



Université
de Lille



FACULTÉ
DES SCIENCES ET
TECHNOLOGIES

Master 1 Calcul Haute Performance, Simulation

Année 2018-2019

TER intitulé

Approximation de problèmes de convection-diffusion

présenté par

Maxime Jonval et Elie Delplace

Encadrante : Claire Chainais

Remerciements

Nous tenons à remercier notre encadrante Pr. Claire Chainais pour toute l'aide qu'elle nous a apportée dans ce Travail Encadré de Recherche. Que ce soit pour les erreurs de signe dans nos calculs ou pour ses conseils de rédaction.

Table des matières

I	Résultats théoriques et méthode des volumes finis	2
1	Résultats théoriques	2
2	Cas test	3
3	Méthode des volumes finis	5
II	Schémas volumes finis linéaires	7
1	Présentation des schémas	7
1.1	Obtention	7
1.2	Consistance des flux	7
1.3	Étude du schéma numérique	8
2	Analyse des résultats numériques	10
2.1	Études de convergence	10
2.1.1	Convergence en espace	10
2.1.2	Convergence en temps	10
2.2	Comportement en temps long	11
2.2.1	Étude de la norme	11
2.2.2	Étude de l'entropie relative	12
2.3	Conclusion	12
III	Schémas volumes finis non linéaires	13
1	Présentation des schémas	13
2	Implémentation	14
2.1	Matrice Jacobienne	14
2.2	Pas de temps adaptatif	14
3	Analyse des résultats numériques	15
3.1	Étude de la convergence en espace	15
3.2	Comportement en temps long	15
3.2.1	Étude de la norme	16
3.2.2	Étude de l'entropie relative	17
3.3	Conclusion	17

Introduction

La modélisation de nombreux phénomènes physiques fait intervenir des équations de convection-diffusion. Par exemple :

- Évolution de la concentration d'un polluant dans un fluide en mouvement,
- Écoulement en milieu poreux isotrope,
- Modèle décrivant le comportement des semis-conducteurs.

Ces équations s'écrivent en toute généralité de la manière suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t u + \operatorname{div}(\mathbf{J}) = 0 \\ \mathbf{J} = -\nabla u + Vu, \\ u(0, x) = u_0(x) \end{array} \right. , x \in \Omega, t > 0, \quad , x \in \Omega, \quad \text{(Convection-Diffusion)}$$

où $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ouvert borné, $u_0 \in C^1(\Omega)$, V est un champ de vecteur et \mathbf{J} représente un flux. Elles se composent d'un terme de diffusion ($\operatorname{div}(-\nabla u) = -\Delta u$) et d'un terme de convection ($\operatorname{div}(Vu)$) et sont complétées par des conditions aux limites.

Nous étudierons ces équations en 1D qui ont la forme suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t u + \partial_x(\mathbf{J}) = 0 \\ \mathbf{J} = -\partial_x u + Vu, \\ u(0, x) = u_0(x) \end{array} \right. , x \in]0, L[, t > 0, \quad , x \in]0, L[, \quad \text{(CD)}$$

Ces équations sont complétées par des conditions aux limites de type Dirichlet (notées u_0^D et u_L^D) ou flux nul aux bords (Neumann homogènes).

Nous commencerons dans un premier temps par énoncer quelques résultats théoriques. Tout d'abord l'existence d'un état stationnaire dans le cas particulier où V dérive d'un potentiel ainsi que la décroissance exponentielle en norme L^1 et en entropie relative de la solution vers celui-ci. Nous exposerons également le cas test qui nous a permis de valider nos simulations numériques. Nous continuerons en introduisant la méthode des volumes finis en 1 dimension. Nous expliciterons ensuite les schémas linéaires, où on établira l'existence et l'unicité d'une solution numérique, ainsi que les schémas non-linéaires. Nous porterons également un regard particulier sur le comportement en temps long de la solution numérique afin de vérifier que les propriétés de décroissance exponentielle vers l'état stationnaire sont vérifiées dans le cas discret.

Première partie

Résultats théoriques et méthode des volumes finis

1 Résultats théoriques

On considérera ici le cas particulier où V dérive d'un potentiel, *i.e.* il existe $\Psi \in C^1(0, L)$ telle que $V = -\partial_x \Psi$. Le problème se réécrit alors sous la forme :

$$\begin{cases} \partial_t u + \partial_x(-\partial_x u - \partial_x \Psi u) = 0 & , x \in]0, L[, t > 0, \\ u(0, x) = u_0(x) & , x \in]0, L[, \\ + \text{Conditions limites.} \end{cases} \quad (\text{P})$$

Dans la suite nous nous intéresserons à deux types de conditions limites :

1. conditions limites de type Dirichlet :

$$\begin{cases} u(t, 0) = u_0^D & , t > 0, \\ u(t, L) = u_L^D & , t > 0; \end{cases}$$

2. conditions limites de type flux nul aux bords :

$$\begin{cases} -\partial_x u(t, 0) + \partial_x \Psi(0)u(t, 0) = 0 & , t > 0, \\ -\partial_x u(t, L) + \partial_x \Psi(L)u(t, L) = 0 & , t > 0. \end{cases}$$

Pour cette équation (dite de Fokker-Planck) on a l'existence d'un état stationnaire, noté u^∞ , indépendant du temps tel que :

$$\begin{cases} \partial_x(-\partial_x u^\infty - \partial_x \Psi u^\infty) = \partial_x(\mathbf{J}^\infty) = 0 & , x \in [0, L], \\ + \text{Conditions limites.} \end{cases}$$

Ceci est particulièrement vrai si $\mathbf{J}^\infty = 0$, on parlera alors d'équilibre thermique.

$$-\partial_x u^\infty - \partial_x \Psi u^\infty = 0 \quad \Rightarrow \quad u^\infty = \rho e^{-\Psi},$$

où la constante ρ est déterminée par les conditions limites. Commençons par énoncer un résultat sur les solutions de l'équation de convection-diffusion.

Propriété 1. *Soit u solution de (P) avec conditions limites flux nul aux bords, alors on a $\frac{d}{dt} \int_0^L u(t, x) dx = 0$. Autrement dit la masse de u est conservée. En particulier $\int_0^L u_0(x) dx = \int_0^L u^\infty(x) dx$.*

Démonstration. En intégrant (CD) sur $]0, L[$ on obtient

$$\int_0^L \partial_t u = \mathbf{J}_0 - \mathbf{J}_L,$$

ainsi les conditions flux nuls aux bords et une permutation dérivée intégrale nous donne $\frac{d}{dt} \int_0^L u = 0$. \square

1. Conditions limites de type Dirichlet, en supposant que u_0^D et u_L^D existent, ρ doit vérifier

$$\begin{cases} \rho e^{-\Psi(0)} = u_0^D \\ \rho e^{-\Psi(L)} = u_L^D \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} \rho = e^{\Psi(0)} u_0^D \\ \rho = e^{\Psi(L)} u_L^D \end{cases}$$

Remarque 1. *Cette relation impose que $e^{\Psi(0)} u_0^D = e^{\Psi(L)} u_L^D$.*

2. Conditions limites de type flux nul aux bords, ρ est déterminé grâce à la conservation de la masse :

$$\int_0^L u^\infty = \int_0^L u_0 \quad \Rightarrow \quad \rho \int_0^L e^{-\Psi} = \int_0^L u_0 \quad \Rightarrow \quad \rho = \frac{\int_0^L u_0}{\int_0^L e^{-\Psi}}$$

On peut également démontrer que la convergence en norme L^1 de u vers u^∞ quand t tend vers $+\infty$ est exponentielle, *i.e* il existe $\alpha > 0$ et $C > 0$ tels que $\|u(t, x) - u^\infty(x)\|_{L^1(0, L)} < C e^{-\alpha t}$.

