

Calcul des capacités parasites dans les interconnexions des circuits intégrés par une méthode de domaines fictifs

Sylvie Putot

▶ **To cite this version:**

Sylvie Putot. Calcul des capacités parasites dans les interconnexions des circuits intégrés par une méthode de domaines fictifs. Modélisation et simulation. Université Joseph-Fourier - Grenoble I, 2001. Français. NNT : . tel-00004700

HAL Id: tel-00004700
https://theses.hal.science/tel-00004700

Submitted on 16 Feb 2004

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

UNIVERSITÉ JOSEPH FOURIER – GRENOBLE 1

THESE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE JOSEPH FOURIER

Discipline : Mathématiques Appliquées

Présentée et soutenue publiquement

par

Sylvie PUTOT

le 15 janvier 2001

CALCUL DES CAPACITES PARASITES DANS LES INTERCONNEXIONS DES CIRCUITS INTEGRES PAR UNE METHODE DE DOMAINES FICTIFS

Directeur de thèse : Patrick WITOMSKI

COMPOSITION DU JURY

M. Pierre BARAS	Président
M. Roland GLOWINSKI	Rapporteur
M. Patrick JOLY	Rapporteur
M. François CHARLET	
M. Rémy KLEIN	
M. Rachid SALIK	
M. Patrick WITOMSKI	Directeur

Thèse préparée au Département Microélectronique du CEA-LETI.

Remerciements

Ce travail a été effectué au Laboratoire, d'Electronique, de Technologies et d'Instrumentation (CEA-LETI) dirigé par M. Jean Therme. Je tiens en premier lieu à remercier M. Joël Hartmann, chef du Département Micro-Electronique et M. Pierre Bichon, chef du Service Projet Intégration Technologiques, pour leur accueil et leur soutien pendant ces trois années.

Je souhaite témoigner toute ma gratitude à M. Patrick Witomski, qui a dirigé ce travail. Dans les moments de doute par lesquels tout thésard passe plus ou moins, j'ai trouvé un soutien constant. Son enthousiasme et son dynamisme communicatifs ont pour beaucoup contribué à faire de mon initiation à la recherche une expérience marquante.

Je tiens également à remercier M. Roland Glowinski et M. Patrick Joly d'avoir accepté la lourde et ingrate tâche de rapporteurs. Je leur suis très reconnaissante de leur relecture attentive et de leurs nombreuses remarques.
M. Pierre Baras m'a fait l'honneur de présider mon jury de thèse ; je le remercie pour l'intérêt qu'il a porté à ce travail. Mes remerciements vont également à M. Rémy Klein et à M. Rachid Salik, leur participation à mon jury m'a fait vraiment plaisir.

J'ai trouvé dans le groupe Informatique, Simulation et Statistiques (I2S), dirigé par M. Rémy Klein, d'excellentes conditions pour effectuer ma thèse, tant humaines que matérielles.
Bien sûr, mes premiers remerciements vont à François, mon responsable de thèse. Par son aide discrète mais efficace, et par la confiance qu'il m'a témoignée, il a pour beaucoup contribué au bon déroulement de ma thèse. Mais aussi Rémy, Daniela, Dominique, Elisabeth, Fred, Gilles, Jacques, Jean-François, Michel, Noëlle, Pascal, Pierrette, Pinuche, Ponpon, Yves, avec qui j'ai travaillé ou tout simplement passé de bons moments.
Je tiens également à remercier les membres de l'équipe d'Athesa, pour leur aide, apportée avec une bonne humeur constante, lors de mes démêlés avec l'éditeur d'équation …

Naturellement, je n'oublie pas non plus ceux que je n'ai pas cités plus haut, mais qui ont contribué à faire de ces trois années à Grenoble une période inoubliable : Josselin bien sûr, Yann, Fred, Gégé, le grand Fred, Nicolas, Claude-Pierre, Sophie, Jean-Philippe et Carine, Stéphane, Patrick et Soraya, Thierry et Isabelle,...

INTRODUCTION 9

CHAPITRE I. PRESENTATION DU PROBLEME 13

1. Modélisation des capacités d'interconnexions 13
1.1. Les interconnexions – quelques ordres de grandeur 13
1.2. Modéle mathématique 15
1.2.1 Equations de l'électrostatique dans les milieux continus 15
1.2.2 Conditions aux limites pour les conducteurs parfaits 16
1.2.3 Définition de la matrice des capacités de *N* conducteurs 16
1.3. Problème à résoudre et notations 17

2. L'existant 19
2.1. Eléments finis 20
2.2. Intégrales de frontière 21
2.3. Algorithme stochastique 22
2.4. Conclusion 25

3. Choix d'une formulation domaines fictifs 25
3.1. Principe des méthodes de domaines fictifs pour le problème de Dirichlet 25
3.2. Une formulation domaines fictifs du calcul des capacités 26
3.2.1 Principe de la méthode 26
3.2.2 Introduction du système couplé 26
3.2.3 Obtention du potentiel et de la charge 28

CHAPITRE II. DISCRETISATION 31

1. Introduction 31

2. L'approximation (A-GPP) due à R. Glowinski, T.-W. Pan et J. Périaux 33
2.1. Espaces de discrétisation 33
2.1.1 Discrétisation du potentiel 34
2.1.2 Discrétisation de la charge 34
2.2. Problème discret 35
2.3. Résolution efficace du système linéaire 35
2.4. Résultats (un exemple) et conclusion 36

3. Enrichissement de l'approximation pour des obstacles conducteurs 37
3.1. Introduction 37
3.2. Exemple de la dimension 1 38
3.2.1 Problème continu en dimension 1 38
3.2.2 Approximation du problème mixte 41
3.2.2.1 Approximation (A-GPP) 41
3.2.2.2 Approximation (A-Capa) 42
3.3. Dimension 2 : approximation du potentiel à un ordre supérieur 44
3.3.1 Notations 45
3.3.2 Calcul approché du potentiel autour de la surface des conducteurs 47
3.3.2.1 Cas de surfaces des conducteurs quelconques 47

3.3.2.2 Cas d'un segment de surface orthogonal à la grille 50
3.3.3 Un nouvel espace de discrétisation, $\overline{X}_{h,\eta}$, pour le potentiel 51
3.3.4 Propriétés sur les fonctions supplémentaires Ψ_k 53
3.3.5 Trace des fonctions de $\overline{X}_{h,\eta}$ sur la surface des conducteurs 55
3.4. Extension à la dimension 3 56
3.5. Nouveau problème discret 57
3.6. Une autre écriture dans le cas de conducteurs quelconques 61

4. Résultats numériques en dimension 2 63
4.1. Introduction 63
4.2. Géométrie circulaire : comparaison avec la solution analytique 65
4.3. Géométrie rectangulaire 69
4.3.1 Cas où les surfaces coïncident avec la grille de volume 70
4.3.2 Cas où les surfaces ne coïncident pas avec la grille de volume 70
4.3.3 Comparaisons des cas 4.3.1 et 4.3.2 73
4.4. Importance d'une bonne prise en compte des coins 74
4.4.1 Charge surfacique locale pour une grille fixée 74
4.4.1.1 Développement en série autour des points singuliers 74
4.4.1.2 Résultats de simulation pour une grille fixée 75
4.4.2 Observations globales 78
4.5. Conclusion 79

5. Conclusion 80

CHAPITRE III. ANALYSE NUMERIQUE 81

1. Formulation continue 81
1.1. Rappel du problème continu et notations 81
1.1.1 Normes sur les espaces du potentiel et de la charge 81
1.1.2 Le problème de point selle 82
1.2. Problème continu : existence d'une solution unique 83
1.3. Régularité des solutions 85
1.4. Approximation 85

2. Approximation (A-GPP) 86
2.1. Problème discret 86
2.2. Existence et convergence de la solution discrète 86
2.2.1 Résultats généraux 86
2.2.2 Application à l'approximation (A-GPP) 88
2.3. Conclusion 89

3. Parallèle avec des méthodes existantes de stabilisation de problèmes mixtes 90

4. Approximation (A-Capa) pour des surfaces orthogonales à la grille 93
4.1. Problème discret 94
4.2. Notations et propriétés préliminaires 97
4.3. Vérification des conditions d'existence et unicité d'une solution 99
4.3.1 Continuité et coercivité de $a_{h,\eta}$ 100

4.3.2 Continuité de b_η 101
4.3.3 Condition inf-sup 102
4.3.3.1 Condition inf-sup discrète : inversibilité du système 102
4.3.3.2 Condition inf-sup uniforme : convergence de l'approximation 103
4.4. Convergence de la solution approchée 107
4.4.1 Obtention d'une formule générale de majoration de l'erreur 108
4.4.2 Calcul de l'erreur de consistance 109
4.4.3 Calcul de l'erreur d'approximation 111
4.4.4 Convergence de la solution approchée 122

5. Conclusion 123

CHAPITRE IV. REALISATION NUMERIQUE 125

1. Structure du programme 125
1.1. Rappel : calcul de la matrice des capacités 125
1.2. Discrétisation et obtention du système linéaire 126
1.2.1 Construction des maillages et conditions aux limites 126
1.2.2 Ecriture matricielle du problème discret 127
1.3. Organisation du calcul 128

2. Initialisation : assemblage du système linéaire 129
2.1. Notations 129
2.2. Calcul de la matrice A 129
2.3. Calcul des intégrales de surface 130
2.3.1 Obtention du maillage de surface initial 130
2.3.2 Intersection maillage de surface / grille volumique 130
2.3.3 Schéma d'intégration numérique sur un polygone 133
2.3.3.1 Intégration exacte 133
2.3.3.2 Intégration approchée 134
2.4. Calcul et stockage de la matrice de couplage B 134
2.4.1 Calcul d'un terme de la matrice de couplage 134
2.4.2 Assemblage 134
2.4.3 Stockage Morse 135
2.5. Calcul de la matrice C 136
2.6. Simplification du calcul de B et C pour un choix particulier du maillage de surface 136

3. Résolution du problème discret 137
3.1. Algorithme de résolution du système linéaire 137
3.2. Résolution rapide du problème de Poisson 139
3.2.1 Expression de la matrice A 140
3.2.2 Principe de la résolution 141
3.2.3 Algorithme de résolution 143
3.2.4 Diagonalisation : changements de base et valeurs propres 143
3.2.5 Coût d'une résolution du problème de Poisson 144

4. Documentation technique 144

CHAPITRE V. RESULTATS SUR DES STRUCTURES REELLES 147

1. Observations sur une structure réelle 3D _____ 147
1.1. Comparaison (A-GPP) – (A-Capa) _____ 148
1.2. Choix du maillage de surface _____ 151
1.3. Choix de la grille de volume _____ 155

2. Validation du programme _____ 155
2.1. Comparaison avec d'autres logiciels _____ 155
2.1.1 Les logiciels testés _____ 156
2.1.2 Première série de structures _____ 156
2.1.3 Deuxième série de structures _____ 158
2.2. Comparaison avec des mesures expérimentales _____ 162

3. Une utilisation pour traiter des circuits complets _____ 163

CONCLUSION _____ 165

BIBLIOGRAPHIE _____ 167

Introduction

Depuis les débuts de la micro-électronique dans les années 60, les densités d'intégration et la vitesse de fonctionnement des circuits intégrés ne cessent d'augmenter : la taille des transistors, la section minimale et l'espacement des interconnexions - c'est-à-dire les fils conducteurs reliant les transistors entre eux - sont de plus en plus faibles, pour des circuits de plus en plus complexes. Ces améliorations, qui doublent les performances des circuits pratiquement tous les deux ans, ont aussi pour conséquence d'amplifier les effets parasites dans la puce. Ainsi les temps de propagation d'un signal dans les lignes d'interconnexion deviennent critiques pour le fonctionnement des circuits : pour une technologie donnée, le retard dû aux interconnexions passe de cinq pour cent du retard total en 1988 à plus de cinquante pour cent en 2000. Les délais de propagation et couplages entre lignes proches risquent d'affecter non seulement les performances des circuits (vitesse, consommation), mais également leur fonctionnement. Ainsi par exemple les délais de propagation dans des longues lignes peuvent devenir critiques par rapport à la fréquence d'horloge, ou bien le passage d'un signal dans une ligne peut induire un signal non désiré dans une ligne voisine (phénomène de "crosstalk"). Tout ceci montre l'importance croissante d'une prédiction correcte de l'influence parasite des lignes d'interconnexion.

Une estimation courante du délai de propagation dans une ligne d'interconnexion est obtenue à partir du produit *RC*, de la résistance par la capacité de la ligne, par rapport au reste du circuit. Deux approches complémentaires permettent alors de contrôler les effets parasites. On peut d'une part étudier des matériaux particuliers afin de les réduire, pour une géométrie donnée. Ou bien d'autre part améliorer la conception des circuits en tentant d'optimiser les réseaux d'interconnexion. Dans les deux cas, il est important de pouvoir calculer les caractéristiques électriques *R* et *C* des interconnexions dans les circuits.

Le calcul des résistances est un calcul local à chaque conducteur, et n'est donc pas très coûteux en mémoire et en temps de calcul. Par contre, le calcul de la matrice des capacités nécessite autant de simulations que de conducteurs, et pour chaque simulation on doit a priori considérer le couplage de tous les conducteurs. Or dans un circuit intégré actuel, il peut y avoir, regroupés sur une surface de l'ordre du centimètre carré, et sur une hauteur totale de quelques microns, plus d'un kilomètre d'interconnexions, c'est-à-dire de "fils" conducteurs enchevêtrés. Ce calcul est donc très coûteux à la fois en temps de calcul et en place mémoire requise, si bien qu'à ce jour, les logiciels ne sont capables de simuler précisément que de petites portions de circuits, de l'ordre au maximum d'une centaine de microns de côté. L'objectif de la thèse est de proposer un algorithme précis, le plus rapide et le moins coûteux en mémoire possible.

Le **chapitre 1** est consacré à la présentation du problème. Nous commençons par décrire les structures d'interconnexions, ainsi que les relations permettant de calculer les capacités entre les interconnexions. La modélisation couramment utilisée pour le calcul des capacités

parasites statiques, mène à s'intéresser au calcul de la charge surfacique, c'est-à-dire la dérivée normale du potentiel sur la surface des conducteurs, le potentiel étant solution de l'équation de Laplace dans des couches diélectriques horizontales homogènes, avec potentiel fixé constant à la surface des conducteurs, et des conditions de transmission aux interfaces entre les couches diélectriques. Diverses méthodes existent, pour calculer soit directement la charge, soit le potentiel et la charge. Mais en raison de la complexité des structures d'interconnexions, aucun logiciel actuel ne permet de calculer les capacités sur des portions de circuit dépassant une centaine de microns de côté, alors qu'un circuit a aujourd'hui une surface de l'ordre du centimètre carré. Après avoir rapidement décrit les méthodes faisant l'objet de logiciels, nous introduisons la formulation sur laquelle nous basons notre calcul. Elle utilise, sur chaque couche diélectrique, une formulation domaines fictifs due à Glowinski, Pan et Périaux [GlPaPé 94] : le potentiel u et la charge surfacique λ sont cherchés comme solution du problème mixte

$$(DF) \quad \begin{cases} \text{Trouver } (u,\lambda) \in X \times M \text{ tels que} \\ \int_\Omega \varepsilon \nabla u . \nabla v \, d\Omega = < v, \lambda >_\gamma , \quad \forall v \in X , \\ < u - g, \mu >_\gamma = 0 , \quad \forall \mu \in M . \end{cases}$$

Dans le **chapitre 2**, nous étudions la discrétisation de cette formulation. Pour résoudre ce problème, [GlPaPé 94] propose une discrétisation par éléments finis P_1 (ou Q_1) sur une grille régulière de volume pour le potentiel, et P_0 sur un maillage de surface pour la charge. Nous notons (A-GPP) le problème discret obtenu par l'approximation de (*DF*) dans ces espaces de discrétisation. Il est connu que, pour des problèmes mixtes du type de (*DF*), si l'on veut contrôler la distance entre la solution discrète et la solution réelle lorsque les pas des maillages tendent vers zéro, les espaces de discrétisation du potentiel et de la charge doivent vérifier une condition de compatibilité appelée condition inf-sup. Sous réserve de conditions de compatibilité entre les pas des maillages, il est montré dans [GiGl 95] que les espaces proposés vérifient la condition inf-sup uniforme. De plus, la résolution du système linéaire obtenu peut se faire par l'algorithme du gradient conjugué sur la charge, et chaque itération du gradient conjugué peut être rendue rapide par l'utilisation d'un solveur de Poisson rapide sur la grille de volume.

Cependant l'approximation (A-GPP) est peu utilisable en pratique pour des portions de circuits un peu complexes. En effet, la condition inf-sup impose que le maillage de surface ne soit pas trop raffiné par rapport à la grille de volume. Cette condition impose donc que le niveau de détail du domaine à traiter ne soit pas trop fin par rapport à la grille. Sur les structures d'interconnexions, qui peuvent comprendre des lignes longues et de petite section, cette condition est restrictive, elle impose de prendre une grille de volume fine. De plus, la convergence du multiplicateur approché vers la valeur réelle est particulièrement sensible à la condition inf-sup.

D'autre part, lorsque les surfaces des conducteurs ne coïncident pas avec des mailles de la grille de volume, la discontinuité de la dérivée du potentiel à travers ces surfaces n'est pas traduite dans la discrétisation du potentiel proposée. Le potentiel est donc mal approché autour de la surface des conducteurs, et la précision sur les multiplicateurs de Lagrange en souffre. Nous ne pouvons pas non plus faire coïncider les mailles de la grille de volume avec les surfaces des conducteurs sans perdre la régularité de cette grille, qui permet l'utilisation d'un solveur rapide. Cette approximation, qui convient à des calculs du potentiel loin des

conducteurs, est donc moins bien adaptée au voisinage des conducteurs, ou pour le calcul de la charge.
Ainsi les coûts de calcul sont élevés, même si l'on ne désire pas une très grande précision.

En utilisant une particularité du problème, qui est que le potentiel est fixé constant sur chaque conducteur, nous enrichissons alors l'espace de discrétisation du potentiel autour des surfaces des conducteurs. Nous ajoutons des fonctions de base supplémentaires, non nulles chacune autour d'un élément du maillage de surface ne coïncidant pas avec la grille, et de dérivée discontinue à travers cet élément de surface. En utilisant une approximation de (*DF*) adaptée à ce nouvel espace de discrétisation du potentiel, nous obtenons un nouveau système discret, que l'on note (A-Capa).
Pour des géométries de conducteurs parallélépipédiques rectangles, cas de la plupart des interconnexions, les degrés de libertés associés aux fonctions de base supplémentaires peuvent être calculés explicitement en fonction des valeurs de la charge sur les segments de surface et substitués, donnant finalement un système proche de la forme obtenue pour l'approximation (A-GPP). La résolution de ce système peut alors se faire de la même façon que pour (A-GPP), et une itération de l'algorithme du gradient conjugué a un coût comparable pour les deux approximations. Nous étendons en pratique cette formulation au cas de surfaces des conducteurs quelconques.

Nous observons sur des exemples en dimension 2, que cet enrichissement de l'espace de discrétisation du potentiel, qui donne l'approximation (A-Capa), a deux effets. D'une part, la méthode paraît stabilisée, c'est-à-dire la convergence de l'algorithme de résolution ne dépend presque plus du choix des maillages. Nous vérifions d'autre part que pour un même choix des maillages, les résultats sont beaucoup plus précis.

Le **chapitre 3** est consacré à l'analyse numérique de l'approximation (A-Capa). Nous confirmons que l'enrichissement de l'espace du potentiel présente deux avantages. Pour des surfaces de conducteurs parallélépipédiques rectangles, la formulation est stabilisée, d'une façon proche des méthodes de stabilisation de problèmes mixtes par ajout de fonctions "bulles". Cependant, dans ces méthodes (dans [BaBrFr 93], [BrFrMaRu 98] par exemple), on ne s'intéresse pas à la forme des fonctions bulles, mais au terme de perturbation qu'elles produisent. Ici, l'ajout de fonctions supplémentaires permet aussi aux fonctions du nouvel espace de discrétisation, de mieux approcher le potentiel réel. D'autre part, les fonctions du nouvel espace de discrétisation étant discontinues, une erreur de consistance est commise, nous montrons qu'elle est majorée par un terme tendant vers zéro lorsque l'on raffine les maillages.

Dans le **chapitre 4**, nous décrivons différents aspects de la résolution numérique du système, en particulier l'algorithme de résolution et la mise en œuvre des différentes étapes : opérations géométriques, assemblage et stockage du système, solveur de Poisson.

Enfin, dans le **chapitre 5**, nous présentons des résultats sur des portions de cellules 3D réelles. Nous verrons que même lorsque la grille paraît grossière par rapport au niveau de certains détails de la structure, l'algorithme converge, et donne des résultats raisonnables. Un point important de la méthode étant le choix des pas des deux maillages, nous étudions d'abord, sur une structure, les résultats en fonction des pas des maillages, et en déduisons un choix "automatique" par défaut des maillages. Nous validons ensuite le logiciel obtenu, avec ce choix par défaut, par rapport aux logiciels existants d'une part, et par rapport à des résultats

expérimentaux d'autre part. Nous montrons sur plusieurs exemples son efficacité en temps de calcul et en mémoire.

Chapitre I. Présentation du problème

Nous présentons d'abord le problème du calcul des capacités parasites statiques dans les interconnexions des circuits intégrés. Le modèle mathématique étant simple, la difficulté du calcul des capacités est due essentiellement à la complexité des domaines de calcul. Nous donnons ensuite les principales caractéristiques et limitations des méthodes faisant, à notre connaissance, l'objet d'un logiciel dédié à ce problème. Enfin, nous introduisons la formulation du problème sur laquelle nous nous basons pour proposer un calcul plus efficace des capacités. Cette formulation est obtenue par une méthode de domaines fictifs avec multiplicateurs de Lagrange de surface, proposée par Glowinski, Pan et Périaux [GlPaPe 94] pour la résolution de problèmes elliptiques avec conditions aux limites de Dirichlet.

1. MODELISATION DES CAPACITES D'INTERCONNEXIONS

1.1. LES INTERCONNEXIONS – QUELQUES ORDRES DE GRANDEUR

Un circuit intégré est schématiquement constitué d'un ensemble de transistors disposés sur une plaque de silicium, isolés électriquement par des matériaux diélectriques, et reliés entre eux par des « fils » conducteurs appelés interconnexions, selon un schéma défini par le concepteur.

Pour augmenter les possibilités de croisement, les interconnexions sont disposées sur plusieurs couches horizontales - cinq ou six actuellement pour les circuits standards - et reliées entre 2 couches successives par des contacts métalliques appelés vias. L'espace entre ces conducteurs est rempli par des diélectriques qu'on suppose homogènes par régions.

La complexité de circuits complets est très importante : un microprocesseur réalisé aujourd'hui en technologie $0.18\ \mu m$, possède près de 21 millions de transistors reliés par environ 1.5 km d'interconnexions réparties sur 6 niveaux. Les Figure I.1 et Figure I.2 sont de très belles photographies de portions de circuit où les diélectriques ont été retirés afin de mieux voir les interconnexions. Ces deux photographies, qui grossissent respectivement 15000 fois et 45000 fois la réalité, permettent d'imaginer la complexité d'un circuit complet de surface de l'ordre du centimètre carré.

En pratique, chaque niveau d'interconnexions est réalisé par le transfert sur la plaque, de motifs d'un masque représentant le plan 2D de la couche vue du dessus. Ainsi, les circuits sont des structures stratifiées, où chaque couche est quasiment homogène en hauteur, comme on peut le voir sur la coupe d'une portion de circuit représentée dans la Figure I.3.

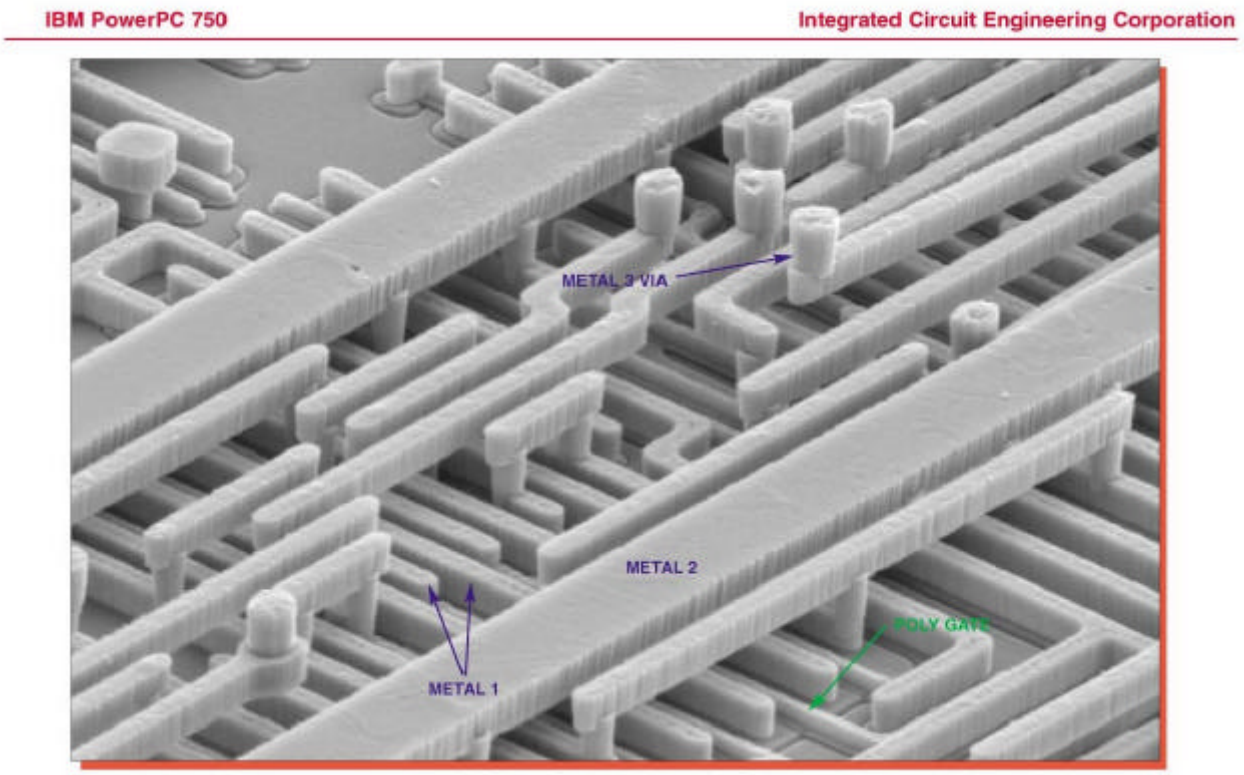


Figure I.1. Photo MEB d'interconnexions grossie 15000 fois.

[1]

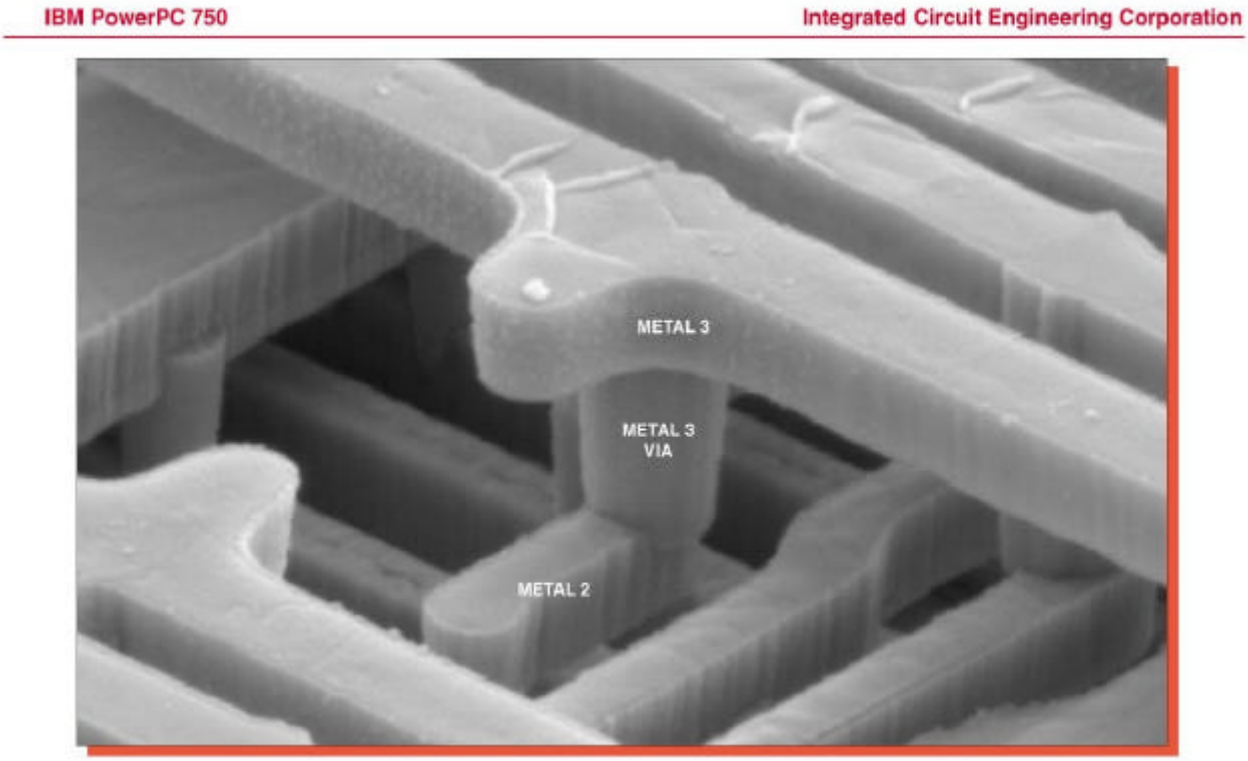


Figure I.2. Photo MEB grossie 45000 fois. Détail de connexion Metal2-Metal3

[1] Je remercie ICE Corporation de m'avoir laissé utiliser ces photos

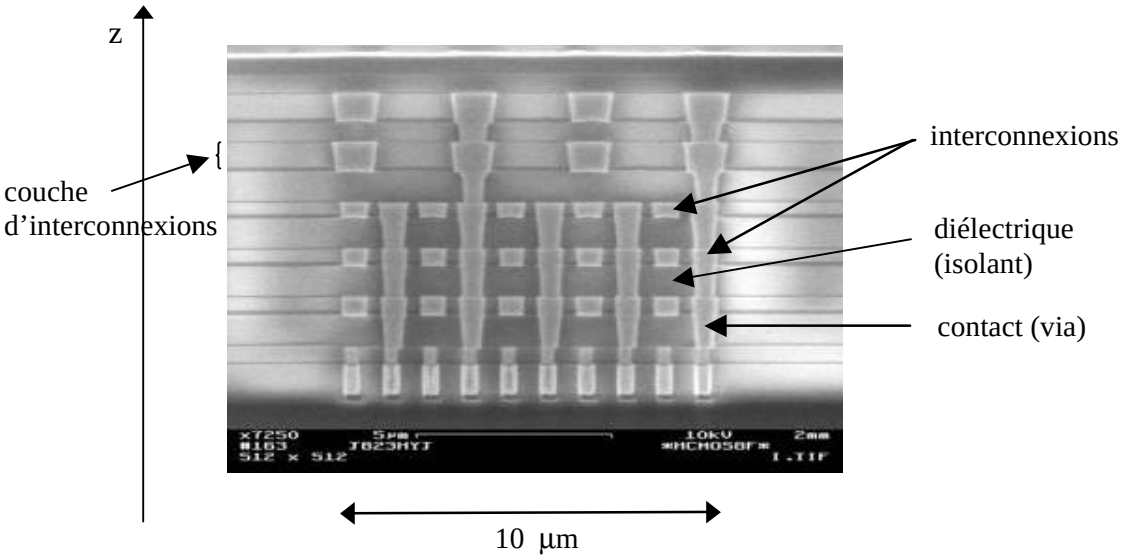


Figure I.3. Photo en coupe verticale d'une portion de circuit

1.2. MODELE MATHEMATIQUE

Une approximation classique pour le calcul des capacités des interconnexions (voir par exemple [Cr 98]), est de supposer les phénomènes statiques, et les milieux parfaits. Les interconnexions sont représentées par des conducteurs parfaits, entourés de matériaux diélectriques parfaits, et le plus bas niveau, où se trouvent les transistors, est modélisé par un plan de masse conducteur. Dans ce cadre, nous rappelons au paragraphe 1.2.1 les équations de l'électrostatique dans les milieux continus. Le paragraphe 1.2.2 explicite les conditions aux limites des conducteurs parfaits, et va permettre d'introduire au paragraphe 1.2.3 la définition de la matrice des capacités d'un ensemble de N conducteurs parfaits. Cette définition est en fait une relation faisant intervenir capacités, charges et potentiels des conducteurs.

1.2.1 Equations de l'électrostatique dans les milieux continus

Les phénomènes électrostatiques dans les milieux continus sont régis par les équations

$$\begin{cases} i) \quad \operatorname{div} D = \rho, \\ ii) \quad \operatorname{rot} E = 0, \end{cases} \qquad \text{(I.1)}$$

où :

- D est l'induction électrique,
- E est le champ électrique,
- ρ est la densité de charge.

Nous considérons de plus que le circuit est composé de conducteurs parfaits et de plusieurs milieux différents, du type diélectrique parfait. Chaque milieu diélectrique parfait correspond à une loi de comportement

$$D_i = \varepsilon_i E_i ,$$

où ε_i représente la permittivité diélectrique, constante, du milieu *i*. Nous pouvons donc décrire le problème dans toute la partie diélectrique du circuit en réécrivant l'équation de Gauss (I.1) i) sous la forme

$$\mathrm{div}(\varepsilon E) = \rho,$$

où ε est une fonction constante par morceaux. Ou bien nous pouvons considérer le problème comme un problème de transmission. Soit *n* un vecteur normal à l'interface Γ_{12} entre deux milieux 1 et 2, dirigé de 2 vers 1. Les conditions de raccordement sur l'interface Γ_{12} sont données par

$$\begin{cases} i) \quad E^{(2)} \wedge n - E^{(1)} \wedge n = 0, \\ ii) \quad \varepsilon_2 E^{(2)}.n - \varepsilon_1 E^{(1)}.n = \rho_{\Gamma_{12}}. \end{cases}$$

L'équation (I.1) ii) permet d'écrire que le champ électrique dérive d'un potentiel u,

$$E = -\nabla u.$$

Nous considérons de plus les matériaux diélectriques comme non chargés, c'est-à-dire $\rho = 0$ dans tout l'espace diélectrique.

1.2.2 Conditions aux limites pour les conducteurs parfaits

Le champ électrique dans un conducteur parfait à l'équilibre électrostatique est nul, et le potentiel à sa surface est constant. D'après la loi de Gauss, sa charge volumique est nulle. Par contre sa surface peut être chargée : la densité surfacique de charge σ à la surface ∂C du conducteur parfait C est donnée par

$$\sigma = (\varepsilon E.n)_{\partial C},$$

où $E.n = \dfrac{\partial u}{\partial n}$ est la dérivée normale du potentiel à l'extérieur du diélectrique, avec *n* dirigé vers l'intérieur du conducteur. On peut ainsi calculer la charge totale de chaque conducteur à partir du potentiel par

$$Q = \int_{\partial C} \varepsilon \frac{\partial u}{\partial n} ds.$$

1.2.3 Définition de la matrice des capacités de *N* conducteurs

Nous utilisons ici la définition au sens de Kirchhoff de la matrice des capacités $[C_{ij}]$ d'un ensemble de *N* conducteurs : les potentiels des conducteurs sont définis par rapport à une référence. Dans notre cas, cette référence est le substrat, considéré comme un plan de masse.

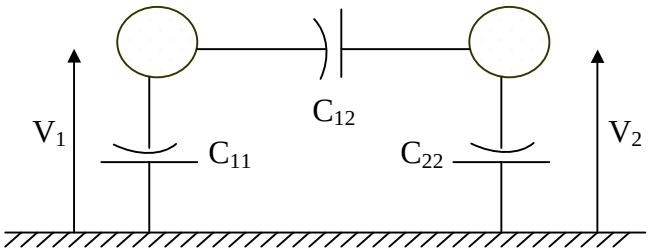


Figure I.4. Définition de la matrice des capacités d'un ensemble de N conducteurs

Les capacités sont données par des relations faisant intervenir la charge totale q_i et le potentiel V_i des conducteurs $i = 1, 2, ..., N$: la charge totale sur le conducteur *i* vaut

$$q_i = C_{ii} V_i + \sum_{j=1}^{N} C_{ij} \left(V_i - V_j \right), \qquad \forall i = 1, 2, ..., N . \tag{I.2}$$

Nous obtenons directement de la définition (I.2), une façon classique de calculer en pratique la matrice des capacités. En effet, on déduit de cette relation que la capacité C_{ij}, $i \neq j$ est l'opposé de la charge totale sur le conducteur i lorsque tous les conducteurs ont un potentiel nul sauf le conducteur j, dont le potentiel est 1. Et la capacité C_{jj} est la somme des charges sur tous les conducteurs, pour les mêmes valeurs du potentiel sur les conducteurs.

Pour déterminer entièrement la matrice des capacités, on peut donc calculer la charge de chaque conducteur pour *N* répartitions de potentiel linéairement indépendantes, la j-ème répartition étant par exemple due aux conditions aux limites $V_i = \delta_{ij}$, $\forall i = 1, 2, ..., N$. Nous sommes donc amenés à résoudre *N* fois l'équation donnant le potentiel dans l'espace diélectrique, avec des conditions aux limites de Dirichlet à la surface des conducteurs, et à en déduire la charge.

1.3. PROBLEME A RESOUDRE ET NOTATIONS

Nous présentons dans cette section le problème à résoudre pour une répartition de potentiel donnée à la surface des conducteurs.

Soit un domaine Ω, de frontière Γ, composé de *N* conducteurs C_i, $i = 1, 2, ..., N$, entourés de matériau diélectrique non chargé ω, de permittivité ε. On décompose Γ en $\Gamma = \Gamma_0 \cup \Gamma_1$, en fonction du type de conditions aux limites qu'on veut imposer sur chaque morceau de frontière. Notons *n* un vecteur normal à la surface Γ_1, et n_ω le vecteur normal à la surface des conducteurs $\gamma = \bigcup_{i=1}^{N} \partial C_i$, orienté vers l'extérieur de ω.

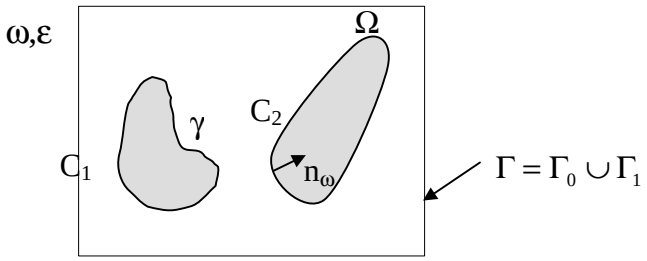


Figure I.5. Notations

Considérons une répartition de potentiel *g* fixée sur la surface γ, constante sur chaque conducteur. Alors le potentiel *u*, constant dans chaque conducteur, est solution dans le domaine diélectrique ω de

$$\begin{cases} \nabla.(\varepsilon \nabla u) = 0 \ \text{ dans } \omega \\ u = g \ \text{ sur } \gamma \\ u = 0 \ \text{ sur } \Gamma_0 \\ \nabla u.n = 0 \ \text{ sur } \Gamma_1, \end{cases} \qquad (\text{I.3})$$

et la charge surfacique sur les conducteurs, σ, est liée au potentiel à l'extérieur des conducteurs par

$$\sigma = \left(\varepsilon \frac{\partial u}{\partial n_\omega} \right)_\gamma . \qquad (\text{I.4})$$

Nous allons utiliser les espaces de Sobolev classiques : pour un domaine ω inclus dans $\Re^n$, soit

$$H^1(\omega) = \left\{ v \in L^2(\omega);\ \frac{\partial v}{\partial x_i} \in L^2(\omega), 1 \le i \le n \right\}.$$

Les éléments de $H^1(\omega)$ admettent une trace sur la frontière de ω, c'est-à-dire sur γ et sur Γ, dans $H^{1/2}(\gamma)$ et dans $H^{1/2}(\Gamma)$. Notons

$$V = \left\{ v \in H^1(\omega);\ v_{|\gamma} = g,\ v_{|\Gamma_0} = 0 \right\} \quad \text{et} \quad V_0 = \left\{ v \in H^1(\omega);\ v_{|\gamma} = 0,\ v_{|\Gamma_0} = 0 \right\}.$$

Le potentiel dans l'espace entre les conducteurs est solution de

$$\begin{cases} \text{Trouver } u \in V \ \text{ tel que} \\ \int_\omega \varepsilon \ \nabla u.\nabla v \, d\omega = 0, \quad \forall v \in V_0 . \end{cases} \qquad (\text{I.5})$$

En pratique, on considère un circuit comme une boite parallélépipédique Ω, union de N_D couches parallélépipédiques Ω_l. Chaque couche Ω_l contient des conducteurs ou portions de conducteurs isolés entre eux par un diélectrique homogène ω_l, de permittivité (constante) égale à ε_l. La base de la boîte est considérée comme un plan de masse ($\Gamma_0 : u = 0$), et on impose sur les autres bords de la boîte des conditions de symétrie ($\Gamma_1 : \nabla u.n = 0$). Le système (I.5) se réécrit

$$\begin{cases} \text{Trouver } u \in V \ \text{ tel que} \\ \sum_{1 \le d \le N_D} \int_{\omega_d} \varepsilon_d \ \nabla u.\nabla v \, d\omega = 0, \quad \forall v \in V_0 \end{cases} \qquad (\text{I.6})$$

Nous représentons dans la Figure I.6, une vue en coupe d'une portion de circuit.

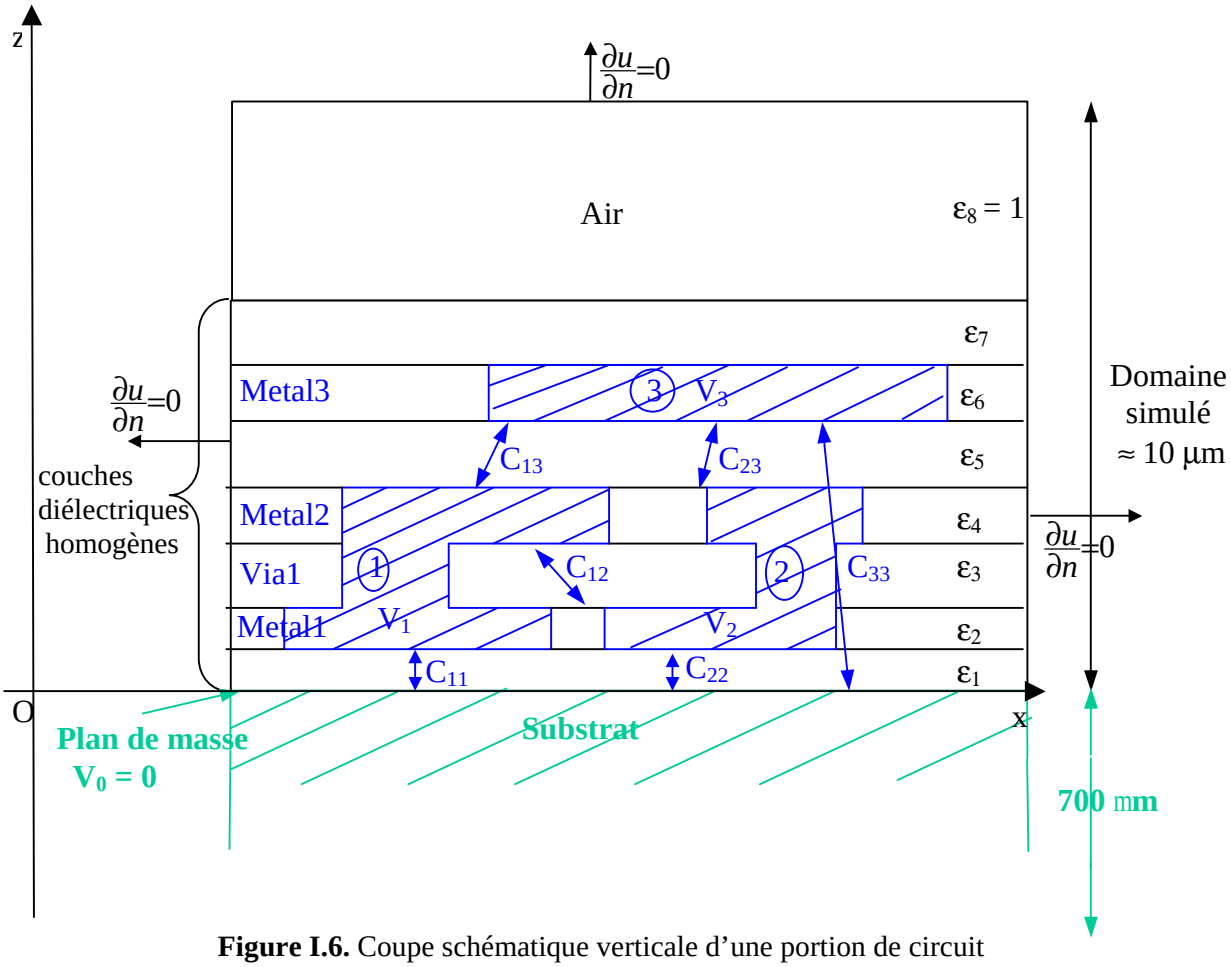


Figure I.6. Coupe schématique verticale d'une portion de circuit

Les conducteurs représentés sur la Figure I.6 sont à sections rectangulaires, et c'est souvent le cas sur les structures réelles (Figure I.3). Cependant, dans la suite nous étudions des conducteurs polygonaux, dont les surfaces peuvent présenter des angles non droits.

2. L'EXISTANT

Cette section est consacrée à l'inventaire des méthodes faisant à notre connaissance l'objet d'un programme dédié au calcul des capacités. Cependant, la plupart de ces programmes étant des produits commercialisés, il ne nous a été possible de tester que certains d'entre eux, et il nous est difficile de présenter des comparaisons précises et objectives. Nous décrivons ainsi les principales caractéristiques de chaque méthode, et si possible une idée de leurs performances.

A cause de la complexité des circuits, il n'est pour l'instant pas possible de calculer de façon précise les capacités parasites sur un circuit entier, ce qui serait l'idéal. Deux types de méthodes sont alors explorées : des méthodes pour calculer de façon très approchée les capacités sur un circuit entier, et des méthodes pour calculer de façon plus précise, et si possible rapidement, les capacités sur des portions de circuits.

Des programmes dédiés au calcul des capacités sur des circuits complets existent. Ils sont tous basés sur l'idée d'isoler des zones d'influence autour de chaque conducteur, en

dehors desquelles le potentiel dépend très peu du potentiel et de la charge de ce conducteur. Sur chaque zone, les capacités partielles sont alors calculées, soit par simulation numérique, soit en reconnaissant des cellules élémentaires pour lesquelles des modèles analytiques approchés sont programmés. La précision des calculs dépend alors de la façon dont sont déterminées ces zones d'influence et de leur taille, ainsi que de la précision des calculs sur chacune de ces zones. Ces programmes permettent à notre connaissance de déterminer les capacités avec une erreur relative de plusieurs dizièmes sur les plus grandes capacités, en environ une journée de calcul sur une station unix.

Des publications proposent des méthodes découpant également le circuit en cellules élémentaires, et tirant parti de l'approximation de circuits intégrés sous la forme de couches homogènes en hauteur. Dans [HoSuZhJiSoDa 96] par exemple, une méthode de réduction de dimension est proposée : en supposant que sur chaque couche, les matériaux sont homogènes en hauteur, le problème 3D se ramène à un ensemble de problèmes 2D liés. Cela permet des résolutions simplifiées pour chaque problème 2D, et même des résolutions analytiques sur certaines couches, par exemple celles où il y a uniquement du diélectrique. Dans [ZhJiHo 97], pour un même découpage du circuit, une méthode de décomposition en sous-domaines permet des résolutions indépendantes sur chaque couche. Il n'y a pas à notre connaissance de logiciel commercial permettant de connaître les performances de ce ces méthodes. Cependant, il semble qu'elles se situent dans une classe de méthodes utilisant des découpages des circuits en cellules élémentaires, et donc peu précises si le lien entre deux structures voisines est fait de façon grossière.

Un autre ensemble de méthodes a pour but de calculer précisément les capacités non sur des circuits complets, mais sur des portions de circuits. Ces calculs pourront par exemple servir pour calibrer les modèles analytiques approchés utilisés dans les programmes traitant des circuits complets. Ou bien être couplés avec une décomposition en sous-domaines pour traiter de façon précise des portions de circuits plus grandes. Ou enfin pourront permettre d'évaluer l'impact sur les capacités parasites, de choix technologiques (matériaux, configurations géométriques, …), en faisant des simulations précises sur des petites structures. Toutes ces utilisations nécessitent un grand nombre de simulations, le calcul sur une structure doit donc être le plus rapide possible.

Dans cet esprit, trois méthodes font l'objet de produits commerciaux reconnus, et sont présentées rapidement dans cette section : une méthode d'éléments finis 3D (logiciel Clever de Silvaco), une méthode basée sur des intégrales de surface ([NaWh 91], [NaKiWh 92], logiciel Fastcap du Massachusetts Institute of Technology par exemple), et une méthode de Monte-Carlo ([CoIv 92], logiciel Quickcap de Random Logics Corporation). Actuellement, ces logiciels sont au mieux capables de traiter avec une bonne précision (c'est-à-dire de quelques pour cents sur les capacités les plus grandes), sur des stations Unix, des circuits à plusieurs niveaux, pouvant atteindre environ 100 microns de côté.

Le but de ce travail est de proposer comme alternative à ces méthodes, un algorithme précis, plus rapide et moins coûteux en mémoire.

2.1. ELEMENTS FINIS

Rappelons le problème (I.6), donnant le potentiel dans l'espace entre les conducteurs :

$$\begin{cases} \text{Trouver } u \in V \text{ tel que} \\ \sum_{1 \le d \le N_D} \int_{\omega_d} \varepsilon_d \, \nabla u . \nabla v \, d\omega = 0, \quad \forall v \in V_0 \end{cases}$$

Ce problème est discrétisé en remplaçant V par un espace vectoriel de dimension finie $V_h \subset V$. On choisit par exemple pour V_h l'espace d'éléments finis P_1 sur l'union de maillages de tétraèdres de chaque zone diélectrique ω_d, $d = 1, 2, ..., N_D$. Obtenir un maillage tridimensionnel de bonne qualité est délicat, et les maillages sont de grande taille. Pour déterminer le potentiel, on doit ensuite résoudre un système linéaire $Au = b$, où A est une matrice creuse mais de très grande taille.

Par cette méthode, on connaît le potentiel dans tout le circuit. On peut alors déduire la charge à la surface des conducteurs.

2.2. INTEGRALES DE FRONTIERE

Les méthodes d'équations intégrales ramènent le problème d'équation aux dérivées partielles dans un ensemble de matériaux diélectriques homogènes à un problème défini sur la frontière des obstacles. L'intérêt de ce type de méthode par rapport aux méthodes volumiques du type différences finies ou éléments finis est le gain d'une dimension d'espace, le problème étant posé sur une surface et non dans un volume tout entier. On présente ici rapidement le principe de la méthode pour un seul diélectrique homogène de permittivité ε_0, telle qu'elle est décrite dans [NaWh 91, NaKiWh 92] et implémentée dans le programme universitaire Fastcap du MIT. Puis on discute de l'extension au cas de diélectriques homogènes par régions.

Le problème est reformulé en considérant que les interfaces diélectrique-conducteur sont des surfaces chargées, de charge surfacique σ. Alors σ satisfait l'équation intégrale

$$u(x) = \int_\gamma \sigma(x') \frac{1}{4\pi\varepsilon_0 \|x - x'\|} ds(x'), \quad \forall x \in \gamma, \qquad (I.7)$$

où u est le potentiel, connu, de la surface du conducteur, et $ds(x')$ est une surface élémentaire sur le conducteur, autour du point x'. Une approche classique pour résoudre cette équation est de discrétiser la charge surfacique σ par un schéma de collocation constant par morceaux. C'est-à-dire, on découpe la surface des conducteurs en n facettes, et sur chaque facette f_i, la charge q_i est supposée uniformément répartie. Notons x_i le centre de la facette f_i, et a_i son aire. Soit p le vecteur des potentiels imposés sur chaque facette, q le vecteur des charges de chaque facette, alors q est solution du système linéaire dense

$$P q = p,$$

où P est la matrice non symétrique de terme général

$$P_{ij} = \frac{1}{a_j} \int_{f_i} \frac{1}{4\pi\varepsilon_0 \|x_i - x'\|} ds(x').$$

Si on résout le système par une méthode directe, le nombre d'opérations est d'ordre n^3, ce qui est trop coûteux, même pour des systèmes de taille moyenne. On utilise donc une méthode itérative comme l'algorithme Gmres, qui nécessite à chaque itération le calcul pour q donné, du produit Pq. L'algorithme multipôle permet alors de calculer ce produit en $O(n)$

opérations avec une bonne précision. Avec un préconditionnement adapté, l'algorithme Gmres converge en largement moins de n itérations, le coût total en temps de calcul pour une simulation est donc inférieur à $O(n^2)$.

Les méthodes par équations intégrales sont très efficaces pour des problèmes assez simples, en revanche, le traitement de plusieurs matériaux diélectriques est problématique. Pour un milieu multicouche, on peut remplacer (I.7) par

$$u(x) = \int_{\gamma} \sigma(x')\, G_I(x, x')\, ds(x'), \quad \forall x \in \gamma,$$

où G_I est une fonction de Green spéciale obtenue en utilisant la théorie des images ([OhKuSc 94, KrXiDePi 96] par exemple). Mais cette fonction consiste en des séries convergeant lentement.

Ou sinon, pour un ensemble quelconque de diélectriques homogènes, on peut utiliser la fonction de Green correspondant à un diélectrique homogène dans tout l'espace extérieur aux conducteurs,

$$G(x, x') = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0 \|x - x'\|},$$

en ajoutant alors le calcul de charges de polarisation sur les interfaces diélectriques [RaSaHa 84]. C'est cette deuxième solution qui est retenue dans le logiciel Fastcap. Les deux approches sont très coûteuses en temps et en mémoire. Prenons l'exemple du logiciel Fastcap, version 2.0. Le tableau présente la mémoire et le temps de calcul nécessaires pour traiter le même exemple comprenant 2 conducteurs, 1800 facettes sur les conducteurs, mais avec 2 ou 7 zones diélectriques différentes.

Tableau I.1. Exemple de prise en compte de plusieurs zones diélectriques homogènes avec Fastcap

Nombre de zones	Nombre de facettes	Mémoire utilisée(MB)	Temps cpu (secondes)
2	2700	31	29,3
7	7200	257	116

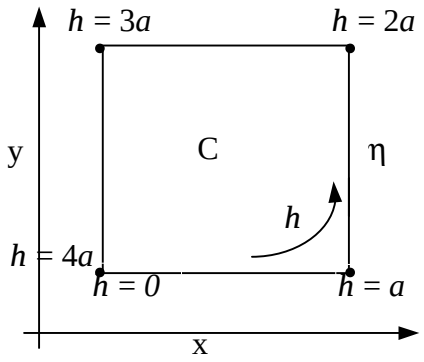
2.3. ALGORITHME STOCHASTIQUE

L'algorithme proposé par [CoIv 92] utilise une méthode de marche aléatoire à pas variable pour résoudre l'équation de Laplace dans le domaine entre les conducteurs. Particulièrement bien adapté aux géométries parallélépipédiques, il ne nécessite pas un maillage 3D du diélectrique, a de faibles besoins en espace mémoire, et utilise des calculs indépendants et donc facilement parallélisables.

La méthode, décrite ici en dimension 2 pour un diélectrique homogène, est basée sur l'expression sous forme d'intégrale de frontière de la solution de l'équation de Laplace sur un carré avec conditions aux limites de Dirichlet.

- Solution de l'équation de Laplace sur un carré :

Nous exprimons dans ce paragraphe, la solution de l'équation de Laplace dans un carré, avec valeur fixée, égale à ψ_{S_a}, sur le contour du carré. Considérons le carré suivant, *C*, de côté *a*.



Soit η la mesure de la longueur de la frontière S_a du carré *C*, en partant de 0 et en allant dans le sens trigonométrique. Le potentiel, solution du système

$$\begin{cases} \Delta\psi = 0 \quad \text{dans } C \\ \psi(\eta) = \psi_{S_a}(\eta), \quad 0 \le \eta \le 4a \end{cases}$$

s'écrit sous la forme

$$\psi(x,y) = \int_{S_a} G(x,y|\eta)\, \psi_{S_a}(\eta)\ d\eta\,, \quad \forall (x,y) \in C \qquad (\text{I.8})$$

où *G* est une somme de quatre séries infinies, la première étant

$$g_1(x,y|\eta) = \frac{2}{a}\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sinh[(n\pi/a)(a-y)]}{\sinh(n\pi)} \sin(\frac{n\pi x}{a}) \sin(\frac{n\pi\eta}{a})\,,$$

et les trois autres ayant des expressions similaires. Posons

$$\overline{G}[a|\eta] = G(\tfrac{1}{2}a, \tfrac{1}{2}a\,|\,\eta)\,.$$

On peut alors exprimer le potentiel et les composantes du champ électrique E au centre du carré comme des intégrales dépendant du potentiel sur la surface du carré par

$$\psi(\tfrac{a}{2},\tfrac{a}{2}) = \int_{S_a} \overline{G}[a|\eta]\, \psi_{S_a}(\eta)\ d\eta\,,$$

$$E\left(\frac{a}{2},\frac{a}{2}\right) = \left(-\int_{S_a} \overline{G}_x[a|\eta]\, \psi_{S_a}(\eta)\, d\eta, \quad -\int_{S_a} \overline{G}_y[a|\eta] \psi_{S_a}(\eta)\, d\eta \right). \qquad (\text{I.9})$$

- Principe du calcul de la matrice des capacités :

Soit G_i une surface fermée entourant le conducteur *i*. La loi de Gauss permet de calculer la charge de ce conducteur par

$$q_i = \int_{G_i} E(\xi).n(\xi)\, d\xi\,.$$

On peut réécrire cette relation en remplaçant, grâce à (I.9), chaque composante du champ *E* en un point ξ de G_i, par une intégrale sur les bords d'un carré $S_{a(x)}$ parallèle aux axes de coordonnées, et de centre le point ξ. Pour chaque ξ, on choisit ce carré comme étant le plus grand carré de centre ξ, ne contenant pas de conducteur : une des faces du carré a donc une frontière commune avec au moins un conducteur. En notant $\alpha(\xi)$ le côté de ce carré maximal, on obtient

$$q_i = \int_{G_i} d\xi \; s_i(\xi) \int_{S_{\alpha(\xi)}} d\xi' \, w(\xi,\xi') \overline{G}[\alpha(\xi)|\xi'] \psi_{S_{\alpha(\xi)}}(\xi'),$$

où

$$w(\xi|\xi') = -\frac{n_x(\xi)\overline{G}_x[\alpha(\xi)|\xi'] + n_y(\xi)\overline{G}_y[\alpha(\xi)|\xi']}{s_i(\xi)\overline{G}[\alpha(\xi)|\xi']},$$

et s_i est une fonction d'échantillonnage telle que $\int_{G_i} s_i(\xi) d\xi = 1$, et $n_x(\xi)$ et $n_y(\xi)$ sont les composantes de la normale *n* en ξ à G_i.

Pour calculer la matrice des capacités, il faut exprimer les charges en fonction des potentiels des conducteurs. On décompose le domaine $S_{\alpha(\xi)}$ en une partie $S^c_{\alpha(\xi)}$ en contact avec un conducteur, et donc sur laquelle le potentiel ψ est connu, et une partie $S^{nc}_{\alpha(\xi)}$ qui ne touche pas de conducteur. On peut alors exprimer à son tour le potentiel ψ en un point ξ' de $S^{nc}_{\alpha(\xi)}$ comme une intégrale sur le plus grand carré centré en ξ' et ne contenant pas de conducteur, à l'aide de l'équation (I.8). En remplaçant ainsi les potentiels des points qui ne sont pas sur des conducteurs grâce à l'équation (I.8), on obtient une somme infinie d'intégrales emboîtées.

La matrice des capacités est évaluée par un algorithme stochastique utilisant le principe décrit ci-dessus. Pour chaque électrode de départ *i*, il génère un ensemble de N_i trajectoires qui partent de G_i et se terminent sur une électrode *j* (voir Figure I.7).

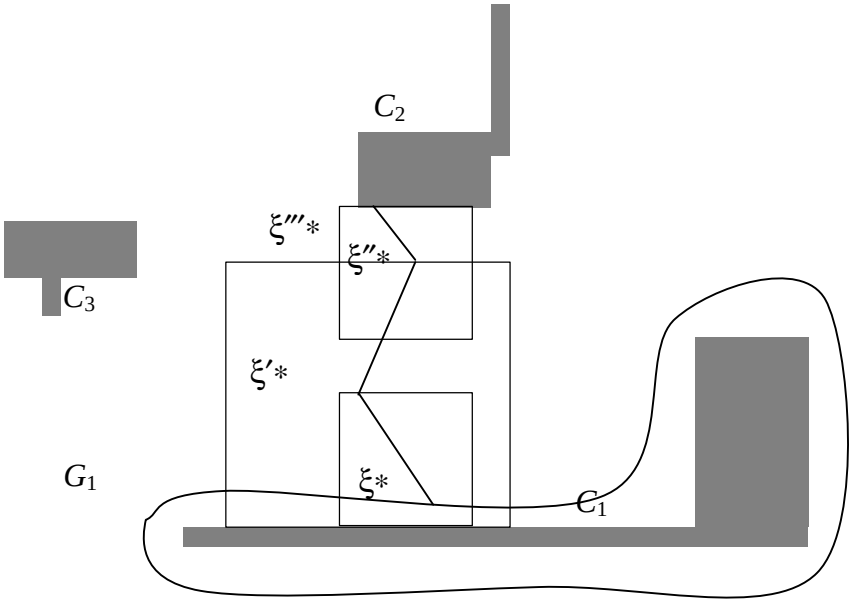


Figure I.7. Une marche aléatoire aboutissant sur un conducteur

L'algorithme demande peu de place mémoire. Mais il n'est efficace sous cette forme que pour des structures parallélépipédiques (sinon la surface des cubes en contact avec les conducteurs peut être réduite à un point). Et nous avons trouvé peu d'articles sur l'utilisation de cette méthode en pratique, et permettant de juger de son efficacité dans le cas de circuits de géométrie assez compliquée.

