

# Schémas asymptotiquement préservants dans la limite quasi-neutre

Marie Hélène Vignal



Paris le 27 Novembre 2012

Collaborations : Claire Chainais-Hillairet (Lille)

M. Bessemoulin-Chatard (Clermont-Ferrand)

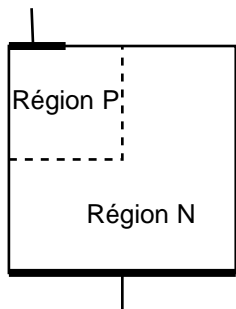
- 1 Motivations et contexte général
- 2 Le modèle de dérive-diffusion-Poisson et sa limite quasineutre
- 3 Les discrétisations asymptotiquement préservantes
  - Le schéma implicite
  - Le schéma asymptotiquement préservant découplé
- 4 Résultats Numériques
  - Cas test en dimension une
  - Résultats bidimensionnels
- 5 Travaux en cours et perspectives

# Motivation : modélisation des semi-conducteurs

## Modèle de dérive-diffusion-Poisson adimensionné

$$(DD)_\lambda \begin{cases} \partial_t N - \nabla \cdot (\nabla r(N) - N \nabla \psi) = 0, \\ \partial_t P - \nabla \cdot (\nabla r(P) + P \nabla \psi) = 0, \\ -\lambda^2 \Delta \psi = P - N + C, \end{cases} \quad r(s) = s^\gamma, \quad \gamma \geq 1.$$

$\lambda = \frac{\text{Longueur de Debye}}{\text{taille du domaine}} = \text{longueur de Debye adimensionnée} \ll 1$



### Inconnues

- $N, P$  : densités de charges
- $\psi$  : potentiel électrique

### Données

- Dopage (préconcentration) :  $C(x)$
- Densités initiales :  $N_0, P_0$
- Conditions aux limites :  $N_D, P_D$

# Stockage de déchets nucléaires

## Modèle de corrosion d'acier

BATAILLON, BOUCHON, CHAINAIS-HILLAIRET, DESGRANGES, HOARAU, MARTIN,  
TUPIN, TALANDIER, EA 2010

$$\begin{cases} \varepsilon \partial_t N - \partial_x (\partial_x N - N \partial_x \psi) = 0, \\ \partial_t P - \partial_x (\partial_x P + P \partial_x \psi) = 0, \\ -\lambda^2 \partial_{xx}^2 \psi = P - N + C. \end{cases} \quad x \in [X_0(t), X_1(t)], \quad t \geq 0.$$

$\lambda$  = longueur de Debye adimensionnée  $\ll 1$

$\varepsilon$  = rapport des masses  $\ll 1$

### Inconnues

- $N, P$  : densités d'ions et de cathions
- $\psi$  : potentiel électrique

### Données

- Dopage ionique :  $C = cste > 0$
- Densités initiales :  $N_0, P_0$
- Conditions aux limites de Fourier

## Contexte général : problèmes multi-échelles

**Modèle  $M_\mu$  multi-échelles :** échelle micro. ( $\mu = \lambda, \varepsilon$  ou  $(\lambda, \varepsilon)$ )  
et  
échelle macro. ( $\mu$  ou échelle de réf)

### Difficultés :

- Schémas explicites stables et consistants ssi  $\mu$  est résolu par le maillage
- Schémas implicites inconditionnellement stables et consistants mais souvent non linéaires
- **Coût trop/très important**

**Une solution :** Utiliser un schéma préservant l'asymptotique  $\mu \rightarrow 0$

- Maillage indépendant de  $\mu$  : **Stabilité asymptotique.**
- Donne une approximation de  $M_0$  si  $\hat{\lambda} \rightarrow 0$  : **Consistance asymptotique.**

Schéma asymptotiquement stable et consistant

⇒ **Schéma asymptotiquement préservant (AP)**  
([S.Jin] cinétique  $\rightarrow$  fluide)

