and R. Herbin. Finite volume methods. In *Handbook of numerical analysis, Vol. VII*, Handb. Numer. Anal., VII, pages 713–1020. North-Holland, Amsterdam, 2000.
- [26] W. Fang and K. Ito. Global solutions of the time-dependent drift-diffusion semiconductor equations. *J. Differential Equations*, 123 :523–566, 1995.
- [27] H. Gajewski. On existence, uniqueness and asymptotic behaviour of solutions of the basic equations for carrier transport in semiconductors. *ZAMM*, 65 :101–108, 1985.
- [28] H. Gajewski. On the uniqueness of solutions to the drift-diffusion model of semiconductor devices. *M3AS*, 4 :121–133, 1994.
- [29] H. Gajewski and K. Gärtner. On the discretization of van Roosbroeck’s equations with magnetic field. *Z. Angew. Math. Mech.*, 76(5) :247–264, 1996.
- [30] H. Gajewski and K. Gröger. On the basic equations for carrier transport in semiconductors. *J. Math. Anal. Appl.*, 113(1) :12–35, 1986.
- [31] T. Gallouët and J.-C. Latché. Compactness of discrete approximate solutions to parabolic PDEs—application to a turbulence model. *Commun. Pure Appl. Anal.*, 11(6) :2371–2391, 2012.

-
- [32] I. Gasser. The initial time layer problem and the quasineutral limit in a nonlinear drift diffusion model for semiconductors. *NoDEA Nonlinear Differential Equations Appl.*, 8(3) :237–249, 2001.
- [33] I. Gasser, C. D. Levermore, P. A. Markowich, and C. Schmeiser. The initial time layer problem and the quasineutral limit in the semiconductor drift-diffusion model. *European J. Appl. Math.*, 12(4) :497–512, 2001.
- [34] E. Hairer, S. P. Nørsett, and G. Wanner. *Solving ordinary differential equations. I*, volume 8 of *Springer Series in Computational Mathematics*. Springer-Verlag, Berlin, second edition, 1993. Nonstiff problems.
- [35] A. M. Il'in. A difference scheme for a differential equation with a small parameter multiplying the highest derivative. *Mat. Zametki*, 6 :237–248, 1969.
- [36] A. Jüngel. On the existence and uniqueness of transient solutions of a degenerate nonlinear drift-diffusion model for semiconductors. *M3AS*, 4 :677–703, 1994.
- [37] A. Jüngel. Qualitative behavior of solutions of a degenerate nonlinear drift-diffusion model for semiconductors. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 5(4) :497–518, 1995.
- [38] A. Jüngel. *Quasi-hydrodynamic semiconductor equations*. Progress in Nonlinear Differential Equations and their Applications, 41. Birkhäuser Verlag, Basel, 2001.
- [39] A. Jüngel and Y. Peng. Rigorous derivation of a hierarchy of macroscopic models for semiconductors and plasmas. *International Conference on Differential Equations 1 (Berlin, 1999)*, *World Sci. Publ., River Edge, NJ.*, pages 1325–1327, 2000.
- [40] A. Jüngel and Y.-J. Peng. A hierarchy of hydrodynamic models for plasmas. Zero-electron-mass limits in the drift-diffusion equations. *Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire*, 17(1) :83–118, 2000.
- [41] A. Jüngel and Y.-J. Peng. Zero-relaxation-time limits in the hydrodynamic equations for plasmas revisited. *Z. Angew. Math. Phys.*, 51(3) :385–396, 2000.
- [42] A. Jüngel and Y.-J. Peng. A hierarchy of hydrodynamic models for plasmas. Quasi-neutral limits in the drift-diffusion equations. *Asymptot. Anal.*, 28(1) :49–73, 2001.

-
- [43] A. Jüngel and I. Violet. The quasi-neutral limit in the quantum drift-diffusion equations. *Asymptotic Analysis*, 53 :139–157, 2007.
- [44] R. D. Lazarov, I. D. Mishev, and P. S. Vassilevski. Finite volume methods for convection-diffusion problems. *SIAM J. Numer. Anal.*, 33(1) :31–55, 1996.
- [45] P. A. Markowich. *The stationary semiconductor device equations*. Computational Microelectronics. Springer-Verlag, Vienna, 1986.
- [46] P. A. Markowich, C. A. Ringhofer, and C. Schmeiser. *Semiconductor equations*. Springer-Verlag, Vienna, 1990.
- [47] M. S. Mock. An initial value problem from semiconductor device theory. *SIAM J. Math. Anal.*, 5 :597–612, 1974.
- [48] R. Sacco and F. Saleri. Mixed finite volume methods for semiconductor device simulation. *Numer. Methods Partial Differential Equations*, 13 :215–236, 1997.
- [49] D. L. Scharfetter and H. K. Gummel. Large signal analysis of a silicon read diode oscillator. *IEEE Trans. Electron Dev.*, 16 :64–77, 1969.
- [50] W. Van Roosbroeck. Theory of the flow of electrons and holes in germanium and other semiconductors. *Bell System Tech. J.*, 29 :560–607, 1950.