2.4. CONCLUSION

On veut un algorithme précis et efficace de calcul des capacités sur un domaine de taille raisonnable. Les éléments finis permettent de bien prendre en compte les géométries complexes, et les inhomogénéités de diélectriques, mais au prix de temps de calcul et place mémoire importants. Les autres méthodes semblent moins coûteuses dans certains cas de circuits, mais moins robustes lorsque la complexité augmente, en particulier en ce qui concerne les diélectriques. Nous proposons d'utiliser une méthode de domaines fictifs, qui couple le calcul du potentiel sur une grille régulière du volume parallélépipédique constitué par les diélectriques et les conducteurs, et de la charge sur un maillage de la surface des conducteurs. Cette méthode permet de conserver une partie de la robustesse des éléments finis, tout en évitant, comme dans les méthodes d'équations intégrales, la difficulté du maillage d'un domaine tridimensionnel complexe.

3. CHOIX D'UNE FORMULATION DOMAINES FICTIFS

3.1. PRINCIPE DES METHODES DE DOMAINES FICTIFS POUR LE PROBLEME DE DIRICHLET

Les méthodes de domaine fictif (ou de capacité), sont employées pour la résolution des équations aux dérivées partielles avec diverses conditions aux limites depuis la fin des années 70, en particulier en URSS et aux Etats Unis. Toutes les méthodes de domaines fictifs sont basées sur l'idée d'étendre le problème à résoudre sur un domaine plus grand que le domaine de calcul initial, mais de forme simple. Le nouveau problème étant défini de façon à ce qu'on puisse déduire facilement de sa solution la solution du problème initial. Ces méthodes s'appliquent ainsi tout particulièrement à la résolution d'équations aux dérivées partielles dans des domaines extérieurs, c'est à dire dans des domaines qui sont le complémentaire d'obstacles.

Les premières méthodes de domaines fictifs permettent d'accélérer la résolution de grands systèmes linéaires obtenus par la discrétisation d'équations aux dérivées partielles. Le problème est pour cela élargi sur un domaine de forme simple, le domaine fictif, mais adapté autour des surfaces des obstacles. Ce problème élargi peut ensuite être préconditionné grâce à une matrice facilement inversible (matrice séparable), par exemple celle correspondant à l'approximation de l'opérateur différentiel considéré sur une grille régulière du domaine fictif. Et ainsi résolu par un algorithme itératif qui converge rapidement.

Un autre ensemble de méthodes plus récentes est plus directement lié aux équations à résoudre. L'idée consiste à prolonger l'équation initiale à l'intérieur de l'obstacle, en remplaçant la présence de l'obstacle par un second membre. Ce second membre doit être tel que les conditions aux limites sur la frontière des obstacles soient vérifiées. Le premier pas dans cette direction, [AtDiGlHePe 90], utilise une approche de contrôle optimal : le second membre du système à résoudre est une variable de contrôle qui permet d'ajuster la condition aux limites sur la surface des obstacles. Plus tard, l'utilisation de multiplicateurs de Lagrange surfaciques, puis volumiques, a été proposée pour imposer – au sens faible – les conditions aux limites de Dirichlet. Les auteurs montrent en particulier qu'il n'est pas forcément nécessaire de modifier le maillage de volume (par rapport à une grille régulière) pour s'adapter aux surfaces des obstacles. L'avantage principal est alors qu'on évite tous les problèmes de maillage, et que la résolution sur un domaine de forme simple peut être faite de façon très efficace en utilisant des solveurs rapides. En contrepartie, des inconnues

supplémentaires, liées à la prise en compte des conditions aux limites sur la frontière des obstacles, augmentent la taille du système.

Par leurs caractéristiques, ces méthodes semblent prometteuses pour certaines applications industrielles, et tout particulièrement pour notre problème du calcul de capacités parasites dans les circuits intégrés, où les problèmes proviennent de la complexité géométrique des cellules à simuler. On a choisi pour ce calcul, d'utiliser la formulation avec des multiplicateurs de Lagrange de surface [GlPaPe 94], sur le domaine fictif parallélépipédique composé de l'ensemble diélectriques plus conducteurs. En effet cette approche est séduisante par plusieurs aspects :

- la résolution du problème peut se faire en utilisant deux maillages indépendants, une grille volumique régulière du domaine fictif, indépendante des conducteurs, et un maillage de la surface des conducteurs. Cela permet l'utilisation de solveurs rapide sur cette grille, et supprime les problèmes de maillage en dimension 3,
- le multiplicateur de Lagrange est en fait dans ce cas, la charge à la surface des conducteurs. Ainsi la charge surfacique est directement obtenue comme une inconnue du problème, et non par dérivation du potentiel.

3.2. UNE FORMULATION DOMAINES FICTIFS DU CALCUL DES CAPACITES

Ce paragraphe présente la formulation domaine fictif avec multiplicateurs de Lagrange de surface, introduite par R. Glowinski, T.-W. Pan et J. Périaux [GlPaPe 94] pour des équations elliptiques avec conditions aux limites de Dirichlet.

3.2.1 Principe de la méthode

On choisit comme domaine fictif la portion de circuit considérée, c'est-à-dire une boîte parallélépipédique Ω contenant les conducteurs, comme défini dans la section 1, et on impose les conditions aux limites sur la surface γ à l'aide de variables supplémentaires définies sur γ.

- Le potentiel est étendu artificiellement à l'intérieur des conducteurs, de façon à chercher une fonction $\tilde{u}$ définie sur $\Omega \supset \omega$ telle que $\tilde{u}_{|w} = u$.
- On introduit une variable auxiliaire (un multiplicateur de Lagrange) définie sur γ, de façon à prendre en compte les conditions aux limites $v_{|g} = g$ sur γ. La principale différence avec la méthode classique des éléments finis est que la condition de Dirichlet sur la frontière est prise en compte au sens faible au lieu d'être imposée dans l'espace fonctionnel.

Cette méthode de domaines fictifs utilise deux maillages indépendants : un, volumique mais structuré, du domaine Ω, et un autre, surfacique, de la frontière γ. En particulier une grille structurée de Ω permet l'utilisation de méthodes numériques simplifiées et peu coûteuses.

3.2.2 Introduction du système couplé

Résoudre le problème (I.6) est équivalent à minimiser

$$J(v)=\frac{1}{2}\sum_{1\le d\le N_D}\varepsilon_d\int_{\omega_d}|\nabla v|^2\,d\omega$$

sur l'espace $V=\{\,v\in H^1(\omega);\ \ v_{|\Gamma_0}=0,\ v_{|\gamma}=g\,\}$. Les fonctions de V peuvent être vues comme les restrictions à ω des fonctions de $\tilde{V}=\{\,v\in H^1(\Omega);\ \ v_{|\Gamma_0}=0,\ v_{|\gamma}=g\,\}$, en prolongeant le calcul du potentiel dans les conducteurs. En traitant la condition $v_{|g}=g$ comme une contrainte d'égalité, et en prolongeant artificiellement la permittivité (par la même valeur, ε_d, constante) dans les conducteurs de chaque couche Ω_d, la solution u de (I.6) est donc aussi la restriction à ω de la solution du problème de minimisation étendu

$$\underset{v\in X,\,v_{|\gamma}=g}{Min}\ \frac{1}{2}\sum_{1\le d\le N_D}\varepsilon_d\int_{\Omega_d}|\nabla v|^2\,d\Omega\,,$$

où $X=\{\,v\in H^1(\Omega),v_{|\Gamma_0}=0\,\}$. Soit $M=H^{-\frac{1}{2}}(\gamma)$ l'espace dual de $H^{\frac{1}{2}}(\gamma)$, on définit le Lagrangien $L:X\times M\to\Re$ par

$$L(v,\mu)=\frac{1}{2}\sum_{1\le d\le N_D}\varepsilon_d\int_{\Omega_d}|\nabla v|^2\,d\Omega-\langle v-g,\mu\rangle_\gamma\,,$$

où $<.,.>_\gamma$ dénote le produit de dualité entre $H^{\frac{1}{2}}(\gamma)$ et M. On considère le problème de recherche du point selle de L,

$$\begin{cases}\text{Trouver }\ (\tilde{u},\lambda)\in X\times M\ \text{ tels que}\\ \forall v\in X,\ \forall\mu\in M,\ \ L(\tilde{u},\mu)\le L(\tilde{u},\lambda)\le L(v,\lambda).\end{cases}$$

Une fonction $\tilde{u}$ est solution du problème de minimisation étendu si et seulement si il existe au moins un élément λ de M tel que $(\tilde{u},\lambda)$ soit solution du problème de point selle.

En écrivant que les dérivées de L sont nulles au point selle $(\tilde{u},\lambda)$, on obtient le problème

$$(DF)\qquad\begin{cases}\text{Trouver }\ (\tilde{u},\lambda)\in X\times M\ \text{ tels que}\\ \displaystyle\sum_{1\le d\le N_D}\varepsilon_d\int_{\Omega_d}\nabla\tilde{u}\,.\nabla v\,d\Omega=\int_\Omega\varepsilon\nabla\tilde{u}\,.\nabla v\,d\Omega=<v,\lambda>_\gamma\,,\quad\forall v\in X & (1)\\ <\tilde{u}-g,\mu>_\gamma=0\,,\quad\forall\mu\in M & (2)\end{cases}$$

Soient a la forme bilinéaire symétrique sur $X\times X$, définie par

$$a(u,v)=\sum_{d=1}^{N_D}\varepsilon_d\int_{\Omega_d}\nabla u\,.\nabla v\,d\Omega,\quad\forall(u,v)\in X\times X\ ,$$

et b la forme bilinéaire sur $X\times M$, définie par

$$b(u,\mu)=-<u,\mu>_\gamma\,,\quad\forall(u,\mu)\in X\times M\,.$$

Alors le système (DF) s'écrit sous la forme mixte générale

$$\begin{cases} \text{Trouver } (\tilde{u},\lambda)\in X\times M \text{ tels que} \\ a(\tilde{u},v)+b(v,\lambda)=0, \quad \forall v\in X, \\ b(\tilde{u},\mu)=-<g,\mu>_{\gamma}, \quad \forall \mu\in M. \end{cases}$$

Remarque : Les conditions aux limites (2) se réécrivent en fait à la surface de chaque conducteur,

$$<\tilde{u}-g_j\ ,\mu>_{\partial C_j}=0, \quad \text{avec } g_j=cste \text{ pour tout } j=1,2,...,N.$$

On en déduit que $\lambda\in L^2(\gamma)$ et le couple $(\tilde{u},\lambda)$ est donc solution de

$$\begin{cases} \sum_{1\le d\le N_D}\varepsilon_d\int_{\Omega_d}\nabla\tilde{u}.\nabla v\,d\Omega=\int_{\gamma}v\lambda\,d\gamma, \quad \forall v\in X \\ \int_{\gamma}(\tilde{u}-g)\mu\,d\gamma=0, \quad \forall\mu\in L^2(\gamma) \end{cases}$$

3.2.3 Obtention du potentiel et de la charge

- Obtention du potentiel :

La restriction au domaine ω de la solution $\tilde{u}$ du problème (DF), si elle existe, est l'unique solution du problème de départ (P), c'est-à-dire le potentiel.

Preuve : l'équation (2) de (DF) donne $\langle\tilde{u}-g,\mu\rangle_{\gamma}=0 \ \ \forall\mu\in M \ \Rightarrow \tilde{u}_{|\gamma}=g$. Dans (1), choisissons la fonction $v\in X$ de la façon suivante

$$v=\begin{cases} v_1\in V_0=\left\{v\in H^1(\omega);\ v_{|\gamma}=0,\ v_{|\Gamma}=0\right\} \text{ sur } \omega \\ 0 \text{ sur } \Omega-\omega. \end{cases}$$

On en déduit

$$\int_{\omega}\varepsilon\nabla\tilde{u}.\nabla v_1\,d\Omega=0 \quad \forall v_1\in V_0,$$

donc $\tilde{u}_{|\omega}=u$ est solution de (I.5). **?**

Remarque : le potentiel dans les conducteurs, $\tilde{u}_{|\Omega-\omega}$, est également le potentiel « physique » dans les conducteurs.

En effet, pour chaque conducteur C_j, l'équation (2) de la formulation domaines fictifs (*DF*) donne

$$\tilde{u}_{|\partial C_j}=g_j=cste \quad (0 \text{ ou } 1).$$

Choisissons alors dans (1) la fonction $v\in X$ de la façon suivante

$$v = \begin{cases} v_{j,d} \in V_0^{j,d} = \left\{ v \in H^1(C_j \cap \Omega_d),\ v_{|\partial C_j \cap \Omega_d} = 0 \right\} \text{ sur } C_j \cap \Omega_d \\ 0 \text{ sur } \Omega - (C_j \cap \Omega_d) \end{cases}$$

On en déduit

$$\int_{C_j \cap \Omega_d} \nabla \tilde{u} . \nabla v_{j,d}\, d\Omega = 0\,, \qquad \forall v_{j,d} \in V_0^{j,d}\ ,$$

et donc $\tilde{u}_{|C_j} = g_j$ dans chaque couche Ω_d du conducteur C_j, et donc dans tout le conducteur C_j.

Dans la suite, on note u le potentiel étendu à Ω, et donc (u, λ) la solution du problème (DF).

- Interprétation du multiplicateur :

Le couple (λ, u) *solution du problème* (DF) *vérifie*

$$\lambda = \varepsilon \frac{\partial u_\omega}{\partial n}\Big|_\gamma\,,$$

où n *désigne le vecteur normal à* g *orienté vers l'extérieur de* w *, et où* e *est la permittivité du diélectrique sur l'élément de surface où l'on calcule* l *. Donc* l *est la charge surfacique sur* g*.*

Preuve: Soit $v \in H_0^{\,1}(w)$, prolongé par 0 en $v \in H_0^{\,1}(\Omega)$. Alors l'équation (1) du problème (DF) permet d'écrire

$$\nabla.(\varepsilon \nabla u) = 0 \ \text{ dans } \omega.$$

En utilisant la formule de Green pour réécrire cette équation, et en notant n_w la normale sortante de ω, on obtient

$$\forall v \in H^1(\omega),\ \int_\omega \varepsilon \nabla u . \nabla v\, d\Omega - \int_\gamma \varepsilon\, v\, \frac{\partial u_\omega}{\partial n_\omega}\, d\gamma = 0\,.$$

Et donc, en utilisant que u est constant à l'intérieur des conducteurs, on peut prolonger l'équation à l'intérieur des conducteurs par

$$\forall v \in H^1(\Omega),\ \int_\Omega \varepsilon \nabla u . \nabla v\, d\Omega = \int_\gamma \varepsilon\, v\, \frac{\partial u_\omega}{\partial n_\omega}\, d\gamma\,,$$

et en identifiant avec l'expression

$$\int_\Omega \varepsilon \nabla u . \nabla v\, d\Omega = \int_\gamma v \lambda\, d\gamma, \quad \forall v \in X\ ,$$

on obtient que le multiplicateur λ vérifie

$$\lambda = \varepsilon \frac{\partial u_\omega}{\partial n_\omega}\Big|_\gamma\,,$$

c'est-à-dire est égal la charge à la surface des conducteurs, ce qu'on cherche à calculer.

Chapitre II. Discrétisation

Ce chapitre est consacré à l'étude d'une discrétisation externe du potentiel, adaptée au calcul des capacités mutuelles entre les conducteurs. Nous introduisons cette discrétisation, et validons son efficacité sur des exemples en dimension 2. Les aspects théoriques seront l'objet du chapitre 3. L'assemblage du système linéaire déduit de cette discrétisation, et la résolution efficace du système seront développés dans le chapitre 4.

1. INTRODUCTION

Soit une grille régulière de volume G_h, de pas h, du domaine parallélépipédique (ou rectangulaire en dimension 2) Ω. Et soit S_η un maillage de pas h, de la surface γ, définie comme l'union des surfaces des N conducteurs. Pour résoudre le problème (*DF*), on construit des espaces de dimension finie, basés sur les maillages G_h et S_η, et dans lesquels on cherche les solutions approchées du potentiel et de la charge, comme solution d'un problème discret approchant le problème (*DF*).

Nous présentons d'abord, dans le paragraphe 2, la discrétisation proposée dans [GlPaPé 94] : le potentiel est discrétisé par des éléments finis P_1 (ou Q_1) sur la grille G_h, et la charge par des éléments finis P_0 sur le maillage S_η. Le potentiel et la charge sont approchés par la solution de

$$\begin{cases} \text{Trouver } (u_h, \lambda_\eta) \in X_h \times M_\eta \text{ tels que} \\ a(u_h, v_h) + b(v_h, \lambda_\eta) = 0, \quad \forall v_h \in X_h, \\ b(u_h, \mu_\eta) = -< g, \mu_\eta >_\gamma, \quad \forall \mu_\eta \in M_\eta. \end{cases}$$

Cette approximation, que l'on appelle (A-GPP), mène à un système linéaire de la forme

$$\begin{cases} \text{Trouver } U \in \Re^{N_V} \text{ et } \Lambda \in \Re^{N_S} \text{ tels que} \\ \mathsf{A}\, U + \mathsf{B}^T \Lambda = 0 \\ \mathsf{B}\, U = -G \end{cases}$$

Ce système peut être résolu par un algorithme de gradient conjugué sur la charge Λ. A chaque itération de l'algorithme, la résolution d'un système $\mathsf{A}^{-1} X = Y$, peut être rendue efficace par l'utilisation d'un solveur de Poisson rapide sur la grille de volume G_h. De plus, Girault et Glowinski [GiGl 95] montrent que, en dimension 2, sous réserve de conditions de compatibilité entre les pas h et h, la solution $(u_h, \lambda_\eta) \in (X_h \times M_\eta)$ du problème discret converge vers la solution continue (u, λ) quand h et h tendent vers 0 :

$$\|u-u_h\|_X + \|\lambda-\lambda_\eta\|_M \le C_1 h^s \|u\|_{s+1,\Omega} + C_2 \eta \sqrt{\sum_i \|\lambda\|^2_{\frac{1}{2},\gamma_i}} \text{ , pour } s=\frac{1}{2}-\varepsilon,\ \varepsilon>0$$

Nous avons testé numériquement cette méthode et les résultats montrent (section 2.4) que pour obtenir une précision satisfaisante sur la valeur de la charge, il faut une grille de volume très raffinée. Les besoins en temps de calcul et en mémoire sont donc trop importants pour espérer avoir une méthode efficace pour la simulation de circuits réels.

Nous proposons donc dans le paragraphe 3 un enrichissement de l'espace de discrétisation du potentiel pour mieux prendre en compte la discontinuité du champ électrique (du gradient du potentiel) à travers la surface des conducteurs, dans le cas général où cette surface ne coïncide pas avec les mailles de la grille de volume. En effet, le saut de la dérivée normale du potentiel à travers la surface des conducteurs étant égal à la charge surfacique, il est important de bien le prendre en compte si on veut une bonne précision sur le calcul de la charge. Nous utilisons une particularité essentielle de notre problème, qui est que les surfaces des conducteurs sont des isopotentielles. Nous construisons un nouvel espace de discrétisation du potentiel, $\overline{X}_{h,\eta}$, enrichi par rapport à l'espace X_h, de fonctions définies autour de chaque élément de surface. L'espace $\overline{X}_{h,\eta}$ n'est pas inclus dans l'espace X contenant le potentiel. Nous adaptons donc le problème approché à cet espace de discrétisation, et cherchons le potentiel et la charge approchés comme solution d'un problème de la forme

$$\begin{cases} \text{Trouver } (\overline{u}_{h,\eta}, \overline{\lambda}_\eta) \in \overline{X}_{h,\eta} \times M_\eta \text{ tels que} \\ a_{h,\eta}(\overline{u}_{h,\eta}, \overline{v}_{h,\eta}) + b_\eta(\overline{v}_{h,\eta}, \overline{\lambda}_\eta) = 0, \quad \forall \overline{v}_{h,\eta} \in \overline{X}_{h,\eta} \\ b_\eta(\overline{u}_{h,\eta}, \mu_\eta) = -<g, \mu_\eta>_\gamma, \quad \forall \mu_\eta \in M_\eta \end{cases}$$

Nous appelons (A-Capa) l'approximation du problème, adaptée au calcul des capacités mutuelles des conducteurs (les surfaces des conducteurs doivent être à un potentiel constant), ainsi obtenue.

Pour des géométries de conducteurs parallélépipédiques, nous montrons que les degrés de libertés associés aux fonctions de base supplémentaires peuvent être calculés explicitement et substitués, donnant finalement un système de la forme

$$\begin{cases} \text{Trouver } R \in \Re^{N_V} \text{ et } \overline{\Lambda} \in \Re^{N_S} \text{ tels que} \\ \mathsf{A}\ R + \mathsf{B}^T \overline{\Lambda} = 0 \\ \mathsf{B}\ R - \mathsf{C}\ \overline{\Lambda} = -G \end{cases}$$

où A et B sont les matrices introduites précédemment, et où C est une matrice diagonale.

Les résultats numériques sur des exemples en dimension 2 présentés dans la section 4 montrent que la précision sur la charge, pour une grille de volume et un maillage de surface donnés, est bien meilleure avec l'approximation (A-Capa) qu'avec l'approximation (A-GPP). De plus, on constate qu'avec cette discrétisation, dans le cas de surfaces de conducteurs orthogonales à la grille, il n'est plus nécessaire de vérifier la condition de compatibilité entre les pas des maillages de surface et de volume. Le système est bien conditionné, et l'algorithme du gradient conjugué converge rapidement, sans préconditionnement.

D'autre part, dans le cas de surfaces de conducteurs quelconques, nous avons résolu un système linéaire similaire au cas de surfaces des conducteurs orthogonales à la grille. Un peu moins précis que dans le cas particulier de surfaces orthogonales à la grille, les résultats de ce système sont en tout cas toujours nettement meilleurs que ceux de l'approximation (A-GPP). Nous tentons de donner une justification à ces bons résultats dans le paragraphe 3.6.

2. L'APPROXIMATION (A-GPP) DUE A R. GLOWINSKI, T.-W. PAN ET J. PERIAUX

Cette section est basée sur la discrétisation en dimension 2 proposée dans [GlPaPe 94] pour le problème

$$\begin{cases} \text{Trouver } (u,\lambda)\in V\times H^{-1/2}(\gamma) \text{ tels que} \\ \int_\Omega \left(\alpha\, u\, v+\nu\,\nabla u.\nabla v\right)dx=\int_\Omega f\, v\, dx+<v,\lambda>_\gamma, \quad \forall v\in V, \\ <u-g,\mu>_\gamma=0, \quad \forall \mu\in H^{-1/2}(\gamma), \end{cases}$$

où $f\in L^2(\Omega)$, $g\in H^{1/2}(\gamma)$, $\alpha\geq 0$, $\nu>0$, et V est un sous-espace de $H^1(\Omega)$. Le problème étudié ici est, dans chaque zone diélectrique homogène (de permittivité diélectrique ε constante), un cas particulier de ce système, où $\alpha=0$, $f=0$, $\nu=\varepsilon$, et g est constant sur la surface de chaque conducteur. On rappelle que l'on suppose les matériaux diélectriques homogènes par couche, c'est-à-dire $\varepsilon=\varepsilon(z)$ est constante par morceaux.

Dans [GlPaPe 94], la variable surfacique λ est discrétisée en utilisant des éléments finis P_0 sur un maillage de surface de γ, et la variable volumique u est discrétisée en utilisant des éléments finis P_1 sur des triangles. On choisit ici une discrétisation très proche, c'est-à-dire la même discrétisation de la variable surfacique λ, et des éléments finis Q_1 sur des rectangles pour u. Nous utilisons la même discrétisation en dimension 3, mais les rectangles de la grille sont remplacés par des parallélépipèdes, et la surface γ est maillée par des triangles.

De plus, le maillage volumique est constitué de rectangles (ou de parallélépipèdes en dimension 3), de côté Δx (Δx et Δy en dimension 3) constant, mais $\Delta z(z)$ variable, de sorte que l'interface entre deux couches diélectriques homogènes coïncide avec des mailles du maillage de volume. Le maillage de surface est également construit de façon à ce qu'un élément de surface ne traverse pas l'interface entre deux couches diélectriques.

Nous introduisons dans le paragraphe 2.1 les espaces de discrétisation du potentiel et de la charge en dimension 3, et nous en déduisons dans le paragraphe 2.2 la formulation matricielle du problème discret. Nous décrivons ensuite rapidement dans le paragraphe 2.3 le principe d'une méthode efficace de résolution de ce système, enfin nous présentons dans le paragraphe 2.4 des résultats obtenus sur un exemple en dimension 2, et nous concluons sur le manque de précision du calcul de la charge pour des maillages assez grossiers.

2.1. ESPACES DE DISCRETISATION

Le problème à résoudre est tridimensionnel, mais dans la suite du chapitre, pour plus de simplicité, nous étudions principalement le cas d'une coupe verticale du circuit, qui se généralise facilement au cas tridimensionnel.

2.1.1 Discrétisation du potentiel

Considérons sur le domaine tridimensionnel Ω, une grille G_h formée de parallélépipèdes rectangles K^i, de côtés Δx, Δy constants, et Δz^i variable. Si le domaine Ω est une coupe verticale, orthogonale à l'axe (*y*'*y*), la grille est formée de rectangles K^i, de côtés Δx constant, et Δz^i variable. On a $\overline{\Omega} = G_h = \bigcup_i K^i$, et de façon classique $K^i \cap K^j$ est soit vide soit réduit à un sommet, une arête ou une face. On note Γ_0 la partie de $\partial\Omega$ correspondant à $z = 0$, et *h* le maximum des longueurs des côtés. Le potentiel est fixé égal à zéro sur Γ_0. On introduit l'espace $X_h \subset X$ par

$$X_h = \left\{ v_h \in C^0\left(\overline{\Omega}\right),\ \text{tel que } v_h = 0 \text{ sur } \Gamma_0 \ \text{ et } \forall K^i \in G_h,\ v_{h|K^i} \in Q_1 \right\}.$$

On désigne par n_x, n_y et n_z le nombre de points de la grille G_h où l'on va calculer numériquement le potentiel dans les trois directions. On pose, en dimension 3, $N_V = n_x.n_y.n_z$, et en dimension 2, $N_V = n_x.n_z$. On associe à tout sommet s_l de la grille G_h la fonction de base Φ_l de X_h telle que

$$\Phi_l(s_m) = \delta_{lm}, \quad \forall l, m \in \{1, ..., N_V\}.$$

Ainsi une variable volumique $u_h \in X_h$ est définie par la donnée de ses valeurs aux N_V sommets de la grille, et s'écrit

$$\forall u_h \in X_h,\ \ u_h(x) = \sum_{1 \le l \le N_V} u_l \Phi_l(x), \quad \text{avec } u_l = u_h(s_l).$$

2.1.2 Discrétisation de la charge

Soit S_η un maillage de la surface γ des conducteurs. Ce maillage est formé, en dimension 3, de triangles, et en dimension 2, de segments, notés dans les deux cas γ_k. On a $\gamma = S_\eta = \bigcup_k \gamma_k$, on introduit alors l'espace $M_\eta \subset M$ par

$$M_\eta = \left\{ \mu_\eta \in L^2(\gamma),\ \text{tel que } \forall \gamma_k \in S_\eta,\ \left(\mu_\eta\right)_{|\gamma_k} \in P_0 \right\}.$$

Soit N_S le nombre d'éléments du maillage de surface S_η. On associe à tout $\gamma_k \in S_\eta$, la fonction $\varphi_k \in M_\eta$ telle que

$$\varphi_k(x) = \chi_{\gamma_k}(x), \quad \forall k \in \{1, 2, ..., N_S\}.$$

Une variable de l'espace des multiplicateurs de Lagrange, $\lambda_\eta \in M_\eta$, est définie par ses valeurs moyennes sur chacun des N_S éléments du maillage de surface, et s'écrit

$$\lambda_\eta(x) = \sum_{1 \le k \le N_S} \lambda_k \varphi_k(x).$$

Remarque : Les espaces de discrétisation d'un problème de la forme (*DF*) doivent satisfaire une condition de compatibilité appelée condition inf-sup [Br 74] pour assurer une bonne convergence de la solution calculée vers la solution réelle.

Les auteurs de [GiGl 95] ont montré qu'en dimension 2, et avec une discrétisation de *u* par des éléments finis P_1, une condition suffisante pour satisfaire cette condition est une condition de compatibilité entre les pas des maillages, qui assure que le maillage de surface n'est pas trop fin par rapport au maillage de volume. En pratique, ils ont effectivement observé une telle condition, mais moins contraignante. Nos constatations (section 4) donnent des résultats analogues.

2.2. PROBLEME DISCRET

Le problème discret s'écrit

$$\begin{cases} \text{Trouver } (u_h, \lambda_\eta) \in X_h \times M_\eta \text{ tels que} \\ \int_\Omega \varepsilon \, \nabla u_h . \nabla v_h \, d\Omega = \int_\gamma v_h \, \lambda_\eta \, d\gamma, \quad \forall v_h \in X_h \\ \int_\gamma (u_h - g) \mu_\eta \, d\gamma = 0, \quad \forall \mu_\eta \in M_\eta \end{cases} \qquad (\text{II.1})$$

On introduit les matrices $\mathsf{A} \in \mathsf{M}_{N_V \times N_V}$, $\mathsf{B} \in \mathsf{M}_{N_S \times N_V}$, et $G \in \Re^{N_S}$ dont les termes généraux sont

$$a_{l,m} = \int_\Omega \varepsilon \nabla \Phi_l . \nabla \Phi_m \, d\Omega,$$

$$b_{k,l} = -\int_\gamma \Phi_l \, \varphi_k \, d\gamma,$$

$$g_k = \int_\gamma g \, \varphi_k \, d\gamma.$$

Le problème (II.1) s'écrit sous la forme matricielle

$$\begin{cases} \text{Trouver } U \in \Re^{N_V} \text{ et } \Lambda \in \Re^{N_S} \text{ tels que} \\ \mathsf{A}\, U + \mathsf{B}^T \Lambda = 0 \\ \mathsf{B}\, U = -G \end{cases} \qquad (\text{II.2})$$

2.3. RESOLUTION EFFICACE DU SYSTEME LINEAIRE

On peut éliminer la variable U du système (II.2), et se ramener à la résolution de

$$\mathsf{B}\, \mathsf{A}^{-1} \mathsf{B}^T \Lambda = G \qquad (\text{II.3})$$

On déduit ensuite U par

$$U = -\mathsf{A}^{-1} \mathsf{B}^T \Lambda .$$

La matrice A étant symétrique définie positive, $\mathsf{B}\, \mathsf{A}^{-1} \mathsf{B}^T$ est semi définie positive, et définie positive si et seulement si $\ker \mathsf{B}^T = \{0\}$. Cette condition est équivalente à la condition inf-sup discrète, qui se traduit par une condition de compatibilité entre les maillages. On peut alors, comme il est suggéré dans [GlPaPé 94], utiliser l'algorithme du gradient conjugué pour résoudre le système réduit (II.3).

Chaque itération de l'algorithme nécessite un calcul de $\mathsf{A}^{-1}X_k$. Ce calcul correspond à la résolution de l'équation de Poisson dans un domaine parallélépipédique discrétisé sur une grille régulière dans deux directions. Donc d'une part, la matrice A n'est pas stockée en mémoire. Et d'autre part, on peut utiliser pour ce calcul un algorithme efficace faisant intervenir la FFT [Sw 77, GoMe 80]. Ces points concernant la mise en œuvre pratique de la méthode sont détaillés dans le chapitre 4.

2.4. RESULTATS (UN EXEMPLE) ET CONCLUSION

Pour tester cette approximation, nous calculons pour un exemple simple, en dimension 2, l'erreur relative commise sur la charge totale d'un conducteur en fonction de la finesse des pas de discrétisation (grille de volume et maillage de surface), en gardant le rapport entre le pas du maillage de surface et le pas du maillage de volume fixé, légèrement supérieur à 3, de façon à vérifier la condition inf-sup.

Considérons le problème suivant, où l'on a deux conducteurs, dont les surfaces en vis-à-vis sont rectangulaires,

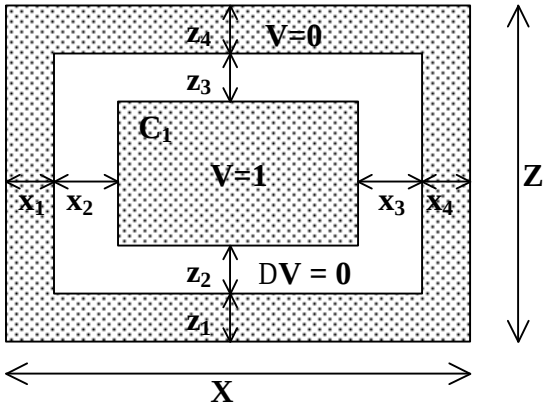


Figure II.1. Géométrie rectangulaire

Si les surfaces des conducteurs ne coïncident pas avec la grille, la discontinuité du gradient du potentiel à travers ces surfaces ne peut pas être traduite dans la discrétisation utilisant des fonctions Q_1 sur la grille. Si les surfaces des conducteurs coïncident avec la grille de volume, on verra que les résultats sont meilleurs. Mais comme on ne peut pas espérer faire coïncider partout une grille régulière de tout le domaine avec la surface des conducteurs, on se place ici dans le cas général où elles ne coïncident pas. On choisit donc les paramètres définissant les conducteurs de la façon suivante,

$$\begin{cases} X = Z = 20; \\ x_1 = 2 + 0{,}023; \quad x_2 = 3 + 0{,}1; \quad x_3 = 3 - 0{,}1; \quad x_4 = 2 - 0{,}023; \\ z_1 = 2 + 0{,}301; \quad z_2 = 3 - 0{,}1; \quad z_3 = 3 + 0{,}1; \quad z_4 = 2 - 0{,}301. \end{cases}$$

On prend pour estimation de la valeur exacte de la charge, la valeur calculée pour une grille de 2^{12} points dans chaque direction ($n_x = n_z = 2^{12} + 1$). Dans la figure ci-dessous, on représente en échelles logarithmiques l'erreur relative sur la charge, donnée par $\dfrac{Q_n - Q_{12}}{Q_{12}}$, et le temps de calcul nécessaire, en fonction du pas de la grille. Celui-ci est donné par

$$h = \frac{20}{2^n},$$

où 2^n est le nombre de points sur la grille dans chaque direction.

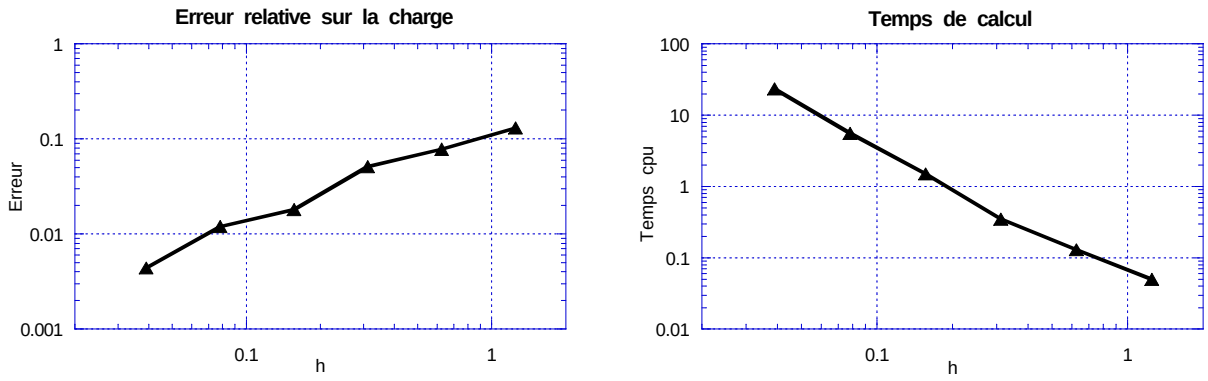


Figure II.2. Erreur relative et temps de calcul en fonction du pas de la grille, pour un rapport fixé supérieur à 3 entre le pas du maillage de surface et le pas de la grille.

On constate que pour obtenir une précision d'environ 1% sur la charge totale (ce qui n'est pas une très grande précision compte tenu de la simplicité de l'exemple), il faut une grille d'au moins 256 points dans chaque direction. Les besoins en temps de calcul (et en mémoire) sont donc importants, ici 5 secondes de calcul pour une erreur de 1,2%, obtenue avec une grille de 256 points dans chaque direction, et 24 secondes pour une erreur de 0,4%, obtenue avec une grille de 512 points dans chaque direction, sur un Sun Ultra 60.

On conclut que pour obtenir une précision satisfaisante sur la valeur de la charge, on doit utiliser une grille de volume très raffinée, ce qui entraîne des besoins en temps de calcul et en mémoire trop importants pour espérer avoir une méthode efficace. Cependant, les idées d'éviter de mailler un domaine 3D compliqué, et d'utiliser un solveur rapide sur le domaine fictif sont très attractives. On veut donc modifier l'approximation pour obtenir une méthode présentant les mêmes avantages, mais donnant des résultats précis sur la charge même pour des grilles grossières.

3. ENRICHISSEMENT DE L'APPROXIMATION POUR DES OBSTACLES CONDUCTEURS

3.1. INTRODUCTION

Dans l'approximation (A-GPP), le saut de la dérivée normale du potentiel à travers la surface γ est introduit par la variable λ dans la formulation variationnelle, mais non dans la discrétisation choisie pour le potentiel. En effet, si la surface γ ne coïncide pas avec des mailles de la grille de volume, la dérivée du potentiel calculé est continue à travers γ, et donc le potentiel est mal approché au voisinage des surfaces des conducteurs. Cela explique que la précision des valeurs calculées de la charge λ n'est pas satisfaisante.

Dans le paragraphe 3.2, nous exprimons en dimension un la solution donnée par l'approximation (A-GPP). Nous proposons ensuite une approximation du potentiel à un ordre supérieur, obtenue par l'ajout d'un terme tenant compte de la discontinuité du gradient du potentiel en γ. Nous en déduisons une nouvelle discrétisation, nommée (A-Capa), du problème. En dimension un, la solution du système qui découle est meilleure, elle donne même la solution exacte du problème.

Nous étendons ensuite, dans le paragraphe 3.3, cet enrichissement de l'approximation du potentiel aux dimensions deux et trois. Pour cela, sur chaque rectangle de la grille coupé par la surface d'un conducteur, nous calculons le potentiel de façon approchée de part et d'autre de cette surface, en utilisant un développement de Taylor faisant intervenir le gradient du potentiel de chaque côté de la surface. La charge étant toujours approchée par une constante sur chaque élément de surface, nous approchons ainsi le potentiel dans une zone autour de l'élément de surface, par l'approximation Q_1 classique sur la grille volumique, plus un terme dépendant de la charge sur l'élément de surface et de dérivée discontinue à travers cette surface. Le fait que le potentiel est constant à la surface des conducteurs est essentiel, cette approximation est donc spécifique à notre exemple particulier.

Nous introduisons alors cette idée dans l'espace de discrétisation du potentiel : nous ajoutons dans l'espace de discrétisation du potentiel, des fonctions définies chacune sur un volume autour d'un élément du maillage de surface, et de dérivée discontinue à travers cet élément de surface. Cette nouvelle discrétisation mène à un système (A-Capa), dont la résolution exacte est coûteuse dans le cas général. Mais dans le cas de surfaces des conducteurs orthogonales à la grille, des propriétés supplémentaires des fonctions ajoutées permettent de réécrire plus simplement le système (A-Capa), en éliminant les degrés de liberté supplémentaires. On obtient un système voisin par sa forme du système (A-GPP), et qui se résout efficacement de la même façon.

Dans le cas de surfaces quelconques, le système obtenu (A-Capa) ne se simplifie pas de la même façon. Et pourtant, si l'on utilise la même formulation simplifiée, les résultats sont bons en pratique. Nous proposons comme explication partielle, de décomposer le potentiel en une partie régulière à travers la surface des conducteurs et une partie de dérivée discontinue à travers cette surface, en revenant à la formulation continue. La discrétisation de cette nouvelle formulation, en utilisant les mêmes fonctions de base supplémentaires pour approcher le terme qui prend en compte le saut du gradient, mène dans le cas général à un système très proche du système obtenu dans le cas de surfaces des conducteurs orthogonal à la grille. Cette formulation paraît aussi plus facilement généralisable au cas où la fonction u n'est pas constante sur la surface des obstacles.

3.2. EXEMPLE DE LA DIMENSION 1

Nous rappelons d'abord la formulation domaines fictifs en dimension un, et résolvons le système discret obtenu par l'approximation (A-GPP). Puis nous montrons comment améliorer l'approximation du potentiel à proximité des points à potentiel imposé (conducteurs) : nous introduisons la discontinuité de la dérivée du potentiel en ces points, tout en gardant la grille structurée, qui, dans les dimensions 2 et 3, permettra l'utilisation de solveurs rapides.

3.2.1 Problème continu en dimension 1

En dimension 1, il est difficile de parler de "conducteurs", mais on a un problème proche de ce qu'on cherche à résoudre en 2D ou en 3D pour un diélectrique homogène, en considérant un problème de la forme

Trouver le potentiel $u \in C^0[\alpha,\beta]$, solution de

$$\begin{cases} u'' = 0 \text{ sur }]\alpha,\gamma_1[\cup]\gamma_1,\gamma_2[\cup]\gamma_2,\beta[\\ u(\alpha) = u_\alpha ; \quad u(\beta) = u_\beta ; \\ u(\gamma_1) = u(\gamma_2) = g. \end{cases} \qquad \text{(II.4)}$$

La valeur fixée aux points γ_1 et γ_2 correspond à la condition aux limites qu'on impose à la surface d'un conducteur, et l'intervalle $]\gamma_1,\gamma_2[$ correspond à l'intérieur de ce conducteur, où le potentiel est constant et égal à g.

La solution exacte de (II.4) est continue, affine par morceaux (cf. Figure II.3).

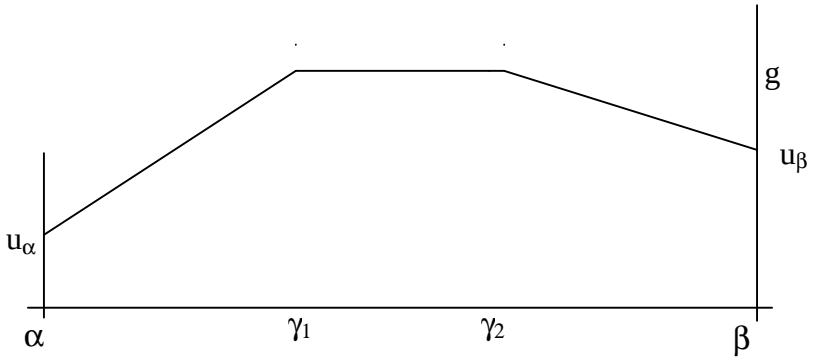


Figure II.3. Potentiel exact

La formulation domaine fictif de (II.4) est le problème mixte

$$\begin{cases} \text{Trouver } u \in H^1(\alpha,\beta),\ \lambda_1 \text{ et } \lambda_2 \text{ dans } \Re \text{ tels que} \\ \int_\alpha^\beta u'(x)v'(x)\,dx = \lambda_1 v(\gamma_1) + \lambda_2 v(\gamma_2), \quad \forall v \in H_0^1(\alpha,\beta), \\ \mu_1 u(\gamma_1) + \mu_2 u(\gamma_2) = \mu_1 g + \mu_2 g, \quad \forall \mu_1,\mu_2 \in \Re, \\ u(\alpha) = u_\alpha,\ u(\beta) = u_\beta . \end{cases} \qquad \text{(II.5)}$$

On déduit de ce système que

$$\lambda_i = u'(\gamma_i^-) - u'(\gamma_i^+) .$$

Proposition II.1 *Le problème* (II.5) *admet une solution unique.*

Preuve : Soit *w* la fonction affine sur $[\alpha,\beta]$, telle que

$$w(\alpha) = u_\alpha \text{ et } w(\beta) = u_\beta .$$

Posons $\varphi = u - w$. Chercher $u \in H^1(\alpha,\beta)$, $(\lambda_1,\lambda_2) \in \Re^2$, solutions de (II.5), revient à chercher $\varphi \in H_0^1(\alpha,\beta)$, $(\lambda_1,\lambda_2) \in \Re^2$ tels que

$$\begin{cases} \int_\alpha^\beta (w' + \varphi')v' = \lambda_1 v(\gamma_1) + \lambda_2 v(\gamma_2), \quad \forall v \in H_0^1(\alpha,\beta), \\ \mu_1[(w+\varphi)(\gamma_1) - g] + \mu_2[(w+\varphi)(\gamma_2) - g] = 0, \quad \forall (\mu_1,\mu_2) \in \Re^2. \end{cases}$$

En remarquant que

$$\int_\alpha^\beta w'v' = 0 \quad \forall v \in H_0^1(\alpha,\beta),$$

on peut réécrire le problème (II.5) :

$$\begin{cases} \text{Trouver } \varphi \in H_0^1(\alpha,\beta),\ (\lambda_1,\lambda_2) \in \Re^2 \ \text{ tels que} \\ \int_\alpha^\beta \varphi' v' = \lambda_1 v(\gamma_1) + \lambda_2 v(\gamma_2), \quad \forall v \in H_0^1(\alpha,\beta), \\ \mu_1 \varphi(\gamma_1) + \mu_2 \varphi(\gamma_2) = \mu_1[g - w(\gamma_1)] + \mu_2[g - w(\gamma_2)], \quad \forall (\mu_1,\mu_2) \in \Re^2. \end{cases} \qquad (\text{II.6})$$

Pour montrer que (II.6) admet une solution unique, il suffit de vérifier que les hypothèses du théorème suivant (voir par exemple [BrFo 91]), sont vérifiées.

Théorème II.1 *Soient X et M des espaces de Hilbert, a et b des formes bilinéaires continues respectivement sur* $X \times X$ *et* $X \times M$ *, et* $f \in X'$, $g \in M'$. *Soit*

$$Z = \{ v \in X; \quad b(v,\mu) = 0, \ \forall \mu \in M \}.$$

Si a est Z-elliptique, et si b vérifie la condition inf-sup

$$\sup_{v \in X - \{0\}} \frac{b(v,\mu)}{\|v\|_V} \geq k \|\mu\|_M, \quad \forall \mu \in M, \qquad (\text{II.7})$$

alors il existe une solution unique au problème

$$\begin{cases} \textit{Trouver } (u,\lambda) \in X \times M \ \textit{ tels que} \\ a(u,v) + b(v,\lambda) = \langle f, v \rangle, \quad \forall v \in X \\ b(u,\mu) = \langle g, \mu \rangle, \quad \forall \mu \in M \end{cases}$$

Ici $X = H_0^1(\alpha,\beta)$, $M = \Re^2$. On définit *a* et *b* respectivement sur $X \times X$ et $X \times M$ par

$$a(\varphi, v) = \int_\alpha^\beta \varphi' v', \quad \forall (\varphi, v) \in X \times X,$$
$$b(\varphi,\mu) = -\mu_1 \varphi(\gamma_1) - \mu_2 \varphi(\gamma_2), \quad \forall (\varphi,\mu) \in X \times M.$$

L'espace *Z* est

$$\begin{aligned} Z &= \{ v \in H_0^1(a,b); \quad \mu_1 v(\gamma_1) + \mu_2 v(\gamma_2) = 0, \quad \forall \mu \in \Re^2 \} \\ &= \{ v \in H_0^1(a,b); \quad v(\gamma_1) = 0, \ \ v(\gamma_2) = 0 \} \end{aligned}$$

La forme bilinéaire *a* est elliptique sur $H_0^1(a,b)$ donc sur *Z*.

La forme bilinéaire *b* définit un opérateur linéaire continu *B*, de *X* dans $\Re^2$, par

$$b(\varphi,\mu) = < B\varphi, \mu >_{\Re^2}, \quad \forall (\varphi,\mu) \in X \times \Re^2.$$

Et donc

$$\begin{aligned} B: \quad X &\to \Re^2 \\ \varphi &\mapsto \begin{pmatrix} \varphi(\gamma_1) \\ \varphi(\gamma_2) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

est surjectif, ce qui est équivalent à la condition inf-sup (II.7).

?

3.2.2 Approximation du problème mixte

On veut approcher le problème

$$\begin{cases} \text{Trouver } \varphi \in H_0^1(\alpha,\beta),\ (\lambda_1,\lambda_2) \in \Re^2 \text{ tels que} \\ \int_\alpha^\beta \varphi' v' = \lambda_1 v(\gamma_1) + \lambda_2 v(\gamma_2), \quad \forall v \in H_0^1(\alpha,\beta), \\ \mu_1 \varphi(\gamma_1) + \mu_2 \varphi(\gamma_2) = \mu_1 \tilde{g}_1 + \mu_2 \tilde{g}_2, \quad \forall (\mu_1,\mu_2) \in \Re^2. \end{cases} \qquad (\text{II.8})$$

où

$$\tilde{g}_i = g - w(\gamma_i), \quad i = 1,2,$$

et w est la fonction affine telle que

$$w(\alpha) = u_\alpha \text{ et } w(\beta) = u_\beta .$$

La solution du problème (II.5) se déduit ensuite par $u = \varphi + w$.

On découpe le domaine fictif $[\alpha,\beta]$ en *N+1* intervalles $[x_i, x_{i+1}]$, $i = \{0,...,N\}$, de même longueur *h*.

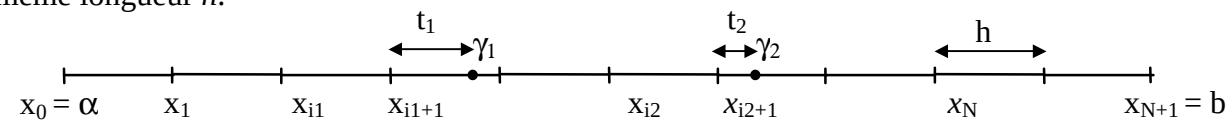


Figure II.4. Grille régulière 1D

3.2.2.1 Approximation (A-GPP)

Nous approchons le potentiel φ (et les fonctions test *v*) par des éléments finis P_1 sur les segments de la grille régulière.
Si le point γ_1 (ou γ_2) ne coïncide pas avec un point de la grille, le potentiel n'est pas bien approché en son voisinage : le potentiel est imposé en γ_1 (ou γ_2), mais la discontinuité du gradient n'est pas traitée (Figure II.5).

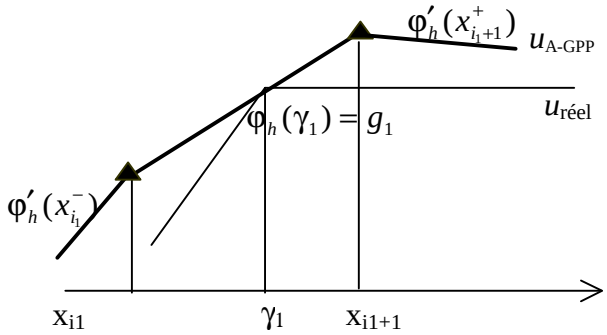


Figure II.5. Approximation du potentiel autour de γ_1

De plus, en écrivant le problème discret correspondant à (II.8), où φ et v sont discrétisés par des éléments finis P_1 sur la grille, on obtient

$$\lambda_1^h = \frac{\varphi_h'(x_{i_1}^-) - \varphi_h'(x_{i_{+11}}^+)}{h(h+t_1)}.$$

L'approximation de λ_1 et λ_2 étant donc liée à l'approximation du potentiel, les résultats sont également peu précis sur les "charges surfaciques" λ_1^h et λ_2^h.

Choisissons par exemple

$$\begin{cases} u_\alpha = 0\,; \quad u_\beta = 1\,; \quad g = 1{,}5 \\ t_1 = \gamma_1 - x_3 = 0{,}7 \\ t_2 = \gamma_2 - x_6 = 0{,}2 \end{cases}$$

Les valeurs exactes et les valeurs obtenues par la résolution du système linéaire obtenu avec l'approximation (A-GPP) de la formulation domaine fictif (II.8), sont respectivement

$$\begin{cases} \lambda_1 = 4{,}05.10^{-1} \\ \lambda_2 = 1{,}32.10^{-1} \end{cases} \text{ et } \begin{cases} \lambda_1^h = 4{,}64.10^{-1} \\ \lambda_2^h = 1{,}04.10^{-1} \end{cases},$$

ce qui fait une erreur relative de 14% sur la première valeur et de 21% sur la deuxième.

3.2.2.2 Approximation (A-Capa)

Nous cherchons maintenant une approximation continue, affine par morceaux, prenant en compte le saut de la dérivée $\lambda_i = u'(\gamma_i^-) - u'(\gamma_i^+)$ en γ_i, $i = 1, 2$. Si les points γ_1 et γ_2 ne coïncident pas avec des points de la grille, avec l'approximation (A-GPP), il n'y a pas de saut. Et étant donné la complexité des conducteurs à traiter en dimension 3, on ne peut pas faire coïncider partout le maillage de volume avec les conducteurs. On perdrait la régularité de la grille et l'efficacité de résolution qui en découle.

Nous ajoutons donc deux fonctions de base Ψ_1 et Ψ_2, continues, affines par morceaux, définies respectivement sur $[x_{i_1}, x_{i_1+1}]$ et $[x_{i_2}, x_{i_2+1}]$ (Figure II.6), et telles que

$$\Psi_i'(\gamma_i^-) - \Psi_i'(\gamma_i^+) = 1, \quad i = 1, 2 \qquad \text{(II.9)}$$

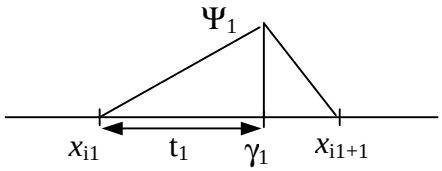


Figure II.6. Fonction de base supplémentaire Ψ_1

La fonction Ψ_1 (Ψ_2 est définie de la même façon) est de la forme

$$\Psi_1(x)=\begin{cases}\tau\dfrac{x-x_{i_1}}{t_1} & \text{si } x\in\left[x_{i_1},x_{i_1}+t_1\right],\\ \tau\dfrac{x_{i_1+1}-x}{h-t_1} & \text{si } x\in\left[x_{i_1}+t_1,x_{i_1+1}\right].\end{cases}$$

On détermine τ pour que

$$\Psi_1'(\gamma_1^-)-\Psi_1'(\gamma_1^+)=1,$$

ce qui donne

$$\tau=\frac{t_1(h-t_1)}{h}.$$

On note Φ_i, $i=1,2,...,N$, les fonctions de base éléments finis P_1 sur la grille. Considérons alors l'espace de discrétisation

$$\overline{X}_h=L(\Phi_1,\Phi_2,...,\Phi_N,\Psi_1,\Psi_2),$$

et le problème discret correspondant,

$$\begin{cases}\text{Trouver } \varphi_h\in\overline{X}_h, \quad (\hat\lambda_1,\hat\lambda_2)\in\Re^2,\\ \int_\alpha^\beta \varphi_h' v_h'\,dx=\hat\lambda_1 v_h(\gamma_1)+\hat\lambda_2 v_h(\gamma_2), \quad \forall v_h\in\overline{X}_h,\\ \varphi_h(\gamma_1)=\tilde g_1;\quad \varphi_h(\gamma_2)=\tilde g_2.\end{cases} \qquad (\text{II.10})$$

Proposition II.2. *Le problème (II.10) admet une solution unique, qui est la solution exacte.*

Preuve :

1. unicité. Considérons deux solutions de (II.10), $\left(\varphi_h^1,\hat\lambda_1^1,\hat\lambda_2^1\right)$ et $\left(\varphi_h^2,\hat\lambda_1^2,\hat\lambda_2^2\right)$. On a

$$\int_\alpha^\beta(\varphi_h^1-\varphi_h^2)'v_h'\,dx=(\hat\lambda_1^1-\hat\lambda_1^2)v_h(\gamma_1)+(\hat\lambda_2^1-\hat\lambda_2^2)v_h(\gamma_2),\quad \forall v_h\in\overline{X}_h.$$

Le choix $v_h=\varphi_h^1-\varphi_h^2$ dans cette équation, en utilisant

$$(\varphi_h^1-\varphi_h^2)(\gamma_1)=0 \text{ et } (\varphi_h^1-\varphi_h^2)(\gamma_2)=0,$$

donne

$$\int_\alpha^\beta(\varphi_h^1-\varphi_h^2)'^2\,dx=0.$$

On en déduit que

$$\varphi_h^1-\varphi_h^2=K=0 \ \ sur\ \ [\alpha,\beta],$$

et donc aussi

$$\begin{cases}\hat\lambda_1^1=\hat\lambda_1^2,\\ \hat\lambda_2^1=\hat\lambda_2^2.\end{cases}$$

2. existence. Vérifions que la solution du problème continu (II.8), représentée Figure II.7, est solution du problème discret.

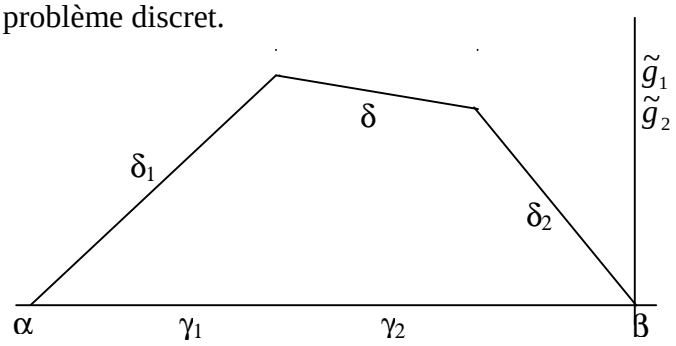


Figure II.7. Solution de (II.8)

La solution du problème continu (II.8) étant affine par morceaux sur $]\alpha,\gamma_1[\cup]\gamma_1,\gamma_2[\cup]\gamma_2,\beta[$, elle appartient à $\overline{X}_h$ et peut s'écrire sous la forme

$$\varphi = \sum_{i=1}^{N} \xi_i \Phi_i + \alpha_1 \Psi_1 + \alpha_2 \Psi_2 .$$

Soient δ_1, δ et δ_2 les pentes des trois segments formant la solution exacte. On a

$$\begin{aligned} \int_\alpha^\beta \varphi' v_h' &= \int_\alpha^{\gamma_1} \delta_1 v_h' + \int_{\gamma_1}^{\gamma_2} \delta v_h' + \int_{\gamma_2}^{\beta} \delta_2 v_h' \\ &= (\delta_1 - \delta) v_h(\gamma_1) + (\delta - \delta_2) v_h(\gamma_2) \end{aligned}$$

Et donc, en posant

$$\begin{cases} \hat{\lambda}_1 = \delta_1 - \delta = \lambda_1, \\ \hat{\lambda}_2 = \delta - \delta_2 = \lambda_2, \end{cases}$$

la solution $(\varphi, \lambda_1, \lambda_2)$ du problème continu (II.8) est également l'unique solution du problème discret (II.10).

On peut de plus expliciter la décomposition de φ dans X_h,

$$\varphi'(\gamma_i^-) - \varphi'(\gamma_i^+) = \lambda_i \quad \Rightarrow \quad \alpha_i = \lambda_i \quad \text{pour } i = 1,2 ,$$

Ψ_1 et Ψ_2 sont nulles aux nœuds x_i $\quad \Rightarrow \quad \xi_i = \varphi(x_i) = \varphi_i \quad$ pour $i = 1,2,...,N$.

Et donc φ s'écrit

$$\varphi = \sum_{i=1}^{N} \varphi_i \Phi_i + \lambda_1 \Psi_1 + \lambda_2 \Psi_2 .$$

3.3. DIMENSION 2 : APPROXIMATION DU POTENTIEL A UN ORDRE SUPERIEUR

De la même façon qu'en dimension 1, nous allons enrichir l'espace d'approximation X_h, en définissant une fonction de base supplémentaire Ψ_k autour de chaque élément de surface γ_k. Pour cela, dans le paragraphe 3.3.2, nous calculons le potentiel de façon approchée sur chaque rectangle K^i coupé par la surface γ, en tenant compte de la

discontinuité du gradient du potentiel introduite par λ à travers $\gamma \cap K^i$. Puis, comme dans l'approximation (A-GPP), nous discrétisons la charge par une fonction λ_η constante sur chaque segment γ_k, $k = 1, 2, ..., N_S$. Le calcul approché effectué au paragraphe 3.3.2 revient alors à l'ajout de N_S degrés de liberté sur N_S fonctions supplémentaires, définies chacune sur un volume entourant un segment de surface, pour approcher le potentiel,. Nous étudions les propriétés de ces fonctions supplémentaires, elles serviront pour écrire le problème discret. Nous définissons enfin dans les coins des conducteurs, la trace sur la surface γ des fonctions appartenant au nouvel espace de discrétisation.

3.3.1 Notations

Dans ce paragraphe, nous rappelons tout d'abord l'expression des fonctions de base Q1 sur le carré de référence, et nous définissons l'application affine bijective, qui projette le carré de référence sur un rectangle quelconque.

- Fonctions de base Q_1 sur le carré de référence :

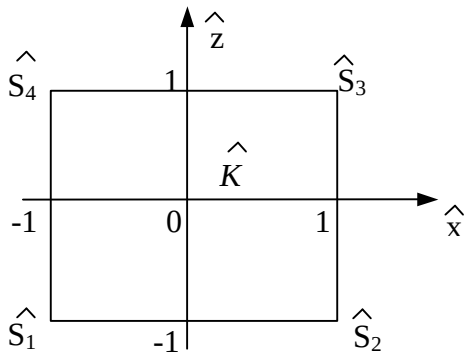


Figure II.8 Carré de référence

On note $\hat{\Phi}_j$, $j = 1, 2, 3, 4$, les fonctions de base éléments finis Q_1 associées aux sommets du carré de référence, entré en 0, et de côtés de longueur 2. Elles s'écrivent

$$\begin{cases} \hat{\Phi}_1(\hat{x}, \hat{z}) = \frac{1}{4}(1-\hat{x})(1-\hat{z}) \\ \hat{\Phi}_2(\hat{x}, \hat{z}) = \frac{1}{4}(1+\hat{x})(1-\hat{z}) \end{cases} \qquad \begin{cases} \hat{\Phi}_3(\hat{x}, \hat{z}) = \frac{1}{4}(1+\hat{x})(1+\hat{z}) \\ \hat{\Phi}_4(\hat{x}, \hat{z}) = \frac{1}{4}(1-\hat{x})(1+\hat{z}) \end{cases}$$

On vérifie facilement les deux relations de la propriété suivante.

