



Université Lille Nord de France
Pôle de Recherche
et d'Enseignement Supérieur

Ecole doctorale régionale Sciences Pour l'Ingénieur Lille Nord-de-France - 072



Titre : Méthodes numériques hybrides cinétiques/fluides et hypocoercivité discrète pour l'équation de Boltzmann pour les semi-conducteurs

Directrice de thèse : Claire Chainais-Hillairet
E-mail : claire.chainais@univ-lille.fr

Co-directeur de thèse : Thomas Rey
E-mail : thomas.rey@univ-lille.fr

Co-encadrante de thèse : Marianne Bessemoulin-Chatard
E-mail : marianne.bessemoulin@univ-nantes.fr

Laboratoire : Laboratoire Paul Painlevé

Equipe : Analyse Numérique et Equations aux Dérivées pPartielles

Descriptif : Modéliser des semi-conducteurs est devenu un problème important dans les dernières décennies pour les physiciens, mathématiciens et ingénieurs. En effet, le champ d'application de ces dispositifs est immense, allant des puces informatiques (CPU, GPU, FPGA, etc.) pour la micro-informatique à toute l'électronique embarquée, (voitures autonomes, domotique, Internet des Objets, etc.), jusqu'à l'opto-électronique (panneaux solaires, fibres optiques, etc.). Il est donc d'un intérêt vital de comprendre les modèles mathématiques décrivant ces dispositifs, pour en améliorer les performances computationnelles et énergétiques. Nous espérons que ce projet de thèse aura un impact sur la compréhension et l'amélioration des méthodes numériques multi-échelles pour les semi-conducteurs.

Ces modèles peuvent se classer en trois grandes échelles [JU09] : particulière, cinétique ou fluide. La première décrit le système comme un ensemble discret de particules interagissant via des collisions ou des forces électromagnétiques. Du fait de la taille d'un tel système, il est théoriquement et numériquement impossible d'étudier ce modèle, et des simplifications sont alors nécessaires. L'échelle mésoscopique, ou cinétique, consiste à représenter les particules par une distribution de probabilité, dépendant du temps, de l'espace et de la vitesse. Une telle approche permet d'éviter une perte d'individualité des particules, tout en réduisant la dimensionnalité de l'espace des phases. Le semi-conducteur est alors décrit par une équation de type champ moyen (Vlasov-Poisson) pour décrire les interactions à longue portée, à laquelle un terme de collision (Boltzmann, Nordheim) est ajouté pour prendre en compte les collisions physiques ou des effets quantiques. Ce type de description est précis concernant l'état du semi-conducteur, mais est très non-linéaire et posé dans un espace des phases de grande dimension (jusqu'à 7). Pour cette raison, une description fluide est nécessaire pour simplifier la description du modèle. Celle-ci, bien que justifiée lorsque le nombre d'interactions interparticulaires par unité de temps est grand, est parfois fautive (notamment à l'échelle microscopique, privilégiée pour les semi-conducteurs).

Une approche explorée depuis la fin du vingtième siècle en dynamique des fluides, dite hybride [KL96], consiste à décomposer le domaine spatial pour résoudre le modèle cinétique (coûteux mais précis) sur de petites zones, et le modèle fluide (bon marché) partout ailleurs. Cette stratégie a été utilisée avec succès dans toute une série d'articles, notamment [FR15]. Plusieurs questions cruciales se posent alors dans cette approche notamment le choix de la décomposition spatiale [LMN98], les conditions de couplage aux bords des différents domaines de



calcul [FR15], et la question de l'utilisation de cette décomposition dans un contexte multi-noeuds de calcul. Toutes ces pistes pourront être explorées dans ce projet de thèse dans le contexte des semi-conducteurs.