En définissant l'entropie relative notée E_{rel} par :

$$E_{rel}(u(t, \cdot) | u^\infty) = \int_0^L u^\infty H\left(\frac{u}{u^\infty}\right) dx,$$

avec H une fonction vérifiant :

$$\begin{cases} H(1) = 0, \\ H'(1) = 0, \\ H'' > 0, \end{cases}$$

on a également une convergence exponentielle de u vers u^∞ en entropie relative (voir [1] et [2]). Nous étudierons ici la fonction

$$H(x) = x \ln x - x + 1.$$

Dans l'analyse des simulations numériques nous utiliserons les versions discrètes de la norme L^1

$$\|u\|_{L^1} = \sum_{i=1}^N h_i |u_i|,$$

et de l'entropie relative

$$E_{rel}(u(t, \cdot) | u_{ex}^\infty) = \sum_{i=1}^N h_i (H(u_i^\infty) - H(u_i) - u_i^\infty \log(u_i - u_i^\infty)).$$

Pour la convergence des schémas en espace et en temps nous utiliserons la norme vectorielle

$$\|u\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq N} \{|u_i|\}.$$

2 Cas test

Considérons le cas particulier où $V = 1$ dérive d'un potentiel. Nous allons définir une solution au problème de convection-diffusion ainsi que les conditions limites et la donnée initiale qui y sont associées. On considérera des conditions limites de type Dirichlet pour les schémas linéaires et des conditions limites de type flux nul aux bords pour les schémas non-linéaires. Le problème s'écrit alors :

$$\begin{cases} \partial_t u + \partial_x(-\partial_x u + u) = 0 & , x \in]0, L[, t > 0, \\ u(0, x) = u_0(x) & , x \in]0, L[, \\ + \text{Conditions limites.} \end{cases} \quad (*)$$

Considérons la fonction suivante :

$$\begin{aligned} u_{ex} &: \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R} \\ (t, x) &\longmapsto e^{-\alpha t + \frac{x}{2}} \left(\pi \cos(\pi x) + \frac{1}{2} \sin(\pi x) \right) + \pi e^{x - \frac{1}{2}}, \end{aligned}$$

où : $\alpha := \pi^2 + \frac{1}{4}$ et vérifions qu'elle est solution du problème (*). On a :

- $\frac{\partial u_{ex}}{\partial t} = -\alpha e^{-\alpha t + \frac{x}{2}} \left(\pi \cos(\pi x) + \frac{1}{2} \sin(\pi x) \right);$
- $\frac{\partial u_{ex}}{\partial x} = \frac{1}{2} e^{-\alpha t + \frac{x}{2}} \left(\pi \cos(\pi x) + \frac{1}{2} \sin(\pi x) \right) + e^{-\alpha t + \frac{x}{2}} \left(-\pi^2 \sin(\pi x) + \frac{\pi}{2} \cos(\pi x) \right) + \pi e^{x-\frac{1}{2}}$
 $= e^{-\alpha t + \frac{x}{2}} \left(\pi \cos(\pi x) + \left(\frac{1}{4} - \pi^2 \right) \sin(\pi x) \right) + \pi e^{x-\frac{1}{2}};$
- $\frac{\partial^2 u_{ex}}{\partial x^2} = \frac{1}{2} e^{-\alpha t + \frac{x}{2}} \left(\pi \cos(\pi x) + \left(\frac{1}{4} - \pi^2 \right) \sin(\pi x) \right)$
 $+ e^{-\alpha t + \frac{x}{2}} \left(-\pi^2 \sin(\pi x) + \left(\frac{\pi}{4} - \pi^3 \right) \cos(\pi x) \right) + \pi e^{x-\frac{1}{2}}$
 $= e^{-\alpha t + \frac{x}{2}} \left(\left(\frac{3\pi}{4} - \pi^3 \right) \cos(\pi x) + \left(\frac{1}{8} - \frac{3\pi^2}{2} \right) \sin(\pi x) \right) + \pi e^{x-\frac{1}{2}}.$

Injectons ces termes dans l'équation :

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_{ex}}{\partial t} - \frac{\partial^2 u_{ex}}{\partial x^2} + \frac{\partial u_{ex}}{\partial x} &= -\alpha e^{-\alpha t + \frac{x}{2}} \left(\pi \cos(\pi x) + \frac{1}{2} \sin(\pi x) \right) \\ &\quad - e^{-\alpha t + \frac{x}{2}} \left(\left(\frac{3\pi}{4} - \pi^3 \right) \cos(\pi x) + \left(\frac{1}{8} - \frac{3\pi^2}{2} \right) \sin(\pi x) \right) - \pi e^{x-\frac{1}{2}} \\ &\quad + e^{-\alpha t + \frac{x}{2}} \left(\pi \cos(\pi x) + \left(\frac{1}{4} - \pi^2 \right) \sin(\pi x) \right) + \pi e^{x-\frac{1}{2}} \\ &= e^{-\alpha t + \frac{x}{2}} \left(\left(\left(\frac{1}{4} - \alpha \right) \pi + \pi^3 \right) \cos(\pi x) + \left(\frac{1}{8} + \frac{\pi^2}{2} - \frac{\alpha}{2} \right) \sin(\pi x) \right) \\ &= 0 \text{ car } \alpha = \pi^2 + \frac{1}{4}. \end{aligned}$$

Donc u_{ex} est solution de l'équation de convection-diffusion.

Pour l'étude numérique des schémas linéaires on se placera sur l'intervalle $[0, 1]$, on a donc besoin des conditions aux limites de type Dirichlet :

$$\begin{aligned} u_{ex}(t, 0) &= \pi e^{-\alpha t} + \pi e^{\frac{1}{2}} = \pi \left(e^{-\alpha t} + e^{-\frac{1}{2}} \right), \\ u_{ex}(t, 1) &= e^{-\alpha t + \frac{1}{2}} \left(\pi \cos(\pi) + \frac{1}{2} \sin(\pi) \right) + \pi e^{\frac{1}{2}} = \pi \left(e^{\frac{1}{2}} - e^{-\alpha t + \frac{1}{2}} \right). \end{aligned}$$

Ainsi le problème devient :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \partial_t u + \partial_x(-\partial_x u + u) = 0 & , x \in]0, 1[, t > 0, \\ u(0, x) = e^{\frac{x}{2}} \left(\pi \cos(\pi x) + \frac{1}{2} \sin(\pi x) \right) + \pi e^{x-\frac{1}{2}} & , x \in]0, 1[, \\ u(t, 0) = \pi \left(e^{-\alpha t} + e^{-\frac{1}{2}} \right) & , t > 0, \\ u(t, 1) = \pi \left(e^{\frac{1}{2}} - e^{-\alpha t + \frac{1}{2}} \right) & , t > 0, \end{array} \right.$$

et a pour solution u_{ex} .

Remarque 2. Les conditions limites de type de Dirichlet de ce problème dépendent du temps.

Pour l'étude numérique des schémas non linéaires on se placera sur l'intervalle $[0, 1]$, on imposera des conditions aux limites de type flux nul aux bords. Le problème devient :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \partial_t u + \partial_x(-\partial_x u + u) = 0 & , x \in]0, 1[, t > 0, \\ u(0, x) = e^{\frac{x}{2}} \left(\pi \cos(\pi x) + \frac{1}{2} \sin(\pi x) \right) + \pi e^{x-\frac{1}{2}} & , x \in]0, 1[, \\ -\partial_x u(t, 0) - \partial_x \Psi(0)u(t, 0) = 0 & , t > 0, \\ -\partial_x u(t, 1) - \partial_x \Psi(1)u(t, 1) = 0 & , t > 0. \end{array} \right.$$

et a pour solution u_{ex} .

A présent nous allons déterminer l'état stationnaire de cette solution. Pour cela on s'intéresse, à x fixé, à la limite, quand t tend vers $+\infty$, de u_{ex} .