Propriété II.1.

$$\forall \hat{M} \in \hat{K}, \quad \sum_{j=1}^{4} \hat{\Phi}_j(\hat{M}) = 1,$$

$$\forall \hat{M} \in \hat{K}, \quad \sum_{j=1}^{4} \hat{\Phi}_j(\hat{M}) \vec{\hat{M}\hat{S}}_j = 0.$$

- Passage à un rectangle quelconque :

Soit F_K l'application affine bijective, qui projette le carré de référence $\hat{K}$ sur un rectangle K quelconque. La transformation F_K est telle que

$(x,z) = F_{D_k}(\hat{x},\hat{z})$, pour $(\hat{x},\hat{z}) \in \hat{K}$ et $(x,z) \in K$, peut se réécrire $\begin{cases} x = F_{K,x}(\hat{x}) \\ z = F_{K,z}(\hat{z}) \end{cases}$.

- Notations sur un rectangle de la grille :

Soit un rectangle de la grille, K^i, de côtés Δx et Δz^i. Notons S_j^i, $j = 1,2,..,4$ les 4 sommets du rectangle K^i, et N_j^i, $j = 1,2,..,4$ les numéros de nœuds globaux permettant de repérer leur position sur la grille.

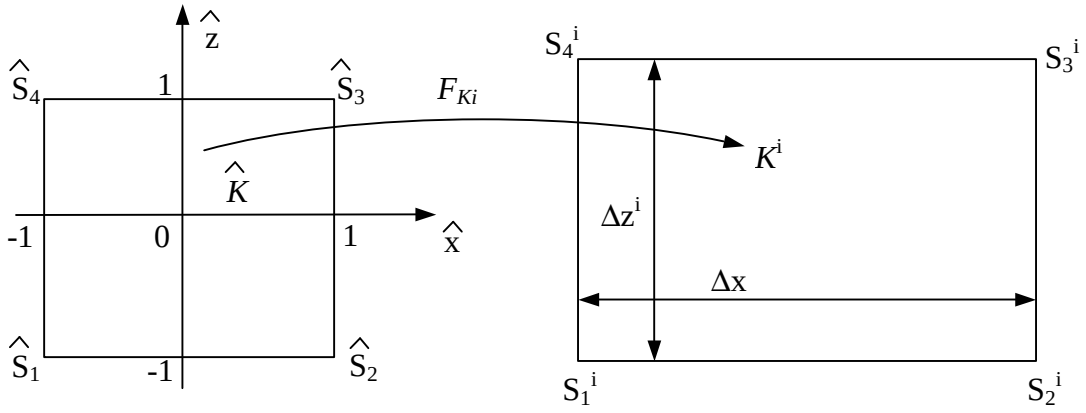


Figure II.9. Passage de l'élément de référence à un rectangle de la grille

On définit les fonctions de base Q_1 en tout point $M(x,z)$ du rectangle K^i par

$$\Phi_{N_j^i}(x,z) = \hat{\Phi}_j(F_{K^i}^{-1}(x,z)), \quad j = 1,2,..,4.$$

On déduit alors les résultat suivants de la Propriété II.1 :

Propriété II.2

$$\forall M \in K^i, \quad \sum_{j=1}^{4} \Phi_{N_j^i}(M) = 1, \qquad (\text{II.11})$$

$$\forall M \in K^i, \quad \sum_{j=1}^{4} \Phi_{N_j^i}(M)\, \vec{MS_j^i} = 0. \qquad (\text{II.12})$$

Définissons à présent quelques notations sur les zones entourant le maillage de surface : elles nous permettrons de modifier l'approximation du potentiel autour des surfaces des conducteurs.

- Considérons un rectangle de la grille coupé par la surface γ :

Soit K^i un rectangle de la grille, et soit γ_k un élément de surface coupant ce rectangle. Nous notons n_k le vecteur normal à la surface γ_k, dirigé vers l'intérieur du conducteur. La

droite qui porte ce segment partage le rectangle en 2 zones $Z_k^{i,1}$ et $Z_k^{i,2}$, $Z_k^{i,2}$ étant la zone vers laquelle pointe le vecteur n_k. On définit de plus $J_k^{i,1}$ et $J_k^{i,2}$ comme les ensembles des indices locaux des sommets appartenant respectivement aux zones $Z_k^{i,1}$ et $Z_k^{i,2}$. On définit enfin K_k^i comme l'ensemble des points du rectangle K^i dont la projection orthogonale sur la droite portant γ_k appartient à γ_k (voir Figure II.10). Lorsqu'il y a plusieurs directions de projection comme ici, un point de K^i peut appartenir à plusieurs de ces zones.

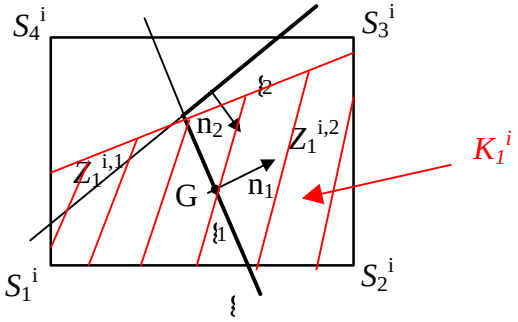


Figure II.10. Rectangle de la grille coupé par une surface quelconque

Sur la Figure II.10 par exemple,

$$\begin{cases} k=1: & J_1^{i,1}=\{1,4\}, \quad J_1^{i,2}=\{2,3\} \\ k=2: & J_2^{i,1}=\{4\}, \quad J_2^{i,2}=\{1,2,3\} \end{cases}$$

Posons $D_k = \bigcup_{i \,|\, K^i \cap \gamma_k \neq \varnothing} K_k^i$, D_k est une région entourant le segment de surface γ_k. Dans le cas d'un segment γ_k orthogonal à la grille, D_k est un rectangle.

Nous rappelons enfin que la grille de volume est construite de façon à ce que la permittivité électrique soit constante dans chaque couche horizontale de parallélépipèdes, et donc notamment dans chaque rectangle. On la note ε_i sur le rectangle K^i.

3.3.2 Calcul approché du potentiel autour de la surface des conducteurs

Nous calculons dans ce paragraphe le potentiel de façon approchée sur un rectangle K^i coupé par un segment de surface quelconque γ_k, en tenant compte de la discontinuité du gradient du potentiel introduite par λ sur $\gamma_k \cap K^i$. Nous exprimons le potentiel approché, comme somme d'un terme défini sur les fonctions de base Q_1, et d'un terme multiplié par λ. En particulier, si un élément de surface est orthogonal aux mailles de la grille, le facteur de λ associé est une fonction « chapeau », constante dans la direction parallèle à l'élément de surface.

3.3.2.1 Cas de surfaces des conducteurs quelconques

Dans ce paragraphe, nous définissons une approximation du potentiel dans le cas de surfaces de conducteurs quelconques, même si ce cas général est peu traité dans la suite de la thèse : en effet l'étude théorique se place dans le cas plus simple et plus favorable de surfaces des conducteurs orthogonales à la grille.

Soit K^i un rectangle traversé par un segment de surface γ_k, de vecteur normal n_k dirigé vers l'intérieur du conducteur. On note u^1 le potentiel dans le diélectrique, et u^2 le potentiel, constant, à l'intérieur du conducteur.

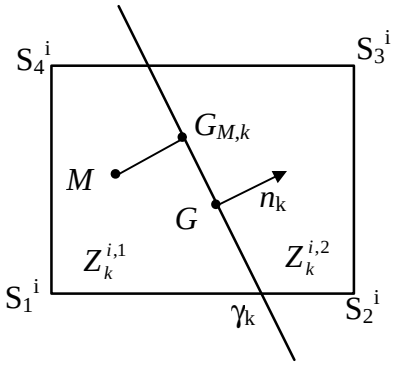


Figure II.11. Rectangle coupé par une surface de conducteur

Soit *M* un point quelconque de la zone $Z_k^{i,1}$ du rectangle, nous approchons le potentiel en *M* en fonction de sa valeur aux sommets du rectangle par un développement de Taylor de chaque côté de γ_k,

$$\begin{cases} \forall j \in J_k^{i,1}, \quad u_{N_j^i} = u(M) + \nabla u^1(M).\vec{MS}_j^i + E_j^i(M), \\ \forall j \in J_k^{i,2}, \ \forall G \in \gamma, \quad u_{N_j^i} = u(M) + \nabla u^1(M).\vec{MG} + \underbrace{\nabla u^2(G)}_{=0}.\vec{GS}_j^i + E_j^i(M). \end{cases}$$

Dans la suite, nous négligeons les termes E_j^i. Pour introduire la charge λ dans l'expression du potentiel, nous faisons une combinaison linéaire des expressions précédentes. On obtient ainsi une expression approchée du potentiel en $M \in K^i$:

$$\begin{aligned} u(M) &= \sum_{j=1}^{4} \Phi_{N_j^i}(M)\, u(M) \\ &\approx \sum_{j=1}^{4} \Phi_{N_j^i}(M)\, u_{N_j^i} - \nabla u^1(M).\left(\sum_{j \in J_k^{i,1}} \Phi_{N_j^i}(M)\, \vec{MS}_j^i + \sum_{j \in J_k^{i,2}} \Phi_{N_j^i}(M)\, \vec{MG} \right), \quad \forall G \in \gamma. \end{aligned} \qquad (\text{II.13})$$

Utilisons (II.12) pour réécrire (II.13) :

$$u(M) \approx \sum_{j=1}^{4} \Phi_{N_j^i}(M)\, u_{N_j^i} - \nabla u^1(M).\left(\sum_{j \in J_k^{i,2}} \Phi_{N_j^i}(M)\, \vec{S_j^i G} \right), \quad \forall G \in \gamma. \qquad (\text{II.14})$$

La surface d'un conducteur étant à un potentiel constant, le gradient du potentiel en un point G de la surface γ des conducteurs est orthogonal à cette surface. On l'approche de plus de chaque côté de γ par une constante sur K^i orthogonalement à γ : soit M un point de $Z_k^{i,1}$, et soit $G_{M,k}$ sa projection sur γ_k orthogonalement à γ_k, nous supposons $\nabla u(M) \approx \nabla u^1(G_{M,k})$. De plus, la charge est reliée au gradient du potentiel à la surface du conducteur par

$$\forall G \in \gamma_k \cap K^i, \quad \lambda(G) = \varepsilon_i \nabla u^1(G).n_k .$$

Le vecteur $\varepsilon_i \nabla u^1(G)$ est orthogonal à la surface γ, donc

$$\forall G \in \gamma_k, \quad \nabla u^1(G) = \frac{1}{\varepsilon_i}\lambda(G)\, n_k .$$

L'expression (II.14) se réécrit donc

$$u(M) \approx \sum_{j=1}^{4} \Phi_{N_j^i}(M)\, u_{N_j^i} + \lambda(G_{M,k})\frac{1}{\varepsilon_i}\left(\sum_{j \in J_k^{i,2}} G_M \vec{S}_j^i .n_k \ \Phi_{N_j^i}(M) \right).$$

Remarquons de plus que pour M un point fixé du rectangle, le produit scalaire $\overrightarrow{GM}.n_k$ est constant quand G varie sur le segment de la surface γ_k, et posons

$$c_{j,k}^i = \left| GS_j^i .n_k \right|, \text{ pour } G \in \gamma_k \cap K^i \text{ quelconque.}$$

On peut approcher le potentiel en $M \in Z_k^{i,1} \cap K_k^i$ par

$$u(M) \approx \sum_{j=1}^{4} \Phi_{N_j^i}(M)\, u_{N_j^i} + \frac{1}{\varepsilon_i}\left(\sum_{j \in J_k^{i,2}} c_{j,k}^i \ \Phi_{N_j^i}(M) \right)\lambda(G_{M,k}) .$$

De la même façon, on obtient pour $M \in Z_k^{i,2} \cap K_k^i$,

$$u(M) \approx \sum_{j=1}^{4} \Phi_{N_j^i}(M)\, u_{N_j^i} + \frac{1}{\varepsilon_i}\left(\sum_{j \in J_k^{i,1}} c_j^i \Phi_{N_j^i}(M) \right)\lambda(G_{M,k}) .$$

Nous définissons de façon générale la fonction $\Psi_{K^i}^k$, définie sur la région K_k^i, par

$$\Psi_{K^i}^k(M) = \begin{cases} \sum_{j \in J_k^{i,2}} c_{j,k}^i \Phi_{N_j^i}(M), & \forall M \in Z_k^{i,1} \cap K_k^i \\ \sum_{j \in J_k^{i,1}} c_{j,k}^i \Phi_{N_j^i}(M), & \forall M \in Z_k^{i,2} \cap K_k^i \end{cases} \qquad \text{(II.14)}$$

Nous approchons le potentiel sur K_k^i par

$$u(M) \approx \sum_{j=1}^{4} \Phi_{N_j^i}(M)\, u_{N_j^i} + \frac{1}{\varepsilon_i}\Psi_{K^i}^k(M)\ \lambda(G_{M,k}) , \qquad \text{(II.15)}$$

où $G_{M,k}$ est la projection de M sur γ_k, orthogonalement à γ_k.

On peut vérifier que la fonction $\Psi_{K^i}^k$ est continue à travers γ_k, et que

$$\Psi_{K^i}^k(G) = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{4} c_{j,k}^i \ \Phi_{N_j^i}(G) , \quad \forall G \in \gamma_k \cap K^i .$$

<u>Généralisons maintenant cette expression au cas d'un rectangle contenant plusieurs segments de conducteur</u> :

On considère maintenant une surface de conducteur coupant le rectangle K^i composée de plusieurs segments γ_k, chacun de vecteur normal n_k. Nous approchons le gradient du

potentiel par une somme de composantes ∇u_k, chacune orthogonale à γ_k et définie sur K_k^i. Nous approchons alors le potentiel sur l'union des K_k^i , par une somme de termes associés aux composantes du gradient,

$$u(M) \approx \sum_{j=1}^{4} \Phi_{N_j^i}(M)\, u_{N_j^i} + \frac{1}{\varepsilon_i} \sum_{k \,|\, K^i \cap \gamma_k \neq \varnothing} \Psi_{K^i}^k(M)\ \lambda(G_{M,k}), \qquad \text{(II.16)}$$

où $G_{M,k}$ est la projection de M sur γ_k, orthogonalement à γ_k, et où la fonction $\Psi_{K^i}^k$ est définie par (II.14).

3.3.2.2 Cas d'un segment de surface orthogonal à la grille

Dans le cas particulier d'un rectangle comprenant un segment de surface γ_k, orthogonal aux côtés du rectangle, l'expression du potentiel approché obtenue en explicitant (II.16) est très proche de celle obtenue en dimension un.

Soit K^i un rectangle de la grille, coupé par exemple verticalement par la surface γ_k. Notons $t\frac{\Delta x}{2}$, la distance de ce segment au côté vertical gauche du rectangle (Figure II.12).

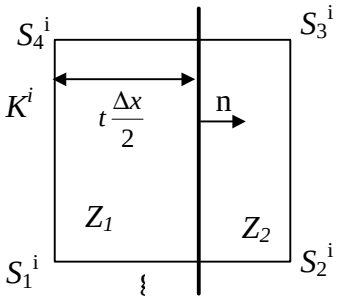


Figure II.12. Cas d'une surface de conducteur orthogonale au rectangle.

Soit *n* le vecteur normal à la surface du conducteur, dirigé de Z_1 vers Z_2. Pour le cas d'un segment vertical, on a

$$\vec{GS_1^i}.n = \vec{GS_4^i}.n = -t\frac{\Delta x}{2},$$

$$\vec{GS_2^i}.n = \vec{GS_3^i}.n = (2-t)\frac{\Delta x}{2}.$$

D'autre part, pour tout point $M \in K$,

$$\Phi_{N_1^i}(M) + \Phi_{N_4^i}(M) = \frac{2 - F_{K^i,x}^{-1}(x)}{2},$$

$$\Phi_{N_2^i}(M) + \Phi_{N_3^i}(M) = \frac{F_{K^i,x}^{-1}(x)}{2}.$$

Définissons la fonction f_t sur $[-1,1]$ par

$$f_t(s) = \frac{1}{2}(2-t)(1+s) \quad \text{quand } s \in [-1,-1+t],$$
$$= \frac{1}{2}t\,(1-s) \quad \text{quand } s \in [-1+t,1].$$

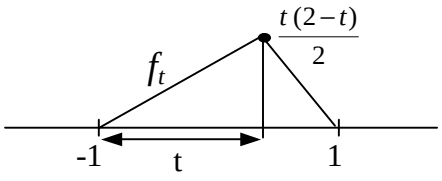


Figure II.13. Fonction f_t

La fonction $\Psi^k_{K^i}$, définie dans le cas général par (II.14), se réécrit ici sous la forme

$$\Psi^k_{K^i}(x,z) = \frac{\Delta x}{2}\, f_t(F^{-1}_{K^i,x}(x)), \quad \forall (x,z) \in K^i .$$

Et (II.16) devient

$$u(M) \approx \sum_{j=1}^{4} \Phi_{N^i_j}(M)\, u_{N^i_j} + \frac{1}{\varepsilon_i}\frac{\Delta x}{2}\, f_t(F^{-1}_{K^i,x}(x))\, \lambda(G_M), \quad \forall M = (x,z) \in K^i,$$

où G_M désigne la projection orthogonale de M sur γ_k.

En particulier, pour tout point $G \in \gamma_k \cap K^i$, on a

$$u(G) \approx \sum_{j=1}^{4} \Phi_{N^i_j}(G)\, u_{N^i_j} + \frac{1}{\varepsilon_i}\frac{t(2-t)}{2}\frac{\Delta x}{2}\, \lambda(G),$$

qui est à rapprocher de ce qu'on avait obtenu en 1D, c'est-à-dire

$$u(\gamma_j) = \sum \Phi_i(\gamma_j)\, u_i + t_j(1-t_j)\lambda_j .$$

3.3.3 Un nouvel espace de discrétisation, $\overline{X}_{h,\eta}$, pour le potentiel

Ce paragraphe est consacré à la définition des fonctions de base supplémentaires de l'espace de discrétisation du potentiel. Comme dans l'approximation (A-GPP), nous discrétisons la charge par une fonction λ_η constante par morceaux sur γ, égale à λ_k sur le segment γ_k, $k = 1,2,...,N_S$. Pour traduire le terme facteur de λ calculé au paragraphe 3.3.2, nous ajoutons alors N_S nouvelles fonctions de base à l'espace de discrétisation du potentiel, définies chacune autour d'un segment de surface.

Soit Ψ_k la fonction définie sur la région $D_k = \bigcup_{i \,|\, K^i \cap \gamma_k \neq \varnothing} K^i_k$ entourant γ_k, par

$$\Psi_k(M) = \begin{cases} \sum_{i \,|\, K^i \cap \gamma_k \neq \varnothing} \Psi^k_{K^i}(M)\, \chi_{K^i_k}(M) & si\ M \in D_k, \\ 0 \quad si\ M \notin D_k, \end{cases} \qquad \text{(II.17)}$$

où l'on note $\chi_{K^i_k}(M)$ la fonction caractéristique sur K^i_k, définie par

$$\chi_{K_k^i}(M) = \begin{cases} 1 \text{ si } M \in K_k^i, \\ 0 \text{ si } M \notin K_k^i. \end{cases}$$

La permittivité diélectrique est constante sur D_k, notée ε_k : en effet, elle est constante dans la direction parallèle à γ_k car un segment de surface ne traverse pas d'interface entre deux couches diélectriques; et elle est constante dans la direction orthogonale à γ_k, car la permittivité est constante à l'intérieur d'un rectangle de la grille. Approchons la charge λ par une constante λ_k sur le segment γ_k, l'expression du potentiel (II.16) se réécrit sur D_k sous la forme

$$u(M) \approx \sum_{j=1}^{N_V} \Phi_j(M)\, u_j + \sum_{k=1}^{N_S} \frac{1}{\varepsilon_k} \Psi_k(M)\, \lambda_k, \quad \forall M \in \Omega. \qquad \text{(II.18)}$$

On s'inspire de cette expression pour agrandir l'espace de discrétisation X_h, en lui ajoutant un degré de liberté sur chaque zone D_k entourant le segment de surface γ_k : on pose

$$\overline{X}_{h,\eta} = X_h + L\left(\Psi_1, \Psi_2, ..., \Psi_{N_S}\right).$$

Expression simplifiée des Ψ_k dans le cas de segments orthogonaux à la grille :

Dans le cas où γ_k est un segment orthogonal à la grille, la zone D_k est un rectangle. On considère la distance de γ_k au bord de D_k parallèle à γ_k et de plus faible abscisse (ou ordonnée suivant l'orientation de γ_k). Notons t_k cette distance ramenée à l'élément de référence $\hat{K}$ (Figure II.12). Suivant l'orientation de γ_k, Ψ_k s'écrit alors

$$\begin{cases} si\ (x,z) \notin D_k, & \Psi_k(x,z) = 0, \\ si\ (x,z) \in D_k, & \begin{cases} si\ \gamma_k\ //(Oz), & \Psi_k(x,z) = \dfrac{\Delta x}{2}\ f_{t_k}\left((F_{D_k,x})^{-1}(x)\right), \\ si\ \gamma_k\ //(Ox), & \Psi_k(x,z) = \dfrac{\Delta z_k}{2}\ f_{t_k}\left((F_{D_k,y})^{-1}(z)\right), \end{cases} \end{cases}$$

où, si $\gamma_k\ //(Ox)$, Δz_k désigne la hauteur des rectangles de la couche dans laquelle se situe γ_k.

En résumé, lorsque les surfaces des conducteurs sont orthogonales à la grille, les fonctions Ψ_k ont la forme de "chapeaux" : elle sont constantes parallèlement à γ_k, et nulles sur les bords de D_k parallèles à γ_k :

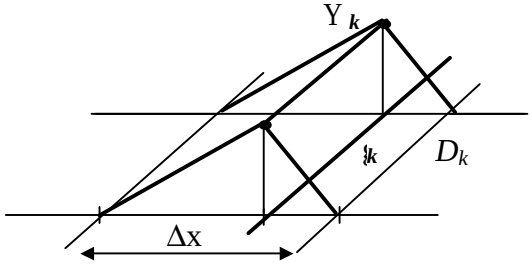


Figure II.14 Forme des fonctions Ψ_k pour γ_k orthogonal aux mailles de la grille

3.3.4 Propriétés sur les fonctions supplémentaires Ψ_k

Nous montrons dans ce paragraphe des propriétés particulières des fonctions définies au paragraphe 3.3.3.

Dans le cas de surfaces des conducteurs quelconques, nous avons la propriété suivante :

Propriété II.3. *Pour tout* $k = 1, 2, ..., N_S$, *le saut du gradient de la fonction* Ψ_k, *définie par* (II.17), *à travers la surface* γ_k, *est égal au vecteur normal à la surface* γ_k :

$$\forall G \in \gamma_k, \quad \nabla\Psi_k(G^-) - \nabla\Psi_k(G^+) = n. \qquad \text{(II.19)}$$

Preuve : Pour tout rectangle K^i de la grille coupé par le segment γ_k, le gradient de Ψ_k, défini sur K_k^i, s'écrit

$$\nabla\Psi_k(M) = \begin{cases} \sum_{j \in J_k^{i,2}} c_{j,k}^i \, \nabla\Phi_{N_j^i}(M), & \forall M \in Z_k^{i,1} \cap K_k^i, \\ \sum_{j \in J_k^{i,1}} c_{j,k}^i \, \nabla\Phi_{N_j^i}(M), & \forall M \in Z_k^{i,2} \cap K_k^i. \end{cases}$$

où $c_{j,k}^i$ est défini à l'aide d'un point $G \in \gamma_k \cap K^i$ quelconque, par

$$c_{j,k}^i = \left| \vec{GS}_j^i . n_k \right| = \begin{cases} -\vec{GS}_j^i . n_k & si \quad j \in J_k^{i,1}, \\ \vec{GS}_j^i . n_k & si \quad j \in J_k^{i,2}. \end{cases}$$

Ainsi, pour tout $G \in \gamma_k \cap K^i$,

$$\nabla\Psi_k(G^-) - \nabla\Psi_k(G^+) = \sum_{j=1}^{4} \nabla\Phi_{N_j^i}(G) \; \vec{GS}_j^i . n_k . \qquad \text{(II.20)}$$

Or, pour tout point $G \in \gamma_k \cap K^i$, et pour $j = 1,2,...,4$, on a l'égalité

$$\begin{aligned} \nabla(\Phi_{N_j^i}(G) \; \vec{GS}_j^i . n_k) &= \Phi_{N_j^i}(G) \; \nabla(\vec{GS}_j^i . n_k) + \nabla\Phi_{N_j^i}(G) \; \vec{GS}_j^i . n_k \\ &= -\Phi_{N_j^i}(G) n_k + \nabla\Phi_{N_j^i}(G) \; \vec{GS}_j^i . n_k , \end{aligned}$$

qui, utilisée dans (II.20), donne

$$\nabla\Psi_k(G^-) - \nabla\Psi_k(G^+) = \nabla\left(\sum_{j=1}^{4} \Phi_{N_j^i}(G) \; \vec{GS}_j^i . n_k \right) + \sum_{j=1}^{4} \Phi_{N_j^i}(G) \; n_k .$$

Et finalement, en utilisant les deux relations de la Propriété II.2,

$$\forall i \left| K^i \cap \gamma_k \neq \varnothing, \quad \forall G \in \gamma_k \cap K^i, \quad \nabla\Psi_k(G^-) - \nabla\Psi_k(G^+) = n_k , \right.$$

dont on déduit immédiatement (II.19). **?**

Supposons à présent que le segment de surface γ_k est orthogonal aux mailles de la grille. Nous montrons de plus les relations suivantes, grâce à la forme de « chapeau » de la fonction Ψ_k associée :

Propriété II.4 : *Soit γ_k un segment de surface orthogonal aux mailles de la grille. Alors la fonction Ψ_k associée vérifie*

i. $\int_{D_k} |\nabla \Psi_k|^2 d\Omega = \int_{\gamma_k} \Psi_k \, d\gamma,$

ii. $\int_{D_k} \nabla \Psi_k . \nabla \Phi_j \, d\Omega = 0, \quad \forall j = 1, 2, ..., N_V .$

Supposons de plus que le segment $\gamma_{k'}$ est soit orthogonal à γ_k, soit porté par la même droite, soit ne coupe pas le même rectangle de la grille que γ_k. Alors on a également

iii. $\int_{D_k \cap D_{k'}} \nabla \Psi_k . \nabla \Psi_{k'} \, d\Omega = 0, \quad \forall k' = 1, 2, ..., N_S .$

Preuve :

Pour montrer les propriétés i et ii, nous supposons par exemple que le segment γ_k est vertical.

i.

$$\int_{D_k} |\nabla \Psi_k|^2 d\Omega = \frac{\Delta x^2}{4} \int_{D_k} \left| \nabla \left[f_{t_k}(F^{-1}_{D_k,x}(x)) \right] \right|^2 dxdz .$$

En effectuant le changement de variables $\hat{x} = F^{-1}_{D_k,x}(x)$, on obtient

$$\begin{aligned} \int_{D_k} |\nabla \Psi_k|^2 d\Omega &= \frac{\Delta x^2}{4} \int_{z \in \gamma_k} \int_{\hat{x}=-1}^{1} \frac{4}{\Delta x^2} \left[f'_{t_k}(\hat{x}) \right]^2 \frac{\Delta x}{2} \, d\hat{x} \, dz \\ &= \frac{\Delta x}{2} \int_{\gamma_k} \left(\int_{-1}^{-1+t_k} \frac{1}{4} (2 - t_k)^2 \, d\hat{x} + \int_{-1+t_k}^{1} \frac{1}{4} t_k{}^2 d\hat{x} \right) dz \\ &= \int_{\gamma_k} \Psi_k \, d\gamma. \end{aligned}$$

ii.

Dans le cas d'un segment γ_k vertical, la fonction Ψ_k ne dépend que de *x*, donc

$$\forall j = 1, 2, ..., N_V, \quad \int_{D_k} \nabla \Psi_k . \nabla \Phi_j \, d\Omega = \int_{D_k} \frac{\partial \Psi_k}{\partial x}(x) \frac{\partial \Phi_j}{\partial x}(z) \, dxdz .$$

Ou encore, en séparant les intégrales en *x* et en *y*, et en effectuant le changement de variable $\hat{x} = F^{-1}_{D_k,x}(x)$,

$$\int_{D_k} \nabla \Psi_k . \nabla \Phi_j \, d\Omega = \int_y \frac{\partial \Phi_j}{\partial x}(z) \, dz . \frac{\Delta x}{2} \underbrace{\left(\int_{-1}^{-1+t_k} \frac{1}{2} (2 - t_k) d\hat{x} - \int_{-1+t_k}^{1} \frac{1}{2} t_k \, d\hat{x} \right)}_{0} = 0$$

iii.

- Si γ_k et $\gamma_{k'}$ sont portés par la même droite ou ne coupent pas un même rectangle de la grille, la propriété est vraie car $D_k \cap D_{k'} = \varnothing$,

- sinon, si γ_k et $\gamma_{k'}$ forment un angle droit, alors les vecteurs

$$\nabla\Psi_k\begin{pmatrix} x_k \\ 0 \end{pmatrix} \text{ et } \nabla\Psi_{k'}\begin{pmatrix} 0 \\ z_{k'} \end{pmatrix},$$

sont orthogonaux, et donc la propriété est également vraie.

?

En pratique, ces propriétés montrent que le nouveau système à résoudre sera très creux, et qu'il aura une structure particulière

Reprenons les hypothèses utilisées dans la Propriété II.4 :

Hypothèse H1. Les surfaces des conducteurs sont orthogonales aux mailles de la grille.

Hypothèse H2. Deux segments de surface parallèles sont soit portés par la même droite, soit ne coupent pas le même rectangle de la grille

L'hypothèse H2 signifie en particulier que la configuration de la Figure II.15 n'est pas possible.

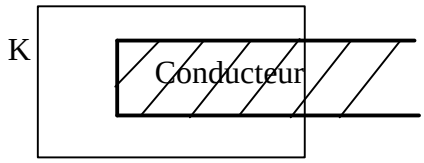


Figure II.15 Configuration impossible

La grille de volume ne doit donc pas être trop grossière par rapport au niveau de détail des conducteurs.

3.3.5 Trace des fonctions de $\overline{X}_{h,\eta}$ sur la surface des conducteurs

Une fonction $\overline{v}_{h,\eta} \in \overline{X}_{h,\eta}$ s'écrit sur Ω sous la forme

$$\overline{v}_{h,\eta}(M) = \sum_{j=1}^{N_V} \Phi_j(M)\, v_j + \sum_{k=1}^{N_S} \Psi_k(M)\, \beta_k, \quad \forall M \in \Omega\,. \qquad (\text{II.21})$$

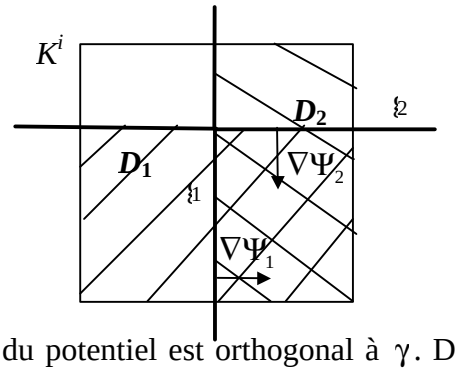
- Il n'y a pas d'ambiguïté pour définir la trace de la fonction $\overline{v}_{h,\eta}$ sur γ lorsque la mesure entre deux segments de surface consécutifs appartient à $[0,\frac{\pi}{2}[\cup]\frac{\pi}{2},\pi]$:

  - Soit une surface des conducteurs, avec des angles entre deux segments consécutifs de mesure $\alpha \in]\frac{\pi}{2},\pi]$. Alors sur chaque segment γ_k, les fonctions $\Psi_{k'}$, $k' \neq k$ sont nulles, et donc (II.21) se réécrit

$$\forall G \in \gamma_k, \quad \overline{v}_{h,\eta}(G) = \sum_{j=1}^{N_V} \Phi_j(G)\, v_j + \Psi_k(G)\, \beta_k\,.$$

  - Soient deux segments consécutifs γ_1 et γ_2, qui font un angle de mesure strictement inférieure à $\pi/2$. Alors Ψ_1 est non nulle sur γ_2 et Ψ_2 est non nulle sur γ_1.

- Considérons à présent deux segments consécutifs γ_1 et γ_2, qui font un angle de mesure égale à $\pi/2$. Le segment γ_2 coïncide avec une partie de la frontière de la région D_1, sur laquelle la fonction Ψ_1 est non nulle. Donc Ψ_1 est discontinue à travers γ_2. De même, Ψ_2 est discontinue à travers γ_1. Il faut donc définir la trace de $\bar{v}_{h,\eta}$ sur γ_1 et γ_2.



En tout point de γ, le gradient du potentiel est orthogonal à γ. D'après la Propriété II.3, le vecteur $\nabla\Psi_k(G)$, $G \in \gamma_k$, est orthogonal à γ_k pour $k = 1,2$. Nous choisissons ainsi Ψ_1 nulle sur γ_2, et Ψ_2 nulle sur γ_1, de façon à ce que le gradient de la fonction $\bar{v}_{h,\eta}$ sur γ_1 et γ_2 soit orthogonal respectivement à γ_1 et γ_2, c'est-à-dire vérifie la même propriété que le potentiel réel, que l'on veut approcher.

Ainsi, (II.21) se réécrit sur γ_k, $k = 1,2$,

$$\forall G \in \gamma_k, \quad \bar{v}_{h,\eta}(G) = \sum_{j=1}^{N_V} \Phi_j(G)\, v_j + \Psi_k(G)\, \beta_k \ .$$

3.4. EXTENSION A LA DIMENSION 3

L'extension à la dimension 3, en utilisant la même démarche, est immédiate.

Cas général :

On définit $\Psi_{K^i}^k$ sur $K_k^i \subset K^i$ par

$$\Psi_{K^i}^k(M) = \begin{cases} \sum_{j \in J_k^{i,2}} c_{j,k}^i \Phi_{N_j^i}(M), & \forall M \in Z_k^{i,1} \cap K_k^i, \\ \sum_{j \in J_k^{i,1}} c_{j,k}^i \Phi_{N_j^i}(M), & \forall M \in Z_k^{i,2} \cap K_k^i. \end{cases}$$

Et on pose, sur la zone D_k entourant γ_k,

$$\Psi_k(M) = \begin{cases} \sum_{i \,|\, K^i \cap \gamma_k \neq \varnothing} \Psi_{K^i}^k(M)\, \chi_{K_k^i}(M) & si\ M \in D_k, \\ 0 \quad si\ M \notin D_k. \end{cases}$$

Expression simplifiée dans le cas d'un segment orthogonal:

Suivant la direction de γ_k, nous avons

$$\Psi_k(x,y,z) = \frac{\Delta x[y][z^k]}{2}\ f_{t_k}(F^{-1}_{D_k, x[y][z]}(x[y][z])), \quad \forall (x,y,z) \in D_k \ .$$

Les Propriété II.3 et Propriété II.4 sont vérifiées également en dimension 3. Nous définissons la trace sur γ des fonctions de $\overline{X}_{h,\eta}$ de la même façon qu'en dimension 2.

3.5. NOUVEAU PROBLEME DISCRET

Nous enrichissons à présent l'espace d'approximation du potentiel par les fonctions supplémentaires Ψ_k définies dans le paragraphe 3.3.3. A l'aide en particulier de la définition introduite au paragraphe 3.3.4, de la trace des fonctions de cet espace sur la surface γ, nous définissons un nouveau problème discret, adapté au nouvel espace de discrétisation $\overline{X}_{h,\eta}$ du potentiel. Dans le cas général, on obtient un système dont la résolution est coûteuse. Mais dans le cas où les surfaces des conducteurs sont orthogonales à la grille de volume, cas proche de l'exemple 1D présenté au paragraphe 3.2, le système discret se réécrit sous une forme permettant une résolution aussi rapide que le système (A-GPP). En pratique, nous étendrons cette résolution au cas de surfaces quelconques.

Nous adaptons l'écriture du problème discret de façon à tenir compte de la discontinuité des fonctions de $\overline{X}_{h,\eta}$ sur les interfaces entre deux régions voisines D_k et $D_{k'}$, et, lorsque ces régions se chevauchent, sur les surfaces en lesquelles ces régions se coupent.

Nous notons $\Theta_{h,\eta} = \Omega - \bigcup_{k=1}^{N_S} D_k$ la région de Ω sur laquelle les fonctions de $\overline{X}_{h,\eta}$ sont définies par une approximation Q_1 sur la grille de volume. Cette région est constituée de tous les rectangles de la grille non coupés par des segments de surface, plus de petites portions rectangulaires incluses dans les rectangles de la grille contenant des coins des conducteurs (voir Figure II.17 par exemple).

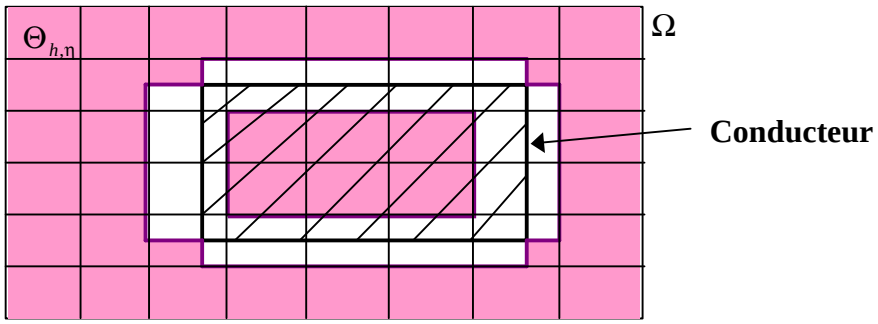


Figure II.16. Définition de la région $\Theta_{h,\eta}$ sur laquelle la discrétisation du potentiel n'est pas modifiée

Nous définissons $a_{h,\eta}$ sur $\overline{X}_{h,\eta} \times \overline{X}_{h,\eta}$, en décomposant l'intégrale sur les régions de Ω sur lesquelles le gradient des fonctions de $\overline{X}_{h,\eta}$ est défini. C'est-à-dire

$$a_{h,\eta}(\overline{u}_{h,\eta}, \overline{v}_{h,\eta}) = \int_{\Theta_{h,\eta}} \varepsilon \nabla \overline{u}_{h,\eta} . \nabla \overline{v}_{h,\eta} \, d\Omega + \sum_{k=1}^{N_S} \int_{D_k - \left(D_k \cap \bigcup_{1 \le k' \ne k \le N_S} D_{k'} \right)} \varepsilon_k \nabla \overline{u}_{h,\eta} . \nabla \overline{v}_{h,\eta} \, d\Omega$$
$$+ \sum_{1 \le k_1 \le k_2 \le N_S} \int_{D_{k_1} \cap D_{k_2}} \varepsilon_k \nabla \overline{u}_{h,\eta} . \nabla \overline{v}_{h,\eta} \, d\Omega ,$$

En décomposant

$$\begin{cases} \bar{u}_{h,\eta} = r_h + \sum_{k=1}^{N_S} \alpha_k \Psi_k, \quad r_h \in X_h, \\ \bar{v}_{h,\eta} = v_h + \sum_{k=1}^{N_S} \beta_k \Psi_k, \quad v_h \in X_h, \end{cases}$$

la forme bilinéaire $a_{h,\eta}$ se réécrit

$$a_{h,\eta}(\bar{u}_{h,\eta}, \bar{v}_{h,\eta}) = a(r_h, v_h) + \sum_{k=1}^{N_S} \int_{D_k} \varepsilon_k \nabla\Psi_k . (\alpha_k \nabla v_h + \beta_k \nabla r_h)\, d\Omega + \sum_{1 \le k_1, k_2 \le N_S} \int_{D_{k_1} \cap D_{k_2}} \varepsilon_k \alpha_{k_1} \beta_{k_2} \nabla\Psi_{k_1} . \nabla\Psi_{k_2}\, d\Omega . \qquad (\text{II.22})$$

Nous définissons de plus b_η sur $\bar{X}_{h,\eta} \times M_\eta$ par

$$b_\eta(\bar{v}_{h,\eta}, \mu_\eta) = b(v_h, \mu_\eta) - \sum_{k=1}^{N_S} \beta_k \int_{\gamma_k} \Psi_k \mu_\eta\, d\gamma . \qquad (\text{II.23})$$

Cette approximation de la forme bilinéaire *b* utilise la définition de la trace d'une fonction de $\bar{X}_{h,\eta}$ sur la surface γ introduite au paragraphe 3.3.5.

On approche alors le problème (*DF*) par

$$\overline{(DF)_{h,\eta}} \quad \begin{cases} \text{Trouver } (\bar{u}_{h,\eta}, \bar{\lambda}_\eta) \in \bar{X}_{h,\eta} \times M_\eta \text{ tels que} \\ a_{h,\eta}(\bar{u}_{h,\eta}, \bar{v}_{h,\eta}) + b_\eta(\bar{v}_{h,\eta}, \bar{\lambda}_\eta) = 0, \quad \forall \bar{v}_{h,\eta} \in \bar{X}_{h,\eta} \\ b_\eta(\bar{u}_{h,\eta}, \mu_\eta) = -\langle g, \mu_\eta \rangle_\gamma, \quad \forall \mu_\eta \in M_\eta \end{cases} \qquad (\text{II.24})$$

Décomposons

$$r_h = \sum_{1 \le i \le N_V} r_i \Phi_i , \quad v_h = \sum_{1 \le i \le N_V} v_i \Phi_i .$$

Dans le cas général, le problème discret (II.24) se réécrit alors sous la forme (II.25) suivante,

$$\begin{cases} \text{Trouver } ((r_i)_i, (\alpha_k)_k, (\bar{\lambda}_m)_m) \in \Re^{N_V} \times \Re^{N_S} \times \Re^{N_S} \text{ tels que} \\ \sum_{1 \le j \le N_V} r_j \int_\Omega \varepsilon \nabla\Phi_i . \nabla\Phi_j\, d\Omega + \sum_{1 \le k \le N_V} \alpha_k \int_{D_k} \varepsilon \nabla\Phi_i . \nabla\Psi_k\, d\Omega = \sum_{1 \le m \le N_S} \bar{\lambda}_m \int_{\gamma_m} \Phi_i \varphi_m\, d\gamma, \quad \forall i = 1, 2, ..., N_V \\ \sum_{1 \le l \le N_S} \alpha_l \int_{D_k \cap D_l} \varepsilon \nabla\Psi_k . \nabla\Psi_l\, d\Omega + \sum_{1 \le j \le N_V} r_j \int_{D_k} \varepsilon \nabla\Psi_k . \nabla\Phi_j\, d\Omega = \bar{\lambda}_k \int_{\gamma_k} \Psi_k \varphi_k\, d\gamma, \quad \forall k = 1, 2, ..., N_S , \\ \sum_{1 \le j \le N_V} r_j \int_{\gamma_m} \Phi_j \varphi_m\, d\gamma + \alpha_m \int_{\gamma_m} \Psi_m \varphi_m\, d\gamma = \int_{\gamma_m} g \varphi_m\, d\gamma, \quad \forall m = 1, 2, ..., N_S . \end{cases}$$

Nous considérons les matrices A , B , et le vecteur G , introduits au paragraphe 2.2 pour l'approximation (A-GPP). Nous définissons de plus la matrice diagonale $\mathsf{C}' \in \mathsf{M}_{N_S \times N_S}$, de terme

$$c'_{k,k} = \int_{\gamma_k} \Psi_k \, \varphi_k \, d\gamma ,$$

et les matrices $\mathsf{D} \in \mathsf{M}_{N_V \times N_S}$ et $\mathsf{E} \in \mathsf{M}_{N_S \times N_S}$, de termes généraux

$$d_{i,k} = \int_\Omega \varepsilon \nabla \Phi_i . \nabla \Psi_k \, d\Omega ,$$

$$e_{k,l} = \int_\Omega \varepsilon \nabla \Psi_k . \nabla \Psi_l \, d\Omega .$$

En utilisant ces notations, le problème discret (II.24) se réécrit sous la forme matricielle

$$\begin{cases} \text{Trouver } R \in \Re^{N_V} , S \in \Re^{N_S} \text{ et } \overline{\Lambda} \in \Re^{N_S} \text{ tels que} \\ \mathsf{A}\ R + \mathsf{D}\ S + \mathsf{B}^T \overline{\Lambda} = 0 \\ \mathsf{D}^T R + \mathsf{E}\ S - \mathsf{C}' \overline{\Lambda} = 0 \\ \mathsf{B}\ R - \mathsf{C}'^T S = -G \end{cases} \qquad \text{(II.26)}$$

Sans propriétés supplémentaires sur les matrices C', D et E , la résolution du système (II.26) est très coûteuse. La Proposition II.3 montre que lorsque les hypothèses H1 et H2 sur les surfaces des conducteurs et le choix de la grille sont vérifiées, ce système peut être réécrit sous une forme telle qu'on peut le résoudre de façon efficace, de la même façon que pour l'approximation (A-GPP).

Proposition II.3 *Si les hypothèses H1 et H2 sont vérifiées, le problème discret* (II.24) *peut s'écrire sous la forme matricielle*

$$\begin{cases} \text{Trouver } R \in \Re^{N_V} \text{ et } \overline{\Lambda} \in \Re^{N_S} \text{ tels que} \\ \mathsf{A}\ R + \mathsf{B}^T \overline{\Lambda} = 0 \\ \mathsf{B}\ R - \mathsf{C}\ \overline{\Lambda} = -G \end{cases} \qquad \text{(II.27)}$$

où A , B , *et* G , *ont été définis pour l'approximation (A-GPP), et* C *est une matrice diagonale.*

Preuve :
Sous ces hypothèses, nous pouvons calculer explicitement les degrés de liberté supplémentaires sur le potentiel, α_k , en fonction de la charge surfacique $\overline{\lambda}_k$, puis les substituer dans le système.

Supposons en effet que les hypothèses H1 et H2 sont vérifiées. Alors les propriétés supplémentaires sur les fonctions Ψ_k , données par Propriété II.4 ii, iii permettent de simplifier l'expression (II.22) définissant $a_{h,\eta}$, et on a

$$a_{h,\eta}(\overline{u}_{h,\eta}, \overline{v}_{h,\eta}) = a(r_h, v_h) + \sum_{k=1}^{N_S} \alpha_k \beta_k \int_{D_k} \varepsilon_k \left| \nabla \Psi_k \right|^2 d\Omega . \qquad \text{(II.28)}$$

Autrement dit, la matrice D est nulle, et la matrice E diagonale. De plus, grâce à la Propriété II.4.i, on peut exprimer les inconnues α_k en fonction de la charge surfacique par

$$\alpha_k = \frac{\overline{\lambda}_k}{\varepsilon_k}.$$

C'est-à-dire que les termes des matrices diagonales E et C' sont égaux, au coefficient ε_k près. On substitue les α_k dans l'équation imposant la valeur du potentiel sur les surfaces des conducteurs, et on obtient ainsi le système

$$\begin{cases} \text{Trouver } ((r_i)_i, (\overline{\lambda}_m)_m) \in \Re^{N_V} \times \Re^{N_S} \text{ tels que} \\ \displaystyle\sum_{1\le j\le N_V} r_j \int_\Omega \varepsilon \nabla\Phi_i . \nabla\Phi_j \, d\Omega = \sum_{1\le m\le N_S} \overline{\lambda}_m \int_{\gamma_m} \Phi_i \, \varphi_m \, d\gamma, \quad \forall i = 1,2,...,N_V, \\ \displaystyle\sum_{1\le j\le N_V} r_j \int_{\gamma_m} \Phi_j \, \varphi_m \, d\gamma + \frac{\overline{\lambda}_m}{\varepsilon_m} \int_{\gamma_m} \Psi_m \, \varphi_m \, d\gamma = \int_{\gamma_m} g \, \varphi_m \, d\gamma, \quad \forall m = 1,2,...,N_S. \end{cases} \qquad (\text{II.29})$$

En utilisant A, B, et G, introduits au paragraphe 2.2, et en notant $\mathsf{C} \in \mathsf{M}_{N_S \times N_S}$ la matrice diagonale, de terme

$$c_{m,m} = \frac{1}{\varepsilon_m} \int_{\gamma_m} \Psi_m \, \varphi_m \, d\gamma = \frac{1}{\varepsilon_m} c'_{m,m},$$

le système linéaire (II.29) s'écrit sous la forme matricielle (II.27). **?**

Remarques:

a) Cas général : si les hypothèses H1 et H2 ne sont pas vérifiées, la Propriété II.4 sur les fonctions Ψ_k n'est pas vérifiée, et on ne peut donc pas réécrire le système (II.26) sous la forme (II.27). On a cependant en pratique résolu le système (II.27), en posant de même

$$c_{m,m} = \frac{1}{\varepsilon_m} \int_{\gamma_m} \Psi_m \, \varphi_m \, d\gamma,$$

où Ψ_m est défini sous la forme générale (II.17). Nous verrons dans section 4 que les résultats sont bons. Nous tentons une explication de ces bons résultats dans le paragraphe 3.6.

b) Résolution : comme dans le cas de l'approximation (A-GPP), on peut éliminer la variable R du système (II.27), et se ramener à la résolution du système

$$(\mathsf{B}\,\mathsf{A}^{-1}\mathsf{B}^T + \mathsf{C})\,\overline{\Lambda} = G \qquad (\text{II.30})$$

On déduit ensuite R par

$$R = -\mathsf{A}^{-1}\mathsf{B}^{\mathrm{T}}\,\overline{\Lambda}.$$

On résout le système (II.30) par un algorithme de gradient conjugué sur la charge. A chaque étape de l'algorithme, on utilise un solveur de Poisson rapide pour résoudre $\mathsf{A}^{-1}X_k$. Le coût d'une itération de cet algorithme est voisin de celui d'une itération de l'algorithme de résolution du système obtenu par l'approximation (A-GPP). En effet, à chaque itération on ne rajoute qu'un produit d'une matrice diagonale par un vecteur, ce qui demande peu de calculs.

3.6. UNE AUTRE ECRITURE DANS LE CAS DE CONDUCTEURS QUELCONQUES

Dans ce paragraphe, nous appliquons au problème continu l'idée de décomposer le potentiel u en une partie u_0 de dérivée continue à travers γ, et une partie Ψ contenant le saut de cette dérivée à travers γ, et nulle lorsque l'on s'éloigne de la surface des conducteurs. Nous obtenons ainsi une nouvelle formulation variationnelle faisant intervenir u_0, Ψ et la charge λ. Nous proposons alors une discrétisation non conforme de cette nouvelle formulation utilisant les fonctions Ψ_k définies précédemment, et menant dans le cas général à un système proche du système programmé. Le principe est donné pour un diélectrique homogène, il s'étend facilement à des couches diélectriques horizontales.

- Formulation continue :

Soit E un sous-ensemble de Ω incluant γ, $\gamma \subset E \subset \Omega$. Nous découpons E en E_1 et E_2, de part et d'autre de la frontière γ. Nous décomposons le potentiel par

$$u = u_0 + \Psi ,$$

où

$$\begin{cases} u_0 \in H^2(E) \cap H^1(\Omega), \quad \Delta u_0 = 0 \ \text{ dans } \ E, \\ \Psi \in H^2(E_1) \cap H^2(E_2) \cap H^1(\Omega), \quad \Delta\Psi = 0 \ \text{ dans } E_1 \text{ et } E_2, \quad \Psi = 0 \ \text{ dans } \Omega - E. \end{cases}$$

Réécrivons la formulation domaines fictifs en utilisant cette décomposition. Soit

$$v \in \left\{ v ; v \in H_0^1(E),\ \mathrm{v} = 0 \ \text{sur} \ \Omega - \mathrm{E} \right\}.$$

Nous réécrivons la première équation de la formulation domaines fictifs (*DF*),

$$\int_\Omega \nabla u . \nabla v \, d\Omega = \int_\gamma v \lambda \, d\gamma \ ,$$

pour ce choix de *v*. Et en utilisant la formule de Green et en notant $\Psi^{(i)} = \Psi$ dans E_i, $i = 1, 2$, nous obtenons

$$\int_E \underbrace{\Delta u_0}_{=0} v \, d\Omega + \sum_{i=1,2} \int_{E_i} \underbrace{\Delta\Psi}_{=0} v \, d\Omega + \int_\gamma \left(\nabla\Psi^{(1)} - \nabla\Psi^{(2)} \right) . n \, v \, d\gamma + \int_{\partial E} \underbrace{v}_{=0} \frac{\partial (u_0 + \Psi)}{\partial n} \, d\gamma = \int_\gamma v \lambda \, d\gamma,$$

c'est-à-dire

$$\int_\gamma v \left(\nabla\Psi^{(1)} - \nabla\Psi^{(2)} \right) . n \ d\gamma = \int_\gamma v \lambda \, d\gamma, \quad \forall v \in H^{\frac{1}{2}}(\gamma). \qquad (\text{II.31})$$

Nous réécrivons maintenant les équations de la formulation (*DF*) pour des fonctions tests $v \in X$ et $\mu \in M$ quelconques. En décomposant à nouveau le potentiel en deux termes, la première équation se réécrit

$$\int_\Omega \nabla u_0 . \nabla v \, d\Omega = \int_\gamma v \lambda \, d\gamma - \int_E \nabla\Psi . \nabla v \ d\Omega , \quad \forall v \in X \ . \qquad (\text{II.32})$$

La deuxième équation traduisant les conditions aux limites se réécrit simplement

$$\int_\gamma \mu\,(u_0 + \Psi - g)\,d\gamma = 0, \quad \forall \mu \in M\,. \qquad \text{(II.33)}$$

En réunissant les équations (II.31), (II.32) et (II.33), le problème continu se réécrit finalement

$$(DF_2) \quad \begin{cases} \text{Trouver } u_0 \in H^1(\Omega),\ \Psi \in H^1_0(E),\ \Delta\Psi = 0 \text{ dans } E_1 \text{ et } E_2\text{, tels que} \\ \int_\gamma w\left(\nabla\Psi^{(1)} - \nabla\Psi^{(2)}\right).n\ d\gamma = \int_\gamma w\lambda\ d\gamma, \quad \forall w \in H^{\frac{1}{2}}(\gamma) & (1) \\ \int_\Omega \nabla u_0 .\nabla v\ d\Omega = \int_\gamma v\lambda\, d\gamma - \int_E \nabla\Psi.\nabla v\ d\Omega, \quad \forall v \in X & (2) \\ \int_\gamma (u_0 + \Psi - g)\mu\ d\gamma = 0, \quad \forall \mu \in M & (3) \end{cases}$$

Les relations (2) et (3) correspondent à la formulation domaines fictifs réécrites en décomposant simplement $u = u_0 + \Psi$. La relation (1) est une relation que nous rajoutons artificiellement à la formulation. Grâce à cette relation supplémentaire, nous allons pouvoir obtenir un problème discret bien posé sans enrichir l'espace des fonctions tests discrètes.

- <u>Discrétisation</u> : nous choisissons $E = \bigcup_{k=1}^{N_S} D_k$, et nous discrétisons :

- u_0 et v par des éléments finis Q_1 sur la grille régulière,
- λ et μ par des éléments finis P_0 sur le maillage de surface,
- Ψ par $\Psi_\eta = \sum_{k=1}^{N_S} \alpha_k \Psi_k$. Nous avons, comme voulu, $\Delta\Psi_\eta = 0$ sur chaque D_k de part et d'autre de γ, mais $\Psi_\eta \notin H^1(E)$: la discrétisation est non conforme,
- w par une fonction $w_\eta = \sum_{k=1}^{N_S} w_k\,\psi_k$, où ψ_k est une fonction continue sur l'élément du maillage de surface γ_k , nulle à ses extrémités et en dehors de γ_k , et telle que $\int_{\gamma_k} \psi_k\ d\gamma \neq 0$.

Nous approchons ainsi le problème (DF_2) par

$$\begin{cases} \text{Trouver } u_{0,h} \in X_h\,, (\alpha_k)_{1\le k\le N_S} \in \Re^{N_S}\text{, et } (\lambda_k)_{1\le k\le N_S} \in \Re^{N_S}\text{, tels que} \\ \alpha_k \int_{\gamma_k} \psi_k \left(\nabla\Psi_k^{(1)} - \nabla\Psi_k^{(2)}\right).n_k\ \ d\gamma = \int_{\gamma_k} \psi_k\,\lambda_k\ d\gamma, \quad \forall k = 1,2,...,N_S\,, \\ \int_\Omega \nabla u_{0,h}.\nabla v_h\ d\Omega = \sum_{k=1}^{N_S}\left(\lambda_k \int_{\gamma_k} v_h\,\varphi_k\ d\gamma - \alpha_k \int_{D_k} \nabla\Psi_k.\nabla v_h\ d\Omega\right) \quad \forall v_h \in X_h\,, \\ \int_\gamma (u_{0,h} + \sum_{k=1}^{N_S} \lambda_k \Psi_k - g)\mu_\eta\ d\gamma = 0, \quad \forall \mu_\eta \in M_\eta. \end{cases} \qquad \text{(II.34)}$$

Grâce à la Propriété II.3, nous tirons de la première équation du système la relation

$$\alpha_k = \lambda_k, \quad \forall k = 1,2,...,N_S\,.$$

Nous obtenons donc le problème discret suivant,

$$\begin{cases} \text{Trouver } (u_{0,h}, \lambda_\eta) \in X_h \times M_\eta \quad \text{tels que} \\ \int_\Omega \nabla u_{0,h} . \nabla v_h \, d\Omega = \int_\gamma v_h \, \lambda_\eta \, d\gamma - \sum_k \lambda_k \int_{D_k} \nabla \Psi_k . \nabla v_h \, d\Omega, \quad \forall v_h \in X_h \\ \int_\gamma (u_{0,h} + \sum_k \lambda_k \Psi_k - g) \, \mu_\eta \, d\gamma = 0, \quad \forall \mu_\eta \in M_\eta . \end{cases}$$

Dans le cas particulier de surfaces des conducteurs orthogonales à la grille, on a de plus

$$\int_{D_k} \nabla \Psi_k . \nabla v_h \, d\Omega = 0 ,$$

et on retrouve le système (II.29), qui se réécrit sous la forme matricielle (II.27) que l'on rappelle ici :

$$\begin{cases} \text{Trouver } R \in \Re^{N_V} \text{ et } \overline{\Lambda} \in \Re^{N_S} \text{ tels que} \\ \mathsf{A} \, R + \mathsf{B}^T \overline{\Lambda} = 0 \\ \mathsf{B} \, R - \mathsf{C} \, \overline{\Lambda} = -G \end{cases}$$

Sinon, dans le cas général, on obtient une forme matricielle assez proche de (II.27),

$$\begin{cases} \text{Trouver } R \in \Re^{N_V} \text{ et } \overline{\Lambda} \in \Re^{N_S} \text{ tels que} \\ \mathsf{A} \, R + (\mathsf{B}^T + \mathsf{F}) \overline{\Lambda} = 0 \\ \mathsf{B} \, R - \mathsf{C} \, \overline{\Lambda} = -G . \end{cases}$$

La matrice F est creuse, mais ce système n'est pas symétrique. Si on emploie un algorithme itératif pour le résoudre, chaque itération peut être effectuée rapidement en utilisant le solveur de Poisson rapide. L'avantage de cette écriture est donc d'obtenir, sans hypothèse particulière sur les surfaces des conducteurs, c'est-à-dire sans utiliser la Propriété II.4, une formulation qui permet une résolution efficace. Cette formulation est de plus assez proche de ce qui a été effectivement programmé dans le cas général, et coïncide avec l'autre formulation lorsque les hypothèses H1 et H2 sont vérifiées. Mais nous n'avons pas eu le temps de la tester en pratique, ni de l'étudier plus en détail.

Remarques :

1. La discrétisation du potentiel est la même que celle utilisée pour obtenir l'approximation (A-Capa). Cependant, les deux approximations du problème étant des approximations non conformes, il n'est pas vraiment surprenant que l'on n'aboutisse pas exactement à la même formulation discrète.

2. Cette formulation semble pouvoir se généraliser, avec éventuellement une discrétisation différente de Ψ, au cas où la fonction u n'est pas constante sur la surface des obstacles.

4. RESULTATS NUMERIQUES EN DIMENSION 2

4.1. INTRODUCTION

Nous présentons dans cette section des résultats numériques en dimension 2 sur deux exemples "académiques". Nous avons cherché à introduire ici de façon concrète, des points que nous étudierons théoriquement au chapitre 3, et qui sont des enjeux importants pour obtenir un logiciel efficace en 3D. Nous observons pour cela le comportement des deux

approximations en fonction des choix des maillages, en termes de rapidité de convergence de l'algorithme du gradient conjugué, et de précision des résultats.

Le potentiel et la charge sont calculés en utilisant deux maillages : une grille structurée du volume, et un maillage de la surface des conducteurs. Un objectif important de ces tests numériques est de déterminer l'influence des pas des deux maillages, et du rapport entre les deux, sur les résultats pour les deux méthodes. Ceci en particulier pour avoir une première idée de choix de maillages efficaces pour une utilisation en dimension 3.

Pour tout segment γ_k du maillage de surface, notons $\Im_k$ le rapport entre la longueur du segment, et le pas de la grille de volume, *h*,

$$\Im_k = \frac{|\gamma_k|}{h},$$

et soit

$$\Im_{\min} = \min_k \Im_k \text{ et } \Im_{\max} = \max_k \Im_k .$$

Ces rapports ont une influence importante sur le comportement des deux approximations. En effet, une condition pour que le problème discret admette une solution unique, et qui converge vers la solution du problème continu lorsque les pas des maillages tendent vers *0,* est la célèbre condition inf-sup. Cette condition se traduit pour (A-GPP) par une condition de compatibilité entre les maillages. En effet, Girault et Glowinski ont montré [GiGl 95], en considérant des éléments finis P_1 pour le potentiel sur un maillage de triangles, et des éléments finis P_0 pour la charge, que s'il existe une constante *L* telle que

$$\begin{cases} \Im_{\min} \geq 3, \\ \Im_{\max} < L, \end{cases} \qquad \text{(II.35)}$$

alors la condition inf-sup est vérifiée. Ils ont de plus remarqué qu'en pratique, on pouvait relâcher $\Im_{\min} \geq 3$ jusqu'à $\Im_{\min} \geq 1{,}5$.

Nous allons étudier ici le comportement des deux approximations en fonction de la finesse des maillages et du rapport entre les pas des deux maillages. Nous prêterons une attention particulière au cas où le maillage de surface est construit comme l'intersection de la surface des conducteurs et de la grille de volume. En effet, ce choix du maillage de surface, s'il s'avère donner de bons résultats, sera un choix facile à étendre en dimension 3. Nous l'appelons dans la suite choix "auto" du maillage de surface.

