

Laboratoire Jacques-Louis Lions, UMR 7598
Université Pierre et Marie Curie – Paris 6 & CNRS
Université Paris Diderot – Paris 7

Habilitation à diriger les recherches en mathématiques

Contributions mathématiques à l'étude de modèles
décrivant le mouvement de particules confinées
et de micro-organismes

Nicolas Vauchelet

Rapporteurs :

Pierre Degond
Imperial College London

Ansgar Jüngel
Vienna University of Technology

Laurent Desvillettes
ENS Cachan

Soutenue le 8 décembre 2014 devant le jury composé de :

François Bouchut
Université Paris-Est Marne-la-Vallée

Laurent Desvillettes
ENS Cachan

Thierry Goudon
INRIA Sophia Antipolis

Michal Kowalczyk
Universidad de Chile

Pierre Degond
Imperial College London

Marie Doumic-Jauffret
INRIA, Paris-Rocquencourt

Ansgar Jüngel
Vienna University of Technology

Benoît Perthame
Université Pierre et Marie Curie

Remerciements

Un grand merci à Pierre Degond, Laurent Desvillettes et Ansgar Jüngel d'avoir si gentiment accepté de rapporter sur les travaux décrits dans ce mémoire. Je les remercie aussi pour leur participation dans mon jury de soutenance. Je suis très honoré de la présence dans ce jury de François Bouchut, Marie Doumic-Jauffret, Thierry Goudon, Michal Kowalczyk et Benoît Perthame. Je les en remercie.

Merci à mes directeurs de thèse Naoufel Ben Abdallah et Florian Méhats qui m'ont initié au monde de la recherche et dont les conseils avisés m'ont toujours été très utiles. J'ai une pensée toute particulière pour Naoufel au moment de rédiger ce mémoire. Je remercie aussi mes encadrants de post-doctorat Christophe Besse et Thierry Goudon.

Un grand merci à Benoît Perthame qui lors de mon arrivée au LJLL m'a proposé de nouveaux sujets de recherche passionnants. C'est un immense plaisir et un enrichissement constant de travailler avec lui. Je le remercie aussi pour m'avoir donné la possibilité de faire partie de l'équipe BANG d'INRIA. J'ai la chance de collaborer avec François James depuis plusieurs années, je le remercie pour tout ce qu'il m'a appris, toujours dans la bonne humeur. Merci à tous mes collaborateurs qui m'ont permis d'aboutir aux travaux résumés dans ce manuscrit : Paola Pietra, Clément Jourdana, Ingrid Lacroix-Violet, Jean-Paul Dudon, Laurent Navoret, Frédérique Charles, Fiammetta Cerretti, Min Tang, Cristian Schmeiser, Ibrahim Cheddadi, Irène Vignon-Clémentel, Dirk Drasdo, Fernando Quirós, Luis Almeida, Casimir Emako, Michal Kowalczyk, José-Antonio Carrillo, Frédéric Lagoutière. Merci aux membres de l'équipe MAMBA Jean Clairambault, Marie Doumic-Jauffret et aussi à la gestionnaire administrative Nathalie Bonte. Merci à tous les collègues dont les discussions et l'aide m'ont été très précieuses : Axel Buguin, Vincent Calvez, Francis Filbet, Laurent Gosse, Jie Liao, Sidi-Mahmoud Kaber, Claudia Codeço et Daniel Vilela de la FioCruz, Jorge Zubelli et le staff de l'IMPA. Enfin merci aux autres responsables PIMA pour leur aide et leur soutien dans cette responsabilité : Laurent Boudin, Nadine Goldstein, Ludovic Perret, Mohab Safey El Din.

Je remercie les membres du bureau 16-26/301, ancien 2D24 de l'époque Chevaleret, pour m'avoir supporté depuis plusieurs années, notamment à l'heure du goûter ! Merci donc aux permanents Laurent, Jean-François et Nicolas, aux membres émérites Stéphane, Frédéric, Philippe, Francesco, et à tous les membres de passage Anne, Ulrich, Stéphane, Filippa, Francesco, Julien, Alexandra, Rachida. Merci aussi aux collègues que je n'ai pas encore cités pour leur participation à la bonne ambiance générale et leurs conseils avisés : Alexander, Ayman, Camille, Céline, Clément, Corentin, Emmanuel, Franck, Frédérique, Grégoire, Jérémy, Magali, Martin, Muriel, Yannick, Yohan.

Le laboratoire Jacques-Louis Lions m'a offert un cadre de travail exceptionnel. Je remercie donc toutes les personnes qui font vivre ce laboratoire : les deux directeurs que j'aurai cotoyés (Yvon Maday et Benoît Perthame), la directrice adjointe (Edwidge Godlewski), les gestionnaires administratives (Danielle Boulic, Catherine Drouet, Nadine Foucart, Salima Lounici, Liliane Ruprecht, Florence Saidani), les ingénieurs (Kashayar Dadras, Pascal Joly, Antoine Le Hyaric, Robert Longeon, Hugues Loretto, Philippe Parnaudau, Altaïr Pélissier) et de manière générale tous les membres permanents et non permanents que j'aurai malencontreusement oublié de citer ci-dessus.

Enfin, je tiens tout particulièrement à remercier mes parents et ma famille pour leur soutien constant dans tous les moments.

Table des matières

Introduction générale	8
1 Modèles couplés quantique-classique	9
1.1 Une hiérarchie de modèle couplé quantique-classique	9
1.2 Interactions électrons-phonons dominantes	12
1.2.1 Modèle cinétique pour les sous-bandes	12
1.2.2 Limite de diffusion	13
1.2.3 Modèles de dérive-diffusion du transport de charges confinées	15
1.3 Modèle Energie-Transport pour les sous-bandes	16
1.3.1 Limite formelle	16
1.3.2 Simulations numériques	18
1.4 Modèle diffusif du transport confiné dans un nanofil	19
1.5 Couplage hybride	22
2 Agrégation de bactéries par chimiotactisme	25
2.1 Processus de run et tumble : modèle cinétique	25
2.1.1 Modélisation	25
2.1.2 Résultat d'existence et simulations numériques	27
2.2 Limite hydrodynamique en une dimension	29
2.2.1 Equation d'agrégation	29
2.2.2 Solutions en dualité en une dimension	31
2.3 Solutions mesures définies par un flot en dimension supérieure	34
2.3.1 Solutions définies par un flot	34
2.3.2 Résolution numérique	36
3 Swarming pour Bacillus subtilis	39
3.1 Introduction et modélisation	39
3.1.1 Motivation : swarming chez Baccillus subtilis	39
3.1.2 Modélisation	41
3.2 Existence d'ondes en forme de plateaux	43
3.2.1 Plateaux stationnaires	43
3.2.2 Traveling plateaux	45
3.2.3 Traveling plateaux pour une diffusion de surfactant nulle	45
4 Modèles macroscopiques de croissance de tumeurs	47
4.1 Introduction et modélisation	47
4.2 Limite incompressible vers Hele-Shaw	49
4.2.1 Préliminaires	49
4.2.2 Analyse asymptotique	50
4.3 Fronts de propagation	53
4.3.1 Existence de traveling waves pour le modèle de Hele-Shaw	53

4.3.2	Existence de traveling waves pour un modèle à densité cellulaire	55
4.4	Instabilités transversales	56
4.4.1	Motivation	56
4.4.2	Traveling waves en une dimension	57
4.4.3	Stabilité transversale des ondes planaires	58
	Liste des publications	59
	Bibliographie générale	61

Introduction générale

Ce mémoire synthétise les travaux publiés ou soumis pour publication de l'auteur. Une liste exhaustive de ces travaux se situe en fin du manuscrit. De plus, au début de chaque chapitre, la liste des articles résumés est donnée.

La thématique générale abordée est l'étude analytique et numérique de modèles d'équations aux dérivées partielles (EDP) issues d'applications provenant de la physique ou de la biologie. Plus précisément, les modèles mathématiques présentés décrivent le mouvement de particules chargées, la migration collective de bactéries et l'auto-organisation de communautés cellulaires. Etant orienté autour des applications, ce mémoire est découpé en 4 chapitres, chacun d'eux ayant une application distincte :

- le premier chapitre résume les travaux réalisés autour du transport quantique d'électrons dans des dispositifs à matériaux semi-conducteurs ;
- le second chapitre est consacré à des modèles de mouvement collectif de bactéries par chimiotactisme ;
- le troisième chapitre s'intéresse à un modèle de migration collective de la bactérie *Bacillus subtilis* ;
- le quatrième chapitre résume les travaux réalisés dans le cadre de la modélisation de la croissance tumorale.

Comme nous le verrons, un dénominateur commun entre les deux premiers chapitres est l'aspect multi-échelle des EDP qui sont présentés, conduisant à l'obtention de modèles macroscopique à partir d'équations cinétiques. Dans les deux derniers chapitres, l'outil mathématique important qui est étudié sont les ondes de propagation à vitesse constante, communément appelés *traveling waves*.

Avant de rentrer dans le vif du sujet, nous détaillons un peu plus le contenu de chaque chapitre en passant rapidement en revue les articles qui y sont résumés.

Le premier chapitre est consacré à l'étude du transport d'un gaz d'électrons dans des dispositifs à matériaux semi-conducteurs pour lesquels les effets quantiques ne sont pas négligeable. Plusieurs des travaux ont été réalisés durant ma thèse de doctorat [Th] et ne sont que très succinctement résumés. Nous nous intéressons ici à des dispositifs qui ont une longueur caractéristique dans la direction parallèle au transport beaucoup plus grande que dans la direction transverse. On dit alors que le gaz d'électrons est confiné dans le dispositif et la direction transverse sera appelée direction de confinement. Ceci nous permet de découpler les directions de transport et de confinement et de proposer des modèles couplés quantique-classique : le transport est modélisé par des modèles d'EDP classiques dans la direction de transport (équation de Boltzmann, système d'énergie-transport, système de dérive-diffusion) alors que le confinement est décrit par les éléments propres du système Schrödinger-Poisson. La difficulté réside donc dans le couplage entre ces directions qui conduit à l'étude de modèles couplés quantique-classique. Un tel modèle dérive-diffusion-Schrödinger-Poisson a alors été introduit dans [A1] puis analysé dans les articles [A3, A4]. Des simulations numériques de ce modèle sont présentées dans [A5] (voir aussi le proceeding de conférences [C1]). Ce système d'EDP est obtenu par une limite de diffusion d'un modèle couplé cinétique-quantique Boltzmann-Schrödinger-Poisson. L'étude de cette limite de diffusion, dans le cas où la direction de transport est mono-dimensionnel, est réalisée dans [A8]. A partir du modèle cinétique-quantique, il est aussi possible grâce à une limite de diffusion d'obtenir un modèle d'énergie-transport couplé avec Schrödinger-Poisson. L'article [A15] présente ce modèle et des simulations numériques de celui-ci. Par ailleurs, dans le même esprit, un modèle de dérive-diffusion quantique pour un nanofil est

proposé et analysé dans l'article [A12]. Finalement, une autre stratégie de couplage entre le modèle d'énergie-transport et l'équation de Schrödinger est considérée dans [A22]. Il ne s'agit plus dans ce cas de découpler les directions de transport et de confinement, mais de considérer des zones dans la direction de transport avec une description classique et des zones avec une description quantique. Des conditions aux interfaces entre ces régions ont donc dû être obtenues.

Dans le chapitre 2, des modèles d'EDP pour décrire le mouvement de bactéries par chimiotactisme sont analysés et simulés. Cette étude entre dans le cadre de l'auto-organisation de communautés bactériennes. De même que dans le chapitre 1, le point de départ est un modèle cinétique décrivant l'interaction entre individus soumis à un champ. Ce modèle a été proposé par Alt, Dunbar et Othmer et décrit le mouvement des bactéries par une alternance de phases de nage rectiligne avec des phases de réorientation des bactéries. Une analyse d'un tel modèle conduisant à des simulations numériques est entreprise dans l'article [A7]. De même qu'au chapitre précédent, nous nous intéressons alors à l'obtention de modèles macroscopiques à partir de cette description cinétique. Une limite hydrodynamique du modèle cinétique conduit à considérer l'équation dite d'agrégation [C3], qui est une loi de conservation avec un champ de vitesse dépendant de manière nonlinéaire et non-locale de l'inconnue. Il est bien connu que les solutions faibles de cette équation explosent en temps fini. Nous avons donc entrepris dans [A13] l'étude, en une seule dimension, de l'existence et de l'unicité de solutions mesures pour cette équation, ce qui a de plus permis de montrer rigoureusement la limite hydrodynamique à partir de l'équation cinétique. Pour cela nous avons adapté la notion de solution en dualité pour notre modèle. Dans [A18], nous avons montré que cette notion de solution pour l'équation d'agrégation coïncide avec les flots gradients dans les cas où elles sont toutes les deux définies. La discrétisation numérique de telles solutions mesures est étudiée dans [A19]. L'article [A21] étend alors cette étude au cas de la dimension supérieure. Les actes de conférences [C5] et [R1] résument les travaux présentés dans les articles cités ci-dessus. Enfin, dans [A20], nous nous intéressons à un modèle cinétique pour deux populations bactériennes en interaction.

Toujours dans le cadre de l'auto-organisation de communautés bactériennes, le chapitre 3 propose des modèles pour décrire la migration collective de colonies bactériennes. Ce travail est né d'observations expérimentales montrant la formation de dendrites avec de nombreux branchements dans un milieu riche en substrat. Nous nous plaçons ici au niveau macroscopique et considérons des modèles d'agrégation (comme au chapitre précédent) mais avec en plus un potentiel de répulsion impliquant un mouvement d'ensemble de la colonie bactérienne. Il s'agit alors d'étudier le processus de propagation. L'outil mathématique utilisé est la recherche d'ondes de propagation ou *traveling waves*, c'est-à-dire d'un régime établi, en translation à vitesse constante. D'un point de vue mathématique, notant x la variable spatiale et t la variable de temps, nous recherchons des solutions ne dépendant que de la quantité $x \cdot e - \sigma t$ où e est un vecteur donnant la direction de propagation. Un modèle complet avec des simulations numériques montrant des branchements est proposé dans [A9]. Ce modèle est simplifié pour pouvoir réaliser une étude mathématique de l'existence de traveling waves qui ont la forme de plateaux. De tels résultats d'existence de traveling waves ont ainsi été obtenus dans [A10].

Finalement le chapitre 4 se consacre à l'étude de modèles macroscopiques décrivant la croissance tumorale. Comme au chapitre précédent, il s'agit, pour une grosse partie, d'étudier les phénomènes d'invasion au moyen de traveling waves. Plus précisément, deux modèles macroscopiques sont utilisés pour décrire la croissance tumorale : un modèle à frontière libre de type Hele-Shaw, un modèle décrivant la dynamique de la densité cellulaire sous l'effet de la pression mécanique exercée sur les cellules et de leur mitose. L'existence de traveling waves a été étudiée dans [A14] pour le modèle à densité cellulaire et dans [A16] pour le modèle Hele-Shaw. Le lien rigoureux entre ces deux modèles est obtenu par une limite incompressible dans l'article [A17]. Enfin l'article [C6] s'intéresse à la stabilité transversale de front de propagation pour un modèle simplifié de type réaction-diffusion à deux composants.

Chapitre 1

Modèles couplés quantique-classique pour le transport de charges confinées

Ce chapitre résume les travaux [A1, A2, A3, A5, A4, A8, A12, A15, A22, C1, C4, Th].

1.1 Une hiérarchie de modèle couplé quantique-classique

Les récents progrès dans la miniaturisations des composants électroniques permettent dorénavant d'atteindre des échelles nanométriques. A de telles échelles de grandeurs, les effets quantiques (confinement, effet tunnel, interférences, . . .) ne peuvent plus être négligés dans les modèles mathématiques. Les travaux résumés dans ce chapitre ont été entamés durant ma thèse de doctorat à l'université Paul Sabatier [Th] et se sont intéressés à la description du confinement de charges dans des dispositifs nanométriques à matériaux semiconducteurs. Nous considérons des dispositifs pour lesquels l'échelle de grandeur dans la direction de transport est beaucoup plus grande que dans la direction transversale, dite de confinement. Des exemples de tels dispositifs sont les nanotransistors de type DG-MOSFET ou les nanofils [10, 11]. Dans la direction de confinement, notée z , les électrons se comportent comme des ondes, alors que dans la direction de transport, notée x , les électrons sont considérés comme des particules et le transport est classique et fortement collisionnel. Il est alors intéressant, dans un objectif de diminution du coût de calcul des simulations numériques, de proposer des modèles couplés quantique-classique pour lesquels les directions de confinement et de transport sont découplées. C'est ce qui a été effectué dans les travaux résumés dans ce chapitre. Nous décrivons ci-dessous tout d'abord la modélisation dans la direction quantique, puis les équations de transport dans la direction classique sont explicitées. Le domaine d'étude est noté $\Omega = \omega \times [0, 1]$ avec $\omega \subset \mathbb{R}^2$ représentant la direction classique $x \in \omega$, et $z \in [0, 1]$.

Dans la direction quantique, $z \in [0, 1]$, les électrons sont considérés comme des ondes et sont à l'équilibre thermodynamique. Ils sont alors décrits par les éléments propres de l'opérateur de Schrödinger $(\epsilon_n, \chi_n)_{n \in \mathbb{N}^*}$ définis par :

$$\begin{cases} -\frac{1}{2m} \partial_{zz} \chi_n + V \chi_n = \epsilon_n \chi_n & (n \geq 1), \\ \chi_n(t, x, \cdot) \in H_0^1(0, 1), & \int_0^1 \chi_n \chi_m dz = \delta_{nm}. \end{cases} \quad (1.1.1)$$

Dans cette équation, m est la masse effective, V est l'énergie potentielle et l'indicateur $\delta_{nm} = 0$ si $n \neq m$, 1 sinon. Il est connu [155] que la suite $(\epsilon_n)_n$ est croissante et tend vers $+\infty$. L'énergie totale est alors quantifiée en *sous-bandes*

$$\epsilon_n(x, k) = \frac{|k|^2}{2m} + \epsilon_n(x). \quad (1.1.2)$$

Cette énergie dépend de la position $x \in \omega$ et de la variable de moment $k \in B$ où B est la zone de Brillouin (qui représente la cellule élémentaire du réseau dual du semiconducteur). Le diagramme d'énergie étant supposé à symétrie sphérique et strictement monotone par rapport à $|k|$, la zone de Brillouin est donné par $B = \mathbb{R}^2$. Nous supposons donc dans la suite $k \in \mathbb{R}^2$.

L'énergie potentielle V est générée par les électrons et est calculée par résolution de l'équation de Poisson, qui s'écrit après adimensionnement :

$$-\Delta_{x,z}V = N - N_D, \quad (1.1.3)$$

où N_D est la densité de dopage qui est une donnée du problème, N est la densité des porteurs de charges. En appelant ρ_n le nombre d'occupation de la n ème sous-bande, l'expression de la densité N est donnée par :

$$N(t, x, z) = \sum_{n=1}^{+\infty} \rho_n(t, x) |\chi_n|^2(t, x, z). \quad (1.1.4)$$

Enfin, le nombre d'occupation ρ_n est donné par la dynamique dans la direction de transport classique. Le couplage entre les deux directions s'effectue donc via la définition de ρ_n .

Le transport classique de particules chargées dans des matériaux semiconducteurs a été l'objet de nombreuses études (voir par exemple les ouvrages [123, 130, 137]). Sous l'effet d'un potentiel électrostatique, d'énergie potentielle V , les porteurs de charges (ici les électrons) sont transportés dans le semiconducteur et sont soumis à de nombreuses collisions : collisions avec les impuretés du réseau, collisions avec les phonons (pseudo-particules représentant les vibrations du réseau), collisions avec les autres porteurs de charges [8, 85, 161, 166, 178]. Au niveau cinétique, le transport collisionnel est modélisé par l'équation de Boltzmann. Dans le cas du confinement, l'énergie est quantifiée en sous-bandes ϵ_n , le transport est alors décrit dans chaque sous-bande. C'est la méthode de décomposition en sous-bandes [111, 154]. L'équation de Boltzmann, pour le modèle des sous-bandes, régit la dynamique de la fonction de distribution $f_n(t, x, k)$ des porteurs de charges de la sous-bande n au temps $t > 0$. Le nombre d'occupation de la n ème sous-bande est déterminé par $\rho_n = \int_{\mathbb{R}^2} f_n(k) dk$. En notation adimensionnée le système s'écrit [20, 21] :

$$\partial_t f_n^\alpha + \frac{1}{\alpha} \nabla_k \epsilon_n \cdot \nabla_x f_n^\alpha - \frac{1}{\alpha} \nabla_x \epsilon_n \cdot \nabla_k f_n^\alpha = \frac{1}{\alpha^2} (Q_{imp}(f^\alpha) + Q_{ph}^\alpha(f^\alpha)) + \frac{1}{\beta} Q_e(f^\alpha), \quad n \in \mathbb{N}^*.$$

Il y a donc une infinité d'équations de Boltzmann, une pour chaque sous-bande. Ici α et β sont des paramètres sans dimension satisfaisant $\alpha \ll \beta \ll 1$. L'opérateur des collisions élastiques Q_{imp} décrivant les collisions avec les impuretés du réseau est donné par

$$Q_{imp}(f)_n(k) := \sum_{n' \in \mathbb{N}^*} \int_{\mathbb{R}^2} \Phi_{n,n'}^{imp}(k, k') \delta(\epsilon_n(k) - \epsilon_{n'}(k')) (f_{n'}(t, x, k') - f_n(t, x, k)) dk', \quad (1.1.5)$$

où ϵ_n et ϵ'_n (resp. f_n et f'_n) sont des abréviations de $\epsilon_n(k)$ et $\epsilon_n(k')$ (resp. $f_n(k)$ et $f_n(k')$). La mesure de Dirac est notée δ . L'énergie $\epsilon_n(k)$ est définie dans (1.1.2). L'opérateur des collisions électrons-électrons Q_e est donné par

$$Q_e(f)_n(k) = \sum_{n', r, s} \int_{(\mathbb{R}^2)^3} \Phi_{n,n',r,s}^e(k, k', k_1, k'_1) \delta(\epsilon_n + \epsilon_{n',1} - \epsilon'_r - \epsilon'_{s,1}) \delta(k + k_1 - k' - k'_1) [f'_r f'_{s,1} (1 - \eta f_n) (1 - \eta f_{n',1}) - f_n f_{n',1} (1 - \eta f'_r) (1 - \eta f'_{s,1})] dk' dk_1 dk'_1. \quad (1.1.6)$$

Les notations $f_{n',1}$, f'_r et $f'_{s,1}$ sont des abréviations de $f_{n'}(k_1)$, $f_r(k')$ et $f_s(k'_1)$ respectivement. Le terme $0 \leq 1 - \eta f \leq 1$ exprime le principe d'exclusion de Pauli où $\eta \geq 0$ est un facteur sans dimension. Enfin, les collisions avec les phonons (acoustiques et optiques) sont décrites par l'opérateur Q_{ph}^α :

$$\begin{aligned} Q_{ph}^\alpha(f)_n(k) = & \sum_{n' \in \mathbb{N}^*} \int_{\mathbb{R}^2} \Phi_{n,n'}^{ph}(k, k') \left([(N_{ph} + 1)\delta(\varepsilon_n(k) - \varepsilon_{n'}(k') + \alpha^2 \varepsilon_{ph}) \right. \\ & + N_{ph}\delta(\varepsilon_n(k) - \varepsilon_{n'}(k') - \alpha^2 \varepsilon_{ph})] f_{n'}(k')(1 - \eta f_n(k)) - \\ & [(N_{ph} + 1)\delta(\varepsilon_{n'}(k') - \varepsilon_n(k) + \alpha^2 \varepsilon_{ph}) \\ & \left. + N_{ph}\delta(\varepsilon_{n'}(k') - \varepsilon_n(k) - \alpha^2 \varepsilon_{ph})] f_n(k)(1 - \eta f_{n'}(k')) \right) dk'. \end{aligned} \quad (1.1.7)$$

Dans cette définition, l'énergie des phonons est notée ε_{ph} et le nombre d'occupation des phonons $N_{ph}^\alpha = (e^{\alpha^2 \varepsilon_{ph}} - 1)^{-1}$. Pour tous les opérateurs de collisions définis ci-dessus, les coefficients de diffraction Φ^{imp} , Φ^e et Φ^{ph} sont des quantités positives données et satisfaisant les hypothèses de micro-réversibilité. Le dernier opérateur peut être développé suivant α^2 : $Q_{ph}^\alpha(f) = Q_{ph}^0(f) + \alpha^2 Q_1^\alpha(f)$. On définit alors l'opérateur des collisions élastiques Q_0 par

$$Q_0(f)_n = Q_{imp}(f)_n + Q_{ph}^0(f)_n = \sum_{n' \in \mathbb{N}^*} \int_{\mathbb{R}^2} \Phi_{n,n'}^0(k, k') \delta(\varepsilon_n(k) - \varepsilon_{n'}(k')) (f_{n'}(k') - f_n(k)) dk', \quad (1.1.8)$$

où $\Phi_{n,n'}^0 = \Phi_{n,n'}^{imp} + (2N_{ph} + 1)\Phi_{n,n'}^{ph}$ et N_{ph} est le premier terme du développement en α^2 de N_{ph}^α . Finalement le système d'équations de **Boltzmann pour les semiconducteurs** pour la méthode des sous-bandes s'écrit :

$$\partial_t f_n^\alpha + \frac{1}{\alpha} (\nabla_k \varepsilon_n \cdot \nabla_x f_n^\alpha - \nabla_x \varepsilon_n \cdot \nabla_k f_n^\alpha) = \frac{1}{\alpha^2} Q_0(f^\alpha)_n + \frac{1}{\beta} Q_e(f^\alpha)_n + Q_1^\alpha(f^\alpha)_n. \quad (1.1.9)$$

Les paramètres α et β dans cette équation permettent de mesurer l'importance relative des collisions. Dans le cas purement classique, c'est-à-dire avec une seule sous-bande d'énergie $|k|^2/(2m) + V$, il a été montré [21, 20, 123] qu'en effectuant des limites de diffusion $\alpha \rightarrow 0$ et $\beta \rightarrow 0$, une hiérarchie de modèle classique peut être obtenue. Ainsi quand les collisions élastiques sont dominantes ($\alpha \rightarrow 0$), le modèle de Boltzmann (1.1.9) peut être approché par le modèle Spherical Harmonic Expansion (SHE) (voir e.g. [172]). Ce modèle a été introduit dans [168] et régit la dynamique de la fonction de distribution $F(t, x, \varepsilon)$ en tant que fonction de l'énergie ε . Supposant alors que le mécanisme de collisions dominant est celui entre les électrons ($\beta \rightarrow 0$), le modèle SHE relaxe vers le système Energie-Transport (ET). Les inconnues dans ce système sont la densité et la température du gaz d'électrons. Ce système a été introduit en [168, 169]. Il peut aussi être obtenu directement par l'équation de Boltzmann sous l'hypothèse de dominance des collisions élastiques et électrons-électrons (voir e.g. [22]). Finalement, lorsque les collisions avec les phonons sont importantes, le système ET converge vers le modèle de dérive-diffusion (DD) qui régit la dynamique de la densité des électrons et où la température est fixée et égale à la température du réseau [137, 96, 97]. Ce modèle peut aussi être obtenu directement à partir de l'équation de Boltzmann en ne considérant que les collisions avec les phonons. Les modèles macroscopiques obtenus par ces limites de diffusion ont l'avantage d'être moins coûteux que le modèle cinétique pour effectuer des simulations numériques.

L'objectif du travail entamé durant ma thèse de doctorat est l'étude d'une telle hiérarchie de modèle pour le transport confiné d'électrons dans des nanostructures à matériaux semiconducteurs. Il s'agit donc d'étendre au cas du confinement les résultats du transport purement classique. Nous verrons que le modèle Schrödinger-Poisson est résolu grâce à un problème variationnel. Une difficulté mathématique consiste alors à coupler ces directions quantiques et classiques. Dans la Section 1.2, nous nous intéressons au cas où les interactions électrons-phonons sont dominantes. Dans ce cas une limite de diffusion de l'équation de Boltzmann pour les sous-bandes conduit directement au modèle de dérive-diffusion. Il s'agit

d'un résumé des travaux effectués pendant ma thèse de doctorat [Th] et qui ont donné lieu aux articles [A1, A2, A3, A5, A4, A8, C1]. Ensuite dans la Section 1.3, nous présentons le modèle Energie-Transport pour les sous-bandes pour lequel nous avons effectué des simulations numériques dans [A15]. La Section 1.4 est consacrée à l'étude et aux simulations numériques d'un système de transport diffusif pour des nanofils. Il s'agit d'un résumé de l'article [A12]. Enfin dans une dernière partie, nous présentons une stratégie de couplage dans la direction classique avec un modèle purement quantique [A22, C4].

1.2 Interactions électrons-phonons dominantes

1.2.1 Modèle cinétique pour les sous-bandes

Le transport purement quantique est généralement modélisé par le système Schrödinger-Poisson. Dans des dispositifs pour lesquels la direction de transport x est grande par rapport à la direction de confinement z , une limite semiclassique partielle dans la direction x de l'équation de Schrödinger peut être effectuée. Il a été montré dans [24] qu'une telle limite conduit au modèle Vlasov-Schrödinger-Poisson étudié dans [25]. Dans ce modèle, le confinement dans la direction z est décrit par le modèle des sous-bandes (1.1.1) couplé à l'équation de Poisson (1.1.3) dans laquelle le nombre d'occupation des sous-bandes est donné par $\rho_n = \int_{\mathbb{R}^2} f_n(k) dk$. La dynamique de la fonction de distribution f_n des électrons de la n ème sous-bande est régie par l'équation de Vlasov dans la direction de transport x .

Cependant ce modèle ne tient pas compte des collisions dans la direction de transport ; effectivement le modèle de départ est un modèle balistique. Pour remédier à cela, nous remplaçons de manière heuristique l'équation de transport dans la direction x par l'équation de Boltzmann (1.1.9). Avant de considérer le cas général des opérateurs de collisions présentés précédemment, nous nous focalisons dans cette partie uniquement sur les interactions avec les phonons. De plus, nous ne considérons que le cas mono-dimensionnel, le cas de la dimension 2 étant toujours ouvert. Le système d'équations cinétiques s'écrit :

$$\partial_t f_n^\alpha + \frac{k}{m} \partial_x f_n^\alpha - \partial_x \epsilon_n \partial_k f_n^\alpha = \frac{1}{\alpha} Q^\alpha(f^\alpha)_n, \quad t > 0, x \in (a, b), k \in \mathbb{R}, n \in \mathbb{N}^*. \quad (1.2.1)$$

Nous remarquons qu'il s'agit du système (1.1.9) pour lequel l'opérateur des collisions est simplifié, vu que nous ne considérons que les interactions électrons-phonons. L'opérateur de ces interactions s'écrit dans l'approximation BGK linéarisé sous la forme :

$$Q^\alpha(f)_n = \sum_{n'} \int_{\mathbb{R}} \Phi_{n,n'}(k, k') (\mathcal{M}_n^\alpha(k) f_{n'}(k') - \mathcal{M}_{n'}^\alpha(k') f_n(k)) dk'. \quad (1.2.2)$$

La fonction \mathcal{M}_n^α est la Maxwellienne normalisée :

$$\mathcal{M}_n^\alpha(t, x, k) = \frac{1}{2\pi \mathcal{Z}^\alpha} e^{-\epsilon_n(t, x, k)}, \quad \mathcal{Z}^\alpha(t, x) = \sum_{n=1}^{+\infty} e^{-\epsilon_n(t, x)}, \quad (1.2.3)$$

où on rappelle que ϵ_n est l'énergie totale définie en (1.1.2) et ϵ_n les sous-bandes, solutions de (1.1.1). Le paramètre sans dimension α correspond au libre parcours moyen des particules, correspondant à la distance moyenne parcourue entre deux collisions. Ces équations sont complétées par des conditions de réflexion spéculaire aux bords :

$$f_n^\alpha(t, a, k) = f_n^\alpha(t, a, -k), \quad f_n^\alpha(t, b, k) = f_n^\alpha(t, b, -k), \quad v > 0, t \in \mathbb{R}^+. \quad (1.2.4)$$

La densité surfacique des particules est définie par :

$$N_s^\alpha(t, x) = \int_0^1 N^\alpha(t, x, z) dz = \sum_n \int_{\mathbb{R}} f_n^\alpha(t, x, k) dk = \sum_n \rho_n^\alpha(t, x).$$

On considère que les données initiales sont bien préparées, i.e. à l'équilibre thermique :

$$f_n^\alpha(0, x, k) = f_n^{in}(x, k) := \frac{N_s^{in}(x)}{2\pi \sum_n e^{-\epsilon_n[V^{in}]}} e^{-k^2/2m - \epsilon_n[V^{in}]}, \quad (x, k) \in [a, b] \times \mathbb{R}, \quad (1.2.5)$$

où $(V^{in}, (\epsilon_n[V^{in}], \chi_n[V^{in}])_{n \geq 1})$ est l'ensemble des solutions du système Schrödinger-Poisson (1.1.1)–(1.1.3) à l'équilibre thermique, i.e. avec $\rho_n^{in} = N_s^{in} e^{-\epsilon_n[V^{in}]} / \sum_m e^{-\epsilon_m[V^{in}]}$.

Bien que l'opérateur des collisions soit linéaire, le couplage est non-linéaire et nous ne sommes donc pas en mesure de construire des solutions fortes du système. Nous travaillons donc dans le cadre des solutions renormalisées [71, 72, 136].