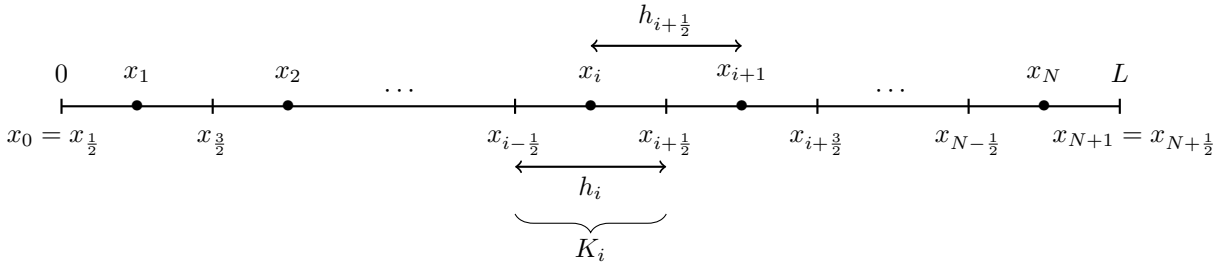
Soit $x \in \mathbb{R}$ fixé, on a :

$$u_{ex}^\infty(x) = \lim_{t \rightarrow +\infty} u_{ex}(t, x) = \lim_{t \rightarrow +\infty} e^{-\alpha t + \frac{x}{2}} \left(\pi \cos(\pi x) + \frac{1}{2} \sin(\pi x) \right) + \pi e^{x-\frac{1}{2}} = \pi e^{x-\frac{1}{2}}.$$

Notre cas test u_{ex} admet donc l'état stationnaire, qui est même un équilibre thermique, u_{ex}^∞ (remarquons que dans ce cas $\Psi(x) = -x + \frac{1}{2}$). Nous allons alors comparer l'évolution de notre solution approchée à cette fonction. Dans un premier temps nous étudierons la norme discrète L^1 de cette différence, puis nous étudierons l'entropie relative afin de vérifier numériquement la propriété de décroissance exponentielle vers l'état stationnaire de ces 2 quantités.

3 Méthode des volumes finis

Nous allons maintenant définir une discrétisation de l'intervalle $]0, L[$. Un maillage de celui-ci est défini par le triplet $(\mathcal{T}, \mathcal{E}, \mathcal{P})$ où \mathcal{T} est un ensemble de N volumes de contrôle (ou mailles) ouverts disjoints non vides. Ces volumes s'écrivent $K_i :=]x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}[$ pour $i \in \llbracket 1, N \rrbracket$ tels que $[0, L] = \cup_{i=1}^N \overline{K_i}$. On a ainsi l'ensemble de $N+1$ points $\mathcal{E} := \{x_{i+\frac{1}{2}}\}_{0 \leq i \leq N}$ correspondants aux bords des mailles. On se donne également l'ensemble de points $\mathcal{P} := \{x_i\}_{1 \leq i \leq N}$ tels que $x_i \in K_i$ pour $i \in \llbracket 1, N \rrbracket$ (par exemple $x_i = \frac{1}{2}(x_{i-\frac{1}{2}} + x_{i+\frac{1}{2}})$). On utilisera également les notations suivantes : $x_0 = x_{\frac{1}{2}}$, $x_{N+1} = x_{N+\frac{1}{2}}$ et $h_i := x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}$, $h_{i+\frac{1}{2}} := x_{i+1} - x_i$, $h := \max_{1 \leq i \leq N} h_i$.



On suppose que notre solution est constante par maille et on se donne alors une inconnue par volume de contrôle, noté u_i , pour approcher $u(x_i)$.

Passons maintenant à l'obtention du schéma, en faisant une approximation du type Euler implicite nous obtenons :

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} + \partial_x \mathbf{J}^{n+1} = 0.$$

Ensuite, puisqu'on a supposé u constante égale à u_i dans chaque maille K_i , une intégration de l'équation dans une maille nous donne :

$$\begin{aligned} & \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} dx + \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \mathbf{J}^{n+1} dx = 0, \\ \Leftrightarrow & h_i \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + \mathbf{J}_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - \mathbf{J}_{i-\frac{1}{2}}^{n+1} = 0. \end{aligned}$$

Les flux $\mathbf{J}_{i+\frac{1}{2}}$ et $\mathbf{J}_{i-\frac{1}{2}}$ sont alors approchés par des flux numériques consistants notés $\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}}$ et $\mathcal{F}_{i-\frac{1}{2}}$ et on obtient le schéma :

$$\begin{cases} h_i \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + \mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - \mathcal{F}_{i-\frac{1}{2}}^{n+1} = 0, \\ u_i^0 = u_0(x_i). \end{cases}$$

Ce schéma est conservatif, *i.e.* à chaque interface entre une maille K_i et K_{i+1} le flux entrant $\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}}$ est égal au flux sortant $\mathcal{F}_{(i+1)-\frac{1}{2}}$.

Deuxième partie

Schémas volumes finis linéaires

1 Présentation des schémas

1.1 Obtention

Nous allons maintenant définir les flux numériques \mathcal{F} aux points $x_{i+\frac{1}{2}}$ et $x_{i-\frac{1}{2}}$ de manière linéaire. Compte tenu de la propriété de conservation des flux, ils nous suffit de définir $\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}}$. Nous étudierons les 3 schémas suivants :

$$\text{Centered : } \mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}} = -\frac{u_{i+1} - u_i}{h_{i+\frac{1}{2}}} + V(x_{i+\frac{1}{2}}) \frac{u_i + u_{i+1}}{2},$$

$$\text{Upwind : } \mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}} = -\frac{u_{i+1} - u_i}{h_{i+\frac{1}{2}}} + \max\left(V(x_{i+\frac{1}{2}}), 0\right)u_i + \min\left(V(x_{i+\frac{1}{2}}), 0\right)u_{i+1},$$

$$\text{Scharfetter-Gummel : } \mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}} = -\frac{V_{i+\frac{1}{2}}}{e^{-V_{i+\frac{1}{2}}h_{i+\frac{1}{2}}} - 1}u_i - \frac{V_{i+\frac{1}{2}}}{e^{V_{i+\frac{1}{2}}h_{i+\frac{1}{2}}} - 1}u_{i+1}.$$

Chacun de ces flux peut être défini de manière synthétique à l'aide d'une fonction B (voir [3]) :

$$\text{Centered : } B_{cc}(s) = 1 - \frac{s}{2},$$

$$\text{Upwind : } B_{up}(s) = 1 - \min(s, 0),$$

$$\text{Scharfetter-Gummel : } B_{sg}(s) = \frac{s}{e^s - 1}, \text{ si } s \neq 0 \text{ et } B_{sg}(0) = 1,$$

celle-ci devant vérifier les propriétés suivantes :

$$\begin{cases} B(0) = 1, \\ B(s) > 0, \quad \forall s \in \mathbb{R}, \\ B(s) - B(-s) = -s. \end{cases}$$

Ce qui nous donne le B -flux :

$$\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{h_{i+\frac{1}{2}}} \left(B(-V(x_{i+\frac{1}{2}})h_{i+\frac{1}{2}})u_i - B(V(x_{i+\frac{1}{2}})h_{i+\frac{1}{2}})u_{i+1} \right).$$

1.2 Consistance des flux

Afin d'étudier la consistance des B -flux on se place dans le cas d'un maillage uniforme en choisissant les points $x_i = \frac{1}{2}(x_{i-\frac{1}{2}} + x_{i+\frac{1}{2}})$, on a donc $h = h_i = h_{i+\frac{1}{2}}$, $\forall i \in \llbracket 1, N \rrbracket$. Considérons alors les deux développements limités suivants :

$$u(t, x_{i+1}) = u(t, x_{i+\frac{1}{2}}) + \frac{h}{2} \partial_x u(t, x_{i+\frac{1}{2}}) + \mathcal{O}(h^2),$$

$$u(t, x_i) = u(t, x_{i+\frac{1}{2}}) - \frac{h}{2} \partial_x u(t, x_{i+\frac{1}{2}}) + \mathcal{O}(h^2).$$