- 1 Motivations et contexte général
- 2 **Le modèle de dérive-diffusion-Poisson et sa limite quasineutre**
- 3 Les discrétisations asymptotiquement préservantes
  - Le schéma implicite
  - Le schéma asymptotiquement préservant découplé
- 4 Résultats Numériques
  - Cas test en dimension une
  - Résultats bidimensionnels
- 5 Travaux en cours et perspectives

# Le modèle de dérive-diffusion-Poisson adimensionné

Pour  $x \in \Omega \subset \mathbb{R}^d$  ( $d = 1, 2$  ou  $3$ ) borné, et  $t > 0$

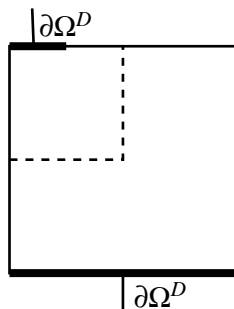
$$(DD)_\lambda \begin{cases} \partial_t N - \nabla \cdot (\nabla N - N \nabla \psi) = 0, \\ \partial_t P - \nabla \cdot (\nabla P + P \nabla \psi) = 0, \\ -\lambda^2 \Delta \psi = P - N + C. \end{cases}$$

## Conditions aux limites :

- Sur les contacts ohmiques :  $\partial\Omega_D$   
Dirichlet :  $N_D, P_D, \psi_D$
- Ailleurs :  $\partial\Omega_N$   
Flux nuls

## Existence, parfois unicité :

- T. SEIDMAN, G. TROIANELLO (1985), H. GAJEWSKI (1985),  
P.A. MARKOWITCH, C.A. RINGHOFER, C. SCHMEISER (1990).
- Preuve basée sur : - estimations  $L^\infty, L^2(0, T; H^1(\Omega))$



# La limite quasineutre

- I. GASSER, C.D. LEVERMORE, P.A. MARKOWICH, C. SCHMEISER (2001)  
A. JÜNGEL, Y.J. PENG (2001)
- Preuve basée sur :  $\Rightarrow$  la dissipation d'entropie (Point clé de la preuve)  
 $\Rightarrow$  des injections de Sobolev

## Modèle limite :

$$(DD)_0 \begin{cases} \partial_t N - \nabla \cdot (\nabla N - N \nabla \psi) = 0, \\ \partial_t P - \nabla \cdot (\nabla P + P \nabla \psi) = 0, \\ 0 = P - N + C. \end{cases}$$

- Sur  $\partial\Omega_D$  :  $N = N_D$ ,  $P = P_D$ ,  $\psi = \psi_D$ .

- Sur  $\partial\Omega_N$  :  $(\nabla N - N \nabla \psi) \cdot \mathbf{v} = 0$ ,  $(\nabla P + P \nabla \psi) \cdot \mathbf{v} = 0$ .



## Reformulation du modèle limite

### Idée :

- On choisit  $P + N$ ,  $P - N$  et  $\psi$  comme inconnues
- On utilise la contrainte de quasineutralité

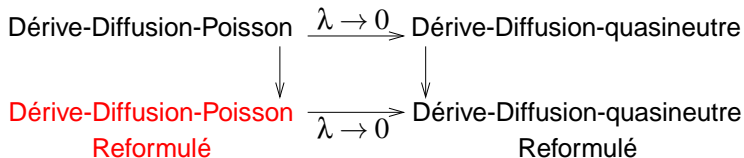
### Modèle équivalent bien posé :

$$(DD)_0 \Leftrightarrow (RDD)_0 \begin{cases} \partial_t(P + N) - \nabla \cdot (\nabla(P + N) - C \nabla \psi) = 0, \\ -\nabla \cdot (-\nabla C + (P + N) \nabla \psi) = 0, \\ P - N = -C. \end{cases}$$

- Sur  $\partial\Omega_D$  :  $P + N = P_D + N_D$ ,  $P - N = P_D - N_D = -C$ ,  $\psi = \psi_D$ .
- Sur  $\partial\Omega_N$  :  $(\nabla(P + N) - C \nabla \psi) \cdot \mathbf{v} = 0$ ,  $(-\nabla C + (P + N) \nabla \psi) \cdot \mathbf{v} = 0$ .