Définition 1.2.1. On dit qu'une fonction positive $f^\alpha = (f_n^\alpha)_{n \in \mathbb{N}^*}$ est une solution renormalisée de (1.2.1) si $\forall \beta \in C^1(\mathbb{R}^+)$ avec $|\beta(t)| \leq C(\sqrt{t} + 1)$ et $|\beta'(t)| \leq C$, on a pour tout $n \geq 1$, $\beta(f^\alpha)_n$ est une solution faible de :

$$\begin{cases} \alpha \partial_t \beta(f^\alpha)_n + \frac{k}{m} \partial_x \beta(f^\alpha)_n - \partial_x \epsilon_n^\alpha \partial_k \beta(f^\alpha)_n = \frac{Q^n(f^n)_n}{\eta} \beta'(f^\alpha)_n, \\ \beta(f^\alpha)_n(t=0) = \beta(f^{in})_n, \\ \beta(f^\alpha)_n(t, a, k) = \beta(f^\alpha)_n(t, a, -k), \quad \beta(f^\alpha)_n(t, b, k) = \beta(f^\alpha)_n(t, b, -k), \quad v > 0, t > 0. \end{cases}$$

Un outil fondamental pour l'étude de ce système est l'entropie relative qui est définie par :

$$W^\alpha(t) = \sum_n \iint_{(a,b) \times \mathbb{R}} \left(f_n^\alpha \log \frac{f_n^\alpha}{M_n} - f_n^\alpha + M_n \right) dx dv + \frac{1}{2} \iint_{(a,b) \times (0,1)} |\nabla_{x,z} V^\alpha|^2 dx dz, \quad (1.2.6)$$

où $M_n = K \exp(-\frac{1}{2}(k^2/m + n^2))$ avec K choisie telle que $\sum_n \int_{\mathbb{R}} M_n dk = 1$. Le taux de dissipation mesurant la distance à l'équilibre est donné par

$$\mathcal{R}^\alpha(t) = \frac{1}{2} \sum_n \iint_{(a,b) \times \mathbb{R}} \left(\sqrt{f_n^\alpha} - \sqrt{N_s^\alpha M_n^\alpha} \right)^2 dx dv. \quad (1.2.7)$$

Le résultat suivant établit l'existence de solutions renormalisées sous l'hypothèse de données initiales petites. On remarque que cette hypothèse a aussi été utilisée dans le cas sans collision dans [25].

Théorème 1.2.2. [Theorem 1.2 [A8]] Soit $T > 0$ et supposons que la section efficace Φ est symétrique et uniformément bornée $0 < \Phi_1 \leq \Phi_{n,n'} \leq \Phi_2$ et que $0 \leq N_s^{in} \in C^0([a, b])$. Posons $\mathcal{N}_{in} = \int_a^b N_s^{in} dx$. Il existe $\mathcal{N}_0 > 0$ tel que si $\mathcal{N}_{in} \leq \mathcal{N}_0$, le système mono-dimensionnel Boltzmann-Schrodinger-Poisson (1.2.1)-(1.1.1)-(1.1.3) (pour $N_D = 0$) complété avec les conditions (1.2.4)–(1.2.5) admet une solution renormalisée qui satisfait de plus l'inégalité d'entropie

$$\forall t \in [0, T], \quad 0 \leq W^\alpha(t) + \frac{\Phi_1}{\alpha^2} \int_0^t \mathcal{R}^\alpha(s) ds \leq C_T. \quad (1.2.8)$$

Le système doit être vu comme un couplage entre l'équation de Boltzmann 1D (1.2.1) pour la fonction de distribution $(f_n^\alpha)_{n \geq 1}$ et le système quasistatique de Schrödinger-Poisson (1.1.1)–(1.1.3) (avec $N_D = 0$) dont l'inconnue est le potentiel V^α . La démonstration de l'existence s'effectue alors en deux étapes. Dans une première étape, on tronque et régularise le système Boltzmann-Schrödinger-Poisson. Par une méthode de point fixe, on peut alors construire une solution forte à ce système régularisé. Enfin un passage à la limite dans la régularisation permet de construire les solutions renormalisées.

1.2.2 Limite de diffusion

Dans le cas purement classique, il est connu que la densité surfacique N_s satisfait, à la limite de diffusion ($\alpha \rightarrow 0$) de l'équation de Boltzmann, le système de dérive-diffusion [157, 102]. La limite de diffusion du modèle couplé Boltzmann-Poisson pour les semiconducteurs vers le système dérive-diffusion-Poisson a été étudiée dans [28, 133]. Le résultat suivant étend cette limite au cas du modèle quantique-classique couplé par la méthode de décomposition en sous-bandes, étudié dans la précédente sous-section :

Théorème 1.2.3. [Theorem 1.3 [A8]] Soit $T > 0$, et pour $\alpha > 0$, soit $(V^\alpha, (f_n^\alpha, \epsilon_n^\alpha, \chi_n^\alpha)_{n \geq 1})$ une solution renormalisée du Théorème 1.2.2 pour $N_{in} \leq N_0$. Alors, quand $\alpha \rightarrow 0$, si N_0 est suffisamment petit, on a, à extraction d'une sous-suite près,

$$\|f_n^\alpha - N_s \mathcal{M}_n\|_{\ell^1(L^1([0,T] \times [a,b] \times \mathbb{R}))} \rightarrow 0 \quad \text{et} \quad \|V^\alpha - V\|_{L^2([0,T], H^1((a,b) \times (0,1)))} \rightarrow 0,$$

où $(V, N_s, (\epsilon_n, \chi_n)_{n \geq 1})$ est une solution du système dérive-diffusion-Schrödinger-Poisson (DDSP) définie par

$$\partial_t N_s + \operatorname{div}_x J = 0, \quad J = -\mathbb{D}(\nabla_x N_s + N_s \nabla_x V_s), \quad (1.2.9)$$

$$\begin{cases} -\frac{1}{2} \partial_{zz} \chi_n + V \chi_n = \epsilon_n \chi_n & (n \geq 1), \\ \chi_n(t, x, \cdot) \in H_0^1(0, 1), & \int_0^1 \chi_n \chi_{n'} dz = \delta_{nn'}, \end{cases} \quad (1.2.10)$$

$$-\Delta_{x,z} V = N_s \sum_n \frac{e^{-\epsilon_n}}{\sum_{n'} e^{-\epsilon_{n'}}} |\chi_n|^2, \quad (1.2.11)$$

où le potentiel effectif V_s est défini par

$$V_s = -\ln \mathcal{Z} = -\ln \sum_n e^{-\epsilon_n}, \quad (1.2.12)$$

et \mathbb{D} est le coefficient de diffusion. Ce système est complété par la donnée initiale $N_s(0, x) = N_s^{in}(x)$ et par les conditions aux bords :

$$\begin{cases} J(t, a) = J(t, b) = 0, & \frac{dV}{dx}(t, a, z) = \frac{dV}{dx}(t, b, z) = 0 \quad \text{pour } z \in (0, 1), \\ V(t, x, 0) = V(t, x, 1) = 0 & \text{pour } x \in (a, b). \end{cases} \quad (1.2.13)$$

Nous soulignons que le modèle limite (DDSP) n'est constitué que d'une seule équation de transport alors que pour le modèle cinétique-quantique on avait une infinité d'équations de Boltzmann dans la direction de transport, une pour chaque sous-bande. Le couplage entre le système de dérive-diffusion dans la direction de transport et le système Schrödinger-Poisson s'effectue via la définition du potentiel effectif V_s (1.2.12).

Idée de la preuve

1ère étape : convergence forte de la densité surfacique.

La démonstration repose fortement sur l'estimation d'entropie (1.2.8) et sur une analyse précise du système Schrödinger-Poisson. L'inégalité d'entropie permet de fixer le cadre fonctionnel pour l'étude :

$$(f_n)_{n \geq 1} \in L_t^\infty(L \log L(dxdk)), \quad ((k^2 + n^2)f_n)_{n \geq 1} \in L_t^\infty(\ell^1(L^1(dxdk))), \quad V \in L_t^\infty(H^1(dx)).$$

En utilisant les théorèmes de Dunford-Pettis et de De La Vallée Poussin, nous obtenons la compacité faible de f^α dans $\ell^1(L^1)$. Un lemme de moyenne [133] (voir aussi [41, 101]) permet alors d'établir la compacité forte de la densité surfacique N_s^α dans $\ell^1(L^1)$.

L'inégalité d'entropie (1.2.8) fournit la borne :

$$\int_0^t \mathcal{R}^\alpha(s) ds = \frac{1}{2} \sum_n \int_0^t \iint_{(a,b) \times \mathbb{R}} \left(\sqrt{f_n^\alpha} - \sqrt{N_s^\alpha \mathcal{M}_n^\alpha} \right)^2 dx dv ds \leq C_T \alpha^2. \quad (1.2.14)$$

Pour pouvoir passer à la limite $\alpha \rightarrow 0$ dans (1.2.14), nous devons étudier la convergence des niveaux d'énergies ϵ_n^α et donc la dépendance de V^α par rapport au facteur d'occupation ρ^α .

2ème étape : le système Schrödinger-Poisson.

Nous nous intéressons donc dans une seconde étape à la résolution du système Schrödinger-Poisson (1.1.1)–(1.1.3) pour $N_D = 0$ et dans le cadre fonctionnel suggéré par l'estimation d'entropie ($\rho \in L \log L$). Cette étude repose sur une idée de Nier [143, 144] suggérant de minimiser la fonctionnelle :

$$J_\rho(V) = \frac{1}{2} \iint_{(a,b) \times (0,1)} |\nabla V|^2 dx dz - \sum_{n \geq 1} \int_a^b \rho_n \epsilon_n[V] dx. \quad (1.2.15)$$

Un point critique pour cette fonctionnelle est une solution du système Schrödinger-Poisson. Dans le cas à l'équilibre où les nombres d'occupation ρ_n sont donnés par une Maxwellienne, alors la suite $(\rho_n)_n$ est décroissante par rapport à n . Ceci implique que la fonctionnelle J_ρ est convexe et admet un unique minimum. Cependant ceci n'est vérifié qu'à la limite $\alpha \rightarrow 0$. Nous utilisons alors l'estimation : si $(\rho_n)_{n \geq 1}$ et $(\widetilde{\rho}_n)_{n \geq 1}$ sont dans $L^\infty((0, T), \ell^1(L^1(a, b)))$ et si V et \widetilde{V} sont les solutions correspondantes du système Schrödinger-Poisson (1.1.1)–(1.1.3), alors

$$\|V - \widetilde{V}\|_{L^1([0, T], H^1((a, b) \times (0, 1)))} \leq C_1 \|\rho_n - \widetilde{\rho}_n\|_{\ell^1(L^1((0, T) \times (a, b)))} + C_2 \mathcal{N} \|V - \widetilde{V}\|_{L^1([0, T], H^1((a, b) \times (0, 1)))}, \quad (1.2.16)$$

où $\mathcal{N} = \max\{\|\rho_n\|_{L^\infty((0, T), \ell^1(L^1(a, b)))}, \|\widetilde{\rho}_n\|_{L^\infty((0, T), \ell^1(L^1(a, b)))}\}$ et C_1 et C_2 sont deux constantes positives. Cette inégalité implique l'unicité des solutions du système Schrödinger-Poisson quand \mathcal{N} est suffisamment petit.

3ème étape : passage à la limite.

Avec l'estimation (1.2.16), la compacité forte de N_s^α dans L^1 implique la compacité forte de V^α dans $L^1((0, T), H^1((a, b) \times (0, 1)))$. En utilisant les propriétés spectrales de l'opérateur Hamiltonien [155], on a : $\epsilon_n[V^\alpha] \rightarrow \epsilon_n[V]$ quand $\alpha \rightarrow 0$. On déduit de (1.2.14) la limite $f^\alpha \rightarrow N_s \mathcal{M}$ dans $\ell^1(L^1(dt dx dk))$. On peut alors passer à la limite dans les équations et retrouver que N_s satisfait le système de dérive-diffusion (1.2.9). \square

1.2.3 Modèles de dérive-diffusion du transport de charges confinées

Cette partie résume les résultats d'existence de solutions faibles au modèle dérive-diffusion-Schrödinger-Poisson (DDSP) (1.2.9)–(1.2.12) obtenus dans les articles [A3, A4]. Dans ces travaux, le domaine d'étude est un cylindre $\Omega = \omega \times (0, 1)$ avec ω un domaine borné régulier de \mathbb{R}^2 . Ce système est complété par des conditions conservatives (des conditions de type Dirichlet ont aussi été proposées et étudiées dans [A3]). Par rapport au modèle cinétique étudié ci-dessus, les facteurs d'occupation $(\rho_n)_{n \geq 1}$ sont ici donnés par les statistiques de Boltzmann :

$$\rho_n(t, x) = \frac{N_s}{\mathcal{Z}(t, x)} e^{-\epsilon_n(t, x)} = \frac{N_s}{\sum_{n'} e^{-\epsilon_{n'}(t, x)}} e^{-\epsilon_n(t, x)}. \quad (1.2.17)$$

La suite $(\rho_n)_n$ est donc décroissante par rapport n et la fonctionnelle J_ρ , définie en (1.2.15) pour la résolution du problème de Schrödinger-Poisson (1.2.10)–(1.2.11), est convexe. Cette fonctionnelle admet donc un unique minimiseur qui est une solution faible du système de Schrödinger-Poisson.

L'entropie relative, dans le cas de conditions aux bords conservatives, est définie par :

$$W(t) = \sum_{n \geq 1} \int_\omega \rho_n (\ln \rho_n - 1) dx + \frac{1}{2} \iint_\Omega |\nabla_{x,z} V|^2 dx dz + \frac{1}{2} \sum_n \iint_\Omega \rho_n |\chi_n|^2 dx dz.$$

On peut alors vérifier que toute solution faible du système (1.2.9)–(1.2.12) satisfait :

$$\frac{d}{dt} W(t) = -D(t) := - \int_\omega \mathcal{Z} \frac{(\nabla_x u)^\top \mathbb{D} \nabla_x u}{u} dx,$$

avec $u(t, x) = N_s(t, x)/Z(t, x)$ la variable de Slotboom. Il est clair que si la matrice de diffusion \mathbb{D} est symétrique et définie positive, alors $t \mapsto W(t)$ est décroissante. En supposant $W(0)$ bornée, l'égalité ci-dessus fournit des estimations a priori et donc un cadre fonctionnel.

Nous avons alors le théorème d'existence et de convergence en temps long suivant :

Théorème 1.2.4 (Theorem 1.1 et 1.2 de [A4]). *Soit $T > 0$. Supposons \mathbb{D} symétrique définie-positive et $C^1(\bar{\Omega})$ telle que $\mathbb{D}(x) \geq dI$ avec $d > 0$. Soit $N_s^{in} \geq 0$ avec $N_s^{in} \ln N_s^{in} \in L^1(\omega)$. Alors le système DDSP (1.2.9)–(1.2.12) avec la donnée initiale N_s^{in} admet une solution faible (N_s, V) avec*

$$N_s \ln N_s \in L^\infty([0, T], L^1(\omega)), \quad \sqrt{N_x} \in L^2([0, T], H^1(\omega)), \quad V \in L^\infty([0, T], H^1(\omega)).$$

De plus, si (N_s^∞, V^∞) est une solution du système stationnaire alors $\exists \kappa > 0$ et $C > 0$ tels que

$$\|N_s - N_s^\infty\|_{L^1(\omega)}(t) + \|V - V^\infty\|_{H^1(\Omega)}(t) \leq C e^{-\kappa t}.$$

Remarque 1.2.5. L'existence dans le cas de conditions de Dirichlet a été établie au Theorem 1.2 de [A3]. Dans cet article, la matrice de diffusion est supposée constante, $\mathbb{D} = 1$, ce qui permet d'obtenir plus de régularité sur les solutions $(N_s \in C([0, T], L^2(\omega)))$ si $N_s^0 \in L^2(\omega)$ et l'unicité grâce à un théorème de point fixe. Le comportement en temps long dans ce cas est établi au [A3, Theorem 1.5] en se basant sur des techniques d'entropie relative [5, 6, 14, 79]. Nous retrouvons la convergence exponentielle en temps long dans $L^2(\omega)$ pour la densité grâce à une approximation quadratique de l'entropie relative. Cette technique a aussi été proposée pour le système classique dérive-diffusion-Poisson dans [A2].

Des simulations numériques du modèle dérive-diffusion-Schrödinger-Poisson (DDSP) pour décrire le transport d'un gaz d'électrons confiné dans un DG-MOSFET ont été réalisées dans [A5, C1]. Pour le modèle Boltzmann-Schrödinger-Poisson, voir aussi [19].

1.3 Modèle Energie-Transport pour les sous-bandes

1.3.1 Limite formelle

Considérons maintenant le modèle de Boltzmann introduit en (1.1.9). Nous rappelons que ce modèle prend en compte les différents types de collisions apparaissant dans le transport, alors que dans la Section précédente nous ne considérons que les collisions électrons-phonons. En effectuant des limites diffusives $\alpha \rightarrow 0$ et $\beta \rightarrow 0$, nous pouvons alors déterminer une hiérarchie de modèles couplés quantique-classique, dans l'esprit de [20]. L'article [26] propose une telle hiérarchie. Cependant, le modèle couplé Energie-Transport-Schrödinger-Poisson dans ce papier est obtenu directement à partir de l'équation de Boltzmann sans passer par l'intermédiaire SHE. Dans un objectif de réaliser des simulations numériques, il est intéressant (cf [74]) d'obtenir le modèle ET à partir de SHE. Pour cela, nous obtenons le modèle SHE à partir de (1.1.9) en effectuant la limite $\alpha \rightarrow 0$. La limite $\beta \rightarrow 0$ dans l'équation résultante conduit alors au modèle ET.

1ère limite macroscopique : modèle SHE. On déduit formellement de (1.1.9) qu'à la limite $\alpha \rightarrow 0$, la fonction de distribution f^α converge vers un élément du noyau de l'opérateur de collision Q_0 . Ce noyau étant généré par les fonctions ne dépendant que de l'énergie, la distribution limite est donc une fonction ne dépendant que de l'énergie qu'on écrit $f_n^0(t, x, k) = F(t, x, \varepsilon_n)$. Nous définissons la densité des états :

$$N(t, x, \varepsilon) := 2\pi m \mathcal{N}(t, x, \varepsilon), \quad \text{où} \quad \mathcal{N}(t, x, \varepsilon) = \max\{n \in \mathbb{N}^* / \varepsilon_n(t, x) \leq \varepsilon\},$$

avec la convention $\mathcal{N}(t, x, \varepsilon) = 0$ si $\varepsilon < \varepsilon_1(t, x)$. (Nous rappelons que la suite $(\varepsilon_n)_n$ est croissante). Avec ces notations le modèle Spherical Harmonic Expansion (SHE) s'obtient par intégration sur les surfaces $S_{\varepsilon - \varepsilon_n} := \{k \in \mathbb{R}^2 \text{ t.q. } |k|^2 = 2m(\varepsilon - \varepsilon_n)\}$ de l'équation de Boltzmann (1.1.9). Il s'écrit :

$$N \partial_t F + \nabla_x \cdot J - \kappa \partial_\varepsilon F = \frac{1}{\beta} S_\varepsilon(F) + S_1(F), \quad (1.3.1)$$

où la densité de courant est définie par

$$J(t, x, \varepsilon) = -D(t, x, \varepsilon) \cdot \nabla_x F(t, x, \varepsilon), \quad (1.3.2)$$

avec D une matrice de diffusion symétrique et définie positive, et où κ est donné par

$$\kappa(t, x, \varepsilon) = -2\pi m \partial_t \left(\sum_{n \in \mathbb{N}^*} (\varepsilon - \varepsilon_n)^+ \right). \quad (1.3.3)$$

La notation $u^+ = \max\{0, u\}$ est la partie positive de u . Finalement, le membre de droite est donné par

$$S_e(F) = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} \int_{S_{\varepsilon - \varepsilon_n}} Q_e(F)_n \frac{dS_{\varepsilon - \varepsilon_n}(k)}{|k|/m}, \quad \text{et} \quad S_1(F) = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} \int_{S_{\varepsilon - \varepsilon_n}} Q_{ph,1}^0(F)_n \frac{dS_{\varepsilon - \varepsilon_n}(k)}{|k|/m}. \quad (1.3.4)$$

L'équation (1.3.1) a la forme standard du modèle SHE, l'effet du confinement dans la direction transverse vient de la forme particulière des coefficients. Le modèle couplé quantique-classique est alors obtenu en couplant (1.3.1) avec (1.1.1)–(1.1.3).

2ème limite macroscopique : modèle ET. On s'intéresse à la limite $\beta \rightarrow 0$ dans (1.3.1). Formellement, en écrivant un développement de Hilbert de la solution de l'équation (1.3.1), $F^\beta = F^0 + \beta F^1 + \dots$, on obtient

$$S_e(F_0) = 0, \quad \text{et} \quad N \partial_t F^0 + \nabla_x J^0 - \kappa \partial_\varepsilon F^0 - S_1(F^0) = D_{F^0} S_e(F^1), \quad (1.3.5)$$

où $D_{F^0} S_e$ est la dérivée de Fréchet de S_e en F^0 . Donc F^0 appartient au noyau de l'opérateur S_e , qui est engendré par les fonctions de Fermi-Dirac : il existe deux fonctions μ et T telles que

$$F^0(t, x, \varepsilon) = \mathcal{F}_{\mu, T}(t, x, \varepsilon) := \left(\eta + \exp\left(\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T}\right) \right)^{-1}, \quad (1.3.6)$$

où k_B est la constante de Boltzmann. Une propriété importante est que l'image de l'opérateur $D_{\mathcal{F}} S_e$ est définie par

$$R(D_{\mathcal{F}} S_e) = \text{Ker} (D_{\mathcal{F}} S_e)^\perp = \left\{ f \quad / \quad \int_{\mathbb{R}} f(\varepsilon) \begin{pmatrix} 1 \\ \varepsilon \end{pmatrix} d\varepsilon = 0 \right\}.$$

La condition de solvabilité pour la seconde équation de (1.3.5) s'écrit donc :

$$\int_{\mathbb{R}} (N \partial_t F^0 + \nabla_x \cdot J^0 - \kappa \partial_\varepsilon F^0 - S_1(F^0)) \begin{pmatrix} 1 \\ \varepsilon \end{pmatrix} d\varepsilon = 0. \quad (1.3.7)$$

Ceci conduit au modèle ET, en introduisant les notations ρ et $\rho \mathcal{E}$ respectivement la densité de charge et la densité d'énergie associée à la fonction de Fermi-Dirac :

$$\rho_{\mu, T}(t, x) := \sum_{n \in \mathbb{N}^*} \int_{\mathbb{R}^2} \mathcal{F}_{\mu, T}(t, x, \varepsilon_n) dk, \quad \rho \mathcal{E}_{\mu, T}(t, x) := \sum_{n \in \mathbb{N}^*} \int_{\mathbb{R}^2} \varepsilon_n \mathcal{F}_{\mu, T}(t, x, \varepsilon_n) dk.$$

Alors (1.3.7) implique

$$\partial_t \rho_{\mu, T} - \nabla_x \cdot J_1 = 0, \quad (1.3.8)$$

$$\partial_t (\rho \mathcal{E}_{\mu, T}) + \sum_{n \in \mathbb{N}^*} 2\pi m \partial_t \varepsilon_n \int_{\varepsilon_n}^{\infty} \mathcal{F}_{\mu, T}(t, x, \varepsilon) d\varepsilon - \nabla_x \cdot J_2 = W, \quad (1.3.9)$$

où on a noté

$$J_1 := \int_{\mathbb{R}} D(t, x, \varepsilon) \cdot \nabla_x \mathcal{F}_{\mu, T}(t, x, \varepsilon) d\varepsilon = \mathbb{D}_{00} \nabla_x \left(\frac{\mu}{k_B T} \right) - \mathbb{D}_{01} \nabla_x \left(\frac{1}{k_B T} \right), \quad (1.3.10)$$

$$J_2 := \int_{\mathbb{R}} \varepsilon D(t, x, \varepsilon) \cdot \nabla_x \mathcal{F}_{\mu, T}(t, x, \varepsilon) d\varepsilon = \mathbb{D}_{10} \nabla_x \left(\frac{\mu}{k_B T} \right) - \mathbb{D}_{11} \nabla_x \left(\frac{1}{k_B T} \right). \quad (1.3.11)$$

Les coefficients de diffusion sont définis par

$$\mathbb{D}_{ij}(t, x) = \int_{\mathbb{R}} D(t, x, \varepsilon) \varepsilon^{i+j} \mathcal{F}_{\mu, T} (1 - \eta \mathcal{F}_{\mu, T}) d\varepsilon, \quad \text{pour } i, j = 0, 1. \quad (1.3.12)$$

La matrice définie par bloc $(\mathbb{D}_{ij})_{0 \leq i, j \leq 1}$ est symétrique et définie positive. Le membre de droite de l'équation d'énergie (1.3.9) est le terme de relaxation W et est défini par

$$W = \int_{\mathbb{R}} \varepsilon S_1(\mathcal{F}_{\mu, T}) d\varepsilon = \sum_{n \in \mathbb{N}^*} \int_{\mathbb{R}^2} \varepsilon_n Q_1^0(\mathcal{F}_{\mu, T}) dk,$$

où on rappelle que Q_1^0 est le terme d'ordre α^2 du développement de Q_{ph}^α défini en (1.1.7). Le système (1.3.8)–(1.3.12) forme le modèle Energie-Transport pour un gaz d'électrons partiellement confiné. Les inconnues du systèmes sont le niveau de Fermi μ et la température T .

3ème limite macroscopique : modèle DD. Finalement, le terme de relaxation W peut se réécrire après calculs :

$$W = \frac{W_0}{\tau_w} \left(\frac{T_L}{T} - 1 \right),$$

où on rappelle que T_L est la température du réseau et τ_w est un temps de relaxation. Lorsque ce temps de relaxation converge vers 0, l'équation (1.3.9) implique $T = T_L$ et le système est à l'équilibre thermique. L'équation (1.3.8) conduit alors au modèle de dérive-diffusion

$$\partial_t \rho_\mu - \nabla_x \left(\frac{\mathbb{D}_{00}}{k_B T_L} \nabla_x \mu \right) = 0.$$

1.3.2 Simulations numériques

Nous considérons un nanotransistor de type DG-MOSFET. Ce dispositif est constitué d'un film de silicium caractérisé par deux zones fortement dopées, appelés la source et le drain, et d'une région active avec un faible dopage, appelée le canal [10, 11]. Des contact ohmiques entre le drain et la source permettent d'appliquer un potentiel V_{DS} . Le film de silicium est compris entre deux couches de dioxyde de silicium SiO_2 assurant le confinement par un fort potentiel de barrière à l'interface. Un potentiel V_{Gate} peut être appliqué à ces couches de dioxyde de silicium. On suppose le domaine invariant dans la direction x_2 , de sorte que le dispositif est considéré dans le domaine en deux dimensions (x_1, z) noté $\Omega = [0, L] \times [0, \ell]$. Une représentation schématique du dispositif est donnée en Figure 1.1.

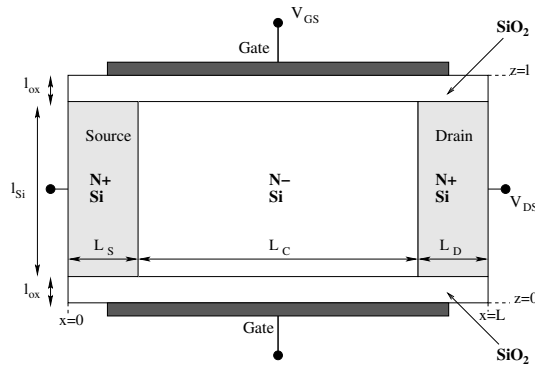


FIGURE 1.1 – Représentation schématique du dispositif.

Introduisons les variables :

$$u = \frac{\mu}{k_B T}, \quad v = -\frac{1}{k_B T}. \quad (1.3.13)$$

Nous nous intéressons à la résolution numérique du système ET couplé avec les sous-bandes à l'équilibre. Le modèle ET stationnaire se déduit de (1.3.8)–(1.3.9) et s'écrit en variables u et v :

$$-\nabla_x(\mathbb{D}_{00}(u, v)\nabla_x u + \mathbb{D}_{01}(u, v)\nabla_x v) = 0, \quad (1.3.14)$$

$$-\nabla_x(\mathbb{D}_{10}(u, v)\nabla_x u + \mathbb{D}_{11}(u, v)\nabla_x v) = -\frac{W_0(u, v)}{\tau_w} (1 + k_B T_L v), \quad (1.3.15)$$

Ce système est couplé avec le modèle Schrödinger-Poisson (1.1.1)–(1.1.3).

L'algorithme de résolution numérique du modèle stationnaire ET pour les sous-bandes (1.3.14)–(1.1.1)–(1.1.3) s'appuie sur un procédé itératif de Gummel [107]. La première étape consiste à calculer l'équilibre thermique quand aucun potentiel drain-source n'est appliqué. Dans ce cas la température et le niveau de Fermi sont constants dans le dispositif, donc le problème se réduit à résoudre l'équation de Poisson (1.1.3). La valeur du potentiel calculé à l'équilibre thermique est la donnée de départ du procédé itératif suivant :

1. Supposons V_{old} donné
2. Nous résolvons le problème aux valeurs propres (1.1.1) sur chaque bande verticale du domaine par diagonalisation de l'opérateur Hamiltonien. On obtient les suites $\{\chi_n(x_i, z_j)\}$ et $\{\epsilon_n(x_i)\}$.
3. Nous résolvons le système ET (1.3.14)–(1.3.15) en les inconnues u et v . Pour cela on utilise une méthode d'éléments finis mixtes [46, 47, 94, 95, 114, 131], qui conduit à la résolution d'un problème non-linéaire, résolu par un algorithme de Newton. (D'autres méthodes numériques de résolution du modèle ET sont proposées en [57, 89, 119, 162])
4. Nous pouvons alors calculer la densité des porteurs de charges correspondant au membre de droite de l'équation de Poisson (1.1.3) et résoudre cette équation pour calculer le potentiel V_{new} [56].
5. Nous répétons les trois dernières étapes jusqu'à ce que la quantité $\|V_{old} - V_{new}\|_{L^\infty}$ soit suffisamment petite. Une fois la convergence atteinte, nous incrémentons le potentiel appliqué entre le drain et la source de 0.02 V et commençons une nouvelle itération.

Il est intéressant de regarder les caractéristiques courant-tension calculés. La Figure 1.2 Gauche donne les caractéristiques $I - V_{DS}$ en fonction du potentiel V_{Gate} appliqué sur les portes du dispositif. La Figure de droite propose une comparaison entre les simulations obtenues par le modèle ET et par le modèle DD. On rappelle que le modèle DD se déduit de ET en effectuant la limite $\tau_w \rightarrow 0$ dans (1.3.15).

1.4 Modèle diffusif du transport confiné dans un nanofil

Dans cette partie, nous proposons un modèle pour le transport quantique dans un nanofil. Il s'agit d'un composant électronique constitué d'un agencement périodique d'ions. Pour un tel dispositif, la direction de transport x est grande par rapport à la section du fil qui n'inclut qu'un nombre fini d'atomes. Contrairement au début de ce chapitre, la direction de transport est mono-dimensionnel, $x \in [0, L]$, alors que la section du fil est un domaine borné $\omega_z \subset \mathbb{R}^2$. On dénote $\Omega = [0, L] \times \omega_z$ le domaine complet. Comme L est grande par rapport à la taille de ω_z , le réseau cristallin n'est supposé périodique que dans la direction de transport. Nous allons donc utiliser un modèle de masse effective longitudinale [18, 23].

Le réseau cristallin génère un potentiel noté $W_{\mathcal{L}}$ qui oscille fortement dans la direction de transport x et est donc considéré périodique en x . La section ω_z dans la direction transversale ne contient qu'un nombre fini d'atomes. Pour le nanofil, on définit les fonctions de Bloch généralisées par le problème aux valeurs propres suivants posé sur la cellule unité $\mathcal{U} = (-1/2, 1/2) \times \omega_z$:

$$\begin{cases} -\frac{1}{2}\Delta\chi_n + W_{\mathcal{L}}\chi_n = E_n\chi_n. \\ \chi_n(y, z) = 0 \text{ on } \partial\omega_z, \quad \chi_n \text{ 1-periodique en } y. \\ \int_{\mathcal{U}} |\chi_n|^2 dydz = 1. \end{cases} \quad (1.4.1)$$

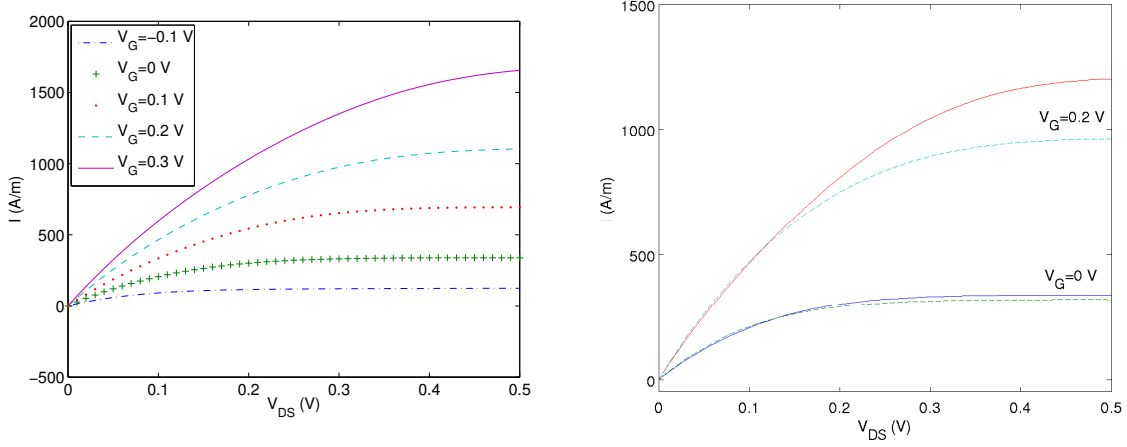


FIGURE 1.2 – *Gauche* : caractéristiques $I - V_{DS}$ pour différents potentiels V_{Gate} obtenues par résolution du modèle ET ; *Droite* : caractéristiques $I - V_{DS}$ pour un potentiel $V_{Gate} = 0$ V et $V_{Gate} = 0.2$ V. La ligne solide correspond à la solution obtenue par le modèle ET, la ligne en pointillé par le modèle de dérive-diffusion.