On injecte ces termes dans

$$\begin{aligned} \widehat{\mathcal{F}}_{i+\frac{1}{2}} &= \frac{1}{h} \left(B(-V(x_{i+\frac{1}{2}})h)u(t, x_i) - B(V(x_{i+\frac{1}{2}})h)u(t, x_{i+1}) \right) \\ &= \frac{1}{h} \left(\left(B(-V(x_{i+\frac{1}{2}})h) - B(V(x_{i+\frac{1}{2}})h) \right) u(t, x_{i+\frac{1}{2}}) \right. \\ &\quad \left. - \left(B(-V(x_{i+\frac{1}{2}})h) + B(V(x_{i+\frac{1}{2}})h) \right) \frac{h}{2} \partial_x u(t, x_{i+\frac{1}{2}}) + \mathcal{O}(h^2) \right), \end{aligned}$$

puis en utilisant la propriété $B(s) - B(-s) = -s$ on obtient

$$\widehat{\mathcal{F}}_{i+\frac{1}{2}} = V(x_{i+\frac{1}{2}})u(t, x_{i+\frac{1}{2}}) - \left(B(-V(x_{i+\frac{1}{2}})h) + B(V(x_{i+\frac{1}{2}})h) \right) \frac{1}{2} \partial_x u(t, x_{i+\frac{1}{2}}) + \mathcal{O}(h).$$

Utilisons maintenant la propriété $B(0) = 1$ en faisant les développements limités

$$\begin{aligned} B(V(x_{i+\frac{1}{2}})h) &= B(0) + \mathcal{O}(h) = 1 + \mathcal{O}(h), \\ B(-V(x_{i+\frac{1}{2}})h) &= B(0) + \mathcal{O}(h) = 1 + \mathcal{O}(h). \end{aligned}$$

Ainsi on obtient :

$$\widehat{\mathcal{F}}_{i+\frac{1}{2}} = V(x_{i+\frac{1}{2}})u(t, x_{i+\frac{1}{2}}) - \partial_x u(t, x_{i+\frac{1}{2}}) + \mathcal{O}(h),$$

d'où l'existence d'une constante $C > 0$ telle que

$$\left| \widehat{\mathcal{F}}_{i+\frac{1}{2}} - \mathbf{J}_{i+\frac{1}{2}} \right| \leq Ch.$$

L'approximation $\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}}$ est donc consistante d'ordre au moins 1 avec $\mathbf{J}_{i+\frac{1}{2}}$.

1.3 Étude du schéma numérique

Le schéma numérique dans le cas des conditions aux limites de Dirichlet est :

$$\left\{ \begin{array}{l} h_i \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + \mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - \mathcal{F}_{i-\frac{1}{2}}^{n+1} = 0, \\ u_i^0 = u_0(x_i), \\ u_0^n = u_0^D, \\ u_{N+1}^n = u_L^D. \end{array} \right.$$

À chaque pas de temps, le schéma se ramène à un système linéaire $\mathbb{M}U^{n+1} = b^n$ ayant pour inconnue $U^{n+1} = (u_i^{n+1})_{1 \leq i \leq N}$ avec \mathbb{M} tridiagonale définie par :

$$\begin{aligned} \mathbb{M}_{i,i} &= \frac{h_i}{\Delta t} + \frac{1}{h_{i+\frac{1}{2}}} B(-V(x_{i+\frac{1}{2}})h_{i+\frac{1}{2}}) + \frac{1}{h_{i-\frac{1}{2}}} B(V(x_{i-\frac{1}{2}})h_{i-\frac{1}{2}}), \\ \mathbb{M}_{i,i+1} &= -\frac{1}{h_{i+\frac{1}{2}}} B(V(x_{i+\frac{1}{2}})h_{i+\frac{1}{2}}), \\ \mathbb{M}_{i,i-1} &= -\frac{1}{h_{i-\frac{1}{2}}} B(-V(x_{i-\frac{1}{2}})h_{i-\frac{1}{2}}), \end{aligned}$$

et :

$$\begin{aligned} b_1^n &= \frac{h_1}{\Delta t} u_1^n + \frac{1}{h_{\frac{1}{2}}} B(-V(x_{\frac{1}{2}})h_{\frac{1}{2}}) u_0^n, \\ b_i^n &= \frac{h_i}{\Delta t} u_i^n, \text{ pour } i \in \llbracket 2, I-1 \rrbracket, \\ b_N^n &= \frac{h_N}{\Delta t} u_N^n + \frac{1}{h_{N+\frac{1}{2}}} B(V(x_{N+\frac{1}{2}})h_{N+\frac{1}{2}}) u_{N+1}^n. \end{aligned}$$

On notera que \mathbb{M} n'est pas symétrique mais satisfait les propriétés suivantes.

Propriétés 1. La matrice de discrétisation \mathbb{M} est :

1. à diagonale strictement dominante selon ses colonnes;
2. monotone.

Démonstration. Afin d'établir ces deux propriétés nous allons travailler sur la transposée \mathbb{M}^T définie par :

$$\begin{aligned}\mathbb{M}_{i,i}^T &= \frac{h_i}{\Delta t} + \frac{1}{h_{i+\frac{1}{2}}} B \left(-V(x_{i+\frac{1}{2}}) h_{i+\frac{1}{2}} \right) + \frac{1}{h_{i-\frac{1}{2}}} B \left(V(x_{i-\frac{1}{2}}) h_{i-\frac{1}{2}} \right), \\ \mathbb{M}_{i,i+1}^T &= \mathbb{M}_{i+1,i} = -\frac{1}{h_{i+\frac{1}{2}}} B \left(-V(x_{i+\frac{1}{2}}) h_{i+\frac{1}{2}} \right), \\ \mathbb{M}_{i,i-1}^T &= \mathbb{M}_{i-1,i} = -\frac{1}{h_{i-\frac{1}{2}}} B \left(V(x_{i-\frac{1}{2}}) h_{i-\frac{1}{2}} \right).\end{aligned}$$

Commençons par remarquer que puisque $B, h_i, \Delta t > 0$ les termes diagonaux de \mathbb{M}^T sont strictement positifs et les termes extra-diagonaux sont négatifs ou nuls.

1. \mathbb{M} est à diagonale strictement dominante selon ses colonnes :

Pour $i \in \llbracket 2, N-1 \rrbracket$ on a :

$$\begin{aligned}|\mathbb{M}_{i,i+1}^T| + |\mathbb{M}_{i,i-1}^T| &= \frac{1}{h_{i+\frac{1}{2}}} B \left(-V(x_{i+\frac{1}{2}}) h_{i+\frac{1}{2}} \right) + \frac{1}{h_{i-\frac{1}{2}}} B \left(V(x_{i-\frac{1}{2}}) h_{i-\frac{1}{2}} \right) \\ &< \frac{h_i}{\Delta t} + \frac{1}{h_{i+\frac{1}{2}}} B \left(-V(x_{i+\frac{1}{2}}) h_{i+\frac{1}{2}} \right) + \frac{1}{h_{i-\frac{1}{2}}} B \left(V(x_{i-\frac{1}{2}}) h_{i-\frac{1}{2}} \right).\end{aligned}$$

Or

$$\frac{h_i}{\Delta t} + \frac{1}{h_{i+\frac{1}{2}}} B \left(-V(x_{i+\frac{1}{2}}) h_{i+\frac{1}{2}} \right) + \frac{1}{h_{i-\frac{1}{2}}} B \left(V(x_{i-\frac{1}{2}}) h_{i-\frac{1}{2}} \right) = \mathbb{M}_{i,i}^T = |\mathbb{M}_{i,i}^T|,$$

d'où

$$|\mathbb{M}_{i,i+1}^T| + |\mathbb{M}_{i,i-1}^T| < |\mathbb{M}_{i,i}^T|.$$

Les cas $i \in \{1, N\}$ se traitent de la même manière.

Ainsi on a montré que la matrice \mathbb{M}^T est à diagonale strictement dominante, donc \mathbb{M} est à diagonale strictement dominante selon ses colonnes.