# Insertion du modèle macro dans le modèle micro

## Il faut compléter le diagramme



- On écrit l'équation sur  $P - N$

$$\partial_t(P - N) - \Delta(P - N) - \nabla \cdot \left( (P + N) \nabla \psi \right) = 0.$$

- On utilise Poisson  $\Rightarrow$

$$-\lambda^2 \partial_t \Delta \psi - \nabla \cdot \left( (P + N) \nabla \psi \right) = \Delta(P - N), \quad \text{Poisson reformulé}$$

- Equation équivalente à Poisson ssi  $\left( -\lambda^2 \Delta \psi = P - N + C \right)_{t=0}$ 
  - $\Rightarrow$  Si  $\lambda > 0$  : donne une condition initiale pour Poisson reformulé
  - $\Rightarrow$  Si  $\lambda = 0$  : impose la quasi-neutralité des conditions initiales

# La limite quasineutre : Bilan

**Dérive-Diffusion-Poisson Reformulé :** Système "équivalent" à  $(DD)_\lambda$

$$(RDD)_\lambda \begin{cases} \partial_t N - \nabla \cdot (\nabla r(N) - N \nabla \psi) = 0, \\ \partial_t P - \nabla \cdot (\nabla r(P) + P \nabla \psi) = 0, \\ -\lambda^2 \partial_t \Delta \psi - \nabla \cdot ((P + N) \nabla \psi) = \Delta(r(P) - r(N)). \end{cases}$$

- Ne dégénère pas lorsque  $\lambda \rightarrow 0$ .  $\Rightarrow$  **Consistance avec  $\lambda \rightarrow 0$**
- Pour  $\lambda = 0$  redonne  $(RDD)_0$
- Présence d'oscillations en temps à la période  $\lambda^2$ 
  - $\rightarrow$  Schémas explicites  $\Rightarrow$  Stab. Conditionnelle :  $\Delta t \leq \lambda^2$
  - $\rightarrow$  Schémas implicites  $\Rightarrow$  **Stabilité inconditionnelle**
- La **dissipation d'entropie** doit être préservée numériquement.

- 1 Motivations et contexte général
- 2 Le modèle de dérive-diffusion-Poisson et sa limite quasineutre
- 3 Les discrétisations asymptotiquement préservantes**
  - Le schéma implicite
  - Le schéma asymptotiquement préservant découplé
- 4 Résultats Numériques
  - Cas test en dimension une
  - Résultats bidimensionnels
- 5 Travaux en cours et perspectives

# Le schéma implicite

## Discrétisation en temps

si  $N^n, P^n, \psi^n$  sont des approximations connues au temps  $t^n$

$$\begin{cases} N^{n+1} - N^n - \Delta t \nabla \cdot (\nabla N^{n+1} - N^{n+1} \nabla \psi^{n+1}) = 0, \\ P^{n+1} - P^n - \Delta t \nabla \cdot (\nabla P^{n+1} + P^{n+1} \nabla \psi^{n+1}) = 0, \\ -\lambda^2 \Delta \psi^{n+1} = P^{n+1} - N^{n+1} + C. \end{cases}$$

## Discrétisation en espace

- Eqs. paraboliques : solveur de Scharfetter Gummel
  - Flux approchés non linéaires en  $\Psi$
  - Préserve la dissipation d'entropie.
- Eq. de Poisson : Différences finis standards.

## Schéma couplé

- Système non linéaire en  $(N, P, \Psi)$
- Algorithme de Newton.

## Convergence non uniforme en $\lambda$ :

- C. CHAINAIS-HILLAIRET, Y.J. PENG, 2003  
C. CHAINAIS-HILLAIRET, Y.J. PENG, J.G. LIU, ,2004

## Dissipation discrète d'entropie

- MARIANNE CHATARD, À PARAÎTRE

## Estimations uniformes en $\lambda$ : $C = 0$ .

- M. BESSEMOULIN-CHATARD, C. CHAINAIS-HILLAIRET, MHV, en cours de rédaction.
- Estimations  $L^\infty$ ,  $L^2(0, T; H^1(\Omega))$  BV-faible uniforme en  $\lambda$   
Discrétisation de la preuve de Gasser-Levermore-Markowich-Schmeiser.