Nous considérons d'abord le cas de deux conducteurs dont les surfaces en vis-à-vis sont circulaires et concentriques, exemple pour lequel on connaît explicitement la charge et le potentiel. On ne se situe pas avec cet exemple dans un cas très favorable à l'approximation (A-Capa), puisqu'on a vu qu'elle est a priori plus particulièrement adaptée au cas de surfaces orthogonales à la grille volumique, cas de la plupart des structures d'interconnexions à simuler. Et ce n'est pas non plus un cas auquel on attache beaucoup d'importance, puisque les interconnexions sont le plus souvent modélisées par un ensemble de parallélépipèdes rectangles. Cependant il permet de valider les résultats et de tirer des premières conclusions.

Nous considérons ensuite un cas contenant un conducteur, de surface rectangulaire.

Enfin, nous nous attachons plus particulièrement à la prise en compte des angles droits. En effet, les structures d'interconnexions étant le plus souvent modélisées par un ensemble de parallélépipèdes, il est important que les coins soient bien pris en compte.

4.2. GEOMETRIE CIRCULAIRE : COMPARAISON AVEC LA SOLUTION ANALYTIQUE

Un exemple sur lequel on connaît explicitement la charge et le potentiel est le cas de deux conducteurs plongés dans un diélectrique de permittivité constante ε_0, dont les surfaces en vis-à-vis sont circulaires (ou sphériques en 3D), de rayons r_1 et r_2 ($r_2 > r_1$), et concentriques de centre O.

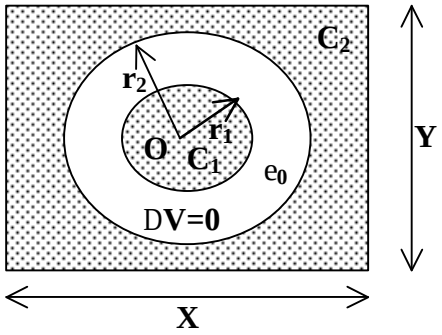


Figure II.17. Géométrie circulaire

Calcul analytique de la charge sur les conducteurs :

Dans l'espace diélectrique entre les conducteurs, le champ électrique $\vec{E}$ est axisymétrique,

$$\vec{E} = E(r)\vec{u}_r ,$$

où *r* est la distance du point auquel on considère le champ électrique au centre des cercles. Le théorème de Gauss exprime la charge Q_S comprise à l'intérieur d'une surface S par

$$\frac{Q_S}{\varepsilon_0} = \oiint_S \vec{E}.\overrightarrow{dS} .$$

Soit Q la charge du conducteur C_1, le champ électrique en tout point d'un cercle de rayon $r > r_1$ et de centre O, vérifie

$$2\pi r E(r) = \frac{Q}{\varepsilon_0} .$$

On en déduit

$$V(r_1) - V(r_2) = \int_{r_1}^{r_2} E(r)dr = \frac{Q}{2\pi\varepsilon_0} \ln\frac{r_2}{r_1} .$$

Choisissons

$$\begin{cases} r_1 = 5 \\ r_2 = 9 \end{cases}, \begin{cases} V(r_1) = 1 \\ V(r_2) = 0 \end{cases} \text{, et, pour simplifier, } \varepsilon_0 = 1.$$

Alors

$$\begin{cases} Q = \dfrac{2\pi}{\ln 9 - \ln 5}, \\ V(r) = V(r_2) + \displaystyle\int_r^{r_2} \frac{1}{r(\ln 9 - \ln 5)}\, dr = \frac{\ln 9 - \ln r}{\ln 9 - \ln 5}, \quad \forall 5 \le r \le 9. \end{cases}$$

Résultats de simulation :
On choisit comme domaine fictif la boite carrée de côtés $X = Y = 20$. On fixe le potentiel sur les conducteurs, $V(C_1) = 1$ et $V(C_2) = 0$. Les systèmes linéaires obtenus avec les approximations (A-GPP) et (A-Capa), sont résolus par un algorithme de gradient conjugué, non préconditionné, sur la charge. Nous considérons ici que l'algorithme a convergé à l'itération *n* si la charge surfacique Λ_n est telle que

$$\frac{\left\| \mathrm{B}\ \mathrm{A}^{-1}\mathrm{B}^{T}\Lambda_n - G \right\|}{\|G\|} < 10^{-7} \quad \text{pour (A-GPP),}$$

$$\text{ou} \quad \frac{\left\| (\mathrm{B}\ \mathrm{A}^{-1}\mathrm{B}^{T} + \mathrm{C})\Lambda_n - G \right\|}{\|G\|} < 10^{-7} \quad \text{pour (A-Capa).}$$

Ce critère d'arrêt garantit une très bonne convergence de la résolution du système.

Nous présentons d'abord les résultats pour les approximations (A-GPP) et (A-Capa) en fonction du pas de la grille de volume, avec un rapport fixé égal à 2 entre le pas du maillage de surface et le pas du maillage de volume. Pour ce rapport, on doit obtenir une bonne convergence de l'approximation (A-GPP), la condition inf-sup « pratique » est vérifiée.

La Figure II.18 présente l'erreur relative sur la charge en échelle logarithmique, ainsi que le nombre d'itérations de l'algorithme de résolution, pour les deux approximations, en fonction du pas de la grille en échelle logarithmique.

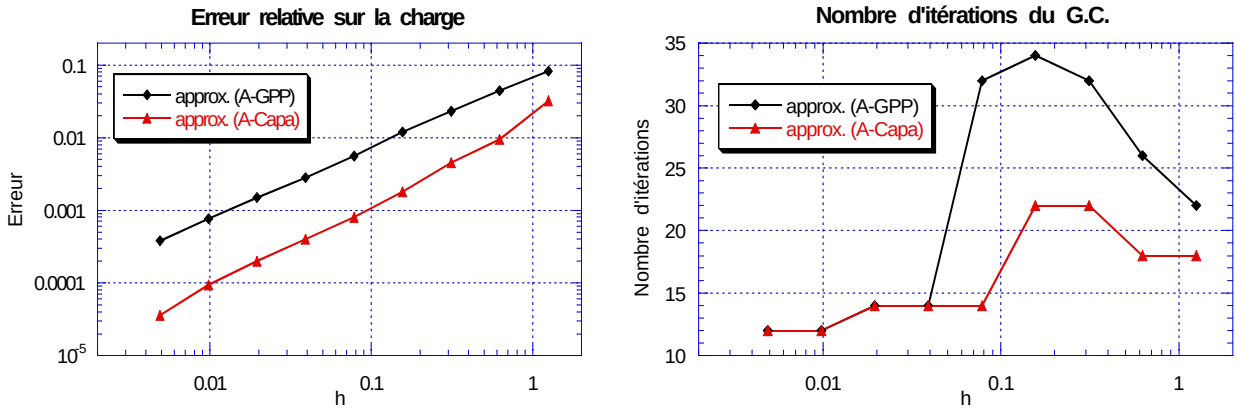


Figure II.18. Erreur relative et nombre d'itérations du G.C. en fonction du pas de la grille pour $\Im \approx 2$

On constate que l'erreur relative sur la charge décroît à peu près à la même vitesse en fonction du pas pour les deux approximations, mais l'erreur est environ dix fois plus faible avec l'approximation (A-Capa). De plus, le nombre d'itérations de l'algorithme de résolution est plus faible avec l'approximation (A-Capa).

Cet exemple montre donc que l'approximation (A-Capa) est intéressante même pour des surfaces des conducteurs non orthogonales à la grille.

Nous étudions maintenant l'influence du rapport $\Im$ entre le pas du maillage de surface et le pas de la grille sur les résultats. Nous comparons dans le Tableau II.1 et le Tableau II.2, la précision et la convergence des approximations en fonction du pas de la grille pour différentes valeurs de $\Im$, telles que la condition inf-sup est ou non vérifiée pour (A-GPP). Le choix particulier du maillage de surface appelé choix "auto", est obtenu en reliant les points d'intersection de la surface des conducteurs (ici les cercles) et de rectangles de la grille.

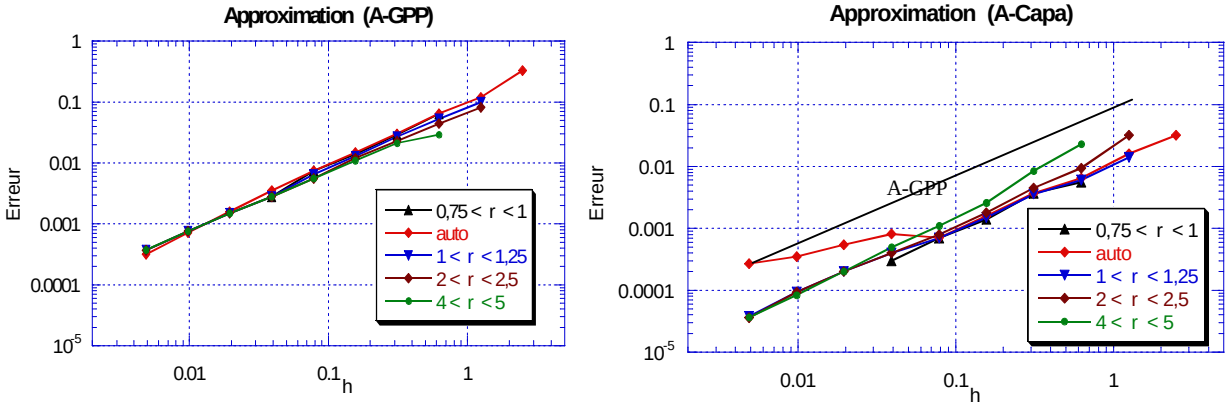
Tableau II.1. Approximation (A-GPP)

h	$\Im \in$ [0,75 ; 1]		Choix auto.		$\Im \in$ [1 ; 1,25]		$\Im \in$ [2 ; 2,5]		$\Im \in$ [4 ; 5]	
	Erreur	# itér.	Erreur	# itér.	Erreur	# itér.	Erreur	# itér.	Erreur	# itér.
5/2			0,33	54						
5/4			0,12	166	$9{,}9.\ 10^{-2}$	34	$8{,}2.\ 10^{-2}$	22		
5/8	$6{,}4.\ 10^{-2}$	140	$6{,}5.\ 10^{-2}$	276	$5{,}3.\ 10^{-2}$	54	$4{,}4.\ 10^{-2}$	26	$2{,}9.\ 10^{-2}$	22
5/16	$2{,}9.\ 10^{-2}$	334	$3.\ 10^{-2}$	228	$2{,}7.\ 10^{-2}$	74	$2{,}3.\ 10^{-2}$	32	$2{,}1.\ 10^{-2}$	22
5/32	$1{,}4.\ 10^{-2}$	234	$1{,}5.\ 10^{-2}$	136	$1{,}3.\ 10^{-2}$	86	$1{,}2.\ 10^{-2}$	34	$1{,}1.\ 10^{-2}$	24
5/64	$7{,}5.\ 10^{-3}$	272	$7{,}5.\ 10^{-3}$	78	$6{,}5.\ 10^{-3}$	50	$5{,}6.\ 10^{-3}$	32	$5{,}6.\ 10^{-3}$	24
5/128	$2{,}8.\ 10^{-3}$	52	$3{,}5.\ 10^{-3}$	40	$2{,}8.\ 10^{-3}$	14	$2{,}8.\ 10^{-3}$	14	$2{,}8.\ 10^{-3}$	14
5/256	Non cv.		$1{,}6.\ 10^{-3}$	66	$1{,}5.\ 10^{-3}$	12	$1{,}5.\ 10^{-3}$	14	$1{,}5.\ 10^{-3}$	14
5/512	Non cv.		$7{,}2.\ 10^{-4}$	40	$7{,}6.\ 10^{-4}$	12	$7{,}6.\ 10^{-4}$	12	$7{,}6.\ 10^{-4}$	14
5/1024	Non cv.		$3{,}2.\ 10^{-4}$	42	$3{,}8.\ 10^{-4}$	10	$3{,}7.\ 10^{-4}$	12	$3{,}7.\ 10^{-4}$	12

Tableau II.2. Approximation (A-Capa)

h	$\Im \in$ [0,75 ; 1]		Choix auto.		$\Im \in$ [1 ; 1,25]		$\Im \in$ [2 ; 2,5]		$\Im \in$ [4 ; 5]	
	Erreur	# itér.	Erreur	# itér.	Erreur	# itér.	Erreur	# itér.	Erreur	# itér.
5/2			$3{,}2.\ 10^{-2}$	32						
5/4			$1{,}6.\ 10^{-2}$	32	$1{,}4.\ 10^{-2}$	22	$3{,}2.\ 10^{-2}$	18		
5/8	$5{,}6.\ 10^{-3}$	50	$6{,}5.\ 10^{-3}$	64	$6.\ 10^{-3}$	22	$9{,}4.\ 10^{-3}$	18	$2{,}3.\ 10^{-2}$	18
5/16	$3{,}7.\ 10^{-3}$	56	$3{,}7.\ 10^{-3}$	52	$3{,}6.\ 10^{-3}$	22	$4{,}5.\ 10^{-3}$	22	$8{,}4.\ 10^{-3}$	18
5/32	$1{,}4.\ 10^{-3}$	50	$1{,}6.\ 10^{-3}$	52	$1{,}5.\ 10^{-3}$	22	$1{,}8.\ 10^{-3}$	22	$2{,}6.\ 10^{-3}$	18
5/64	$7.\ 10^{-4}$	36	$7{,}1.\ 10^{-4}$	42	$7.\ 10^{-4}$	14	$8.\ 10^{-4}$	14	$1{,}1.\ 10^{-3}$	14
5/128	$3.\ 10^{-4}$	42	$8{,}1.\ 10^{-4}$	32	$4.\ 10^{-4}$	14	$4.\ 10^{-4}$	14	$5.\ 10^{-4}$	14
5/256	Non cv.		$5{,}5.\ 10^{-4}$	56	$2.\ 10^{-4}$	12	$2.\ 10^{-4}$	14	$2.\ 10^{-4}$	14
5/512	Non cv.		$3{,}5.\ 10^{-4}$	36	$9{,}4.\ 10^{-5}$	12	$9{,}4.\ 10^{-5}$	12	$8{,}4.\ 10^{-5}$	14
5/1024	Non cv.		$2{,}7.\ 10^{-4}$	42	$3{,}8.\ 10^{-5}$	12	$3{,}6.\ 10^{-5}$	12	$3{,}7.\ 10^{-5}$	12

On représente ci-dessous les erreurs en échelles logarithmiques sur deux graphes séparés, mais avec les mêmes échelles.



Approximation (A-GPP) : On constate sur ces figures que l'erreur pour (A-GPP) dépend très peu du maillage de surface. Par contre, on voit dans les tableaux que pour des grilles pas très raffinées, l'algorithme du gradient conjugué converge beaucoup mieux (en nombre d'itérations) lorsque le rapport $\Im$ est élevé, c'est à dire si la condition de compatibilité entre les maillages est vérifiée.

Approximation (A-Capa) : La convergence de l'algorithme du gradient conjugué dépend peu du rapport entre les pas du maillage de surface et de la grille. L'algorithme a cependant besoin de deux fois plus d'itérations lorsque la condition de compatibilité entre les maillages ($\Im_{min} \geq 1{,}5$) n'est pas vérifiée que lorsqu'elle est vérifiée.

D'autre part, pour des grilles de taille grossière à moyenne, l'erreur dépend assez peu du maillage de surface et diminue même légèrement quand on raffine celui-ci. Mais pour des grilles fines, les résultats sont moins précis lorsque la condition de compatibilité n'est pas vérifiée. Pour un rapport $\Im_{min} < 1$, l'algorithme du gradient conjugué peut même ne pas converger. Par contre, lorsque cette condition est vérifiée, les résultats sont environ dix fois plus précis que pour (A-GPP).

Remarques :

1. Dans les tests précédents, les pas de la grille étaient les mêmes dans les deux directions. Nous avons refait les mêmes simulations, avec pour un pas Δx fixé, des pas $\Delta y = (2,4 \text{ ou } 8).\Delta x$. La précision sur la charge est sensiblement la même qu'avec $\Delta y = \Delta x$, mais avec un coût de calcul plus important.
2. Nous avons refait les mêmes calculs en agrandissant le domaine fictif, de façon à vérifier que l'influence sur les résultats des conditions aux limites sur les bords du domaine fictif est négligeable.

Conclusion pour des surfaces de conducteurs quelconques:

En termes de précision, les deux méthodes sont en O(*h*), mais l'approximation (A-Capa) est environ dix fois plus précise. Quant à la condition de compatibilité entre les deux maillages, le fait qu'elle soit vérifiée ou non influe sur la convergence de l'algorithme, mais peu sur la précision des résultats. De plus, une condition entre les pas des maillages semble exister pour les deux approximations, mais être moins contraignante pour l'approximation (A-Capa).

4.3. GEOMETRIE RECTANGULAIRE

Considérons à présent un exemple sur lequel on ne connaît plus la solution analytique, mais où les surfaces des conducteurs sont orthogonales aux mailles de la grille, c'est-à-dire où l'approximation programmée correspond exactement à une discrétisation de la formulation domaines fictifs. Cet exemple est représenté sur la Figure II.19 : on a un conducteur, de surface rectangulaire, plongé dans un milieu diélectrique.

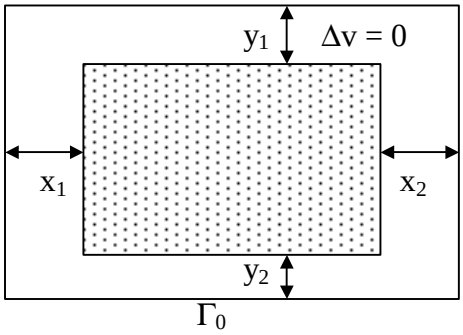


Figure II.19. Conducteur rectangulaire

Plusieurs cas se présentent, suivant que les surfaces des conducteurs coïncident ou non avec la grille de volume. En effet, si sur un rectangle de la grille un segment de frontière γ_k coïncide avec un côté du rectangle, la fonction supplémentaire associée Ψ_k est nulle sur ce rectangle. On simule deux cas extrêmes,

- le cas où toutes les surfaces coïncident avec la grille de volume. Alors les approximations (A-GPP) et (A-Capa) sont identiques,
- le cas où aucune surface ne coïncide avec la grille de volume. Alors on va pouvoir évaluer la précision de l'approximation (A-Capa), et la comparer par rapport à l'approximation (A-GPP) et par rapport au cas où les surfaces coïncident avec la grille de volume.

Dans les deux cas, de la même façon que pour les cercles concentriques, nous prenons dans un premier temps comme maillage de surface l'intersection des conducteurs et de la grille volumique, mais en gardant les angles droits même s'ils ne coïncident pas avec des mailles de la grille. Dans ce cas, pour tout segment γ_k ne touchant pas un coin, on a $\Im_k = 1$ (voir Figure II.20).

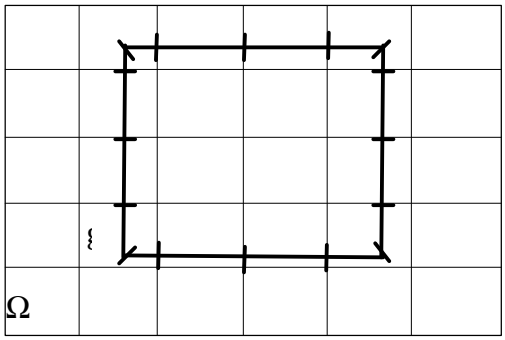


Figure II.20. Choix "auto" avec coins

On choisit le même critère d'arrêt de l'algorithme du gradient conjugué que pour l'exemple des cercles concentriques. Pour chaque approximation, on prend pour valeur de référence de

la charge, la valeur calculée avec une grille de 4096 points dans chaque direction. On en déduit les erreurs relatives sur la charge en fonction du pas.

4.3.1 Cas où les surfaces coïncident avec la grille de volume

On choisit un problème identique dans les deux directions, en fixant

$$\begin{cases} X = Y = 20, \\ x_1 = \mathrm{x}_2 = \mathrm{y}_1 = \mathrm{y}_2 = 2{,}5. \end{cases}$$

On représente dans la figure suivante les erreurs relatives sur la charge, et le nombre d'itérations de l'algorithme du gradient conjugué en fonction du pas de la grille, pour différentes valeurs du rapport $\Im$ entre le pas du maillage de surface et le pas du maillage de volume.

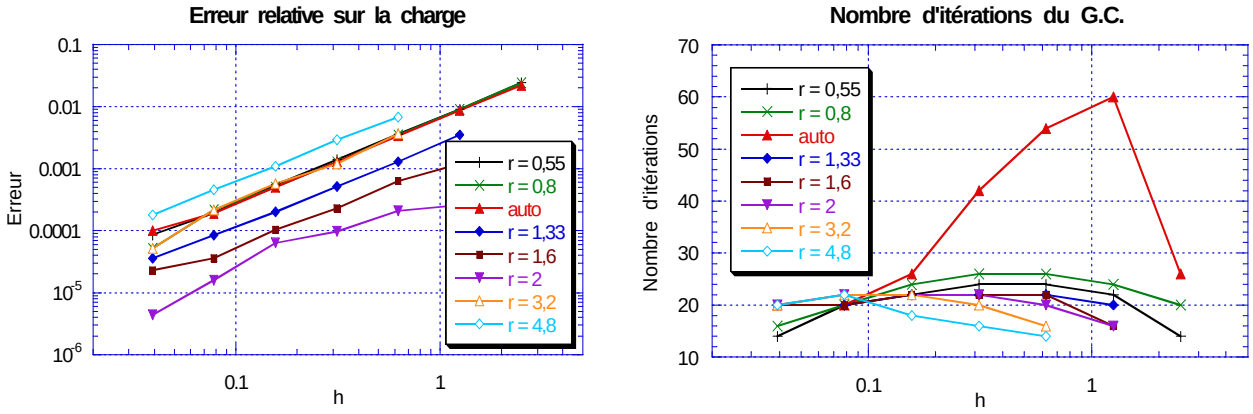


Figure II.21. Résultats pour un conducteur rectangulaire, dont la surface coïncide avec la grille

Nous faisons les observations suivantes :

- Pour un rapport $\Im$ fixé, l'erreur relative sur la charge totale varie en fonction du pas de la grille en environ $h^{1,3}$

- Pour un pas de grille donné, lorsque l'on fait varier le maillage de surface pour $\Im \leq 1$, la précision est à peu près constante (courbes r = 0,55, r = 0,8, et *auto* superposées). Puis, pour $1 \leq \Im \leq 2$ environ, la précision est meilleure quand on relâche le maillage de surface, donc quand $\Im$ augmente. On obtient une précision optimale autour de $\Im = 2$. Enfin, pour $\Im > 2$, lorsqu'on relâche davantage le maillage de surface, la précision devient moins bonne, et moins bonne en particulier que pour $\Im \leq 1$.

D'autre part, le nombre d'itérations de l'algorithme de résolution varie assez peu, même s'il est un peu plus important pour des grilles de taille moyenne lorsque $\Im$ est faible. Par contre, le cas particulier du choix auto du maillage de surface, requiert un nombre d'itérations nettement plus important pour des grilles de volume moyennes à grossières.

4.3.2 Cas où les surfaces ne coïncident pas avec la grille de volume

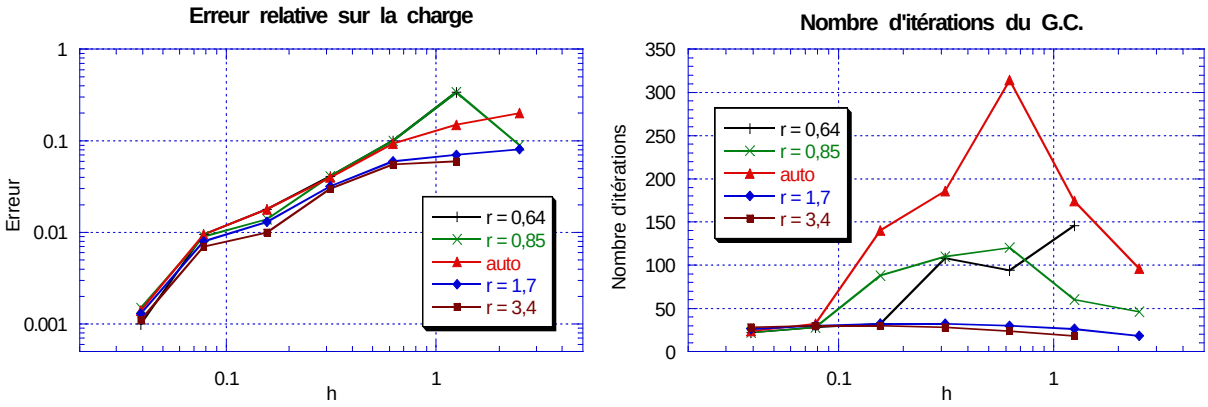
On définit le problème par la donnée des paramètres,

$$\begin{cases} X = Y = 20; \\ x_1 = 2 + 0{,}023; \quad x_2 = 2 - 0{,}023; \\ y_1 = 2 + 0{,}301; \quad y_2 = 2 - 0{,}301. \end{cases}$$

On observe d'abord, séparément pour les deux approximations, les résultats (précision et vitesse de convergence de l'algorithme du gradient conjugué) en fonction du pas de la grille pour différentes valeurs du rapport $\Im$ entre les pas des maillages (noté r sur la figure). On compare ensuite, pour des choix représentatifs des maillages, les résultats des deux approximations.

Approximation (A-GPP) :

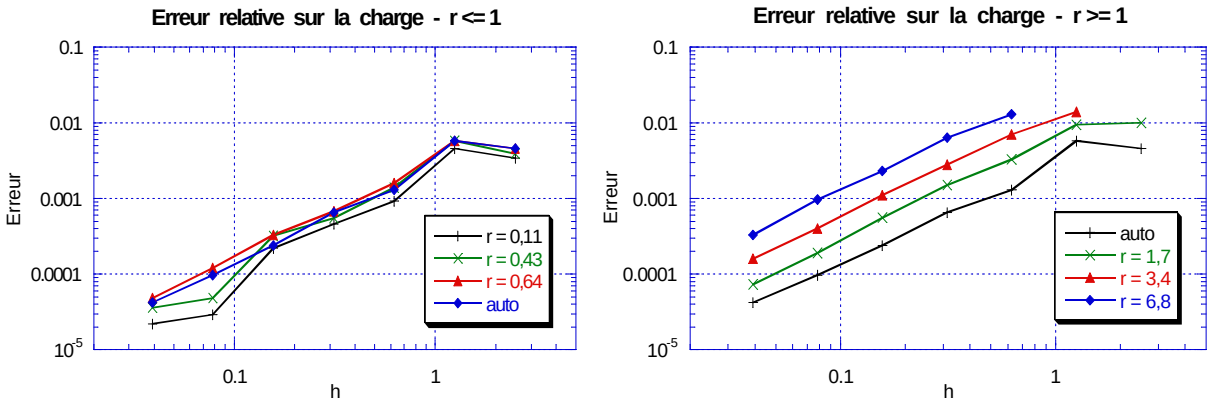
Nous représentons ci-dessous l'erreur en échelle logarithmique et le nombre d'itérations, en fonction du pas de la grille de volume, pour différents choix du maillage de surface.



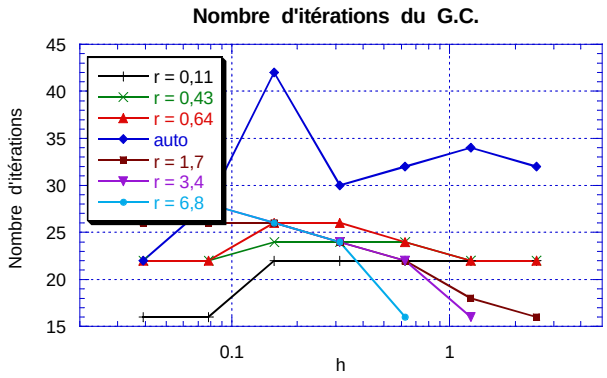
Pour une grille de volume donnée, on constate que la précision dépend peu du maillage de surface. Par contre, pour des grilles de volume de tailles moyennes, c'est-à-dire souvent les grilles qu'on utilise en pratique, le nombre d'itérations de l'algorithme du gradient conjugué dépend fortement du rapport $\Im$. Lorsque celui-ci est inférieur à environ 1,5, c'est-à-dire lorsque la condition de compatibilité entre les maillages n'est pas vérifiée, l'algorithme du gradient conjugué converge mal. Le cas du maillage « auto » est particulièrement défavorable.

Approximation (A-Capa) :

Nous présentons ci-dessous les erreurs relatives en échelles logarithmiques, en séparant pour plus de clarté les résultats pour des rapports $\Im \leq 1$ et $\Im \geq 1$.



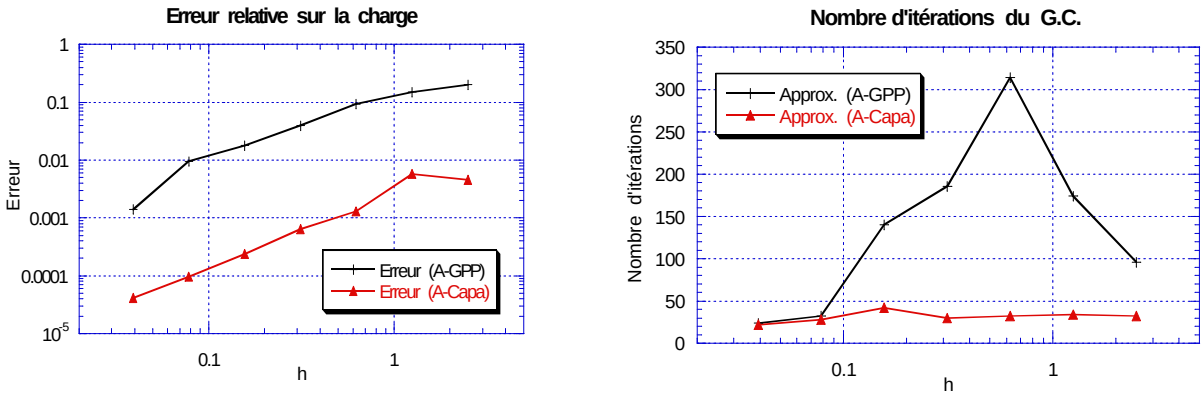
On remarque que pour une grille de volume donnée, quand $\Im \leq 1$, c'est-à-dire quand on raffine le maillage de surface, la précision est à peu prés constante. Par contre, lorsque $\Im \geq 1$, c'est-à-dire lorsqu'on relâche le maillage de surface, la précision devient moins bonne. Donc dans ce cas le maillage auto assure une précision quasiment optimale pour une grille de volume fixée.



Le nombre d'itérations de l'algorithme de résolution, même s'il est légèrement plus important pour le maillage auto, reste du même ordre de grandeur pour tous les choix de maillages. Il ne semble pas y avoir de conditions de compatibilité fortes entre les maillages pour l'approximation (A-Capa), bien que le choix auto semble introduire une légère instabilité.

Sur cet exemple, pour les deux approximations, le choix comme maillage de surface de l'intersection de la surface des conducteurs et de la grille est donc un très bon compromis en termes de précision sur la charge. Les comparaisons effectuées par la suite le seront donc pour ce choix du maillage de surface.

Ainsi, dans la figure qui suit, nous comparons l'erreur en échelle logarithmique, et le nombre d'itérations de l'algorithme du gradient conjugué avec les deux approximations, pour le choix auto du maillage de surface.



On constate le gain important en précision apporté par l'approximation (A-Capa) : les pentes des courbes sont à peu près les mêmes, autour de 1, pour les deux approximations, mais (A-Capa) est presque 100 fois précise pour une grille donnée. L'approximation (A-Capa) est ainsi très précise déjà pour des maillages grossiers. D'autre part, le nombre d'itérations assez faible pour (A-Capa) permet l'emploi du maillage auto, qui pour (A-GPP) est en pratique inutilisable, du moins sans préconditionnement.

4.3.3 Comparaisons des cas 4.3.1 et 4.3.2

Dans la figure qui suit, nous comparons les erreurs relatives sur la charge, en fonction du pas de la grille, obtenues sur les exemples des paragraphes 4.3.1 et 4.3.2. Dans l'exemple du paragraphe 4.3.1, les rectangles coïncident avec la grille, et les deux approximations donnent les mêmes résultats. On présente deux courbes correspondant à deux choix du maillage de surface, le maillage auto (courbe C_auto de la Figure II.22), et le maillage optimal sur cet exemple, caractérisé par $\Im = 2$ (courbe C_r=2). Dans l'exemple du paragraphe 4.3.2, les rectangles ne coïncident pas avec la grille, on prend le maillage auto (courbes (A-GPP)_NC_auto et (A-Capa)_NC_auto).

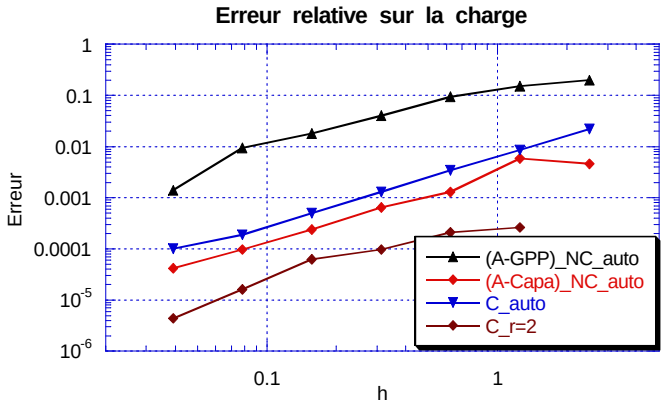


Figure II.22. Comparaisons pour des surfaces de conducteurs coïncidant où non avec la grille de volume

On constate que pour le maillage auto, l'approximation (A-Capa) dans le cas où les conducteurs ne coïncident pas avec la grille est plus précise que si les conducteurs coïncident avec la grille. Par contre, si on choisit le maillage de surface optimal pour le cas où les conducteurs coïncident avec la grille, les résultats dans ce cas sont meilleurs.

4.4. IMPORTANCE D'UNE BONNE PRISE EN COMPTE DES COINS

Jusqu'ici, les résultats présentés sont des observations sur des valeurs globales : charge surfacique totale et nombre d'itérations de l'algorithme du gradient conjugué. Ces résultats montrent en particulier que le non-respect de la condition de compatibilité entre les maillages, c'est-à-dire de la valeur du rapport $\Im$, influe sur la convergence de l'algorithme du gradient conjugué, mais assez peu sur la charge totale.
Nous considérons ici l'exemple de la figure Figure II.1 : deux conducteurs, de surfaces en vis-à-vis rectangulaires, et qui ne coïncident pas avec des mailles de la grille. Dans le paragraphe 4.4.1, nous fixons la grille de volume et représentons la charge surfacique le long d'un conducteur. On remarque que pour l'approximation (A-GPP), lorsque la géométrie des conducteurs présente des coins, la valeur du rapport $\Im$ influe fortement sur la valeur locale de la charge surfacique, et des oscillations importantes peuvent apparaitre. Ces oscillations se compensent lors du calcul de la charge totale. Par contre, les résultats de l'approximation (A-Capa) restent très stables lorsque $\Im$ varie.
Puis dans le paragraphe 4.4.2, nous faisons varier la finesse de la grille de volume, et confirmons l'importance d'une bonne prise en compte des coins, à la fois sur la précision des résultats et sur la convergence de l'algorithme de résolution.

4.4.1 Charge surfacique locale pour une grille fixée

On utilise d'abord les premiers termes d'un développement en série du potentiel autour des coins des rectangles pour obtenir des tendances de la charge surfacique moyenne sur les segments les plus proches des coins.

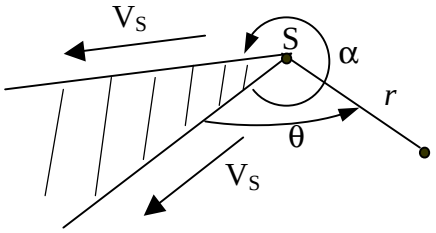
Puis on montre qu'on retrouve ces tendances par la simulation, et on insiste sur le traitement des coins où il y a une singularité de la charge surfacique.

4.4.1.1 Développement en série autour des points singuliers

La solution de

$$\Delta V = 0$$

dans un domaine limité par les deux côtés d'un angle, avec la fonction donnée sur les deux côtés de l'angle,



s'écrit, [Du, p.37],

$$V(r,\theta) = V_S + \sum_{n=1}^{\infty} A_n r^{\frac{n\pi}{\alpha}} \sin(\frac{n\pi}{\alpha}\theta).$$

En ne retenant que les termes du premier ordre (autour de r = 0 les autres sont négligeables),

$$V(r,\theta) \approx V_S + A r^{\frac{\pi}{\alpha}} \sin(\frac{\pi}{\alpha}\theta), \quad |r| << 1.$$

Le champ électrique est égal au signe près, à la dérivée normale du potentiel, soit [Du, p.159]

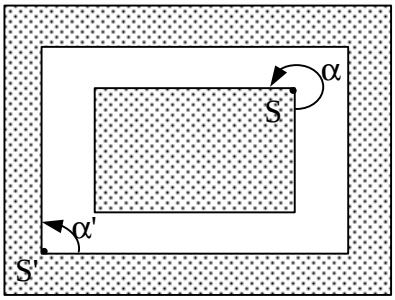
$$E(r,\theta) = -\frac{1}{r}\left(\frac{\partial V}{\partial \theta}\right) \approx -\frac{\pi}{\alpha} A r^{(\frac{\pi}{\alpha}-1)} \cos(\frac{\pi}{\alpha}\theta), \quad |r| << 1.$$

Le champ électrique de chaque côté de l'angle est orthogonal à la surface, donc on déduit la charge surfacique en prenant les angles $\theta = 0$ et $\theta = \pi$ suivant le côté de l'angle,

$$q_r \approx \pm \frac{\pi}{\alpha} A r^{(\frac{\pi}{\alpha}-1)}.$$

Et donc si $\alpha > \pi$, le champ électrique et la charge sont infinis en S, et si $\alpha < \pi$, ils sont finis en S.

Application à notre exemple :



- Pour les coins du *rectangle intérieur* (point S), la charge est infinie sur le coin :

$$\alpha = \frac{3\pi}{2} \quad \Rightarrow \quad q(r) = \frac{2}{3} A r^{-\frac{1}{3}} \xrightarrow[r\to 0]{} \infty.$$

Et si on intègre sur un segment de taille ε,

$$\int_0^{\varepsilon} q(r)\, dr = A\varepsilon^{\frac{2}{3}},$$

donc la valeur moyenne de la charge surfacique sur le segment le plus proche de S est $A\varepsilon^{-\frac{1}{3}}$.

Pour les coins du *rectangle extérieur* (point S'), il n'y a pas de singularité de la charge:

$$\alpha' = \frac{\pi}{2} \quad \Rightarrow \quad q(r) = 2Ar \xrightarrow[r\to 0]{} 0.$$

Et si on intègre la charge sur un segment de taille ε,

$$\int_0^{\varepsilon} q(r)\, dr = A\varepsilon^{2},$$

donc la valeur moyenne de la charge surfacique sur le segment le plus proche de S est $A\varepsilon$, et tend donc vers 0 lorsque l'on raffine le maillage de surface.

Nous retrouvons ces deux tendances dans les simulations.

4.4.1.2 Résultats de simulation pour une grille fixée

La grille de volume est fixée, et comprend 256 points dans chaque direction. On fait alors varier le rapport $\Im$ pour observer le comportement de la charge surfacique pour les deux approximations.

Rectangle extérieur : angles rentrants

Nous présentons d'abord la charge surfacique le long de la surface du rectangle extérieur, où il n'y a pas de singularité du champ électrique (et donc de la charge surfacique) aux coins. Les courbes suivantes sont d'abord pour le maillage de surface "auto", puis pour un rapport $\Im \in [1{,}6;\ 1{,}8]$, tel que la condition de compatibilité entre les maillages est vérifiée.

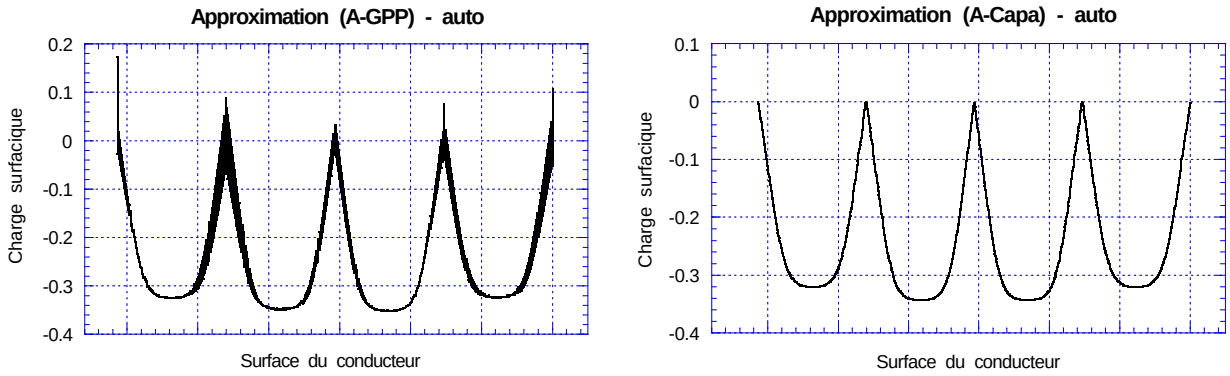


Figure II.23. Charge surfacique moyenne le long de la surface du rectangle extérieur, pour le maillage de surface "auto"

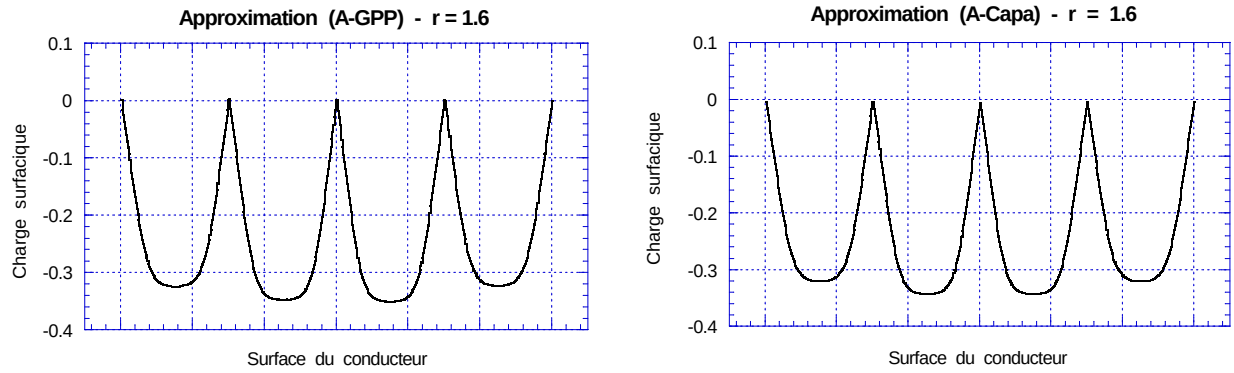


Figure II.24. Charge surfacique moyenne le long de la surface du rectangle extérieur, pour $\Im \in [1{,}6;\ 1{,}8]$

Les courbes sont assez proches pour les deux approximations, malgré une légère oscillation de la charge surfacique dans l'approximation (A-GPP) lorsque la condition de compatibilité n'est pas vérifiée. On retrouve dans tous les cas que la charge surfacique tend vers 0 aux coins du rectangle.

Rectangle intérieur : angles saillants

Nous présentons maintenant la charge à la surface du rectangle intérieur. Nous montrons les résultats des deux approximations, d'abord pour un maillage de surface tel que l'approximation (A-GPP) vérifie la condition inf-sup, puis pour notre maillage de surface "auto", puis pour un maillage de surface encore plus fin.

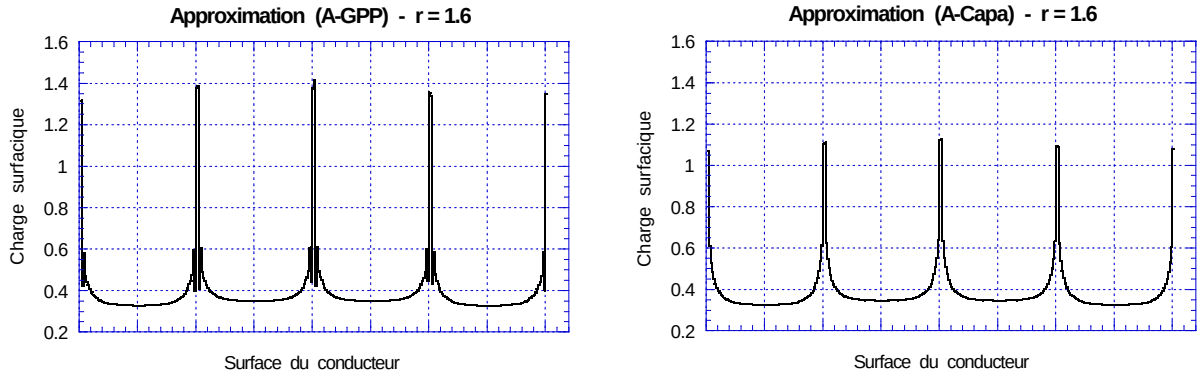


Figure II.25. Charge surfacique moyenne le long de la surface du rectangle extérieur, pour $\Im \in [1{,}6;\ 1{,}8]$

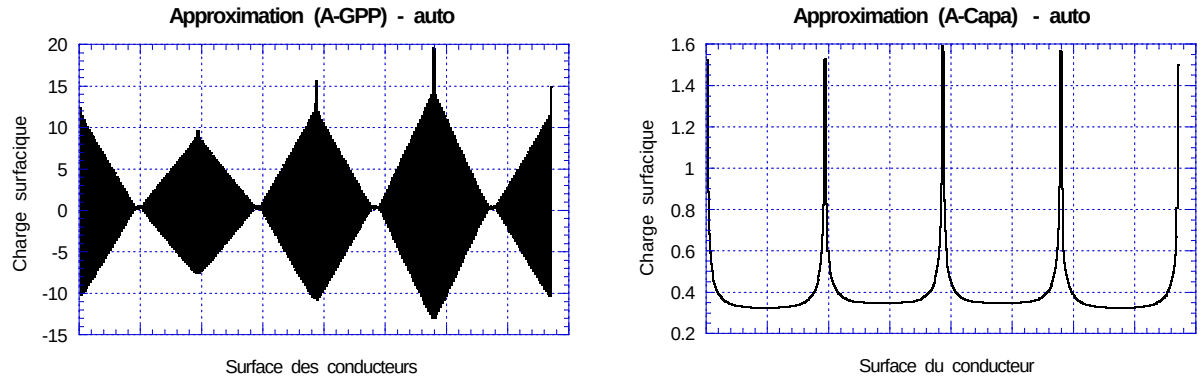


Figure II.26. Charge surfacique moyenne le long de la surface du rectangle extérieur, pour le maillage "auto"

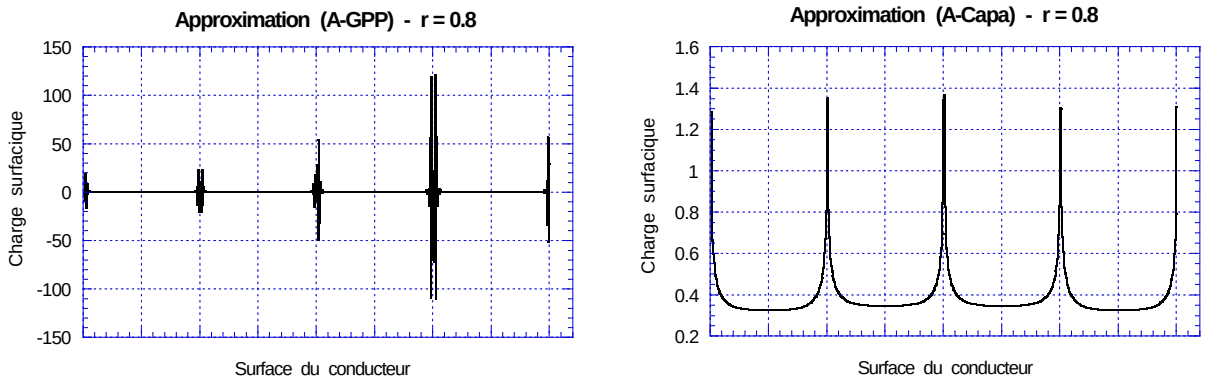


Figure II.27. Charge surfacique moyenne le long de la surface du rectangle extérieur, pour $\Im \in [0{,}8;\ 0{,}9]$

On constate d'abord que lorsque la condition de compatibilité entre les maillages est vérifiée, la charge surfacique a une bonne "allure" pour les deux approximations, malgré tout de même une légère oscillation pour l'approximation (A-GPP) de la charge autour des coins. Il y a un pic de la charge surfacique en ces coins comme prévu par le calcul.

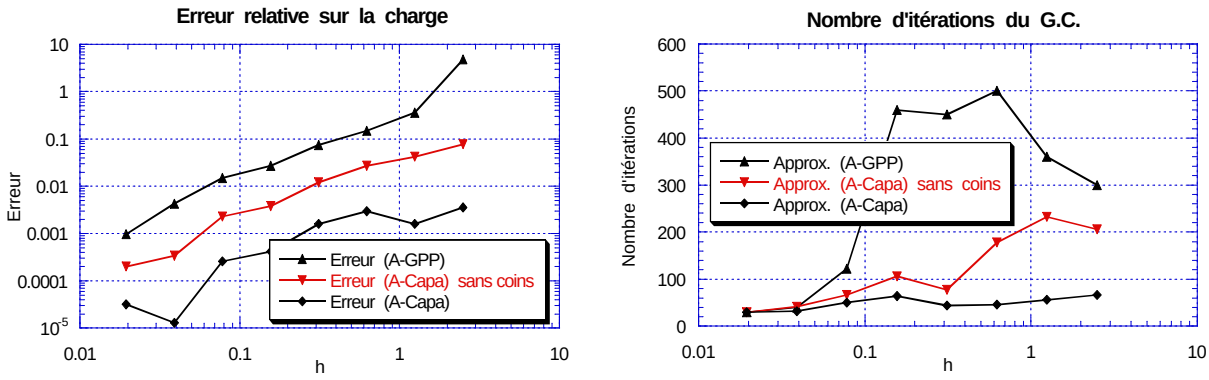
D'autre part, pour l'approximation (A-Capa), le profil reste sensiblement le même lorsque l'on change le maillage de surface, avec simplement une légère augmentation de l'amplitude du pic lorsque le maillage est fin autour des coins, ce qui est toujours conforme au calcul.

Pour l'approximation (A-GPP) par contre, lorsque la condition de compatibilité n'est pas vérifiée, les coins déclenchent des fortes oscillations de la charge surfacique. Cependant, on a vu dans les paragraphes précédents que la valeur totale de la charge à la surface des conducteurs dépend très peu du maillage de surface : ces oscillations sont faiblement pondérées car localisées dans les coins sauf pour le cas "auto", et surtout se compensent.

En résumé, ces essais confirment de façon visuelle la bonne stabilité de (A-Capa) par rapport à (A-GPP) lorsque $\Im$ est inférieur à 1,5.

4.4.2 Observations globales

Pour montrer l'importance de la prise en compte des coins à la fois sur la précision des résultats et sur la bonne convergence de l'algorithme du gradient conjugué, nous comparons maintenant les valeurs et le nombre d'itérations en fonction de la finesse de la grille, obtenus avec l'approximation (A-GPP), l'approximation (A-Capa), et l'approximation (A-Capa) sauf dans les coins où l'on ne fait pas de correction.



On constate que la modification ou non de l'approximation sur les segments aux coins des parallélépipèdes change la précision des résultats d'un facteur dix !

Nous comparons maintenant ces résultats avec les résultats obtenus dans le cas où les coins sont "cassés" comme dans la Figure II.28, avec comme maillage de surface l'intersection de ces rectangles aux coins cassés avec la grille (maillage "auto").

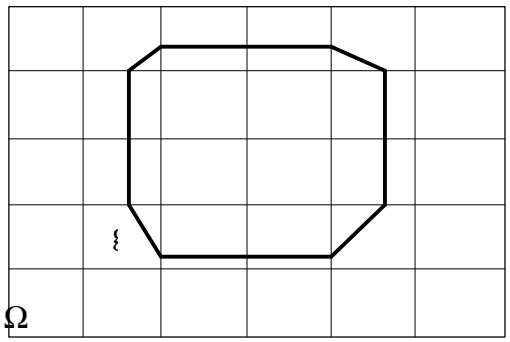


Figure II.28. Choix "auto" avec coins cassés.

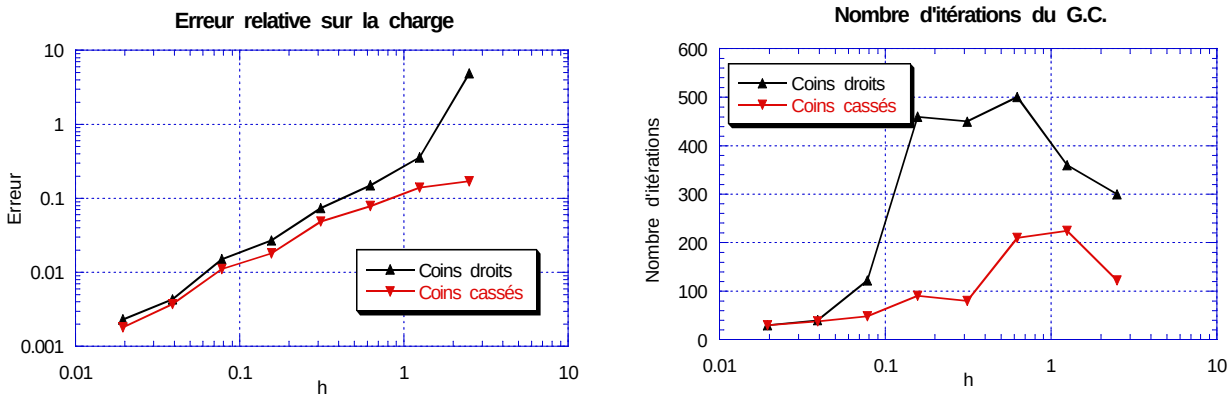


Figure II.29. Approximation (A-GPP)

Pour l'approximation (A-GPP), les résultats sont un peu plus précis, et l'algorithme du gradient conjugué converge nettement mieux (en moins d'itérations), quand on casse les coins.

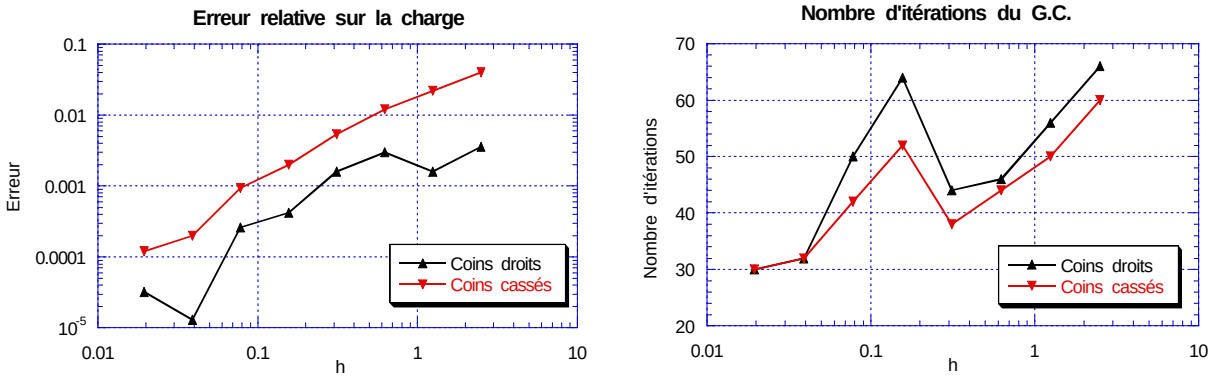


Figure II.30. Approximation (A-Capa)

Par contre pour (A-Capa), les résultats sont nettement moins précis quand on casse les coins, même si l'algorithme du GC converge un peu mieux en nombre d'itérations. Cela confirme que l'approximation (A-Capa) prend très bien en compte les coins !

4.5. CONCLUSION

L'approximation (A-Capa) est sans conteste plus efficace pour le cas d'obstacles conducteurs parfaits, c'est-à-dire où les surfaces des obstacles sont des isopotentielles, que l'approximation initiale (A-GPP). En particulier, le traitement des coins où la charge surfacique devient infinie est très satisfaisant.

De plus, elle permet d'utiliser des maillages ne vérifiant pas la condition de compatibilité sur le rapport du pas du maillage de surface sur le pas de la grille de volume, sans que le choix du maillage de surface, s'il reste raisonnable, n'influe trop sur la précision ou l'efficacité de la résolution (en nombre d'itérations de l'algorithme du gradient conjugué). Ainsi, on peut par exemple utiliser systématiquement le choix "auto" du maillage de surface, c'est-à-dire prendre comme maillage de surface l'intersection de la grille de volume et des conducteurs, choix pour lequel l'approximation (A-GPP) converge mal car la condition inf-sup n'est pas vérifiée. Cela permet un choix facile, et directement extensible à la dimension 3.

5. CONCLUSION

Nous avons proposé dans ce chapitre un enrichissement de l'espace de discrétisation du potentiel par N_S fonctions supplémentaires, non nulles chacune autour d'un élément du maillage de surface, sur une région qui s'appuie sur la grille de volume. Cet enrichissement permet de prendre en compte la discontinuité du gradient du potentiel à travers la surface des conducteurs dans l'approximation du potentiel. Les fonctions du nouvel espace de discrétisation du potentiel sont discontinues, nous avons adapté l'approximation du problème pour tenir compte de ces discontinuités.

Lorsque les surfaces des conducteurs sont orthogonales à la grille, ces fonctions ont la forme de "chapeaux" : elle sont définies sur un rectangle entourant un élément de surface, sont constantes parallèlement à cette surface, et nulles sur les bords du rectangle parallèles à cette surface. Dans ce cas, on peut éliminer les degrés de liberté supplémentaires, et réécrire le problème discret sous une forme proche du système obtenu par l'approximation (A-GPP). Ce nouveau système peut se résoudre de la même façon, en utilisant un solveur de Poisson rapide. Les résultats numériques montrent que sur des exemples en deux dimensions, quel que soit le choix des maillages, l'algorithme de résolution converge mieux, et les résultats sont plus précis avec l'approximation (A-Capa) qu'avec l'approximation (A-GPP). L'approximation (A-Capa) permet de plus une plus grande souplesse dans le choix des maillages : quel que soit le choix des maillages, l'algorithme de résolution converge en peu d'itérations, sans préconditionnement. Nous confirmerons ces propriétés au chapitre 3, par une preuve théorique de la convergence de la solution de (A-Capa).

Enfin, dans le cas de surfaces des conducteurs quelconques, la réécriture du problème discret sous une forme qui se résout rapidement n'est pas possible. Nous avons cependant résolu en pratique un système de la même forme, et les résultats, un peu moins bons que dans le cas de surfaces orthogonales à la grille, sont toujours nettement meilleurs que pour l'approximation (A-GPP).

Chapitre III. Analyse numérique

Les problèmes contenant des contraintes sont souvent résolus en ajoutant une variable duale : le multiplicateur de Lagrange. Ainsi dans la formulation (DF), la dérivée normale du potentiel à travers la surface des conducteurs, qui coïncide avec ce multiplicateur, est considérée comme une variable du problème, et la formulation obtenue est une formulation mixte. Les formulations mixtes et leur approximation par éléments finis, ont été étudiées par Babuska [Ba 71, Ba 73] et Brezzi [Br 74], puis Fortin [Fo 77]. Babuska et Brezzi ont en particulier montré l'existence d'une condition nécessaire, souvent difficile à vérifier, pour que le problème mixte soit bien posé. Cette condition importante, appelée condition inf-sup, ou parfois condition de Babuska-Brezzi, appliquée à la formulation discrète, implique que les espaces de discrétisation du potentiel et du multiplicateur ne peuvent pas être choisis indépendamment. L'attention particulière accordée à cette condition provient de ce que, généralement, pour les choix naturels de ces espaces, elle n'est pas vérifiée.

Dans ce chapitre, nous étudions en dimension 2, les deux approximations de la formulation (*DF*) introduites au chapitre 2. Pour l'approximation (A-GPP), il a été montré ([GiGl 95]) que si les maillages vérifient une condition de compatibilité, alors la solution discrète converge vers la solution réelle. Cependant, nous avons vérifié en pratique que, d'une part cette condition de compatibilité est contraignante sur les structures d'interconnexions, et d'autre part, même lorsque la condition inf-sup est vérifiée, les résultats observés sur la charge ne sont pas suffisamment précis. Après avoir donné les principaux résultats concernant le problème continu et l'approximation (A-GPP), nous montrons donc l'existence, l'unicité et la convergence de la solution discrète obtenue par l'approximation (A-Capa), vers la solution réelle. Nous montrons que l'enrichissement de l'espace de discrétisation du potentiel entraîne la vérification de la condition inf-sup pour tous les choix des maillages, et une réduction de l'erreur d'approximation du potentiel.

1. FORMULATION CONTINUE

Nous réécrivons dans cette section la formulation *(DF)* sous la forme générique des problèmes de point selle, de façon à pouvoir introduire et utiliser les principaux résultats d'existence, d'unicité et d'approximation pour ces problèmes. Dans ce cadre, nous montrons l'existence et l'unicité d'une solution au problème *(DF*), et discutons la régularité de cette solution.

1.1. RAPPEL DU PROBLEME CONTINU ET NOTATIONS

1.1.1 Normes sur les espaces du potentiel et de la charge

Nous rappelons ici les normes usuelles pour quelques espaces de Sobolev, et en particulier les normes dont nous munissons les espaces $X = \left\{ v \in H^1(\Omega);\quad v_{|\Gamma_0} = 0 \right\}$ et $M = H^{-\frac{1}{2}}(\gamma)$, dans lesquels sont définis respectivement le potentiel et la charge.