2. \mathbb{M} est monotone :

Soit $X \in \mathbb{R}^N$ tel que $d := \mathbb{M}^T X \geq 0$. Puisque $\mathbb{M}_{i,j}^T \leq 0$ si $i \neq j$, pour $i \in \llbracket 1, N \rrbracket$ on a :

$$\begin{aligned}d_i &= \sum_j \mathbb{M}_{i,j}^T x_j = \mathbb{M}_{i,i}^T x_i + \sum_{i \neq j} \mathbb{M}_{i,j}^T x_j \\ &\leq \mathbb{M}_{i,i}^T x_i + \sum_{i \neq j} \mathbb{M}_{i,j}^T \min(x_k),\end{aligned}$$

puis

$$\mathbb{M}_{i,i}^T x_i + \sum_{i \neq j} \mathbb{M}_{i,j}^T \min(x_k) = \mathbb{M}_{i,i}^T \left(x_i - \min(x_k) \right) + \min(x_k) C_i,$$

où : $C_i := \sum_j \mathbb{M}_{i,j}^T > 0$. Soit $i_0 := \operatorname{argmin}_k(x_k)$, alors :

$$0 \leq d_{i_0} \leq C_{i_0} x_{i_0} \Rightarrow 0 \leq x_{i_0} \Rightarrow X \geq 0.$$

Ainsi \mathbb{M}^T est monotone. Par conséquent \mathbb{M} est monotone. □

Compte tenu de ces propriétés, on a le résultat suivant.

Proposition 1. *Pour tout $n \geq 0$ le système linéaire $\mathbb{M}U^{n+1} = b^n$ admet une unique solution. De plus si u^0, u_0^D et u_L^D sont positifs, alors U^n est positif pour tout $n > 0$.*

Démonstration. En effet la monotonie de la matrice implique qu'elle est inversible et ainsi on a la solution $U^{n+1} = \mathbb{M}^{-1}b^n$.

Puisque dans les 3 cas $B \geq 0$ on a $b^0 = \mathbb{M}U^1 \geq 0 \Rightarrow U^1 \geq 0$ par monotonie de \mathbb{M} . Ainsi $b^1 \geq 0$ et par récurrence $U^n \geq 0, \forall n > 0$. □

2 Analyse des résultats numériques

Pour cette partie on se place dans le cas d'un maillage uniforme et avec $x_i = \frac{1}{2} \left(x_{i-\frac{1}{2}} + x_{i+\frac{1}{2}} \right)$.

2.1 Études de convergence

2.1.1 Convergence en espace

Pour chacun des schémas on s'intéresse à la quantité $\|u_{ex} - u_{app}(0.2, \cdot)\|_\infty$, où u_{app} est la solution approchée, en faisant varier la taille h des mailles. Puisque le schéma en temps est d'ordre 1 on va partir de $\Delta t = 1/16$ et le diviser par 4 à chaque fois que l'on divise le pas d'espace par 2 pour les schémas Centered et Scharfetter-Gummel car on attend un ordre 2 en espace. Pour le schéma upwind l'évolution du pas de temps suivra celle du pas d'espace.

h	Upwind	Ordre	Centered	Ordre	Scharfetter-Gummel	Ordre
1/4	1.33×10^{-1}		1.42×10^{-1}		1.42×10^{-1}	
1/8	4.32×10^{-2}	1.62	3.08×10^{-2}	2.20	3.08×10^{-2}	2.21
1/16	1.74×10^{-2}	1.31	6.40×10^{-3}	2.27	6.39×10^{-3}	2.27
1/32	6.99×10^{-3}	1.32	1.57×10^{-3}	2.03	1.57×10^{-3}	2.03
1/64	3.09×10^{-3}	1.18	3.88×10^{-4}	2.02	3.86×10^{-4}	2.02
1/128	1.50×10^{-3}	1.04	9.69×10^{-5}	2.00	9.65×10^{-5}	2.00
1/256	7.40×10^{-4}	1.02	2.42×10^{-5}	2.00	2.41×10^{-5}	2.00
1/512	3.64×10^{-4}	1.02	6.06×10^{-6}	2.00	6.03×10^{-6}	2.00

Évolution de $\|u_{ex} - u_{app}(0.2, \cdot)\|_\infty$ en fonction de h .

On obtient une convergence numérique d'ordre 1 pour le schéma upwind et d'ordre 2 pour Centered et Scharfetter-Gummel. Nos résultats sont donc conformes à la théorie.

2.1.2 Convergence en temps

Pour chacun des schémas on s'intéresse à la quantité $\|u_{ex} - u_{app}(0.25, \cdot)\|_\infty$, où u_{app} est la solution approchée. On choisit un pas d'espace de 1/8192 afin de pouvoir étudier la convergence en temps sans influence de la discrétisation spatiale.

Δt	Upwind	Ordre	Centered	Ordre	Scharfetter-Gummel	Ordre
1/4	1.33×10^0		1.33×10^0		1.33×10^0	
1/8	7.34×10^{-1}	0.86	7.35×10^{-1}	0.86	7.35×10^{-1}	0.86
1/16	3.95×10^{-1}	0.89	3.95×10^{-1}	0.89	3.95×10^{-1}	0.89
1/32	2.06×10^{-1}	0.94	2.06×10^{-1}	0.94	2.06×10^{-1}	0.94
1/64	1.05×10^{-1}	0.97	1.05×10^{-1}	0.97	1.05×10^{-1}	0.97
1/128	5.30×10^{-2}	0.99	5.33×10^{-2}	0.98	5.33×10^{-2}	0.98
1/256	2.65×10^{-2}	1.00	2.68×10^{-2}	0.99	2.68×10^{-2}	0.99
1/512	1.31×10^{-2}	1.01	1.34×10^{-2}	1.00	1.34×10^{-2}	1.00

Évolution de $\|u_{ex} - u_{app}(0.25, \cdot)\|_\infty$ en fonction de Δt .

On retrouve numériquement que les trois schémas sont convergents à l'ordre 1 en temps.

2.2 Comportement en temps long

2.2.1 Étude de la norme

Traçons l'évolution de $Err_1 : t \mapsto \frac{\|u_{ex}^\infty - u_{app}(t, \cdot)\|_{L^1}}{\|u_{ex}^\infty - u_{app}(0, \cdot)\|_{L^1}}$ en échelle semi-log pour différentes valeurs de h .

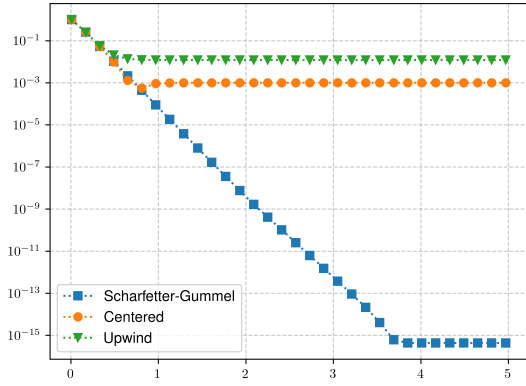


Figure 1 : Evolution de Err_1 pour $h = 1/4$.

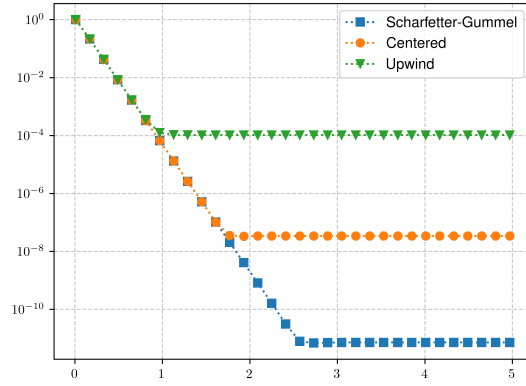


Figure 2 : Evolution de Err_1 pour $h = 1/512$.