Le problème étant posé sur la cellule unité \mathcal{U} qui est définie à partir de la section ω_z , les fonctions de Bloch dépendent du dispositif. Par ailleurs, la périodicité dans les conditions aux bords n'est posée que dans la direction de transport, alors que le confinement est assuré par des conditions de Dirichlet dans les autres directions. Par conséquent les vecteurs propres sont des quantités 3D alors que les bandes d'énergies sont 1D.

Dans toute la suite on supposera $W_{\mathcal{L}} \geq 0$ et donné dans $L^\infty(\mathcal{U})$. Les valeurs propres $(E_n)_n$ forment une suite croissante et convergeant vers $+\infty$. On supposera de plus que ces valeurs propres sont simples.

La masse effective m_n^* de la n ème bande est donnée par

$$\frac{1}{m_n^*} = 1 - 2 \sum_{n' \neq n} \frac{P_{nn'} P_{n'n}}{E_n - E_{n'}}, \quad \text{avec } P_{nn'} = \int_{\mathcal{U}} \partial_y \chi_{n'}(y, z) \chi_n(y, z) dy dz. \quad (1.4.2)$$

Remarquons ici l'importance de supposer les valeurs propres simples pour la définition de m_n^* . De même que dans les sections précédentes, un potentiel électrostatique $V(t, x, z)$ est généré dans le dispositif et calculé via l'équation de Poisson :

$$-\Delta_{x,z} V = N. \quad (1.4.3)$$

La densité de charge $N(t, x, z)$ prend en compte la contribution de chaque bande d'énergie et est définie par [23]

$$N = \sum_{n=1}^{+\infty} \rho_n g_{nn}, \quad \text{avec } g_{nn}(z) = \int_{-1/2}^{1/2} \chi_n^2(y, z) dy. \quad (1.4.4)$$

On définit un potentiel effectif V_{nn} par

$$V_{nn}(t, x) = \int_{\omega_z} V(t, x, z) g_{nn}(z) dz = \langle V(t, x, \cdot), g_{nn} \rangle, \quad (1.4.5)$$

La densité de charge $\rho_n(t, x)$ est déterminée par la dynamique dans la direction de transport. De même que dans la Section 1.2, on suppose que le transport est fortement affecté par les collisions avec les phonons et est donc décrit par le modèle de dérive-diffusion (1.2.9) dont nous rappelons l'écriture :

$$\partial_t N_s - \partial_x \left(D(\partial_x N_s + N_s \partial_x V_s) \right) = 0, \quad x \in [0, L], \quad (1.4.6)$$

où D est un coefficient de diffusion et $V_s(t, x)$ est le potentiel effectif. Comme nous l'avons vu à la Section 1.2, cette équation est obtenue par une limite de diffusion de l'équation de Boltzmann avec un opérateur de collisions électrons-phonons de type BGK linéarisé (1.2.1)–(1.2.2). Cette limite permet d'obtenir l'expression du potentiel effectif (1.2.12) :

$$V_s = -\ln \mathcal{Z} \quad \text{avec} \quad \mathcal{Z} = \sum_{n=1}^{+\infty} e^{-(E_n + V_{nn})}, \quad (1.4.7)$$

où E_n sont les valeurs propres du problème (1.4.1) et $V_{nn}(t, x)$ sont les énergies potentielles définies par (1.4.5). Nous introduisons le niveau de Fermi $E_F(t, x)$ et la variable de Slotboom $u(t, x)$ définies par

$$u = e^{E_F} = N_s e^{V_s} = \frac{N_s}{\mathcal{Z}}.$$

La densité de charge ρ_n apparaissant dans le membre de droite de l'équation de Poisson s'exprime alors, en utilisant la statistique de Boltzmann :

$$\rho_n = e^{E_F - (E_n + V_{nn})} = \frac{N_s}{\mathcal{Z}} e^{-(E_n + V_{nn})}. \quad (1.4.8)$$

En comparaison avec les résultats présentés dans la Section 1.2, le modèle de dérive-diffusion-Poisson pour un nanofil présenté ci-dessus implique la résolution du problème de Bloch dans toutes les directions. De plus, le confinement est bidimensionnel. Le résultat d'existence est le suivant :

Théorème 1.4.1. [Theorem 1.6 [A12]] *Let $T > 0$. Supposons :*

- *Le coefficient de diffusion D est de classe $C^1(0, L)$ et on a la borne uniforme $0 < D_1 \leq D \leq D_2$.*
- *La donnée initiale $N_s^0 \geq 0$ satisfait $N_s^0 \ln N_s^0 \in L^1(0, L)$.*
- *Le système est complété par des conditions de Dirichlet aux bords $x = 0$ et $x = L$: $N = N_b > 0$ et $V = V_b \in C^2(\omega_z)$; et par des conditions de Neumann homogènes pour le potentiel sur $\partial\omega_z$. On suppose la condition de compatibilité aux bords $\partial_z V_b(z) = 0$.*

Alors le modèle dérive-diffusion-Poisson pour le nanofil (1.4.3)–(1.4.8) admet une solution faible telle que

$$N_s \ln N_s \in L^\infty([0, T]; L^1(\omega_x)), \quad \sqrt{N_s} \in L^2([0, T]; H^1(\omega_x)), \quad V \in L^\infty([0, T]; H^1(\Omega)).$$

Idée de la preuve.

Deux outils indépendants sont importants pour la démonstration : des estimations précises des éléments propres du problème de Bloch (1.4.1) et une estimation d'entropie relative. L'entropie relative est définie par

$$W = \sum_{n=1}^{+\infty} \int_0^L \left(\rho_n \ln \left(\frac{\rho_n}{\underline{\rho}_n} \right) - \rho_n + \underline{\rho}_n \right) dx + \frac{1}{2} \int_\Omega |\nabla(V - \underline{V})|^2 dx dz.$$

où on a introduit les extensions \underline{N}_s et \underline{V} des données aux bords, définies respectivement sur ω_x et Ω et supposées régulières. L'équation (1.4.5) avec \underline{V} au lieu de V permet de définir $V_{nn}[\underline{V}]$ dénoté \underline{V}_{nn} . On définit alors $\underline{\mathcal{Z}}$ et $\underline{\rho}_n$. Pour une solution faible définie sur $[0, T]$, l'entropie relative est bornée

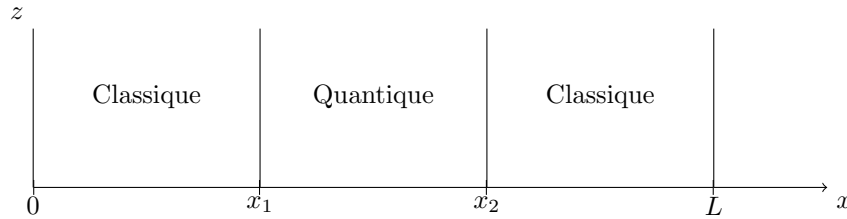
$$0 \leq W(t) \leq C_T, \quad \text{pour } t \in [0, T].$$

Cette estimation permet d'obtenir des bornes a priori et donc un cadre fonctionnel pour les quantités N_s et V . Comme N_s est définie dans $L \log L$, nous régularisons le système. L'existence de solutions pour le système régularisé est obtenue par une procédure de point fixe. Par passage à la limite dans la régularisation, nous obtenons une solution du système non-régularisé. \square

1.5 Couplage hybride

Dans les travaux présentés dans ce chapitre, nous avons considéré des dispositifs pour lesquels la direction de transport et la direction de confinement peuvent être découplées. Outre la réduction de la dimensionalité du problème, ce qui est d'un grand intérêt numérique, cette décomposition permet d'utiliser des modèles classiques du transport de charges dans la direction x de transport. Un avantage est la prise en compte des collisions dans le transport, alors que les modèles purement quantique n'en tiennent pas compte. Néanmoins, cette approche présente l'inconvénient de négliger les effets quantiques dans la direction de transport (comme l'effet tunnel). Ces effets quantiques sont cependant très localisés dans certaines régions des dispositifs électroniques, par exemple dans le canal pour le DG-MOSFET schématisé sur la Figure 1.1 ou pour le nanofil de la Section 1.4. Nous pouvons alors tirer parti de ces approches en utilisant un modèle purement quantique dans les zones où les effets quantiques sont importants, et un modèle couplé quantique-classique dans les régions où les collisions sont prépondérantes (comme dans le drain et la source). Bien évidemment, l'interface entre ces domaines doit être traitée avec soin et nous devons donc définir précisément les conditions à l'interface à imposer.

Plus précisément, considérons un dispositif situé dans l'intervalle $[0, L]$ dans la direction de transport. Cet intervalle est alors décomposé en trois régions : $[0, x_1]$ correspondant à la source, $[x_1, x_2]$ pour le canal et $[x_2, L]$ pour le drain. La zone classique est alors définie pour $x \in [0, x_1] \cup [x_2, L]$ et la région quantique pour $x \in [x_1, x_2]$ (voir la représentation schématique ci-dessous).



Dans l'article précurseur [17], N. Ben Abdallah propose un modèle couplé cinétique-quantique où l'équation de Schrödinger est utilisée pour calculer la densité dans la zone quantique tandis que le transport collisionnel des électrons dans la région classique est modélisé par l'équation de Boltzmann. Des conditions aux interfaces pour l'équation de Boltzmann ont été définies ; elles dépendent des coefficients de réflexion et transmission. Une discrétisation numérique de cette approche a été proposée dans [27]. Dans l'objectif de diminuer les coûts numériques de l'équation de transport, le couplage avec un modèle de dérive-diffusion dans la direction de transport a été étudié dans [73]. Les conditions d'interface ont été obtenues par passage à la limite dans les conditions de réflexion-transmission obtenues dans [17], ce qui conduit à approcher les couches limites à l'interface solutions d'un problème de Milne. Une autre approche a été proposée par [13] consistant à imposer la continuité exacte du courant aux interfaces. Des cas-test ont permis de constater que les résultats numériques obtenus par les deux approches sont similaires.

Dans le cas du transport confiné dans des nanostructures, nous avons considéré le couplage du modèle purement quantique de Schrödinger pour les sous-bandes proposé dans [154, 142] avec le modèle de dérive-diffusion-Schrödinger-Poisson présenté dans les Sections précédentes de ce chapitre dans la zone classique. En adaptant les travaux de [73], des conditions aux interfaces ont été obtenues et ont permis de réaliser des simulations numériques présentées dans [Th]. Des simulations numériques pour le modèle du nanofil introduit dans la Section 1.4 sont présentées dans [C4]. Dans ce travail, le modèle de dérive-diffusion pour le nanofil est utilisé dans la zone classique et couplé avec des équations de Schrödinger pour chaque énergie potentielle V_{nn} dans la zone quantique.

Comme il a été précisé dans ce chapitre, il y a une hiérarchie de modèles classiques suivant le type de collisions considérées [20]. Dans cette Section, nous décrivons brièvement comment étendre les conditions d'interface obtenus dans [13, 73] aux modèles SHE et ET dans le cas purement classique. Il s'agit d'un résumé de l'article [A22]. Des conditions d'interfaçage entre modèles ET ont été obtenues en [75, 76].

Nous considérons ici le cas du couplage avec l'équation de Schrödinger dans la zone quantique $[x_1, x_2]$; et nous étendons les deux approches décrites ci-dessus : celle consistant à passer à la limite de diffusion dans les conditions aux bords du modèle cinétique, et celle reposant sur la conservation exacte du courant. Seul le cas sans confinement est étudié, l'extension au modèle confiné est un travail futur.

Avant de décrire l'obtention des conditions aux interfaces pour les deux approches, nous rappelons brièvement les modèles utilisés dans la zone quantique puis dans la zone classique. La zone quantique $[x_1, x_2]$ est décrite par les états de diffraction de l'équation de Schrödinger pour une énergie potentielle V :

$$-\frac{1}{2m}\partial_{xx}\psi_k + V(x)\psi_k = \varepsilon(x_1, k)\psi_k, \quad \text{pour } k > 0; \quad -\frac{1}{2m}\partial_{xx}\psi_k + V(x)\psi_k = \varepsilon(x_2, k)\psi_k, \quad \text{pour } k < 0,$$

où l'énergie dans le cas sans confinement est donnée par $\varepsilon(x, k) = \frac{|k|^2}{2m} + V(x)$. Ce système est complété par les conditions transparentes aux bords traduisant que les ondes sont partiellement réfléchies et transmises en $x = x_1$ et $x = x_2$. L'expression des coefficients de réflexion et transmission (dans le cas $V(x_1) \geq V(x_2)$) est donnée par

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(k) &= |r(k)|^2, \quad k \in \mathbb{R}; & \mathcal{T}(k) &= k_+(k) \frac{|t(k)|^2}{k}, \quad \text{pour } k > 0, \\ \mathcal{T}(k) &= -\Re\left(k_-(k)\right) \frac{|t(k)|^2}{k}, \quad \text{pour } k < 0, \end{aligned} \quad (1.5.1)$$

où

$$\begin{aligned} r(k) &= \frac{1}{2} \left(\psi_k + \frac{i}{k} \partial_x \psi_k \right) (x_1), \quad t(k) = \psi_k(x_2), \quad \text{pour } k > 0, \\ r(k) &= \frac{1}{2} \left(\psi_k + \frac{i}{k} \partial_x \psi_k \right) (x_2), \quad t(k) = \psi_k(x_1), \quad \text{pour } k < 0. \end{aligned}$$

Supposant connue la fonction de distribution f rentrant dans la zone quantique, la densité quantique des électrons N_Q est définie par

$$N_Q(x) = \int_{k>0} f(x_1, k) |\psi_k(x)|^2 dk + \int_{k<0} f(x_2, k) |\psi_k(x)|^2 dk;$$

et le courant quantique

$$J_Q = \int_{V_1}^{+\infty} \mathcal{J}_Q(\varepsilon) d\varepsilon, \quad \text{avec } \mathcal{J}_Q(\varepsilon) = (f(x_1, k(x_1, \varepsilon)) - f(x_2, -k(x_2, \varepsilon))) \mathcal{T}(k(x_1, \varepsilon)), \quad (1.5.2)$$

où $k(x, \varepsilon) = \sqrt{2m(\varepsilon - V(x))}$ pour $\varepsilon \geq V(x)$.

Le transport dans la zone classique est modélisé par l'équation de Boltzmann. Rappelons que dans le cas sans confinement, qui nous intéresse ici, cette équation est donnée par (1.1.9) avec une seule bande d'énergie potentielle V . Il a été montré dans [17] que les conditions à l'interface s'écrivent :

$$\begin{cases} f^\alpha(x_1, k) = \mathcal{R}(-k) f^\alpha(x_1, -k) + \mathcal{T}(-k_+) f^\alpha(x_2, -k_+), & \text{pour } k < 0, \\ f^\alpha(x_2, k) = \mathcal{R}(-k) f^\alpha(x_2, -k) + \mathcal{T}(k_-(k)) f^\alpha(x_1, k_-), & \text{pour } k > \sqrt{2m(V(x_1) - V(x_2))}, \\ f^\alpha(x_2, k) = f^\alpha(x_2, -k), & \text{pour } 0 < k < \sqrt{2m(V(x_1) - V(x_2))}, \end{cases} \quad (1.5.3)$$

avec $k_+ = \sqrt{k^2 + 2m(V(x_1) - V(x_2))}$ et $k_- = \sqrt{k^2 - 2m(V(x_1) - V(x_2))}$. Pour simplifier les notations, le système (1.5.3) est écrit sous la forme synthétique : $\mathcal{B}(f_1^\alpha, f_2^\alpha) = 0$ où $f_i^\alpha(k) := f^\alpha(x_i, k)$, $i = 1, 2$.

Conditions d'interface pour le modèle SHE : 1ère approche

Dans le cas d'une seule bande d'énergie potentielle V , le modèle SHE 1D est donné par les équations (1.3.1)–(1.3.2) avec $\kappa = -2\pi m \partial_t V$. Il s'obtient en effectuant la limite $\alpha \rightarrow 0$ dans l'équation de Boltzmann. Un développement de Hilbert de la solution f^α de l'équation de Boltzmann s'écrit :

$$f^\alpha(x, k) = F^\alpha(x, \varepsilon) + O(\alpha^2), \quad (1.5.4)$$

où F^α est solution de (SHE) à $O(\alpha^2)$ près. Il a alors été montré au Théorème 4.2 de [A22] que f^α est solution à l'ordre 2 de l'équation de Boltzmann complété par les conditions de transmission (1.5.3) ssi les conditions aux interfaces suivantes sont satisfaites :

$$D(x_1, \varepsilon) \partial_x F^\alpha(x_1, \varepsilon) = D(x_2, \varepsilon) \partial_x F^\alpha(x_2, \varepsilon) =: \bar{J}^\alpha(\varepsilon), \quad (1.5.5)$$

$$F^\alpha(x_1, \varepsilon) - F^\alpha(x_2, \varepsilon) = \alpha \bar{J}^\alpha(\varepsilon) (\theta_1(\varepsilon) - \theta_2(\varepsilon)), \quad (1.5.6)$$

où θ_1 et θ_2 sont les correcteurs définis par le problème de Milne [12, 76, 100, 181]

$$\begin{cases} \frac{k}{m} \frac{\partial \theta_i}{\partial \xi} = Q_0(\theta_i), & k \in \mathbb{R}, \xi \in \Omega_i, i = 1, 2, \\ \mathcal{B}(\theta_1(0, k) - \ell(k), \theta_2(0, k) - \ell(k)) = 0, \end{cases} \quad (1.5.7)$$

avec $\Omega_1 = (-\infty, 0]$ et $\Omega_2 = [0, +\infty)$. La fonction ℓ ne dépend que de k et est donnée par le terme d'ordre α du développement de Hilbert de f^α . Dans le cas monodimensionnel, elle s'exprime simplement : $\ell(k) = k/(2|k|)$ si $k \neq 0$, et $\ell(0) = 0$.

Conditions d'interface pour le modèle SHE : 2ème approche

Les conditions d'interface obtenues dans la première approche ne donnent pas la conservation exacte du courant aux interfaces, mais seulement à l'ordre 2 en α . En injectant le développement de Hilbert (1.5.4) dans (1.5.2), nous obtenons la continuité exacte du courant aux interfaces ssi en plus de la condition (1.5.5) nous imposons la condition :

$$F^\alpha(x_1, \varepsilon) - F^\alpha(x_2, \varepsilon) = -\alpha \frac{\bar{J}^\alpha(\varepsilon)}{\mathcal{T}(k(x_1, \varepsilon))}. \quad (1.5.8)$$

Remarque 1.5.1. Dans le cas 1D, le problème de Milne (1.5.7) peut se résoudre explicitement et on obtient

$$\forall \varepsilon \geq V_1, \quad \theta_1(\varepsilon) - \theta_2(\varepsilon) = 1 - \frac{1}{\mathcal{T}(k(x_1, \varepsilon))}.$$

Cette expression permet de faire le lien entre les conditions aux interfaces (1.5.6) et (1.5.8).

Finalement, les conditions d'interface pour le modèle ET se déduisent aisément en multipliant les conditions pour SHE par $\begin{pmatrix} 1 \\ \varepsilon \end{pmatrix}$ et en intégrant par rapport à ε . La limite de relaxation $\tau_w \rightarrow 0$ permet de retrouver les conditions aux interfaces pour DD. Des simulations numériques du modèle ET pour le cas test d'une diode à effet tunnel résonnant ont été réalisées dans [A22] et soulignent que, dans ce cas, les deux approches donnent des résultats très proches.

Chapitre 2

Agrégation de bactéries par chimiotactisme

Ce chapitre résume les travaux [A7, A11, A13, A18, A19, A20, A21, C3, C5, R1].

2.1 Processus de run et tumble : modèle cinétique

2.1.1 Modélisation

La compréhension du mouvement collectif de micro-organismes fait l'objet d'une intense activité de recherche depuis plusieurs années. Ce chapitre est consacré aux travaux réalisés autour de l'étude du chimiotactisme bactérien, i.e. du mouvement des bactéries en réponse à un signal chimique extérieur. Dans cette étude, nous nous intéressons tout particulièrement au cas du chimiotactisme positif, donnant lieu à des phénomènes d'agrégation. Le signal chimique sera alors appelé le chemoattractant.

Le déplacement individuel d'une bactérie comme *Escherichia Coli* en réponse à un gradient chimique extérieur est désormais bien connu [32]. De fines flagelles se branchent sur le corps de la bactérie au niveau de moteurs qui peuvent tourner soit dans le sens des aiguilles d'une montre soit dans le sens inverse. Lorsque ceux-ci tournent tous dans le sens inverse des aiguilles d'une montre, les flagelles s'assemblent pour propulser la bactérie en ligne droite. Cette phase est appelée phase de *run*. Si l'un des moteurs tourne dans le sens inverse, les flagelles se désassemblent et la bactérie effectue une rotation. C'est la phase de *tumble* durant laquelle la bactérie se réoriente pour la phase de run suivante. Le mouvement résultant est dû à l'alternance de ces deux phases. En modulant la durée de leurs phases de run, les bactéries sont capables de s'agréger et de se déplacer collectivement. En se basant sur ces observations, une description cinétique du processus de *run et tumble* décrit ci-dessus a été proposée par Alt, Dunbar et Othmer [1, 147]. Plus précisément, la population de bactéries au temps $t > 0$ à la position $x \in \mathbb{R}^d$ et ayant la vitesse $v \in \mathcal{V}$ est décrite par la densité $f(t, x, v)$. Les bactéries sont supposées avoir une vitesse de module constant durant la phase de run et la durée des phases de tumble est négligée. Le domaine \mathcal{V} considéré dans cette étude sera donc la sphère. La dynamique est régie par le modèle cinétique suivant [83, 151, 152, 113] :

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f = \int_{\mathcal{V}} \mathcal{T}(v, v') f(t, x, v') dv' - \int_{\mathcal{V}} \mathcal{T}(v', v) f(t, x, v) dv', \quad (2.1.1)$$

où $\mathcal{T}(v, v')$ est le noyau de transition de vitesse, représentant la probabilité des bactéries ayant la vitesse v de passer à la vitesse v' lors d'une phase de tumble. Le membre de gauche de cette équation modélise alors la phase de *run* et le membre de droite la phase de *tumble*.

Sur la base d'observations expérimentales, on considère que les phases de run ont une durée plus longue lorsque les bactéries vont dans une direction favorable, i.e. telle que la concentration du chemoattractant est croissante le long de leur trajectoire. Nous en déduisons que le noyau de transition $\mathcal{T}(v, v')$ doit dépendre de la densité du chemoattractant, notée $S(t, x)$. Dans le modèle proposé dans [77], on suppose que le noyau de transition est directement relié au gradient du chemoattractant le long de la trajectoire d'une bactérie :

$$\mathcal{T}(v, v') = \phi(\partial_t S + v \cdot \nabla_x S). \quad (2.1.2)$$

Nous utiliserons aussi le modèle simplifié suivant, supposant les bactéries capables de répondre instantanément au gradient spatial de chemoattractant,

$$\mathcal{T}(v, v') = \phi(v \cdot \nabla_x S). \quad (2.1.3)$$

Nous soulignons que dans ces expressions, $\mathcal{T}(v, v')$ ne dépend pas de v' . Dans le cas du chimiotactisme positif, le taux de réorientation est plus faible quand les bactéries vont dans une direction favorable. Par conséquent, la fonction ϕ sera choisie décroissante. Différents choix de noyau de tumbling sont disponibles dans la littérature (voir e.g. [83, 84, 77]).

Le chemoattractant est émis par les bactéries elles-mêmes. Si on note $\rho := \int_{\mathcal{V}} f(v) dv$ la densité des bactéries, la dynamique du chemoattractant est donnée par le modèle elliptique suivant :

$$-\Delta S + S = \rho. \quad (2.1.4)$$

Le modèle couplé (2.1.1)-(2.1.4) est le point de départ des travaux présentés dans ce chapitre. Ce modèle a en particulier été utilisé en [164, 165] en comparaison avec des résultats expérimentaux. Dans ces articles, les auteurs se sont intéressés à la description d'ondes de concentration en bactéries. Ces ondes sont observées expérimentalement dans un micro-canal riche en nutriment. Une description mathématique de ce phénomène est obtenue à partir d'un modèle similaire à (2.1.1)-(2.1.4) dans lequel l'influence d'un nutriment a été rajoutée. Une bonne concordance entre les résultats expérimentaux et les résultats théoriques a été obtenue grâce à ce modèle. Actuellement, nous nous intéressons à une extension de ces travaux dans le cas d'un modèle de deux populations de bactéries en interaction.

Les travaux résumés dans ce chapitre portent sur des résultats d'existence de solutions au modèle cinétique et sur l'étude de la limite hydrodynamique de celui-ci et du modèle macroscopique d'agrégation obtenu par ce passage à la limite. Dans la Section suivante, nous présentons les résultats d'existence et les simulations numériques pour le modèle cinétique [A7]. La Section 2.2 est consacrée à la limite hydrodynamique de ce système. Cette limite conduit à l'étude d'un modèle macroscopique. Celui-ci consiste en une loi de conservation scalaire non locale généralement appelée équation d'agrégation. Il est connu que pour ce modèle les solutions faibles dans L^p ($p > 1$) explosent en temps fini alors que la norme L^1 est conservée. Il paraît donc naturel de s'intéresser à l'existence globale de solutions mesures, ce qui a été mené dans [A13] par la méthode de dualité en une dimension d'espace. Cette étude est résumée Section 2.2.2. Dans le cas où la dépendance du noyau de tumbling au chemoattractant est linéaire, les solutions obtenues sont équivalentes à des solutions définies par flots gradients [A18]. L'approche en dualité ne peut cependant pas être appliquée en dimension supérieure. Nous utilisons alors le flot de Filippov. Cette étude est l'objet de la Section 2.3 qui résume les résultats d'existence de solutions mesures de [A21]. De plus, des schémas numériques simulant les solutions après blow-up de l'équation d'agrégation sont proposés et décrits dans la Section 2.3.2 qui résume l'article [A19].

Avant de poursuivre, nous avons besoin d'introduire quelques notations qui sont utilisées dans ce chapitre. On dénote $C_0(Y, Z)$ l'ensemble des fonctions continues de Y dans Z qui s'annulent à l'infini et $C_c(Y, Z)$ l'ensemble de celles à support compact. On pose $\mathcal{M}_{loc}(\mathbb{R}^d)$ l'espace des mesures localement Boréliennes sur \mathbb{R}^d . Pour $\rho \in \mathcal{M}_{loc}(\mathbb{R}^d)$ on définit $|\rho|(\mathbb{R}^d)$ sa variation totale. On dénote $\mathcal{M}_b(\mathbb{R}^d)$ l'espace des mesures de $\mathcal{M}_{loc}(\mathbb{R}^d)$ avec une variation totale finie. Cet espace est toujours doté de la topologie

faible $\sigma(\mathcal{M}_b, C_0)$. Nous considérons aussi les espaces de mesures de probabilité (i.e. de masse totale 1) avec un moment d'ordre q fini :

$$\mathcal{P}_q(\mathbb{R}^d) = \left\{ \mu \text{ mesure Borélienne positive, } \mu(\mathbb{R}^d) = 1, \int |x|^q \mu(dx) < \infty \right\}.$$

Cet espace est muni de la distance de Wasserstein définie par (voir [176, 177])

$$d_{W_q}(\mu, \nu) = \inf_{\gamma \in \Gamma(\mu, \nu)} \left\{ \int |y - x|^q \gamma(dx, dy) \right\}^{1/q} \quad (2.1.5)$$

où $\Gamma(\mu, \nu)$ est l'ensemble des mesures de $\mathcal{P}_q(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$ avec marginale μ et ν .

2.1.2 Résultat d'existence et simulations numériques

Dans cette section nous nous plaçons en dimension 2 d'espace. L'existence de solutions au modèle cinétique pour le chimiotactisme (2.1.1)-(2.1.4) avec différentes formes de noyau de tumbling \mathcal{T} a été largement étudié dans la littérature [45, 58, 117, 82]. Un ingrédient important est l'obtention d'estimations a priori sur les termes $\partial_t S$ et $\nabla_x S$ utilisés dans l'expression du noyau de tumbling \mathcal{T} (2.1.2). Pour cela, nous représentons la solution de l'équation (2.1.4) dans l'espace \mathbb{R}^2 sous la forme :

$$S(t, x) = (G * \rho(t))(x), \quad \text{où } G(x) = \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty \exp\left(-\pi \frac{|x|^2}{4s} - \frac{s}{4\pi}\right) \frac{ds}{s}.$$

La fonction G est le potentiel de Bessel en dimension 2. Alors en utilisant la conservation de la densité, obtenue par simple intégration de l'équation cinétique (2.1.1) :

$$\partial_t \rho + \nabla_x \cdot J = 0, \quad J(t, x) = \int_{\mathcal{V}} v f(t, x, v) dv, \quad (2.1.6)$$

le terme $\partial_t S$ se réécrit :

$$\partial_t S = G * \partial_t \rho = -G * \nabla_x \cdot J = -\nabla_x G * J. \quad (2.1.7)$$

Dans cette expression la convolution entre deux vecteurs est définie par $\nabla_x G * J = \partial_{x_1} G * J_1 + \partial_{x_2} G * J_2$ où J_1 et J_2 sont les deux composantes du vecteur J . Par conséquent nous obtenons des estimations sur $\partial_t S$ et $\nabla_x S$ à partir d'estimations sur ρ et J .

On peut alors réécrire le problème (2.1.1)-(2.1.2)-(2.1.4) :

$$\begin{cases} \partial_t f + v \cdot \nabla_x f = \int_{v' \in \mathcal{V}} \phi(\nabla_x G * (v' \rho - J)) f(v') dv' - 2\pi \phi(\nabla_x G * (v \rho - J)) f(v), \\ f(0, x, v) = f^0(x, v), \end{cases} \quad (2.1.8)$$

où f^0 est la donnée initiale.

Le résultat d'existence est le suivant :

Théorème 2.1.1 (Theorem 2.2 [A7]). *Soit $f^0 \in L^1_+ \cap L^\infty(\mathbb{R}^2 \times \mathcal{V})$. Supposons que $\phi \in C^\infty(\mathbb{R})$ avec $\phi' < 0$ et ϕ bornée. Le problème avec donnée initiale (2.1.8) admet une unique solution faible globale f . De plus $f \in L^\infty((0, +\infty); L^1_+ \cap L^\infty(\mathbb{R}^2 \times \mathcal{V}))$.*

Ce résultat est obtenu tout d'abord localement en utilisant un argument de point fixe, puis étendu à tout intervalle de temps grâce à des estimations a priori.

Le système étant bien posé, des simulations numériques du modèle ont été implémentées. Le domaine de simulation en espace est un rectangle $(0, L) \times (0, \ell) \subset \mathbb{R}^2$, pour les simulations numériques nous prenons un domaine allongé avec $L = 10^{-2} m$ et $\ell = 10^{-3} m$. Ce domaine correspond au dispositif dans

lequel ont été menées les expériences présentées dans [164, 165], voir aussi les simulations réalisées plus récemment dans [87]. La valeur du module constant des vitesses est $V = 20 \mu m.s^{-1}$. Dans ce cas, le modèle (2.1.1)–(2.1.4) s'écrit :

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f = \int_{\mathbb{S}^V} \phi(\partial_t S + v' \cdot \nabla_x S) f(v') dv' - 2\pi\phi(\partial_t S + v \cdot \nabla_x S) f(v), \quad (2.1.9)$$

avec la donnée initiale f^0 . Le domaine étant borné, le système est complété par des conditions aux bords de réflexion spéculaire aux parois.

La méthode de discrétisation proposée dans [A7] est une méthode semi-lagrangienne très utilisée en physique des plasmas [167]. Il s'agit d'une méthode Eulérienne consistant en un calcul direct de la fonction de distribution à chaque pas de temps sur un maillage cartésien fixe de l'espace des phases. Connaissant la fonction de distribution au temps t aux noeuds du maillage, une valeur approchée de celle-ci au temps $t + \delta t$ est calculée en suivant les caractéristiques dans le sens rétrograde et en interpolant la valeur au pied de la caractéristique sur les noeuds du maillage. Une analyse de convergence de cette méthode dans le cas étudié ici est proposée Theorem 3.3 de [A7]. Les Figures 2.1 et 2.2 présentent les résultats d'une simulation avec la donnée initiale :

$$f^0(x_1, x_2, v) = n_0 \frac{C_x}{2\pi} \exp(-C_x((x_1 - L/2)^2 + (x_2 - \ell/2)^2)),$$

avec la densité initiale $n_0 = 10^8 m^{-3}$ et pour un facteur $C_x = 10^6$. La Figure 2.1 représente la dynamique pour le modèle avec le noyau de tumbling \mathcal{T} donné par (2.1.2). On observe l'agrégation le long d'une bande perpendiculaire aux parois du plus grand côté du dispositif. Pour la Figure 2.2, \mathcal{T} est supposé ne pas dépendre de $\partial_t S$ comme dans (2.1.3). On observe un phénomène d'agrégation beaucoup plus rapide que dans le cas de la première figure et ponctuel au centre du dispositif. Ceci montre une différence de comportement importante des solutions entre les deux modèles de noyau de tumbling.