Pour $u \in H^1(\Omega)$, nous notons

$$\|u\|_{1,\Omega} = \left(\int_\Omega |\nabla u|^2 \, d\Omega + \int_\Omega u^2 \, d\Omega \right)^{1/2}$$

et

$$|u|_{1,\Omega} = \left(\int_\Omega |\nabla u|^2 \, d\Omega \right)^{1/2}.$$

Il est bien connu que grâce à l'inégalité de Poincaré, on a

$$\exists C(\Omega) \text{ tel que } \forall u \in X, \ \|u\|_{1,\Omega} \le C(\Omega)|u|_{1,\Omega},$$

et $|.|_{1,\Omega}$ est une norme sur X. L'espace X muni de la norme $\|.\|_X = |.|_{1,\Omega}$ est un espace de Hilbert. Nous notons de plus $(.,.)_X$ le produit scalaire dans X, défini par

$$(u,v)_X = \int_\Omega \nabla u . \nabla v \, d\Omega, \quad \forall (u,v) \in X \ .$$

Nous munissons l'espace $H^{\frac{1}{2}}(\gamma)$, espace des traces sur γ d'éléments de $H^1(\omega)$, de la norme

$$\|v\|_{\frac{1}{2},\gamma} = \inf_{u \in H^1(\omega),\, u_{|\gamma} = v} \|u\|_{1,\omega}.$$

En dimension *n*, une norme sur $H^{1/2}(\gamma)$ équivalente à $\|.\|_{\frac{1}{2},\gamma}$ est la norme $\|.\|^{\sim}_{\frac{1}{2},\gamma}$ définie par

$$\|u\|^{\sim}_{\frac{1}{2},\gamma} = \left[\|u\|^2_{0,\gamma} + \int_\gamma \int_\gamma \frac{|u(x)-u(y)|^2}{|x-y|^n} \, dx \, dy \right]^{1/2}. \qquad (\text{III.1})$$

Nous désignons par $M = H^{-\frac{1}{2}}(\gamma)$ l'espace dual de $H^{\frac{1}{2}}(\gamma)$, et notons $<.,.>_\gamma$ le produit de dualité entre $H^{\frac{1}{2}}(\gamma)$ et M. Nous munissons enfin M de la norme duale

$$\|\mu\|_M = \|\mu\|_{-\frac{1}{2},\gamma} = \sup_{v \in H^{1/2}(\gamma)} \frac{<v,\mu>_\gamma}{\|v\|_{\frac{1}{2},\gamma}}.$$

Munis des normes définies ici, les espaces X et M sont des espaces de Hilbert.

1.1.2 Le problème de point selle

Nous rappelons que l'on note a la forme bilinéaire symétrique sur $X \times X$, définie par

$$a(u,v) = \sum_{d=1}^{N_D} \varepsilon_d \int_{\Omega_d} \nabla u . \nabla v \, d\Omega, \quad \forall (u,v) \in X \times X \ .$$

On a, pour tout $(u,v) \in X \times X$,

$$(\min_{1\le l\le N_D} \varepsilon_l)\ (u,v)_X \le a(u,v) \le (\max_{1\le l\le N_D} \varepsilon_l)\ (u,v)_X , \qquad (\text{III.2})$$

dont on peut déduire, grâce à l'inégalité de Cauchy-Schwarz, que a est continue. Notons α la norme de a.

On définit enfin la propriété de coercivité par

Définition III.1 *La forme bilinéaire a est dite coercive sur un sous-espace V de X si et seulement si*

$$\exists \gamma_V > 0, \quad \forall v \in V, \quad a(v,v) \ge \gamma_V \|v\|_X^2 .$$

De l'inégalité de gauche de (III.2), on déduit que a est coercive sur tout X, avec une constante de coercivité $\gamma = (\min_{1\le l\le N_D} \varepsilon_l)$.

Rappelons également que l'on note b la forme bilinéaire sur $X \times M$, définie par

$$b(u,\mu) = -<u,\mu>_\gamma , \quad \forall (u,\mu) \in X \times M .$$

Comme

$$b(u,\mu) \le \|u\|_{\frac{1}{2},\gamma} \|\mu\|_M \le C\|u\|_X \|\mu\|_M , \quad \forall (u,\mu) \in X \times M ,$$

elle est de plus continue, de norme notée β. La forme bilinéaire continue b définit donc un opérateur linéaire continu B, de X dans M', par

$$b(u,\mu) = <Bu,\mu>_\gamma , \quad \forall (u,\mu) \in X \times M .$$

Notons $\ker(B)$ le noyau de l'opérateur B,

$$\ker(B) = \{v \in X; \quad b(v,\mu) = 0, \quad \forall \mu \in M\}.$$

Le système domaine fictif *(DF)* se réécrit sous la forme mixte

$$\begin{cases} \text{Trouver } (u,\lambda) \in X \times M \text{ tels que} \\ a(u,v) + b(v,\lambda) = 0, \quad \forall v \in X, \\ b(u,\mu) = -<g,\mu>_\gamma , \quad \forall \mu \in M . \end{cases} \qquad (\text{III.3})$$

1.2. PROBLEME CONTINU : EXISTENCE D'UNE SOLUTION UNIQUE

Nous citons d'abord des résultats généraux sur les problèmes de point selle, dus à Brezzi [Br 74], puis nous vérifions que les hypothèses de ces résultats sont bien vérifiées dans notre exemple.

Une condition nécessaire et suffisante pour l'existence et l'unicité d'une solution au problème (III.3) est donnée par le théorème suivant :

Théorème III.1. *Soient X et M des espaces de Hilbert, a et b des formes bilinéaires continues respectivement sur* $X \times X$ *et* $X \times M$, *de normes* α et β, *et* $f \in X'$, $g \in M'$. *Soit*

$$Z = \{v \in X;\ b(v,\mu) = 0,\ \forall \mu \in M\} = \ker(B).$$

Si a est coercive sur Z, *et si*

$$\exists k > 0, \quad \sup_{v \in X - \{0\}} \frac{b(v,\mu)}{\|v\|_X} \geq k \|\mu\|_M, \quad \forall \mu \in M, \tag{III.4}$$

alors il existe une solution unique au problème

$$\begin{cases} \text{Trouver } (u,\lambda) \in X \times M \text{ tels que} \\ a(u,v) + b(v,\lambda) = \langle f, v \rangle, \ \forall v \in X \\ b(u,\mu) = \langle g, \mu \rangle, \quad \forall \mu \in M \end{cases} \tag{III.5}$$

La condition (III.4) est appelée condition inf-sup. Le lemme suivant traduit cette condition :

Lemme III.1. *La forme bilinéaire b vérifie la condition inf-sup* (III.4) *si et seulement si l'opérateur* B *associé est surjectif de* X *dans* M'.

Sous les hypothèses du Théorème III.1, on peut de plus majorer la solution du problème (III.5) :

Théorème III.2 *Si a est coercive sur* Z, *de constante de coercivité* γ, *et si la condition inf-sup* (III.4) *est vérifiée, la solution* (u,λ) *du problème* (III.5) *vérifie les deux inégalités*

$$\|u\|_X \leq \gamma^{-1} \|f\|_{X'} + k^{-1}(1 + \alpha\gamma^{-1}) \|g\|_{M'},$$
$$\|\lambda\|_M \leq k^{-1}(1 + \alpha\gamma^{-1})(\|f\|_{X'} + \alpha k^{-1} \|g\|_{M'}),$$

ou encore

$$\|u\|_X + \|\lambda\|_M \leq M(\alpha,\gamma,k)(\|f\|_{X'} + \|g\|_{M'}),$$

avec $M(\alpha,\gamma,k) = \max\left(\gamma^{-1} + k^{-1}(1+\alpha\gamma^{-1}), k^{-1}(1+\alpha k^{-1})(1+\alpha\gamma^{-1})\right)$.

Nous utilisons maintenant ces résultats pour montrer la proposition suivante :

Proposition III.1 *Il existe une solution unique* $(u,\lambda) \in X \times M$ *au problème* (DF).

Preuve : Il suffit de vérifier que les hypothèses du Théorème III.1 sont vérifiées. L'opérateur $(-B)$ est l'opérateur de trace d'une fonction de X sur la frontière γ, et est donc une application linéaire continue surjective de X dans $H^{\frac{1}{2}}(\gamma) = M'$. Donc, d'après le Lemme III.1, la forme bilinéaire continue b vérifie la condition inf-sup (III.4). Le noyau de B se réécrit

$$Z = \{ v \in H^1(\Omega) \mid \ v_{|\gamma} = 0,\ v_{|\Gamma_0} = 0 \} \subset X.$$

La forme bilinéaire a étant coercive sur X, elle l'est également sur $Z \subset X$.

?

1.3. REGULARITE DES SOLUTIONS

Sur chaque zone diélectrique homogène ω_d, $1 \le d \le N_D$, le potentiel est solution de l'équation de Laplace avec des conditions limites constantes sur les conducteurs.

- Si ω_d est un ouvert borné régulier, le potentiel étant fixé égal à une constante à la surface de chaque conducteur, on a les résultats de régularité

$$\begin{cases} u \in H^2(\omega_d), \\ \lambda \in H^{1/2}(\gamma). \end{cases} \qquad (\text{III.6})$$

- Par contre, si γ est un polygone, tel que le domaine diélectrique ω_d possède des angles rentrants, le potentiel et la charge ne sont pas réguliers autour de ces angles. En particulier, on a $\lambda \in L^2(\gamma)$ et $\lambda \in H^{\frac{1}{2}}(\gamma_j)$, pour tout segment de frontière γ_j ne traversant pas une interface entre deux zones diélectriques.

Les estimations d'erreur pour l'approximation (A-GPP) ne nécessitent pas une grande régularité du potentiel et de la charge, dans ce cas nous modélisons les surfaces des conducteurs par des polygones.

En revanche, il est plus simple d'estimer l'erreur pour l'approximation (A-Capa) en ayant les propriétés de régularité (III.6). On considère donc qu'en pratique les coins sont légèrement arrondis, et on a les propriétés (III.6). Cette hypothèse est d'ailleurs réaliste. Cependant nous considérerons, pour les calculs réalisés par la suite, la frontière comme polygonale. Le fait d'approcher la surface des conducteurs par un polygone introduit une légère erreur de consistance, mais dont nous ne tiendrons pas compte ici.

Sur chaque couche Ω_d :

Si la charge λ est non nulle, on a au mieux

$$u \in H^{\frac{3}{2}-\delta}(\Omega_d), \text{ avec } \delta > 0 .$$

1.4. APPROXIMATION

Considérons sur le rectangle $\overline{\Omega}$, une famille de grilles G_h formées de rectangles K^i, de côté Δx constant, et Δz^i variable. Nous notons *h* le maximum des longueurs des côtés. Soit de plus S_η un maillage de la surface γ des conducteurs, et η le maximum des longueurs des segments de S_η. Le maillage de surface est choisi de façon à ce qu'un élément de surface ne traverse jamais une interface entre deux diélectriques.

Dans la suite du chapitre, nous allons étudier les approximations (A-GPP) et (A-Capa) du problème, qui ont été définies au chapitre 2 sur ces deux maillages.

2. APPROXIMATION (A-GPP)

Nous présentons dans ce paragraphe des résultats établis dans [GiGl 95], qui montrent, sous réserve d'une condition de compatibilité entre les pas des maillages, l'existence et l'unicité d'une solution au problème discret proposé dans [GlPaPé 94], et majorent la distance entre la solution approchée et la solution réelle.

2.1. PROBLEME DISCRET

Rappelons tout d'abord le problème discret : les espaces de discrétisation du potentiel et de la charge utilisés pour obtenir l'approximation (A-GPP) sont

$$\begin{aligned} X_h &= \left\{ v_h \in C^0(\overline{\Omega}),\ \text{tel que } v_h = 0 \text{ sur } \Gamma_0, \text{ et } \forall K^i \in G_h,\ v_{h|K^i} \in Q_1 \right\} \subset X, \\ M_\eta &= \left\{ \mu_\eta \in L^2(\gamma),\ \text{tel que } \forall \gamma_k \in S_\eta,\ \mu_{\eta|\gamma_k} \in P_0 \right\} \subset M. \end{aligned} \qquad \text{(III.7)}$$

Les espaces d'approximation du potentiel et de la charge étant inclus dans les espaces continus, la formulation discrète qui découle naturellement est

$$(DF)_{h,\eta} \quad \begin{cases} \text{Trouver } (u_h, \lambda_\eta) \in X_h \times M_\eta \text{ tels que} \\ a(u_h, v_h) + b(v_h, \lambda_\eta) = 0, \quad \forall v_h \in X_h, \\ b(u_h, \mu_\eta) = - < g, \mu_\eta >_\gamma, \quad \forall \mu_\eta \in M_\eta. \end{cases}$$

La forme bilinéaire continue b définit un opérateur linéaire continu $B_{h,\eta}$, de X_h dans M'_η, par

$$b(u_h, \mu_\eta) = < B_{h,\eta} u_h, \mu_\eta >_\gamma, \quad \forall (u_h, \mu_\eta) \in X_h \times M_\eta,$$

ainsi qu'un opérateur linéaire continu $B^*_{h,\eta}$ de M_η dans X'_h par

$$b(u_h, \mu_\eta) = < u_h, B^*_{h,\eta} \mu_\eta >_\gamma, \quad \forall (u_h, \mu_\eta) \in X_h \times M_\eta.$$

2.2. EXISTENCE ET CONVERGENCE DE LA SOLUTION DISCRETE

Nous présentons d'abord des résultats généraux sur l'approximation de problèmes mixtes (voir [Br 74]), puis les appliquons à l'approximation de (*DF*).

2.2.1 Résultats généraux

L'existence et l'unicité d'une solution au problème approché $(DF)_{h,\eta}$, ainsi que la convergence de cette solution vers la solution continue, sont données par les théorèmes suivants (voir [Br 74]) :

Théorème III.3. *Soient X_h et M_η deux sous-espaces fermés de X et M respectivement. On considère le problème*

$$\begin{cases} \text{Trouver } (u_h,\lambda_\eta) \text{ dans } X_h\times M_\eta \text{ tels que} \\ a(u_h,v_h)+b(v_h,\lambda_\eta)=\langle f,v\rangle, \quad \forall v_h\in X_h, \\ b(u_h,\mu_\eta)=<g,\mu_\eta>, \quad \forall \mu_\eta\in M_\eta. \end{cases} \qquad (\text{III.8})$$

On définit $Z_h=\left\{v_h \middle| v_h\in X_h,\ \ b(v_h,\lambda_\eta)=0,\ \forall\lambda_\eta\in M_\eta\right\}$. *Si* a *est coercive sur* Z_h, *de constante de coercivité* γ_h, *et s'il existe une constante positive* $k_{h,\eta}$ *telle que*

$$\underset{v_h\in X_h-\{0\}}{Sup}\frac{b(v_h,\lambda_\eta)}{\|v_h\|_X}\geq k_{h,\eta}\|\lambda_\eta\|_M, \quad \forall\lambda_\eta\in M_\eta, \qquad (\text{III.9})$$

alors le problème approché (III.8) *admet une solution unique* $(u_h,\lambda_\eta)\in X_h\times M_\eta$.

Ce théorème se déduit directement du Théorème III.1. La condition (III.9), qui est le pendant de la condition inf-sup pour les espaces discrets, est appelée condition inf-sup discrète.

Théorème III.4 *On suppose que* a *est coercive sur* Z *et sur* Z_h, *et que les conditions inf-sup continue* (III.4), *et discrète* (III.9) *sont vérifiées. Soit* (u,λ) *la solution du problème continu* (III.5), *et* (u_h,λ_η) *la solution du problème discret* (III.8). *Alors on a les majorations :*

$$\begin{cases} \|u-u_h\|_X \leq \left(1+\gamma_h^{-1}\alpha+k_{h,\eta}^{-1}(1+\alpha\gamma_h^{-1})\beta\right)\inf\limits_{v_h\in X_h}\|u-v_h\|_X+\gamma_h^{-1}\beta\inf\limits_{\mu_\eta\in M_\eta}\|\lambda-\mu_\eta\|_M \\ \|\lambda-\lambda_\eta\|_M \leq k_{h,\eta}^{-1}\alpha\,(1+\alpha\gamma_h^{-1})(1+k_{h,\eta}^{-1}\beta)\inf\limits_{v_h\in X_h}\|u-v_h\|_X+\left(1+k_{h,\eta}^{-1}\beta(1+\alpha\gamma_h^{-1})\right)\inf\limits_{\mu_\eta\in M_\eta}\|\lambda-\mu_\eta\|_M, \end{cases}$$

ou encore, en regroupant ces deux estimations sous une forme plus condensée,

$$\|u-u_h\|_X+\|\lambda-\lambda_\eta\|_M\leq\sigma_{h,\eta}\left(\inf_{v_h\in X_h}\|u-v_h\|_X+\inf_{\mu_\eta\in M_\eta}\|\lambda-\mu_\eta\|_M\right), \qquad (\text{III.10})$$

où $\sigma_{h,\eta}=\left(1+M(\alpha,\gamma_h,k_{h,\eta})(\alpha+\beta)\right)$.

Ce théorème est obtenu grâce au Théorème III.2 appliqué au problème discret.

La majoration (III.10) n'assure pas forcément une bonne convergence de la solution approchée vers la solution réelle. En effet, elle dépend du comportement de γ_h et $k_{h,\eta}$ lorsque h et η tendent vers zéro. Le résultat du Théorème III.4 est plus utilisable sous la forme suivante :

Théorème III.5 *Supposons que les hypothèses du Théorème III.4 sont vérifiées, et qu'il existe de plus deux constantes* $\gamma_0>0$ *et* $k_0>0$, *telles que a est coercive sur* Z_h, *de constante de coercivité* γ_h, $\gamma_h\geq\gamma_0$, *et telles que la condition inf-sup discrète* (III.9) *est vérifiée avec* $k_{h,\eta}\geq k_0$. *Alors on a*

$$\|u-u_h\|_X+\|\lambda-\lambda_\eta\|_M\leq\sigma\left(\inf_{v_h\in X_h}\|u-v_h\|_X+\inf_{\mu_\eta\in M_\eta}\|\lambda-\mu_\eta\|_M\right), \qquad (\text{III.11})$$

où $\sigma=\left(1+M(\alpha,\gamma_0,k_0)(\alpha+\beta)\right)$ *est indépendante de h et de* h.

Définition III.2 *La condition inf-sup discrète* (III.9) *vérifiée avec* $k_{h,\eta} \geq k_0 > 0$ *est appelée condition inf-sup uniforme ou condition de Babuska-Brezzi.*

2.2.2 Application à l'approximation (A-GPP)

Dans notre cas, *a* étant coercive sur tout X , *a* est coercive sur $Z_h \subset X$, avec une constante $\gamma > 0$ indépendante de *h*. La condition qui reste à vérifier pour assurer l'existence et l'unicité d'une solution au problème discret, est donc la condition inf-sup discrète. Cette condition traduit la surjectivité de $B_{h,\eta}$, c'est-à-dire est vérifiée si et seulement si $\ker(B_{h,\eta}^*) = \{0\}$, où $\ker(B_{h,\eta}^*)$ est défini par

$$\ker(B_{h,\eta}^*) = \left\{ q_\eta \in M_\eta, \quad b(v_h, q_\eta) = 0 \quad \forall v_h \in X_h \right\}.$$

Cette condition se traduit ici par une condition de compatibilité entre les deux maillages, et plus exactement entre les pas des deux maillages : le pas du maillage de surface ne doit pas être trop petit par rapport au pas de la grille de volume. En effet, si pour toute fonction de base φ_k définie sur le segment γ_k du maillage de surface, on peut trouver une fonction de base Φ_l, correspondant au nœud s_l de la grille, telle que

$$\begin{cases} \text{mes}_\gamma(\text{supp } \varphi_k \cap \text{supp } \Phi_l) > 0 \\ \text{supp } \Phi_l \cap \gamma \subset \text{supp } \varphi_k \end{cases}$$

alors $\ker(B_{h,\eta}^*) = \{0\}$. En dimension 2, on constate en particulier (cf. Figure III.1) que si

$$|\gamma_k| \geq 3\sqrt{2}\, h, \quad \forall k = 1, 2, ..., N_S ,$$

alors cette condition est vérifiée.

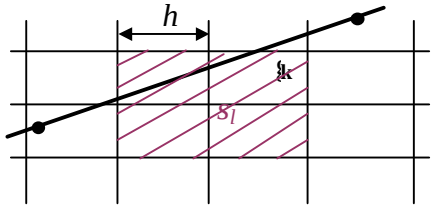


Figure III.1. Cas où $\ker(B_{h,\eta}^*) = \{0\}$

Pour assurer de plus une bonne convergence de la solution approchée vers la solution réelle, il est nécessaire que la condition inf-sup uniforme soit vérifiée. Girault et Glowinski [GiGl 95] montrent le théorème suivant, dans le cas très voisin d'éléments finis P_0 sur un maillage de surface, et P_1 sur une grille de triangles du volume, où *h* est la longueur de la diagonale des triangles (donc vaut notre $\sqrt{2}\, h$) :

Théorème III.6 *Supposons que tout segment de S_η est de longueur supérieure ou égale à 3h, et que $\eta \le Lh$, L fixé. Alors la condition inf-sup uniforme est vérifiée.*

Remarques :

- La minoration de la taille des segments de S_η par $3h$ est une condition suffisante mais non nécessaire pour que la condition inf-sup uniforme soit vérifiée. On observe en particulier de bons résultats en pratique pour une minoration par $\frac{3}{2}h$.

- La démonstration du théorème doit pouvoir s'étendre à l'approximation (A-GPP), c'est-à-dire au cas d'éléments finis P_0 sur le maillage de surface, et Q_1 sur la grille de volume.

Sous les hypothèses du Théorème III.6, la distance entre la solution (u_h, λ_η) du problème discret (III.8) et la solution (u, λ) du problème continu (III.5), est ainsi majorée par l'inégalité

$$\|u-u_h\|_X + \|\lambda-\lambda_\eta\|_M \le \sigma\left(\inf_{v_h \in X_h} \|u-v_h\|_X + \inf_{\mu_\eta \in M_\eta} \|\lambda-\mu_\eta\|_M \right).$$

Pour X_h et M_η définis par (III.7), et en utilisant les propriétés de régularité de u et λ, on peut estimer ce second membre (voir [GiGl 95]),

$$\inf_{v_h \in X_h} \|u-v_h\|_X \le C\, h^s \|u\|_{s+1,\Omega} \ , \ s = \frac{1}{2} - \varepsilon,\ \varepsilon > 0 \,,$$

et

$$\begin{aligned} \inf_{\mu_\eta \in M_\eta} \|\lambda-\mu_\eta\|_M &\le C\sqrt{\eta}\, \|\lambda\|_{0,\gamma} \\ &\le C\,\eta \sqrt{\sum_i \|\lambda\|^2_{\frac{1}{2},\gamma_i}} \end{aligned}$$

et finalement, en regroupant ces deux estimations, on obtient

$$\|u-u_h\|_X + \|\lambda-\lambda_\eta\|_M \le C_1 h^s \|u\|_{s+1,\Omega} + C_2 \eta \sqrt{\sum_i \|\lambda\|^2_{\frac{1}{2},\gamma_i}} \quad \text{pour } s = \frac{1}{2} - \varepsilon,\ \varepsilon > 0 \qquad \text{(III.12)}$$

Cette majoration de l'erreur commise, est difficile à relier à ce que nous avons observé en pratique au chapitre 2 : les résultats présentés concernaient l'erreur sur la charge totale, et non l'erreur estimée ici.

2.3. CONCLUSION

Nous avons testé cette méthode en dimension 2. L'algorithme de résolution converge lorsque la grille n'est pas trop raffinée par rapport au maillage de surface. Cette condition, qui traduit la condition inf-sup, est une contrainte pour les calculs : pour que l'algorithme de résolution converge, la géométrie des obstacles ne doit pas être trop irrégulière par rapport à la grille de volume, tout segment de S_η devant être de longueur supérieure au pas de la grille. Sur les structures d'interconnexions, qui peuvent comprendre des lignes longues et de petite

section, cette condition est handicapante, elle impose de prendre une grille de volume fine pour que la condition inf-sup soit vérifiée et que le système soit inversible. Ainsi les coûts de calcul sont élevés, même si l'on ne désire pas une très bonne précision.

D'autre part, dans le chapitre 2 nous avons observé, sur l'exemple en dimension 2 d'un conducteur rectangulaire, une convergence linéaire de la charge totale en fonction de la grille. Mais la constante de cette convergence est élevée, et il faut prendre une grille de volume assez raffinée pour obtenir une précision satisfaisante sur la charge, même lorsque le niveau de détail des conducteurs n'est pas très fin.

Nous étudions à présent l'approximation stabilisée (A-Capa). Tout d'abord, dans la section 3, nous faisons le parallèle entre la construction d'(A-Capa) et certaines méthodes de stabilisation de formulations mixtes.

3. PARALLELE AVEC DES METHODES EXISTANTES DE STABILISATION DE PROBLEMES MIXTES

Nous ne cherchons pas dans cette section à faire une étude complète des moyens employés pour stabiliser des méthodes mixtes, mais simplement à rapprocher l'approximation (A-Capa) de méthodes existantes de stabilisation.

Le principe des méthodes mixtes est de réécrire des problèmes en utilisant des approximations éléments finis indépendantes pour des variables dépendantes, comme par exemple une variable et son gradient. Un des avantages possibles est que l'on peut obtenir une meilleure précision sur le calcul de la variable (le gradient par exemple) ainsi introduite que par dérivation de la variable primale. Lorsque ces deux variables sont volumiques, un choix naturel est de discrétiser ces variables sur un même maillage, donnant ainsi des éléments finis mixtes. Mais Babuska [Ba 71, Ba 73] et Brezzi [Br 74] ont montré l'existence d'une condition nécessaire, souvent difficile à vérifier, pour que le problème discret admette une solution unique, qui converge vers la solution réelle. Cette condition importante, appelée condition inf-sup, implique que les espaces de discrétisation du potentiel et du multiplicateur ne peuvent pas être choisis indépendamment. Et généralement, pour les choix naturels de ces espaces, elle n'est pas vérifiée.

Beaucoup de méthodes ont été proposées sur différents problèmes pour tâcher de contourner cette condition, et de "stabiliser" certaines approximations. Le mot "stable" signifie en pratique que, lorsque le pas des maillages tend vers zéro, la distance entre la solution approchée et la solution réelle, doit tendre vers zéro de la même façon que l'erreur d'approximation due au choix des espaces, plus éventuellement l'erreur de consistance par rapport au problème continu. Il y a deux stratégies possibles pour obtenir une discrétisation stable : soit choisir des espaces qui satisfont la condition inf-sup, soit modifier la formulation discrète, de façon à pouvoir se passer de cette condition. En fait, un certain nombre de stabilisations peuvent être interprétées des deux façons.

Nous allons considérer deux exemples : le problème de Stokes, qui a inspiré un grand nombre de stabilisations, mais n'est pas très proche de notre problème, et une méthode pour la décomposition de domaines sur le problème de Poisson avec conditions aux limites de Dirichlet.

Premier exemple : problème de Stokes :

- Présentons d'abord le premier type de méthodes, basées sur une modification de la formulation discrète.

Des méthodes de pénalisation sont parfois utilisées pour rendre stable un problème discret, lorsque les espaces d'approximation ne vérifient pas la condition inf-sup. Par exemple, pour le problème pénalisé

$$\begin{cases} a(u_h, v_h) + b(v_h, \lambda_h) = < f, v_h >, \quad \forall v_h, \\ b(u_h, \mu_h) - \delta((\lambda_h, \mu_h)) = < g, \mu_h >, \quad \forall \mu_h, \end{cases}$$

où δ est une constante positive, on peut montrer l'existence et la convergence de la solution approchée par des techniques standard, sans utiliser la condition inf-sup. L'algorithme du Lagrangien augmenté permet de résoudre ces problèmes.

Des méthodes proches, mais meilleures en pratique, sont les méthodes basée sur des formulations variationnelles augmentées, appelées aussi méthodes de moindre carrés de Galerkin. Elles ont été introduites pour le problème de Stokes réécrit sous une formulation mixte par Hugues, Franca et Balestra [HuFrBa 86], puis améliorées dans [HuFr 87]. Ces méthodes peuvent également s'appliquer à d'autres problèmes mixtes. Il s'agit d'utiliser le fait que l'on peut modifier le Lagrangien associé au problème de point selle, en lui ajoutant le carré d'une équation d'Euler, multiplié par une constante, sans modifier le point selle. Ceci est effectué sur le problème discret : les termes ajoutés sur chaque élément du maillage, permettent en pratique de relâcher la condition de divergence nulle sur la variable primale. La formulation est ainsi stabilisée par des termes qui ressemblent à des termes de pénalisation, sans que la condition inf-sup sur les espaces soit nécessairement vérifiée. Une première façon de stabiliser la formulation en relâchant la condition de divergence nulle avait déjà été proposée dans [BrPi 84], mais introduisait une erreur supplémentaire de consistance. Dans [HuFrBa 86], la consistance de l'approximation n'est pas affectée, ce n'est pas une méthode de pénalisation.

- D'autre part, de par la forme de la condition inf-sup uniforme, lorsque la condition inf-sup continue est vérifiée, on peut toujours obtenir la condition uniforme en enrichissant l'espace de discrétisation de la variable primale. Il existe diverses façons d'enrichir cet espace. Un problème est de ne pas obtenir un coût supplémentaire trop important en ajoutant des degrés de liberté, car même si l'on améliore l'approximation de la variable primale, l'ordre de convergence sera toujours limité par l'ordre d'approximation de la variable duale.

L'addition par exemple d'un degré de liberté par élément, grâce à une fonction « bulle », c'est-à-dire une fonction de forme nulle sur les bords de l'élément, peut rendre stable des méthodes mixtes, avec un coût supplémentaire faible. Cette idée a en particulier donné l'élément MINI de Arnold, Brezzi et Fortin [ArBrFo 84].

D'autres méthodes existent pour enrichir l'espace de discrétisation de la variable primale et obtenir des éléments stables. Mais nous nous restreignons à ce qui, à nos yeux, ressemble le plus à notre problème.

- Il a été montré depuis, ([Pi 88]), que des méthodes de moindre carrés de Galerkin, utilisées pour stabiliser des formulation mixtes utilisant des éléments finis non stables, sont

équivalentes à l'ajout de fonctions bulles à l'espace de discrétisation de la variable primale dans la méthode de Galerkin classique, puis l'élimination des degrés de liberté supplémentaires ainsi introduits. Dans [BaBrFr 93], le concept de "fonctions bulles virtuelles" est généralisé : c'est-à-dire que lorsque l'on ajoute des fonctions bulles dans l'espace de discrétisation, on n'est pas intéressé par la forme des fonctions, mais par le terme de perturbation qu'elles produisent après élimination des degrés de liberté supplémentaires.

Deuxième exemple : décomposition de domaines pour le problème de Poisson avec conditions aux limites de Dirichlet

Un problème plus proche du nôtre, est traité dans [BrFrMaRu 98]. Nous venons d'avoir connaissance de cet article. Il s'agit de résoudre le problème

$$-\Delta u = f \text{ dans } \Omega, \quad u = g \text{ sur } \partial\Omega,$$

par une méthode de décomposition en sous-domaines, et de recoller la solution de chaque côté de l'interface en utilisant des multiplicateurs de Lagrange. Des éléments finis P_1 sur un maillage de triangles sont utilisés pour discrétiser u, et des fonctions constantes par morceaux sur des segments de surface sont utilisés pour discrétiser le multiplicateur. Les auteurs de [BrFrMaRu 98] définissent un maillage uniforme de l'interface entre deux sous-domaines, sur lequel, pour chaque sous-domaine, des multiplicateurs de Lagrange sont définis pour recoller la fonction u. De façon à ce que la condition inf-sup soit vérifiée de chaque côté de l'interface, tout en gardant une grande liberté dans le choix des maillages, des fonctions bulles sont ajoutées dans l'espace de discrétisation de u et des fonctions tests associées, sur les triangles ayant un côté en commun avec l'interface. Les fonctions bulles ainsi que les multiplicateurs de Lagrange peuvent ensuite être éliminés par "condensation statique". Comme dans les méthodes précédentes, la forme de ces fonctions "bulles" intéresse peu, seul est important le terme de perturbation qu'elles produisent.

Calcul des capacités d'un ensemble de conducteurs :

Dans notre cas, nous enrichissons de même l'espace de discrétisation du potentiel, par des fonctions volumiques définies chacune autour d'un élément de surface. Nous montrerons dans la section 4 que la condition inf-sup est ainsi vérifiée. De plus, lorsque les surfaces des conducteurs sont orthogonales à la grille, et lorsque la grille est suffisamment fine par rapport au niveau de détail des surfaces, nous pouvons expliciter les degrés de liberté supplémentaires et réécrire le problème discret comme un problème ressemblant à une pénalisation du problème (A-GPP),

$$\begin{cases} \textit{Trouver } (u_h, \lambda_\eta) \textit{ dans } X_h \times M_\eta \textit{ tels que} \\ a(u_h, v_h) + b(v_h, \lambda_\eta) = 0, \quad \forall v_h \in X_h, \\ b(u_h, \mu_\eta) + c_\eta(\lambda_\eta, \mu_\eta) = -<g, \mu_\eta>, \quad \forall \mu_\eta \in M_\eta. \end{cases} \qquad (\text{III.13})$$

Ce système a une forme proche également de celle obtenue pour le problème de Stokes par ajout puis suppression de fonctions bulles.

Cependant notre méthode est différente par plusieurs aspects des méthodes présentées ci-dessus. D'une part, nos fonctions supplémentaires ne sont pas réellement des fonctions "bulles", au le sens que leur donne [BaBrFr 93] par exemple : en particulier l'approximation qui découle de l'ajout de ces fonctions est non conforme. Mais surtout, contrairement aux cas précédents, nous sommes intéressés par la forme des fonctions supplémentaires, et non seulement par le terme qu'elles produisent : en effet, en même temps qu'elles stabilisent l'approximation, elles permettent d'améliorer l'approximation du potentiel en apportant une discontinuité du gradient que l'on n'a pas autrement lorsque la surface des conducteurs ne coïncide pas avec la grille. Le potentiel sur les rectangles de la grille coupés par la surface des conducteurs, est ainsi approché par un élément composite, qui donne la possibilité d'introduire un saut du gradient du potentiel à l'intérieur du rectangle.

De plus, la suppression des degrés de liberté supplémentaires ne se fait pas de la même façon que dans [BrFrMaRu 98], l'objectif n'est pas le même. Dans [BrFrMaRu 98], le maillage n'est pas une grille régulière; on supprime les degrés de liberté supplémentaires et les multiplicateurs de Lagrange, et on obtient une formulation modifiée pour le potentiel. Ici, nous supprimons uniquement les degrés de liberté supplémentaires, mais obtenons un système qui peut se résoudre en utilisant des méthodes rapides.

Surfaces des conducteurs quelconques :

L'approximation que nous avons introduite n'explique pas pourquoi, dans le cas de conducteurs de surfaces quelconques, le système programmé, de la forme de (III.13), donne en pratique de bons résultats. En effet, dans le cas général, ce système ne correspond pas à l'ajout puis à la suppression de degrés de liberté sur les fonctions supplémentaires que nous avons définies.

L'idée de fonctions "virtuelles", au sens donné dans [BaBrFr 93] par exemple, est tentante pour expliquer ce résultat. Nous avons d'ailleurs essayé, mais sans succès, de définir dans le cas général, des fonctions supplémentaires qui vérifient les propriétés II.3 et II.4, et permettant de réécrire le système discret sous la forme programmée.

Cependant, nous avons observé en pratique que dans le cas général, les résultats sont améliorés par rapport à l'approximation (A-GPP), mais pas autant que lorsque les surfaces des conducteurs sont orthogonales aux mailles de la grille. Nous proposons une autre piste permettant d'expliquer ces résultats, mais que nous n'avons pas eu le temps d'approfondir : dans le paragraphe 3.6 du chapitre 2, nous décomposons le potentiel sur la formulation continue, et discrétisons cette formulation après réécriture. La formulation discrète obtenue est proche du problème programmé, et coïncide avec ce problème lorsque les surfaces des conducteurs sont orthogonales aux mailles de la grille. Mais nous ne l'avons pas testée et ne savons pas si les résultats sont proches, et éventuellement meilleurs dans le cas de surfaces de conducteurs non orthogonales à la grille.

4. APPROXIMATION (A-CAPA) POUR DES SURFACES ORTHOGONALES A LA GRILLE

Dans cette section, nous étudions, en dimension 2 et pour des surfaces de conducteurs orthogonales à la grille, l'approximation (A-Capa). Cette approximation (A-Capa) consiste à enrichir par rapport à l'approximation (A-GPP) l'espace de discrétisation du potentiel par des

fonctions à dérivée discontinue à travers la surface des conducteurs. Nous avons constaté en pratique, que la précision des résultats est très nettement améliorée, et que de plus, le système est stabilisé, dans le sens où la condition inf-sup est vérifiée quels que soient les choix des pas des deux maillages. Nous avons observé en pratique, sur l'exemple contenant un conducteur rectangulaire, que comme pour l'approximation (A-GPP), la charge totale calculée converge linéairement vers la charge réelle lorsque le pas des maillages tend vers zéro. Mais les résultats sont nettement plus précis, quels que soient les maillages, que pour (A-GPP).

Nous ne faisons pas une analyse poussée de l'ordre de convergence de la solution approchée : nous montrons que la condition inf-sup est vérifiée pour tous les choix de maillages, et nous montrons que l'erreur de consistance due aux discontinuités des fonctions approchant le potentiel, et l'erreur d'approximation due aux choix des espaces de discrétisation, tendent vers zéro lorsque les pas des maillages tendent vers zéro. Et en utilisant la théorie classique pour les méthodes mixtes, nous en déduisons une majoration de la distance entre la solution approchée et la solution exacte.

4.1. PROBLEME DISCRET

Nous considérons l'approximation du problème (*DF*) dans $\overline{X}_{h,\eta} \times M_\eta$, où

$$\overline{X}_{h,\eta} = X_h + L\left(\Psi_1, \Psi_2, ..., \Psi_{N_S}\right).$$

Nous nous restreignons au cas où le système obtenu par cette discrétisation se réécrit sous la forme programmée, c'est-à-dire nous faisons les deux hypothèses suivantes, introduites dans le chapitre 2 :

Hypothèse H1. *Toutes les surfaces des conducteurs sont orthogonales à la grille.*

Hypothèse H2. *Deux segments de surface parallèles sont soit portés par la même droite, soit ne coupent pas le même rectangle de la grille.*

L'hypothèse H2 signifie en particulier que la grille de volume ne doit pas être trop grossière par rapport au niveau de détail des conducteurs. Notons $|\gamma_k|$ la longueur du segment γ_k. Nous faisons de plus pour toute la suite les hypothèses suivantes sur le maillages de surface et la grille de volume :

Hypothèse H3. *Les pas de la grille sont du même ordre de grandeur dans les deux directions, c'est-à-dire il existe deux constantes C_m et C_M telles que, pour tout rectangle K^i de la grille,*

$$C_m \le \frac{\Delta z^i}{\Delta x} \le C_M . \qquad (\text{III.14})$$

On note $h = \max(\Delta x, \Delta z^i)$. Dans la suite, pour simplifier les calculs, on supposera que Δz^i ne dépend pas de *i*, et que $h = \Delta x = \Delta z^i$ (hypothèse H3bis). Cependant tous les résultats restent vrais, à une constante près dépendant de C_m *et* C_M lorsque l'hypothèse H3 est vérifiée.

Hypothèse H4. *Il existe deux constantes L_m et L_M telles que pour tout segment γ_k du maillage de surface,*

$$L_m \le \frac{|\gamma_k|}{h} \le L_M \quad . \qquad \text{(III.15)}$$

Rappelons tout d'abord la forme de la fonction Ψ_k associée à un segment de surface γ_k orthogonal à la grille. Supposons le segment γ_k vertical, distant de $t_k \Delta x/2$ de la maille verticale de la grille, la plus proche à gauche. Nous rappelons ci-dessous la définition de Ψ_k sur le rectangle D_k, qui est l'ensemble des points compris entre les deux mailles verticales de la grille encadrant le segment γ_k, et dont la projection sur γ, orthogonalement à γ_k, appartient à γ_k.

Tableau III.1 Définition de Ψ_k pour un segment γ_k vertical

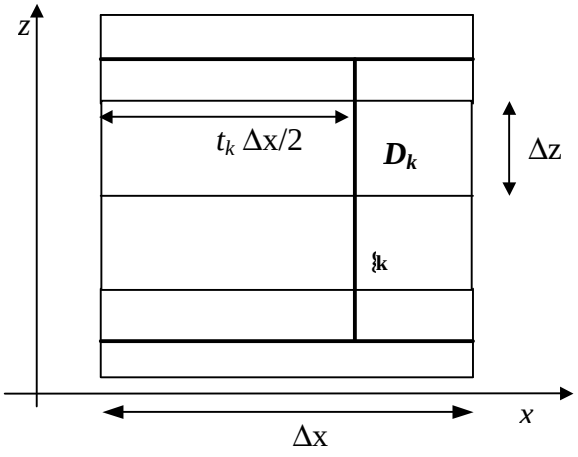


Figure III.2 Domaine D_k

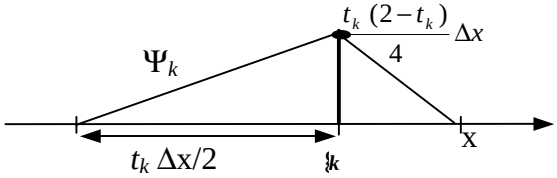


Figure III.3 Vue en coupe de la fonction Ψ_k

Soit f_t la fonction définie sur $[-1,1]$ par

$$f_t(s) = \frac{1}{2}(2-t)(1+s) \quad \text{quand } s \in [-1,-1+t],$$

$$= \frac{1}{2} t\,(1-s) \quad \text{quand } s \in [-1+t,1].$$

Nous avons

$$\Psi_k(x,z) = \frac{\Delta x}{2}\ f_{t_k}(F^{-1}_{D_k,x}(x)), \quad \forall (x,z) \in D_k\ .$$

La fonction Ψ_k est constante dans la direction z, nulle sur les bords de D_k parallèles à γ_k, et, pour tout $G \in \gamma_k$, vaut

$$\Psi_k(G) = \frac{t_k(2-t_k)}{4}\Delta x\ .$$

L'espace $\overline{X}_{h,\eta}$ de discrétisation du potentiel n'est pas inclus dans X. Nous élargissons donc la définition des formes bilinéaires $a_{h,\eta}$ et b_η, de façon à ce que ces définitions soient valables respectivement sur $(X \cup \overline{X}_{h,\eta}) \times (X \cup \overline{X}_{h,\eta})$ et sur $(X \cup \overline{X}_{h,\eta}) \times M$. Nous pourrons ainsi définir également une norme sur $X \cup \overline{X}_{h,\eta}$.

Rappelons que nous notons $\Theta_{h,\eta} = \Omega - \bigcup_{k=1}^{N_S} D_k$, la région de Ω sur laquelle les fonctions de $\overline{X}_{h,\eta}$ sont définies par une approximation Q_1 sur la grille de volume (Figure III.4).

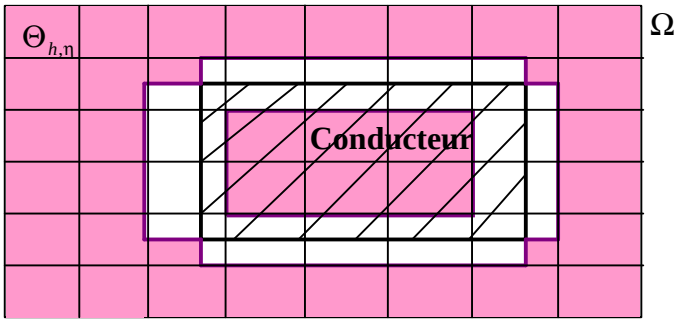


Figure III.4. Définition de la région $\Theta_{h,\eta}$ sur laquelle la discrétisation du potentiel n'est pas modifiée

En décomposant l'intégrale sur les régions de Ω sur lesquelles le gradient des fonctions de $\overline{X}_{h,\eta}$ est défini, nous avions défini au Chapitre II la forme bilinéaire $a_{h,\eta}$ sur $\left(X \cup \overline{X}_{h,\eta}\right)\times\left(X \cup \overline{X}_{h,\eta}\right)$ par,

$$a_{h,\eta}(\overline{u},\overline{v}) = \int_{\Theta_{h,\eta}} \varepsilon \nabla\overline{u}\,.\nabla\overline{v}\,d\Omega + \sum_{k=1}^{N_S} \int_{D_k - \left(D_k \cap \bigcup_{1\le k'\ne k\le N_S} D_{k'}\right)} \varepsilon \nabla\overline{u}\,.\nabla\overline{v}\,d\Omega + \sum_{1\le k_1\le k_2\le N_S} \int_{D_{k_1}\cap D_{k_2}} \varepsilon \nabla\overline{u}\,.\nabla\overline{v}\,d\Omega\,.$$

Décomposons $(\overline{u}_{h,\eta},\overline{v}_{h,\eta}) \in \overline{X}_{h,\eta}\times\overline{X}_{h,\eta}$:

$$\begin{cases} \overline{u}_{h,\eta} = r_h + \sum_{k=1}^{N_S} \alpha_k \Psi_k, \quad r_h \in X_h, \\ \overline{v}_{h,\eta} = v_h + \sum_{k=1}^{N_S} \beta_k \Psi_k, \quad v_h \in X_h. \end{cases}$$

Si les hypothèses H1 et H2 sont vérifiées, on a vu au chapitre 2 qu'on a

$$a_{h,\eta}(\overline{u}_{h,\eta},\overline{v}_{h,\eta}) = a(r_h,v_h) + \sum_{k=1}^{N_S} \alpha_k\,\beta_k \int_{D_k} \varepsilon_k \left|\nabla\Psi_k\right|^2 d\Omega\,. \qquad (\text{III.16})$$

Enfin, pour $(u,v) \in X\times X$, on a

$$a_{h,\eta}(u,v) = a(u,v)\,.$$

Définissons maintenant b_η sur $\left(X \cup \overline{X}_{h,\eta}\right)\times M$. Pour une fonction $\overline{v} \in X \cup \overline{X}_{h,\eta}$, notons $\Pi_h^{Q_1}\overline{v}$ son interpolée par des éléments finis Q_1 sur la grille de volume G_h. Cette notation a bien un sens pour une fonction $\overline{v} \in \overline{X}_{h,\eta}$, car les fonctions Ψ_k sont nulles aux nœuds de la grille G_h, et donc en ces nœuds, $\overline{v} \in X_h$. On définit

$$b_\eta(\overline{v},\mu) = b(\Pi_h^{Q_1}\overline{v},\mu) - \sum_{j=1}^{N_S} \int_{\gamma_j} \left[\nabla\overline{v}\,.n_j\right]_{\gamma_j} \Psi_j\,\mu\,d\gamma, \quad \forall(\overline{v},\mu) \in \left(X \cup \overline{X}_{h,\eta}\right)\times M\,, \qquad (\text{III.17})$$

En particulier, pour tout $(\bar{v}_{h,\eta},\mu_\eta)\in \bar{X}_{h,\eta}\times M_\eta$, où $\bar{v}_{h,\eta}$ se décompose en $\bar{v}_{h,\eta}=v_h+\sum_{k=1}^{N_S}\beta_k\Psi_k$, $v_h\in X_h$, on obtient

$$b_\eta(\bar{v}_{h,\eta},\mu_\eta)=-<v_h,\mu_\eta>_\gamma-\sum_{j=1}^{N_S}\int_{\gamma_j}\underbrace{\left[\sum_{k=1}^{N_S}\beta_k\nabla\Psi_k.n_j\right]_{\gamma_j}}_{=\beta_j\nabla\Psi_j.n_j=\beta_j}\Psi_j\,\mu_\eta\;d\gamma,$$

qui se réécrit sous la forme utilisée au chapitre 2,

$$b_\eta(\bar{v}_{h,\eta},\mu_\eta)=b(v_h,\mu_\eta)-\sum_{j=1}^{N_S}\beta_j\int_{\gamma_j}\Psi_j\,\mu_\eta\;d\gamma. \qquad (III.18)$$

Nous notons de plus

$$\bar{Z}_{h,\eta}=\left\{\bar{v}_{h,\eta}\,\middle|\,\bar{v}_{h,\eta}\in\bar{X}_{h,\eta},\quad b_\eta(\bar{v}_{h,\eta},\lambda_\eta)=0,\ \forall\lambda_\eta\in M_\eta\right\}.$$

On a les propriétés

$$a_{h,\eta}(u_h,v_h)=a(u_h,v_h),\quad \forall(u_h,v_h)\in X_h\times X_h,$$
$$b_\eta(u_h,\lambda_\eta)=b(u_h,\lambda_\eta),\quad \forall(u_h,\lambda_\eta)\in X_h\times M_\eta.$$

On approche le problème (*DF*) par

$$\overline{(DF)}_{h,\eta}\quad\begin{cases}\text{Trouver } (\bar{u}_{h,\eta},\bar{\lambda}_\eta)\in\bar{X}_{h,\eta}\times M_\eta \text{ tels que}\\ a_{h,\eta}(\bar{u}_{h,\eta},\bar{v}_{h,\eta})+b_\eta(\bar{v}_{h,\eta},\bar{\lambda}_\eta)=0,\quad\forall\bar{v}_{h,\eta}\in\bar{X}_{h,\eta}\\ b_\eta(\bar{u}_{h,\eta},\mu_\eta)=-<\mu_\eta,g>_\gamma,\quad\forall\mu_\eta\in M_\eta\end{cases}$$

4.2. NOTATIONS ET PROPRIETES PRELIMINAIRES

L'objectif principal de ce paragraphe, est d'obtenir, sur les rectangles D_k sur lesquels sont définies les fonctions Ψ_k et pour tout segment l coupant D_k, une relation entre les normes dans $L^2(l)$ et dans $H^1(D_k)$, de fonctions nulles sur une partie du bord de D_k.

La démonstration du lemme suivant se déduit directement de la démonstration du lemme 2 p 494 de [GiGl 95].

Lemme III.2 *Soit $\hat{K}$ le carré de référence, coupé par un segment $\hat{l}$ quelconque. Alors il existe une constante C, indépendante de $\hat{l}$, telle que*

$$\forall\hat{w}\in H^1(\hat{K}),\quad \|\hat{w}\|_{0,\hat{l}}\le C\|\hat{w}\|_{1,\hat{K}}. \qquad (III.19)$$

Passage à un rectangle D_k :

Soit F_{D_k} l'application affine bijective qui transforme le carré de référence $\hat{K}$ en la région D_k associée au segment γ_k, choisi par exemple vertical. La matrice jacobienne J_k de la transformation F_{D_k} s'écrit

$$J_k = \begin{pmatrix} \frac{h}{2} & 0 \\ 0 & \frac{|\gamma_k|}{2} \end{pmatrix}.$$

Et la formule classique de changement de variable devient $dx\,dz = \frac{h\,|\gamma_k|}{4} d\hat{x}\,d\hat{z}$.

Propriétés sur un rectangle D_k

Proposition III.2 *Soit γ_k un segment du maillage de surface, orthogonal à la grille et D_k le volume associé. Soit $w \in H^1(D_k)$, avec w nulle sur une partie de mesure non nulle du bord de D_k, et l un segment quelconque coupant D_k. Supposons enfin les hypothèses H3bis et H4 vérifiées. Alors il existe une constante $C(L_m, L_M)$, indépendante de γ_k, telle que*

$$\|w\|_{0,l} \le C\sqrt{h}\,|w|_{1,D_k}. \qquad (\text{III.20})$$

Pour le cas particulier $w = \Psi_k$,

- *si $l = \gamma_k$, on a*

$$\|\Psi_k\|_{0,\gamma_k} \le \frac{\sqrt{h}}{2}\,|\Psi_k|_{1,D_k}, \qquad (\text{III.21})$$

- *si l est un segment orthogonal à γ_k, il existe une constante C' telle que*

$$\|\Psi_k\|_{0,\gamma_k} \le C'\frac{\sqrt{h}}{\sqrt{L_m}}\,|\Psi_k|_{1,D_k}. \qquad (\text{III.22})$$

Preuve : On exprime les quantités à évaluer en fonction des quantités associées sur l'élément de référence, sur lequel on utilise le théorème de trace et l'inégalité de Poincaré, puis on remonte à l'élément D_k :

Soit $\hat{K}$ le carré de référence. Soit $\hat{l}$ l'image de l par $F_{D_k}^{-1}$, et soit $\hat{w} \in H^1(\hat{K})$ tel que

$$\hat{w}(\hat{x},\hat{z}) = w(F_{D_k}(\hat{x},\hat{z})), \quad \forall (\hat{x},\hat{z}) \in \hat{K}.$$

On exprime $\|w\|_{0,l}$ en fonction de $\|\hat{w}\|_{0,\hat{l}}$, et on applique le Lemme III.2 pour obtenir

$$\|w\|_{0,l} \le \sqrt{\frac{\max(|\gamma_k|,h)}{2}}\,\|\hat{w}\|_{0,\hat{l}} \le C\sqrt{h}\,\|\hat{w}\|_{1,\hat{K}}.$$

La fonction $\hat{w}$ est nulle sur une partie de mesure non nulle du bord de $\hat{K}$, elle vérifie donc l'inégalité de Poincaré. On en déduit qu'il existe une constante, indépendante de l et γ_k, et qu'on note à nouveau *C*, telle que

$$\|w\|_{0,l} \le C\sqrt{h}\,|\hat{w}|_{1,\hat{K}}\,. \qquad (\text{III.23})$$

Nous voulons à présent exprimer $|\hat{w}|_{1,\hat{K}}$ en fonction de $|w|_{1,D_k}$. Le calcul

$$|w|^2_{1,D_k} = \int_{D_k} |\nabla w|^2\, dx\, dz = \int_{\hat{K}} \left(\frac{|\gamma_k|}{h}\left(\frac{\partial \hat{w}}{\partial \hat{x}}\right)^2 + \frac{h}{|\gamma_k|}\left(\frac{\partial \hat{w}}{\partial \hat{z}}\right)^2 \right) d\hat{x}\, d\hat{z}$$

permet d'obtenir

$$|\hat{w}|^2_{1,\hat{K}} \le \max\left(\frac{h}{|\gamma_k|}, \frac{|\gamma_k|}{h} \right) |w|^2_{1,D_k}\,.$$

Et en regroupant cette dernière inégalité et l'inégalité (III.23), on déduit l'inégalité (III.20).

Pour $w = \Psi_k$ et $l = \gamma_k$, on peut montrer directement ce résultat, en reprenant un calcul effectué au chapitre 2, pour un segment γ_k vertical par exemple,

$$\begin{aligned}
\int_{D_k} |\nabla \Psi_k|^2 d\Omega &= \frac{\Delta x^2}{4} \int_{z\in\gamma_k} \int_{\hat{x}=-1}^{1} \frac{4}{\Delta x^2} \left[f'_{t_k}(\hat{x}) \right]^2 \frac{\Delta x}{2}\, d\hat{x}\, dz \\
&= \frac{\Delta x}{2} \int_{\gamma_k} \frac{t_k(2-t_k)}{2}\, dz \\
&= \int_{\gamma_k} \Psi_k\, d\gamma \\
&= \frac{4}{\Delta x\; t_k(2-t_k)} \int_{\gamma_k} \Psi_k^2\, d\gamma.
\end{aligned}$$

Comme $t_k(2-t_k) \le 1$, on en déduit (III.21).

Un calcul analogue au calcul donnant (III.20), en prenant en compte les propriétés du cas particulier $w = \Psi_k$ et l orthogonal à γ_k, donne (III.22).

?

4.3. VERIFICATION DES CONDITIONS D'EXISTENCE ET UNICITE D'UNE SOLUTION

Dans ce paragraphe, nous montrons les différentes conditions pour que le problème discret admette une solution unique : continuité des formes bilinéaires $a_{h,\eta}$ et b_η, coercivité de $a_{h,\eta}$ sur $\overline{X}_{h,\eta}$, et condition inf-sup. Nous montrons des propriétés (continuité et condition inf-sup) plus larges que celles strictement nécessaires à l'existence de la solution discrète, ces propriétés seront utiles pour établir les résultats de convergence de l'approximation.

Nous supposons toujours les hypothèses H1, H2, H3, et H4 vérifiées.

4.3.1 Continuité et coercivité de $a_{h,\eta}$

Nous définissons d'abord un produit scalaire sur $\left(X \cup \overline{X}_{h,\eta}\right)\times\left(X \cup \overline{X}_{h,\eta}\right)$, et la norme associée, pour lesquels nous allons établir des propriétés de continuité et de coercivité de $a_{h,\eta}$. Notons $(.,.)_{h,\eta}$ la forme bilinéaire symétrique, analogue à $a_{h,\eta}$ sauf qu'elle ne dépend pas de la permittivité ε, définie sur $\left(X \cup \overline{X}_{h,\eta}\right)\times\left(X \cup \overline{X}_{h,\eta}\right)$ par

$$(\overline{u},\overline{v})_{h,\eta} = \int_{\Theta_{h,\eta}} \nabla\overline{u}.\nabla\overline{v}\ d\Omega + \sum_{k=1}^{N_S}\int_{D_k - \left(D_k \cap \bigcup_{1\le k'\ne k\le N_S} D_{k'}\right)} \nabla\overline{u}.\nabla\overline{v}\ d\Omega + \sum_{1\le k_1\le k_2\le N_S}\int_{D_{k_1}\cap D_{k_2}} \nabla\overline{u}.\nabla\overline{v}\ d\Omega. \quad (\text{III.24})$$

Pour $(\overline{u}_{h,\eta},\overline{v}_{h,\eta}) \in \overline{X}_{h,\eta}\times\overline{X}_{h,\eta}$, (III.24) se réécrit

$$(\overline{u}_{h,\eta},\overline{v}_{h,\eta})_{h,\eta} = (r_h, v_h)_X + \sum_{k=1}^{N_S}\alpha_k\,\beta_k\int_{D_k}\left|\nabla\Psi_k\right|^2 d\Omega,$$

et pour $(u,v)\in X\times X$, on a

$$(u,v)_{h,\eta} = (u,v)_X.$$

Propriété III.1. *La forme bilinéaire symétrique* $(.,.)_{h,\eta}$ *est un produit scalaire sur* $\left(X \cup \overline{X}_{h,\eta}\right)\times\left(X \cup \overline{X}_{h,\eta}\right)$. *Notons* $\|.\|_{h,\eta}$ *la norme sur* $X \cup \overline{X}_{h,\eta}$ *associée à ce produit scalaire.*

Preuve :

Soit $\overline{u} \in X \cup \overline{X}_{h,\eta}$, qu'on décompose sous la forme $\overline{u} = u + \overline{u}_{h,\eta} = u + r_h + \sum_{k=1}^{N_S}\alpha_k\Psi_k$, $u \in X$.

Il faut montrer que $(\overline{u},\overline{u})_{h,\eta} = 0$ entraîne $\overline{u} = 0$. En utilisant la définition (III.24), $(\overline{u},\overline{u})_{h,\eta} = 0$ entraîne $\overline{u}$ constante sur chaque région sur laquelle $\overline{u}_{h,\eta}$ est continue. Comme de plus, Ψ_k est nulle aux coins de ces régions, $\overline{u}$ est continue en ces coins et donc constante dans tout Ω. La fonction $\overline{u}$ est donc nulle grâce aux conditions aux limites considérées dans X.

?

Nous pouvons maintenant montrer les propriétés suivantes sur $a_{h,\eta}$:

Proposition III.3. *La forme bilinéaire* $a_{h,\eta}$ *est continue sur* $\left(X \cup \overline{X}_{h,\eta}\right)\times\left(X \cup \overline{X}_{h,\eta}\right)$, *de constante de continuité* $A \le (\max_{1\le l\le N_D}\varepsilon_l)$ *indépendante de h et* h, *et coercive sur* $\overline{Z}_{h,\eta}$, *de constante de coercivité* $\alpha_0 = (\min_{1\le l\le N_D}\varepsilon_l)$ *indépendante de h et* h.

Preuve : Pour tout $(\overline{u},\overline{v}) \in \left(X \cup \overline{X}_{h,\eta}\right)\times\left(X \cup \overline{X}_{h,\eta}\right)$,

$$(\min_{1\le l\le N_D}\varepsilon_l)\ (\overline{u},\overline{v})_{h,\eta} \le a_{h,\eta}(\overline{u},\overline{v}) \le (\max_{1\le l\le N_D}\varepsilon_l)\ (\overline{u},\overline{v})_{h,\eta}.$$

Grâce à l'inégalité de Cauchy-Schwarz, on déduit de l'inégalité de droite que $a_{h,\eta}$ est continue sur $\left(X \cup \overline{X}_{h,\eta}\right)\times\left(X \cup \overline{X}_{h,\eta}\right)$, de norme $A \le (\max_{1\le l\le N_D} \varepsilon_l)$. Et on déduit de l'inégalité de gauche que $a_{h,\eta}$ est coercive sur $X \cup \overline{X}_{h,\eta}$ donc sur $\overline{Z}_{h,\eta} \subset \overline{X}_{h,\eta}$, de constante $\alpha_0 = (\min_{1\le l\le N_D} \varepsilon_l)$.

?