Schéma	Scharfetter-Gummel	Centered	Upwind
h	$Err_1(5)$		
1/4	4.31×10^{-16}	1.00×10^{-3}	1.20×10^{-2}
1/8	9.05×10^{-16}	1.63×10^{-4}	6.22×10^{-3}
1/16	6.27×10^{-15}	3.66×10^{-5}	3.21×10^{-3}
1/32	4.66×10^{-15}	8.85×10^{-6}	1.63×10^{-3}
1/64	2.31×10^{-14}	2.19×10^{-6}	8.25×10^{-4}
1/128	6.44×10^{-13}	5.44×10^{-7}	4.14×10^{-4}
1/256	2.10×10^{-12}	1.36×10^{-7}	2.08×10^{-4}
1/512	7.17×10^{-12}	3.39×10^{-8}	1.04×10^{-4}

Valeur de Err_1 au temps final $T=5$.

Pour les trois schémas nous obtenons une décroissance exponentielle de Err_1 qui se stabilise à partir d'un certain temps. Concernant Upwind et Centered cette stabilisation intervient assez tôt. La convergence sature en premier pour Upwind et on peut l'expliquer par le fait qu'il est d'ordre 1. Quant au schéma de Scharfetter-Gummel il est intéressant de remarquer que la précision machine est quasiment atteinte pour $h = 1/4$ et que le fait de diminuer le pas d'espace provoque une augmentation de l'erreur, dû aux erreurs d'arrondis, alors que dans les autres cas cette erreur diminue.

2.2.2 Étude de l'entropie relative

Intéressons nous maintenant à l'évolution de l'entropie relative discrète et traçons son évolution en échelle semi-log pour différentes valeurs de h .

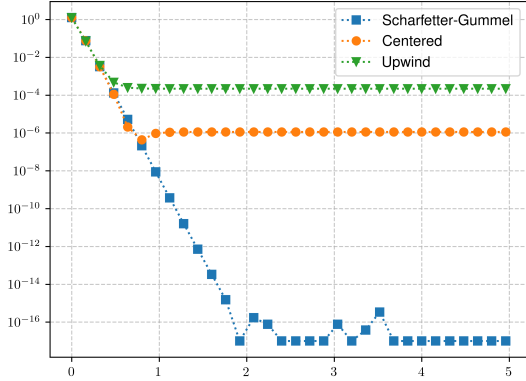


Figure 3 : Evolution de E_{rel} pour $h = 1/4$.

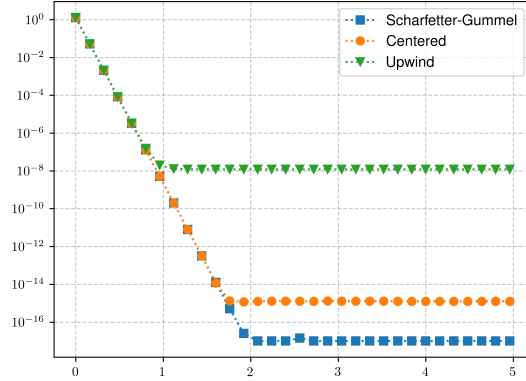


Figure 4 : Evolution de E_{rel} pour $h = 1/512$.

Schéma	Scharfetter-Gummel	Centered	Upwind
h	$E_{rel}(u_{app}(5, \cdot) u_{ex}^\infty)$		
1/4	7.59×10^{-17}	1.13×10^{-6}	2.18×10^{-4}
1/8	3.66×10^{-17}	3.13×10^{-8}	4.77×10^{-5}
1/16	1.39×10^{-18}	1.55×10^{-9}	1.19×10^{-5}
1/32	2.98×10^{-17}	8.94×10^{-11}	3.02×10^{-6}
1/64	1.37×10^{-17}	5.39×10^{-12}	7.63×10^{-7}
1/128	1.56×10^{-17}	3.32×10^{-13}	1.92×10^{-7}
1/256	5.32×10^{-17}	2.06×10^{-14}	4.80×10^{-8}
1/512	4.43×10^{-18}	1.26×10^{-15}	1.20×10^{-8}

Valeur de E_{rel} au temps final $T=5$.

Nous observons, comme pour Err_1 , une décroissance exponentielle de E_{rel} . La précision machine est atteinte pour Scharfetter-Gummel et la diminution du pas d'espace ne provoque pas d'augmentation de l'erreur. Une fois de plus la stabilisation de la décroissance de Upwind intervient plus tôt que celle de Centered.

2.3 Conclusion

L'étude du comportement numérique de ces trois schémas nous confirme la propriété de décroissance exponentielle vers l'état stationnaire en norme L^1 et pour l'entropie relative au niveau discret. Cependant tous les schémas ne se valent pas. En effet le schéma de Scharfetter-Gummel est bien meilleur que les autres, bien qu'il soit convergent d'ordre 2 en espace comme Centered son comportement pour des temps long surpasse largement celui des autres. Cela s'explique par le fait qu'il soit exact pour l'état stationnaire.

Troisième partie

Schémas volumes finis non linéaires

1 Présentation des schémas

On se place maintenant plus particulièrement dans le cas où V dérive d'un potentiel (ie $V = -\partial_x \Psi$). On peut alors écrire le flux de la manière suivante :

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{i+\frac{1}{2}} &= -\partial_x u(t, x_{i+\frac{1}{2}}) + V(x_{i+\frac{1}{2}})u(t, x_{i+\frac{1}{2}}) \\ &= -\partial_x u(t, x_{i+\frac{1}{2}}) - \partial_x \Psi(x_{i+\frac{1}{2}})u(t, x_{i+\frac{1}{2}}) \\ &= -u(t, x_{i+\frac{1}{2}}) \partial_x \left(\log(u(t, x_{i+\frac{1}{2}})) + \Psi(x_{i+\frac{1}{2}}) \right). \end{aligned}$$

On a maintenant un flux non linéaire et on va approcher l'opérateur ∂_x par un schéma centré pour obtenir le flux numérique :

$$\mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}} = -g(u_i, u_{i+1}) \left(\frac{\left(\log(u_{i+1}) + \Psi_{i+1} \right) - \left(\log(u_i) + \Psi_i \right)}{h_{i+\frac{1}{2}}} \right),$$

avec g est une fonction qui approxime $u(t, x_{i+\frac{1}{2}})$, nous ne discuterons pas ici des conditions que doit vérifier la fonction g . Pour cette approximation nous allons étudier les 4 choix suivants qui peuvent être vus comme différentes moyennes de x et y :

$$\begin{aligned} g_1 : (x, y) &\mapsto \frac{x+y}{2}, & g_2 : (x, y) &\mapsto \frac{y-x}{\log y - \log x}, \\ g_3 : (x, y) &\mapsto \left(\frac{\sqrt{x} + \sqrt{y}}{2} \right)^2, & g_4 : (x, y) &\mapsto \max\{x, y\}. \end{aligned}$$

Remarque 3. Ces schémas sont exacts pour l'état stationnaire. En effet on a

$$\left(\log(\rho e^{-\psi_{i+1}}) + \Psi_{i+1} \right) - \left(\log(\rho e^{-\psi_i}) + \Psi_i \right) = \left(\log(\rho) - \Psi_{i+1} + \Psi_{i+1} \right) - \left(\log(\rho) - \Psi_i + \Psi_i \right) = 0.$$

D'où $\mathcal{F} = 0$ pour u^∞ .

À cela on ajoute des conditions aux limites flux nuls et le schéma associé est

$$\left\{ \begin{array}{l} h_i \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + \mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}}^{n+1} - \mathcal{F}_{i-\frac{1}{2}}^{n+1} = 0, \\ u_i^0 = u_0(x_i), \\ \mathcal{F}_{\frac{1}{2}} = 0, \\ \mathcal{F}_{N+\frac{1}{2}} = 0. \end{array} \right.$$

Ce schéma est non linéaire et on peut le réécrire à chaque pas de temps sous la forme :

$$\mathbf{F}_n(U^{n+1}) = 0, \tag{SNL}$$

avec :

$$\begin{aligned} (\mathbf{F}_n(Z))_1 &= h_1 \frac{z_1 - u_1^n}{\Delta t} + \mathcal{F}_{\frac{3}{2}}, \\ (\mathbf{F}_n(Z))_i &= h_i \frac{z_i - u_i^n}{\Delta t} + \mathcal{F}_{i+\frac{1}{2}} - \mathcal{F}_{i-\frac{1}{2}}, \text{ pour } i \in \llbracket 2, N-1 \rrbracket, \\ (\mathbf{F}_n(Z))_N &= h_N \frac{z_N - u_N^n}{\Delta t} - \mathcal{F}_{N-\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

2 Implémentation

Le problème (SNL) consiste à la recherche du zéro d'une fonction, plusieurs méthodes sont possibles pour ce type de problème. Nous allons ici utiliser la méthode de Newton qui lorsqu'elle converge présente l'avantage d'avoir une convergence quadratique.