Finalement, nous soulignons que le résultat d'existence présenté ici a été étendu au cas de deux populations de bactéries en interaction dans [A20]. Dans cet article, les deux populations en interaction sont issues de la même souche de bactéries et émettent le même chemoattractant, mais leur sensibilité au chemoattractant est différente. Notant $f_1(t, x, v)$ et $f_2(t, x, v)$ les fonctions de distribution de chacune des espèces, la dynamique de ces fonctions est régie par le système :

$$\begin{cases} \partial_t f_i + v \cdot \nabla_x f_i = \int_{\mathcal{V}} (\mathcal{T}_i[S](v, v') f_i(v') - \mathcal{T}_i[S](v', v) f_i(v)) dv', \\ f_i(t = 0, x, v) = f_i^0(x, v), \quad \text{pour } i = 1, 2. \end{cases} \quad (2.1.10)$$

La position $x \in \mathbb{R}^d$, la vitesse $v \in \mathcal{V}$ avec \mathcal{V} un domaine borné de \mathbb{R}^d et $t \geq 0$. De même que précédemment, le noyau de tumbling $\mathcal{T}_i[S]$ prend en compte les changements temporels de la concentration du chemoattractant le long des trajectoires des bactéries et s'écrit :

$$\mathcal{T}_i[S](v, v') := \phi_i(\partial_t S + v' \cdot \nabla_x S), \quad \text{pour } i = 1, 2, \quad (2.1.11)$$

où les fonctions ϕ_i sont décroissantes et régulières. Les deux espèces émettant le même chemoattractant S , la dynamique de celui-ci est donnée par le système parabolique (si $\delta = 1$) ou elliptique (si $\delta = 0$) :

$$\begin{cases} \delta \partial_t S - \Delta S + S = \rho_1 + \rho_2 := \int_{\mathcal{V}} f_1(v) dv + \int_{\mathcal{V}} f_2(v) dv, & \delta = 0, 1, \\ S(x, t = 0) = 0, & \text{si } \delta = 1. \end{cases} \quad (2.1.12)$$

Pour ce modèle général, il a été montré le résultat d'existence suivant :

Théorème 2.1.2 (Theorem 2.2 [A20]). *Supposons que les noyaux de tumbling $\mathcal{T}_1, \mathcal{T}_2$ sont donnés par (2.1.11) avec ϕ_1 et ϕ_2 des fonctions positives, bornées et Lipschitziennes. Supposons de plus que les données initiales f_1^0 et f_2^0 sont dans $L_+^1(\mathbb{R}^d \times \mathcal{V}) \cap L^\infty(\mathbb{R}^d \times \mathcal{V})$, alors il existe une unique solution globale au système (2.1.10)–(2.1.12) telle que*

$$f_1, f_2 \in L^\infty((0, +\infty), L_+^1 \cap L^\infty(\mathbb{R}^d \times \mathcal{V})), \quad S \in L^\infty((0, +\infty), L^p(\mathbb{R}^d)), \quad \text{pour tout } 1 \leq p \leq \infty.$$

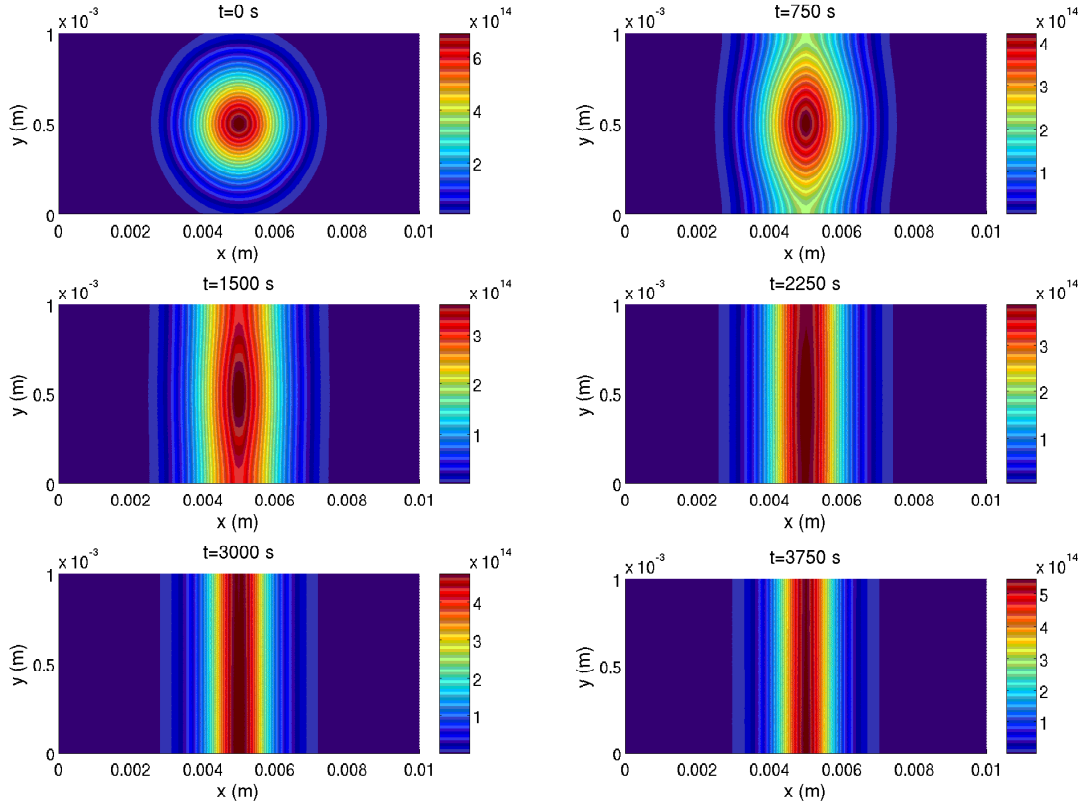


FIGURE 2.1 – Dynamique de la densité des bactéries ρ solution du modèle cinétique (2.1.9), complété par des conditions de réflexion spéculaire aux bords. L’agrégation se fait le long d’une bande (voir la barre de couleur sur la droite).

2.2 Limite hydrodynamique en une dimension : solutions en dualité de l’équation d’agrégation

2.2.1 Equation d’agrégation

Dans cette Section, nous considérons la limite hydrodynamique du modèle cinétique (2.1.1)–(2.1.4) en une dimension. Ceci conduit à l’étude de modèles hyperboliques à la limite (voir [103, 86, 141] pour d’autres exemples). Remarquons que plusieurs auteurs se sont aussi intéressés à la limite diffusive du modèle cinétique avec des hypothèses différentes sur le noyau de tumbling [58] conduisant au modèle célèbre de Keller-Segel [150, 125]. La limite diffusive du modèle à 2 espèces (2.1.10)–(2.1.12) a été étudiée en [A20].

Dans cette étude, le noyau de tumbling est choisi sous la forme (2.1.3) et tel que

$$\mathcal{T}(v, v') = \frac{1}{2} (1 + \psi(v \partial_x S)), \quad \text{avec } \psi \text{ impaire, } \psi \in C^1(\mathbb{R}) \text{ et Lipschitzienne.} \quad (2.2.1)$$

Cette limitation nous permet de mener une étude mathématique complète.

Nous introduisons un paramètre sans dimension $\varepsilon \ll 1$ représentant la distance moyenne parcourue durant une phase de *run*. Dans le cas de l’application numérique de la Section précédente, en posant \bar{x} la longueur caractéristique et $\bar{\phi}$ la probabilité moyenne de réorientation, on a $\varepsilon = V/\bar{\phi}\bar{x} = 2 \cdot 10^{-3}$.

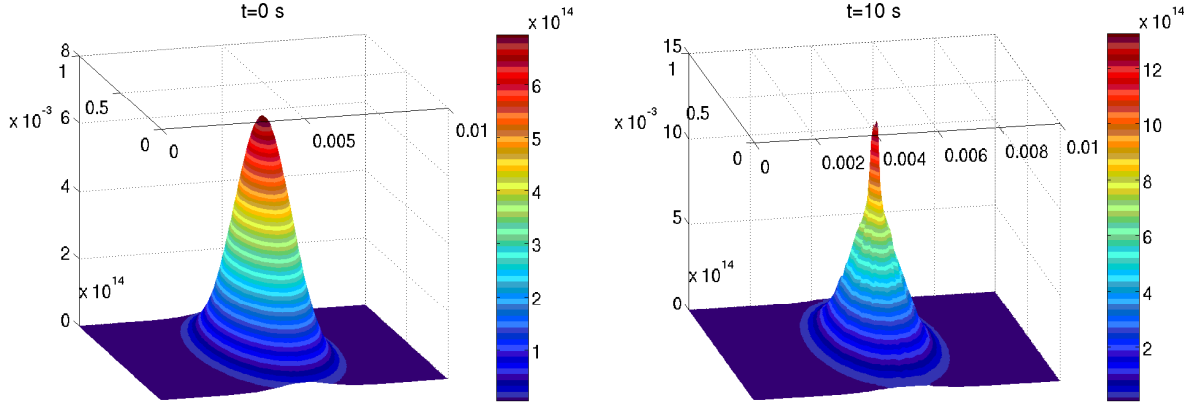


FIGURE 2.2 – Dynamique de la densité ρ des bactéries dans le dispositif dans le cas où le noyau de tumbling ne dépend pas de $\partial_t S$ (2.1.3) sous les mêmes conditions que pour la Figure 2.1. L'agrégation a lieu au centre du dispositif (voir la barre de couleur sur la droite).

En une dimension, la sphère \mathbb{S}_V de l'espace des vitesses ne contient que 2 vitesses $\{-V, V\}$. Le modèle (2.1.1)–(2.1.4) dans ce cadre se simplifie en :

$$\begin{aligned} \partial_t f_\varepsilon + v \partial_x f_\varepsilon &= \frac{1}{\varepsilon} (\phi(-v \partial_x S_\varepsilon) f_\varepsilon(-v) - \phi(v \partial_x S_\varepsilon) f_\varepsilon(v)), & x \in \mathbb{R}, v \in \{-V, V\} \\ -\partial_{xx} S_\varepsilon + S_\varepsilon &= \rho_\varepsilon = f_\varepsilon(v) + f_\varepsilon(-v). \end{aligned} \quad (2.2.2)$$

Nous définissons $\rho_\varepsilon = f_\varepsilon(v) + f_\varepsilon(-v)$ la densité des bactéries et $J_\varepsilon = v(f_\varepsilon(v) - f_\varepsilon(-v))$ le flux. En ajoutant et soustrayant les équations pour v et $-v$, on obtient, en utilisant (2.2.1) :

$$\begin{cases} \partial_t \rho_\varepsilon + \partial_x J_\varepsilon = 0, \\ \partial_t J_\varepsilon + v^2 \partial_x \rho_\varepsilon = -\frac{1}{\varepsilon} (J_\varepsilon + v \psi(v \partial_x S_\varepsilon)). \end{cases} \quad (2.2.3)$$

Formellement, on déduit à la limite le modèle d'agrégation en une dimension suivant :

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x (a(\partial_x S) \rho) = 0, \\ -\partial_{xx} S + S = \rho, \end{cases} \quad (2.2.4)$$

où on a défini la fonction $a(y) = -v \psi(vy)$; la fonction ψ étant impaire et décroissante, cette quantité ne dépend pas de $v \in \{-V, V\}$ et a est croissante.

En écrivant la solution de l'équation elliptique sous la forme d'un produit de convolution, $S = K * \rho$ avec $K = \frac{1}{2} e^{-|x|}$, le système (2.2.4) peut s'écrire sous la forme plus standard pour l'équation d'agrégation :

$$\partial_t \rho + \partial_x (a(\partial_x K * \rho) \rho) = 0. \quad (2.2.5)$$

Cette équation apparaît dans de nombreuses applications par exemple pour modéliser l'agrégation de particules [31, 55, 174], cellules [138, 146, 173], ou piétons [63, 67], ...

L'existence de solutions faibles dans le cas où $a = Id$, cas que nous appellerons *le cas linéaire* dans la suite de ce chapitre, a été largement étudiée. Il est maintenant connu que dans le cas où le potentiel d'interaction K n'est pas de classe C^1 , les solutions faibles explosent en temps fini, au sens suivant : $\forall p > 1$, $\|\rho(t)\|_{L^p} \rightarrow +\infty$ en temps fini (voir par exemple [33, 34] en dimension $d \geq 1$ quelconque et pour $a = Id$, et [C3] pour le cas particulier du système (2.2.4)). Cependant la conservation de la masse permet d'envisager l'existence de solutions mesurées globales en temps.

Dans le cas linéaire, où $a = Id$, l'équation (2.2.5) a une structure naturelle de flot gradient. En utilisant les techniques développées dans [3], basées sur le schéma JKO [120], Carrillo et al [54] ont montré l'existence d'un flot gradient et donc d'une solution mesure pour le modèle en dimension quelconque :

$$\partial_t \mu = \operatorname{div}((\nabla_x W * \mu) \mu), \quad x \in \mathbb{R}^d.$$

Le problème étant invariant par translation, on fixe le centre de gravité en 0. Dans cet article, le potentiel d'interaction W vérifie :

$$\begin{aligned} &W \text{ est continue, paire, } C^1(\mathbb{R}^d \setminus \{0\}), |\nabla W(x)| \leq C(1 + |x|), \\ &\text{et } \lambda\text{-convexe pour un certain } \lambda \leq 0 \text{ (i.e. } x \mapsto W(x) - \lambda|x|^2/2 \text{ est convexe)} \end{aligned} \quad (2.2.6)$$

Le potentiel $-K$ de l'exemple ci-dessus entre clairement dans ce cadre. Dans les travaux résumés dans ce chapitre, nous proposons une autre approche consistant à interpréter le système (2.2.4) comme une loi de conservation scalaire avec une vitesse $a(\partial_x S)$ qui dépend de manière nonlinéaire et non-locale de la solution.

2.2.2 Solutions en dualité en une dimension

Lorsque ρ est une mesure dans le système (2.2.4), le coefficient $a(\partial_x S)$ peut avoir des discontinuités. Une difficulté réside alors dans la définition du produit $a(\partial_x S)\rho$. En une dimension d'espace, la théorie des solutions en dualité a été développée par Bouchut & James [42] pour une loi de conservation à coefficient discontinu $b \in L^\infty((0, T) \times \mathbb{R})$ donné :

$$\partial_t \rho + \partial_x (b\rho) = 0, \quad \rho(t=0) = \rho^0. \quad (2.2.7)$$

Les solutions en dualité sont définies comme des solutions faibles, les fonctions tests étant des solutions Lipschitziennes de l'équation de transport rétrograde :

$$\partial_t p + b(t, x)\partial_x p = 0, \quad p(T, \cdot) = p^T \text{ donnée dans } \operatorname{Lip}(\mathbb{R}). \quad (2.2.8)$$

On dit alors que p est **réversible** si p est localement constant sur $\{(t, x) \in [0, T] \times \mathbb{R}; \exists p_e, p_e(t, x) \neq 0 \text{ solution de (2.2.8) pour } p^T = 0\}$. Une mesure ρ est une **solution en dualité** de (2.2.7) si pour toute solution réversible p et tout $\tau > 0$, l'application $t \mapsto \int_{\mathbb{R}} p(t, x)\rho(t, dx)$ est constante sur $[0, \tau]$.

Théorème 2.2.1 (Bouchut & James [42]). *Il existe une unique solution en dualité de l'équation (2.2.7) ρ dans $C(0, T; \mathcal{M}_b(\mathbb{R}))$ si b satisfait la condition OSL (one sided Lipschitz) :*

$$\partial_x b(t, x) \leq \alpha(t), \quad \alpha \in L^1(0, T), \text{ au sens des distributions.} \quad (2.2.9)$$

De plus, $\rho = X_{\#}\rho^0$, i.e. pour tout $\phi \in C_0(\mathbb{R})$

$$\int_{\mathbb{R}} \phi(x)\rho(t, dx) = \int_{\mathbb{R}} \phi(X(t, x))\rho^0(dx),$$

où X est le flot rétrograde défini comme la solution réversible de

$$\partial_t X + b(t, x)\partial_x X = 0 \quad \text{dans }]0, s[\times \mathbb{R}, \quad X(s, s, x) = x.$$

Il existe une fonction Borélienne \widehat{b} appelée représentant universel de b telle que $\widehat{b} = b$ p.p. et pour toute solution en dualité ρ ,

$$\partial_t \rho + \partial_x (\widehat{b}\rho) = 0 \quad \text{au sens des distributions.}$$

Cette notion a été utilisée dans le cas de l'équation des gaz sans pression [43]. Le cadre d'application est le caractère Lipschitzien à droite (OSL) (2.2.9) de la vitesse b . En effet, Filippov [88] a montré que cette condition permet d'assurer l'existence et l'unicité d'un flot caractéristique associé la vitesse b . Ce flot est appelé le *flot de Filippov* et est défini comme solution de l'inclusion différentielle $X'(t) \in \{\text{Convess}(b)(t, \cdot)\}(X(t))$ [9], où Convess est l'enveloppe convexe essentielle, définie par :

$$\{\text{Convess}(b)(t, \cdot)\}(x) = \bigcap_{r>0} \bigcap_{N \in \mathcal{N}_0} \text{Conv} [b(t, B(x, r) \setminus N)] ,$$

avec \mathcal{N}_0 l'ensemble des ensembles de mesure de Lebesgue nulle. La notation Conv correspond comme habituellement à l'enveloppe convexe. Dans le cadre du théorème ci-dessus, le flot de Filippov coïncide avec le flot rétrograde X du théorème.

Après avoir rappelé ces notions, nous retournons au cas de l'équation d'agrégation (2.2.4). Ici, la vitesse macroscopique n'est pas une donnée du problème mais dépend de la solution. Nous introduisons alors la définition :

Définition 2.2.2. On dit que $(\rho, S) \in C([0, T]; \mathcal{M}_b(\mathbb{R})) \times C([0, T], W^{1,\infty}(\mathbb{R}))$ est une solution en dualité de (2.2.4) si :

(i) il existe $\widehat{a}_\rho \in L^\infty((0, T) \times \mathbb{R})$ et $\alpha \in L^1_{loc}(0, T)$ tels que $\partial_x \widehat{a}_\rho \leq \alpha$ dans $\mathcal{D}'((0, T) \times \mathbb{R})$, $\widehat{a}_\rho = a(W' * \rho)$ a.e., et pour tout $0 < t_1 < t_2 < T$, ρ est solution en dualité sur (t_1, t_2) de

$$\partial_t \rho + \partial_x(\widehat{a}_\rho \rho) = 0. \quad (2.2.10)$$

(ii) l'équation $-\partial_{xx} S + S = \rho$ est satisfaite au sens faible.

Formellement, le caractère OSL de la vitesse se vérifie simplement. En effet, dans le cas où $\rho \geq 0$, qui est le cas physique, on a, en utilisant l'équation elliptique sur S dans (2.2.4) et le fait que a est croissante et Lipschitzienne :

$$\partial_x(a(\partial_x S)) = a'(\partial_x S) \partial_{xx} S \leq cS,$$

au sens des distribution, avec c une constante de Lipschitz de la fonction a . Nous sommes donc dans le cadre d'utilisation des solutions en dualité. Les résultats de [A13] se résument alors en :

Théorème 2.2.3 (Theorem 3.9 et 3.10 de [A13]). *Supposons ρ^0 donné dans $\mathcal{P}_1(\mathbb{R})$. Alors pour tout $T > 0$, il existe une unique solution en dualité (ρ, S) de (2.2.4) qui satisfait*

$$\partial_t \rho + \partial_x J = 0, \quad J = -\partial_x(A(\partial_x S)) + a(\partial_x S)S \quad \text{a.e.}, \quad (2.2.11)$$

avec A une primitive de la fonction a . De plus $\rho = X_{\#} \rho^{ini}$ où X est le flot rétrograde pour la fonction OSL $a(\partial_x S)$.

Par ailleurs, si $(f_\varepsilon, S_\varepsilon)$ est une solution du modèle cinétique (2.2.2), alors quand $\varepsilon \rightarrow 0$ on a :

$$\begin{aligned} \rho_\varepsilon &\rightharpoonup \rho & \text{dans} & C([0, T]; \mathcal{M}_b(\mathbb{R}) - \sigma(\mathcal{M}_b, C_0)), \\ S_\varepsilon &\rightharpoonup S & \text{dans} & C([0, T]; W^{1,\infty}(\mathbb{R})) - \text{faible}. \end{aligned}$$

Avant de présenter les principales lignes de la démonstration, nous commentons ce résultat en soulignant l'importance de (2.2.11) pour l'unicité des solutions. Un contre-exemple à l'unicité est en effet donné dans la Section 5 de [A13]. La définition du flux J dans (2.2.11) vient du calcul formel suivant :

$$a(\partial_x S)\rho = -a(\partial_x S)\partial_{xx} S + a(\partial_x S)S = -\partial_x A(\partial_x S) + a(\partial_x S)S,$$

où on a utilisé le fait que $-\partial_{xx} S + S = \rho$. Bien que formel, ce calcul peut se justifier en utilisant le calcul de Vol'pert [179] (chain rule pour les fonctions BV , voir aussi [2]) qui implique qu'il existe une fonction \widehat{a}_ρ telle que $\widehat{a}_\rho = a(\partial_x S)$ a.e. et

$$-\partial_x A(\partial_x S) + a(\partial_x S)S = \widehat{a}_\rho \rho.$$

Cette définition du flux permet donc de donner un sens au produit dans le terme de divergence. Une telle idée a été proposée dans [145] pour le modèle Vlasov-Poisson-Fokker-Planck en dimension 1. Elle a été étendue dans le cas de la dimension 2 dans [158] au moyen des mesures de défaut pour définir le produit, mais l'unicité n'a pas été démontrée (voir aussi [104]). On réfère aussi à [80] pour une application au modèle de Keller-Segel. Pour ce dernier modèle, l'existence de solutions mesures a aussi été montré par des techniques de régularisation du potentiel dans [129].

Un exemple simple. Pour illustrer les difficultés soulevées par le problème de l'unicité, nous considérons le cas bien plus simple dans lequel la seconde équation de (2.2.4) est remplacée par $-\partial_{xx}S = \rho$ (voir aussi [A11]). Le modèle s'écrit :

$$\partial_t \rho + \partial_x (a(\partial_x S) \rho) = 0, \quad -\partial_{xx} S = \rho.$$

Le flux est alors défini par $J = -\partial_x A(\partial_x S)$. Par une intégration, nous obtenons l'équation de Burgers-Hopf pour $\partial_x S$:

$$\partial_t \partial_x S + \partial_x A(\partial_x S) = 0.$$

La fonction a étant croissante, sa primitive A est convexe. Il est bien connu que cette équation admet une unique solution seulement sous une condition d'entropie. En particulier, il existe une unique solution décroissante pour l'équation de Burgers-Hopf ci-dessus, i.e. satisfaisant l'inégalité d'entropie $\partial_{xx} S \leq 0$ ce qui équivaut à $\rho \geq 0$. Cette dernière inégalité doit donc être vue comme une inégalité de type Oleinik. En conclusion, l'unicité n'est obtenue que sous la condition $\rho \geq 0$; bien évidemment cette condition est imposé par le modèle, car ρ modélise une densité de population.

Revenons maintenant au cas étudié dans le Théorème 2.2.3.

Idée de la preuve : La démonstration de l'existence se déroule en deux principales étapes :

- On suppose que la donnée initiale est une somme finie de masses de Dirac : $\rho^0 = \sum_{i=1}^n m_i \delta_{x_i^0}$. Alors on construit une solution au sens des distribution sous la forme $\rho = \sum_{i=1}^n m_i(t) \delta_{x_i(t)}$ en utilisant une dynamique de particules collantes pour définir la dynamique des agrégats.
- Nous passons ensuite à la limite $n \rightarrow +\infty$ en utilisant les résultats de stabilité des solutions en dualité (voir [42]).

La preuve de la limite hydrodynamique s'obtient en passant à la limite au sens des distributions dans (2.2.3) après avoir obtenu des estimations a priori sur la densité et la concentration du chemoattractant.

Pour l'unicité, nous utilisons le fait que $S = K * \rho$. En convolant (2.2.11) par K , nous déduisons

$$\partial_t \partial_x S + \partial_x A(\partial_x S) - a(\partial_x S) S + K * (-\partial_x A(\partial_x S) + a(\partial_x S) S) = 0.$$

Par rapport à l'exemple simple présenté ci-dessus pour lequel on remplace l'équation sur S par $-\partial_{xx} S = \rho$, cette équation est non-locale. En adaptant la technique de doublement de variable à la Kruzhkov nous pouvons alors montrer que, comme dans le cas de l'équation de Burgers-Hopf, cette équation admet une unique solution S pourvu que l'inégalité $\rho \geq 0$ soit satisfaite. Nous pouvons donc interpréter cette inégalité comme une condition d'entropie.

Remarque 2.2.4. Equivalence avec les flots gradients. Comme il l'a été souligné, l'équation d'agrégation dans le cas $a = Id$ a une structure naturelle de flot gradient. L'existence d'un flot gradient a été démontrée dans [54] (voir aussi [70] pour un modèle à deux espèces). La question de l'équivalence avec les solutions en dualité se pose donc et a été résolue dans le cas de la dimension 1 dans [A18]. Pour cela, nous avons étendu le résultat d'existence de solutions en dualité pour l'équation

$$\partial_t \rho = \partial_x (a(\partial_x W * \rho) \rho).$$

dans les deux cadres indépendants suivants :

- $a = Id$ et W satisfait (2.2.6), ce qui correspond au cadre de [54], et est de plus Lipschitzien ;
- $a \in C^1(\mathbb{R})$ croissante et Lipschitzienne et $W'' = \delta_0 + w$ avec $w \in C^1(\mathbb{R})$ où δ_0 est la masse de Dirac en 0.

Nous avons alors démontré que dans le premier cas, solutions en dualités et flots gradients sont équivalents [A18, Theorem 4.1]. Par contre, pour a non-linéaire, nous ne pouvons étendre la notion de flot gradient que dans le cas $W = \frac{1}{2}|x|$; dans ce cas les deux notions de solutions coïncident [A18, Theorem 5.7].

Notons que dans le cas des flots gradients, la vitesse macroscopique est définie comme l'élément de norme minimale du sous-différentiel $\partial\mathcal{W}$ de l'énergie

$$\mathcal{W}(\rho) = \frac{1}{2} \int K(x-y) d\rho(x) d\rho(y).$$

Dans l'approche décrite dans ce chapitre, elle est obtenue par la chain rule pour les fonctions BV (ou calcul de Vol'pert). Nous référons finalement à un autre résultat récent d'équivalence dans le cas répulsif [40].

2.3 Solutions mesures définies par un flot en dimension supérieure

2.3.1 Solutions définies par un flot

En dimension supérieure, la théorie des solutions en dualité n'est pas complète [44]. Nous employons donc une autre stratégie, basée sur la définition de solutions en mesure pour une loi de conservation de Poupaud & Rascle [156]. Nous en rappelons les grandes lignes : considérons la loi de conservation

$$\partial_t u + \operatorname{div}(bu) = 0; \quad u(t=0) = u^0. \quad (2.3.1)$$

Les caractéristiques sont les solutions de l'équation :

$$\frac{d}{dt} X(t, x) = b(t, X(t, x)); \quad X(0, x) = x. \quad (2.3.2)$$

Lorsque les caractéristiques sont bien définies, par exemple quand b est localement Lipschitzienne uniformément en t , alors la solution de (2.3.1) est telle que : pour tout fonction $\phi \in C_0(\mathbb{R}^d)$, on a

$$\int_{\mathbb{R}^d} \phi(x) u(t, dx) = \int_{\mathbb{R}^d} \phi(X(t, x)) u_0(dx), \quad \text{pour } t \in [0, T].$$

On dit que u est la *mesure pushforward* (ou mesure image) de u_0 par X . Cette définition reste aussi valable lorsque u_0 est mesure et X continue.

Pour pouvoir considérer des vitesses b plus singulières, pouvant avoir des discontinuités, il convient de pouvoir définir des caractéristiques (2.3.2). Pour cela, Filippov [88] a montré l'existence et l'unicité de caractéristique, appelé *flot de Filippov*, dans le cas où b est Lipschitzien à droite (OSL). Ceci a permis d'étendre le résultat d'existence de solutions à (2.3.1) :

Théorème 2.3.1. [Poupaud & Rascle [156]] Soient $T > 0$, $b \in L^1([0, T], L^\infty(\mathbb{R}^d))$ satisfaisant la condition OSL :

$$(b(t, x) - b(t, y)) \cdot (x - y) \leq \alpha(t) \|x - y\|^2, \quad \text{pour } \alpha \in L^1(0, T).$$

Alors pour tout $u_0 \in \mathcal{M}_b(\mathbb{R}^d)$, il existe une unique solution mesure u de l'équation (2.3.1), de plus elle est définie par la mesure image : $u(t) = X(t)_\# u_0$, où X est le flot de Filippov associé à la vitesse b .

De plus, un résultat de stabilité a été récemment établi :

Théorème 2.3.2. [Bianchini & Gloyer [38]] Soit $T > 0$. Supposons que $b_n \rightharpoonup b$ dans $L^1([0, T], L^1_{loc}(\mathbb{R}^d))$. Alors le flot de Filippov X_n généré par b_n converge localement dans $C([0, T] \times \mathbb{R}^d)$ vers le flot de Filippov X généré par b .

Après avoir rappelé ces résultats d'existence pour une loi de conservation scalaire avec une vitesse b donnée et OSL, nous revenons à l'équation d'agrégation dans le cas linéaire posé dans \mathbb{R}^d , $d \geq 1$:

$$\partial_t \rho = \operatorname{div}(\nabla W * \rho \rho), \quad \rho(0) = \rho^0, \quad (2.3.3)$$

avec un potentiel d'interaction W Lipschitzien et satisfaisant (2.2.6). Afin de donner un sens au produit dans le terme de divergence de cette équation, nous devons trouver une définition adaptée de la vitesse macroscopique, comme nous l'avons fait en 1D en utilisant le calcul de Vol'pert.

Le potentiel d'interaction W satisfait (2.2.6) et est Lipschitzien. Soit $(W_n)_{n \in \mathbb{N}^*}$ une suite de fonctions paires, $C^1(\mathbb{R}^d)$ régularisant W et telle que

$$\sup_{x \in \mathbb{R}^d \setminus B(0, \frac{1}{n})} |\nabla W_n(x) - \nabla W(x)| \leq \frac{1}{n}, \quad \text{pour tout } n \in \mathbb{N}^*.$$

Soit (ρ_n) une suite de mesures telle que $\rho_n \rightharpoonup \rho$ vaguement. Posons $a_n = \nabla W_n * \rho_n$. Alors, en utilisant la parité de W_n , pour toute fonction continue à support compact, on a :

$$\int_{\mathbb{R}^d} \phi(x) a_n(x) \rho_n(dx) = \frac{1}{2} \iint_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} (\phi(x) - \phi(y)) \nabla W_n(x - y) \rho_n(dx) \rho_n(dy).$$

Le terme $\phi(x) - \phi(y)$ s'annule quand $x = y$. En décomposant l'intégrale sur $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ dans le terme de droite entre l'intégrale sur un voisinage de la diagonale $D = \{(x, x), x \in \mathbb{R}^d\}$ et sur son complémentaire, on montre que

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} \int_{\mathbb{R}^d} \phi(x) a_n(x) \rho_n(dx) = \iint_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \setminus D} \phi(x) \nabla W(x - y) \rho(dx) \rho(dy),$$

Ceci conduit à définir le champs de vitesse, pour $\rho \in C([0, T], \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^d))$, par :

$$\widehat{a}_\rho(t, x) = - \int_{y \neq x} \nabla W(x - y) \rho(t, dy). \quad (2.3.4)$$

Par définition de la λ -convexité du potentiel W , on a :

$$\forall x, y \in \mathbb{R}^d \setminus \{0\}, \quad (\nabla W(x) - \nabla W(y)) \cdot (x - y) \geq \lambda \|x - y\|^2. \quad (2.3.5)$$

Donc, si ρ est positive, on déduit de la définition (2.3.4) et de la λ -convexité de W l'estimation OSL :

$$(\widehat{a}_\rho(t, x) - \widehat{a}_\rho(t, y)) \cdot (x - y) \leq -\lambda \|x - y\|^2 |\rho|(\mathbb{R}^d).$$

Par conséquent, pour une mesure ρ donnée, on peut, d'après le Théorème 2.3.1, définir un flot de Filippov X_ρ associé à la vitesse \widehat{a}_ρ et donc une solution mesure $\mu = X_\rho \# \rho^0$ de l'équation de conservation avec la vitesse \widehat{a}_ρ . Il reste alors à montrer que $\mu = \rho$, ce qui s'obtient avec des arguments de stabilité en se basant sur le Théorème 2.3.2. Finalement, le résultat s'énonce sous la forme :

Théorème 2.3.3. [Theorem 2.5 [A21]] Soient $T > 0$ et ρ^0 donné dans $\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^d)$. Supposons W Lipschitzien et satisfaisant (2.2.6). Il existe une unique flot caractéristique de Filippov X telle que la mesure image $\rho := X \# \rho^0$ est une solution de l'équation d'agrégation

$$\partial_t \rho + \operatorname{div}(\widehat{a}_\rho \rho) = 0, \quad \rho(0, \cdot) = \rho^0, \quad (2.3.6)$$

où \widehat{a}_ρ est défini par (2.3.4). De plus, $\rho \in C([0, T], \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^d))$ et est égal à la solution définie par les flots gradients.