4.3.2 Continuité de b_η

La forme bilinéaire b_η coïncide avec b sur $X \times M$, et est donc évidemment continue sur $X \times M$. Nous montrons de plus la continuité de l'extension b_η sur $\overline{X}_{h,\eta} \times M$:

Proposition III.4 *L'application bilinéaire b_η est continue sur $\overline{X}_{h,\eta} \times M$.*

Preuve :

Soit $\overline{v}_{h,\eta} \in \overline{X}_{h,\eta}$, $\overline{v}_{h,\eta} = v_h + \sum_{k=1}^{N_S} \beta_k \Psi_k$, où $v_h \in X_h$. Pour tout $\mu \in M$, on a

$$b_\eta(\overline{v}_{h,\eta},\mu) = b(v_h,\mu) - \sum_{k=1}^{N_S} \beta_k < \Psi_k, \mu >_{\gamma_k} .$$

Grâce à la continuité de b sur $X \times M$,

$$\left|b_\eta(\overline{v}_{h,\eta},\mu)\right| \le C\left|v_h\right|_X \left\|\mu\right\|_M + \sum_{k=1}^{N_S} \left|\beta_k < \Psi_k, \mu >_{\gamma_k}\right| .$$

Lorsque les surfaces sont orthogonales à la grille, Ψ_k est constante sur γ_k. En utilisant l'inégalité de Cauchy Schwarz pour le produit scalaire dans $\Re^{N_S}$, on peut donc écrire

$$\sum_{k=1}^{N_S} \left|\beta_k < \Psi_k, \mu >_{\gamma_k}\right| \le \sqrt{\sum_{k=1}^{N_S} (\beta_k \Psi_k)^2} \sqrt{\sum_{k=1}^{N_S} \left(< 1, \mu >_{\gamma_k}\right)^2} . \qquad \text{(III.25)}$$

Majorons les deux racines séparément. D'une part,

$$\sqrt{\sum_{k=1}^{N_S} \left(< 1, \mu >_{\gamma_k}\right)^2} \le \sum_{k=1}^{N_S} \left|< 1, \mu >_{\gamma_k}\right| \le \left\|1\right\|_{\frac{1}{2},\gamma} \left\|\mu\right\|_M .$$

Utilisons la norme $\left\|.\right\|_{\frac{\sim}{1}{2},\gamma}$ définie par (III.1), il existe une constante C telle que

$$\left\|1\right\|_{\frac{1}{2},\gamma} \le C \left\|1\right\|_{\frac{\sim}{1}{2},\gamma} = C\sqrt{|\gamma|} ,$$

et donc

$$\sqrt{\sum_{k=1}^{N_S} \left(< 1, \mu >_{\gamma_k}\right)^2} \le C\sqrt{|\gamma|}\ \left\|\mu\right\|_M . \qquad \text{(III.26)}$$

D'autre part, en utilisant à nouveau le fait que Ψ_k est constante sur γ_k, on a

$$\Psi_k^2 = \frac{\int_{\gamma_k} \Psi_k^2 \, d\gamma}{|\gamma_k|}.$$

On déduit alors de l'inégalité (III.21) de la Proposition III.2, que

$$\Psi_k \le \frac{\sqrt{h}}{2\sqrt{|\gamma_k|}} \, |\Psi_k|_{1,D_k},$$

et en sommant pour $k = 1, 2, ..., N_S$, on a finalement

$$\sqrt{\sum_{k=1}^{N_S} (\beta_k \Psi_k)^2} \le \frac{1}{2\sqrt{L_m}} \sqrt{\sum_{k=1}^{N_S} \left(\beta_k |\Psi_k|_{1,D_k}\right)^2}. \qquad \text{(III.27)}$$

En regroupant (III.26) et (III.27) dans (III.25), on obtient

$$\sum_{k=1}^{N_S} \left| \beta_k < \Psi_k, \mu >_{\gamma_k} \right| \le \frac{C\sqrt{|\gamma|}}{\sqrt{L_m}} \left\| \sum_{k=1}^{N_S} \beta_k \Psi_k \right\|_{h,\eta} \|\mu\|_M,$$

et donc il existe une constante $B(L_m, C_m, C_M, \gamma)$ telle que

$$\left| b_\eta(\bar{v}_{h,\eta}, \mu) \right| \le B \left\| \bar{v}_{h,\eta} \right\|_{h,\eta} \|\mu\|_M.$$

?

4.3.3 Condition inf-sup

4.3.3.1 Condition inf-sup discrète : inversibilité du système

Nous rappelons qu'une condition nécessaire et suffisante d'existence et unicité d'une solution au problème discret est la condition inf-sup discrète, qui peut se réécrire sous la forme équivalente suivante,

$$\left\{ \mu_\eta \in M_\eta; \quad b_\eta(\bar{v}_{h,\eta}, \mu_\eta) = 0, \quad \forall \bar{v}_{h,\eta} \in \bar{X}_{h,\eta} \right\} = \{0\}.$$

- Si la condition inf-sup discrète est vérifiée pour le couple d'espaces (X_h, M_η), elle l'est aussi pour le couple d'espaces $(\bar{X}_{h,\eta}, M_\eta)$.

- Si les surfaces des conducteurs ne coïncident nulle part avec des mailles de la grille, la condition inf-sup discrète est vérifiée quels que soient les pas des deux maillages. En effet, dans ce cas, Ψ_k est non nulle pour tout $k = 1, 2, ..., N_S$, et en choisissant

$$\bar{v}_{h,\eta} = \sum_{k=1}^{N_S} \beta_k \Psi_k,$$

on obtient ainsi

$$b_\eta(\bar{v}_{h,\eta},\mu_\eta)=\sum_{k=1}^{N_S}\beta_k\,\mu_k\int_{\gamma_k}\Psi_k\;d\gamma,$$
$$=0\ \text{ pour tout }\ \beta_k\ \text{ ssi }\ \mu_k=0,\ \ k=1,2,...,N_S\,,$$

c'est-à-dire $\mu_\eta=0$.

4.3.3.2 Condition inf-sup uniforme : convergence de l'approximation

De plus, pour avoir une bonne convergence de l'approximation, b_η doit vérifier la condition inf-sup uniforme :

$$\exists\bar{k}_0>0,\quad \sup_{\bar{v}_{h,\eta}\in\bar{X}_{h,\eta}-\{0\}}\frac{b_\eta(\bar{v}_{h,\eta},\mu_\eta)}{\left\|\bar{v}_{h,\eta}\right\|_{h,\eta}}\geq\bar{k}_0\left\|\mu_\eta\right\|_M\ ,\ \ \forall\mu_\eta\in M_\eta\,.$$

Si la condition inf-sup est vérifiée pour les espaces (X_h,M_η), elle l'est aussi pour les espaces $(\bar{X}_{h,\eta},M_\eta)$. Nous allons de plus montrer que, pour les espaces $(\bar{X}_{h,\eta},M_\eta)$, la condition inf-sup uniforme est vérifiée sous des hypothèses moins restrictives que pour les espaces (X_h,M_η). Pour cela, nous utilisons le Théorème III.7, qui reformule des résultats de [Fo 77] :

Théorème III.7. *Supposons que la condition*

$$\sup_{v\in X-\{0\}}\frac{b(v,\mu_\eta)}{\left\|v\right\|_X}\geq k\left\|\mu_\eta\right\|_M\,,\qquad\forall\mu_\eta\in M_\eta\,,\tag{III.28}$$

est vérifiée, et qu'il existe une famille d'opérateurs $\Pi_{h,\eta}$ de X dans $\bar{X}_{h,\eta}$ vérifiant, pour tout $v\in X$,

$$\begin{cases}b_\eta(\Pi_{h,\eta}v,\mu_\eta)=b(v,\mu_\eta),\qquad\forall\mu_\eta\in M_\eta,\\ \left\|\Pi_{h,\eta}v\right\|_{h,\eta}\leq c\left\|v\right\|_X.\end{cases}\tag{III.29}$$

avec c indépendant de h et de h. Alors on a

$$\sup_{\bar{v}_{h,\eta}\in\bar{X}_{h,\eta}-\{0\}}\frac{b_\eta(\bar{v}_{h,\eta},\mu_\eta)}{\left\|\bar{v}_{h,\eta}\right\|_{h,\eta}}\geq k_0\ \left\|\mu_\eta\right\|_M\,,\qquad\forall\mu_\eta\in M_\eta\,,$$

où $k_0=k/c$.

Preuve : En effet on a

$$\sup_{\bar{v}_{h,\eta}\in\bar{X}_{h,\eta}-\{0\}}\frac{b_\eta(\bar{v}_{h,\eta},\mu_\eta)}{\left\|\bar{v}_{h,\eta}\right\|_{h,\eta}}\geq\sup_{v\in X-\{0\}}\frac{b_\eta(\Pi_{h,\eta}v,\mu_\eta)}{\left\|\Pi_{h,\eta}v\right\|_{h,\eta}}=\sup_{v\in X-\{0\}}\frac{b(v,\mu_\eta)}{\left\|\Pi_{h,\eta}v\right\|_{h,\eta}}\geq\sup_{v\in X-\{0\}}\frac{1}{c}\frac{b(v,\mu_\eta)}{\left\|v\right\|_X}\geq\frac{k}{c}\left\|\mu_\eta\right\|_M\,.$$

Application à notre problème :

Comme dans [GiGl 95], nous utilisons l'opérateur de régularisation de Clément R_h, (voir [Cl 75]) pour définir $\Pi_{h,\eta}$. La famille d'opérateurs introduits dans [Cl 75] est définie sur des éléments triangulaires, nous l'adaptons ici pour des éléments rectangulaires. Notons

- Δ_l le support de Φ_l, la fonction de base Q_1 associée au nœud l de la grille,
- $\Delta_{K^i} = \bigcup_{l \text{ sommet de } K^i} \Delta_l$.

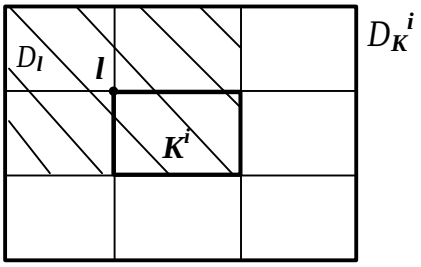


Figure III.5 Définition de Δ_l pour un nœud l de la grille, et de Δ_{K^i} pour un rectangle K^i de la grille

On pose

$$p_l(v) = \frac{1}{mes\,\Delta_l} \int_{\Delta_l} v\,dx ,$$

et on définit $R_h : X \to X_h$ par

$$R_h v = \sum_{l=1}^{N_V} p_l(v)\ \Phi_l .$$

Propriété III.2 *Il existe deux constantes C_1 et C_2 ne dépendant que de C_m et C_M, telles que, pour tout rectangle de la grille K^i, et pour tout $v \in X$, on a*

i. $\left\| R_h v - v \right\|_{0,K^i} \le C_1\, h\, |v|_{1,\Delta_{K^i}}$,

ii. $|R_h v - v|_{1,K^i} \le C_2\, |v|_{1,\Delta_{K^i}}$.

Et donc il existe une constante C_3 telle que

$$|R_h v - v|_{1,\Omega} \le C_3\, |v|_{1,\Omega} . \qquad \text{(III.30)}$$

Preuve :

Nous adaptons [Cl 75] :

$$R_h v = p_{N_1^i}(v) + \sum_{j=1}^{4} \left(p_{N_j^i}(v) - p_{N_1^i}(v) \right) \Phi_{N_j^i} .$$

On a

$$\left|p_{N_j^i}(v)-p_{N_1^i}(v)\right| \le \frac{\left|p_{N_j^i}(v)-p_{N_1^i}(v)\right|_{0,K^i}}{\sqrt{mes\,K^i}} \le \frac{\left|p_{N_j^i}(v)-v\right|_{0,K^i}+\left|v-p_{N_1^i}(v)\right|_{0,K^i}}{\sqrt{mes\,K^i}},$$

et donc, pour s égal à O ou 1,

$$\left|R_h v-v\right|_{s,K^i} \le \left|v-p_{N_1^i}(v)\right|_{s,K^i} + \sum_{j=1}^{4}\left(\frac{\left|p_{N_j^i}(v)-v\right|_{0,K^i}+\left|v-p_{N_1^i}(v)\right|_{0,K^i}}{\sqrt{mes\,K^i}}\right)\left|\Phi_{N_j^i}\right|_{s,K^i}. \qquad (\text{III.31})$$

Pour $j=1,\ldots,4$,

$$\left|p_{N_j^i}(v)-v\right|_{0,K^i} \le \left|p_{N_j^i}(v)-v\right|_{0,\Delta_{N_j^i}} \le C\,h\left|v\right|_{1,\Delta_{N_j^i}}, \qquad (\text{III.32})$$

où C est une constante ne dépendant que de C_m et C_M, et

$$\left|v-p_{N_j^i}(v)\right|_{1,K^i} = \left|v\right|_{1,K^i} \qquad (\text{III.33})$$

puisque $p_{N_j^i}(v)$ est une constante.

Enfin, il existe une constante C ne dépendant que de C_m et C_M, telle que, pour tout $1 \le j \le 4$, on a

$$\left|\Phi_{N_j^i}\right|_{s,K^i} \le C\,h^{1-s}, \text{ pour } s=0 \text{ ou } 1. \qquad (\text{III.34})$$

On majore (III.31) en utilisant (III.32), (III.33) et (III.34) pour terminer la démonstration.

?

Nous supposons de plus que les surfaces des conducteurs ne coïncident nulle part avec des mailles de la grille pour montrer la Proposition III.5 :

Proposition III.5. *Sous les hypothèses H1, H2, H3, et H4, et si les surfaces des conducteurs ne coïncident nulle part avec des mailles de la grille, alors il existe une constante* $\bar{k}_0(L_m,C_m,C_M)>0$ *telle que*

$$\sup_{\bar{v}_{h,\eta}\in\bar{X}_{h,\eta}-\{0\}} \frac{b_\eta(\bar{v}_{h,\eta},\mu_\eta)}{\left\|\bar{v}_{h,\eta}\right\|_{h,\mu}} \ge \bar{k}_0\left\|\mu_\eta\right\|_M, \quad \forall \mu_\eta \in M_\eta$$

Preuve :

La condition inf-sup continue étant vérifiée, et comme $M_\eta \subset M$, on a immédiatement l'hypothèse (III.28). Il reste à construire des fonctions $\Pi_{h,\eta}v$, $v\in X$ vérifiant (III.29).

- Nous définissons l'opérateur $\Pi_{h,\eta}: X \to \bar{X}_{h,\eta}$

$$\Pi_{h,\eta} v = R_h v + \sum_{k=1}^{N_S} \alpha_k \Psi_k \ ,$$

où les α_k, $k = 1, 2, ..., N_S$ sont calculées de façon à ce que

$$b_\eta(\Pi_{h,\eta} v, \mu_\eta) = b(v, \mu_\eta), \qquad \forall \mu_\eta \in M_\eta, \ \forall v \in X \ .$$

Ce qui donne la valeur de α_k suivante :

$$\alpha_k = \frac{\int_{\gamma_k} (v - R_h v)\, d\gamma}{\int_{\gamma_k} \Psi_k \, d\gamma}. \qquad \text{(III.35)}$$

- Montrons qu'il existe une constante *C* telle que

$$\left\| \Pi_{h,\eta} v \right\|_{h,\eta} = \left[\left| R_h v \right|_{1,\Omega}^2 + \sum_{1 \le k \le N_S} \alpha_k^2 \left| \Psi_k \right|_{1,D_k}^2 \right]^{1/2} \le C \left\| v \right\|_X , \ \forall v \in X \ . \qquad \text{(III.36)}$$

Considérons un segment de surface γ_k, par exemple vertical, distant de $t_k\, h/2$ des mailles verticales et de plus faible abscisse des rectangles de la grille qu'il coupe. Nous avons

$$\left| \Psi_k \right|_{1,D_k}^2 = \int_{\gamma_k} \Psi_k \, d\gamma = \frac{h \left| \gamma_k \right|}{4} t_k (2 - t_k) \, ,$$

et donc, en utilisant l'expression de α_k donnée par (III.35),

$$\alpha_k^2 \left| \Psi_k \right|_{1,D_k}^2 = \frac{4 \left(\int_{\gamma_k} (v - R_h v)\, d\gamma \right)^2}{h \left| \gamma_k \right| \, t_k (2 - t_k)} . \qquad \text{(III.37)}$$

On peut décomposer

$$\left(\int_{\gamma_k} (v - R_h v)\, d\gamma \right)^2 \le \left| \gamma_k \right| \int_{\gamma_k} (v - R_h v)^2 \, d\gamma = \left| \gamma_k \right| \sum_{K^i \left| \gamma_k \cap K^i \ne \varnothing \right.} \left| v - R_h v \right|_{0, \gamma_k \cap K^i}^2 \ .$$

On majore chacun des termes de la somme en passant sur le carré de référence et en utilisant le Lemme III.2 et la Propriété III.2

$$\begin{aligned} \left| v - R_h v \right|_{0,\gamma_k \cap K^i}^2 = \frac{h}{2} \left| \hat{v} - \hat{R}_h \hat{v} \right|_{0,\hat{\gamma}_k \cap \hat{K}}^2 &\le C\, h \left\| \hat{v} - \hat{R}_h \hat{v} \right\|_{1,\hat{K}}^2 \\ &\le C\, h \left(\frac{1}{h^2} \left\| v - R_h v \right\|_{0,K^i}^2 + \left| v - R_h v \right|_{1,K^i}^2 \right) \\ &\le C\, h \left| v \right|_{1,\Delta_{K^i}}^2 . \end{aligned}$$

En utilisant cette inégalité dans (III.37), on peut réécrire (III.36),

$$\left\|\Pi_{h,\eta} v\right\|_{h,\eta}^2 \le 2\left(\left|R_h v - v\right|_{1,\Omega}^2 + \left|v\right|_{1,\Omega}^2\right) + C \max_{1\le k\le N_S} \frac{1}{t_k(2-t_k)} \sum_{k=1}^{N_S} \sum_{K^i \left| \gamma_k \cap K^i \neq \varnothing \right.} \left|v\right|_{1,\Delta_{K^i}}^2 \qquad \text{(III.38)}$$

Le nombre de segments du maillage de surface qui peuvent couper un même rectangle de la grille étant majoré par $2+\frac{1}{L_m}$ (hypothèse H4), on a

$$\sum_{k=1}^{N_S} \sum_{K^i \left| \gamma_k \cap K^i \neq \varnothing \right.} \left|v\right|_{1,\Delta_{K^i}}^2 \le \left(2+\frac{1}{L_m}\right) \sum_{K^i} \left|v\right|_{1,\Delta_{K^i}}^2 \le 8\left(2+\frac{1}{L_m}\right)\left|v\right|_{1,\Omega}^2$$

En utilisant cette dernière inégalité et (III.30) pour majorer (III.38), on obtient qu'il existe une constante $C\left(\max_{1\le k\le N_S} \frac{1}{t_k(2-t_k)}, C_m, C_M, \frac{1}{L_m}\right)$ telle que

$$\left\|\Pi_{h,\eta} v\right\|_{h,\eta} \le C\left|v\right|_{1,\Omega}, \quad \forall v \in X \ . \qquad ?$$

Remarque. Rappelons que

- C_m et C_M sont les constantes qui bornent le rapport entre les pas de la grille de volume dans les deux directions (hypothèse H3). L'hypothèse que ces constantes ne sont ni très faibles ni très grandes, est une hypothèse naturelle, et leur influence n'est donc pas très importante.

- L_m est la constante telle que, pour tout segment γ_k du maillage de surface, $\left|\gamma_k\right| \ge h\, L_m$.

Or la constante $\bar{k}_0$ de la condition inf-sup uniforme est telle que $\bar{k}_0 \ge \frac{k_0}{C}$, où C est définie ci-dessus, et dépend du coefficient $\frac{1}{L_m}$ et de $\max_{1\le k\le N_S} \frac{1}{t_k(2-t_k)}$. Cela signifie en particulier que si le maillage de surface est très raffiné par rapport à la grille de volume, L_m est faible, donc $\bar{k}_0$ peut l'être aussi. On retrouve ainsi, affaiblie, la condition de compatibilité entre les maillages de l'approximation (A-GPP). De même, si $\max_{1\le k\le N_S} \frac{1}{t_k(2-t_k)}$ est grand, c'est-à-dire si la surface d'un conducteur est très proche d'une maille de la grille, $\bar{k}_0$ va être faible.

4.4. CONVERGENCE DE LA SOLUTION APPROCHEE

Nous allons à présent, en utilisant les propriétés montrées dans le paragraphe 4.3, estimer l'erreur d'approximation effectuée en approchant la solution du problème (DF) par la solution de $\overline{(DF)}_{h,\eta}$. Nous supposons toujours les hypothèses H1, H2, H3, H4 et H5 vérifiées.

4.4.1 Obtention d'une formule générale de majoration de l'erreur

Nous utilisons pour majorer la distance entre la solution approchée et la solution réelle, un analogue du lemme de Strang pour notre discrétisation non conforme (voir par exemple [BrFo 91] page 67 pour l'expression dans le cas général).

Proposition III.6 *Le problème discret* $\overline{(DF)}_{h,\eta}$ *admet une solution unique* $(\bar{u}_{h,\eta},\bar{\lambda}_\eta)$, *et sa distance à la solution* (u,λ) *du problème* (DF) *est majorée par*

$$\left\|u-\bar{u}_{h,\eta}\right\|_{h,\eta}+\left\|\lambda-\bar{\lambda}_\eta\right\|_M \le C\left(\inf_{\tilde{u}_{h,\eta}\in\bar{X}_{h,\eta}}\left(\left\|u-\tilde{u}_{h,\eta}\right\|_{h,\eta}+\sup_{\mu_\eta\in M_\eta}\frac{\left|b_\eta(\tilde{u}_{h,\eta},\mu_\eta)-b(u,\mu_\eta)\right|}{\left\|\mu_\eta\right\|_M}\right)+\right.$$
$$\left.\inf_{\tilde{\lambda}_\eta\in M_\eta}\left\|\lambda-\tilde{\lambda}_\eta\right\|_M+\sup_{\bar{v}_{h,\eta}\in\bar{X}_{h,\eta}}\frac{\left|a_{h,\eta}(u,\bar{v}_{h,\eta})-b_\eta(\bar{v}_{h,\eta},\lambda)\right|}{\left\|\bar{v}_{h,\eta}\right\|_{h,\eta}}\right)$$

Preuve : Le Théorème III.1, appliqué au problème discret $\overline{(DF)}_{h,\eta}$, affirme l'existence d'une solution unique à ce problème. De plus, le Théorème III.2 associé au Théorème III.1 permet d'affirmer que le problème

$$\begin{cases}\text{Trouver}\,(\bar{u}_{h,\eta},\bar{\lambda}_\eta)\in\bar{X}_{h,\eta}\times M_\eta\ \text{tels que}\\ a_{h,\eta}(\bar{u}_{h,\eta},\bar{v}_{h,\eta})-b_\eta(\bar{v}_{h,\eta},\bar{\lambda}_\eta)=<F,\bar{v}_{h,\eta}>, \quad \forall\bar{v}_{h,\eta}\in\bar{X}_{h,\eta}\\ b_\eta(\bar{u}_{h,\eta},\mu_\eta)=<G,\mu_\eta>, \quad \forall\mu_\eta\in M_\eta\end{cases} \qquad (\text{III.39})$$

admet une solution unique, et qu'il existe une constante C indépendante de *h* et η telle que

$$\left\|\bar{u}_{h,\eta}\right\|_{h,\eta}+\left\|\bar{\lambda}_\eta\right\|_M \le C(\left\|F\right\|_{1,h,\eta}+\left\|G\right\|_{2,\eta}), \qquad (\text{III.40})$$

où

$$\left\|F\right\|_{1,h,\eta}=\sup_{\bar{v}_{h,\eta}\in\bar{X}_{h,\eta}}\frac{<F,\bar{v}_{h,\eta}>}{\left\|\bar{v}_{h,\eta}\right\|_{h,\eta}} \quad\text{et}\quad \left\|G\right\|_{2,\eta}=\sup_{\mu_\eta\in M_\eta}\frac{<G,\mu_\eta>}{\left\|\mu_\eta\right\|_M}.$$

De façon classique, nous utilisons maintenant cette propriété pour obtenir l'estimation annoncée. Soit $(\tilde{u}_{h,\eta},\tilde{\lambda}_\eta)$ fixé quelconque dans $\bar{X}_{h,\eta}\times M_\eta$. Pour tout $(\bar{v}_{h,\eta},\mu_\eta)\in\bar{X}_{h,\eta}\times M_\eta$, on a, par définition de $(\bar{u}_{h,\eta},\bar{\lambda}_\eta)$ et (u,λ),

$$a_{h,\eta}(\tilde{u}_{h,\eta}-\bar{u}_{h,\eta},\bar{v}_{h,\eta})-b_\eta(\bar{v}_{h,\eta},\tilde{\lambda}_\eta-\bar{\lambda}_\eta)=\underbrace{-a_{h,\eta}(\bar{u}_{h,\eta},\bar{v}_{h,\eta})+b_\eta(\bar{v}_{h,\eta},\bar{\lambda}_\eta)}_{0}+a_{h,\eta}(\tilde{u}_{h,\eta},\bar{v}_{h,\eta})-b_\eta(\bar{v}_{h,\eta},\tilde{\lambda}_\eta)$$

$$b_\eta(\tilde{u}_{h,\eta}-\bar{u}_{h,\eta},\mu_\eta)=\underbrace{b(u,\mu_\eta)-b_\eta(\bar{u}_{h,\eta},\mu_\eta)}_{=0}+b_\eta(\tilde{u}_{h,\eta},\mu_\eta)-b(u,\mu_\eta)$$

Ainsi, le couple $(\tilde{u}_{h,\eta}-\bar{u}_{h,\eta},\tilde{\lambda}_\eta-\bar{\lambda}_\eta)$ est solution du problème (III.39), avec

$$\begin{cases}<F,\bar{v}_{h,\eta}>=a_{h,\eta}(\tilde{u}_{h,\eta},\bar{v}_{h,\eta})-b_\eta(\bar{v}_{h,\eta},\tilde{\lambda}_\eta),\\ <G,\mu_\eta>=b_\eta(\tilde{u}_{h,\eta},\mu_\eta)-b(u,\mu_\eta).\end{cases}$$

Nous déduisons alors de l'application de (III.40), la majoration

$$\left\|\tilde{u}_{h,\eta}-\bar{u}_{h,\eta}\right\|_{h,\eta}+\left\|\tilde{\lambda}_{\eta}-\bar{\lambda}_{\eta}\right\|_{M}\le C\left(\underbrace{\sup_{\bar{v}_{h,\eta}\in\bar{X}_{h,\eta}}\frac{\left|a_{h,\eta}(\tilde{u}_{h,\eta},\bar{v}_{h,\eta})-b_{\eta}(\bar{v}_{h,\eta},\tilde{\lambda}_{\eta})\right|}{\left\|\bar{v}_{h,\eta}\right\|_{h,\eta}}}_{T(\tilde{u}_{h,\eta},\tilde{\lambda}_{\eta})}+\sup_{\mu_{\eta}\in M_{\eta}}\frac{\left|b_{\eta}(\tilde{u}_{h,\eta},\mu_{\eta})-b(u,\mu_{\eta})\right|}{\left\|\mu_{\eta}\right\|_{M}}\right)$$

Majorons d'abord $T(\tilde{u}_{h,\eta},\tilde{\lambda}_{\eta})$. En décomposant

$$\left|a_{h,\eta}(\tilde{u}_{h,\eta},\bar{v}_{h,\eta})-b_{\eta}(\bar{v}_{h,\eta},\tilde{\lambda}_{\eta})\right|\le\left|a_{h,\eta}(\tilde{u}_{h,\eta}-u,\bar{v}_{h,\eta})\right|+\left|a_{h,\eta}(u,\bar{v}_{h,\eta})-b_{\eta}(\bar{v}_{h,\eta},\lambda)\right|+\left|b_{\eta}(\bar{v}_{h,\eta},\lambda-\tilde{\lambda}_{\eta})\right|$$

et en utilisant la continuité de $a_{h,\eta}$ sur $S\times\bar{X}_{h,\eta}$, et de b_{η} sur $\bar{X}_{h,\eta}\times M$, on peut écrire

$$T_1(\tilde{u}_{h,\eta},\tilde{\lambda}_{\eta})\le\left(A\left\|\tilde{u}_{h,\eta}-u\right\|_{h,\eta}+B\left\|\tilde{\lambda}_{\eta}-\lambda\right\|_{M}+\sup_{\bar{v}_{h,\eta}\in\bar{X}_{h,\eta}}\frac{\left|a_{h,\eta}(u,\bar{v}_{h,\eta})-b_{\eta}(\bar{v}_{h,\eta},\lambda)\right|}{\left\|\bar{v}_{h,\eta}\right\|_{h,\eta}}\right).$$

En utilisant de plus les inégalités triangulaires

$$\begin{cases}\left\|u-\bar{u}_{h,\eta}\right\|_{h,\eta}\le\left\|u-\tilde{u}_{h,\eta}\right\|_{h,\eta}+\left\|\tilde{u}_{h,\eta}-\bar{u}_{h,\eta}\right\|_{h,\eta}\\ \left\|\lambda-\bar{\lambda}_{\eta}\right\|_{M}\le\left\|\lambda-\tilde{\lambda}_{\eta}\right\|_{M}+\left\|\tilde{\lambda}_{\eta}-\bar{\lambda}_{\eta}\right\|_{M}\end{cases},$$

on obtient la majoration annoncée.

?

Il reste à estimer les deux termes qui composent la majoration de l'erreur :

- *l'erreur de consistance*

$$EC_{h,\eta}=\sup_{\bar{v}_{h,\eta}\in\bar{X}_{h,\eta}}\frac{\left|a_{h,\eta}(u,\bar{v}_{h,\eta})-b_{\eta}(\bar{v}_{h,\eta},\lambda)\right|}{\left\|\bar{v}_{h,\eta}\right\|_{h,\eta}},$$

- *l'erreur d'approximation*

$$EA_{h,\eta}=\inf_{\tilde{u}_{h,\eta}\in\bar{X}_{h,\eta}}\left(\left\|u-\tilde{u}_{h,\eta}\right\|_{h,\eta}+\sup_{\mu_{\eta}\in M_{\eta}}\frac{\left|b_{\eta}(\tilde{u}_{h,\eta},\mu_{\eta})-b(u,\mu_{\eta})\right|}{\left\|\mu_{\eta}\right\|_{M}}\right)+\inf_{\tilde{\lambda}_{\eta}\in M_{\eta}}\left\|\lambda-\tilde{\lambda}_{\eta}\right\|_{M},$$

où (u,λ) est la solution du problème (*DF*).

4.4.2 Calcul de l'erreur de consistance

L'erreur de consistance est majorée dans la proposition suivante :

Proposition III.7 *Il existe une constante $C(C_m,C_M)$ telle que*

$$EC_{h,\eta}\le C\sqrt{\frac{h\eta}{L_m}}\max_{1\le d\le N_D}(\varepsilon_d)\left|u\right|_{2,\omega}. \qquad (\text{III.41})$$

Preuve : décomposons $\bar{v}_{h,\eta} \in \bar{X}_{h,\eta}$ par

$$\bar{v}_{h,\eta} = v_h + \sum_{k=1}^{N_S} \beta_k \Psi_k, \quad v_h \in X_h \subset X,$$

on a

$$a_{h,\eta}(u,\bar{v}_{h,\eta}) + b_\eta(\bar{v}_{h,\eta},\lambda) = a(u,v_h) + \left(\sum_{k=1}^{N_S} \beta_k a_{h,\eta}(u,\Psi_k)\right) + b(v_h,\lambda) + \left(\sum_{k=1}^{N_S} \beta_k b_\eta(\Psi_k,\lambda)\right),$$

et on peut ainsi réécrire l'erreur de consistance $EC_{h,\eta}$ par

$$EC_{h,\eta} = \sup_{\beta_1,\beta_2,\ldots,\beta_{N_S}} \frac{\left|\sum_{1\le k\le N_S} \beta_k \left(a_{h,\eta}(u,\Psi_k) + b_\eta(\Psi_k,\lambda)\right)\right|}{\left\|\sum_{1\le k\le N_S} \beta_k \Psi_k\right\|_{h,\eta}}$$

Soit γ_k un élément du maillage de surface, horizontal par exemple. La région rectangulaire D_k associée est partagée par γ_k en deux zones, l'une conductrice D_k^C, et l'autre diélectrique D_k^D. Soit $\Gamma_{k-1,k}$ la frontière entre D_{k-1} et D_k, et $\Gamma_{k,k+1}$ la frontière entre D_k et D_{k+1} (Figure III.6).

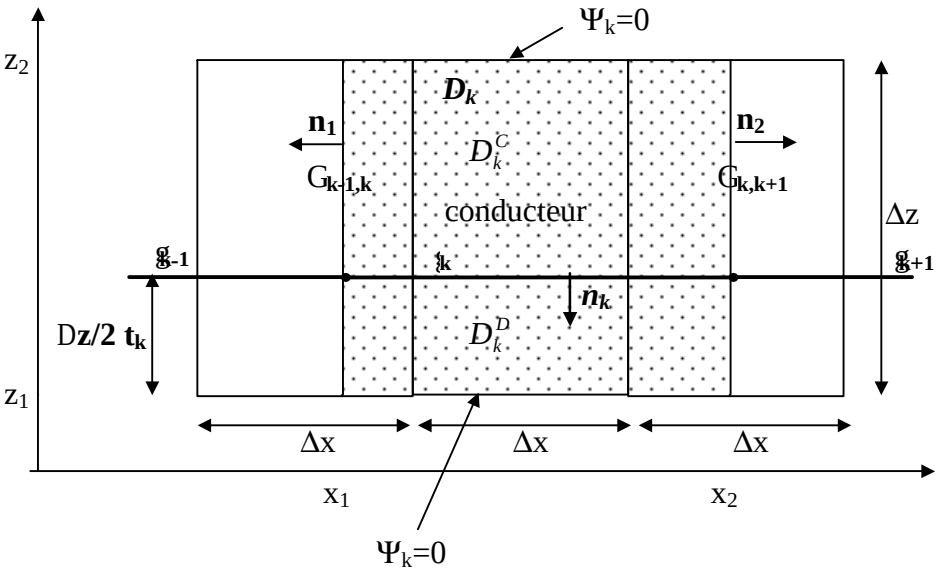


Figure III.6. Notations

Soit n_k un vecteur normal à γ_k, et n le vecteur normal à ∂D_k, dirigé vers l'extérieur de D_k. En utilisant la formule de Green sur D_k^C et D_k^D pour réécrire $a_{h,\eta}(u,\Psi_k)$, on a

$$a_{h,\eta}(u,\Psi_k) = -\int_{D_k^C} \varepsilon_k \underbrace{\Delta u}_{=0} \Psi_k \, d\Omega - \int_{D_k^D} \varepsilon_k \underbrace{\Delta u}_{=0} \Psi_k \, d\Omega + \int_{\gamma_k} \underbrace{\varepsilon_k [\nabla u . n_k]}_{=\lambda} \Psi_k \, d\gamma + \int_{\partial D_k} \varepsilon_k \nabla u . n \Psi_k \, d\gamma$$

$$= -b_\eta(\Psi_k,\lambda) + \int_{\partial D_k} \varepsilon_k \nabla u . n \Psi_k \, d\gamma$$

Or le potentiel u est constant dans le conducteur donc dans D_k^1, et d'autre part Ψ_k est nulle sur $\partial D_k - \{\Gamma_{k-1,k} \cup \Gamma_{k,k+1}\}$, donc on peut réécrire cela

$$a_{h,\eta}(u,\Psi_k) = -b_\eta(\Psi_k,\lambda) + \int_{\Gamma_{k-1,k}\cap D_k^D} \varepsilon_k \nabla u.n_1\, \Psi_k\, d\gamma + \int_{\Gamma_{k,k+1}\cap D_k^D} \varepsilon_k \nabla u.n_2\, \Psi_k\, d\gamma.$$

Comme

$$\begin{cases} n_1 = -n_2, \\ \Psi_k(x_1,z) = \Psi_k(x_2,z), \quad \forall z \in [z_1,z_2], \end{cases}$$

on a

$$\begin{aligned} \int_{(\Gamma_{1,k}\cup\Gamma_{2,k})\cap D_k^D} \varepsilon_k \nabla u.n\,\Psi_k\, d\gamma &= \int_{z=z_1}^{z_1+t_k\frac{\Delta z}{2}} \varepsilon_k \left(\frac{\partial u}{\partial x}(x_2,z) - \frac{\partial u}{\partial x}(x_1,z)\right)\Psi_k(x_1,z)\,dz \\ &\le \varepsilon_k \|\Psi_k\|_{0,\Gamma_{k-1,k}} \sqrt{\int_{z_1}^{z_1+t_k\frac{\Delta z}{2}} \left(\frac{\partial u}{\partial x}(x_2,z) - \frac{\partial u}{\partial x}(x_1,z)\right)^2 dz} \end{aligned}$$

Or, pour tout $z \in [z_1,z_2]$ fixé,

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}(x_2,z) - \frac{\partial u}{\partial x}(x_1,z)\right)^2 = \left(\int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,z)\,dx\right)^2 \le \underbrace{(x_2-x_1)}_{|\gamma_k|} \int_{x_1}^{x_2} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,z)\right)^2 dx,$$

et donc

$$\int_{(\Gamma_{k-1,k}\cup\Gamma_{k,k+1})\cap D_k^D} \varepsilon_k \nabla u.n\,\Psi_k\, d\gamma \le \sqrt{|\gamma_k|}\ \varepsilon_k \|\Psi_k\|_{0,\Gamma_{k-1,k}} |u|_{2,D_k^D}. \qquad (\text{III.42})$$

En sommant (III.42) pour $k = 1,2,...,N_S$, et en utilisant l'inégalité de Cauchy-Schwarz pour le produit scalaire de $\Re^{N_S}$, on a

$$\left|\sum_{1\le k\le N_S} \beta_k \left(a_{h,\eta}(u,\Psi_k) + b_\eta(\Psi_k,\lambda)\right)\right| \le \sqrt{\eta}\ \max_{1\le d\le N_D}(\varepsilon_d) \sqrt{\sum_{1\le k\le N_S} (\beta_k \|\Psi_k\|_{0,\Gamma_{k-1,k}})^2}\, |u|_{2,\omega}.$$

On peut ainsi majorer le terme de consistance par

$$EC_{h,\eta} \le \sqrt{\eta}\ \max_{1\le d\le N_D}(\varepsilon_d) \sup_{\beta_1,\beta_2,...,\beta_{N_S}} \frac{\sqrt{\sum_{1\le k\le N_S} (\beta_k \|\Psi_k\|_{0,\Gamma_{k-1,k}})^2}}{\sqrt{\sum_{1\le k\le N_S} (\beta_k |\Psi_k|_{1,D_k})^2}} |u|_{2,\omega}.$$

Et en utilisant l'inégalité (III.22) de la Proposition III.2, on déduit qu'il existe une constante C telle que (III.41) est vérifiée. **?**

4.4.3 Calcul de l'erreur d'approximation

L'erreur d'approximation s'écrit

$$EA_{h,\eta} = \inf_{\tilde{u}_{h,\eta}\in \bar{X}_{h,\eta}} \left(\left\| u - \tilde{u}_{h,\eta} \right\|_{h,\eta} + \sup_{\mu_\eta \in M_\eta} \frac{\left| b_\eta(\tilde{u}_{h,\eta},\mu_\eta) - b(u,\mu_\eta) \right|}{\left\| \mu_\eta \right\|_M} \right) + \inf_{\tilde{\lambda}_\eta \in M_\eta} \left\| \lambda - \tilde{\lambda}_\eta \right\|_M .$$

Le terme $\inf_{\tilde{\lambda}_\eta \in M_\eta} \left\| \lambda - \tilde{\lambda}_\eta \right\|_M$ a déjà été estimé lors de l'étude de l'approximation (A-GPP). Il s'agit donc de majorer

$$EA_{pot} = \inf_{\tilde{u}_{h,\eta}\in \bar{X}_{h,\eta}} \left(\left\| u - \tilde{u}_{h,\eta} \right\|_{h,\eta} + \sup_{\mu_\eta \in M_\eta} \frac{\left| b_\eta(\tilde{u}_{h,\eta},\mu_\eta) - b(u,\mu_\eta) \right|}{\left\| \mu_\eta \right\|_M} \right).$$

Considérons une famille particulière de fonctions $\tilde{u}_{h,\eta} \in \bar{X}_{h,\eta}$. Soit $\Pi_h^{Q_1} u$ l'interpolée Q_1 du potentiel u sur la grille de volume. Le potentiel étant régulier de chaque côté de la surface γ, ses valeurs aux coins des rectangles de la grille sont définies, et cette interpolée existe. Nous choisissons alors $\tilde{u}_{h,\eta}$ de la forme $\tilde{u}_{h,\eta} = r_h + \sum_{k=1}^{N_S} \alpha_k \Psi_k$, où $r_h = \Pi_h^{Q_1} u$. La Proposition III.8 permet alors de réduire l'expression de EA_{pot} :

Proposition III.8. *Soit u le potentiel continu, et $\bar{v}_{h,\eta} \in \bar{X}_{h,\eta}$ se décomposant en $\bar{v}_{h,\eta} = r_h + \sum_{k=1}^{N_S} \alpha_k \Psi_k$, où $r_h = \Pi_h^{Q_1} u$. Alors pour tout $\mu_\eta \in M_\eta$, on a*

$$b_\eta(\bar{v}_{h,\eta},\mu_\eta) - b(u,\mu_\eta) \le C\sqrt{|\gamma|}\, \left\| \mu_\eta \right\|_M \sqrt{\sum_{k=1}^{N_S} \left| r_h + \alpha_k \Psi_k - u \right|^2_{1,D_k}} . \qquad (\text{III.43})$$

Preuve :

Comme μ_η est constant sur chaque segment γ_k, on peut réécrire $\mu_k = \frac{1}{|\gamma_k|} < 1, \mu_\eta >_{\gamma_k}$, et en déduire

$$\begin{aligned} b_\eta(\bar{v}_{h,\eta},\mu_\eta) - b(u,\mu_\eta) &= \sum_{k=1}^{N_S} < r_h + \alpha_k \Psi_k - u, \mu_\eta >_{\gamma_k} \\ &= \sum_{k=1}^{N_S} \frac{1}{|\gamma_k|} \int_{\gamma_k} \left(r_h + \alpha_k \Psi_k - u \right) d\gamma < 1, \mu_\eta >_{\gamma_k} . \end{aligned}$$

On en déduit la majoration

$$b_\eta(\bar{v}_{h,\eta},\mu_\eta) - b(u,\mu_\eta) \le \underbrace{\sqrt{\sum_{k=1}^{N_S} \frac{1}{|\gamma_k|^2} \left(\int_{\gamma_k} \left(r_h + \alpha_k \Psi_k - u \right) d\gamma \right)^2}}_{R_1} \underbrace{\sqrt{\sum_{k=1}^{N_S} \left(< 1, \mu_\eta >_{\gamma_k} \right)^2}}_{R_2} \qquad (\text{III.44})$$

On peut reprendre un calcul effectué lors de la preuve de la continuité de b_η pour montrer

$$R_2 \le \sqrt{|\gamma|}\ \|\mu_\eta\|_M . \qquad (\text{III.45})$$

D'autre part,

$$R_1 \le \sqrt{\sum_{k=1}^{N_S} \frac{1}{|\gamma_k|} \|r_h + \alpha_k \Psi_k - u\|^2_{0,\gamma_k}} .$$

Sur le bord de D_k parallèle à γ_k et à l'intérieur du conducteur, le potentiel u est constant. Donc $r_h + \alpha_k \Psi_k - u = 0$ sur ce bord. On peut donc utiliser la Proposition III.2 avec $l = \gamma_k$ pour écrire, pour tout $k = 1, 2, ..., N_S$,

$$\frac{1}{|\gamma_k|} \|r_h + \alpha_k \Psi_k - u\|^2_{0,\gamma_k} \le C\, |r_h + \alpha_k \Psi_k - u|^2_{1,D_k} . \qquad (\text{III.46})$$

En utilisant les inégalités (III.46) et (III.45) pour majorer (III.44), on déduit l'inégalité annoncée.

?

La Proposition III.8 permet ainsi de majorer EA_{pot} par

$$EA_{pot} \le \inf_{(\alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_{N_S})} \left(\left\| r_h + \sum_{k=1}^{N_S} \alpha_k \Psi_k - u \right\|_{h,\eta} + C \sqrt{\sum_{k=1}^{N_S} |r_h + \alpha_k \Psi_k - u|^2_{1,D_k}} \right), \qquad (\text{III.47})$$

où $r_h = \Pi_h^{Q_1} u$ désigne l'interpolation du potentiel par des éléments finis Q_1 sur la grille.

Décomposons le premier terme de cette majoration :

$$\left\| r_h + \sum_{k=1}^{N_S} \alpha_k \Psi_k - u \right\|^2_{h,\eta} = |r_h - u|^2_{1,\Theta_{h,\eta}} + \sum_{k=1}^{N_S} |r_h + \alpha_k \Psi_k - u|^2_{1,D_k - \left(D_k \cap \bigcup_{1 \le k' \ne k \le N_S} D_{k'} \right)} + \sum_{1 \le k_1 \le k_2 \le N_S} |r_h + \alpha_{k_1} \Psi_{k_1} + \alpha_{k_2} \Psi_{k_2} - u|^2_{1,D_{k_1} \cap D_{k_2}} \qquad (\text{III.48})$$

Notons, pour tout coin de conducteur formé par les segments γ_{k_1} et γ_{k_2}, $R_{k_1 k_2}$ la partie du rectangle de la grille contenant ce coin, sur laquelle les fonctions Ψ_{k_1} et Ψ_{k_2} sont nulles. Une estimation classique pour les éléments finis permet alors d'écrire

$$|u - r_h|^2_{1,\Theta_{h,\eta}} \le C\, h^2\, |u|^2_{2,\omega} + C' \sum_{(k_1,k_2),\ D_{k_1} \cap D_{k_2} \ne \varnothing} |r_h - u|^2_{1,R_{k_1 k_2}} . \qquad (\text{III.49})$$

Dans les coins, les deux termes composant la majoration (III.47) se contrarient : quel que soit le choix des α_k, $k = 1, 2, ..., N_S$, l'un des deux termes ne pourra pas être bien majoré. Soient K_k^1 et K_k^4 les rectangles de la grille contenant les extrémités du segment de surface γ_k, nous notons $V_k = \left(K_k^1 \cup K_k^4 \cup D_k \right) \cap \omega$. Nous obtenons le résultat suivant :

Proposition III.9 *Il existe un choix des* α_k, $k = 1, 2, ..., N_S$ *et deux constantes* C_1 et C_2 dépendant de L_M, L_m, C_m et C_M, *tels que*

i. *pour tout* $k = 1, 2, ..., N_S$, $\left| r_h + \alpha_k \Psi_k - u \right|_{1, D_k} \leq C_1 \, h \left| u \right|_{2, V_k}$, (III.50)

ii. *pour tous* (k_1, k_2), $D_{k_1} \cap D_{k_2} \neq \varnothing$,

$$\left| r_h + \alpha_{k_1} \Psi_{k_1} + \alpha_{k_2} \Psi_{k_2} - u \right|_{1, D_{k_1} \cap D_{k_2}} \leq C_2 \, h \, (\left| u \right|_{2, V_{k_1}} + \left| u \right|_{2, V_{k_2}}) + \left| r_h - u \right|_{1, D_{k_1} \cap D_{k_2}} . \quad \text{(III.51)}$$

Preuve :

Nous commençons par choisir les α_k, $k = 1, 2, ..., N_S$ de façon à établir i :

En utilisant l'inégalité triangulaire, on a

$$\left| r_h + \alpha_k \Psi_k - u \right|_{1, D_k} \leq \left| r_h + \alpha_k \Psi_k - u_{h,\eta} \right|_{1, D_k} + \left| u_{h,\eta} - u \right|_{1, D_k}, \quad \forall u_{h,\eta} \in H^1(D_k) .$$

Choisissons sur D_k, $u_{h,\eta} = r_h + \Pi_k^{Q_1} (u - r_h)$, où $\Pi_k^{Q_1} v$ désigne l'interpolée Q_1 sur chacun des deux rectangles, inclus dans D_k et situés de part et d'autre de γ_k. En utilisant l'estimation éléments finis

$$\left| u - \Pi_k^{Q_1} u \right|_{1, D_k} \leq C \eta \left| u \right|_{2, D_k \cap \omega},$$

on obtient la majoration

$$\left| r_h + \alpha_k \Psi_k - u \right|_{1, D_k} \leq C \eta \left| u \right|_{2, D_k} + \left| \alpha_k \Psi_k - \Pi_k^{Q_1} (u - r_h) \right|_{1, D_k} + \left| r_h - \Pi_k^{Q_1} r_h \right|_{1, D_k}, \quad \text{(III.52)}$$

où il faut estimer les termes

$$A_k = \left| \Pi_k^{Q_1} (u - r_h) - \alpha_k \Psi_k \right|_{1, D_k} \text{ et } B_k = \left| r_h - \Pi_k^{Q_1} r_h \right|_{1, D_k}, \text{ pour } k = 1, 2, ..., N_S . \quad \text{(III.53)}$$

- Estimons d'abord A_k. Notons D_k^1 et D_k^2 les parties de D_k de part et d'autre de γ_k, et soit par exemple D_k^2 la partie conductrice de D_k, au potentiel $u = g$. Nous allons expliciter la fonction $u_{h,\eta}$ sur la région D_k, et calculer le coefficient α_k qui minimise le terme A_k.

Nous introduisons les notations suivantes, que l'on représente pour un segment γ_k vertical dans la Figure III.7. La fonction r_h est définie sur D_k par ses valeurs aux 4 coins de D_k, (r_1, r_2, r_3, r_4), notation où nous omettons l'indice *k* pour clarifier la lecture. On exprime ces valeurs aux coins de D_k en fonction des valeurs du potentiel aux coins du rectangle de la grille dans lequel se situe le coin considéré. Notons $(u_{i,1}, u_{i,2}, u_{i,3}, u_{i,4})$ les valeurs aux 4 coins du rectangle dans lequel se situe le ième coin de D_k.

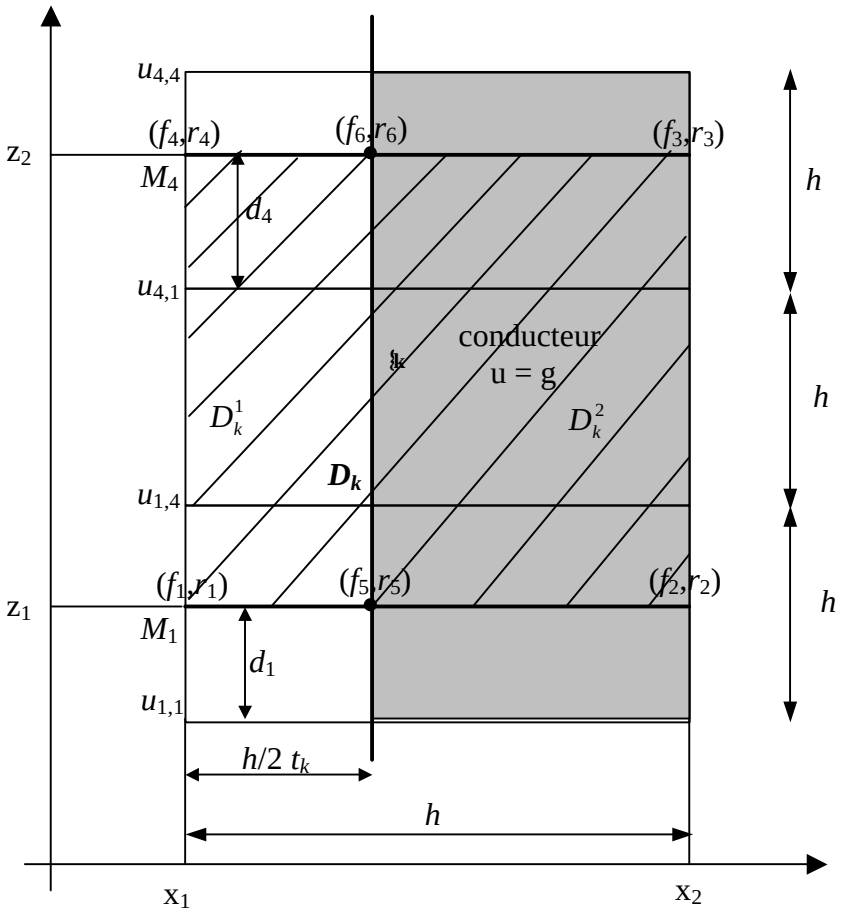


Figure III.7. Notations

Nous avons

$$\begin{cases} r_1 = \dfrac{h-d_1}{h}u_{1,1} + \dfrac{d_1}{h}u_{1,4}, \\ r_2 = r_3 = g, \\ r_4 = \dfrac{h-d_4}{h}u_{4,1} + \dfrac{d_4}{h}u_{4,4}. \end{cases}$$

Nous en déduisons les valeurs de r_h aux extrémités de γ_k, notées r_5 et r_6, par

$$\begin{cases} r_5 = \dfrac{1}{2}\big((2-t_k)r_1 + t_k g\big), \\ r_6 = \dfrac{1}{2}\big((2-t_k)r_4 + t_k g\big). \end{cases}$$

La fonction $f_{h,\eta}^k = \Pi_k^{Q_1}(u - r_h)$ est définie sur D_k par ses valeurs aux 4 coins de D_k, (f_1, f_2, f_3, f_4), et ses valeurs aux extrémités de γ_k, notées f_5 et f_6 (nous omettons à nouveau l'indice k):

$$\begin{cases} f_1 = -r_1 + u_1, \\ f_4 = -r_4 + u_4, \\ f_5 = \dfrac{2-t_k}{2}(g - r_1), \\ f_6 = \dfrac{2-t_k}{2}(g - r_4), \\ f_2 = f_3 = 0. \end{cases}$$

Soient $\left(\Phi_j^1\right)_{1\le j\le 4}$ et $\left(\Phi_j^2\right)_{1\le j\le 4}$ les fonctions de base Q_1 respectivement sur D_k^1 et D_k^2. Alors la fonction $f_{h,\eta}^k = \Pi_k^{Q_1}(u - r_h)$ se réécrit sur D_k par

$$f_{h,\eta}^k = \begin{cases} f_1\Phi_1^1 + f_5\Phi_2^1 + f_6\Phi_3^1 + f_4\Phi_4^1 & \text{sur } D_k^1, \\ f_5\Phi_1^2 + f_6\Phi_4^2 & \text{sur } D_k^2. \end{cases}$$

La fonction Ψ_k est constante sur γ_k, et nulle sur les bords de D_k parallèles à γ_k. Notons Ψ_k^γ la valeur de Ψ_k sur γ_k, alors on a sur D_k

$$\Psi_k = \begin{cases} \Psi_k^\gamma(\Phi_2^1 + \Phi_3^1) & \text{sur } D_k^1, \\ \Psi_k^\gamma(\Phi_1^2 + \Phi_4^2) & \text{sur } D_k^2. \end{cases}$$

et donc

$$f_{h,\eta}^k - \alpha_k\Psi_k = \begin{cases} f_1\Phi_1^1 + (f_5 - \alpha_k\Psi_k^\gamma)\Phi_2^1 + (f_6 - \alpha_k\Psi_k^\gamma)\Phi_3^1 + f_4\Phi_4^1 & \text{sur } D_k^1, \\ (f_5 - \alpha_k\Psi_k^\gamma)\Phi_1^2 + (f_6 - \alpha_k\Psi_k^\gamma)\Phi_4^2 & \text{sur } D_k^2. \end{cases}$$

On calcule alors $\left|f_{h,\eta}^k - \alpha_k\Psi_k\right|_{1,D_k^1}^2$ et $\left|f_{h,\eta}^k - \alpha_k\Psi_k\right|_{1,D_k^2}^2$, en se ramenant de D_k^1 et D_k^2 à l'élément de référence. Soit $\hat{f}_{h,\eta}^{k,1} - \alpha_k\hat{\Psi}_k^1$ tel que

$$(\hat{f}_{h,\eta}^{k,1} - \alpha_k\hat{\Psi}_k^1)(\hat{x},\hat{z}) = (f_{h,\eta}^k - \alpha_k\Psi_k)(F_{D_k^1}(\hat{x},\hat{z})),\ \forall(\hat{x},\hat{z}) \in \hat{K}.$$

Alors on a

$$\left|f_{h,\eta}^k - \alpha_k\Psi_k\right|_{1,D_k^1}^2 = \int_{\hat{K}}\left[\frac{|\gamma_k|}{t_k h}\left(\frac{\partial(\hat{f}_{h,\eta}^{k,1} - \alpha_k\hat{\Psi}_k^1)}{\partial\hat{x}}\right) + \frac{t_k h}{|\gamma_k|}\left(\frac{\partial(\hat{f}_{h,\eta}^{k,1} - \alpha_k\hat{\Psi}_k^1)}{\partial\hat{z}}\right)\right]d\hat{x}\,d\hat{z}. \qquad (\text{III.54})$$

En utilisant les fonctions de base Q_1 sur le carré de référence, on exprime $\hat{f}_{h,\eta}^{k,1} - \alpha_k\hat{\Psi}_k^1$:

$$\hat{f}_{h,\eta}^{k,1} - \alpha_k\hat{\Psi}_k^1 = f_1\hat{\Phi}_1 + (f_5 - \alpha_k\Psi_k^\gamma)\hat{\Phi}_2 + (f_6 - \alpha_k\Psi_k^\gamma)\hat{\Phi}_3 + f_4\hat{\Phi}_4.$$

Ainsi,

$$\frac{\partial}{\partial\hat{x}}(\hat{f}_{h,\eta}^{k,1} - \alpha_k\hat{\Psi}_k^1) = \frac{1}{4}\left[\hat{z}\underbrace{(f_1 - f_5 + f_6 - f_4)}_{a} + \underbrace{(-f_1 + f_5 + f_6 - f_4 - 2\alpha_k\Psi_k^\gamma)}_{b}\right],$$

et

$$\frac{\partial}{\partial \hat{z}}(\hat{f}_{h,\eta}^{k,1} - \alpha_k \hat{\Psi}_k^1) = \frac{1}{4}\left[\hat{x}(\underbrace{f_1 - f_5 + f_6 - f_4}_{a}) + \underbrace{(-f_1 - f_5 + f_6 + f_4)}_{c}\right].$$

On utilise ces deux dernières expressions pour calculer (III.54) :

$$\left| f_{h,\eta}^k - \alpha_k \Psi_k \right|_{1,D_k^1}^2 = \frac{|\gamma_h|}{t_k h}\frac{a^3 + 3ab^2}{12} + \frac{t_k h}{|\gamma_h|}\frac{a^3 + 3ac^2}{12}. \qquad \text{(III.55)}$$

En effectuant les mêmes calculs sur D_k^2, on obtient

$$\left| f_{h,\eta}^k - \alpha_k \Psi_k \right|_{1,D_k^2}^2 = \frac{|\gamma_h|}{(2-t_k)h}\frac{d^3 + 3de^2}{12} + \frac{(2-t_k)h}{|\gamma_h|}\frac{d^3}{3}, \qquad \text{(III.56)}$$

où $d = f_5 - f_6$, et $e = -f_5 - f_6 + 2\alpha_k \Psi_k^\gamma$.

Explicitons les coefficients a, b, c, d, et e :

$$\begin{cases} a = f_1 - f_5 + f_6 - f_4 \\ b = -f_1 + f_5 + f_6 - f_4 - 2\alpha_k \Psi_k^\gamma \\ c = -f_1 - f_5 + f_6 + f_4 \\ d = f_5 - f_6 \\ e = -f_5 - f_6 + 2\alpha_k \Psi_k^\gamma \end{cases}$$

Nous évaluons d'abord f_1 :

$$f_1 = u_1 - r_1 = \frac{h - d_1}{h}(u_1 - u_{1,1}) + \frac{d_1}{h}(u_1 - u_{1,4}). \qquad \text{(III.57)}$$

Pour majorer f_1, nous montrons un résultat intermédiaire :

Lemme III.3 *Soit un rectangle R, de côtés de longueurs c_x et c_z. Soit M_1 et M_2, les extrémités d'un côté de longueur c_z* (

Figure **III.8**). *Soit une fonction $u \in H^2(R)$, à potentiel fixé constant sur le côté du rectangle parallèle au côté M_1M_2. Alors on a*

$$\left| u(M_2) - u(M_1) \right| \le \sqrt{c_x c_z}\, |u|_{2,R} . \qquad \text{(III.58)}$$

Preuve :
Supposons par exemple le côté M_1M_2 vertical, et notons $M_1(x_1, z_1)$ et $M_2(x_1, z_1 + c_z)$, les coordonnées des points M_1 et M_2 (voir

Figure **III.8**).

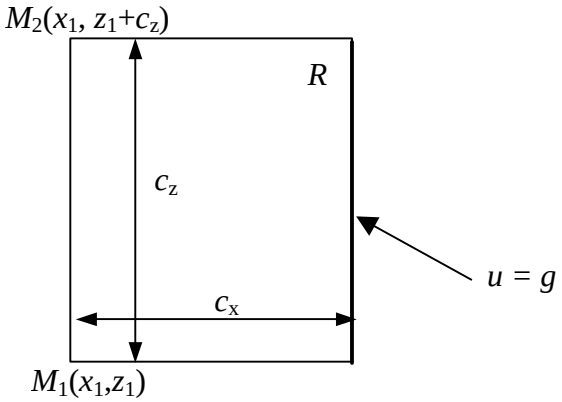


Figure III.8. Notations du Lemme III.3

En intégrant la fonction u sur (M_1M_2), on a

$$u(M_2)-u(M_1)=u(x_1,z_1+c_z)-u(x_1,z_1)=\int_{z_1}^{z_1+c_z}\frac{\partial u}{\partial y}(x_1,z)\,dz$$

Sur le côté d'abscisse $x=x_1+c_x$, on a $u=g$, et donc

$$\frac{\partial u}{\partial z}(x_1,z)-\underbrace{\frac{\partial u}{\partial z}(x_1+c_x,z)}_{=0}=\int_{x_1+c_x}^{x_1}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)(x,z)\,dx\,,$$

donc

$$\left|u(M_2)-u(M_1)\right|\le\int_{z_1}^{z_1+c_z}\int_{x_1}^{x_1+c_x}\left|\frac{\partial^2 u}{\partial x\partial z}(x,z)\right|dx\,dz\,.$$

Et en utilisant l'inégalité de Cauchy-Schwarz, on obtient (III.58).

?

Soit K_k^1 le rectangle de la grille contenant l'extrémité du segment γ_k de plus faible hauteur, on utilise (III.58) pour majorer (III.57). On obtient facilement

$$|f_1|\le\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{(h-d_1)\,d_1\,t_k}\,|u|_{2,K_k^1\cap\omega}\le\frac{1}{2\sqrt{2}}\,h\sqrt{t_k}\,|u|_{2,K_k^1\cap\omega}\,. \qquad \text{(III.59)}$$

On obtient de même la majoration

$$|f_4|\le\frac{1}{2\sqrt{2}}\,h\sqrt{t_k}\,|u|_{2,K_k^4\cap\omega}\,. \qquad \text{(III.60)}$$

Les coefficient f_5 et f_6 ne peuvent pas être majorés de la même façon, ils sont seulement bornés. Considérons par exemple f_5, que l'on peut écrire

$$f_5 = \frac{2-t_k}{2}\left(\frac{h-d_1}{h}(g-u_{1,1}) + \frac{d_1}{h}(g-u_{1,4})\right).$$

Avec les conditions limites imposées (potentiel 1 ou 0 sur les conducteurs), on sait que $|g-u_{1,1}| \le 1$ et $|g-u_{1,4}| \le 1$, dont on déduit $|f_5| \le 1$.