# Le schéma AP découplé

## Reformulation du schéma implicite

$$\left\{ \begin{array}{l} N^{n+1} = N^n + \Delta t \nabla \cdot \left( \nabla N^{n+1} - N^{n+1} \nabla \psi^{n+1} \right), \quad (1) \\ P^{n+1} = P^n + \Delta t \nabla \cdot \left( \nabla P^{n+1} + P^{n+1} \nabla \psi^{n+1} \right), \quad (2) \\ -\lambda^2 \Delta \psi^{n+1} = P^{n+1} - N^{n+1} + C, \quad (3) \end{array} \right.$$

- On injecte (1) et (2) dans (3)

$$-\lambda^2 \Delta \psi^{n+1} - \Delta t \nabla \cdot \left( (N^{n+1} + P^{n+1}) \nabla \psi^{n+1} \right) = P^n - N^n + C + \Delta t \Delta (P^{n+1} - N^{n+1}).$$

Discrétisation de Poisson reformulé

**Pour découpler, on remplace cette équation par**

$$-\lambda^2 \Delta \psi^{n+1} - \Delta t \nabla \cdot \left( (N^n + P^n) \nabla \psi^{n+1} \right) = P^n - N^n + C + \Delta t \Delta (P^n - N^n).$$

# Le schéma AP découplé

## Discrétisation en temps

$$\begin{cases} N^{n+1} - N^n - \Delta t \nabla \cdot (\nabla N^{n+1} - N^{n+1} \nabla \psi^{n+1}) = 0, \\ P^{n+1} - P^n - \Delta t \nabla \cdot (\nabla P^{n+1} + P^{n+1} \nabla \psi^{n+1}) = 0, \\ -\nabla \cdot \left( (\lambda^2 + \Delta t (N^n + P^n)) \nabla \psi^{n+1} \right) = P^n - N^n + C + \Delta t \Delta (P^n - N^n). \end{cases}$$

## Discrétisation en espace

- Eqs. paraboliques : solveur de Scharfetter Gummel

Flux approchés non linéaires en  $\Psi$  mais linéaires en  $N$  et  $P$ .

- Eq. de Poisson reformulée :

$$-\lambda^2 \Delta \psi^{n+1} - \Delta t \nabla \cdot \left( \underbrace{(\nabla P^n + P^n \nabla \psi^{n+1})}_{-J_P} - \underbrace{(\nabla N^n - N^n \nabla \psi^{n+1})}_{-J_N} \right) = P^n - N^n + C.$$

→ Flux de Scharfetter Gummel non linéaires en  $\Psi$

- Un système non linéaire en  $\Psi$  et deux systèmes linéaires en  $N$  et  $P$



- 1 Motivations et contexte général
- 2 Le modèle de dérive-diffusion-Poisson et sa limite quasineutre
- 3 Les discrétisations asymptotiquement préservantes
  - Le schéma implicite
  - Le schéma asymptotiquement préservant découplé
- 4 Résultats Numériques**
  - Cas test en dimension une
  - Résultats bidimensionnels
- 5 Travaux en cours et perspectives