Si ρ^0 et μ^0 sont deux mesures données dans $\mathcal{P}_2(\mathbb{R}^d)$, alors les mesures images correspondantes ρ et μ satisfont pour tout $t \in [0, T]$

$$d_{W2}(\rho(t), \mu(t)) \leq e^{-2\lambda t} d_W(\rho^0, \mu^0), \quad (2.3.7)$$

où d_{W2} est la distance de Wasserstein définie en (2.1.5).

Idée de la preuve de l'unicité. Les arguments pour l'existence reprennent ceux du cas de la dimension 1 comme cela l'a été énuméré ci-dessus. Nous donnons maintenant un calcul formel afin de présenter l'idée permettant de conduire à l'unicité des solutions. Elle repose sur l'inégalité de contraction (2.3.7).

Soient $\rho = X_{\#}\rho^0$ et $\tilde{\rho} = \tilde{X}_{\#}\rho^0$ deux solutions dans $C([0, T], \mathcal{P}_2(\mathbb{R}^d))$. Introduisons la quantité

$$\mathcal{I} = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^d} (X(t, x) - \tilde{X}(t, x))^2 \rho^0(dx).$$

Cette quantité est reliée à la distance de Wasserstein définie en (2.1.5). Formellement on calcule :

$$\frac{d}{dt} \mathcal{I} = \int_{\mathbb{R}^d} (\hat{a}_{\rho}(t, X(t, x)) - \hat{a}_{\tilde{\rho}}(t, \tilde{X}(t, x))) \cdot (X(t, x) - \tilde{X}(t, x)) \rho^0(dx).$$

Par la définition (2.3.4) et en utilisant la parité de W , on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathcal{I} = & -\frac{1}{2} \iint_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \setminus D} (\nabla W(X(t, x) - X(t, y)) - \nabla W(\tilde{X}(t, x) - \tilde{X}(t, y))) \cdot \\ & (X(t, x) - X(t, y) - \tilde{X}(t, x) + \tilde{X}(t, y)) \rho^0(dx) \rho^0(dy). \end{aligned}$$

Avec la λ -convexité de W (2.3.5), nous déduisons

$$\frac{d}{dt} \mathcal{I} \leq -\frac{\lambda}{2} \iint_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \setminus D} (X(t, x) - X(t, y) - \tilde{X}(t, x) + \tilde{X}(t, y))^2 \rho^0(dx) \rho^0(dy).$$

Nous rappelons que $\lambda \leq 0$ et $|\rho^0|(\mathbb{R}^d) = 1$. Finalement

$$\frac{d}{dt} \mathcal{I} \leq -2\lambda \mathcal{I},$$

et nous concluons avec un Lemme de Gronwall que $X = \tilde{X}$. Les calculs menés ici se justifient rigoureusement grâce à un procédé de régularisation. \square

2.3.2 Résolution numérique

L'approximation numérique des solutions de l'équation d'agrégation (2.2.4) en dimension 1 ou (2.3.3) en dimension supérieure soulève plusieurs difficultés. L'une d'elles est que les solutions explosent en temps fini, formant des masses de Dirac. Une autre difficulté est due au fait que l'unicité n'est obtenue que sous un critère d'entropie et de définition adéquate de la vitesse macroscopique, comme précisé dans les parties précédentes de ce chapitre. Il n'existe actuellement que peu de travaux sur la résolution numérique de telles lois de conservation scalaire avec une vitesse non locale. Les travaux [53, 65] proposent des méthodes de discrétisation mais ne s'intéressent pas au cas des solutions mesurées après explosion.

Compte tenu des résultats d'existence présentés ci-dessus, l'idée est de discrétiser l'équation (2.2.11) en dimension 1 (Théorème 2.2.3) et l'équation (2.3.6) en dimension supérieure (Théorème 2.3.3). Nous présentons plus précisément la discrétisation pour le modèle (2.2.4) en dimension 1. La vitesse macroscopique est alors définie à partir de la définition du flux J dans (2.2.11) grâce au calcul de Vol'pert. Supposons, pour la présentation, que la fonction $a \in C^1(\mathbb{R})$ et est telle que $|a| \leq a_M$ (des hypothèses moins restrictives sont présentées dans [A19]). Soient $(x_i)_{i \in \mathbb{Z}}$ un maillage cartésien de pas δx et δt le pas de temps, $t_n = n\delta t$, $n \in \mathbb{N}$. Dénotons ρ_i^n une valeur approchée de $\rho(t_n, x_i)$ et S_i^n une valeur approchée de $S(t_n, x_i)$. Nous considérons la discrétisation de type Lax-Friedrichs :

$$\begin{aligned} \rho_i^{n+1} &= \rho_i^n (1 - \lambda a_M) + \frac{\lambda}{2} a_M (\rho_{i-1}^n + \rho_{i+1}^n) + \lambda (J_{i-1/2}^n - J_{i+1/2}^n), \\ J_{i+1/2}^n &= -\frac{A(\partial_x S_{i+1}^n) - A(\partial_x S_i^n)}{\delta x} + a_{i+1/2}^n \frac{S_{i+1}^n + S_i^n}{2}, \end{aligned} \tag{2.3.8}$$

où $\lambda = \frac{\delta t}{\delta x}$. On utilise la discrétisation $\partial_x S_{i+1}^n = \frac{S_{i+2}^n - S_i^n}{2\delta x}$ où $(S_i^n)_i$ est obtenue par discrétisation de l'équation elliptique satisfaite par S :

$$-\frac{S_{i+1}^n - 2S_i^n + S_{i-1}^n}{\delta x^2} + S_i^n = \rho_i^n.$$

On définit la vitesse macroscopique par :

$$a_{i+1/2}^n = \begin{cases} 0 & \text{si } \partial_x S_{i+1}^n = \partial_x S_i^n, \\ \frac{A(\partial_x S_{i+1}^n) - A(\partial_x S_i^n)}{\partial_x S_{i+1}^n - \partial_x S_i^n} & \text{sinon.} \end{cases}$$

Avec cette définition, on déduit de la seconde équation de (2.3.8)

$$J_{i+1/2}^n = a_{i+1/2}^n \frac{\rho_{i+1}^n + \rho_i^n}{2}.$$

Par conséquent, nous pouvons réécrire le schéma (2.3.8) sous la forme

$$\rho_i^{n+1} = \rho_i^n \left(1 - \lambda a_M + \frac{\lambda}{2}(a_{i-1/2}^n - a_{i+1/2}^n)\right) + \frac{\lambda}{2} \left(a_M + a_{i-1/2}^n\right) \rho_{i-1}^n + \frac{\lambda}{2} \left(a_M - a_{i+1/2}^n\right) \rho_{i+1}^n. \quad (2.3.9)$$

On en déduit que si la condition de type CFL,

$$\lambda := \frac{\delta t}{\delta x} \leq \frac{1}{2a_M}, \quad (2.3.10)$$

est vérifiée alors le schéma est positif. On définit alors (ρ_δ, S_δ) une reconstruction constante par morceaux égale à (ρ_i^n, S_i^n) sur chaque cellule $[t_n, t_{n+1}) \times [x_i, x_{i+1})$. On peut alors montrer (voir [A19, Theorem 2.5]) que la suite (ρ_δ, S_δ) converge, quand δt et δx tendent vers 0 en satisfaisant la condition (2.3.10), vers la solution du Théorème 2.2.3.

La Figure 2.3 présente le résultat d'une simulation effectuée avec le schéma (2.3.8) présenté ci-dessus. La donnée initiale est choisie régulière et composée de trois bosses : $\rho^0(x) = e^{-10(x-1.25)^2} + 0.8e^{-20x^2} + e^{-10(x+1)^2}$. La fonction a est définie par $a(x) = 2/\pi \operatorname{Arctan}(10x)$, de sorte que $a_M = 1$. On observe sur la Figure 2.3 la formation de masses de Dirac qui en temps fini s'agrègent en une seule masse de Dirac.

La discrétisation proposée en une dimension peut s'adapter à la dimension supérieure. Nous rappelons qu'en dimension supérieure nous nous limitons au cas où a est linéaire et où le potentiel d'interaction W et Lipschitzien et satisfait (2.2.6). La vitesse macroscopique est alors définie par (2.3.4) et nous cherchons à discrétiser (2.3.6). Pour cela il suffit de reprendre le schéma (2.3.9) et de l'écrire sur un maillage cartésien. La vitesse macroscopique discrète doit alors être calculée par une discrétisation de la formule (2.3.4), par exemple en utilisant une méthode des rectangles (voir [A21] pour plus de détails). La convergence d'un tel schéma vers la solution du Théorème 2.3.3, sous une contrainte sur le pas de temps de type CFL, est démontrée dans [A21].

Nous présentons dans la Figure 2.4 le résultat d'une simulation réalisée sur un carré de longueur 1, pour une donnée initiale composée de trois bosses :

$$\begin{aligned} \rho^0(x, y) = & \exp(-C_x(x - 1/4)^2 - C_x(y - 1/3)^2) + \exp(-C_x(x - 0.8)^2 - C_x(y - 0.6)^2) \\ & + 0.9 \exp(-C_x(x - 0.4)^2 - C_x(y - 0.6)^2), \end{aligned}$$

avec $C_x = 100$. Le potentiel d'interaction choisi pour cette simulation est $W(x) = 1 - e^{-5|x|}$. Nous observons qu'au bout de 2 secondes, les trois bosses initiales ont formé trois agrégats très piqués. Ces agrégats interagissent entre eux et finissent par s'agglutiner en temps fini au centre de masse. Cette dynamique est attendue, car il a été démontré dans [54] que les solutions de l'équation d'agrégation pour une donnée initiale à support compacte convergent en temps fini vers une masse de Dirac au centre de masse.

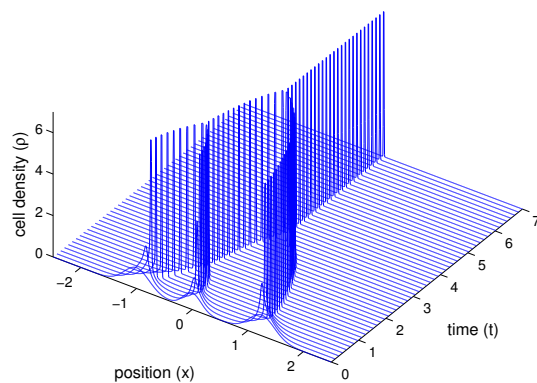


FIGURE 2.3 – Dynamique de la densité ρ solution de l'équation d'agrégation (2.2.4) obtenue grâce au schéma (2.3.8). On observe la formation de masses de Dirac qui s'agrègent en une seule masse de Dirac en temps fini.

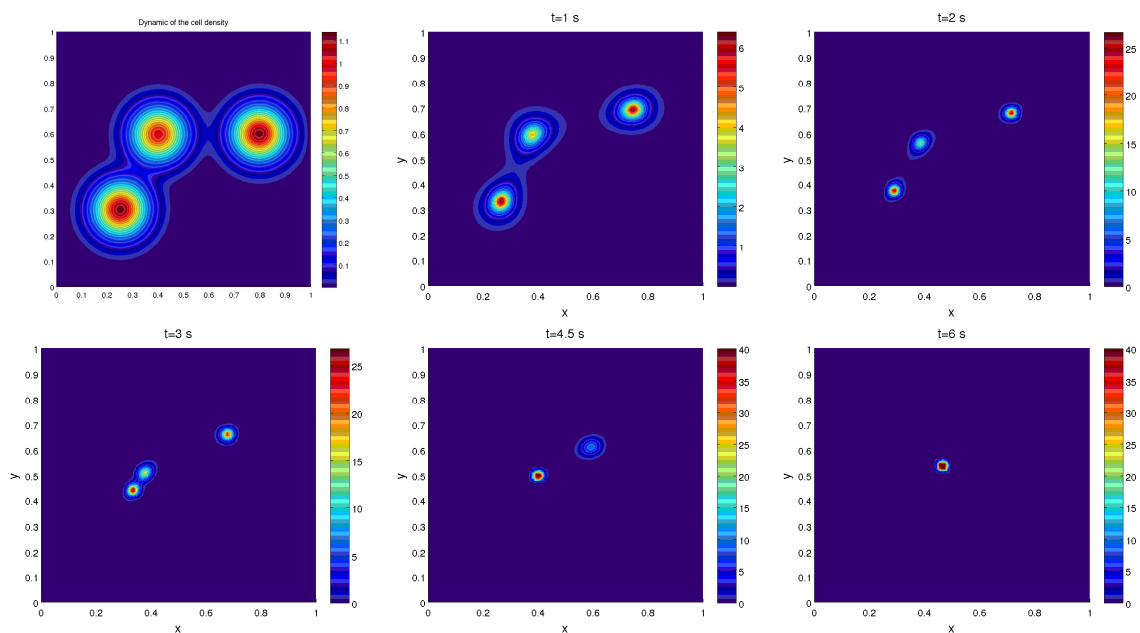


FIGURE 2.4 – Dynamique de la densité ρ avec une donnée initiale composée de trois bosses dans le cas $W(x) = 1 - e^{-5|x|}$.

Chapitre 3

Auto-organisation de communautés cellulaires : swarming chez *Bacillus subtilis*

Ce chapitre résume les articles [A9, A10].

3.1 Introduction et modélisation

3.1.1 Motivation : swarming chez *Bacillus subtilis*

Bacillus subtilis est un des modèles de bactéries les plus utilisés dans les laboratoires pour étudier des questions fondamentales concernant la croissance des bactéries, leur métabolisme, la création d'enzymes. C'est aussi un modèle important pour étudier le comportement social en large communauté des bactéries. De récentes expériences se sont intéressées à la prolifération de la bactérie *Bacillus subtilis* [109, 121, 122]. Il a en particulier été observé que dans un milieu riche en substrat, ces cellules migrent en colonies en formant un réseau complexe de ramifications dendritiques. Ce phénomène de migration collective impliquant une interaction coopérative entre les cellules est appelé *swarming*. Un tel réseau obtenu dans une boîte de Petri par les scientifiques de l'Institut de Génétique et Microbiologie de Paris est représenté dans la Figure 3.1. Les bactéries ont été inoculées au centre de la boîte de Petri et ont migré en formant des dendrites au bout de quelques heures.

Dans une première étape, les cellules prolifèrent à l'intérieur de la colonie mère. Après un soudain phénomène d'explosion, un petit nombre de dendrites primaires se forment à partir de la colonie mère. La Figure 3.2 reporte les étapes de formation de ces dendrites. Elles sont constituées d'une seule couche de cellules que l'on peut distinguer en deux types : les *swarmers* hyper-mobiles à l'extrémité de la dendrite et les *supporters* avec une mobilité beaucoup plus faible et maintenus à une densité constante le long de la dendrite. La Figure 3.3 représente la composition d'une dendrite par marquage fluorescent. On constate que les cellules à l'extrémité de la dendrite sont hyper-flagellées et donc beaucoup plus mobiles que les cellules le long de la dendrite. Des branchements ont lieu lors de la migration à l'extrémité de la dendrite. Les observations expérimentales montrent aussi la sécrétion d'un surfactant, appelé *surfactine*, qui est essentiel à la migration des cellules, ainsi que la production d'au minimum 15 gènes. Un processus de communication via l'émission de signaux chimiques a donc lieu entre les cellules. Finalement les expériences ont été réalisées dans un milieu très riche en substrat, ce qui semble indiquer que le processus

de branchement ne dépend pas de la concentration en nutriment. Ainsi, les modèles à la Gray-Scott [105] qui sont nutriments-dépendants et ont permis avec succès de modéliser le branchement [99, 124, 126, 132, 135, 139] ne peuvent pas être utilisés ici.

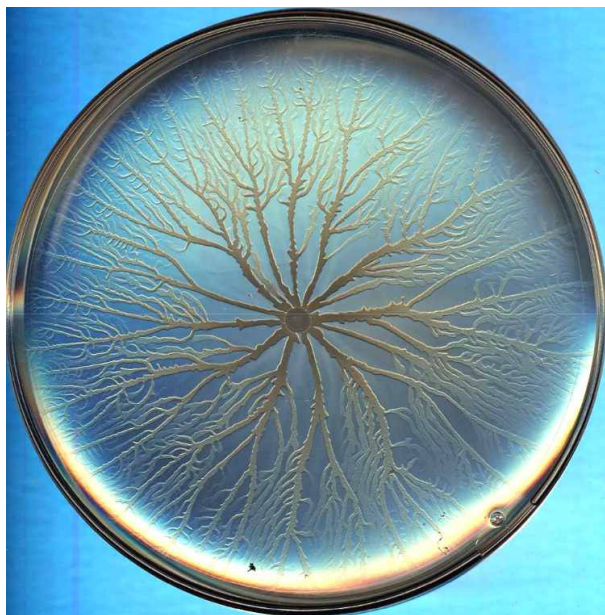


FIGURE 3.1 – Formation d'un arbre dendritique durant le processus de colonisation de la bactérie *Bacillus subtilis*

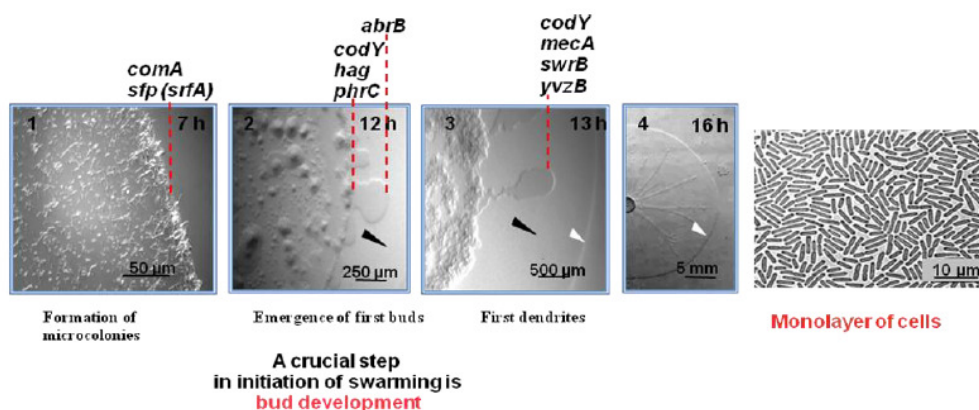


FIGURE 3.2 – Processus de formation d'une dendrite. Des microcolonies se regroupent au bord de la colonie mère. Au bout de 12h on note l'émergence de quelques boutons à l'interface qui donnent naissance à des dendrites colonisant la boîte de Petri. Ces dendrites sont constituées d'une seule couche de bactéries *Bacillus subtilis*

Dans ce chapitre nous proposons une nouvelle classe de modèles basés sur les observations décrites dans cette introduction permettant de prédire les branchements sans limitation de nutriment. Le modèle le plus complet, présenté dans [A9] et rappelé dans la sous-section suivante, est aussi celui le plus précis d'un point de vue biologique. Il se relève cependant trop complexe pour son étude mathématique et est

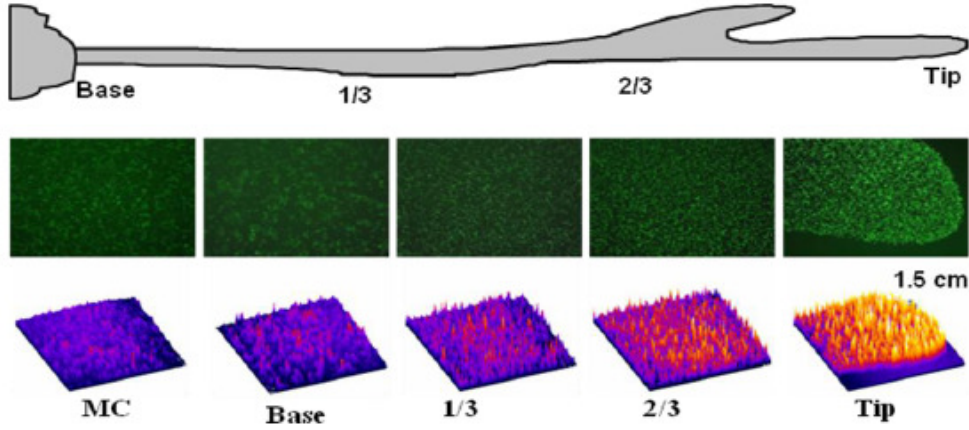


FIGURE 3.3 – Analyse par microfluorescence d’une dendrite. La composition varie suivant que l’on se trouve proche de la colonie mère ou à l’extrémité de la dendrite (*tip*) : les bactéries du tip sont fortement flagellées et donc très mobiles alors que le long de la dendrite les bactéries sont peu mobiles.

donc simplifié. Le modèle simplifié ne s’intéresse qu’à la densité des *swarmers* dans l’extrémité de la dendrite et décrit leur dynamique sous l’effet de l’interaction de forces d’agrégation et de répulsion dans la direction du surfactant. On obtient un système de 3 EDP présenté Section 3.2. Nous proposons ensuite une étude de l’existence d’ondes sous forme de plateau pour ce modèle simplifié.

3.1.2 Modélisation

A partir des observations ci-dessus, nous introduisons les quantités mathématiques :

- $n(t, x)$ la densité des *swarmers* pour laquelle on considère une équation de conservation. Les *swarmers* se déplacent par effet chimiotactique dû à la surfactine S et à une substance chimique notée c qui a un rôle attractif ;
- $c(t, x)$ la concentration de l’agent chimique produit par les *swarmers* qui leur permettent de s’attirer mutuellement. Le taux de production est noté α_c , le coefficient de diffusion D_c et le facteur de dégradation τ_c ;
- $S(t, x)$ la densité de la surfactine qui est produite par les *supporters* et la colonie mère avec des taux de production respectifs α_f et α_s . Le coefficient de diffusion est noté D_s , le facteur de dégradation τ_s ;
- $D_m(t, x)$ la trace laissée par les *swarmers*, produite par ceux-ci avec un taux d_m ;
- m_{col} la densité de population de la colonie mère ;
- $f(t, x)$ la densité des *supporters* diffusant dans le milieu avec un coefficient de diffusion D_m . Les *supporters* sont engendrés par mitoses par les *swarmers* avec un taux B_n et par les *supporters* avec un taux $B_f(1 - f)$.

Le système complet s’écrit :

$$\begin{cases} \partial_t n + \operatorname{div}(n(1-n)\nabla c - n\nabla S) = 0, \\ -D_c c + \tau_c c = \alpha_c n, \\ \partial_t S - D_s \Delta S + \tau_s S = \alpha_s m_{col} + \alpha_f f, \\ \partial_t D_m = d_m n, \\ \partial_t f - \operatorname{div}(D_m \nabla f) = B_f f(1-f) + B_n n, \end{cases} \quad (3.1.1)$$

Nous présentons des simulations numériques de ce modèle effectuées grâce au logiciel FreeFem++ [110]. On se place dans un domaine borné $\Omega = [0, L] \times [0, L] \subset \mathbb{R}^2$, le système étant complété par des conditions de Neumann aux bords pour c et S et des conditions de flux nul aux bords pour la densité des swarmers n . Les paramètres choisis sont $D_c = 0.001$, $\tau_c = 1$, $\alpha_c = 1$, $D_s = 0.5$, $\tau_s = 10$, $\alpha_s = 2$, $\alpha_f = 30$, $d_m = 50$, $B_f = 0$, $B_n = 1$. La donnée initiale pour la densité des *swarmers* est un inoculum injecté dans un petit domaine : $n(0, x) = n_0(x) = 1$ sur l'ensemble $I = \{x = (x_1, x_2) : 0.16 < x_1^2 + x_2^2 < 0.25\}$ et $n(0, x) = 0$ à l'extérieur de ce domaine. Afin d'éviter des couches initiales, la concentration initiale de la surfactine, $S(0, x) = S_0(x)$, est obtenu par résolution du problème

$$-D_s \Delta S_0 + \tau_s S_0 = \alpha_s m_{col}.$$

Finalement, on choisit $D_m(0, x) = 0$, $f(0, x) = 0$ et $m_{col}(x_1, x_2) = 3$ sur l'ensemble $\{x = (x_1, x_2) : x_1^2 + x_2^2 < 0.16\}$ et 0 ailleurs.

Les résultats numériques sont représentés dans la Figure 3.4 pour 5 temps successifs. Avec nos choix de paramètres, les *swarmers* présents dans le *tip* de la colonie forment un plateau se déplaçant vers l'extérieur du domaine. De plus nous observons plusieurs branchements dans la dynamique, ce qui est compatible avec les observations expérimentales (voir Figure 3.1). Ce mécanisme de branchement est très différent de celui observé pour les systèmes de réaction-diffusion étudiés dans [99, 124, 135, 126] puisqu'il n'est pas dû à un manque de nutriment.

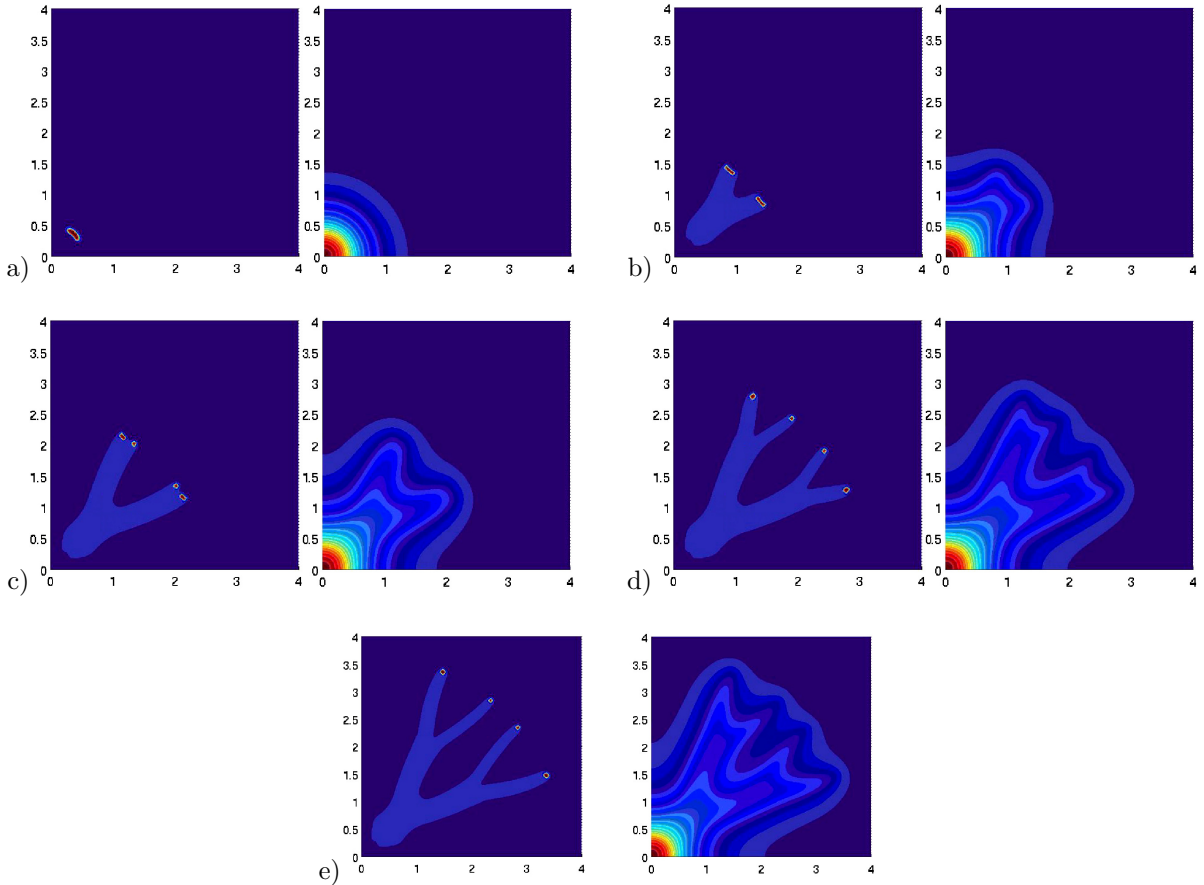


FIGURE 3.4 – Dynamique en temps de la densité des swarmers et des supporteurs $n + f$ (gauche) et de la concentration de la surfactine S (droite) calculé avec le système (3.1.1). Les résultats sont présentés pour 5 temps successifs, la figure a) correspondant à la donnée initiale.

3.2 Existence d'ondes en forme de plateaux

Afin de mener une étude mathématique, nous simplifions le système (3.1.1) en un système de 3 EDP en ne gardant que la densité des swarms n , la concentration de l'agent chimique attractif c qui joue le rôle de chemoattractant, et la concentration de la surfactine S qui agit comme un agent répulsif. Le système simplifié adimensionné s'écrit alors :

$$\begin{cases} \partial_t n + \operatorname{div} (n(1-n)\nabla c - n\nabla S) = 0, \\ -D_c \Delta c + c = \alpha_c n, \\ \partial_t S - D_s \Delta S + S = \alpha_s n. \end{cases} \quad (3.2.1)$$

D'une manière plus générale, ce système représente un modèle d'auto-organisation pour une communauté de cellules capable de produire un des agents chimiques attractifs et répulsifs (voir d'autres applications dans [99, 148, 134]). La sensibilité logistique $n(1-n)$ pour le chemo-attractant tient compte des effets de réduction de la réponse cellulaire lorsque la densité cellulaire devient élevée [113, 149, 152]. Ceci prévient les effets de surpopulation et d'un point de vue mathématiques permet d'éviter les effets d'explosion en temps fini des solutions faibles [171] comme c'est le cas pour le modèle de Keller-Segel (voir par exemple [39, 115, 116]). Dans le cas d'absence de surfactine, le système résultant a été étudié par plusieurs auteurs [48, 49, 69, 78].

Un outil mathématique important pour étudier les phénomènes de migration à vitesse constante est la recherche d'onde de propagation ou *traveling wave*. C'est une solution particulière du système (3.2.1) en translation uniforme à vitesse constante notée σ . Elle est obtenue naturellement en une dimension d'espace. Nous nous focalisons donc sur le système :

$$\begin{cases} \partial_t n + \partial_x (n(1-n)\partial_x c - n\partial_x S) = 0, \\ -D_c \partial_{xx} c + c = \alpha_c n, \\ \partial_t S - D_s \partial_{xx} S + S = \alpha_s n. \end{cases} \quad (3.2.2)$$

La recherche de traveling waves consiste donc à rechercher des solutions particulières sous la forme $n(t, x) = n(x - \sigma t)$, $c(t, x) = c(x - \sigma t)$, $S(t, x) = S(x - \sigma t)$. Parmi les traveling waves, on s'intéresse plus particulièrement à celles sous forme de plateau [112] :

Définition 3.2.1. On dit que le système (3.2.2) admet une solution sous la forme d'une onde de propagation en forme de plateau, ou *traveling plateau*, s'il existe une traveling wave (n, c, S) à la vitesse σ telle qu'il existe $L > 0$ pour lequel $n = 0$ sur $\mathbb{R} \setminus (0, L)$ et $n > 0$ sur $(0, L)$.

Nous n'avons pas de résultat général d'existence pour ces traveling plateaux, mais seulement dans les cas particuliers où la masse totale est petite en négligeant la dégradation du surfactant et où la diffusion du surfactant est négligeable $D_s \ll 1$. Dans un premier temps, nous étudions l'existence de plateaux stationnaires qui sont des traveling waves à vitesse nulle. Ensuite, nous présentons les résultats d'existence de traveling plateaux obtenus dans [A9, A10].

3.2.1 Plateaux stationnaires

Nous recherchons les solutions du système à l'équilibre :

$$\begin{cases} \partial_x (n(1-n)\partial_x c - n\partial_x S) = 0, \\ -D_c \partial_{xx} c + c = \alpha_c n, \\ -D_s \partial_{xx} S + S = \alpha_s n, \end{cases} \quad (3.2.3)$$

complété avec les conditions aux bords

$$n(\pm\infty) = c(\pm\infty) = S(\pm\infty) = 0. \quad (3.2.4)$$

Avec ces conditions, une intégration de la première équation donne

$$n[(1-n)\partial_x c - \partial_x S] = 0.$$

Nous pouvons donc distinguer deux régions : la zone où $n = 0$ et la région où

$$n = 1 - \frac{\partial_x S}{\partial_x c} > 0. \quad (3.2.5)$$

Il y a donc un saut en n à l'interface entre ces régions, satisfaisant les conditions de Rankine-Hugoniot. La convexité du flux est déterminée par le signe de $\partial_x c$. Ces sauts satisfont les conditions d'entropie si, soit $n = 0$ à gauche, $n > 0$ à droite du saut et $\partial_x c > 0$ au point du saut ; soit $n > 0$ à gauche, $n = 0$ à droite et $\partial_x c < 0$ au niveau du saut.