Mais on peut majorer $|f_5 - f_6|$ par

$$|f_5 - f_6| = \frac{2-t_k}{2}|r_4 - r_1| \le \frac{2-t_k}{2}\left(\underbrace{|r_4-u_4|}_{|f_4|} + |u_4-u_1| + \underbrace{|u_1-r_1|}_{|f_1|}\right).$$

En utilisant les majorations de $|f_1|$ et $|f_4|$ obtenues précédemment, et en majorant $|u_4-u_1|$ en utilisant à nouveau (III.58), on obtient

$$|f_5 - f_6| \le \frac{2-t_k}{2}\left(\frac{1}{2\sqrt{2}}h\sqrt{t_k}\,(|u|_{2,K_k^4\cap\omega} + |u|_{2,K_k^1\cap\omega}) + \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{h|\gamma_k|t_k}\,|u|_{2,D_k\cap\omega}\right).$$

Notons $V_k = \left(K_k^1 \cup K_k^4 \cup D_k\right)\cap\omega$, et utilisons l'hypothèse H4 sur les pas des maillages, on a

$$|f_5 - f_6| \le \frac{2-t_k}{2}h\sqrt{t_k}\,(1+\sqrt{L_M})|u|_{2,V_k} \qquad (\text{III.61})$$

Choisissons enfin α_k tel que

$$2\alpha_k\Psi_k^\gamma = f_5 + f_6,$$

et utilisons les expressions (III.59), (III.60), et (III.61), et l'hypothèse H4 sur les pas des maillages pour majorer a,b,c,d , et e :

$$\begin{cases} a = f_1 - f_4 - (f_5 - f_6) \le C\sqrt{t_k}\left(h + \sqrt{h|\gamma_k|}\right)|u|_{2,V_k} \le C\,h\sqrt{t_k}\,\left(1+\sqrt{L_M}\right)|u|_{2,V_k}, \\ b = -f_1 + f_5 + f_6 - f_4 - 2\alpha_k\Psi_k^\gamma = -f_1 - f_4 \le \dfrac{1}{2\sqrt{2}}h\sqrt{t_k}\,|u|_{2,V_k}, \\ c = -f_1 - f_5 + f_6 + f_4 \le C\,h\sqrt{t_k}\left(1+\sqrt{L_M}\right)|u|_{2,V_k}, \\ d = f_5 - f_6 \le C(2-t_k)h\sqrt{t_k}\left(1+\sqrt{L_M}\right)|u|_{2,V_k}, \\ e = -f_5 - f_6 + 2\alpha_k\Psi_k^\gamma = 0. \end{cases}$$

Ainsi, on peut majorer $\left|f_{h,\eta}^k - \alpha_k\Psi_k\right|_{1,D_k^1}^2$ par un terme tendant vers zéro, où les termes $\dfrac{1}{t_k}$ que l'on ne maîtrise pas ont disparu,

$$\left|f_{h,\eta}^k - \alpha_k\Psi_k\right|_{1,D_k^1}^2 \le C(L_M, L_m)\,h^3\,|u|_{2,V_k}. \qquad (\text{III.62})$$

De même, (III.56) est majoré par

$$\left| f_{h,\eta}^{k} - \alpha_k \Psi_k \right|_{1,D_k^2}^2 = C'(L_M, L_m)\, h^3 \left|u\right|_{2,V_k} . \qquad \text{(III.63)}$$

En sommant les inégalités (III.62) et (III.63) pour $k = 1, 2, ..., N_S$, et en généralisant au cas de grilles de volume dont les éléments ne sont pas des carrés mais des rectangles, on obtient finalement qu'il existe une constante $C(L_M, L_m, C_m, C_M)$ telle que

$$\sum_{k=1}^{N_S} \left| f_{h,\eta}^{k} - \alpha_k \Psi_k \right|_{1,D_k}^2 \le C\, h^3 \sum_{k=1}^{N_S} \left|u\right|_{2,V_k}^2 . \qquad \text{(III.64)}$$

- Estimons à présent $B_k = \left| r_h - \Pi_k^{Q_1} r_h \right|_{1,D_k}$. Notons M_1 et M_4 les deux coins du rectangle D_k n'appartenant pas au conducteur (voir Figure III.7). Pour tout point M de $(M_1 M_4)$, soit t_M tel que

$$t_M \overrightarrow{M_1 M} + (1 - t_M) \overrightarrow{M_4 M} = 0 . \qquad \text{(III.65)}$$

Alors, l'approximation Q1 de r_h sur D_k vaut

$$\Pi_k^{Q_1} r_h(M) = t_M\, r_h(M_1) + (1 - t_M)\, r_h(M_4) ,$$

où $r_h(M_1) = \dfrac{h - d_1}{h} u_{1,1} + \dfrac{d_1}{h} u_{1,4}$ et $r_h(M_4) = \dfrac{h - d_4}{h} u_{4,1} + \dfrac{d_4}{h} u_{4,4}$.

Décomposons B_k sur les rectangles K^i de la grille coupés par γ_k,

$$\left| r_h - \Pi_k^{Q_1} r_h \right|_{1,D_k}^2 = \sum_{i,\, K^i \cap \gamma_k \neq \varnothing} \left| r_h - \Pi_k^{Q_1} r_h \right|_{1,K^i \cap D_k}^2 \le \sum_{i,\, K^i \cap \gamma_k \neq \varnothing} \left| r_h - \Pi_k^{Q_1} r_h \right|_{1,K^i}^2 .$$

En utilisant le fait que le potentiel est constant dans le conducteur, on a ici $r_h(S_2^i) = \Pi_\eta^{Q_1} r_h(S_2^i) = r_h(S_3^i) = \Pi_\eta^{Q_1} r_h(S_3^i) = g$, et donc, en se ramenant au carré de référence, on peut écrire, pour tout rectangle K^i de la grille, coupé par γ_k,

$$\left| r_h - \Pi_k^{Q_1} r_h \right|_{1,K^i}^2 = \left(u(S_1^i) - \Pi_k^{Q_1} r_h(S_1^i) \right)^2 \left| \hat{\Phi}_1 \right|_{1,\hat{K}}^2 + \left(u(S_4^i) - \Pi_k^{Q_1} r_h(S_4^i) \right)^2 \left| \hat{\Phi}_4 \right|_{1,\hat{K}}^2 ,$$

et donc

$$\begin{aligned} \left| r_h - \Pi_k^{Q_1} r_h \right|_{1,K^i}^2 \le C \Big[& \left(u(S_1^i) - r_h(M_4) + t_{S_1^i} \left(r_h(M_1) - r_h(M_4) \right) \right)^2 \\ & + \left(u(S_4^i) - r_h(M_4) + t_{S_4^i} \left(r_h(M_1) - r_h(M_4) \right) \right)^2 \Big] , \end{aligned} \qquad \text{(III.66)}$$

où les point S_1^i et S_4^i appartiennent à V_k. Les coefficients $t_{S_1^i}$ et $t_{S_4^i}$ sont bornés : en effet, si $M \in V_k$, (III.65) se réécrit

$$t_M = \frac{\left| M M_4 \right|}{\left| M_1 M_4 \right|} \le \frac{\left| \gamma_k \right| + h}{\left| \gamma_k \right|} \le 1 + \frac{1}{L_m} .$$

D'autre part,

$$|r_h(M_1) - r_h(M_4)| \le |r_h(M_1) - u(M_1)| + |u(M_1) - u(M_4)| + |u(M_4) - r_h(M_4)|,$$

qui se réécrit

$$|r_h(M_1) - r_h(M_4)| \le \left| \frac{h-d_1}{h}\left(u_{1,1} - u(M_1)\right) + \frac{d_1}{h}\left(u_{1,4} - u(M_1)\right) \right| + |u(M_1) - u(M_4)| + \left| \frac{h-d_4}{h}\left(u_{4,1} - u(M_4)\right) + \frac{d_4}{h}\left(u_{4,4} - u(M_4)\right) \right|$$

Nous utilisons alors la relation (III.58) du Lemme III.3 pour majorer chaque différence de potentiel dans cette expression. Remarquons que chaque différence de potentiel à majorer, est la différence entre le potentiel de deux points éloignés d'une distance inférieure à $|\gamma_k| + 2h$. On a donc

$$|r_h(M_1) - r_h(M_4)| \le C\left(|\gamma_k| + 2h\right)|u|_{2,V_k}.$$

On majore de même $u(S_1^i) - r_h(M_4)$ et $u(S_4^i) - r_h(M_4)$ dans (III.66) : on a, par exemple pour $u(S_1^i) - r_h(M_4)$, l'inégalité

$$u(S_1^i) - r_h(M_4) = \frac{h-d_4}{h}(u(S_1^i) - u_{4,1}) + \frac{d_4}{h}(u(S_1^i) - u_{4,4}) \le C\left(|\gamma_k| + 2h\right)|u|_{2,V_k}.$$

Ainsi, finalement,

$$\left|r_h - \Pi_k^{Q_1} r_h\right|_{1,K^i} \le C_1\left(1 + C_2 L_M + \frac{C_3}{L_m}\right) h\,|u|_{2,V_k}.$$

Le nombre de rectangles de la grille coupés par γ_k est majoré par $L_M + 1$, donc finalement

$$B_k = \left|r_h - \Pi_k^{Q_1} r_h\right|_{1,D_k} \le C_1\sqrt{L_M + 1}\left(1 + C_2 L_M + \frac{C_3}{L_m}\right) h\,|u|_{2,V_k}. \qquad \text{(III.67)}$$

En utilisant (III.67) généralisée à une grille composée de rectangles, et (III.64) pour majorer (III.52), nous obtenons la propriété i.

Montrons maintenant ii avec les valeurs de α_k, $k = 1, 2, ..., N_S$ choisies pour établir i. :

Pour tous (k_1, k_2) tels que $D_{k_1} \cap D_{k_2} \neq \varnothing$, nous décomposons

$$\left|r_h + \alpha_{k_1}\Psi_{k_1} + \alpha_{k_2}\Psi_{k_2} - u\right|_{1,D_{k_1}\cap D_{k_2}} \le \left|r_h + \Pi_{k_1}^{Q_1}(u - r_h) + \Pi_{k_2}^{Q_1}(u - r_h) - u\right|_{1,D_{k_1}\cap D_{k_2}} + \left|\alpha_{k_1}\Psi_{k_1} - \Pi_{k_1}^{Q_1}(u - r_h)\right|_{1,D_{k_1}\cap D_{k_2}} + \left|\alpha_{k_2}\Psi_{k_2} - \Pi_{k_2}^{Q_1}(u - r_h)\right|_{1,D_{k_1}\cap D_{k_2}}$$

En utilisant l'expression A_k, définie par (III.53) et majorée à l'aide de (III.61) et (III.62), et

en décomposant encore le premier terme du membre de droite de l'inégalité, on peut réécrire cette inégalité

$$\begin{aligned}\left|r_h+\alpha_{k_1}\Psi_{k_1}+\alpha_{k_2}\Psi_{k_2}-u\right|_{1,D_{k_1}\cap D_{k_2}} \le & \left|u-r_h\right|_{1,D_{k_1}\cap D_{k_2}}+\left|\Pi_{k_1}^{Q_1}u-u\right|_{1,D_{k_1}\cap D_{k_2}} \\ & +\left|\Pi_{k_2}^{Q_1}u-u\right|_{1,D_{k_1}\cap D_{k_2}}+B_{k_1}+B_{k_2}+A_{k_1}+A_{k_2}\,.\end{aligned} \qquad (\text{III.68})$$

En utilisant les estimations éléments finis classiques, on a de plus

$$\left|\Pi_{k_i}^{Q_1}u-u\right|_{1,D_{k_1}\cap D_{k_2}} \le C\,L_M\,h\left|u\right|_{2,D_{k_1}\cap D_{k_2}\cap\omega}, \quad i=1,2. \qquad (\text{III.69})$$

On peut majorer (III.68) à l'aide de (III.69), (III.61), (III.62) et (III.67), on obtient ainsi la majoration désirée ii.

?

Utilisons à présent les résultats de la Proposition III.9, ainsi que (III.48) et (III.49), pour réécrire (III.47) :

$$EA_{pot} \le \sqrt{C\,h^2\left|u\right|_{2,\omega}^2+\sum_{k=1}^{N_S}C'h^2\left|u\right|_{2,V_k}^2+C''\left(\sum_{(k_1,k_2),\ D_{k_1}\cap D_{k_2}\neq\varnothing}\left|r_h-u\right|_{1,D_{k_1}\cap D_{k_2}}^2+\left|r_h-u\right|_{1,R_{k_1k_2}}^2\right)}.$$

Le nombre de segments du maillage de surface qui peuvent couper un même rectangle de la grille est majoré par $2+\frac{1}{L_m}$, donc le nombre de V_k qui ont une intersection non vide est majoré par $2+\frac{1}{L_m}$, et donc finalement il existe des constantes $C_1(L_m,L_M,C_m,C_M)$ et $C_2(L_m,L_M,C_m,C_M)$ telles que

$$EA_{pot} \le C_1\,h\left|u\right|_{2,\omega}+C_2\sqrt{\sum_{(k_1,k_2),\ D_{k_1}\cap D_{k_2}\neq\varnothing}\left|r_h-u\right|_{1,D_{k_1}\cap D_{k_2}}^2+\left|r_h-u\right|_{1,R_{k_1k_2}}^2}\,.$$

Majorons à présent l'erreur d'approximation complète : on a

$$EA_{h,\eta} \le C_1\,h\,\left|u\right|_{2,\omega}+C_2\sqrt{\sum_{(k_1,k_2),\ D_{k_1}\cap D_{k_2}\neq\varnothing}\left|r_h-u\right|_{1,D_{k_1}\cap D_{k_2}}^2+\left|r_h-u\right|_{1,R_{k_1k_2}}^2}+C_3\,\eta\sqrt{\sum_k\left\|\lambda\right\|_{\frac{1}{2},\gamma_k}^2},$$

où C_1 et C_2 sont des constantes qui dépendent de C_m, C_M, L_m, et L_M.

4.4.4 Convergence de la solution approchée

Regroupons les résultats obtenus aux paragraphes 4.4.2 et 4.4.3, pour majorer l'erreur de discrétisation de la formulation domaine fictif,

$$\left\|u-\bar{u}_{h,\eta}\right\|_{h,\eta}+\left\|\lambda-\bar{\lambda}_\eta\right\|_M \le C\left(EC_{h,\eta}+EA_{h,\eta}\right).$$

Il existe deux constantes C_1, C_2, C_3, et C_4, qui dépendent de C_m, C_M, L_m, et L_M, telles que

$$\left\|u-\bar{u}_{h,\eta}\right\|_{h,\eta}+\left\|\lambda-\bar{\lambda}_{\eta}\right\|_{M}\leq C_1\,h\,|u|_{2,\omega}+C_3\,\eta\sqrt{\sum_k\|\lambda\|^2_{\frac{1}{2},\gamma_k}}+C_4\,\sqrt{h\eta}\,\max_{1\leq d\leq N_D}(\varepsilon_d)\,|u|_{2,\omega}$$
$$+C_2\sqrt{\sum_{(k_1,k_2),\ D_{k_1}\cap D_{k_2}\neq\varnothing}|r_h-u|^2_{1,D_{k_1}\cap D_{k_2}}+|r_h-u|^2_{1,R_{k_1k_2}}}\,. \qquad (\text{III.70})$$

Remarques sur la majoration (III.70) :

1. Elle est meilleure que celle obtenue pour (A-GPP), mais des termes dans les coins gardent le même ordre d'erreur. Ce résultat est un peu frustrant, on obtient une erreur « presque » linéaire en fonction du pas de la grille.

2. Elle fait intervenir les pas h et η des maillages, mais aussi les coefficients L_m et L_M qui bornent le rapport entre les pas des maillages de surface et de volume. Il ne faut donc pas regarder de trop près l'estimation (III.70), mais plutôt conclure que globalement elle est la somme d'un terme qui converge linéairement par rapport aux pas des maillages, plus un terme perturbateur dans les coins. De plus, il faudrait ajouter à l'estimation, l'erreur de consistance apportée par l'approximation de la surface des conducteurs, arrondie dans les coins (et qui donne donc un potentiel et une charge réguliers), par une surface polygonale.

3. Nous ne cherchons pas à relier cette estimation aux résultats obtenus en pratique : nous avons observé en pratique la charge totale et non la norme de l'erreur dans $H^{-1/2}(\gamma)$. En pratique, l'approximation (A-Capa) est plus précise que (A-GPP) pour tous les choix de maillages.

4. Si les surfaces ne coïncident pas avec la grille, la condition inf-sup est toujours vérifiée, même pour des maillages de surface plus fins que la grille de volume. Si elles coïncident avec des mailles de la grille, la condition inf-sup est vérifiée moyennant des hypothèses plus contraignantes sur les maillages, mais dans ce cas l'erreur est majorée par

$$\left\|u-\bar{u}_{h,\eta}\right\|_{h,\eta}+\left\|\lambda-\bar{\lambda}_{\eta}\right\|_{M}\leq C_1\,h\,|u|_{2,\omega}+C_3\,\eta\sqrt{\sum_k\|\lambda\|^2_{\frac{1}{2},\gamma_k}}\,,$$

et donc converge réellement linéairement.

5. L'approximation enrichie n'est pas bien adaptée dans les coins. Nous avons voulu d'une part généraliser les fonctions définies sur les segments ne formant pas les coins, et ne pas introduire de fonction spéciale dans les coins. Et d'autre part, il fallait que le système se simplifie sous une forme programmable, et le terme stabilisateur que nous obtenons de cette façon (qui correspond à une amélioration de l'approximation de la trace du potentiel à la surface des conducteurs) est satisfaisant, et les résultats sont bons en pratique. Cependant, on peut peut-être trouver une meilleure approximation dans les coins, et qui donne à résoudre le même système ou un système proche.

5. CONCLUSION

Dans ce chapitre, nous nous sommes intéressés à l'analyse en dimension 2 de la convergence de l'approximation (A-Capa), lorsque les surfaces des conducteurs sont orthogonales aux mailles de la grille.

Un cas particulier de cette situation apparaît lorsque ces surfaces coïncident avec des mailles de la grille. Dans ce cas, les approximations (A-GPP) et (A-Capa) sont identiques. Les pas des maillages doivent donc vérifier une condition de compatibilité : il a été montré [GiGl 95], que si tous les segments du maillage de surface sont au moins trois fois plus longs que le côté d'un rectangle de la grille, la condition inf-sup est vérifiée. Mais, le saut du gradient du potentiel se situant sur des mailles de la grille, il est bien pris en compte dans l'approximation (A-GPP), et l'approximation est précise si la condition inf-sup est vérifiée.

Lorsque les surfaces des conducteurs ne coïncident pas avec des mailles de la grille, nous montrons que la condition inf-sup est vérifiée pour tous choix des maillages, pour lesquels le rapport du pas du maillage de surface sur le pas de la grille de volume reste cependant minoré. Nous obtenons de plus, en utilisant les résultats classiques d'approximation des problèmes mixtes, une majoration de l'erreur meilleure que celle obtenue pour (A-GPP). Cependant il nous reste des termes dans les coins qui gardent le même ordre d'erreur, malgré nos efforts pour les faire disparaître ...

Enfin, dans le cas de surfaces des conducteurs quelconques, nous n'avons pas trouvé de formulation satisfaisante du problème qui mène au système linéaire qui a été résolu en pratique. Les calculs sont en outre plus compliqués. Nous ne présentons donc pas de résultats concernant la formulation (A-Capa) dans le cas général.

Chapitre IV. Réalisation numérique

La résolution du problème du calcul des capacités parasites d'interconnexions par une méthode de domaines fictifs, fait l'objet d'un "moteur numérique" nommé Icare. Ce chapitre n'est pas une documentation technique du programme, mais précise les principaux points de la résolution numérique du système linéaire, obtenu par la discrétisation présentée dans le chapitre 2.

Dans la première section, nous rappelons le problème à résoudre et donnons l'organisation globale du programme : après une phase d'initialisation où le système linéaire est assemblé, le problème est résolu pour *N* seconds membres, correspondant à des répartitions différentes du potentiel sur les *N* conducteurs. Nous décrivons ensuite dans la deuxième section les principales étapes de la phase d'initialisation. Enfin, dans la troisième section, nous décrivons la résolution du système discret.

Actuellement, Icare est intégré dans un outil commercial (société Silvaco).

1. STRUCTURE DU PROGRAMME

1.1. RAPPEL : CALCUL DE LA MATRICE DES CAPACITES

On modélise un circuit par une boîte parallélépipédique constituée N_D couches diélectriques homogènes, contenant *N* conducteurs C_j plongés dans des diélectriques homogènes par couches horizontales. La base de la boîte est considérée comme un plan conducteur Γ_0 au potentiel $V_0 = 0$.

La capacité C_{ij}, $i \neq j$, est l'opposé de la charge totale sur le conducteur i lorsque tous les conducteurs ont un potentiel nul sauf le conducteur j, dont le potentiel est 1. Et la capacité C_{jj} est la somme des charges sur tous les conducteurs, pour les mêmes valeurs du potentiel sur les conducteurs. Ainsi, le calcul des charges sur les conducteurs pour les potentiel des conducteurs $V_i = \delta_{ij}$, $i = 1,2,...,N_S$, permet de déterminer la j^{ème} colonne de la matrice des capacités.

Ainsi, en reprenant les notations du chapitre 2, le but du programme est de calculer de façon approchée, pour j variant entre 1 et *N*, la charge surfacique λ^j, solution de

$$\left(DF^j\right) \quad \begin{cases} \text{Trouver } (u^j, \lambda^j) \in X \times M \text{ tels que} \\ \sum_{d=1}^{N_D} \varepsilon_d \int_{\Omega_d} \nabla u^j . \nabla v \, d\Omega = \int_\gamma v \, \lambda^j \, d\gamma, \quad \forall v \in X \\ \int_{\partial C_i} (u^j - \delta_{ij}) \mu \, d\gamma = 0, \quad \forall i = 1,2,...,N, \quad \forall \mu \in M \end{cases}$$

1.2. DISCRETISATION ET OBTENTION DU SYSTEME LINEAIRE

1.2.1 Construction des maillages et conditions aux limites

Grille de volume et prise en compte des couches diélectriques :

On veut définir sur le domaine parallélépipédique Ω un maillage le plus uniforme possible, idéalement une grille régulière, de façon à pouvoir utiliser une méthode de résolution rapide sur cette grille. Mais pour pouvoir discrétiser les variables volumiques sans que la prise en compte des couches diélectriques n'introduise d'approximation supplémentaire, il faut que les interfaces entre diélectriques coïncident avec des mailles de la grille. On verra que pour pouvoir utiliser un solveur rapide, une grille régulière seulement dans deux directions suffit. Le solveur rapide utilisé étant basé sur la FFT, pour une efficacité optimale on impose que le nombre de points de la grille dans ces deux directions est une puissance de 2 plus 1. A partir d'une grille régulière dans les trois dimensions, on ajuste donc les mailles suivant z de façon à ce que les interfaces entre diélectriques coïncident avec des mailles de la grille, et qu'entre deux interfaces diélectriques la grille soit uniforme, de façon à ce que la taille des mailles de la grille soit assez régulière.

La position d'un nœud s_l de la grille est repérée par les numéros de mailles dans les trois directions, $s_l \equiv (l_x, l_y, l_z)$. Soit de plus K^i le parallélépipède de la grille dont le sommet de coordonnées les plus faibles est s_i, repéré sur la grille par $s_i \equiv (i_x, i_y, i_z)$. Nous définissons alors $Dz^i = Dz^{i_z}$ la hauteur du parallélépipède K^i, ou encore l'espacement en hauteur entre la maille $i_z - 1$ et la maille i_z de la grille. On note enfin $\varepsilon_i = \varepsilon_{i_z}$ la permittivité du diélectrique dans K^i.

On discrétise les variables de volume en utilisant des éléments finis Q_1 sur cette grille, plus des fonctions de base supplémentaires à supports dans l'union des parallélépipèdes entourant la surface des conducteurs. Le potentiel est imposé nul sur la base du domaine ($z = Z_{\min}$), et sa dérivée normale doit être nulle sur le reste de la frontière du domaine. On désigne par $n_x = 2^{r_x} + 1$, $n_y = 2^{r_y+1}$, et n_z, le nombre de points de la grille dans les trois dimensions en lesquels on va calculer numériquement le potentiel. Ce sont tous les points de la grille tels que $z \neq Z_{\min}$, c'est-à-dire les points $l = (l_x, l_y, l_z)$ de coordonnées

$$\begin{cases} x_l = (l_x - 1)Dx + X_{\min}, & l_x = 1, 2, ..., n_x \\ y_l = (l_y - 1)Dy + Y_{\min}, & l_y = 1, 2, ..., n_y \\ z_l = \sum_{o=1}^{l_z} Dz^o + Z_{\min}, & l_z = 1, 2, ..., n_z \end{cases}$$

les pas de discrétisation en x et y étant donnés par

$$Dx = \frac{X_{\max} - X_{\min}}{n_x - 1} \quad \text{et} \quad Dy = \frac{Y_{\max} - Y_{\min}}{n_y - 1}.$$

La Figure IV.1 illustre ce choix de l'indexation des points de la grille en lesquels le potentiel est calculé.

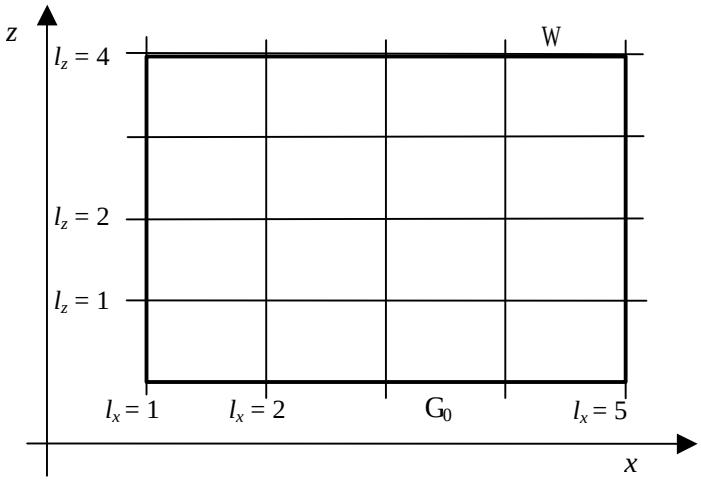


Figure IV.1. Coupe 2D d'une grille de $n_x = 6$, $n_z = 4$ points

On pose $N_V = n_x.n_y.n_z$. Un nœud de la grille est aussi repéré par son indice global l, $1 \le l \le N_V$.

Pour tenir compte des conditions de Neumann (symétrie) sur les frontières, on ajoute des points fictifs à l'extérieur du domaine, symétriques par rapport à la frontière aux points intérieurs les plus proches de la frontière. On ajoute ainsi une couche de parallélépipèdes autour de la boîte Ω, sauf sur la base. On définit en particulier

$$\begin{cases} Dz^{n_z+1} = Dz^{n_z} \\ \varepsilon^{n_z+1} = \varepsilon^{n_z} \end{cases}.$$

Maillage de surface :

Sur la surface des conducteurs γ, on définit une triangulation telle qu'une interface entre deux couches diélectriques ne traverse jamais un élément de cette triangulation. On discrétise les variables de surface en utilisant des éléments finis P_0 sur le maillage de surface.

Un choix empirique des maillages par défaut, qui permet une utilisation facile du logiciel, sera détaillé au chapitre 5.

1.2.2 Ecriture matricielle du problème discret

Soient $(\Phi_l)_{1\le l\le N_V}$ les fonctions de base volumique Q_1, correspondant aux N_V nœuds de la grille. Soient $(\Psi_k)_{1\le k\le N_S}$ les fonctions de base volumiques supplémentaires, définies chacune autour d'un élément γ_k de maillage de surface, et dont l'expression sera explicitée plus tard. Et enfin soient $(\varphi_k)_{1\le k\le N_S}$ les fonctions de base P_0 sur les N_S éléments du maillage de surface.

On introduit les matrices $\mathsf{A} \in \mathsf{M}_{N_V\times N_V}$, $\mathsf{B} \in \mathsf{M}_{N_S\times N_V}$, et la matrice diagonale $\mathsf{C} \in \mathsf{M}_{N_S\times N_S}$, dont les termes généraux sont

$$a_{l,m} = \int_\Omega \varepsilon \nabla\Phi_l . \nabla\Phi_m \, d\Omega,$$

$$b_{k,l} = -\int_{\gamma} \Phi_l \, \varphi_k \, d\gamma,$$

$$c_{k,k} = \int_{\gamma} \frac{1}{\varepsilon} \Psi_k \, \varphi_k \, d\gamma.$$

On discrétise alors (voir chapitre 2) le problème $\left(DF^j\right)$ par

$$\begin{cases} \text{Trouver } U^j \in \Re^{N_V} \text{ et } \Lambda^j \in \Re^{N_S} \text{ tels que} \\ \mathsf{A}\, U^j + \mathsf{B}^T \Lambda^j = 0 \\ \mathsf{B}\, U^j - \mathsf{C}\, \Lambda^j = -G^j \end{cases} \qquad (\text{IV.1})$$

où le second membre $G^j \in \Re^{N_S}$ dépend des conditions aux limites imposées à la surface des conducteurs, et a pour terme général

$$g_k^j = \int_{\gamma} g^j \varphi_k \, d\gamma, \text{ avec } g^j(x) = \delta_{ij}, \ \forall x \in \partial C_i .$$

1.3. ORGANISATION DU CALCUL

Quelle que soit la façon de résoudre les problèmes discrets (IV.1), la détermination de la matrice complète des capacités nécessite autant de calculs de la charge (et du potentiel) qu'il y a de conducteurs. Ces calculs, qui correspondent à différentes valeurs du potentiel à la surface des conducteurs, se ramènent à la résolution du même système, où seul le second membre G^j est modifié. Le système peut donc être assemblé une fois pour toutes lors d'une étape d'initialisation.
La matrice A, qui traduit la discrétisation dans chaque couche diélectrique de l'opérateur de Laplace sur une grille régulière dans les trois dimensions, ne nécessite aucun stockage ou initialisation.
Le calcul de la matrice de couplage B nécessite des calculs d'intégrales sur le maillage de surface, du produit d'une fonction de volume par une fonction de surface. Il faut pour cela connaître l'intersection du maillage de surface et de la grille de volume. Cette matrice B est très creuse, et ses termes non nuls sont coûteux à calculer. On les calcule donc lors d'une phase d'initialisation, et on les stocke sous forme Morse.
Enfin l'assemblage de la matrice diagonale C est peu coûteux, mais peut également être effectué lors de l'étape d'initialisation.

Le programme comprend donc les étapes suivantes :

Initialisation :

- Initialisation des maillages : construction du maillage de surface initial, définition du domaine fictif, choix du nombre de points sur la grille, adaptation de la grille en fonction des couches diélectriques.
- Calcul de l'intersection entre le maillage surfacique et la grille volumique.
- Calcul de la matrice diagonale C.
- Calcul et stockage Morse de la matrice de couplage B.
- Désallocation des intersections entre les 2 maillages.

Calcul :

Pour chaque conducteur,

- Calcul du second membre à partir des conditions aux limites,
- Résolution du système linéaire par l'algorithme du gradient conjugué sur la charge.

Fin :

Toutes les dimensions ont été entrées en microns. Affichage des capacités calculées, multipliées par la permittivité diélectrique du vide, $\varepsilon_0 = 8.85e^{-18} F/\mu m$.

2. INITIALISATION : ASSEMBLAGE DU SYSTEME LINEAIRE

La matrice A correspondant à la discrétisation du problème de Poisson sur une grille de chaque couche diélectrique avec raccord aux interfaces entre diélectriques est régulière et n'est donc pas stockée lors de l'initialisation, on rappelle seulement le terme général de la matrice.

La détermination des matrices B et C nécessite de calculer des intégrales sur les éléments d'un maillage de la surface des conducteurs, de variables de volume définies par des éléments finis Q_1 sur la grille volumique. Ces variables sont de degré au plus 3 sur chaque intersection d'un élément de surface et d'un parallélépipède de la grille, et on peut alors utiliser une formule d'intégration numérique exacte ou approchée sur chacun de ces sous-éléments.

On décrit d'abord l'obtention du maillage de la surface des conducteurs pris en entrée du programme, puis l'algorithme de calcul de l'intersection entre le maillage de surface et la grille volumique. Celui-ci repose sur l'intersection dans le cas général d'un triangle et d'un parallélépipède rectangle. On présente ensuite la formule de quadrature utilisée pour le calcul de l'intégrale surfacique sur le polygone plan convexe obtenu par l'intersection d'un parallélépipède et d'un triangle, et l'algorithme de calcul des coefficients de la matrice de couplage. Enfin on décrit le calcul des matrices B et C, et le principe du stockage Morse, utilisé pour stocker la matrice de couplage B, qui est très creuse.

2.1. NOTATIONS

Dans cette section, pour simplifier l'écriture, on note ε_i la valeur, constante, de la permittivité du diélectrique dans le parallélépipède K^i, même si elle ne dépend en fait que de l'altitude de la couche horizontale dans laquelle se situe le parallélépipède. On définit de plus

- Autour(s_l) l'ensemble des parallélépipèdes K^i dont le nœud s_l est un sommet
- Voisin $s(\gamma_k)$ l'ensemble des parallélépipèdes K^i coupés par l'élément de surface γ_k,
- Sommets(K^i) l'ensemble des sommets s_l du parallélépipède K^i.

2.2. CALCUL DE LA MATRICE A

Le terme général de la matrice A,

$$a_{l,m} = \int_\Omega \varepsilon \nabla\Phi_l . \nabla\Phi_m \, d\Omega ,$$

peut se réécrire en utilisant les notations introduites ci-dessus,

$$a_{l,m} = \sum_{K^i \in \text{Autour}(s_l) \cap \text{Autour}(s_m)} \int_{K^i} \varepsilon_i \nabla\Phi_l . \nabla\Phi_m \, d\Omega .$$

Assemblage : pour tous s_l et s_m noeuds de la grille,

pour tous les parallélépipèdes K^i dont s_l et s_m sont des sommets,

$$a_{l,m} += \int_{C_j} \varepsilon_{k_j} \nabla\Phi_l . \nabla\Phi_m \, d\Omega$$

La matrice A a en fait une structure particulière, qu'on explicite par la suite, et ses termes ne sont pas assemblés ni stockés.

2.3. CALCUL DES INTEGRALES DE SURFACE

2.3.1 Obtention du maillage de surface initial

Actuellement, le programme utilise un maillage de triangles de la surface des conducteurs effectué pour des structures homogènes par couches horizontales. Ce maillage a été réalisé par F. Charlet et S. Dupré à partir d'une description par couches des circuits, proche de celle utilisée dans les outils Silvaco :

- un fichier contenant le « masque » de chaque couche métallique : description 2D de la géométrie des lignes conductrices, et positionnement dans le plan,
- un fichier contenant les épaisseurs des couches diélectriques, et des lignes conductrices de chaque niveau de métal.

La géométrie 3D des conducteurs est d'abord reconstruite à partir de ces informations, puis la surface est maillée par des triangles. Le pas du maillage peut être modulé grâce à un paramètre.

2.3.2 Intersection maillage de surface / grille volumique

Ce paragraphe décrit rapidement le procédé de calcul de l'intersection entre les deux maillages. Ce calcul est présenté de façon plus détaillée dans [Ga 97, Ch. 6 et Annexe A], sur lequel ce paragraphe est basé.

Calculer l'intersection entre les deux maillages revient à calculer l'intersection entre chaque triangle du maillage de surface et les parallélépipèdes de la grille. Une première étape du calcul est donc, pour chaque triangle, d'éliminer rapidement un maximum de parallélépipèdes dont l'intersection avec le triangle est vide. Pour cela, on calcule la plus petite boîte parallélépipédique, constituée de parallélépipèdes de la grille, et contenant entièrement le triangle.

Pour chaque triangle λ_k du maillage de surface, on détermine $K^{i_k^1}$, $K^{i_k^2}$ et $K^{i_k^3}$, les parallélépipèdes de la grille contenant respectivement ses sommets A_k^1, A_k^2 et A_k^3. Autrement dit, si x_k^1 est l'abscisse du point A_k^1, $i_{k,x}^1$ est défini comme la partie entière du rapport $x_k^1 / \Delta x$, ou encore $i_{k,x}^1$ est le nombre entier tel que

$$i_{k,x}^1 \le \frac{x_k^1}{\Delta x} < i_{k,x}^1 + 1.$$

Et on définit les entiers $i_{k,x}^{\min}$, $i_{k,x}^{\max}$, $i_{k,y}^{\min}$, $i_{k,y}^{\max}$, $i_{k,z}^{\min}$, $i_{k,z}^{\max}$ par

$$i_{k,x}^{\min} = \min(i_{k,x}^1, i_{k,x}^2, i_{k,x}^3), \quad i_{k,x}^{\max} = \max(i_{k,x}^1, i_{k,x}^2, i_{k,x}^3),$$
$$i_{k,y}^{\min} = \min(i_{k,y}^1, i_{k,y}^2, i_{k,y}^3), \quad i_{k,y}^{\max} = \max(i_{k,y}^1, i_{k,y}^2, i_{k,y}^3),$$
$$i_{k,z}^{\min} = \min(i_{k,z}^1, i_{k,z}^2, i_{k,z}^3), \quad i_{k,z}^{\max} = \max(i_{k,z}^1, i_{k,z}^2, i_{k,z}^3).$$

Alors seuls les parallélépipèdes rectangles K^i, avec

$$\begin{cases} i_{k,x}^{\min} \le i_x \le i_{k,x}^{\max} \\ i_{k,y}^{\min} \le i_y \le i_{k,y}^{\max} \\ i_{k,z}^{\min} \le i_z \le i_{k,z}^{\max} \end{cases}$$

sont susceptibles d'avoir une intersection non nulle avec le triangle γ_k.

Algorithme de calcul de l'intersection d'un parallélépipède et d'un triangle :

Soit $(S_1 \ldots S_8)$ un parallélépipède, et $(A_1 A_2 A_3)$ un triangle, on note

- π le plan contenant le triangle,

- et, pour tout (i, j); $1 \le i < j \le 3$, π_{ij} le demi-plan inclus dans le plan π, de frontière la droite $(A_i A_j)$, et contenant le troisième sommet du triangle.

Alors le triangle $(A_1 A_2 A_3)$ est égal à l'intersection du plan π et des trois demi-plans π_{12}, π_{23} et π_{13}. Et donc, pour déterminer l'intersection P du parallélépipède et du triangle, il suffit de calculer successivement :

- l'intersection P_1 du parallélépipède et du plan π,
- l'intersection P_2 du polygone plan P_1 avec le demi-plan π_{12},
- l'intersection P_3 du polygone plan P_2 avec le demi-plan π_{23},
- l'intersection P du polygone plan P_3 avec le demi-plan π_{13}.

Ces calculs nécessitent donc de déterminer, d'une part, l'intersection d'un parallélépipède et d'un plan, et d'autre part d'un polygone plan et d'un demi-plan contenu dans le plan du polygone.

Intersection d'un parallélépipède rectangle $(S_1 \ldots S_8)$ et d'un plan π :

C'est un polygone convexe à au plus 6 sommets, que l'on note P_1. Pour le calculer, on détermine d'abord l'intersection du plan π avec les douze arêtes du parallélépipède, ce qui donne les sommets, notés N_i,du polygone. Puis on trie les sommets du polygone obtenus de façon à obtenir un polygone convexe.

Soit $\vec{n}$ le vecteur normal au plan π, on calcule pour les 8 sommets du parallélépipède, les quantités $f_i = \vec{A_1 S_i}.\vec{n}$. Soit $[S_i S_j]$ l'une des douze arêtes, alors

- si $f_i = f_j = 0$, l'arête $[S_i S_j]$ est incluse dans le plan π, et les points S_i et S_j sont deux sommets du polygone P_1,
- si $f_i f_j > 0$, alors l'intersection de l'arête $[S_i S_j]$ avec le plan π est vide,
- si $f_i f_j \leq 0$, alors l'arête $[S_i S_j]$ coupe le plan π en un point M_{ij} défini par

$$\vec{OM}_{ij} = \frac{f_j}{f_j - f_i}\vec{OS}_i + \frac{f_i}{f_i - f_j}\vec{OS}_j ,$$

et qui est un sommet du polygone.

Les sommets ainsi obtenus sont ensuite réorganisés, de façon à ce que finalement $[N_i N_{i+1}]$ soit une arête du polygone convexe P_1. Pour cela, on utilise le fait que tout côté du polygone est nécessairement sur une face du parallélépipède. De plus, si le polygone est inclus dans une face du parallélépipède, alors P_1 est un rectangle. Il faut alors vérifier que chaque segment $[N_i N_{i+1}]$ est une arête du parallélépipède.

<u>Intersection du polygone convexe P_1 et du demi-plan π_{12}</u> :

L'intersection d'un polygone plan convexe avec un demi-plan contenus dans le plan du polygone est un polygone plan convexe, qui a au plus un côté de plus que le polygone de départ. Donc P, qui est l'intersection d'un polygone plan convexe avec 3 demi-plans, est un polygone convexe à au plus 9 côtés.

Le demi-plan π_{12} est caractérisé par

$$\pi_{12} = \left\{ M; \quad (\vec{MA}_1 \times \vec{A_1 A_2}).\vec{n} \geq 0 \ \text{ et } \ M \in \pi \right\}.$$

On calcule alors, pour chaque sommet N_i du polygone P_1, la quantité $g_i = (\vec{N_i A_1} \times \vec{A_1 A_2}).\vec{n}$. On en déduit l'intersection du côté $[N_i N_{i+1}]$ avec le demi-plan π_{12} de la manière suivante :

- si $g_i \geq 0$ et $g_{i+1} \geq 0$, alors le segment $[N_i N_{i+1}]$ est inclus dans le demi-plan π_{12},
- si $g_i < 0$ et $g_{i+1} < 0$, alors le segment $[N_i N_{i+1}]$ est inclus dans le demi-plan complémentaire de π_{12},
- si $g_i < 0$ et $g_{i+1} \geq 0$, alors le segment $[N_i N_{i+1}]$ et le demi-plan π_{12} ont pour intersection le segment $[N'_{i,i+1} N_{i+1}]$ avec $\vec{ON'}_{i,i+1} = \frac{g_{i+1}}{g_{i+1} - g_i}\vec{ON}_i + \frac{g_i}{g_i - g_{i+1}}\vec{ON}_{i+1}$,
- si $g_i \geq 0$ et $g_{i+1} < 0$, alors le segment $[N_i N_{i+1}]$ et le demi-plan π_{12} ont pour intersection le segment $[N_i N'_{i,i+1}]$ avec $\vec{ON'}_{i,i+1} = \frac{g_{i+1}}{g_{i+1} - g_i}\vec{ON}_i + \frac{g_i}{g_i - g_{i+1}}\vec{ON}_{i+1}$.

Toutes les comparaisons entre 2 réels ou par rapport à 0 sont faites moyennant une tolérance fixée.

2.3.3 Schéma d'intégration numérique sur un polygone

Chaque polygone obtenu par l'algorithme précédent appartient à un seul triangle du maillage, et un seul parallélépipède de la grille. Aussi la restriction de la fonction à intégrer à ce polygone est une fonction polynomiale de degré inférieur ou égal à 3 (la variable de surface est constante, et la variable de volume est de degré inférieur ou égal à 1 en chaque coordonnée). Il faut alors utiliser une formule d'intégration numérique sur le polygone, appropriée à l'intégration d'une fonction polynomiale de degré 3.

2.3.3.1 Intégration exacte

Le polygone convexe intersection du parallélépipède K^i et du triangle γ_k, est décomposé en triangles de la façon suivante : soit n_k^i, le nombre de sommets du polygone $\gamma_k \cap K^i$, et G le centre de gravité, défini par

$$\vec{OG} = \frac{1}{n_k^i} \sum_{j=1}^{n_k^i} \vec{ON}_j .,$$

où on pose $N_{n+1} = N_1$. Le polygone $\gamma_k \cap K^i$ est la réunion disjointe des triangles constitués par le centre de gravité G et deux sommets consécutifs du polygone,

$$K^i \cap \gamma_k = \bigcup_{i=1}^{n_k^i} (N_j, N_{j+1}, G).$$

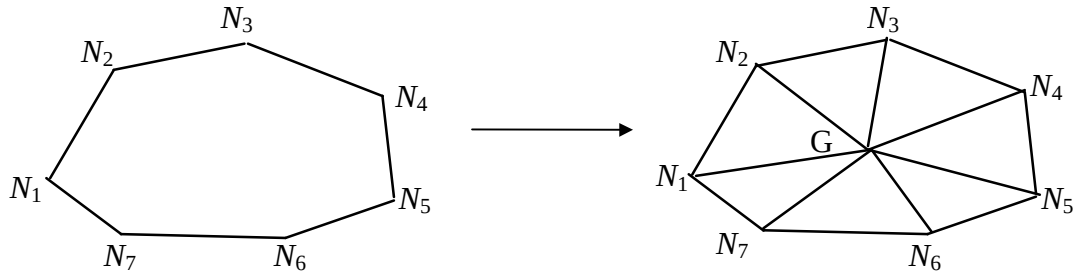


Figure IV.2. Découpage d'un polygone en triangles

Sur chaque triangle, on peut alors utiliser une formule d'intégration numérique exacte pour les polynômes de degré inférieur ou égal à 3, par exemple le schéma à 4 nœuds de Hammer-Stroud.

Coordonnées barycentriques	multiplicité	poids
$\left(\frac{1}{3},\frac{1}{3},\frac{1}{3}\right)$	1 C_0	$w_0 = -\frac{9S}{16}$
$\left(\frac{1}{5},\frac{1}{5},\frac{3}{5}\right)$	3 C_1, C_2, C_3	$w_j = \frac{25S}{48}$

(S = aire du triangle)

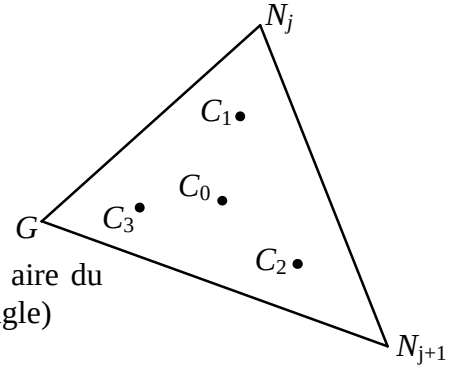


Figure IV.3. Intégration numérique sur un triangle : schéma à 4 nœuds de Hammer-Stroud

Le schéma d'intégration de Hammer-Stroud permet ainsi d'écrire, pour f fonction polynomiale de degré inférieur ou égal à 3, on a alors

$$\int_{\gamma_k \cap K^i} f \, d\gamma = \sum_{l=1}^{n} \int_{(N_l, N_{l+1}, G)} f \, d\gamma = \sum_{l=1}^{n} \left(\sum_{p=0}^{4} \omega_p f(C_p^l) \right).$$

2.3.3.2 Intégration approchée

Mené de cette façon, le calcul des intégrales de surface est exact. Mais on remarque que dans notre problème cela n'est pas forcément nécessaire, et qu'on garde des bons résultats en approchant la fonction f sur le polygone simplement par sa valeur au barycentre du polygone. Ainsi, si G_k^i est le barycentre du polygone $\gamma_k \cap K^i$, on approche $\int_{\gamma_k \cap K^i} f d\gamma$ par $f(G_k^i) Aire(\gamma_k \cap K^i)$.

Cette approximation permet non seulement une simplification du calcul de la matrice de couplage, mais surtout un gain en place mémoire, en ne gardant au moment du calcul des polygones intersections des conducteurs et de la grille que l'aire et le barycentre de ces polygones au lieu de tous ses sommets.

2.4. CALCUL ET STOCKAGE DE LA MATRICE DE COUPLAGE B

2.4.1 Calcul d'un terme de la matrice de couplage

Le terme de la matrice de couplage correspondant au nœud s_l de la grille, et au triangle γ_k du maillage de surface,

$$b_{k,l} = -\int_{\gamma_k} \Phi_l \, \varphi_k \, d\gamma,$$

se réécrit, en décomposant les termes sur chaque parallélépipède dont s_l est un sommet, et dont l'intersection avec γ_k est non vide,

$$b_{k,l} = - \sum_{K^i \in \text{Autour}(s_l) \cap Voisin(\gamma_k)} \int_{\gamma_k \cap K^i} \Phi_l \, d\gamma.$$

Le terme $b_{k,l}$ est donc non nul si s_l est le sommet d'au moins un parallélépipède K^i coupé par l'élément de surface γ_k.

2.4.2 Assemblage

En pratique, pour chaque triangle du maillage de surface, on calcule les termes de couplage correspondant aux sommets des parallélépipèdes qui ont une intersection non vide avec le triangle.

Assemblage : pour tout γ_k élément du maillage de surface,

pour tous les parallélépipèdes K^i tels que $\gamma_k \cap K^i \neq \emptyset$,

pour tous les sommets s_l du parallélépipède K^i,

$$b_{k,l} - = \int_{\gamma_k \cap K^i} \Phi_l \, d\gamma$$

Cette intégrale est calculée comme précisé précédemment.

2.4.3 Stockage Morse

La matrice de couplage est très creuse, et de dimension trop grande pour pouvoir être entièrement stockée. Afin d'optimiser le coût en mémoire et en calcul, nous ne stockons que les termes non nuls de cette matrice, en utilisant un stockage Morse.

Le stockage Morse :

Il consiste à ne stocker que les termes non nuls de la matrice, dans un tableau monodimensionnel de réels. On associe de plus à ce tableau de réels deux tableaux d'entiers, l'un contenant les indices de colonnes de chacun des termes et l'autre pointant sur le début de chaque ligne. Dans notre exemple, on définit les 3 tableaux suivants :

- MCM = termes non nuls de la matrice, dans l'ordre de parcours des lignes, de gauche à droite ;
- IDL = pour chaque ligne (pour chaque triangle du maillage surfacique), l'indice dans le tableau MCM du premier élément non nul de la ligne (= on pointe sur le début de chaque ligne) ;
- IC = pour chaque élément de MCM, indice de colonne, c'est-à-dire repérage sur la grille volumique (on décompose en fait IC en 3 tableaux ICX, ICY et ICZ, correspondant à la position sur la grille dans chaque direction).

Algorithme d'assemblage de la matrice sous forme Morse :

On ne peut pas stocker tous les termes dans une matrice de dimension $N_S.N_V$, puis la parcourir en ne gardant que les termes non nuls, cela prendrait trop de place mémoire, même temporaire, et trop de temps de calcul. D'autre part, un terme non nul de la matrice, associé à un triangle γ_k et un nœud s_l, peut réunir plusieurs contributions, provenant de l'intégrale sur plusieurs parallélépipèdes qui ont le sommet s_l en commun, et qui ont une intersection non vide avec γ_k. On ne peut donc pas non plus simplement ajouter les éléments au tableau au fur et à mesure qu'on les calcule.

Pour chaque triangle, on fait donc deux parcours de tous les sous-polygones intersections du triangle avec un parallélépipède de la grille volumique :

- un premier parcours où l'on calcule et garde en mémoire la ligne correspondante de la matrice de couplage, de dimension N_V ; où l'on détermine le nombre de termes non nuls et leur place dans cette ligne,
- un deuxième parcours où l'on stocke ces éléments sous forme Morse, dans des tableaux alloués entre temps.

Et enfin, on concatène tous ces tableaux (chacun associé à un élément de surface) pour donner les tableaux définitifs.

Explicitons à présent le produit de la matrice B ou de sa transposée par un vecteur, en utilisant les tableaux introduits au début du paragraphe :

Calcul des produits $\mathsf{B}\,u$ et $\mathsf{B}^T\lambda$:

Calcul de $\mathsf{B}\,u$: Pour chaque triangle γ_k du maillage de surface

$(\mathsf{B}\,u)[k] = 0$

pour m de $IDL[k]$ à $IDL[k+1]-1$

$(\mathsf{B}\,u)[k] += MCM[m] * u[ICZ[m], ICY[m], ICX[m]]$

Calcul de $\mathsf{B}^T\lambda$: Pour chaque nœud $s_l \equiv (l_x, l_y, l_z)$ de la grille

$$\left(\mathsf{B}^T\lambda\right)\left[l_z, l_y, l_x\right] = 0$$

Pour chaque triangle γ_k du maillage de surface

pour m de $IDL[k]$ à $IDL[k+1]-1$

$$\left(\mathsf{B}^T\lambda\right)\left[ICZ[m], ICY[m], ICX[m]\right] += MCM[m] * \lambda[k]$$

2.5. CALCUL DE LA MATRICE C

Le terme de la matrice diagonale C correspondant à l'élément γ_k du maillage de surface se calcule par

$$c_{k,k} = \frac{1}{2} \sum_{K^i \in \text{Voisin } s(\gamma_k)} \frac{1}{\varepsilon_i} \sum_{s_l \in \text{Sommets}(K^i)} E_{s_l} \int_{\gamma_k \cap K^i} \Phi_l \, d\gamma ,$$

où $E_{s_l} = \left| \vec{Gs_l} . \vec{n}_\gamma \right|$ pour un point G quelconque de l'élément de surface γ_k.

Cette décomposition, pour chaque élément du maillage de surface, en des contributions correspondant à chacun des parallélépipèdes qui ont une intersection non vide avec l'élément, se traduit par l'algorithme d'assemblage suivant :

Assemblage : pour tout γ_k élément du maillage de surface,

pour tous les parallélépipèdes K^i tels que $\gamma_k \cap K^i \neq \varnothing$,

pour tous les sommets s_l du parallélépipède K^i,

$c_{k,k} += \frac{1}{2\varepsilon} E_{s_l} \int_{\gamma_k \cap K^i} \Phi_l \, d\gamma$ (calculé par la formule de quadrature définie au paragraphe 2.3.3).

Si l'élément γ_k se trouve sur la grille, alors $c_k = 0$.

2.6. SIMPLIFICATION DU CALCUL DE B ET C POUR UN CHOIX PARTICULIER DU MAILLAGE DE SURFACE

Un choix particulier du maillage de surface est l'intersection de la surface des conducteurs avec la grille de volume, ou encore, l'intersection d'un maillage de surface grossier et de la grille. Ce maillage est formé de polygones à au plus 9 côtés, et non plus de triangles, mais cela ne pose pas de problème particulier puisque l'on approche la charge par une valeur constante sur chaque élément de surface (éléments finis P_0). Le maillage de surface ainsi obtenu est assez fin, et le nombre d'inconnues de surface est donc important, on pourrait donc s'attendre à des besoins conséquents en mémoire. Ce n'est pas le cas pour deux raisons :

- dans le cas d'un maillage quelconque moins raffiné, l'intersection avec la grille doit de toute façon être calculée, car les intégrations sur la surface des conducteurs sont décomposées sur ces intersections pour obtenir une bonne précision de calcul,
- les variables de surface sont pour ce maillage des vecteurs de dimension importante, mais tout de même négligeable par rapport aux variables de volume. De plus, on pourrait s'attendre à ce que la matrice de couplage nécessite davantage de place en mémoire que pour un maillage de surface moins raffiné, puisqu'elle est de dimension (Ntc,n_x.n_y.n_z). Mais chaque

élément de surface étant couplé à moins de points de la grille que pour des éléments plus gros, le nombre de termes non nuls de la matrice n'augmente pas tant que ça. En fait, chaque élément de surface est inclus dans un parallélépipède de la grille, et donc couplé à exactement 8 points de la grille, les 8 sommets de ce parallélépipède. L'assemblage et le stockage des matrices B et C sont donc très simplifiés et moins coûteux en temps de calcul et en mémoire que dans le cas général. En effet, comme on connaît à l'avance le nombre de termes non nuls de la matrice de couplage B, on évite l'allocation de tableaux intermédiaires plus gros.

Assemblage et stockage Morse de B :

Comme chaque élément de surface est couplé à exactement 8 points de la grille, les tableaux IC et MCM sont de dimension $8N_S$. On sait de plus sans calcul que l'indice dans le tableau MCM du premier élément non nul de la ligne *k*, correspondant à l'élément de surface γ_k, est $IDL[k] = 8*(k-1)+1$. L'algorithme de remplissage de ces tableaux est alors simplifié :

indice_cour = 0.
pour tout élément γ_k du maillage de surface,
  pour chaque sommet $s_l = (l_x, l_y, l_z)$ du parallélépipède K^i qui contient γ_k,
    indice_cour ++,
    calcul de MCM [indice_cour] $= -\int_{\gamma_k} \Phi_l \, d\gamma$,
    remplissage de IC [indice_cour] $= (l_x, l_y, l_z)$.

Assemblage de C :

pour tout élément γ_k du maillage de surface,
  pour chaque sommet $s_l = (l_x, l_y, l_z)$ du parallélépipède K^i qui contient γ_k,
    $c_{k,k} += E_{s_l} \int_{\gamma_k \cap K^i} \Phi_l \, d\gamma$,

C'est ce maillage de surface qui est proposé par défaut dans le programme : en plus des simplifications qu'il permet, il s'est révélé un bon choix en termes de rapidité de l'algorithme de résolution du système. En pratique on n'utilise pas exactement l'intersection de la surface des conducteurs et de la grille, mais l'intersection d'un maillage très grossier de la surface des conducteurs avec la grille.

3. RESOLUTION DU PROBLEME DISCRET

3.1. ALGORITHME DE RESOLUTION DU SYSTEME LINEAIRE

Pour résoudre le système (IV.1) en U^j et Λ^j, on en élimine la variable U^j, et on se ramène à la résolution du système

$$(\mathsf{B}\ \mathsf{A}^{-1}\mathsf{B}^{T} + \mathsf{C})\,\Lambda^{j} = G^{j}. \qquad (\text{IV.2})$$

On déduit ensuite U^{j} par

$$U^{j} = -\mathsf{A}^{-1}\mathsf{B}^{\mathrm{T}}\,\Lambda^{j}.$$

Algorithme de résolution :

Nous appliquons l'algorithme du gradient conjugué non préconditionné au système en la charge (IV.2). Notons, pour $(X,R) \in \left(\Re^{N_S}\right)^2$, $X = (x_k)$ et $R = (r_k)$,

$$(X,R) = \sum_{k=1}^{N_S} x_k r_k .$$

Nous donnons ici l'algorithme sous sa forme matricielle, en omettant l'indice *j* associé à la $j^{\text{ème}}$ condition aux limites.

Initialisation :

- choisir Λ_0
- résoudre $U_0 = -\mathsf{A}^{-1}\mathsf{B}^{\mathrm{T}}\Lambda_0$
- poser $\begin{cases} R_0 = G + \mathsf{B}\,U_0 - \mathsf{C}\,\Lambda_0 \\ W_0 = R_0 \end{cases}$

Itérations : pour $n \geq 0$, on suppose Λ_n, R_n, W_n connus, et on calcule $\Lambda_{n+1}, R_{n+1}, W_{n+1}$:

- résoudre $Z_n = \mathsf{A}^{-1}\mathsf{B}^{\mathrm{T}} W_n$
- prendre la trace $X_n = \mathsf{B}\,Z_n + \mathsf{C}\,W_n$
- soit $\tau_n = \dfrac{(R_n,R_n)}{(X_n,W_n)} = \dfrac{(R_n,R_n)}{(X_n,R_n)}$, poser $\begin{cases} \Lambda_{n+1} = \Lambda_n + \tau_n W_n \\ U_{n+1} = U_n - \tau_n Z_n \\ R_{n+1} = R_n - \tau_n X_n \end{cases}$
- Si $\dfrac{(R_{n+1},R_{n+1})}{(G,G)} < \varepsilon$ alors fin.

  Sinon soit $s_{n+1} = \dfrac{(R_{n+1},R_{n+1})}{(R_n,R_n)}$,

  poser $W_{n+1} = R_{n+1} + \sigma_{n+1} W_n$.

Critère d'arrêt de l'algorithme :

Il est important de choisir convenablement le critère de convergence de l'algorithme, c'est-à-dire d'une part de ne pas effectuer des itérations inutilement, d'autre part de ne pas arrêter l'algorithme trop loin de la solution, suivant la précision désirée. Il paraît donc préférable de faire dépendre ce critère de la précision espérée des calculs, et donc du choix de la grille de volume.

En pratique, nous verrons que nous proposons un choix par défaut de la grille de volume, dont nous estimons qu'il permet de calculer les capacités avec une précision d'environ 5 pour cent. L'utilisateur peut ensuite raffiner cette grille en entrant un paramètre qui définit la puissance de 2 par laquelle est multiplié le nombre de points de la grille dans chaque direction. Si l'utilisateur utilise ces options, et n'entre pas lui-même son choix de la grille, le critère est adapté au degré de raffinement de la grille : plus celle-ci est fine, plus ε est pris petit dans le critère d'arrêt

$$\frac{(R_{n+1}, R_{n+1})}{(G,G)} < \varepsilon .$$

D'autre part, la structure régulière de la grille permet, à chaque itération de l'algorithme, un calcul exact et efficace de $\mathsf{A}^{-1} Y_n$, où $Y_n = \mathsf{B}^{\mathrm{T}} W_n$, sans stockage en mémoire. Nous utilisons pour cela un algorithme de résolution rapide de l'équation de Poisson sur un rectangle, faisant intervenir la FFT. La description de cet algorithme est l'objet du paragraphe suivant.

3.2. RESOLUTION RAPIDE DU PROBLEME DE POISSON

Il s'agit de résoudre le système

$$\mathsf{A}\, U = Y , \qquad (\text{IV.3})$$

où $U = (u_l)_{1 \le l \le N_V}$ et $Y = (y_l)_{1 \le l \le N_V}$ sont les vecteurs des valeurs aux nœuds de la grille, de fonctions définies sur le volume Ω, et où la matrice A est de terme général

$$a_{l,m} = \int_\Omega \varepsilon \nabla \Phi_l . \nabla \Phi_m \, d\Omega .$$

Rappelons que la permittivité électrique ε et la hauteur des parallélépipèdes, sont constantes sur chaque couche horizontale de parallélépipèdes, mais dépendent de l'emplacement en hauteur de la couche de parallélépipèdes. Ainsi, on note ε_k et Dz^k la permittivité et la hauteur de la $k^{\text{ième}}$ couche de parallélépipèdes.

On a vu au paragraphe 3.1 qu'une résolution de ce système est nécessaire à chaque itération de l'algorithme du gradient conjugué. Il est donc important qu'elle soit rapide. Nous utilisons pour cela un solveur basé sur des transformées de Fourier rapides (FFT) et des résolutions de systèmes tridiagonaux. Le principe du solveur pour l'équation de Poisson, ou plus généralement pour des équations aux dérivées partielles à variables séparées dans des domaines rectangulaires 2D, est détaillé par exemple dans [GoMe 80], et les diverses conditions aux limites possibles sont traitées dans [Sw 77]. L'algorithme s'étend facilement au cas de la dimension 3, en ajoutant un étage de transformées de Fourier. De plus, si on n'utilise l'analyse de Fourier que dans deux directions sur trois (ou une direction sur deux en 2D), et que dans la dernière dimension on résout directement des systèmes tridiagonaux, on remarque que l'on peut faire varier des paramètres dans cette dernière dimension. Nous allons ainsi, dans notre cas, pouvoir prendre en compte des couches diélectriques de permittivités différentes, et des variations de la hauteur des couches de parallélépipèdes. De plus, dans [GoMe 80], pour le cas 2D, il est précisé que l'analyse de Fourier dans une direction, suivie de la résolution de systèmes tridiagonaux, est souvent plus efficace que l'analyse de Fourier dans deux directions. La prise en compte des couches diélectriques n'apportera donc probablement pas de coût supplémentaire au calcul, ou bien un coût très faible.