2.1 Matrice Jacobienne

Pour utiliser la méthode de Newton il nous faut calculer la matrice Jacobienne de \mathbf{F}_n . Les coefficients de \mathbf{F}_n ne dépendent au maximum que de trois variables qui se suivent, par conséquent la matrice Jacobienne, $J_{\mathbf{F}_n}$, est tridiagonale. Ainsi nous obtenons :

$$\begin{aligned}
 (J_{\mathbf{F}_n}(Z))_{i,i-1} &= \frac{\partial (\mathbf{F}(Z))_i}{\partial z_{i-1}} \\
 &= \frac{1}{h_{i-\frac{1}{2}}} \left[\frac{\partial g}{\partial x}(z_{i-1}, z_i) [\log(z_i) - \log(z_{i-1}) + \Psi_i - \Psi_{i-1}] - \frac{g(z_{i-1}, z_i)}{z_{i-1}} \right], \\
 (J_{\mathbf{F}_n}(Z))_{i,i} &= \frac{\partial (\mathbf{F}(Z))_i}{\partial z_i} \\
 &= \frac{h_i}{\Delta t} + \frac{1}{h_{i+\frac{1}{2}}} \left[-\frac{\partial g}{\partial x}(z_i, z_{i+1}) [\log(z_{i+1}) - \log(z_i) + \Psi_{i+1} - \Psi_i] + \frac{g(z_i, z_{i+1})}{z_i} \right] \\
 &\quad + \frac{1}{h_{i-\frac{1}{2}}} \left[\frac{\partial g}{\partial y}(z_{i-1}, z_i) [\log(z_i) - \log(z_{i-1}) + \Psi_i - \Psi_{i-1}] + \frac{g(z_{i-1}, z_i)}{z_i} \right], \\
 (J_{\mathbf{F}_n}(Z))_{i,i+1} &= \frac{\partial (\mathbf{F}(Z))_i}{\partial z_{i+1}} \\
 &= \frac{1}{h_{i+\frac{1}{2}}} \left[-\frac{\partial g}{\partial y}(z_i, z_{i+1}) [\log(z_{i+1}) - \log(z_i) + \Psi_{i+1} - \Psi_i] - \frac{g(z_i, z_{i+1})}{z_{i+1}} \right].
 \end{aligned}$$

2.2 Pas de temps adaptatif

Nous ne montrerons pas que la matrice Jacobienne de \mathbf{F}_n est inversible en tout point, même s'il suffirait de le montrer pour un voisinage du zéro de \mathbf{F}_n . Cependant pour prévenir d'éventuels problèmes de convergence de la méthode de Newton nous avons implémenté un algorithme de pas de temps adaptatif. L'idée est qu'une diminution de Δt va augmenter la valeur des coefficients diagonaux et ainsi $J_{\mathbf{F}_n}^T$ sera à diagonale strictement dominante. Cela implique que $J_{\mathbf{F}_n}$ soit inversible en n'importe quel point, en particulier au zéro recherché. Voici l'algorithme du pas de temps adaptatif :

Données :

$$dt_{min}, dt_{max} \in \mathbb{R}, nb_it_max \in \mathbb{N}$$

Initialisation :

$$t = 0, dt = dt_{max}$$

Traitement :

while $t < T$ **do**

$$\left[\begin{array}{l}
 dt = \min [4 \times dt, 2 * dt_{min}] \\
 k = nb_it_max \\
 test = 1 \\
 \mathbf{while} (k = nb_it_max \mathbf{or} test \neq +\infty) \mathbf{do} \\
 \left[\begin{array}{l}
 dt = \max [dt/2, dt_{min}] \\
 \mathbf{Résolution par Newton} \\
 k = \text{nombre d'itération de Newton} \\
 test = \text{norme infinie de } \mathbf{F}_n(U^{n+1})
 \end{array} \right. \\
 t = t + dt
 \end{array} \right.$$

3 Analyse des résultats numériques

Pour l'étude numérique on se place dans le cas d'un maillage uniforme et avec $x_i = \frac{1}{2} \left(x_{i-\frac{1}{2}} + x_{i+\frac{1}{2}} \right)$. On utilise le même cas test u_{ex} que dans le cas des schémas linéaires puisque celui-ci vérifie bien $V = -\partial_x \Psi$ avec $\Psi(x) = -x + \frac{1}{2}$. Cependant nous sommes maintenant dans le cas flux nul aux bords, u_{ex} est alors solution de

$$\begin{cases} \partial_t u + \partial_x(\mathbf{J}) = 0, \mathbf{J} = -\partial_x u + u & , x \in]0, 1[, t > 0, \\ u(0, x) = e^{\frac{x}{2}} \left(\pi \cos(\pi x) + \frac{1}{2} \sin(\pi x) \right) + \pi e^{x-\frac{1}{2}} & , x \in]0, 1[, \\ \mathbf{J}_0 = \mathbf{J}_1 = 0 & , t > 0. \end{cases}$$

3.1 Étude de la convergence en espace

Pour chacun des schémas on étudie $\|u_{ex} - u_{app}(0.2, \cdot)\|_\infty$, où u_{app} est la solution approchée. Ici on sait que l'ordre de convergence en espace théorique de chacun des schémas est de 1 ou 2. Nous allons donc utiliser la même méthode que dans le cas linéaire. Cependant afin de confirmer nos résultats pour le schéma avec g_4 nous avons également fait une étude avec un pas de temps $\Delta t = 1e-6$ pour tout h afin de diminuer fortement l'impact de l'erreur en temps.

h	g_1	Ordre	g_2	Ordre	g_3	Ordre	g_4	Ordre
1/4	7.51×10^{-2}		8.15×10^{-2}		7.98×10^{-2}		6.38×10^{-2}	
1/8	1.82×10^{-2}	2.04	2.00×10^{-2}	2.03	1.95×10^{-2}	2.03	4.90×10^{-2}	0.38
1/16	4.53×10^{-3}	2.00	4.98×10^{-3}	2.00	4.87×10^{-3}	2.00	2.93×10^{-2}	0.74
1/32	1.13×10^{-3}	2.00	1.24×10^{-3}	2.00	1.22×10^{-3}	2.00	1.59×10^{-2}	0.88
1/64	2.83×10^{-4}	2.00	3.11×10^{-4}	2.00	3.04×10^{-4}	2.00	8.30×10^{-3}	0.94
1/128	7.07×10^{-5}	2.00	7.77×10^{-5}	2.00	7.59×10^{-5}	2.00	4.23×10^{-3}	0.97
1/256	1.77×10^{-5}	2.00	1.94×10^{-5}	2.00	1.90×10^{-5}	2.00	2.13×10^{-3}	1.00

Évolution de $\|u_{ex} - u_{app}(0.2, \cdot)\|_\infty$ en fonction de h .

Au vu des résultats numériques nous pouvons dire que les schémas pour les 3 premiers choix de g sont convergents d'ordre 2 en espace et que celui pour la fonction g_4 est d'ordre 1.