Théorème 3.2.2. [Theorem 2.1 et 3.3 [A10]] *Supposons que $\gamma := \frac{\alpha_s D_c}{\alpha_c D_s} < 1$. Supposons de plus être dans l'un des deux cas suivants :*

(i) *L est suffisamment petit,*

(ii) *$|\delta|$ est suffisamment petit, avec $\delta = L(D_s^{-1/2} - D_c^{-1/2})$.*

Alors il existe une unique solution entropique de (3.2.3) telle que $n = 0$ sur $\mathbb{R} \setminus [0, L]$, $n > 0$ sur $(0, L)$, $n \in C(0, L)$ et symétrique par rapport à $x = L/2$. De plus sur $(0, L)$ on a $n(x) = 1 - \gamma + O(L)$ dans le cas (i), $n(x) = 1 - \gamma + O(|\delta|)$ dans le cas (ii).

Remarque 3.2.3. Nous soulignons que la condition $\gamma < 1$ signifie que l'attraction domine la répulsion, ce qui est clairement nécessaire pour avoir la formation de plateaux.

Idée de la preuve.

Tout d'abord, avec le changement d'échelle $x \rightarrow Lx$, le support de n où (3.2.5) est vérifiée devient $[0, 1]$. Les solutions c et S vérifiant les deux dernières équations de (3.2.3) s'expriment explicitement en fonction de n . Avec les conditions aux bords (3.2.4), on obtient pour $x \in \mathbb{R}$:

$$\partial_x c = -\frac{\alpha_c L_c^2}{2} \left(\int_0^x e^{L_c(y-x)} n(y) dy - \int_x^1 e^{L_c(x-y)} n(y) dy \right), \quad (3.2.6)$$

$$\partial_x S = -\frac{\alpha_s L_s^2}{2} \left(\int_0^x e^{L_s(y-x)} n(y) dy - \int_x^1 e^{L_s(x-y)} n(y) dy \right), \quad (3.2.7)$$

où $L_s = L/\sqrt{D_s}$, $L_c = L/\sqrt{D_c}$. La formule (3.2.5) se réécrit alors sous la forme d'un problème de point fixe :

$$n = \mathcal{F}[n] := 1 - \gamma \frac{F[L_s, n]}{F[L_c, n]}, \quad (3.2.8)$$

avec

$$F[L_i, n](x) = -\int_0^x e^{L_i(y-x)} n(y) dy + \int_x^1 e^{L_i(x-y)} n(y) dy, \quad 0 < x < 1, \quad i = s, c. \quad (3.2.9)$$

On remarque que pour $L = 0$ ou $D_s = D_c$, alors $L_s = L_c$, et le problème de point fixe (3.2.8) admet la solution triviale : $n = 1 - \gamma$. Par symétrie, on peut réduire l'intervalle d'étude à $[0, 1/2]$.

L'idée de la preuve consiste alors à appliquer le théorème du point fixe de Banach dans la boule

$$B := \left\{ n \in C([0, 1/2]) : \|n - n_0\|_\infty < \frac{1 - \gamma}{2} \right\},$$

de l'espace de Banach $C([0, 1/2])$. Par symétrie, $\partial_x c$ et $\partial_x S$ s'annulent en $x = 1/2$. On peut alors mettre $(x - 1/2)$ en facteur dans l'expression (3.2.9) et donner un sens à l'application \mathcal{F} définie en (3.2.8). On montre alors que cette application est contractante sur la boule B pour L ou δ petits.

3.2.2 Traveling plateaux

Après avoir étudié ci-dessus l'existence de solutions stationnaires, qui peuvent être vues comme des traveling waves à vitesse nulle, nous expliquons ici comment étendre l'analyse à l'existence de traveling plateaux avec une vitesse non nulle. Nous ne considérons ici que le cas où la dégradation de la surfactine est négligée dans (3.2.2). En une dimension le système s'écrit :

$$\begin{cases} \partial_t n + \partial_x[(1-n)n\partial_x c - n\partial_x S] = 0, \\ -D_c \partial_{xx} c + c = \alpha_c n, \\ \partial_t S - D_s \partial_{xx} S = \alpha_s n. \end{cases} \quad (3.2.10)$$

On recherche des plateaux de longueur L se déplaçant à la vitesse σ donc des solutions particulières sous la forme $n(x - \sigma t)$, $c(x - \sigma t)$ et $S(x - \sigma t)$. Avec le changement d'échelle $x \rightarrow Lx$ et $\sigma \rightarrow L\sigma$, le système précédent se réduit à :

$$\begin{cases} -\sigma L^2 \partial_x n + \partial_x[(1-n)n\partial_x c - n\partial_x S] = 0, \\ -\frac{D_c}{L^2} \partial_{xx} c + c = \alpha_c n, \\ -\sigma \partial_x S - \frac{D_s}{L^2} \partial_{xx} S = \alpha_s n, \end{cases} \quad (3.2.11)$$

avec

$$n > 0 \quad \text{sur } (0, 1), \quad n = 0 \quad \text{sinon.} \quad (3.2.12)$$

Comme nous recherchons un plateau se déplaçant dans le sens des x croissants, ce système, défini sur \mathbb{R} , est complété par les conditions aux bords sur c et S :

$$c(\pm\infty) = 0, \quad S(-\infty) = S_\infty, \quad S(+\infty) = 0. \quad (3.2.13)$$

La valeur S_∞ est aussi une inconnue du problème.

De même que précédemment en intégrant l'équation sur n , on obtient la formulation sous forme de point fixe : $n = 1 - \frac{\sigma L^2 + \partial_x S}{\partial_x c}$ pour $x \in [0, 1]$. On peut alors étendre le résultat de la section précédente à l'existence de petit traveling plateau, la vitesse σ étant déterminé de sorte que $\sigma L^2 + \partial_x S$ s'annule au même point que $\partial_x c$ afin de donner un sens au quotient définissant le point fixe.

Théorème 3.2.4. [Theorem 4.1 [A10]] Soit $\gamma := \frac{\alpha_s D_c}{\alpha_c D_s} < 1$ et soit L suffisamment petit. Il existe une unique solution au système (3.2.11)–(3.2.13), telle que $n \in W^{1,\infty}(0, 1)$ et

$$n = 1 - \gamma + O(L) \quad \text{sur } (0, 1), \quad \sigma = \frac{\alpha_s(1 - \gamma)}{2D_s} + O(L), \quad S_\infty = 2D_s + O(L).$$

De plus, c est concave sur $(0, 1)$ et S est décroissante sur \mathbb{R} .

Remarque 3.2.5. Il paraît naturel de se demander si la condition de petitesse pour l'existence d'un plateau est nécessaire. Des simulations numériques présentées dans [A10] montrent que pour des plateaux plus grands, on observe numériquement que ceux-ci ne sont pas stables et se découpent en plusieurs plateaux plus petits. Des simulations numériques en dimension supérieure montrent alors l'apparition de branchements [A9].

3.2.3 Traveling plateaux pour une diffusion de surfactant nulle

Enfin, dans le cas d'une diffusion nulle de surfactant ($D_s = 0$), le système (3.2.10) s'écrit, en posant $v = -\partial_x S$, sous la forme d'un système hyperbolique avec un couplage non-local

$$\begin{cases} \partial_t n + \partial_x((n(1-n)\partial_x c + nv)) = 0, \\ \partial_t v + \partial_x(\alpha_s n) = 0, \\ -D_c \partial_{xx} c + c = \alpha_c n. \end{cases} \quad (3.2.14)$$

La recherche de traveling waves conduit à considérer le système :

$$\begin{aligned} -\sigma n' + (n(1-n)c' + nv)' &= 0, \\ -\sigma v' + \alpha n' &= 0, \\ -D_c c'' + \tau_c c &= n. \end{aligned} \tag{3.2.15}$$

On recherche des solutions faibles avec n nul à l'extérieur d'un domaine borné. Les relations de saut de Rankine-Hugoniot impliquent qu'à l'endroit des sauts, les solutions doivent satisfaire :

$$n(-\sigma + (1-n)c' + v) = 0, \quad -\sigma v + \alpha n = 0.$$

Par conséquent, la solution constante $(n, v) = (1, \sigma)$ existe si sa vitesse satisfait la relation $\sigma^2 = \alpha$, et il peut être connecté à l'état $(n, v) = (0, 0)$. Il y a alors deux ondes de chocs à chaque extrémité du plateau. Par une étude de stabilité, dans l'esprit de [127], on peut montrer [A9] que ces chocs sont entropiques s'ils satisfont la condition nécessaire :

$$\frac{\sqrt{\alpha_c}(1 - \exp(-L/\sqrt{D_c}))}{2\sqrt{D_c}} > \sqrt{\alpha_s}. \tag{3.2.16}$$

On a alors les solutions plateaux sous la forme explicite suivante :

$$n(y) = \begin{cases} 1 & \text{for } 0 \leq y \leq L, \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases} \quad v(y) = \begin{cases} \sqrt{\alpha_s} & \text{for } 0 \leq y \leq L, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Chapitre 4

Modèles macroscopiques de croissance de tumeurs

Ce chapitre résume les travaux [A14, A16, A17, C6].

4.1 Introduction et modélisation

Récemment, la modélisation mathématique de la multiplication cellulaire dans un tissu a mené à de nombreuses études. En particulier, la croissance tumorale a retenu l'attention de mathématiciens, due à l'importance qu'a pris le cancer dans la santé publique. A l'échelle de la cellule, les modèles individus centrés (IBM) donnent une description précise des phénomènes à petites échelles [4, 81, 118]. Pour des phénomènes à plus grande échelle, des modèles macroscopiques ont été développés. Dans les travaux résumés dans ce chapitre nous nous focalisons sur ces modèles au niveau macroscopique. En particulier, en considérant les propriétés mécaniques des cellules tumorales, les outils de la mécanique des milieux continus ont permis de mettre en place des modèles continus [15, 16, 52, 60, 61, 163, 159] (voir aussi [51] pour une comparaison avec l'approche IBM). De tels modèles sont notamment utilisés pour des comparaisons avec des expériences médicales et en analyse d'images [62, 64, 170]. Une première classe de modèles, dont les travaux précurseurs remontent aux années 70 [106], a considéré que la multiplication cellulaire est limitée par les nutriments apportés par les vaisseaux sanguins. Parmi ces modèles, on peut distinguer deux approches : soit ils décrivent la dynamique de la densité cellulaire [50], soit ils considèrent le mouvement géométrique de la tumeur au moyen d'un modèle à frontières libres [68, 90, 91, 128]. Lorsque la tumeur grossit, elle pousse les vaisseaux sanguins qui n'apportent plus le nutriment nécessaire au coeur de la tumeur ; les cellules deviennent alors nécrotique et une nouvelle vascularisation se met en place [59]. Ceci a poussé à considérer des modèles pour lesquels la croissance tumorale est limitée par la pression mécanique exercée sur les cellules. La croissance se bloque lorsque les forces de contact sont trop importantes [51] ; le terme de pression *homéostatique* dénomme cette pression inhibant la croissance [160].

Les travaux résumés dans ce chapitre s'intéressent à deux questions mathématiques sur les modèles macroscopiques de croissance tumorale. D'une part, nous étudions le lien entre les modèles de densité cellulaire et les modèles géométriques à frontière libre. D'autre part, nous nous intéressons au phénomène d'invasion au moyen d'ondes de propagation. Le point de départ de ces études est le modèle décrivant la dynamique de la densité cellulaire ci-dessous. Dénotant $n(t, x)$ la densité des cellules tumorales à l'instant

$t > 0$ et à la position $x \in \mathbb{R}^d$ ($d \in \mathbb{N}^*$), $p(t, x)$ la pression élastique donnée par une loi d'état $p = P(n)$, $v(t, x)$ le champs de vitesse, $c(t, x)$ la concentration en nutriment, ce modèle s'écrit :

$$\partial_t n + \operatorname{div}(nv) = nG(c, p) + \nu \Delta n, \quad (4.1.1)$$

$$v = -\nabla p, \quad (4.1.2)$$

$$\partial_t c - \Delta c + \Psi(n)c = 0. \quad (4.1.3)$$

La première équation décrit la dynamique cellulaire sous l'effet de la pression mécanique, de la multiplication cellulaire et du mouvement actif des cellules caractérisé par une constante de diffusion ν . La vitesse v est donnée par une loi de Darcy. La troisième équation décrit la consommation du nutriment par les cellules tumorales; elle dépend d'une fonction positive Ψ que nous précisons dans la suite. Il reste à décrire la loi de pression reliant la densité cellulaire n à la pression p . Dans ce manuscrit nous considérons la loi suivante :

$$p = P_k(n) = \frac{k}{k-1} n^{k-1}, \quad k > 1. \quad (4.1.4)$$

Ceci permet de réécrire l'équation gouvernant la dynamique cellulaire (4.1.1) sous la forme d'une équation des milieux poreux, qui a été beaucoup étudiée mathématiquement [175], avec terme de croissance :

$$\partial_t n - \Delta n^k = nG(c, p) + \nu \Delta n. \quad (4.1.5)$$

La croissance cellulaire est modélisée par la fonction G . Dans ce manuscrit, nous ne considérons que les cas pour lesquels $G = G(p)$ ne dépend que de la pression et $G = G(c)$ ne dépend que de la concentration en nutriment. Dans le premier cas, $G = G(p)$, G est une fonction décroissante qui s'annule pour $p = P_M$ où P_M dénote la pression homéostatique définie ci-dessus (i.e. $G(P_M) = 0$). Si $G = G(c)$, le nutriment ayant un effet positif sur la croissance, la fonction G est croissante et la nécrose cellulaire est modélisée par l'existence d'une constante \bar{c} telle que $G(\bar{c}) = 0$.

Un autre point de vue consiste à considérer un modèle à frontière libre pour décrire la tumeur, couramment appelé modèle de Hele-Shaw en mécanique des fluides. Dans ce modèle, la tumeur est caractérisée par son domaine $\Omega(t) \subset \mathbb{R}^d$ et par la dynamique de son interface. Dans le cas présenté dans ce manuscrit, il s'écrit :

$$-\Delta p = G(c, p), \quad \text{dans } \Omega(t); \quad p = 0 \quad \text{sur } \partial\Omega(t).$$

La dynamique de la frontière libre $\partial\Omega(t)$ est donnée par la loi de Darcy : $v = -\nabla p$.

Le lien entre ces deux descriptions dans le cas $\nu = 0$ et $G = G(p)$ a été rigoureusement obtenu en [153] grâce à une analyse asymptotique. Le cas $G = G(c)$ reste pour le moment un problème ouvert. L'idée est de passer à la limite incompressible, ce qui revient ici à faire $k \rightarrow +\infty$. Formellement, en passant à la limite $k \rightarrow +\infty$ dans la loi de pression (4.1.4), on obtient

$$P_\infty(n) = 0, \quad \text{si } 0 \leq n < 1; \quad P_\infty(n) = 1, \quad \text{si } n = 1. \quad (4.1.6)$$

Ceci pousse à distinguer deux régions : l'ensemble $\Omega(t) = \{p > 0\}$ où la densité $n = 1$, et la région complémentaire où $p = 0$ et $n < 1$. L'équation limite sur la pression dans le domaine $\Omega(t)$ est alors obtenue en passant à la limite $k \rightarrow +\infty$ dans l'équation sur la pression obtenue à partir de (4.1.5). La dynamique de la frontière est régie grâce à l'équation limite de (4.1.1). La présentation de ces résultats est l'objet de la Section 4.2.

L'autre étude abordée dans ces travaux est l'existence de *traveling waves*, i.e. d'ondes de propagation à vitesse constante, pour ces modèles. Ceci s'apparente à l'étude de l'invasion des cellules tumorales dans le milieu environnant. La recherche de traveling waves dans des équations de réaction-diffusion avec advection modélisant des phénomènes biologiques est l'objet de nombreux travaux (voir par exemple [36, 92, 93, 139, 140, 180]). Comme nous l'avons précisé au chapitre précédent, cela consiste à chercher des solutions particulières du système d'équations sous la forme

$$n(t, x) = n(x - \sigma t), \quad p(t, x) = p(x - \sigma t), \quad c(t, x) = c(x - \sigma t), \quad (4.1.7)$$

où σ est une constante représentant la vitesse de propagation. L'existence de telles solutions pour le modèle de Hele-Shaw obtenu à la limite incompressible est établie dans [A16]. Pour le modèle de densité cellulaire, l'existence de traveling waves est étudiée dans [A14], pour une loi de pression différente de (4.1.4) et définie par $P_k(n) = c_k(\ln n)_+$, où a_+ dénote la partie positive de a . Dans ce cas la limite incompressible est obtenue en faisant $c_k \rightarrow +\infty$. Par ailleurs, ces travaux conduisent à la question de la stabilité du front de propagation. En effet, les articles [29, 61] soulignent l'apparition d'instabilités transversales dans certains régimes. L'étude de ces instabilités pour le système présenté ci-dessus s'avère délicate. Dans un premier temps, nous avons alors considéré un modèle plus simple de réaction-diffusion à deux composants et établi l'instabilité transversale des ondes de propagation dans [C6]. Un travail ultérieur consiste à étendre cette étude dans le cas du modèle de croissance tumorale.

Le plan du chapitre est le suivant. Dans la section 4.2, nous présentons l'analyse asymptotique $k \rightarrow +\infty$ pour le modèle à densité cellulaire (4.1.1)–(4.1.4). Cette limite conduit à un modèle à frontière libre de type Hele-Shaw. La Section 4.3 est dédiée à l'existence de traveling waves pour ces modèles de croissance tumorale. Enfin dans la Section 4.4, nous synthétisons une étude des instabilités transversales pour un modèle plus simple de réaction-diffusion à deux composants.

4.2 Limite incompressible vers Hele-Shaw

4.2.1 Préliminaires

Dans cette Section nous présentons les résultats de [A17]. Nous nous situons dans le cas où la croissance cellulaire est uniquement fonction de la pression $G = G(p)$ avec

$$G'(\cdot) < 0 \quad \text{et} \quad G(P_M) = 0, \quad (4.2.1)$$

où $P_M > 0$ est la pression homéostatique. Plus précisément, nous considérons la limite $k \rightarrow +\infty$ du système d'équations :

$$\partial_t n_k - \operatorname{div}(n_k \nabla p_k) = n_k G(p_k) + \nu \Delta n_k, \quad t > 0, x \in \mathbb{R}^d, \quad (4.2.2)$$

$$p_k = \frac{k}{k-1} n_k^{k-1}. \quad (4.2.3)$$

Ce système est complété avec les données initiales telles que :

$$\begin{cases} n_k(x, 0) = n_k^{\text{ini}}(x) > 0, & n_k^{\text{ini}} \in L^1(\mathbb{R}^d) \cap L^\infty(\mathbb{R}^d), \\ p_k^{\text{ini}} := \frac{k}{k-1} (n_k^{\text{ini}})^{k-1} \leq P_M. \end{cases} \quad (4.2.4)$$

Le cas où le mouvement actif des cellules est négligé, $\nu = 0$, a été étudié dans [153]. Comme il a été précisé dans l'introduction, nous nous attendons, formellement, à ce que le système obtenu à la limite $k \rightarrow +\infty$ soit caractérisé par le domaine $\Omega(t) = \{p_\infty > 0\}$ dans lequel la densité est constante $n_\infty = 1$; alors que dans le domaine complémentaire, $p_\infty = 0$ et $n_\infty < 1$.

Le point de départ de cette étude est l'équation sur la pression. Multipliant l'équation (4.2.2) par $p'_k(n_k)$ conduit à

$$\partial_t p_k - n_k p'_k(n_k) \Delta p_k - |\nabla p_k|^2 - \nu \Delta p_k = n_k p'_k(n_k) G(p_k) - \nu p''_k(n_k) |\nabla n_k|^2.$$

En remplaçant $p_k(n_k)$ par son expression (4.2.3), nous obtenons

$$\partial_t p_k - (k-1) p_k \Delta p_k - |\nabla p_k|^2 - \nu \Delta p_k = (k-1) p_k G(p_k) - \nu \frac{(k-2) \nabla p_k \cdot \nabla n_k}{n_k}. \quad (4.2.5)$$

Par conséquent, nous nous attendons à obtenir la *relation complémentaire*

$$-p_\infty \Delta p_\infty = p_\infty G(p_\infty) - \nu \frac{\nabla p_\infty \cdot \nabla n_\infty}{n_\infty},$$

à la limite. Cependant, $p_\infty = 0$ à l'extérieur du domaine $\Omega(t)$ et dans ce domaine $n_\infty = 1$, donc $\nabla n_\infty = 0$. Donc le dernier terme de l'équation ci-dessus est nul et nous retrouvons la même *relation complémentaire* que dans le cas où $\nu = 0$ [153] :

$$p_\infty (\Delta p_\infty + G(p_\infty)) = 0. \quad (4.2.6)$$

Cette relation complémentaire conduit au modèle de Hele-Shaw. Effectivement, dans le domaine $\Omega(t)$ on a

$$-\Delta p_\infty = G(p_\infty), \quad x \in \Omega(t).$$

Le mouvement de la frontière est alors déterminé grâce à l'équation limite

$$\partial_t n_\infty - \operatorname{div}(n_\infty \nabla p_\infty) = n_\infty G(p_\infty) + \nu \Delta n_\infty, \quad t > 0, x \in \mathbb{R}^d. \quad (4.2.7)$$

La diffusion des cellules induite par le terme de mouvement actif implique une propagation plus rapide que dans le cas sans mouvement actif (voir la Section 7 de [A17] pour plus de détails sur ce point).

Les arguments ci-dessus peuvent être rendus rigoureux :

Théorème 4.2.1. [Théorème 2.1 de [A17]] Soit $T > 0$ et $\nu > 0$. Supposons (4.2.4), (4.2.1) et que la donnée initiale est une sous-solution du système stationnaire, i.e.

$$-\operatorname{div}(n_k^{\text{ini}} \nabla p_k^{\text{ini}}) - \nu \Delta n_k^{\text{ini}} \leq n_k^{\text{ini}} G(p_k^{\text{ini}}). \quad (4.2.8)$$

Soit (n_k, p_k) une solution faible de (4.2.2)–(4.2.3). Alors, à extraction près, les suites $(n_k)_k$, $(p_k)_k$ convergent fortement dans $L^q((0, T) \times \mathbb{R}^d)$, $1 \leq q < \infty$, vers

$$n_\infty \in C((0, T); L^1(\mathbb{R}^d)) \cap L^\infty((0, T); H^1(\mathbb{R}^d)), \quad p_\infty \in L^\infty((0, T); H^1(\mathbb{R}^d)),$$

tels que $0 \leq n_\infty \leq 1$, $n_\infty(0) = n^{\text{ini}}$, $0 \leq p_\infty \leq P_M$, $p_\infty \in P_\infty(n_\infty)$, où P_∞ est le graphe monotone de Hele-Shaw (4.1.6). De plus (n_∞, p_∞) satisfait (au sens faible) (4.2.7), l'équation

$$\partial_t n_\infty - \Delta p_\infty - \nu \Delta n_\infty = n_\infty G(p_\infty), \quad (4.2.9)$$

et la relation complémentaire (4.2.6).

Remarque 4.2.2. L'hypothèse supplémentaire (4.2.8) signifie que la tumeur est initialement croissante. Nous verrons dans la preuve que cela implique que la tumeur continue à croître. Cette hypothèse permet de simplifier grandement la preuve, il est possible d'obtenir ce résultat dans un cadre plus général en utilisant des propriétés d'effets régularisants de l'équation des milieux poreux [7, 35, 66]. Le lecteur intéressé pourra se référer à l'annexe de [A17].

4.2.2 Analyse asymptotique

Nous présentons ici les arguments de la preuve du Théorème 4.2.1. Celle-ci se découpe en trois principales étapes.

1ère étape. Estimations uniformes en k sur la densité et la pression.

Dans le cas où $G = G(p)$ satisfait (4.2.1), l'équation (4.1.1)–(4.1.2) avec une loi de pression $p = P(n)$ croissante, satisfait un principe du maximum (voir par exemple Lemma 2.1 de [A14]) :

Lemme 4.2.3. Sous l'hypothèse (4.2.1) et supposons que la loi de pression P est positive et strictement croissante, i.e. $P'(\cdot) > 0$. Alors, posant $p_M^{\text{ini}} = \max_{x \in \mathbb{R}} p^{\text{ini}}(x)$, toute solution classique de (4.1.1)–(4.1.2) satisfait le principe du maximum :

$$P(n) \leq \max(p_M^{\text{ini}}, P_M). \quad (4.2.10)$$

Dans le cas qui nous intéresse où la loi de pression est donnée par (4.1.4), on obtient des bornes uniformes dans $L^\infty((0, T) \times \mathbb{R}^d)$:

$$0 \leq n_k \leq \left(\frac{k-1}{k} P_M \right)^{1/(k-1)} \xrightarrow[k \rightarrow \infty]{} 1, \quad 0 \leq p_k \leq P_M.$$

En intégrant (4.2.2) sur \mathbb{R}^d et utilisant (4.2.1), on déduit une borne uniforme de n_k dans $L^\infty((0, T); L^1(\mathbb{R}^d))$:

$$\int_{\mathbb{R}^d} n_k(t) \leq e^{G(0)t} \int_{\mathbb{R}^d} n^{\text{ini}}.$$

Avec la relation (4.2.3) et la borne uniforme de n_k dans L^∞ , on obtient une borne uniforme de p_k dans $L^\infty((0, T); L^1(\mathbb{R}^d))$. Finalement n_k et p_k sont uniformément bornées dans $L^\infty((0, T); L^1(\mathbb{R}^d)) \cap L^\infty((0, T) \times \mathbb{R}^d)$.

Les estimations sur la dérivée en temps reposent sur l'hypothèse supplémentaire (4.2.8). Définissons la quantité $\Sigma_k = \Sigma(n_k)$ par $\Sigma(n_k) = n_k^k + \nu n_k$ et $w_k = \partial_t \Sigma_k$. En multipliant (4.2.2) par $\Sigma'(n_k)$ et dérivant par rapport à t , w_k satisfait l'équation :

$$\partial_t w_k - \Sigma'_k \Delta w_k = w_k \left(\frac{\Sigma''_k}{\Sigma'_k} (\Delta \Sigma_k + n_k G(p_k)) + G(p_k) + k n_k^{k-1} G'(p_k) \right).$$

Cette dernière équation préserve la positivité. De plus, $\text{sign}(\partial_t n_k) = \text{sign}(w_k)$ et $\text{sign}(w_k(0)) \geq 0$ grâce à l'hypothèse (4.2.8). On déduit que pour p.t. $t > 0$, on a $w_k \geq 0$, donc $\partial_t n_k \geq 0$ et avec (4.2.3) $\partial_t p_k \geq 0$. Ceci permet d'obtenir des bornes uniformes sur $\partial_t n_k$ et $\partial_t p_k$ dans $L^\infty([0, T]; L^1(\mathbb{R}^d))$.

Considérons maintenant les estimations sur le gradient en espace. Nous avons l'estimation uniforme suivante :

$$\int_{\mathbb{R}^d} (\nu |\nabla n_k|^2 + k n_k^{k-1} |\nabla n_k|^2 + |\nabla p_k|^2)(t) \leq C \quad \text{pour tout } t \in (0, T). \quad (4.2.11)$$

En effet, multipliant (4.2.2) par n_k et intégrant sur \mathbb{R}^d , on obtient après une intégration par parties pour le terme de diffusion,

$$\int_{\mathbb{R}^d} (n_k \partial_t n_k)(t) + \int_{\mathbb{R}^d} (k n_k^{k-1} |\nabla n_k|^2 + \nu |\nabla n_k|^2)(t) = \int_{\mathbb{R}^d} (n_k^2 G(p_k))(t) \leq G(0) \int_{\mathbb{R}^d} n_k^2(t).$$

D'après ce qui précède, n_k et $\partial_t n_k$ sont positifs, on en déduit directement l'estimation sur les deux premiers termes de (4.2.11). De plus, en intégrant (4.2.5), on obtient

$$\int_{\mathbb{R}^d} \partial_t p_k(t) + (k-2) \int_{\mathbb{R}^d} (|\nabla p_k|^2 + \nu k n_k^{k-3} |\nabla n_k|^2)(t) \leq (k-1) G(0) \int_{\mathbb{R}^d} p_k(t).$$

Comme $\partial_t p_k \geq 0$, on déduit la borne L^2 sur ∇p_k dans (4.2.11).

2ème étape. Convergence et passage à la limite.

A partir des estimations uniformes ci-dessus nous obtenons la convergence forte dans $L^q((0, T) \times \mathbb{R}^d)$ pour $1 < q < \infty$ de n_k et p_k vers des limites n_∞ et p_∞ et la convergence faible dans $L^2((0, T) \times \mathbb{R}^d)$ de $(\nabla n_k)_k$ et $(\nabla p_k)_k$. On a

$$0 \leq n_\infty \leq 1, \quad 0 \leq p_\infty \leq P_M, \quad n_\infty, p_\infty \in L^\infty((0, T); H^1(\mathbb{R}^d)), \quad \partial_t n_\infty, \partial_t p_\infty \geq 0.$$

Ces résultats de convergence permettent de passer à la limite dans l'équation (4.2.2) et d'établir (4.2.7) au sens des distributions. Par ailleurs par définition de p_k (4.2.3), on a

$$n_k p_k = \frac{k}{k-1} n_k^k = \left(1 - \frac{1}{k} \right)^{1/(k-1)} p_k^{k/(k-1)} \xrightarrow[k \rightarrow \infty]{} p_\infty.$$

En prenant la limite $k \rightarrow \infty$, on déduit la propriété

$$p_\infty(1 - n_\infty) = 0. \quad (4.2.12)$$

Pour montrer l'équivalence entre (4.2.9) et (4.2.7), nous devons montrer que $\nabla p_\infty = n_\infty \nabla p_\infty$ ou de manière équivalente $p_\infty \nabla n_\infty = 0$ (en appliquant la règle de Leibniz dans $H^1(\mathbb{R}^d)$ à (4.2.12)). On a d'après (4.2.3)

$$p_k \nabla n_k = \frac{k}{k-1} n_k^k \nabla n_k = \frac{\sqrt{k}}{k-1} n_k^{(k+1)/2} (\sqrt{k} n_k^{(k-1)/2} \nabla n_k).$$

En utilisant l'estimation (4.2.11) et la borne uniforme de $(n_k)_k$ dans $L^\infty((0, T) \times \mathbb{R}^d)$, on déduit que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|p_k \nabla n_k\|_{L^2((0, T) \times \mathbb{R}^d)} = 0,$$

ce qui conduit à $p_\infty \nabla n_\infty = 0$. Comme $p_\infty \geq 0$, ceci implique de plus que $\nabla p_\infty \cdot \nabla n_\infty = 0$.

3ème étape. La relation complémentaire (4.2.6).

Ce point est plus délicat. En effet, démontrer la relation complémentaire (4.2.6) est équivalent à montrer la convergence forte de ∇p_k , ce que les estimations obtenues ci-dessus ne permettent pas de montrer. Nous allons donc montrer (4.2.6) par double inégalité.

Par un calcul direct, on obtient l'inégalité

$$p_\infty \Delta p_\infty + p_\infty G(p_\infty) \geq 0. \quad (4.2.13)$$

En effet, en multipliant (4.2.5) par une fonction test $\phi(x, t) \geq 0$ et intégrant, on obtient

$$\int_0^T \int_{\mathbb{R}^d} \phi (p_k \Delta p_k + p_k G(p_k) - \nu \frac{k-2}{k-1} \frac{\nabla p_k \cdot \nabla n_k}{n_k}) = \frac{1}{k-1} \int_0^T \int_{\mathbb{R}^d} (\phi (\partial_t p_k - |\nabla p_k|^2) + \nu \nabla \phi \cdot \nabla p_k).$$

Avec les estimations a priori, le terme de droite de cette égalité converge vers 0 quand $k \rightarrow \infty$. Avec une intégration par parties, on peut réécrire le terme de gauche comme

$$\int_0^T \int_{\mathbb{R}^d} \left(\phi p_k G(p_k) - p_k \nabla \phi \cdot \nabla p_k - \phi |\nabla p_k|^2 - \phi \nu \frac{k(k-2)}{k-1} n_k^{k-3} |\nabla n_k|^2 \right).$$

Le dernier terme étant négatif, on obtient

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \int_0^T \int_{\mathbb{R}^d} (\phi p_k G(p_k) - p_k \nabla \phi \cdot \nabla p_k - \phi |\nabla p_k|^2) \geq 0.$$

En passant à la limite, on obtient la formulation faible de (4.2.13)

Pour l'inégalité inverse

$$p_\infty \Delta p_\infty + p_\infty G(p_\infty) \leq 0, \quad (4.2.14)$$

nous utilisons un argument de régularisation à la *Steklov*. Cet argument consiste à introduire un noyau de régularisation en temps $\omega_\varepsilon(t, x) \geq 0$ avec un support compact de longueur ε . Ceci permet alors d'avoir de la compacité pour la suite $n_{k,\varepsilon} = n_k * \omega_\varepsilon$ qui satisfait

$$\partial_t n_{k,\varepsilon} - \Delta \omega_\varepsilon * (n_k^k + \nu n_k) = (n_k G(p_k)) * \omega_\varepsilon. \quad (4.2.15)$$

Pour $\varepsilon > 0$ fixé, nous pouvons passer à la limite dans cette équation après l'avoir multipliée par p_k

$$\lim_{k \rightarrow \infty} p_k \partial_t n_{k,\varepsilon} = p_\infty \Delta (\omega_\varepsilon * (p_\infty + \nu n_\infty)) + p_\infty ((n_\infty G(p_\infty)) * \omega_\varepsilon).$$

Il suffit maintenant de déterminer le signe du membre de gauche. Pour cela nous décomposons

$$\int_{\mathbb{R}} n_k^{k-1}(t) \partial_t n_k(s) \omega_\varepsilon(t-s) ds = \frac{1}{k} \int_{\mathbb{R}} \partial_t n_k^k(s) \omega_\varepsilon(t-s) ds + \int_{\mathbb{R}} (n_k^{k-1}(t) - n_k^{k-1}(s)) \partial_t n_k(s) \omega_\varepsilon(t-s) ds.$$

Le premier terme du membre de droite converge vers 0 quand $k \rightarrow +\infty$. Le second terme est négatif d'après l'estimation $\partial_t n_k \geq 0$. On a donc

$$p_\infty \Delta(\omega_\varepsilon * (p_\infty + \nu n_\infty)) + p_\infty (n_\infty G(p_\infty) * \omega_\varepsilon) \leq 0.$$

Il suffit alors de passer à la limite dans la régularisation $\varepsilon \rightarrow 0$. \square

Remarque 4.2.4. Il est assez remarquable de constater la nature différente du problème si on rajoute la friction entre les cellules. Ceci consiste à inclure un terme de viscosité de coefficient $\gamma > 0$ dans la loi de Darcy, c'est-à-dire à remplacer (4.1.2) par

$$v = -\nabla W, \quad -\gamma \Delta W + W = p.$$

En effet, dans ce cas, les estimations uniformes de la 1ère étape ci-dessus sur les dérivées spatiales de p_k et n_k ne sont plus valables. Dans un travail en préparation, nous utilisons alors des techniques similaires à [69, 30] pour retrouver de la compacité forte sur les suites $(n_k)_k$ et $(p_k)_k$.