## Cas test en dimension une

- Domaine  $x \in ]0, 1[$ , Temps final  $T = 1.5$ ,
- $\Delta t = 10^{-3}$        $\Delta x = 10^{-2}$  ou  $10^{-3}$       maillages uniformes.
- $\lambda^2 = 1$  ou  $10^{-3}$  ou  $10^{-10}$
- Profil de dopage non constant :  $C(x) = \begin{cases} -0.8, & \text{for } x < 1/2, \\ +0.8, & \text{for } x > 1/2. \end{cases}$
- CL de Dirichlet quasineutres

$$P_D - N_D + C = 0.$$

- Conditions initiales quasineutres

$$P_0 - N_0 + C = 0.$$

# Comparaison des schémas $\lambda^2 = 1, \Delta t = 10^{-3}$

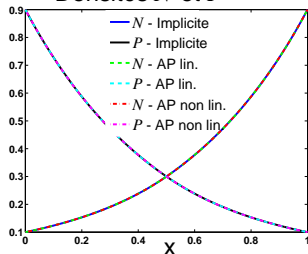
Tps CPU : $\Delta x$	$10^{-2}$	$10^{-3}$
Implicite :	15 s,	22 s
AP lin. :	14 s,	16 s
AP non lin. :	14 s,	17 s

Erreurs rel. en norme  $L^2$  :

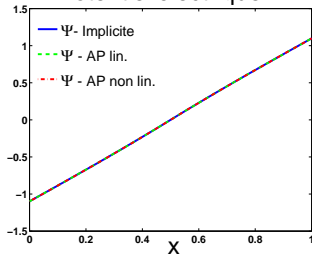
Implicite - AP lin.  $\approx 10^{-10}$ ,

Implicite - AP non lin.  $\approx 10^{-14}$ .

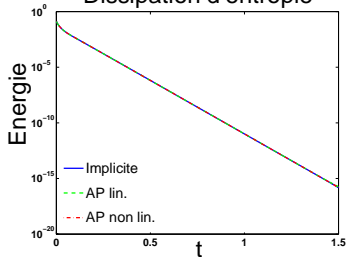
### Densités $N$ et $P$



### Potentiel électrique



### Dissipation d'entropie



# Comparaison des schémas

$$\lambda^2 = 10^{-3}, \quad \Delta t = 10^{-3}$$

Tps CPU : $\Delta x$	$10^{-2}$	$10^{-3}$
Implicite :	15 s,	44 s
AP lin. :	14 s,	16 s
AP non lin. :	14 s,	80 s

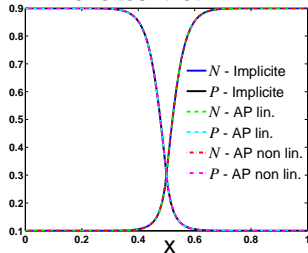
Erreurs rel. en norme  $L^2$  :

Implicite - AP lin.  $\approx 10^{-4}$ ,

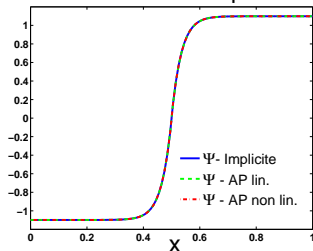
Implicite - AP non lin.  $\approx 10^{-10}$ ,

AP lin. - AP non lin.  $\approx 10^{-4}$ .

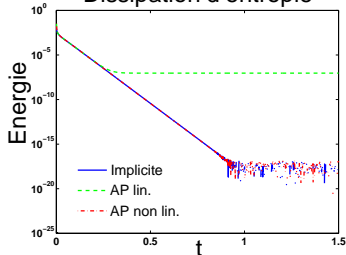
### Densités $N$ et $P$



### Potentiel électrique



### Dissipation d'entropie



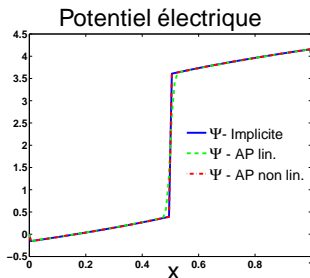
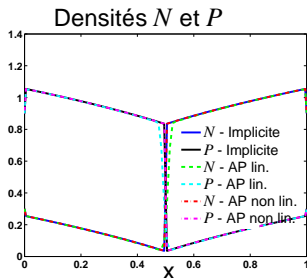
Temps CPU : Implicite : 15 s.

AP lin. : 14 s.

AP non lin. : 14 s.