3.2 Comportement en temps long

Nous allons à nouveau étudier le comportement en temps long de la norme L^1 discrète et de l'entropie relative afin de vérifier que la décroissance exponentielle vers l'état stationnaire à toujours lieu. Étant cette fois ci dans le cas flux nul aux bords le principe de conservation de la masse s'applique et il va nous falloir comparer la solution approchée avec l'état stationnaire numérique $u^\infty = \rho e^{x-\frac{1}{2}}$ avec $\rho = \frac{\sum_{i=1}^N h_i u_0(x_i)}{\sum_{i=1}^N h_i e^{-\psi_i}}$.

3.2.1 Étude de la norme

Traçons l'évolution de Err_1 jusqu'au temps final $T=10$ pour différentes valeurs de h .

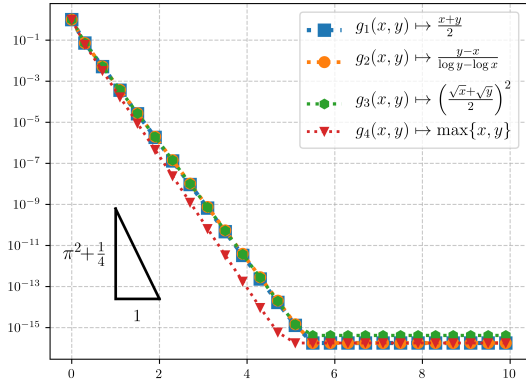


Figure 5 : Évolution de Err_1 pour $h = 1/4$.

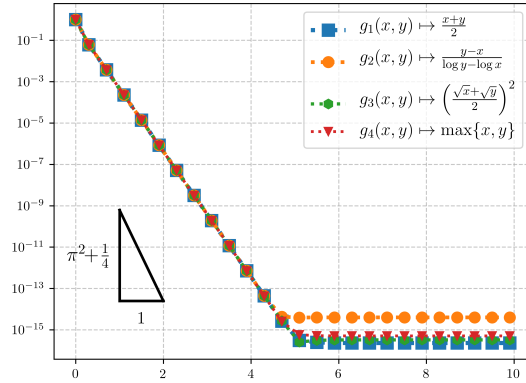


Figure 6 : Évolution de Err_1 pour $h = 1/512$.

Schéma	$g_1(x, y) \mapsto \frac{x+y}{2}$	$g_2(x, y) \mapsto \frac{y-x}{\log y - \log x}$	$g_3(x, y) \mapsto \left(\frac{\sqrt{x} + \sqrt{y}}{2}\right)^2$	$g_4(x, y) \mapsto \max\{x, y\}$
h	$Err_1(10)$			
1/4	1.75×10^{-15}	1.58×10^{-15}	1.28×10^{-15}	1.75×10^{-16}
1/8	6.67×10^{-15}	3.56×10^{-15}	3.98×10^{-15}	1.94×10^{-16}
1/16	9.84×10^{-16}	5.87×10^{-15}	2.65×10^{-15}	9.27×10^{-16}
1/32	2.01×10^{-15}	1.82×10^{-15}	3.16×10^{-15}	1.40×10^{-15}
1/64	1.23×10^{-16}	1.10×10^{-16}	4.35×10^{-16}	1.18×10^{-16}
1/128	1.34×10^{-15}	6.14×10^{-16}	7.54×10^{-16}	1.50×10^{-15}
1/256	5.12×10^{-16}	7.87×10^{-16}	1.63×10^{-15}	2.99×10^{-16}
1/512	1.40×10^{-15}	3.97×10^{-15}	5.19×10^{-16}	8.09×10^{-16}

Valeur de Err_1 au temps final $T=10$.

On a bien la décroissance exponentielle en norme L^1 vers l'état stationnaire. La précision machine est atteinte, cela confirme que les schémas sont exacts pour l'état stationnaire. Remarquons que les 4 schémas évoluent de manière similaire.

3.2.2 Étude de l'entropie relative

Intéressons nous maintenant à l'évolution de l'entropie relative.

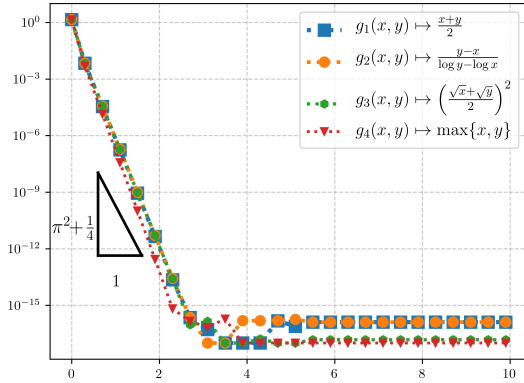


Figure 7 : Évolution de E_{rel} pour $h = 1/4$.

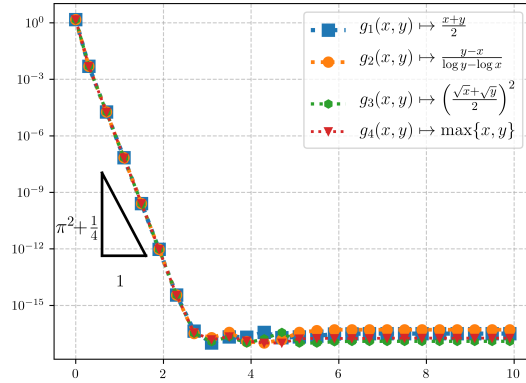


Figure 8 : Évolution de E_{rel} pour $h = 1/512$.

Schéma	$g_1(x, y) \mapsto \frac{x+y}{2}$	$g_2(x, y) \mapsto \frac{y-x}{\log y - \log x}$	$g_3(x, y) \mapsto \left(\frac{\sqrt{x} + \sqrt{y}}{2}\right)^2$	$g_4(x, y) \mapsto \max\{x, y\}$
h	E_{rel}			
1/4	2.75×10^{-17}	1.00×10^{-17}	1.15×10^{-16}	1.00×10^{-17}
1/8	1.69×10^{-16}	1.60×10^{-16}	1.00×10^{-17}	1.56×10^{-16}
1/16	9.28×10^{-17}	1.00×10^{-17}	8.53×10^{-17}	1.72×10^{-16}
1/32	1.91×10^{-17}	1.49×10^{-17}	3.69×10^{-17}	6.24×10^{-17}
1/64	1.36×10^{-17}	1.00×10^{-17}	1.0×10^{-17}	2.16×10^{-17}
1/128	1.00×10^{-17}	1.00×10^{-17}	1.12×10^{-17}	1.00×10^{-17}
1/256	1.00×10^{-17}	1.00×10^{-17}	1.00×10^{-17}	1.00×10^{-17}
1/512	3.13×10^{-17}	1.24×10^{-17}	2.99×10^{-17}	1.00×10^{-17}

Valeur de E_{rel} au temps final T=10.

De même la décroissance exponentielle en entropie relative a bien lieu et on observe que les schémas sont exacts pour l'état stationnaire. Remarquons qu'il n'y a pas de différence notable entre les 4 schémas.

3.3 Conclusion

Comme nous l'avons vu les 4 choix de fonction g respectent la propriété de décroissance exponentielle vers l'état stationnaire en norme L^1 et en entropie relative au niveau discret. Cependant la convergence en espace pour le choix g_4 est d'ordre 1 alors que les 3 autres sont d'ordre 2, ce choix n'est donc pas à privilégier. Les 3 premiers schémas ont donc des comportements similaires mais la fonction g_1 à l'avantage d'être peu coûteuse en calcul et est donc le choix optimal.

Références

- [1] Thierry Bodineau, Joel Lebowitz, Clément Mouhot, and Cédric Villani. Lyapunov functionals for boundary-driven nonlinear drift–diffusion equations. *Nonlinearity*, 27(9) :2111–2132, aug 2014.
- [2] J. A. CARRILLO and G. TOSCANI. Asymptotic l^1 -decay of solutions of the porous medium equation to self-similarity. *Indiana University Mathematics Journal*, 49(1) :113–142, 2000.
- [3] Claire Chainais-Hillairet and Jérôme Droniou. Finite-volume schemes for noncoercive elliptic problems with Neumann boundary conditions. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 31(1) :61–85, 08 2009.