4.3 Fronts de propagation

Nous nous intéressons dans cette partie à l'existence d'ondes de propagation pour les modèles d'EDP présentés en introduction de ce chapitre. Nous nous limitons au cas mono-dimensionnel. Dans la Section 4.3.1, l'existence de traveling waves pour le modèle de Hele-Shaw obtenu à la limite incompressible est présentée. La Section 4.3.2 s'intéresse plus particulièrement au modèle à densité cellulaire.

4.3.1 Existence de traveling waves pour le modèle de Hele-Shaw

Le point de départ de cette étude est le modèle de Hele-Shaw obtenu à la limite incompressible dans la Section précédente. On néglige le mouvement actif, $\nu = 0$, et la croissance est supposée ne dépendre que de la concentration en nutriment $G = G(c)$. En une seule dimension d'espace le modèle s'écrit :

$$\begin{cases} \partial_t n - \partial_x(n \partial_x p) = nG(c), & \text{dans } \Omega_0(t) = \{p(t, x) = 0\}, \\ n(x, t) = 1 & \text{dans } \Omega(t) = \{p(t, x) > 0\}, \\ -\partial_{xx} c + \Psi(n)c = 0, \\ -\partial_{xx} p = G(c), & \text{dans } \Omega(t), \\ p = 0, & \text{sur } \partial\Omega(t). \end{cases} \quad (4.3.1)$$

Dans ce modèle, l'équation sur la concentration de nutriment est stationnaire contrairement à (4.1.3), ce qui revient à supposer que la dynamique temporelle de c est très rapide. On suppose que loin de la tumeur, la concentration en nutriment est connue et notée c_B . En grossissant, la tumeur pousse les vaisseaux sanguins qui la suppléent en nutriment, entraînant une nécrose des cellules du centre de la tumeur, celles-ci n'ayant pu accès à une quantité suffisante de nutriment. Nous distinguons deux modèles pour la fonction Ψ dépendant du cas considéré : pour le modèle *in vitro*, le nutriment à l'extérieur de la tumeur est constant et connu, pour le modèle *in vivo*, on ne connaît la quantité de nutriment que loin de la tumeur. Plus précisément, l'équation sur le nutriment est donnée dans le cas *in vitro* par :

$$-\partial_{xx} c + \psi(n)c = 0, \quad \text{pour } x \in \{n > 0\}; \quad c = c_B, \quad \text{pour } x \in \{n = 0\}. \quad (4.3.2)$$

Dans le cas *in vivo*,

$$-\partial_{xx} c + \psi(n)c = \mathbf{1}_{\{n=0\}}(c_B - c). \quad (4.3.3)$$

De plus, nous faisons l'hypothèse

$$\forall z \in (0, 1), \quad 0 < \psi(z) \leq \psi(1), \quad \psi(0) = 0. \quad (4.3.4)$$

Afin de modéliser le manque de nutriment entraînant la nécrose cellulaire dans le centre de la tumeur, nous supposons :

$$G' \geq 0, \quad \exists \bar{c} > 0 \text{ tel que } G(c) = -g_- < 0 \text{ pour } c < \bar{c}, \text{ et } G(c) > 0 \text{ for } c > \bar{c}, \quad (4.3.5)$$

Le domaine est alors décomposé en trois régions : le centre nécrotique, la partie proliférante et le tissu sain. Nous recherchons une onde de propagation dans le sens des x croissants, i.e. une solution en translation uniforme à vitesse constante positive. Nous introduisons le paramètre $R > 0$ correspondant à la taille de la partie proliférante. Comme les solutions sont en translation uniforme, elles sont définies à une translation près. Nous fixons en 0 l'origine de la région proliférante $\Omega = [0, R]$. La zone nécrotique est alors $(-\infty, 0)$ et le tissu sain, pour lequel $n = 0$, est $(R, +\infty)$. La recherche de traveling waves consiste à injecter l'ansatz (4.1.7) dans le modèle (4.3.1). En prenant en compte les observations décrites ci-dessus, cela conduit à montrer l'existence de fonctions n , c et p , d'une constante $\sigma > 0$ et de $R > 0$ satisfaisant :

$$\begin{aligned} -\sigma n' &= nG(c), & \text{dans } (-\infty, 0), \\ n &= 1 & \text{dans } (0, R), \quad n = 0 & \text{dans } (R, +\infty), \\ -p'' &= G(c) & \text{dans } (0, R), \quad p(0) = p(R) = 0, \quad p \geq 0, \end{aligned} \quad (4.3.6)$$

complété par l'équation sur c dans le cas *in vitro* :

$$c'' = \psi(n)c \text{ dans } (-\infty, R), \quad c(R) = c_B; \quad (4.3.7)$$

et dans le cas *in vivo* :

$$\begin{aligned} -c'' + \psi(n)c &= 0, & \text{dans } (-\infty, R) & \quad -c'' + \psi(n)c = c_B - c, & \text{dans } (R, +\infty), \\ \lim_{x \rightarrow +\infty} c(x) &= c_B, \end{aligned} \quad (4.3.8)$$

Ces systèmes sont complétés par les relations de saut en $x = 0$ et $x = R$, déduites de l'équation sur la densité cellulaire :

$$\sigma = -p'(R^-), \quad n(0) = 1, \quad p'(0^+) = 0. \quad (4.3.9)$$

Nous pouvons alors énoncer le résultat d'existence de traveling waves :

Théorème 4.3.1. [Theorems 3.1 et 4.1 de [A16]] *Supposons que G et ψ sont des fonctions de classe C^1 satisfaisant les hypothèses (4.3.5)-(4.3.4). De plus, nous supposons*

- $0 < \bar{c} < c_B$ dans le cas *in vitro*,
- $0 < \bar{c} < \frac{c_B}{2}$ dans le cas *in vivo*.

Alors il existe $\sigma > 0$ et $R > 0$ tels que les systèmes (4.3.6)-(4.3.7)-(4.3.9) et (4.3.6)-(4.3.8)-(4.3.9) admettent une solution avec c croissante sur \mathbb{R} , n croissante sur $(-\infty, 0]$ et $\lim_{x \rightarrow -\infty} n(x) = 0$.

Idée de la preuve. Supposons dans un premier temps que $\sigma > 0$ est donné. Nous pouvons alors construire une solution pour les systèmes (4.3.6)-(4.3.7) et (4.3.6)-(4.3.8) avec n continue et croissante sur $(-\infty, R]$, c de classe C^1 et strictement croissante sur $(-\infty, R]$ dans le cas *in vitro*, sur \mathbb{R} dans le cas *in vivo*. Pour cela il suffit de décomposer $\mathbb{R} = (-\infty, 0) \cup [0, R] \cup (R, +\infty)$ et de regarder chaque intervalle séparément. Avec les hypothèses du théorème, il est facile de résoudre les équations différentielles de ces deux systèmes sur $[0, R]$ et $(R, +\infty)$ en fonction de R . Sur le domaine $(-\infty, 0)$, le système se réduit à

$$-\sigma n' = nG(c), \quad n(0) = 1, \quad (4.3.10)$$

$$c'' = \psi(n)c, \quad c(0) = c_0, \quad c'(0) = c'_0, \quad (4.3.11)$$

avec c_0 et c'_0 dépendant de R . Avec l'hypothèse (4.3.5), on a $G(c) = -g_-$ sur $(-\infty, 0)$ et (4.3.10) se résout analytiquement. On se ramène au problème de Cauchy :

$$-c'' + \psi(e^{g_-x/\sigma})c = 0 \text{ pour } x < 0, \quad c(0) = c_0, \quad c'(0) = c'_0. \quad (4.3.12)$$

En utilisant la méthode de l'espace des phases consistant à écrire le système que satisfait l'inverse de c (c étant strictement croissante, elle est inversible), nous pouvons montrer le résultat suivant :

Lemme 4.3.2. *Il existe une application continue $\sigma \mapsto A(\sigma)$ telle que la solution du problème de Cauchy (4.3.12) est définie, positive et croissante ssi $c'_0 = A(\sigma)c_0$.*

Pour $R > 0$ et $\sigma > 0$, nous avons pu construire des solutions n , c et p . Il suffit maintenant de vérifier les relations (4.3.9). L'égalité $p'(0^+) = 0$ impose une relation non-linéaire permettant de calculer R . Enfin, on se ramène au problème de point fixe $\sigma = p'(R)$, sachant que R et p dépendent de σ . Il est alors possible de montrer l'existence d'une solution pour ce problème de point fixe, ce qui complète la preuve. \square

4.3.2 Existence de traveling waves pour un modèle à densité cellulaire

Nous nous intéressons maintenant à l'existence d'ondes de propagation pour le système à densité cellulaire (4.1.1) dans le cas où $G = G(p)$ et où la loi de pression est donnée par

$$P_k(n) = c_k(\ln n)_+, \quad (4.3.13)$$

avec a_+ la partie positive de a . Afin de simplifier le modèle, nous considérons un terme de croissance donné par

$$G(p) = H(P_M - p), \quad \text{où } H(z) = \mathbf{1}_{\{z \geq 0\}};$$

H est la fonction de Heaviside. L'équation (4.1.1) peut alors se réécrire :

$$\partial_t n - c_k \partial_{xx} Q(n) = nH(P_M - c_k(\ln n)_+) + \nu \partial_{xx} n, \quad (4.3.14)$$

où

$$Q(n) = (n - 1)_+. \quad (4.3.15)$$

Recherchant des traveling waves, i.e. des solutions sous la forme (4.1.7), on a :

$$\begin{cases} -\sigma \partial_x n - c_k \partial_{xx} Q(n) = nH(P_M - c_k(\ln n)_+) + \nu \partial_{xx} n, \\ n(-\infty) = n_M := P_k^{-1}(P_M), \quad n(+\infty) = 0. \end{cases} \quad (4.3.16)$$

Le théorème suivant donne l'existence d'une vitesse minimale au delà de laquelle, il y a existence d'une traveling wave au système (4.3.14)–(4.3.15) :

Théorème 4.3.3. *[Theorems 3.1 et 3.5 de [A14]] Il existe $\sigma^* > 0$ tel que pour tout $\sigma \geq \sigma^*$, le système (4.3.16)–(4.3.15) admet une solution n positive et croissante. De plus*

(i) *Dans le cas $\nu = 0$, n est discontinue et pour $\sigma = \sigma^*$, n est donné par*

$$n(x) = \begin{cases} n_M := \exp\left(\frac{P_M}{c_k}\right) & x \leq 0, \\ g(x) & x \in (0, R), \quad R > 0, \\ 0 & x > x_0, \end{cases}$$

où g est une fonction décroissante satisfaisant $g(0) = n_M$, $g'(0) = 0$ et $g(R) = 1$.

(ii) *Dans le cas $\nu > 0$, on a $\sigma^* > 2\sqrt{\nu}$ et n est continue.*

La démonstration de ce résultat repose sur des idées assez proches de celles du Théorème 4.3.1 : nous découpons la droite réelle en trois intervalles $\mathbb{R} = (-\infty, 0] \cup (0, R) \cup [R, +\infty)$ définis par $(-\infty, 0) = \{n(x) = n_M\}$, $(0, R) = \{1 < n(x) < n_M\}$, $(R, +\infty) = \{n(x) \leq n_M\}$ et résolvons (4.3.16) sur chaque intervalle en utilisant les relations de saut pour les conditions aux bornes de l'intervalle. Compte tenu du choix simple des fonctions, les calculs peuvent être menés de manière semi-explicite. La constante R est choisie telle que $n(R^-) = 1$. La condition de saut en $x = R$ donne alors la relation non-linéaire que doit satisfaire σ pour avoir existence d'une solution. Dans le cas étudié ici, cette condition est équivalente ici à l'existence de σ^* telle que $\sigma \leq \sigma^*$.

Ce résultat d'existence d'une vitesse minimale rappelle le résultat célèbre pour l'équation de Fisher/KPP. Il y a donc une infinité de traveling waves pour le système. Ceci diffère du résultat du précédent Théorème pour lequel nous montrons l'existence d'au moins une vitesse (notons que pour certains choix de ψ , nous pouvons montrer l'unicité de la traveling waves, voir [A16]). Cependant comme dans le cas de Fisher/KPP, la plupart des traveling waves du Théorème 4.3.3 sont instables. Par exemple, si nous pouvons approcher le terme de croissance $nH(P_M - P(n))$ par un terme de type *température d'ignition*, i.e. de la forme $\xi_\theta(n)H(P_M - P(n))$ où $\theta \in (0, 1)$ est un petit paramètre et

$$\xi_\theta(n) = \begin{cases} n & \text{for } n \in (\theta, n_M), \\ 0 & \text{for } n \in [0, \theta]. \end{cases} \quad (4.3.17)$$

L'équation (4.3.16) devient :

$$-\sigma_\theta \partial_x n_\theta - c_k \partial_{xx} Q(n_\theta) = \xi_\theta(n_\theta)H(P_M - c_k(\ln n_\theta)_+) + \nu \partial_{xx} n_\theta. \quad (4.3.18)$$

En adaptant le Théorème 4.3.3 à ce modèle, nous obtenons alors l'existence et l'unicité d'une traveling wave :

Lemme 4.3.4. *Soit $\theta \in (0, 1)$ fixé. Le système (4.3.18)–(4.3.17) admet un unique couple de solution $(\sigma_\theta, n_\theta)$. De plus, $\sigma_\theta \rightarrow \sigma^*$ quand $\theta \rightarrow 0$.*

Remarque 4.3.5 (Limite incompressible). Avec la loi de pression (4.3.13), nous pouvons formellement effectuer une limite incompressible en faisant $c_k \rightarrow +\infty$. Nous retrouvons alors le graphe monotone (4.1.6) pour la loi de pression limite. Les expressions obtenues dans la démonstration du Théorème 4.3.3 se simplifient. On obtient $n(x) = 1$ sur $(-\infty, R)$ où $R = \sqrt{2P_M}$, et

$$\sigma^* = \max\left(2\sqrt{\nu}, \min\left(2\sqrt{2P_M}, \sqrt{2P_M} + \frac{\nu}{\sqrt{2P_M}}\right)\right).$$

4.4 Instabilités transversales

4.4.1 Motivation

Le chapitre précédent a proposé une étude des ondes de propagation en une dimension d'espace. En dimension supérieure, des phénomènes d'instabilités de l'interface peuvent être à l'origine de formes remarquables observées dans la nature. Ainsi les tumeurs ne sont pas toujours des sphères parfaitement symétriques. La Figure 4.1 présente des simulations numériques réalisées grâce au logiciel FreeFem++ [110] pour le modèle présenté dans l'introduction de ce chapitre (4.1.1)–(4.1.3). Le terme de croissance est supposé tel que dans (4.3.5) et donc modélise le manque de nutriment au centre de la tumeur conduisant à la formation d'une zone nécrotique. La donnée initiale est $n^0 = 0.9$ sur le disque de rayon 0.5. On observe, sur ce tracé de la dynamique en temps de la densité des cellules tumorales n , les différentes zones de la tumeur avec un coeur nécrotique au centre de la tumeur et un anneau de cellules proliférantes où la densité est maximale envahissant le tissu sain. Nous constatons de plus des instabilités de l'interface entre la tumeur et le tissu sain.

L'étude mathématique de ces instabilités transversales sur le modèle complet est un travail délicat. Afin de comprendre les modalités de création de telles instabilités, nous avons considéré un modèle bien plus simple à deux composants. Il s'agit d'un modèle de type réaction-diffusion à deux composants apparaissant dans la modélisation de la propagation de flamme [37], mais aussi dans des modèles de dynamique de population bactérienne [99] :

$$\begin{cases} \partial_t u - \alpha \Delta u = \frac{1}{\alpha} h(u)v, \\ \partial_t v - \Delta v = -\frac{1}{\alpha} h(u)v. \end{cases} \quad (4.4.1)$$

Les deux inconnues u et v représentent la concentration du réactant et la température pour les modèles de combustion ou la densité de population bactérienne et la concentration en nutriment pour des applications

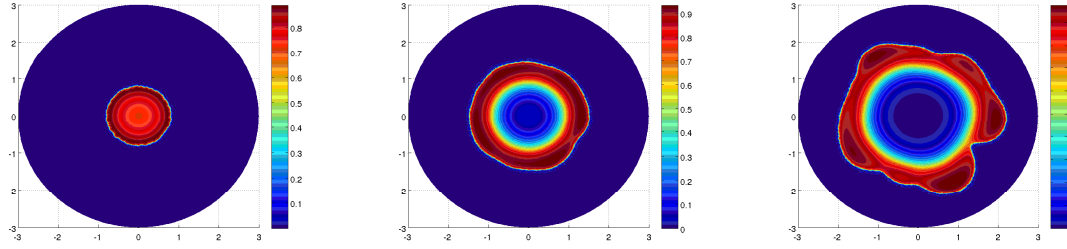


FIGURE 4.1 – Dynamique en temps de la densité de cellules n . On observe des instabilités du front de propagation. Le temps est croissant de la gauche vers la droite.

en biologie. Le paramètre $\alpha > 0$ est appelé le nombre de Lewis. L'existence de traveling waves pour de tels modèles a été démontrée par exemple dans les articles [37, 108] et une étude d'instabilité pour un régime asymptotique différent de celui que nous regardons ici est proposée dans [98]. Afin de pouvoir mener des calculs explicites, nous utilisons une fonction h de type température d'ignition :

$$h(u) = \begin{cases} 0, & \text{for } u \leq \theta, \\ 1, & \text{for } u > \theta, \end{cases} \quad (4.4.2)$$

pour un paramètre $\theta \in (0, 1)$.

Pour illustrer les différents régimes en fonction des paramètres du modèle, nous avons effectué des simulations numériques du modèles (4.4.1) à l'aide du logiciel FreeFem++ [110]. Le domaine de calcul considéré est un disque de rayon 4, le système (4.4.1) est complété par des conditions de Neumann au bord du domaine de calcul. On se donne initialement $u^0 = 1$ sur la sphère de rayon 0.4 et $v^0 = 1 - u^0$. Les résultats sont présentés dans la Figure 4.2. Suivant les valeurs des paramètres α et θ , on observe un régime stable ou un régime pour lequel des instabilités apparaissent.

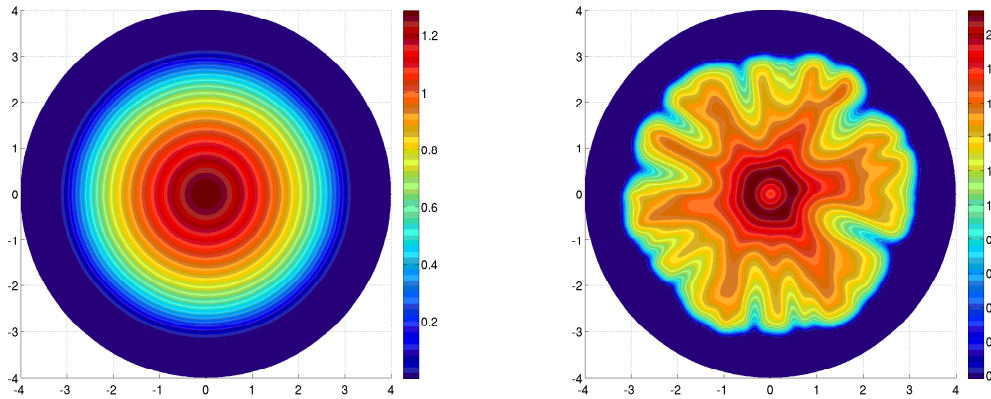


FIGURE 4.2 – Simulations numériques pour u dans (4.4.1). Gauche : solution u au temps $T = 1$ pour $\alpha = 0.25$ et $\theta = 0.1$. Droite : solution u au temps $T = 2$ pour $\alpha = 0.01$ et $\theta = 0.1$.

4.4.2 Traveling waves en une dimension

Avec la forme simple de h (4.4.2), nous pouvons calculer explicitement les traveling waves. On rappelle que ce sont des solutions de (4.4.1) de la forme $u(t, x) = u_0(x - \sigma t)$, $v(t, x) = v_0(x - \sigma t)$, où $\sigma > 0$ est

une constante représentant la vitesse. Cela conduit à résoudre le système :

$$\begin{cases} -\sigma u_{0x} - \alpha u_{0xx} = \frac{1}{\alpha} h(u_0) v_0, \\ -\sigma v_{0x} - v_{0xx} = -\frac{1}{\alpha} h(u_0) v_0, \\ (u_0, v_0)(-\infty) = (1, 0), \quad (u_0, v_0)(+\infty) = (0, 1). \end{cases} \quad (4.4.3)$$

Le problème étant invariant par translation, nous fixons $0 < u_0(0) = \theta < 1$. Il existe une unique (à translation près) traveling wave (u_0, v_0) avec u_0 décroissante et v_0 croissante pour le système (4.4.1)–(4.4.2). De plus, la vitesse est donnée par

$$\sigma = (1 - \theta) \sqrt{\frac{\alpha}{\theta^2 + \alpha\theta(1 - \theta)}} \quad (4.4.4)$$

4.4.3 Stabilité transversale des ondes planaires

Afin d'étudier les instabilités observées numériquement, nous nous inspirons des travaux [61] et posons

$$\begin{cases} u(t, x, y) = u_0(x - \sigma t) + \varepsilon e^{\lambda t} \cos(\omega y) u_1(x - \sigma t), \\ v(t, x, y) = v_0(x - \sigma t) + \varepsilon e^{\lambda t} \cos(\omega y) v_1(x - \sigma t), \end{cases}$$

où (u_0, v_0) est la traveling wave monodimensionnelle. En injectant ce développement dans (4.4.1) et ne gardant que les termes d'ordre 1 en ε , on obtient le système linéarisé :

$$\begin{cases} \lambda u_1 - \sigma u_1' - \alpha u_1'' + \alpha \omega^2 u_1 = \frac{1}{\alpha} (h'(u_0) v_0 u_1 + h(u_0) v_1), \\ \lambda v_1 - \sigma v_1' - v_1'' + \omega^2 v_1 = -\frac{1}{\alpha} (h'(u_0) v_0 u_1 + h(u_0) v_1). \end{cases} \quad (4.4.5)$$

On remarque que pour $\omega = 0$, ce système a la solution $\lambda = 0$, $u_1 = u_1'$ et $v_1 = v_1'$. Ce cas représente le cas mono-dimensionnel pour lequel il n'y a pas d'effets transversaux.

Définition 4.4.1. En dimension 2, on dit que la traveling wave monodimensionnelle (u_0, v_0) est **linéairement transversalement instable** s'il existe $\omega > 0$ et λ avec $\text{Re } \lambda > 0$ tels que le système (4.4.5) admet une solution non-triviale.

Avec l'expression particulière de h (4.4.2). On peut alors résoudre explicitement le système (4.4.5) en séparant les ensembles $\{x > 0\}$, où $h(u_0) = 0$, et $\{x < 0\}$, où $h(u_0) = 1$. Bien évidemment le couple de solution recherché doit être borné et satisfaire les relations de continuité en $x = 0$ et les relations de saut de la dérivée en $x = 0$. On obtient alors une condition d'existence d'une solution non-triviale en fonction de λ . En étudiant plus précisément cette relation, on peut montrer le résultat suivant :

Proposition 4.4.2 (Proposition 4.2 de [C6]). *Soient $\theta \in (0, 1)$ et h donné par (4.4.2). Alors :*

1. *Pour α assez petit, la traveling wave monodimensionnelle est linéairement stable en une dimension pour tout $\theta \in (0, 1)$.*
2. *Pour $\theta \in (0, 1)$ et α petit, il existe $\omega(\alpha, \theta)$ tel que $\lambda(\omega(\alpha, \theta)) < 0$ i.e. la traveling wave est linéairement transversalement instable pour ces valeurs de paramètres en deux dimensions. De plus, $\omega(\alpha, \theta) = \mathcal{O}(\frac{1}{\sqrt{\alpha}})$.*

Liste des publications

Articles soumis

- [A22] C. Jourdana, P. Pietra, N. Vauchelet, *A classical-quantum coupling strategy for a hierarchy of one dimensional models for semiconductor*
- [A21] J.A. Carrillo, F. James, F. Lagoutière, N. Vauchelet, *The Filippov characteristic flow for solutions of the aggregation equation with mildly singular potentials*
- [A20] L. Almeida, C. Emako, N. Vauchelet, *Existence and diffusive limit of a two-species kinetic model of chemotaxis*
- [A19] F. James, N. Vauchelet, *Numerical methods for one-dimensional aggregation equations*
- [A18] F. James, N. Vauchelet, *Equivalence between duality and gradient flow solutions for one-dimensional aggregation equations*

Articles publiés ou acceptés pour publication

- [A17] B. Perthame, F. Quiròs, M. Tang, N. Vauchelet, *Derivation of a Hele-Shaw type system from a cell model with active motion*, to appear in *Interface and free boundaries*
- [A16] B. Perthame, M. Tang, N. Vauchelet, *Traveling wave solution of the Hele-Shaw model of tumor growth with nutrient*, *Math. Models and Meth. in Appl. Sci.*, Vol 24, no 13 (2014), 2601–2626
- [A15] P. Pietra, N. Vauchelet, *Numerical simulations of an energy-transport model for partially quantized particles*, *Comm. Math. Sci.* **12** no 1 (2014), 99–123
- [A14] M. Tang, N. Vauchelet, I. Cheddadi, I. Vignon-Clémentel, D. Drasdo, B. Perthame, *Composite waves for a cell population system modelling tumor invasion*, *Chinese Annals of Math. Ser. B.* **34** (2) (2013), 295–318
- [A13] F. James, N. Vauchelet, *Chemotaxis : from kinetic equations to aggregate dynamics*, *Nonlinear Diff. Eq. Appl.* Vol **20**, Issue 1 (2013), 101–127
- [A12] C. Jourdana, N. Vauchelet, *Analysis of a diffusive effective mass model for nanowires*, *Kin. Rel. Models.*, Vol 4 no 4 (2011), 1121–1142
- [A11] F. James, N. Vauchelet, *A remark on duality solutions for some weakly nonlinear scalar conservation laws*, *C. R. Acad. Sci.* **349** (2011), 657–661
- [A10] B. Perthame, C. Schmeiser, M. Tang, N. Vauchelet, *Traveling plateaus for a hyperbolic Keller-Segel system with attraction and repulsion : existence and branching instabilities*, *Nonlinearity* **24** (2011) 1253–1270 (**featured article**)
- [A9] F. Cerreti, B. Perthame, C. Schmeiser, M. Tang, N. Vauchelet, *Wave for an Hyperbolic Keller-Segel Model and Branching Instabilities*, *Math. Model. Meth. Appl. Sci.*, Special Issue on Mathematics and Complexity in Human and Life Sciences, **21** (2011), 825–842
- [A8] N. Vauchelet, *Diffusive limit of a kinetic system of partially quantized particles in one dimension*, *J. Stat. Phys.* (2010) 139, 882–914

- [A7] N. Vauchelet, *Numerical simulation of a kinetic model for chemotaxis*, Kin. Rel. Models., Vol 3, no 3 (2010), 501–528
- [A6] N. Vauchelet, J.-P. Dudon, C. Besse, Th. Goudon *Comparison of Vlasov solvers for spacecraft charging simulation*, Math. Mod. Num. Analysis (2010) 44, 109–131
- [A5] P. Pietra, N. Vauchelet, *Modeling and simulation of the diffusive transport in a nanoscale Double-Gate MOSFET*, J. Comput. Elec., (2008) 7 :52–65
- [A4] N. Vauchelet, *Diffusive transport of partially quantized particles : $L \log L$ solutions*, Math. Model. Methods Appl. Sci. (2008), vol 18 no 4, 489–510
- [A3] N. Ben Abdallah, F. Méhats, N. Vauchelet, *Diffusive transport of partially quantized particles : Existence, uniqueness and long time behaviour*, Proc. Edinb. Math. Soc. (2006), **49**, 513–549
- [A2] N. Ben Abdallah, F. Méhats, N. Vauchelet, *A note on long time behaviour for the Drift-Diffusion-Poisson system*, C.R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 339 (2004) 683–688
- [A1] N. Ben Abdallah, F. Méhats, N. Vauchelet, *Analysis of a Drift-Diffusion-Schrödinger-Poisson model*, C.R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 335 (2002) 1007–1012

Proceedings avec comité de lecture :

- [C6] M. Kolwaczyk, B. Perthame, N. Vauchelet, *Transversal instability for the thermodiffusive reaction-diffusion system*, Proceeding of the International Conference on Nonlinear and Multiscale Partial Differential Equations : Theory, Numerics and Applications, Shanghai.
- [C5] F. James, N. Vauchelet, *Numerical simulation of a hyperbolic model for chemotaxis after blow up*, Proceedings of the HYP2012 International Conference, Theory, Numerics and Applications of Hyperbolic Problems, AIMS on Applied Mathematics, Vol. 8, 693–700
- [C4] N. Ben Abdallah, C. Jourdana, P. Pietra, N. Vauchelet, *A hybrid classical-quantum approach for ultra-scaled confined nanostructures : modeling and simulation*, ESAIM Proc. **35** (2012), 239–244
- [C3] F. James, N. Vauchelet, *On the hydrodynamical limit for a one dimensional kinetic model of cell aggregation by chemotaxis*, Riv. Mat. Univ. Parma. (2012) Vol 3, no 1, 91–113
- [C2] F. Charles, N. Vauchelet, C. Besse, T. Goudon, I. Lacroix-Violet, J.-P. Dudon, L. Navoret, *Numerical approximation of Knudsen layer for Euler-Poisson system*, ESAIM Proc. **32** (2011), 177–194
- [C1] N. Ben Abdallah, F. Méhats, P. Pietra, N. Vauchelet, *A drift-diffusion subband model for the simulation of the Double-Gate MOSFET*, 5th IEEE Conference on Nanotechnology (2005) vol 2, 519–522

Actes de conférences sans comité de lecture :

- [R1] N. Vauchelet, *Description cinétique et modèles asymptotiques pour le mouvement des bactéries par chimiotactisme*, Equations aux dérivées partielles et leurs applications. Actes du colloque Edp-Normandie. Caen 2013. 125–132

Autres publications :

- [Th] N. Vauchelet, *Modélisation mathématique du transport diffusif de charges partiellement quantiques*, thèse de doctorat de l'Université Paul Sabatier, Toulouse 3, 2006

Les articles [A6, C2] ne sont pas présentés dans ce mémoire. L'article [A1] est une note annonçant le système étudié dans [A3].