Erreurs rel. : Imp - AP lin.  $\approx 0,1\%$

Imp - AP non lin.  $\approx 10^{-8}\%$ ,



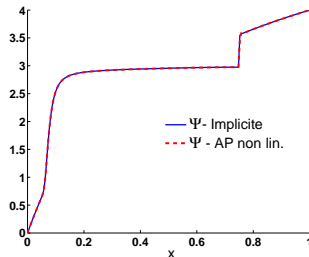
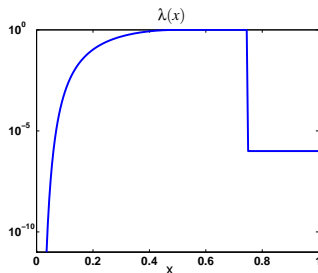
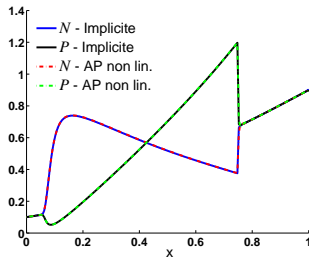
# $\lambda$ variable en espace, $C = 0$

Erreurs rel. en norme  $L^2$  :

$$N \approx 0,5\%,$$

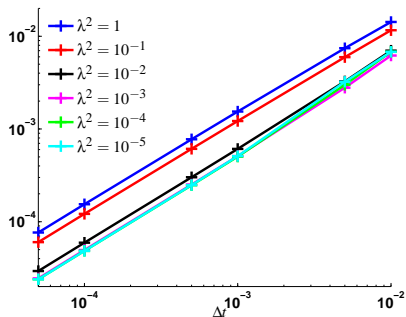
$$P \approx 0,5\%,$$

$$\Psi \approx 0,2\%.$$

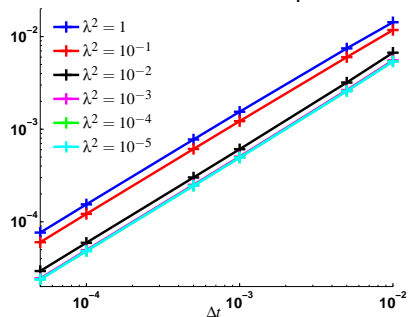


# Courbes d'erreurs, $C = 0$

## Erreur schéma AP

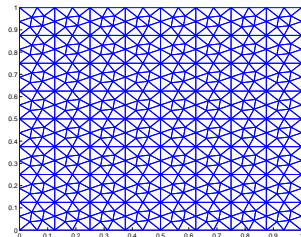
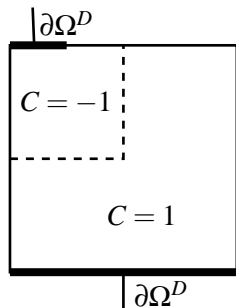


## Erreur schéma implicite



Schémas d'ordre 1

# Diode - Jonction PN



- $\lambda^2 = 10^{-10}$ ,
- $\Delta t = 5 \cdot 10^{-4}$ .
- Maillage en espace : 896 triangles.
- Conditions aux limites :
  - ➡ Sur  $\partial\Omega_D$  : Dirichlet quasineutres.
  - ➡ Ailleurs : Neumann homogènes.
- Conditions initiales quasineutres.



Diode - Jonction PN,  $\lambda^2 = 10^{-10}$ ,  $\Delta t = 5 \cdot 10^{-4}$

Schéma implicite

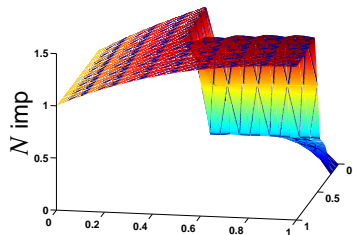


Schéma AP

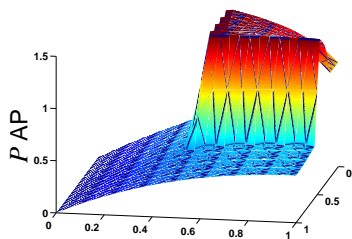
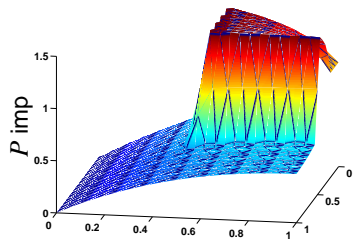
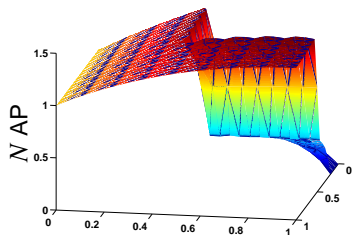