La question du comportement en temps long ou en limites de petits paramètres des méthodes numériques développées est aussi fondamentale en analyse numérique d'équations multi-échelles. Les méthodes préservant le comportement théorique des solutions des équations en jeu sont dites Préservant les Asymptotiques (AP), depuis l'article fondateur [JI99]. La question du retour à taux explicite vers un équilibre universel est notamment centrale dans ces équations [BC19]. On parle d'hypocoercivité lorsque ce taux est exponentiel [DMS15]. L'étude théorique de ce comportement au niveau discret a été récemment menée pour des modèles simplifiés fluides et cinétiques dans [BC19, BHR20], mais la question reste encore ouverte pour des modèles complets de semi-conducteurs.

La thèse comprendra donc des objectifs théoriques et numériques. L'étude théorique pourra porter sur le comportement asymptotique en limite en petits paramètres de l'équation cinétique pour les semi-conducteurs (caractère AP), puis éventuellement en temps grand (hypocoercivité continue puis discrète). Ces travaux pourront s'inspirer de la récente prépublication [ADLT19] établissant le comportement hypocoercif d'un modèle cinétique linéaire avec terme de champ moyen, et s'inscriront alors naturellement dans le prolongement de l'article [BHR20].

Les aspects numériques de ce projet de thèse sont multiples. Le premier objectif consiste à développer un code hybride pour un modèle jouet unidimensionnel, valable dans la limite de diffusion, d'abord sans, puis avec un terme de confinement extérieur. Ce code de calcul sera alors étendu au cas non-linéaire d'un potentiel auto-consistant (voir [JU09] pour une hiérarchie fine de modèles possibles) puis au cas véritablement multi-dimensionnel. Dans tous ces travaux, il sera nécessaire d'affiner les indicateurs de décomposition de domaine existants (voir [LMN98, FR15]) ainsi que les conditions de couplage entre les différents modèles en jeu. Enfin, l'extension de ces méthodes à des machines massivement parallèles, traitant chacun des sous domaines indépendamment, et minimisant les communications réseau aux seules interfaces, sera envisagée.

Références.

- [ADLT19] L. Addala, J. Dolbeault, X. Li et M. Lazhar Tayeb. *L2-Hypocoercivity and large time asymptotics of the linearized Vlasov-Poisson-Fokker-Planck system*. Preprint arXiv 1909.12762.
- [BHR20] **M. Bessemoulin-Chatard**, Maxime Herda et **T. Rey**. *Hypocoercivity and diffusion limit of a finite volume scheme for linear kinetic equations*. *Math. Comp.* 89 (2020), pp. 1093–1133.
- [BC19] **M. Bessemoulin-Chatard** et **C. Chainais-Hillairet**. *Exponential decay of a finite volume scheme to the thermal equilibrium for drift-diffusion systems*. *J. Numer. Math.* 25 (2017), pp. 147–168.
- [DMS15] J. Dolbeault, C. Mouhot et C. Schmeiser. *Hypocoercivity for linear kinetic equations conserving mass*. *Trans. Amer. Math. Soc.* 367 (2015), pp. 3807–3828.
- [FR15] F. Filbet et **T. Rey**. *A Hierarchy of Hybrid Numerical Methods for Multi-Scale Kinetic Equations*. *SIAM J. Sci. Comput.* 37-3 (2015), pp. A1218–A1247.
- [KL96] A. Klar. *Domain decomposition for kinetic problems with nonequilibrium states*. *Eur. J. Mech. B/Fluids.* 15 (1996), pp. 203–216.
- [LMN98] C. Levermore, W. Morokoff, et B. Nadiga. *Moment realizability and the validity of the Navier–Stokes equations for rarefied gas dynamics*. *Phys. Fluids* 10 (1998), pp. 3214–3226.
- [JI99] Shi Jin. *Efficient asymptotic-preserving (AP) schemes for some multiscale kinetic equations*. *SIAM J. Scient. Comput.* 21 (1999), pp. 441–454.
- [JU09] A. Juengel. *Transport Equations for Semiconductors*. *Lecture Notes in Physics* No. 773. Springer, Berlin, 2009.