Bibliographie générale

- [1] W. Alt, *Biased random walk models for chemotaxis and related diffusion approximations*, J. Math. Biol. **9**, 147–177 (1980).
- [2] L. Ambrosio, N. Fusco, D. Pallara, *Functions of Bounded Variation and Free Discontinuity Problems*, Oxford University Press, 2000.
- [3] L. Ambrosio, N. Gigli, G. Savaré, *Gradient flows in metric space of probability measures*, Lectures in Mathematics, Birkäuser, 2005
- [4] A. Anderson, M.A.J. Chaplain, K. Rejniak, *Single-cell-based models in biology and medicine*, Birkhauser, Basel, 2007.
- [5] A. Arnold, P. Markowich, G. Toscani, *On Large Time Asymptotics for Drift-Diffusion-Poisson Systems*, Transport Theory Statist. Phys. **29** (2000), no. 3-5, 571–581.
- [6] A. Arnold, P. Markowich, G. Toscani, A. Unterreiter, *On generalized Csiszár-Kullback inequalities*, Monatsh. Math. **131** (2000), no. 3, 235–253.
- [7] Aronson, D. G. ; Bénilan, Ph. *Régularité des solutions de l'équation des milieux poreux dans R^N* . C. R. Acad. Sci. Paris Sér. A-B 288 (1979), no. 2, A103–A105.
- [8] N.W. Ashcroft, N.D. Mermin, *Solid State Physics*, Brooks Cole Ed., 1976.
- [9] J-P. Aubin, A. Cellina, *Differential inclusions. Set-valued maps and viability theory*. Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften [Fundamental Principles of Mathematical Sciences], **264**. Springer-Verlag, Berlin, 1984.
- [10] G. Baccarani, S. Reggiani, *A compact double-gate MOSFET model comprising quantum-mechanical and nonstatic effects*, IEEE Trans. Electron Devices **46** (8) (1999), 1656–1666.
- [11] F. Balestra, S. Cristoloveanu, M. Benachir, J. Brini, T. Elewa, *Double-gate silicon-on-insulator transistor with volume inversion : A new device with greatly enhanced performance*, IEEE Electron Device Lett., vol. EDL-8, pp 410-412, Sept. 1987.
- [12] C. Bardos, R. Santos, R. Sentis, *Diffusion approximation and computation of the critical size*, Trans. Am. Math. Soc. **284** (1984), 617–649.
- [13] M. Baro, N. Ben Abdallah, P. Degond, A. El Ayyadi, *A 1D coupled Schrödinger drift-diffusion model including collisions*, J. Comp. Phys **203** (2005), 129–153.
- [14] P. Biler, J. Dolbeault, P. A. Markowich, *Large time asymptotics of nonlinear drift-diffusion systems with Poisson coupling*, Transport Theory Statist. Phys. **30** (2001), no. 4-6, 521–536.
- [15] Bellomo, N. ; Li, N. K. ; Maini, P. K. *On the foundations of cancer modelling : selected topics, speculations, and perspectives*. Math. Models Methods Appl. Sci. 18 (2008), no. 4, 593–646.
- [16] N. Bellomo and L. Preziosi, *Modeling and mathematical problems related to tumor evolution and its interaction with the immune system*, *Math. Comput. Mod.* **32** (2000) 413–452.
- [17] N. Ben Abdallah, *A hybrid kinetic-quantum model for stationary electron transport*, J. Stat. Phys. **90** (1998), no. 3-4, 627–662.
- [18] N. Ben Abdallah and L. Barletti, *Quantum transport in crystals : effective-mass theorem and $k.p$ Hamiltonians*, Comm. Math. Phys. (to appear).

- [19] N. Ben Abdallah, J. M. Cáceres, J. A. Carrillo, F. Vecil, *A deterministic solver for a hybrid quantum-classical transport model in nanoMOSFETs*, J. Comput. Phys. **228** (2009), no. 17, 6553–6571.
- [20] N. Ben Abdallah, P. Degond, *On a hierarchy of macroscopic models for semiconductors*, J. Math. Phys. **37**, n. 7 (1996), 3308–3333.
- [21] N. Ben Abdallah, P. Degond, S. Génieys, *An energy transport model for the semiconductors derived from the Boltzmann equation*, J. Stat. Phys., **84**, n. 1-2 (1996), 205–231.
- [22] N. Ben Abdallah, L. Desvillettes, S. Génieys, *On the Convergence of the Boltzmann equation for semiconductors towards the Energy Transport model*, J. Stat. Phys. **98**, n. 3-4 (2000), 835–870.
- [23] N. Ben Abdallah, C. Jourdana and P. Pietra, *An effective mass model for the simulation of ultra-scaled confined devices*, Math. Models Methods Appl. Sci. **22** (2012), no. 12, 125–139.
- [24] N. Ben Abdallah, F. Méhats, *Semiclassical limit of the Schrödinger equation with a partially confining potential*, J. Math. Pures App. **84** (2005), 580–614.
- [25] N. Ben Abdallah, F. Méhats, *On a Vlasov-Schrödinger-Poisson model*, Comm. Partial Differential Equations **29** (2004), no. 1-2, 173–206.
- [26] N. Ben Abdallah, F. Méhats, C. Negulescu, *Adiabatic quantum-fluid transport models*, Comm. Math. Sci. **4** (2006), no. 3, 621-650.
- [27] N. Ben Abdallah, S. Tang, *On hybrid quantum-classical transport models*, Math. Meth. Appl. Sci. **27** (2004), 643–667.
- [28] N. Ben Abdallah, M. L. Tayeb, *Diffusion approximation for the one dimensional Boltzmann-Poisson system*, Discrete and Continuous Dynamical Systems-Series B, **4** (4), (November 2004), 1129–1142.
- [29] Martine Ben Amar and Alain Goriely, *Growth and instability in elastic tissues*, J. Mech. Phys. Solids, 53 (10) : 2284–2319, 2005.
- [30] F. Ben Belgacem, P. E. Jabin, *Compactness for nonlinear transport equations*. J. Funct. Anal, 264 (2013), no. 1, 139–168.
- [31] D. Benedetto, E. Caglioti, M. Pulvirenti, *A kinetic equation for granular media*, RAIRO Model. Math. Anal. Numer., **31** (1997), 615-641
- [32] H. Berg, *E. Coli in motion*, Springer, 2004.
- [33] A.L. Bertozzi, J.A. Carrillo, Th. Laurent, *Blow-up in multidimensional aggregation equation with mildly singular interaction kernels*, Nonlinearity **22** (2009) 683–710.
- [34] A.L. Bertozzi, T. Laurent, J. Rosado, *L^p theory for the multidimensional aggregation equation*, Comm. Pure Appl. Math., **64**(1) (2011) 45–83.
- [35] Bénilan, Ph. ; Igbida, N. *La limite de la solution de $u_t = \Delta_p u^m$ lorsque $m \rightarrow \infty$* . C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math. 321 (1995), no. 10, 1323–1328.
- [36] H. Berestycki, F. Hamel, Reaction-Diffusion Equations and Propagation Phenomena, Springer Verlag, New York (2012)
- [37] H. Berestycki, B. Nicolaenko and B. Scheurer, *Traveling wave solutions to combustion models and their singular limits*, SIAM J. Math. Anal. **16**(6) (1985) 1207–1242.
- [38] S. Bianchini, M. Gloyer, *An estimate on the flow generated by monotone operators*, Comm. Partial Diff. Eq., **36** (2011), n° 5, 777–796
- [39] A. Blanchet, J. Dolbeault, B. Perthame, *Two-dimensional Keller-Segel model : optimal critical mass and qualitative properties of the solutions*, Electron. J. Differential Equations (2006) **44** 32 pp.
- [40] G.A. Bonaschi, J.A. Carrillo, M. Di Francesco, M.A. Peletier, *Equivalence of gradient flows and entropy solutions for singular nonlocal interaction equations in 1D*, arXiv :1310.4110
- [41] F. Bouchut, F. Golse, M. Pulvirenti, *Kinetic equations and asymptotic theory*, Series in Appl. Math., Gauthier-Villars, 2000.

- [42] F. Bouchut, F. James, *One-dimensional transport equations with discontinuous coefficients*, Nonlinear Analysis TMA **32** (1998), n° 7, 891–933.
- [43] F. Bouchut, F. James, *Duality solutions for pressureless gases, monotone scalar conservation laws, and uniqueness*, Comm. Partial Differential Eq., **24** (1999), 2173–2189.
- [44] F. Bouchut, F. James, S. Mancini, *Uniqueness and weak stability for multidimensional transport equations with one-sided Lipschitz coefficients*, Ann. Scuola Norm. Sup. Pisa Cl. Sci. (5), **IV** (2005), 1–25.
- [45] N. Bournaveas, V. Calvez, S. Gutiérrez, B. Perthame *Global existence for a kinetic model of chemotaxis via dispersion and Strichartz estimates*, Comm Partial Differential Equations **33** (2008), 79–95.
- [46] F. Brezzi, M. Fortin, *Mixed and hybrid finite element methods*, Springer Series in Computational Mathematics, 15. Springer-Verlag, New York, 1991.
- [47] F. Brezzi, L. Marini, P. Pietra, *Two-dimensional exponential fitting and applications to drift-diffusion models*, SIAM J. Num. Anal. **26** (1989), 1342–1355.
- [48] M. Burger, M. Di Francesco, Y. Dolak-Strauss, *The Keller-Segel model for is with prevention of overcrowding : linear vs. nonlinear diffusion*, SIAM J. Math. Anal. **38** No. 4, 1288–1315 (2006).
- [49] M. Burger, Y. Dolak-Strauss, C. Schmeiser, *Asymptotic analysis of an advection-dominated chemotaxis model in multiple spatial dimensions*, Commun. Math. Sci. **6** No. 1, 1–28 (2008).
- [50] Byrne, H. M. ; Chaplain, M. A. *Growth of necrotic tumors in the presence and absence of inhibitors*. Math. Biosci. 135 (1996), no. 15, 187–216.
- [51] Byrne, H. M. ; Drasdo, D. *Individual-based and continuum models of growing cell populations : a comparison*. J. Math. Biol. **58** (2009), no. 4-5, 657–687.
- [52] Byrne, H. M. ; Preziosi, L. *Modelling solid tumour growth using the theory of mixtures*. Math. Med. Biol. 20 (2003), no. 4, 341–366.
- [53] J. A. Carrillo, A. Chertock, Y. Huang, *A finite-volume method for nonlinear nonlocal equations with a gradient flow structure*, preprint
- [54] J. A. Carrillo, M. DiFrancesco, A. Figalli, T. Laurent, D. Slepčev, *Global-in-time weak measure solutions and finite-time aggregation for nonlocal interaction equations*, Duke Math. J. **156** (2011), 229–271
- [55] J. A. Carrillo, R. J. McCann, C. Villani, *Contractions in the 2-Wasserstein length space and thermalization of granular media*, Arch. Rational Mech. Anal. **179** (2006), 217–263
- [56] Ph. Caussignac, B. Zimmermann, R. Ferro, *Finite element approximation of electrostatic potential in one dimensional multilayer structures with quantized electronic charge*, Computing 45, (1990) 251–264.
- [57] C. Chainais-Hillairet, *Discrete duality finite volume schemes for two-dimensional drift-diffusion and energy-transport models*, Internat. J. Numer. Methods Fluids **59** (2009), no 3, 239–257.
- [58] F.A.C.C. Chalub, P.A. Markowich, B. Perthame, C. Schmeiser, *Kinetic models for chemotaxis and their drift-diffusion limits*, Monatsh. Math. **142**, 123–141 (2004).
- [59] Chaplain, M. A. J. *Avascular growth, angiogenesis and vascular growth in solid tumours : the mathematical modeling of the stages of tumor development*. Math. Comput. Modeling 23 (1996), no. 6, 47–87.
- [60] C. Chatelain, T. Balois, P. Ciarletta and M. Ben Amar, *Emergence of microstructural patterns in skin cancer : a phase separation analysis in a binary mixture*, *New Journal of Physics* **13** (2011) 115013.
- [61] Ciarletta, P. ; Foret, L. ; Ben Amar, M. *The radial growth phase of malignant melanoma : multi-phase modelling, numerical simulations and linear stability analysis*. J. R. Soc. Interface 8 (2011) no. 56, 345–368.

- [62] T. Colin, D. Bresch, E. Grenier, B. Ribba and O. Saut, Computational modeling of solid tumor growth : the avascular stage, *SIAM Journal of Scientific Computing* **32** (4) (2010) 2321–2344.
- [63] R.M. Colombo, M. Garavello, M. Lécureux-Mercier, *A class of nonlocal models for pedestrian traffic*, Math. Models Methods Appl. Sci., (2012) **22**(4) :1150023, 34.
- [64] F. Cornelis, O. Saut, P. Cumsille, D. Lombardi, A. Iollo, J. Palussire and T. Colin, In vivo mathematical modeling of tumor growth from imaging data : Soon to come in the future?, *Diagnostic and Interventional Imaging* **94**(6) (2013), 593–600.
- [65] K. Craig, A. L. Bertozzi, *A Blob Method for the Aggregation Equation*, preprint.
- [66] Crandall, M. G. ; Pierre, M. *Regularizing effects for $u_t = \Delta\phi(u)$* , Trans. Amer. Math. Soc. 274 (1982), no. 1, 159–168.
- [67] G. Crippa, M. Lécureux-Mercier, *Existence and uniqueness of measure solutions for a system of continuity equations with non-local flow*, NoDEA Nonlinear Differential Equations Appl., (2013) **20**(3) :523–537.
- [68] Cui, S. ; Escher, J. *Asymptotic behaviour of solutions of a multidimensional moving boundary problem modeling tumor growth*. Comm. Partial Differential Equations 33 (2008), no. 4–6, 636–655.
- [69] A. L. Dalibart, B. Perthame, *Existence of solutions of the hyperbolic Keller-Segel model*, Trans. Amer. Math. Soc. **361** No. 5, 2319–2335 (2009).
- [70] M. Di Francesco, S. Fagioli, *Measure solutions for non-local interaction PDEs with two species*, Nonlinearity **26** (2013), 2777–2808.
- [71] R. J. Diperna, P. L. Lions, *On the Cauchy problem for the Boltzmann equation ; global existence and weak stability*, Ann. Math. (130) (1989), 707–741.
- [72] R. J. Diperna, P. L. Lions, *Ordinary differential equations, transport theory and Sobolev spaces*, Invent. Math. (1989), **98** (3), 511–547.
- [73] P. Degond, A. El Ayyadi, *A coupled Schrödinger Drift-Diffusion model for Quantum semiconductor device simulations*, J. Comp. Phys. **181** (2002), 222–259.
- [74] P. Degond, A. Jüngel, P. Pietra, *Numerical discretization of energy-transport models for semiconductors with non-parabolic band structure*, SIAM J. Sci. Comput., **22** (2000), 986–1007.
- [75] P. Degond, C. Schmeiser, *Macroscopic models for semiconductor heterostructures*, J. Math. Phys. **39** (1998), no. 9, 4634–4663.
- [76] P. Degond, C. Schmeiser, *Kinetic boundary layers and fluid-kinetic coupling in semiconductors*, Transp. Theory Statist. Phys. **28** (1999), 31–55.
- [77] Y. Dolak, C. Schmeiser, *Kinetic models for chemotaxis : Hydrodynamic limits and spatio-temporal mechanisms*, J. Math. Biol. **51**, 595–615 (2005).
- [78] Y. Dolak-Strauss, C. Schmeiser, *The Keller-Segel model with logistic sensitivity function and small diffusivity*, SIAM J. Appl. Math., **66** No. 1, 286–308 (2005).
- [79] J. Dolbeault, M. del Pino, *Generalized Sobolev inequalities and asymptotic behaviour in fast diffusion and porous medium problems*, preprint Ceremade no. 9905 (1999).
- [80] J. Dolbeault, C. Schmeiser, *The two-dimensional Keller-Segel model after blow-up*, Disc. Cont. Dyn. Syst. A **25** (2009), 109–121.
- [81] Drasdo, D. ; Hoehme, S. *Modeling the impact of granular embedding media, and pulling versus pushing cells on growing cell clones*. New J. Phys. 14 (2012) 055025 (37pp).
- [82] R. Erban, H.J. Hwang, *Global existence results for complex hyperbolic models of bacterial chemotaxis*, Disc. Cont. Dyn. Systems-Series B **6**, no 6, 1239–1260 (2006).
- [83] R. Erban, H.G. Othmer, *From individual to collective behavior in bacterial chemotaxis*, SIAM J. Appl. Math. **65** (2004/05), no 2, 361–391
- [84] R. Erban, H.G. Othmer, *Taxis equations for amoeboid cells*, J. Math. Biol. **54**, no 6, 847–885 (2004).

- [85] D. K. Ferry, S. M. Goodnick, *Transport in nanostructures*, Cambridge Univ. Press (1997).
- [86] F. Filbet, Ph. Laurençot, B. Perthame, *Derivation of hyperbolic models for chemosensitive movement*, J. Math. Biol. **50**, 189–207 (2005).
- [87] F. Filbet, C. Yang, *Numerical Simulations of Kinetic Models for chemotaxis*, SIAM Journal on Scientific Computing, **36** (3) (2014) : B348–B366.
- [88] A.F. Filippov, *Differential Equations with Discontinuous Right-Hand Side*, A.M.S. Transl. (2) **42** (1964), 199–231
- [89] M. Fournié, *Numerical discretization of the energy-transport model for semiconductors*, Applied Mathematics Letters (2002) **15**(6), 721–726.
- [90] A. Friedman, A hierarchy of cancer models and their mathematical challenges, *DCDS(B)* **4**(1) (2004), 147–159.
- [91] Friedman, A. ; Hu, B. *Stability and instability of Liapunov-Schmidt and Hopf bifurcation for a free boundary problem arising in a tumor model*. Trans. Am. Math. Soc. **360** (2008), no. 10, 5291–5342.
- [92] M. Funaki, M. Mimura and A. Tsujikawa, *Traveling front solutions in a chemotaxis-growth model*, Interfaces and Free Boundaries, **8**, 223–245 (2006).
- [93] R.A. Gardner, *Existence of travelling wave solution of predator-prey systems via the connection index*, SIAM J. Appl. Math. **44** (1984), 56–76.
- [94] S. Gadau, A. Jüngel, *A three-dimensional mixed finite-element approximation of the semiconductor energy-transport equations*, SIAM J. Sci. Comput. **31** (2008/09) no 2, 1120–1140.
- [95] S. Gadau, A. Jüngel, P. Pietra, *A mixed finite-element scheme of a semiconductor energy-transport model using dual entropy variables*, Hyperbolic problems : theory, numerics and applications. I, 139–146, Yokohama Publ., Yokohama, 2006.
- [96] H. Gajewski, *On existence, uniqueness and asymptotic behavior of solutions of the basic equations for carrier transport in semiconductors*, Z. Angew. Math. Mech. **65** (1985), no. 2, 101–108.
- [97] H. Gajewski, K. Gröger, *Semiconductor equations for variable mobilities based on Boltzmann statistics or Fermi-Dirac statistics*, Math. Nachr. **140** (1989), 7–36.
- [98] Léo Glangetas and Jean-Michel Roquejoffre, *Bifurcations of travelling waves in the thermo-diffusive model for flame propagation*, Arch. Rational Mech. Anal., **134** : 341–402, 1996.
- [99] I. Golding, Y. Kozlovsky, I. Cohen and E. Ben Jacob, *Studies of bacterial branching growth using reaction-diffusion models for colonial development*, Physica A, **260** (1998) 510–554.
- [100] F. Golse, *Knudsen layers from a computational viewpoint*, Transp. Theory Stat. Phys. **21** (1992), 211–236.
- [101] F. Golse, P. L. Lions, B. Perthame and R. Sentis, *Regularity of the moments of solution of a transport equation*, J. Func. Anal. **76**, (1988), 110–125.
- [102] F. Golse, F. Poupaud, *Limite fluide des équation de Boltzmann des semiconducteurs pour une statistique de Fermi-Dirac*, Asympt. Analysis **6** (1992), 135–169.
- [103] T. Goudon, P.-E. Jabin, A. Vasseur, *Hydrodynamic limit for the Vlasov-Navier-Stokes equations. Part II : fine particles regime*, Indiana Univ. Math. J. **53** No. 6 (2004), 1517–1536.
- [104] T. Goudon, J. Nieto, F. Poupaud, J. Soler, *Multidimensional high-field limit of the electrostatic Vlasov-Poisson-Fokker-Planck system*, J. Differential Equations **213** (2005), no. 2, 418–442.
- [105] P. Gray, S. K. Scott, *Autocatalytic reactions in the isothermal continuous stirred tank reactor : isolas and other forms of multistability*. Chem. Eng. Sci. **38**, no. 1, 29–43 (1983)
- [106] Greenspan, H. P. *Models for the growth of a solid tumor by diffusion*. Stud. Appl. Math. **51** (1972), no. 4, 317–340.
- [107] H.K. Gummel, *A self-consistent iterative scheme for one-dimensional steady state transistor calculations*, IEEE Trans. on Elec Dev., **11** (10) 455, 1964.

- [108] F. Hamel and L. Ryzhik, *Traveling fronts for the thermo-diffusive system with arbitrary Lewis numbers*, Arch. Ration. Mech. Anal., **195** (3) : 923–952, 2010.
- [109] K. Hamze, D. Julkowska, S. Autret, K. Hinc et al., Identification of genes required for different stages of dentritic swarming in *Bacillus subtilis*, with a role for *phrC*. Microbiology **155**, 398-412 (2009).
- [110] Hecht, F., *New development in FreeFem++*, J. Numer.Math., **20** (2012), no 3-4, pp 251–265. <http://www.freefem.org>
- [111] C. Heitzinger and C. Ringhofer, *A transport equation for confined structures derived from the Boltzmann equation*, Comm. Math. Sci. **9** (3) (2011) 829–857.
- [112] T. Hillen, *A classification of spikes and plateaus*, SIAM Rev. **49**(1), 35-51 (2007).
- [113] T. Hillen, K. Painter, *A user's guide to PDE models for chemotaxis*, J. Math. Biol. **58**, 183-217 (2009).
- [114] S. Holst, A. Jüngel, P. Pietra, *A mixed finite-element discretization of the energy-transport model for semiconductors*, SIAM J. Sci. Comput. (2003) **24**(6), 2058–2075.
- [115] D. Horstmann, From 1970 until present : The Keller-Segel model in chemotaxis and its consequences, Part I. Jahresbericht der DMV **105**, no. 3, 103–165, (2003).
- [116] D. Horstmann, From 1970 until present : The Keller-Segel model in chemotaxis and its consequences, Part II. Jahresbericht der DMV **106**, no. 2, 51–69, (2004).
- [117] H.J. Hwang, K. Kang, A. Stevens, *Global solutions of nonlinear transport equations for chemosensitive movement*, SIAM J. Math. Anal. **36** 4, 1177–1199 (2005).
- [118] N. Jagiella, Parameterization of Lattice-Based Tumor Models from Data, *PhD Thesis*, UPMC (2013), <http://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00779981>
- [119] J.W. Jerome , C.W. Shu, *Energy transport systems for semiconductors : analysis and simulation*, World Congress of Nonlinear Analysis, vol. I–IV. de Gruyter : Berlin, 1996, 3835–3846.
- [120] R. Jordan, D. Kinderlehrer, F. Otto, *The variational formulation of the Fokker-Planck equation*, SIAM J. Math. Anal., **29** (1998), 1-17
- [121] D. Julkowska, M. Obuchowski, I. B. Holland, S. J. Seror, Branched swarming patterns on a synthetic medium formed by wild type *Bacillus subtilis* strain 3610. Microbiology **150**, 1839-1849 (2004).
- [122] D. Julkowska, M. Obuchowski, I. B. Holland, S. J. Seror, Comparative analysis of the development of swarming communities *Bacillus subtilis* 168 anda a natural wild type : critical effect of the surfactin and the composition of the medium. J. Bacteriol. **187**, 65-74 (2005).
- [123] A. Jüngel, *Transport Equations for Semiconductors*, Lectures Notes in Physics no 773, Springer, Berlin, 2009.
- [124] K. Kawasaki, A. Mochizuki, M. Matsushita, T. Umeda, N. Shigesada, *Modeling spatio-temporal patterns created by Bacillus-subtilis*, J. Theor. Biol., **188**, 177-185 (1997).
- [125] E.F. Keller, L.A. Segel, *Initiation of slime mold aggregation viewed as instability*, J. Theor. Biol. **26**, 399–415 (1970).
- [126] Y. Kozlovsky, I. Cohen, I. Golding, E. Ben-Jacob, *Lubricating bacteria model for branching growth of bacterial colony*, Phys. Rev. E, Phys. plasmas fluids Relat. Interdisciplinary Topics, **50**, 7025-7035 (1999).
- [127] T. Li, Z. Wang, *Nonlinear stability of traveling waves to a hyperbolic-parabolic system modeling chemotaxis*, SIAM J. Appl. Math. **70** (2009), 1522–1541.
- [128] Lowengrub, J. S. ; Frieboes H. B. ; Jin, F. ; Chuang, Y.-L. ; Li, X. ; Macklin, P. ; Wise, S. M. ; Cristini, V. *Nonlinear modelling of cancer : bridging the gap between cells and tumours*. Nonlinearity **23** (2010), no. 1, R1–R91.
- [129] S. Luckhaus, Y. Sugiyama and J.J.L. Velazquez, *Measure valued solutions of the 2D Keller-Segel system*, Arch. Rational Mech. Anal. **206**, Issue 1, pp 31-80 (2012).

- [130] P. A. Markowich, C. A. Ringhofer, C. Schmeiser, Semiconductor equations, Springer-Verlag, Vienna, 1990.
- [131] A. Marrocco, Ph. Montarnal, *Simulation de modèles "energy transport" à l'aide des éléments finis mixtes*. (French) [Simulation of energy transport models via mixed finite elements], C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math. **323** (1996).
- [132] A. Marrocco, H. Henry, I. B. Holland, M. Plapp, S. J. S  ror, B. Perthame, *Models of self-organizing bacterial communities and comparisons with experimental observations*, Math. Model. Nat. Phenom. **90**, issue 1 (2010), 357–373.
- [133] N. Masmoudi, M. L. Tayeb, *Diffusion limit for semiconductor Boltzmann-Poisson system*, SIAM J. Math. Anal., vol. 38 issue 6 (2007), 1788–1807.
- [134] B. Maury, A. Roudneff-Chupin, F. Santambrogio, *A macroscopic crowd motion model of gradient flow type*, Mathematical Models and Methods in Applied Sciences Vol. 20, No. 10 (2010) 1787–1821.
- [135] M. Mimura, H. Sakaguchi and M. Matsushita, Reaction diffusion modeling of bacterial colony patterns, *Physica A*, **282** (2000) 283–303.
- [136] S. Mischler, *On the trace problem for the solutions of the Vlasov equation*, Comm. Partial Diff. Equations. **25** (7-8), (2000), 1415–1443.
- [137] M. S. Mock, Analysis of mathematical models of semiconductor devices, Advances in Numerical Computation Series 3, Boole Press, 1983.
- [138] D. Morale, V. Capasso, K. Oelschl  ger, *An interacting particle system modelling aggregation behavior : from individuals to populations*, J. Math. Biol., **50** (2005), 49-66
- [139] J. D. Murray, *Mathematical biology*, Springer-Verlag, 1989.
- [140] G. Nadin, B. Perthame, L. Ryzhik, *Traveling waves for the Keller-Segel system with Fisher birth terms*, Interfaces and Free Boundaries **10** (2008) 517–538.
- [141] C. Di Russo, R. Natalini, M. Ribot, *Global existence of smooth solutions to a two-dimensional hyperbolic model of chemotaxis*. Commun. Appl. Ind. Math., 1(1) :92– 109, 2010.
- [142] C. Negulescu, N. Ben Abdallah, E. Polizzi, M. Mouis, *Simulation schemes in 2D nanoscale MOS-FETs : a WKB based method*, J. Comput. Electron. **3**, no. 3–4, 397–400 (2005).
- [143] F. Nier, *Schr  dinger-Poisson systems in dimension $d \leq 3$: the whole-space case*, Proc. Roy. Soc. Edinburgh Sect. A **123** (1993), no. 6, 1179–1201.
- [144] F. Nier, *A variational formulation of Schr  dinger-Poisson systems in dimension $d \leq 3$* , Comm. Partial Differential Equations **18** (1993), no. 7-8, 1125–1147.
- [145] J. Nieto, F. Poupaud, J. Soler, *High field limit for Vlasov-Poisson-Fokker-Planck equations*, Arch. Rational Mech. Anal. **158** (2001), 29–59.
- [146] A. Okubo, S. Levin, Diffusion and Ecological Problems : Modern Perspectives, Springer, Berlin, 2002
- [147] H.G. Othmer, S.R. Dunbar, W. Alt, *Models of dispersal in biological systems*, J. Math. Biol. **26**, 263–298 (1988).
- [148] K.J. Painter, P. Maini, and H. Othmer, *Development and application of a model of cellular response to multiple chemical cues*, J. Math. Biol., 41(4) :285-314, 2000.
- [149] K.J. Painter and T. Hillen, *Volume-Filling and Quorum Sensing in Models for Chemosensitive Movement*, Canadian Applied Mathematics Quarterly, Vol 10(4), 2002, 501-543.
- [150] C.S. Patlak, *Random walk with persistence and external bias*, Bull. Math. Biophys. **15** (1953), 263–298.
- [151] B. Perthame, *PDE models for chemotactic movements : parabolic, hyperbolic and kinetic*, Appl. Math. **49** 6, 539–564 (2004).
- [152] B. Perthame, Transport equations in Biology LN Series Frontiers in Mathematics, Birkhauser, (2007).

- [153] Perthame, B. ; Quirós, F. ; Vázquez, J. L. *The Hele-Shaw asymptotics for mechanical models of tumor growth*. Arch. Ration. Mech. Anal. 212 (2014), no. 1, 93–127
- [154] E. Polizzi, N. Ben Abdallah, *Subband decomposition approach for the simulation of quantum electron transport in nanostructures*, J. Comp. Phys. **202** (2005), 150–180.
- [155] J. Pöschel, E. Trubowitz, *Inverse spectral theory*, Academic Press, 1987.
- [156] F. Poupaud, M. Rascle, *Measure solutions to the linear multidimensional transport equation with discontinuous coefficients*, Comm. Partial Diff. Equ. **22** (1997), 337–358
- [157] F. Poupaud, *Diffusion approximation of the linear semiconductor Boltzmann equation : analysis of boundary layers*, Asymptotic Analysis **4** (1991), 293–317.
- [158] F. Poupaud, *Diagonal defect measures, adhesion dynamics and Euler equation*, Methods Appl. Anal., **9** (2002), n° 4, 533–561
- [159] Preziosi, L. ; Tosin, A. *Multiphase modelling of tumour growth and extracellular matrix interaction : mathematical tools and applications*. J. Math. Biol. 58 (2009), no. 4-5, 625–656.
- [160] Ranft, J. ; Basana, M. ; Elgeti, J. ; Joanny, J.-F. ; Prost, J. ; Jülicher, F. *Fluidization of tissues by cell division and apoptosis*. Proc. Natl. Acad. Sci. USA (2010), no. 49, 20863–20868.
- [161] L. Reggiani (ed), *Hot electron transport in semiconductors*, Springer, Berlin, 1985.
- [162] C. Ringhofer, *An entropy-based finite difference method for the energy transport system*, Math. Models Methods Appl. Sci., **11** (2001), 769–796.
- [163] Roose, T. ; Chapman, S. J. ; Maini, P. K. *Mathematical models of avascular tumor growth*. SIAM Rev. 49 (2007), no. 2, 179–208.
- [164] J. Saragosti, V. Calvez, N. Bournaveas, A. Buguin, P. Silberzan, B. Perthame, *Mathematical description of bacterial traveling pulses*. PLoS Comput. Biol. 6 (2010), no. 8, e1000890, 12 pp.
- [165] J. Saragosti, V. Calvez, N. Bournaveas, B. Perthame, A. Buguin, P. Silberzan, *Directional persistence of chemotactic bacteria in a traveling concentration wave*, PNAS (2011).
- [166] K. Seeger, *Semiconductor Physics. An Introduction*, 6th edition, Springer, Berlin, 1997.
- [167] E. Sonnendrücker, J. Roche, P. Bertrand, A. Ghizzo, *The semi-Lagrangian method for the numerical resolution of the Vlasov equation*, J. Comput. Phys. **149** (1999) 201–220.
- [168] R. Stratton, *Diffusion of hot and cold electrons in semiconductor barriers*, Phys. Rev. **126** (1962), 2002–2014.
- [169] R. Stratton, *Semiconductor current flow equations (diffusion and degeneracy)*, IEEE Trans. Electron. Dev. ED-19 (1972), 1288–1292.
- [170] K. R. Swanson, R. C. Rockne, J. Claridge, M. A. J. Chaplain, E. C. Alvord Jr and A. R. Anderson, *Quantifying the role of angiogenesis in malignant progression of gliomas : in silico modeling integrates imaging and histology*, *Cancer Res.* **71** (2011) 7366–7375.
- [171] Y. Tao, Z.-A. Wang, *Competing effects of attraction vs. repulsion in chemotaxis*, Math. Models Methods Appl. Sci. **23** (2013), no 1, 1–36.
- [172] M. L. Tayeb, *From Boltzmann equation to spherical harmonics expansion model : diffusion limit and Poisson coupling*, Commun. Math. Sci. **9** (2011), no. 1, 255–275.
- [173] C. M. Topaz, A. L. Bertozzi, *Swarming patterns in a two-dimensional kinematic model for biological groups*, SIAM J. Appl. Math. **65** (2004), 152–174
- [174] G. Toscani, *Kinetic and hydrodynamic models of nearly elastic granular flows*, Monatsh. Math. **142**, 179–192
- [175] Vázquez, J. L. “The porous medium equation. Mathematical theory. Oxford Mathematical Monographs. The Clarendon Press, Oxford University Press, Oxford, 2007. ISBN : 978-0-19-856903-9.
- [176] C. Villani, **Optimal transport, old and new**, Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften 338, Springer, 2009

- [177] C. Villani, **Topics in optimal transportation**, Graduate Studies in Mathematics **58**, Amer. Math. Soc, Providence, 2003
- [178] B. Vinter, C. Weisbuch, Quantum Semiconductor Structures, Academic Press, 1991.
- [179] A.I. Vol’pert, *The spaces BV and quasilinear equations*, Math. USSR Sb., **2** (1967), 225–267.
- [180] H. F. Weinberger, M. A. Lewis, B. Li, *Analysis of linear determinacy for spread in cooperative models*, J. Math. Biol. 45 (2002) 183–218
- [181] A. Yamnaki, *Second order boundary conditions for the drift-diffusion equations of semiconductors*, Math. Methods Appl. Sci. **5** (1995), 429–456.