Schéma implicite

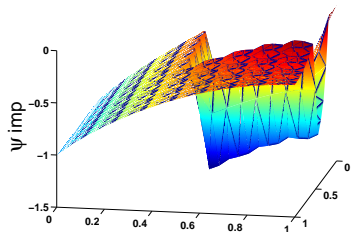
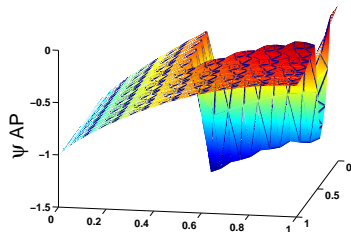


Schéma AP



-Temps CPU schéma implicite : 90s.

-Temps CPU schéma AP : 13s.

$\Rightarrow$  gain  $\approx 7$ .

-Erreurs relatives en norme  $L^2$  : Sur N : 2%,

Sur P : 2%,

Sur  $\psi$  : 3%.

# Schéma AP découplé : résultats

**Existence unicité de la solution :** idem schéma implicite

**Numériquement :** Schéma asymptotiquement stable et consistant

**Premiers pas vers la convergence uniforme :**

- Semi-discrétisé 1-D
- Inconnues  $S = P + N$  et  $D = P - N$
- $\lambda = 0$  et  $C = 0$
- Système diff. en  $(S^{n+1}, D^{n+1})$

**Question :**  $D^n = 0 \Rightarrow D^{n+1} = 0$ ?

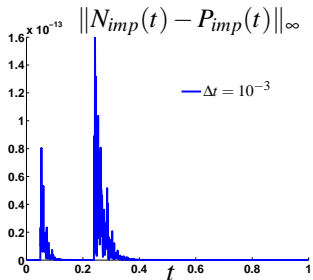


Schéma implicite

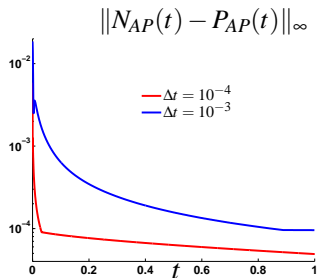


Schéma AP

# Plan

- 1 Motivations et contexte général
- 2 Le modèle de dérive-diffusion-Poisson et sa limite quasineutre
- 3 Les discrétisations asymptotiquement préservantes
  - Le schéma implicite
  - Le schéma asymptotiquement préservant découplé
- 4 Résultats Numériques
  - Cas test en dimension une
  - Résultats bidimensionnels
- 5 Travaux en cours et perspectives

- Convergence uniforme en  $\lambda$  du schéma AP découplé.
- Schémas asymptotiquement précis dans les limites fluide et quasineutre pour Vlasov-BGK-Poisson : N. CROUSEILLES, G. DIMARCO, MHV
- Problème multi-micro-échelles singulier :

Problème de corrosion d'acier C. CHAINAIS-HILLAIRET, MHV

$$\begin{cases} \varepsilon \partial_t N - \nabla \cdot (\nabla N - N \nabla \psi) = 0, \\ \partial_t P - \nabla \cdot (\nabla P + P \nabla \psi) = 0, \\ -\lambda^2 \Delta \psi = P - N + C. \end{cases}$$

Si  $(\varepsilon, \lambda) \rightarrow 0$ ,      Poisson reformulé  $\rightarrow -\nabla \cdot (\nabla N - N \nabla \psi) = 0$ .