Nous explicitons ici le problème en dimension 3 : dans le paragraphe 3.2.1, nous donnons l'expression de la matrice A, dans le paragraphe 3.2.2 nous présentons le principe de la résolution, et nous en déduisons dans le paragraphe 3.2.3 l'algorithme global du solveur 3D, enfin nous détaillons dans le paragraphe 3.2.4 les différentes étapes de cet algorithme.

3.2.1 Expression de la matrice A

Nous donnons dans ce paragraphe l'expression de la matrice A, sans détailler le calcul de ses termes. Considérons les coefficients suivants, dépendant uniquement de l'emplacement en hauteur des parallélépipèdes, repéré par $k = 1, 2, ..., n_z$,

$$\begin{cases} a^k = \dfrac{\varepsilon_k}{9}\left(Dz^k(-\dfrac{1}{4}\dfrac{Dy}{Dx} - \dfrac{1}{4}\dfrac{Dx}{Dy}) - \dfrac{1}{4}\dfrac{DxDy}{Dz^k} \right) \\ b^k = \dfrac{2\varepsilon_k}{9}\left(Dz^k(\dfrac{1}{4}\dfrac{Dy}{Dx} - \dfrac{1}{2}\dfrac{Dx}{Dy}) - \dfrac{1}{2}\dfrac{DxDy}{Dz^k} \right) \\ c^k = \dfrac{2\varepsilon_k}{9}\left(Dz^k(-\dfrac{1}{2}\dfrac{Dy}{Dx} + \dfrac{1}{4}\dfrac{Dx}{Dy}) - \dfrac{1}{2}\dfrac{DxDy}{Dz^k} \right) \\ d^k = \dfrac{4\varepsilon_k}{9}\left(Dz^k(\dfrac{1}{2}\dfrac{Dy}{Dx} + \dfrac{1}{2}\dfrac{Dx}{Dy}) - \dfrac{DxDy}{Dz^k} \right) \end{cases}$$

$$\begin{cases} e^{k,k+1} = \dfrac{1}{9}\left(\varepsilon_{k+1}\left(Dz^{k+1}(-\dfrac{1}{2}\dfrac{Dy}{Dx} - \dfrac{1}{2}\dfrac{Dx}{Dy}) + \dfrac{1}{4}\dfrac{DxDy}{Dz^{k+1}} \right) + \varepsilon_k\left(Dz^k(-\dfrac{1}{2}\dfrac{Dy}{Dx} - \dfrac{1}{2}\dfrac{Dx}{Dy}) + \dfrac{1}{4}\dfrac{DxDy}{Dz^k} \right) \right) \\ f^{k,k+1} = \dfrac{2}{9}\left(\varepsilon_{k+1}\left(Dz^{k+1}(\dfrac{1}{2}\dfrac{Dy}{Dx} - \dfrac{Dx}{Dy}) + \dfrac{1}{2}\dfrac{DxDy}{Dz^{k+1}} \right) + \varepsilon_k\left(Dz^k(\dfrac{1}{2}\dfrac{Dy}{Dx} - \dfrac{Dx}{Dy}) + \dfrac{1}{2}\dfrac{DxDy}{Dz^k} \right) \right) \\ g^{k,k+1} = \dfrac{2}{9}\left(\varepsilon_{k+1}\left(Dz^{k+1}(-\dfrac{Dy}{Dx} + \dfrac{1}{2}\dfrac{Dx}{Dy}) + \dfrac{1}{2}\dfrac{DxDy}{Dz^{k+1}} \right) + \varepsilon_k\left(Dz^k(-\dfrac{Dy}{Dx} + \dfrac{1}{2}\dfrac{Dx}{Dy}) + \dfrac{1}{2}\dfrac{DxDy}{Dz^k} \right) \right) \\ h^{k,k+1} = \dfrac{4}{9}\left(\varepsilon_{k+1}\left(Dz^{k+1}(\dfrac{Dy}{Dx} + \dfrac{Dx}{Dy}) + \dfrac{DxDy}{Dz^{k+1}} \right) + \varepsilon_k\left(Dz^k(\dfrac{Dy}{Dx} + \dfrac{Dx}{Dy}) + \dfrac{DxDy}{Dz^k} \right) \right) \end{cases}.$$

Nous notons $\text{Tridiag_neu}(a, b \mid n)$ la matrice tridiagonale d'ordre n

$$\text{Tridiag_neu}(a, b \mid n) = \begin{pmatrix} b & 2a & & & \\ a & \ddots & a & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a & \ddots & a \\ & & & 2a & b \end{pmatrix}.$$

Pour $k = 1, 2, ..., n_z$, on définit alors les matrices

$$A^k = \text{Tridiag_neu}(a^k, b^k \mid n_x),$$

$$B^k = \text{Tridiag_neu}(c^k, d^k \mid n_x),$$

$$C^{k,k+1} = \text{Tridiag_neu}(e^{k,k+1}, f^{k,k+1} \mid n_x)$$

$$\text{et } D^{k,k+1} = \text{Tridiag_neu}(g^{k,k+1}, h^{k,k+1} \mid n_x).$$

Nous notons u_{kj} le vecteur correspondant à la ligne horizontale d'indices (k, j), et u_k le vecteur de vecteur correspondant à la couche horizontale d'indice k :

$$u_{kj} = \text{vecteur}(u_{kj1},...,u_{kjn_x}), \quad u_k = \text{vecteur}(u_{k1},...,u_{kn_y}).$$

Alors l'équation (IV.3) s'écrit, pour tout point intérieur (en hauteur) du maillage, $k = 2,3,...,n_z - 1$,

$$\begin{pmatrix} B^{k+1} & 2A^{k+1} & & \\ A^{k+1} & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & A^{k+1} \\ & & 2A^{k+1} & B^{k+1} \end{pmatrix} u_{k+1} + \begin{pmatrix} D^{k,k+1} & 2C^{k,k+1} & & \\ C^{k,k+1} & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & C^{k,k+1} \\ & & 2C^{k,k+1} & D^{k,k+1} \end{pmatrix} u_k +$$
$$\begin{pmatrix} B^{k} & 2A^{k} & & \\ A^{k} & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & A^{k} \\ & & 2A^{k} & B^{k} \end{pmatrix} u_{k-1} = y_k. \qquad \text{(IV.4)}$$

3.2.2 Principe de la résolution

La résolution rapide du problème repose sur le fait qu'on connaît explicitement les valeurs propres et vecteurs propres des matrices tridiagonales intervenant dans (IV.4), et que les changements de base permettant de diagonaliser ces matrices peuvent être effectués en utilisant des transformées de Fourier rapide. Nous utilisons pour cela le résultat suivant :

Lemme IV.1 *La matrice tridiagonale d'ordre n,* $\text{Tridiag_neu}(a,b|n)$*, a pour valeurs propres*

$$\lambda_i = b + 2a\cos\frac{(i-1)\pi}{n-1}, \quad i = 1,2,...,n.$$

Les vecteurs propres associés v_i, $i = 1,2,...,n$ *, sont donnés par*

$$v_i = \left((v_i)_1 = \frac{1}{2}C; \quad (v_i)_l = \cos\left(\frac{il\pi}{n-1}\right)C, \ 2 \le l \le n-1; \quad (v_i)_n = \frac{(-1)^i}{2}C \right),$$

où C *est une constante que l'on prend ici égale à* $\sqrt{\frac{2}{n-1}}$ *pour avoir* $\|v_i\| = 1$.

En pratique, on choisit de ne pas utiliser les vecteurs propres normalisés, on définit Q la matrice composée des vecteurs

$$q_i = \frac{1}{C}v_i, \ i = 1,2,...,n_x.$$

Son inverse vaut alors $Q^{-1} = C^2 Q$. Les matrices A^k, B^k, $C^{k,k+1}$ et $D^{k,k+1}$ sont de la forme $\text{Tridiag_neu}(a,b|n_x)$, on peut donc les diagonaliser par

$$\Lambda_X = Q^{-1} X Q, \qquad X = A^k, B^k, C^{k,k+1}, D^{k,k+1}, \quad \forall k.$$

En utilisant cette diagonalisation et en posant, pour tous $j = 1,2,...,n_y$ et $k = 1,2,...,n_z$,

$$\begin{cases} \bar{u}_{k\,j} = Q^{-1} u_{k\,j} \\ \bar{y}_{k\,j} = Q^{-1} y_{k\,j} \end{cases},$$

la partie du système (IV.4) qui correspond sur la grille à la ligne d'indices (k, j), se réécrit, pour tous indices intérieurs de la grille (k, j),

$$\begin{aligned} &(\Lambda_{A^{k+1}} \bar{u}_{k+1\,j+1} + \Lambda_{B^{k+1}} \bar{u}_{k+1\,j} + \Lambda_{A^{k+1}} \bar{u}_{k+1\,j-1}) + (\Lambda_{C^{k,k+1}} \bar{u}_{k\,j+1} + \Lambda_{D^{k,k+1}} \bar{u}_{k\,j} + \Lambda_{C^{k,k+1}} \bar{u}_{k\,j-1}) + \\ &(\Lambda_{A^k} \bar{u}_{k-1\,j+1} + \Lambda_{B^k} \bar{u}_{k-1\,j} + \Lambda_{A^k} \bar{u}_{k-1\,j-1}) = \bar{y}_{k\,j}. \end{aligned} \qquad (\text{IV.5})$$

Notons α_i^k, β_i^k, $\chi_i^{k,k+1}$, $\delta_i^{k,k+1}$, $i = 1,2,...,n_x$, $k = 1,2,...,n_z$, les valeurs propres respectivement de A^k, B^k, $C^{k,k+1}$ et $D^{k,k+1}$, et considérons les matrices tridiagonales

$$\Gamma_i^{1,k} = \text{Tridiag_neu}(\alpha_i^k, \beta_i^k \,|\, n_y),$$

$$\Gamma_i^{2,k,k+1} = \text{Tridiag_neu}(\chi_i^k, \delta_i^k \,|\, n_y).$$

Réorganisons les valeurs de $\bar{u}$ aux nœuds de la grille, et posons

$$\bar{u}_{ki} = \text{vecteur}(\bar{u}_{k1i}, ..., \bar{u}_{kn_y i}) \text{ et } \bar{u}_i = \text{vecteur}(\bar{u}_{1i}, ..., \bar{u}_{n_z i}),$$

on déduit de (IV.5) que l'on peut réécrire le système (IV.4) sous la forme suivante,

$$\begin{pmatrix} \Gamma_i^{2,1,2} & \Gamma_i^{1,2} & & & \\ \Gamma_i^{1,2} & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \Gamma_i^{1,n_z-1} & \ddots & \Gamma_i^{1,n_z} \\ & & & 2\Gamma_i^{1,n_z} & \Gamma_i^{2,n_z,n_z+1} \end{pmatrix} \bar{u}_i = \bar{y}_i, \quad \forall i = 1,2,...,n_x.$$

De la même façon que précédemment, on peut diagonaliser les matrices $\Gamma_i^{1,k}$ et $\Gamma_i^{2,k,k+1}$ par

$$P^{-1}\,\Gamma_i^{1,k}\,P = \text{diag}(\lambda_{i,1}^k, \lambda_{i,2}^k, ..., \lambda_{i,n_y}^k)$$

$$P^{-1}\,\Gamma_i^{2,k,k+1}\,P = \text{diag}(\mu_{i,1}^{k,k+1}, \mu_{i,2}^{k,k+1}, ..., \mu_{i,n_y}^{k,k+1})$$

Posons

$$\begin{cases} \tilde{u}_{ki} = P^{-1} \bar{u}_{ki} \\ \tilde{y}_{ki} = P^{-1} \bar{y}_{ki} \end{cases},$$

et réorganisons les valeurs de $\tilde{u}$ par $\tilde{u}_{ji} = \text{vecteur}(\tilde{u}_{1ji}, ..., \tilde{u}_{n_z ji})$. Le problème se ramène ainsi à la résolution de $n_x.n_y$ systèmes tridiagonaux d'ordre n_z indépendants entre eux,

$$V_i^j \tilde{u}_{ji} = \tilde{y}_{ji}, \quad \forall i = 1..n_x, \ \forall j = 1..n_y, \ \text{où} \ \ V_i^j = \begin{pmatrix} \mu_{i,j}^{1,2} & \lambda_{i,j}^2 & & \\ \lambda_{i,j}^2 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \lambda_{i,j}^{n_z} \\ & & 2\lambda_{i,j}^{n_z} & \mu_{i,j}^{n_z,n_z+1} \end{pmatrix},$$

et on retrouve le potentiel u par deux transformations $\hat{u}_{ki} = P\tilde{u}_{ki}$, puis $u_{k\,j} = Q\bar{u}_{k\,j}$.

3.2.3 Algorithme de résolution

En résumé du paragraphe 3.2.2, l'algorithme de résolution du système s'écrit

- Calcul de $\bar{y}_{kj} = Q^{-1} y_{kj}$; réorganisation de $\bar{y}$ - ($n_z.n_y$ FFT de dimension n_x)
- Calcul de $\tilde{y}_{ki} = P^{-1}\bar{y}_{ki}$; réorganisation de $\tilde{y}$ - ($n_z.n_x$ FFT de dimension n_y)
- Résolution de $V_i^j \tilde{u}_{ji} = \tilde{y}_{ji}$ - ($n_y.n_x$ systèmes tridiag. de dim. n_z)
- Réorganisation de $\tilde{u}$; calcul de $\bar{u}_{ki} = P\tilde{u}_{ki}$ - ($n_z.n_x$ FFT de dimension n_y)
- Réorganisation de $\bar{u}$; Calcul de $u_{kj} = Q\bar{u}_{kj}$. - ($n_z.n_y$ FFT de dimension n_x)

Nous donnons dans le paragraphe 3.2.4 le détail des transformées de Fourier.

3.2.4 Diagonalisation : changements de base et valeurs propres

Les valeurs propres des matrices A^k, B^k, $C^{k,k+1}$ et $D^{k,k+1}$ sont respectivement

$$\begin{cases} \alpha_i^k = b^k + 2a^k \cos\dfrac{(i-1)\pi}{n_x - 1}, \\ \beta_i^k = d^k + 2c^k \cos\dfrac{(i-1)\pi}{n_x - 1}, \\ \chi_i^{k,k+1} = f^{k,k+1} + 2e^{k,k+1} \cos\dfrac{(i-1)\pi}{n_x - 1}, \\ \delta_i^{k,k+1} = h^{k,k+1} + 2g^{k,k+1} \cos\dfrac{(i-1)\pi}{n_x - 1}. \end{cases}$$

et on en déduit celles de $\Gamma_i^{1,k}$ et $\Gamma_i^{2,k,k+1}$ par

$$\begin{cases} \lambda_{i,j}^k = \beta_i^k + 2\alpha_i^k \cos\dfrac{(j-1)\pi}{n_y - 1}, \\ \mu_{i,j}^{k,k+1} = \delta_i^{k,k+1} + 2\chi_i^{k,k+1} \cos\dfrac{(j-1)\pi}{n_y - 1}. \end{cases}$$

Le calcul de $\bar{y}_{kj} = Q^{-1} y_{kj}$ se fait par

$$\left(\bar{y}_{kj}\right)_i = \frac{1}{n_x - 1}\left(y_{kj}\right)_1 + \frac{2}{n_x - 1}\left(\sum_{l=1}^{n_x-2}\left(y_{kj}\right)_{l+1} \cos\left(\frac{il\pi}{n_x - 1}\right)\right) + \frac{1}{n_x - 1}(-1)^i \left(y_{kj}\right)_{n_x}$$

De même, $\tilde{y}_{ki} = P^{-1}\bar{y}_{ki}$ s'écrit

$$\left(\tilde{y}_{kj}\right)_j = \frac{1}{n_y - 1}\left(\bar{y}_{ki}\right)_1 + \frac{2}{n_y - 1}\left(\sum_{l=1}^{n_y-2}\left(\bar{y}_{ki}\right)_{l+1} \cos\left(\frac{jl\pi}{n_y - 1}\right)\right) + \frac{1}{n_y - 1}(-1)^j \left(\bar{y}_{ki}\right)_{n_y}$$

Les transformées inverses $\bar{u}_{ki} = P\tilde{u}_{ki}$ et $u_{kj} = Q\bar{u}_{kj}$ s'écrivent

$$\left(\bar{u}_{ki}\right)_j = \frac{1}{2}\left(\tilde{u}_{ki}\right)_1 + \left(\sum_{l=1}^{n_y-2}\left(\tilde{u}_{ki}\right)_{l+1}\cos\left(\frac{jl\pi}{n_y-1}\right)\right) + \frac{1}{2}(-1)^j\left(\tilde{u}_{ki}\right)_{n_y},$$

$$\left(u_{kj}\right)_i = \frac{1}{2}\left(\bar{u}_{kj}\right)_1 + \left(\sum_{l=1}^{n_x-2}\left(\bar{u}_{kj}\right)_{l+1}\cos\left(\frac{il\pi}{n_x-1}\right)\right) + \frac{1}{2}(-1)^i\left(\bar{u}_{kj}\right)_{n_x}.$$

Tous ces calculs sont effectués en utilisant la transformée de Fourier rapide.

3.2.5 Coût d'une résolution du problème de Poisson

Une résolution du problème de Poisson sur une grille comprenant $n_x.n_y.n_z$ nœuds comporte

- $2\,n_z.n_y$ transformées de Fourier de taille n_x et $2\,n_z.n_x$ transformées de Fourier de taille n_y : coût $O(n_x.n_y.n_z(\log_2 n_x + \log_2 n_y))$,
- $n_x.n_y$ résolutions de systèmes tridiagonaux de taille n_z : coût $O(n_x.n_y.n_z)$.

4. DOCUMENTATION TECHNIQUE

La méthode décrite dans ce chapitre est une méthode de résolution du problème de Laplace, avec conditions de Dirichlet constantes sur la surface d'obstacles quelconques. Cependant, le programme Icare, qui compte environ 5000 lignes de code écrites en C^{++} sous Unix, est plus particulièrement dédié au calcul des capacités parasites dans les interconnexions. En effet, la méthode est particulièrement bien adaptée aux géométries parallélépipédiques, et les choix par défaut des maillages sont optimisés pour le cas de structures d'interconnexions des circuits intégrés. De plus, ce programme utilise une description des données d'entrée propre au calcul des interconnexions de circuits. Nous décrivons donc dans cette section le format d'entrée des données du programme Icare, en son état actuel. Nous précisons en particulier la façon dont sont actuellement crées ces données d'entrée, à partir de la description d'une structure dans le format standard "gds2". Pour plus de détails sur certains points de la génération des données nécessaires à Icare, on pourra se référer au compte-rendu interne CEA-LETI, écrit par P. Rivallin, et nommé "manuel d'utilisation du logiciel Icare". Le programme peut cependant être utilisé pour la résolution de problèmes de géométrie quelconque, si on lui fournit en entrée directement un maillage de la surface des obstacles.

Actuellement, le programme prend en entrée un fichier .car contenant un nom de fichier d'extension .geo contenant la géométrie 3D de la structure, un certain nombre de données technologiques, et éventuellement de paramètres utiles au calcul. Il appelle un programme qui génère un maillage de surface à partir de la géométrie. On pourrait donc aussi directement entrer un maillage de surface.

Nous décrivons ici la génération actuelle des données d'entrée, pour les structures d'interconnexions. Cette génération est représentée schématiquement dans la Figure IV.4.

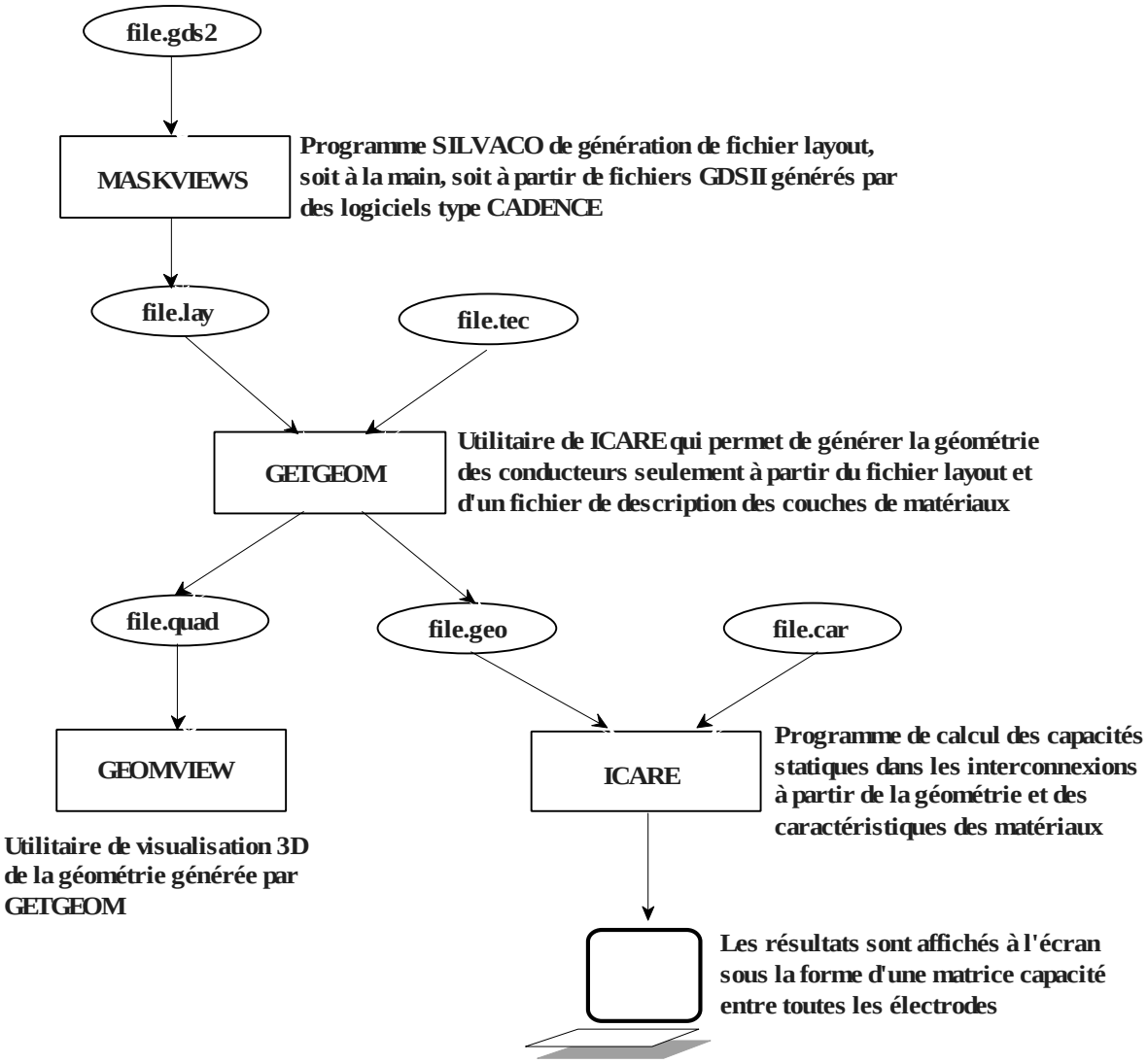


Figure IV.4. Génération des fichiers d'entrée d'Icare (figure tirée du compte-rendu de P. Rivallin)

Commentons rapidement cette figure :

Un format standard de description des structures d'interconnexions des circuits intégrés est le format "gds2".

Nous nous sommes plutôt basés sur le format du fichier de sortie de l'outil *Maskviews* de SILVACO. Ce fichier contient la description couche par couche de la géométrie des interconnexions (qui sont donc homogènes en hauteur dans chaque couche).

A partir de ce fichier .lay, et d'un fichier .tec contenant les hauteurs de chaque couche métallique ou diélectrique, le programme *getgeom*, écrit par S. Dupré et F. Charlet reconstitue la géométrie 3D de la structure, et la stocke dans un fichier .geo.

Enfin Icare appelle un programme, qui, à partir du fichier .geo, crée un maillage de la surface.

Décrivons enfin le format actuel du fichier d'entrée file.car : dans ce fichier exemple, les paramètres facultatifs sont précédés du signe # , indiquant les commentaires.

```
Version LETI
```

```
# Fichier contenant la géométrie de la
# structure
GeomFile file.geo
```

Fichier résultat du programme getgeom

```
# Définition des diélectriques
Material "diel" Permittivity 3.9
Material "air" Permittivity 1.

# Définition des épaisseurs des couches
Deposit "diel" Height 5.84
# Rajouter une couche d'air >= 3
Deposit "air"  Height 6.26
```

Définition des diélectriques et de leur épaisseur.
Une couche diélectrique peut contenir des conducteurs.
Il vaut mieux rajouter une couche d'air au-dessus de la structure pour que les conditions aux limites ne perturbent pas les résultats.

```
# Paramètres de choix de la grille

# GridParam 32 32 16
# Refinement 1

# Critère d'arrêt de l'algo du G.C.
# PrecisionParam 1.e-4
```

Les paramètres de calcul sont facultatifs : si rien n'est imposé, le programme les choisit lui-même.

La commande

```
GridParam nx ny nz,
```

où `nx` et `ny` doivent être des puissances de 2, permet à l'utilisateur d'entrer son choix de la grille. Si cette commande est omise, un choix par défaut est calculé et utilisé. Sur les structures d'interconnexions sur lesquelles nous avons testé ce choix par défaut, la précision était satisfaisante. Toutefois l'utilisateur peut choisir de raffiner la grille 2^n fois la grille dans chaque direction, en utilisant la commande

```
Refinement n.
```

Si l'utilisateur fait ce choix, et n'impose pas lui-même le critère d'arrêt de l'algorithme du gradient conjugué (par la commande `PrecisionParam eps`), alors ce critère d'arrêt va dépendre du degré *n* de raffinement, de façon à adapter le degré de convergence de l'algorithme du gradient conjugué à la précision désirée.

En sortie du programme, s'affichent :

- le temps de calcul et la mémoire nécessaires,
- la liste des capacités classées par taille décroissante.

Chapitre V. Résultats sur des structures réelles

Nous présentons dans ce chapitre, des résultats de calcul de capacités sur des morceaux de structures réelles, que l'on caractérisera par leurs dimensions (largeur et longueur), leur nombre de niveaux de métallisation et de couches diélectriques.

Nous étudions d'abord un exemple représentatif du type de structures à traiter. Nous comparons sur cet exemple la précision et les ressources nécessaires en temps de calcul et mémoire pour les deux approximations en fonction de la finesse des maillages. Au vu de ces résultats, nous proposons alors un critère de choix par défaut du maillage de surface, dont nous montrons les avantages sur cet exemple. Nous proposons aussi un critère empirique de choix de la grille de volume, s'appuyant sur des particularités des structures d'interconnexions, et assurant un bon compromis entre précision des résultats et efficacité de la résolution.

Puis nous comparons sur deux échantillons de structures de dimensions moyennes, les résultats obtenus par la méthode des domaines fictifs avec les maillages par défaut, avec ceux obtenus par d'autres logiciels existants dédiés à ce problème, basés sur les éléments finis, sur une méthode d'intégrales de frontière, et sur une méthode de Monte-Carlo. Sur certaines structures, nous disposons de plus de mesures expérimentales de capacités permettant de valider ces résultats.

1. OBSERVATIONS SUR UNE STRUCTURE REELLE 3D

Considérons par exemple la structure suivante, représentative du type de structures à étudier.

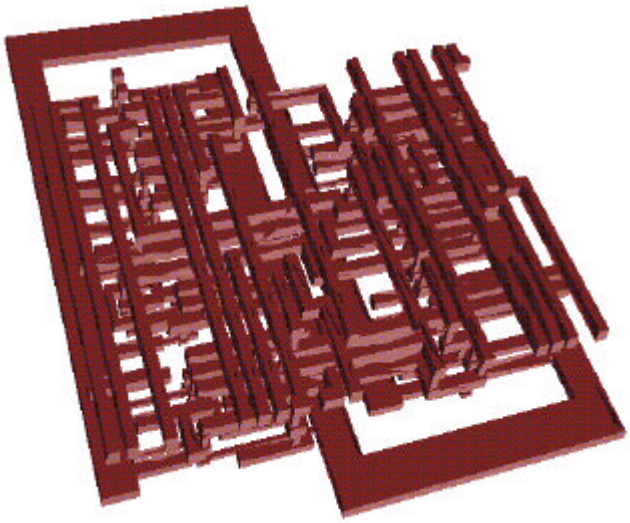


Figure V.1 Structure étudiée

La structure de la Figure V.1 comprend 5 niveaux de métallisation, 3 couches diélectriques, et est de dimensions 35µm par 30µm.

Un point important de l'algorithme étant le choix des deux maillages, nous présentons dans cette section les résultats obtenus sur cet exemple représentatif du type de structures à traiter, pour un large éventail de grilles de volume et de maillages de surface. Nous pourrons ainsi observer de quelle façon varient la précision pour les deux approximations, le temps de calcul et la mémoire.

1.1. COMPARAISON (A-GPP) – (A-CAPA)

Nous comparons dans ce paragraphe les performances des deux approximations sur divers maillages de surface et grilles de volume. Nous donnons d'abord des caractéristiques des différents maillages, de surface et de volume, utilisés dans les calculs.

Les maillages de surface sont caractérisés par un paramètre (L = .), donné en entrée au mailleur. Pour chaque choix de L, nous donnons dans le Tableau V.1 le nombre d'éléments du maillage de surface, ainsi que deux dimensions caractéristiques caractérisant la taille de ces éléments. Les plus petites et plus grandes dimensions des côtés des éléments n'étant pas très représentatives du maillage, nous donnons hs_min et hs_max, qui sont les moyennes sur tous les éléments du maillage respectivement du plus petit et du plus grand côté des éléments.

Tableau V.1. Caractéristiques des maillages de surface utilisés

Maillage de surface	Nombre d'éléments	hs_min (µm)	hs_max (µm)
L = 20	5116	0,5	3,2
L = 10	5188	0,5	3
L = 5	5534	0,5	2,6
L = 3	6318	0,5	2,2
L = 1	12590	0,5	1,2
L = 0,5	25234	0,5	1
L = 0,3	44000	0,37	0,92
L = 0,2	71872	0,31	0,94
L = 0,15	175372	0,27	0,79

On remarque que la moyenne des plus petites dimensions des éléments est constante égale à 0,5µm pour les maillages de surface grossiers à moyens, seule la plus grande dimension varie. En effet, la section des lignes d'interconnexions est petite devant leur longueur, égale à 0,5µm. Cette faible section impose d'avoir des grilles de volume suffisamment raffinées, quel que soit le maillage de surface choisi. Ceci est d'autant plus vrai avec l'approximation (A-GPP), qui requiert une condition de compatibilité entre les pas des deux maillages.

Nous présentons à présent dans le Tableau V.2 les caractéristiques des grilles de volume et des maillages de surface "auto" associés. Le maillage de surface désigné par "auto", correspond à l'intersection d'un maillage très lâche de la surface des conducteurs et de la grille (donc quasiment à l'intersection de la surface des conducteurs et de la grille). De même que pour les maillages de surface, nous présentons des moyennes des plus petites et plus grandes dimensions.

Tableau V.2. Caractéristiques des grilles et des maillages de surface "auto" associés

Grille de volume	Caractéristiques de la grille		Caractéristiques du maillage de surface « auto »		
$n_x.n_y.n_z$	hv_min (µm)	hv_max (µm)	Nombre d'éléments	hs_min (µm)	hs_max (µm)
16.16.16	1,87	2,2	16919	0,25	1,1
32.32.(16-32)	0,95	1,1	27000 - 33000	0,2 - 0,15	0,75
64.64.(16-32)	0,47	0,55	50000 - 59000	0,15	0,45

128.128.(16-32-64)	0,23	0,28	106000 - 146000	0,12	0,28
256.256.(32-64)	0,12	0,14	285000 - 330000	0 ,075	0,16

Les résultats présentés dans le Tableau V.3 permettent d'abord de vérifier que l'amélioration apportée par l'approximation (A-Capa), déjà observée en 2D au chapitre 2, est également très nette en dimension 3 :

Tableau V.3. Comparaison (A-GPP)-(A-Capa) pour différents choix des maillages

Grille	Maillage de surface	Approximation (A-GPP)		Approximation (A-Capa)		Mémoire(MB)
		valeur (μm)	cpu (sec)	valeur (μm)	cpu (sec)	
16.16.16	L=10	Divergence du G.C.		40,5	28	9,1
	L=5			40,6	25	9,3
	L=3			41,3	24	10,1
	L=1			43,6	31	16,8
	L=0,5			42,3	34	31,5
	auto			43,1	34	9,1
32.32.16	L=10	DV		28,9	36	13,3
	L=5			29,1	31	13,3
	L=3			29,2	27	14
	L=1			30,5	33	21
	L=0,5			29,7	35	38
	auto			29,9	28	14
32.32.32	L=10	DV		29,0	56	15
	L=5			29,0	49	15,2
	L=3			29,1	43	16
	L=1			30,4	47	25
	L=0,5			29,6	44	43,6
	L=0,3			29,2	58	71
	auto			29,9	39	17
64.64.16	L=10	DV		24,5	94	22
	L=5			24,6	76	22
	L=3			24,7	63	22
	L=1			24,8	53	30
	L=0,5			24,6	52	52
	L=0,3			24,2	65	82
	L=0,2			23,9	92	130
	L=0,15			23,7	155	284
	auto			24,8	43	25,5
64.64.32	L=10	31,5	584	24,5	150	25
	L=5	31,7	541	24,6	124	25
	L=3	32,5	432	24,7	101	26
	L=1	DV		24,7	76	35
	L=0,5			24,6	76	57
	L=0,3			24,3	89	92
	L=0 ,2			24,1	118	144
	L=0,15			23,8	183	315
	auto			24,8	63	30,5
128.128.16	L=10	28,6	856	23,2	341	42
	L=5	29,6	744	23,3	278	42
	L=3	30,4	600	23,3	232	42
	L=1	DV		23,4	164	53
	L=0,5			23,2	143	82
	L=0,3			23,2	140	123
	L=0,2			23,2	186	197
	L=0,15			23,2	267	403
	auto			23,1	95	55
128.128.32	L=10	26,0	1085	23,1	456	49
	L=5	26,1	846	23,2	380	49
	L=3	26,0	719	23,3	298	49
	L=1	25,9	473	23,2	224	59
	L=0,5	24,7	271	23,1	194	91
	L=0,3	24,8	291	23,0	194	138

	L=0,2	24,4	306	23,0	225	209
	L=0,15	25,0	379	23,1	307	440
	auto	25,3	508	22,9	161	65
128.128.64	L=10	23,9	1541	22,6	880	64
	L=5	23,9	1332	22,7	747	63
	L=3	23,9	1092	22,8	608	64
	L=1	23,8	585	22,7	436	75
	L=0,5	23,8	460	22,6	352	106
	L=0,3	23,7	457	22,4	335	154
	L=0,2	23,8	446	22,5	348	234
	L=0,15	23,8	456	22,6	411	501
	auto	23,9	431	22,6	260	85
256.256.32	L=10	24,3	2949	23,1	2131	122
	L=5	24,4	2542	23,1	1777	121
	L=3	24,5	2140	23,1	1247	121
	L=1	24,3	1272	23,1	881	133
	L=0,5	24,0	899	23,0	670	172
	L=0,3	23,8	812	23,1	642	236
	L=0,2	24,1	850	23,2	677	359
	L=0,15	24,2	868	23,2	728	689
	auto	24,6	590	22,7	424	168
256.256.64	L=10	22,8	4399	22,3	3662	168
	L=5	22,8	3592	22,3	2947	167
	L=3	22,9	2931	22,4	2470	167
	L=1	23,0	1906	22,4	1703	181
	L=0,5	22,9	1489	22,4	1220	223
	L=0,3	23,1	1390	22,3	1160	285
	L=0,2	23,2	1348	22,4	1154	396
	L=0,15	23,2	1154	22,3	1079	753
	auto	23,0	786	22,2	729	221

Bien que peu "visuel", ce tableau permet un certain nombre d'observations:

Précision de (A-GPP) et (A-Capa) :

La première remarque est qu'avec l'approximation (A-GPP), il faut prendre une grille d'au moins 128.128.32 points, avec un maillage de surface bien choisi ($L \leq 0{,}5$), pour assurer une précision raisonnable sur la valeur de la charge (environ 10% de précision). Tandis qu'avec l'approximation (A-Capa), il suffit d'une grille de 64.64.16 points et d'un maillage de surface quelconque, soit deux fois plus grossière dans chaque direction, pour obtenir la même précision. Cela se traduit par un algorithme 5 fois plus rapide, et utilisant 3 fois moins de mémoire. Et cet écart se renforce encore si l'on veut des résultats plus précis.

Plus généralement, on remarque que pour un même choix de maillages, les résultats sont nettement plus précis pour l'approximation (A-Capa) que pour (A-GPP).

De même qu'en dimension 2, avec l'approximation (A-Capa), la précision des résultats est légèrement améliorée lorsque l'on raffine le maillage de surface. Mais cette tendance est moins nette qu'en dimension 2. La précision du maillage "auto", maillage assez raffiné par rapport à la grille, est un peu moins bonne que celle des maillages quelconques contenant le même nombre d'éléments. Cependant, ces variations de précision sont nettement plus faibles que celles obtenues lorsque l'on raffine la grille.

En résumé, pour les deux approximations, la précision des résultats dépend peu du maillage de surface, elle dépend surtout du choix de la grille.

Temps de calcul et convergence du G.C. :

Le temps d'initialisation du calcul (temps d'assemblage du système) est quasiment le même pour les deux approximations, ainsi que le temps de calcul pour une itération. Ainsi, comparer les temps de calcul pour les deux approximations revient à comparer la convergence de l'algorithme du gradient conjugué.

Pour des grilles assez grossières, et avec l'approximation (A-GPP), l'algorithme du gradient conjugué ne converge pour aucun maillage de surface. Et quel que soit le choix des maillages (le même pour les deux approximations), l'algorithme du gradient conjugué converge plus rapidement pour (A-Capa) que pour (A-GPP).

Pour une grille de volume fixée et pour les deux approximations, l'algorithme converge plus rapidement lorsque l'on raffine le maillage de surface. En effet, nous avons choisi un critère d'arrêt de l'algorithme qui devient moins exigeant lorsqu'on raffine le maillage de surface. Nous observons qu'avec ce choix, la précision des résultats dépend peu du maillage de surface. Le temps de calcul devient plus important lorsque le maillage de surface devient très fin, mais on verra au paragraphe 1.2 que cela est dû à un temps d'initialisation plus long, et non à un nombre d'itérations plus élevé.

D'autre part, avec l'approximation (A-GPP), pour une grille de volume grossière à moyenne, l'algorithme du gradient conjugué ne converge plus, confirmant l'existence d'une condition de compatibilité entre les pas des maillages.

Place mémoire nécessaire : on constate qu'un raffinement important du maillage de surface ou de la grille de volume entraîne une augmentation importante de la place mémoire.

Il est donc important de bien choisir les maillages pour minimiser à la fois le temps de calcul et la place mémoire. Nous avons introduit dans le programme un choix empirique de ces maillages pour l'approximation (A-Capa).

1.2. CHOIX DU MAILLAGE DE SURFACE

La faible dépendance de la précision au maillage de surface, observée dans le Tableau V.3, permet de choisir le maillage de surface en fonction d'autres critères, c'est-à-dire le temps de calcul et la mémoire.

Nous représentons ainsi ci-dessous, pour une grille de volume fixée, le nombre d'itérations du gradient conjugué et le temps total de calcul pour différents maillages de surface. La grille de volume choisie est la grille comprenant 64.64.16, qui, d'après le Tableau V.3, assure une précision correcte des résultats pour l'approximation (A-Capa).

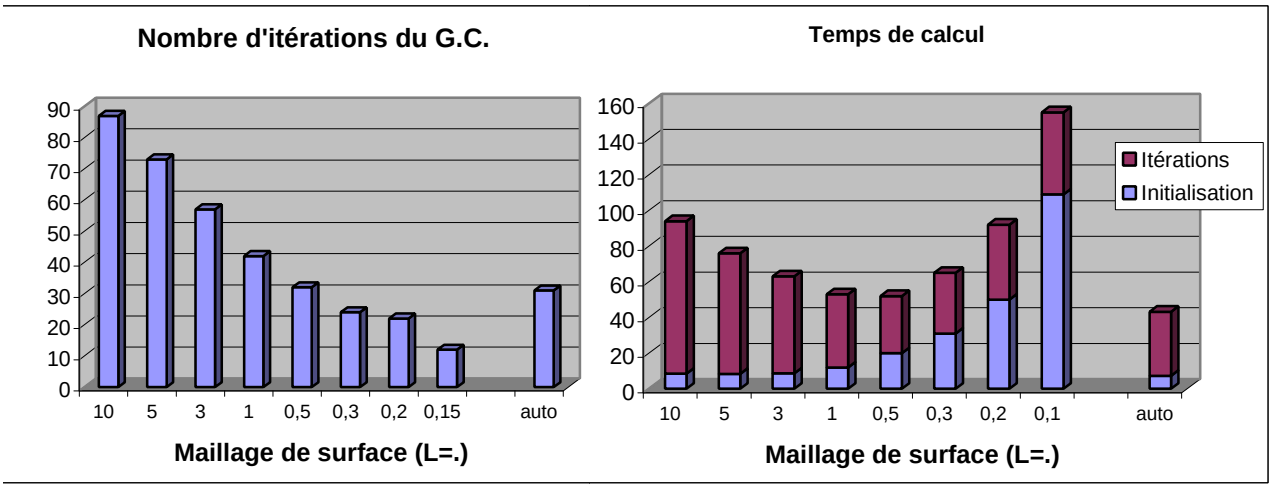


Figure V.2 Nombre d'itérations et temps de calcul en fonction du maillage de surface

Le nombre d'itérations plus faible quand on raffine le maillage de surface, est compensé par un temps d'initialisation nettement plus long. De plus, le temps d'une itération augmente aussi lorsqu'on raffine le maillage de surface. Donc finalement, le choix optimal du maillage de surface en termes de temps de calcul pour une même précision, est un compromis entre ces deux tendances (L = 0,5). Donc le choix "auto" du maillage de surface, qui en nombre d'éléments se situe près du maillage L = 0,3, est proche de ce choix optimal. De plus, on a vu au chapitre 4 que des particularités de ce maillage permettent d'accélérer la phase d'initialisation. Le temps d'initialisation, qui est, pour le temps de calcul, la contrepartie majeure d'un maillage de surface fin, est donc très réduit pour le maillage "auto" (Figure V.2).

Nous observons un comportement semblable en raffinant davantage la grille de volume.

Nous nous intéressons maintenant, toujours pour une grille de volume de 64.64.16 points, à la variation de la mémoire utilisée lorsque l'on raffine le maillage de surface.

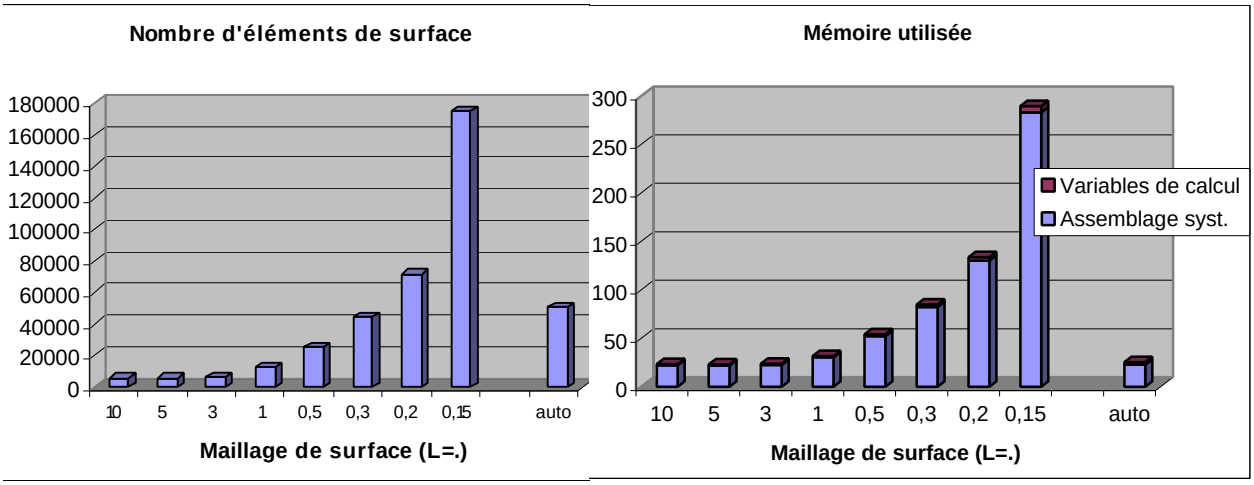


Figure V.3. a) Nombre d'éléments de surface pour chaque choix du maillage de surface
b) Mémoire utilisée pour chaque maillage de surface, décomposée en assemblage et calcul

On constate que la mémoire est directement liée au nombre d'éléments du maillage de surface. On remarque de plus (Figure V.3b), que cette importante mémoire supplémentaire est utilisée principalement lors de la phase d'initialisation pour assembler le système linéaire. En effet, le nombre de points de la grille reste fixe, et la mémoire utilisée pour les variables de calcul, qui devient importante lorsque la grille de volume augmente, reste ici négligeable.

Le calcul utilisant le maillage "auto", bien que comprenant légèrement plus d'éléments que le maillage L=0,3, utilise beaucoup moins de mémoire lors de la phase d'initialisation grâce à la simplification du calcul des couplages détaillée au chapitre 4. Il utilise donc une mémoire comparable aux calculs utilisant les maillages de surface les plus grossiers.

Ainsi, pour une grille de volume donnée, le choix « auto » du maillage de surface, bien qu'étant un maillage assez raffiné, est un bon compromis en temps de calcul et en mémoire.

Enfin, nous proposons une simplification du calcul qui diminue nettement le coût en mémoire sans affecter la précision des résultats :

Calcul des intégrales de surface :

Nous comparons les résultats obtenus pour une intégration exacte et approchée des intégrales de surface, sur chaque polygone intersection d'un triangle du maillage de surface et d'un parallélépipède de la grille. Afin de valider le choix de l'intégration approchée, nous avons fait varier le pas du maillage de surface pour un choix de la grille de volume, puis la grille de volume pour un rapport fixé entre les pas des deux maillages. Ces résultats sont présentés Tableau V.4.

Tableau V.4 Approximation (A-Capa) : calcul exact ou approché des intégrales de surface

Grille	Maillage de surface	Intégration exacte			Intégration approchée		
		Valeur (fF)	cpu (sec.)	Mémoire(MB)	Valeur	cpu (sec.)	Mémoire(MB)
32.32.16	L=5	29,1	31	13,3	29,0	29	8,4
	L=3	29,2	27	14	29,1	24	9
	L=1	30,5	33	21	30,9	33	14,4
	L=0.5	29,7	35	38	29,7	32	26,3
	auto	29,9	28	14	29,9	26	9,5
32.32.32	auto	29,9	40	17	30,1	41	11,1
64.64.16	auto	24,8	43	25	24,8	40	17,7
128.128.32	auto	23,0	153	65	22,9	148	35

La valeur de la charge obtenue, ainsi que le temps de calcul, sont quasiment les mêmes pour les deux intégrations, tandis qu'avec l'intégration approchée on gagne une quantité importante de place mémoire par rapport à l'intégration exacte (en moyenne près d'un tiers de la mémoire totale) : en effet on ne stocke pas les polygones intersections d'un triangle du maillage de surface et d'un parallélépipède de la grille, mais uniquement leur barycentre et leur aire.

Dans la suite, les résultats seront donc donnés pour l'intégration approchée.

Coût en mémoire et temps de calcul en fonction des pas des maillages :

Nous détaillons ici (de façon approximative) les coûts en temps de calcul de chaque étape du calcul pour le maillage de surface « auto » et l'intégration approchée. Nous choisissons comme grille volumique de base (raffinement 1), une grille de 32.32.16 points, et obtenons la grille correspondant au raffinement n en multipliant le nombre de points dans chaque direction par 2^{n-1} par rapport à la grille de base.

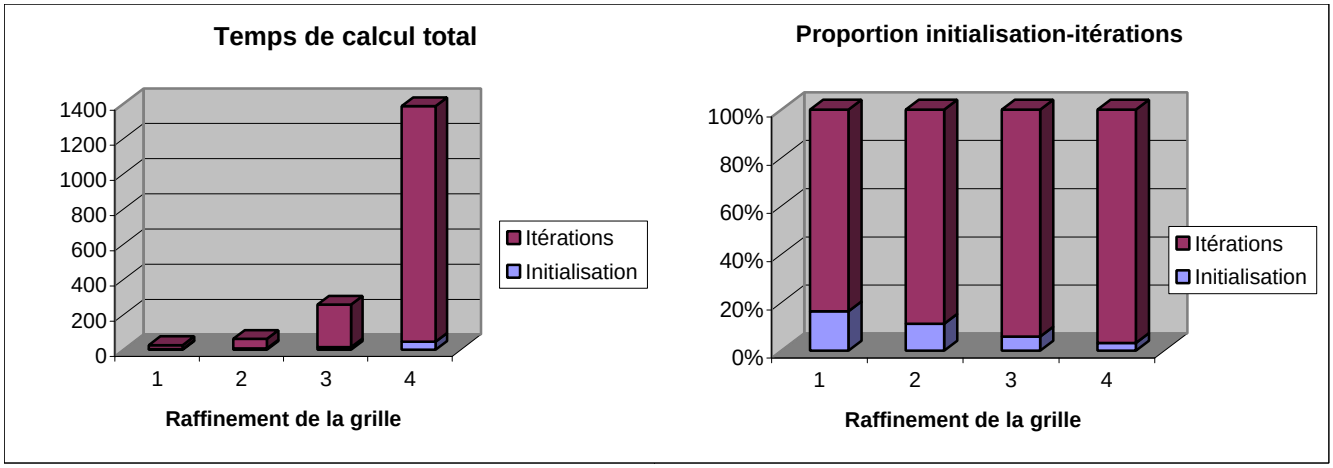


Figure V.4. a) Evolution du temps de calcul en fonction du raffinement de la grille
b) Evolution de la proportion de l'initialisation sur le temps total

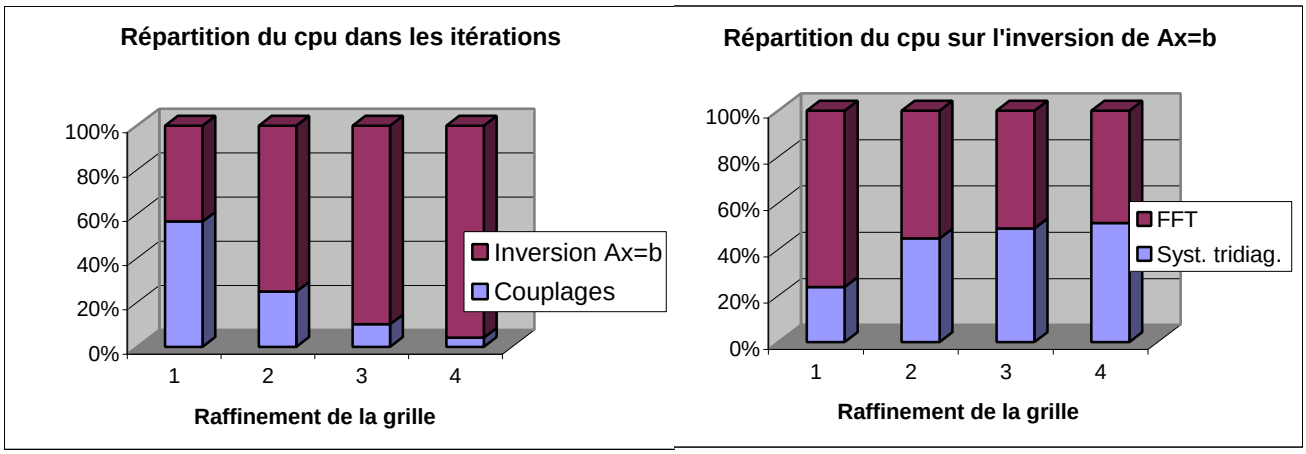
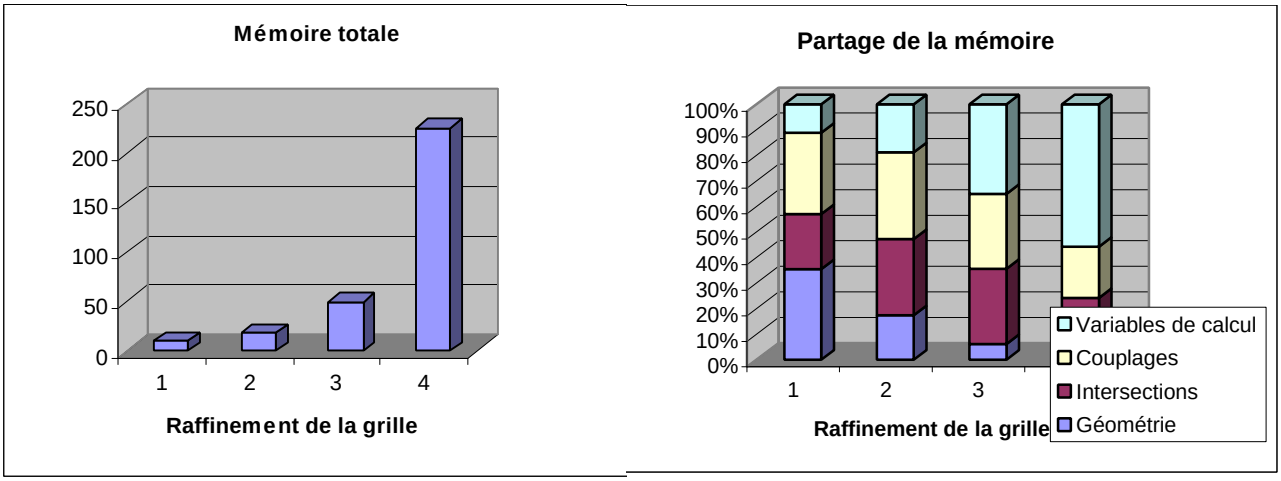


Figure V.5. Répartition du temps de calcul des itérations dans les différentes étapes

Nous constatons tout d'abord, au vu de l'évolution du temps de calcul en fonction du choix de la grille (Figure V.4a), l'importance d'un bon choix de la grille : elle doit être suffisamment fine pour que la précision soit bonne, mais si elle est trop fine, le surcoût de calcul sera important.

De plus, en détaillant la proportion de temps passée dans chaque étape du calcul, on constate qu'une grande partie du temps de calcul est utilisée par le solveur de Poisson rapide. Cela confirme l'importance de l'utilisation d'un solveur rapide pour un problème de cette complexité. Nous pouvons aussi remarquer que lorsque la grille est assez raffinée (raffinement supérieur à 2 ici par exemple), une part importante du temps est passé dans la résolution des systèmes tridiagonaux. Si le but est la simulation de grosses structures, et non un calcul rapide sur de petites structures, peut-être qu'une méthode plus efficace pour cette résolution devrait être envisagée.

Nous détaillons également le coût en mémoire :



On voit bien, pour des grilles de taille moyenne (c'est-à-dire celles qui seront utilisées en pratique), l'importance du stockage de la géométrie et de la matrice de couplage. Et donc l'importance du gain apporté d'une part par l'intégration approchée, qui permet de réduire le

coût de stockage des intersections, et d'autre part par le choix "auto" du maillage de surface, qui permet de réduire le coût du couplage.

On constate à nouveau l'importance d'un bon choix de la grille pour ne pas avoir une mémoire trop importante. Nous allons donc, dans le paragraphe 1.3, proposer un critère empirique de choix de cette grille de volume adapté aux interconnexions, et vérifier sa validité sur cette structure.

1.3. CHOIX DE LA GRILLE DE VOLUME

Nous proposons pour le choix des pas de la grille un critère empirique adapté aux structures d'interconnexions, traduisant que le niveau de détail moyen de la surface des conducteurs ne doit pas être trop fin par rapport à la grille.

Considérons un maillage très grossier de la surface des conducteurs. Les structures étant le plus souvent constituées de lignes de faible section, on espère que le plus souvent, la plus petite dimension d'un élément grossier coïncide avec la plus petite dimension d'un conducteur. De plus, la technologie utilisée pour la construction d'un circuit définit une section caractéristique, dont seront généralement voisines les sections de tous les conducteurs. On espère ainsi que dans chaque direction, les plus petites dimensions calculées sur les éléments de surface, seront voisines d'un conducteur à l'autre.

Alors, pour chaque élément grossier du maillage, on ajoute la plus petite des dimensions au total des plus petites dimensions, dans la direction qui correspond. Puis on divise chacun des trois totaux correspondant aux 3 directions, par le nombre d'éléments dont la plus petite dimension correspondait à cette direction. On obtient alors grossièrement une moyenne dans chaque direction de ce qu'on espère être les plus petites dimensions des conducteurs. On constate que dans la plupart des cas, en prenant pour pas dans les trois directions la valeur la plus proche possible de cette moyenne, la grille est bien choisie : le temps de calcul est optimisé, et les résultats sont malgré tout précis.

Sur cet exemple, les résultats obtenus avec des choix par défauts de la grille et du maillage de surface, sont les suivants :

Grille par défaut	Maillage de surface auto	Valeur (fF)	Temps de calcul (sec.)	Mémoire (MB)
64.64.19	5788 triangles	24,8	45	15,5

Cela paraît un bon compromis entre la précision sur la valeur du résultat et les besoins en temps de calcul et mémoire.

2. VALIDATION DU PROGRAMME

Dans cette section, nous validons les résultats obtenus, en comparant d'abord les valeurs des capacités obtenues avec différentes méthodes dont les domaines fictifs, puis, sur certaines structures qui ont pu être caractérisées expérimentalement, en comparant les valeurs calculées aux mesures. Ces résultats permettent ainsi de comparer, pour une même précision d'environ cinq pour cent sur les capacités auxquelles on s'intéresse, les performances en temps de calcul et en mémoire des différents logiciels.

2.1. COMPARAISON AVEC D'AUTRES LOGICIELS

Nous présentons dans ce paragraphe deux séries de comparaisons entre plusieurs méthodes, auxquelles nous demandons une précision d'environ 5 pour cent. En effet, les incertitudes sur les données technologiques des interconnexions sont telles que cette précision

suffit largement aux concepteurs de circuits. Nous pouvons ainsi comparer les performances relatives des différents logiciels, tout en vérifiant que les valeurs des capacités obtenues sont proches.

Dans un premier temps, nous présentons rapidement les logiciels testés, qui reposent sur les méthodes citées dans le premier chapitre.

2.1.1 Les logiciels testés

- Le logiciel Clever, de la société Silvaco, est basé sur une méthode d'éléments finis 3D. On entre en paramètre la précision désirée sur la plus grande capacité calculée. La précision réelle est parfois nettement moins bonne que la précision estimée. Les résultats présentés sont pour une précision requise de cinq pour cent.

- La version 2.0 du logiciel Fastcap, réalisé au MIT, repose sur une méthode d'intégrales de frontière, avec résolution du système par un algorithme multipôle. La version dont nous disposons était à disposition du public sur internet, mais n'est pas complètement au point. En particulier le traitement des couches diélectriques est très lourd, il pénalise beaucoup les performances du logiciel (voir chapitre 1). Pour les calculs réalisés avec Fastcap, nous avons donc supposé le matériau diélectrique homogène, et nous ne donnons donc pas les valeurs des capacités, qui ne sont pas comparables à celles obtenues avec les autres logiciels. Nous n'insisterons donc pas trop sur les comparaisons avec ce logiciel, et donnerons juste quelques résultats pour avoir une idée des ordres de grandeur des temps de calcul et mémoire.

- Le logiciel Quickcap, de la société Random Logics Corporation, est basé sur une méthode de Monte Carlo. C'est actuellement le logiciel de référence pour la simulation de portions de structures qui vont jusqu'à une centaine de microns de côté. Il est réputé précis et efficace, à la fois en mémoire et temps de calcul. Le logiciel ne donne pas la mémoire utilisée par le programme lors du calcul, car celui-ci ne nécessite « presque aucune mémoire ». Cependant, à notre connaissance, l'argument est plutôt commercial, et le logiciel utilise une mémoire tout de même considérable. On entre en paramètre la précision désirée sur les capacités. Il semble que cette précision est bien contrôlée.
Nous n'avons pas de licence pour ce logiciel au LETI, les simulations dont nous disposons ont été réalisées par Sophie Gabillet, de la société Mentor Graphics, sur un certain nombre de structures que nous avons simulé de notre côté avec Icare et Clever.

- Notre programme, basé sur les domaines fictifs, est nommé Icare. Nous estimons qu'avec les choix par défaut des maillages, Icare assure généralement une précision inférieure à 5% sur les plus grandes capacités. Les résultats présentés sont pour les choix par défaut des maillages.

2.1.2 Première série de structures

Une première série de comparaisons a été effectuée sur des cellules de taille moyenne, qui pour certaines se situent à la limite des possibilités du logiciel éléments finis Clever. Nous présentons, dans les Tableau V.5 et Tableau V.6, des comparaisons entre Clever, et Icare avec les choix par défaut des maillages. Cependant, les calculs ont aussi été effectués avec Fastcap 2.0 sur certaines de ces cellules, ils sont alors présentés. Dans le Tableau V.5, nous donnons pour chaque méthode, la valeur de la plus forte capacité calculée, le temps de calcul et la mémoire nécessaires. Les cellules pour lesquelles les résultats sont donnés dans le Tableau V.5, sont toutes des structures relativement denses, ressemblant à la structure smult2b_poly dessinée Figure V.1, et qui font entre 20 et 100 microns de côté. Elles sont présentées par complexité croissante.

Tableau V.5 Comparaisons Clever-Icare-Fastcap

Structure	# cond.	Grille $n_x.n_y.n_s$	Clever 5%			Icare			Fastcap 2.0	
			Valeur (femtoF)	cpu (sec.)	Mém. (MB)	Valeur (femtoF)	cpu (sec.)	Mém. (MB)	cpu (sec.)	Mém. (MB)
ptassoc	3	8.32.16	1,85	127	32	1,58	3,2	2,8		
cel_reel	4	32.32.13	15,5	311	62	13,7	12	4,7	58	27
smult2b_poly	3	64.64.19	26,4	1389	339	24,8	43	15,5	500	443
smult1b_poly	13	64.64.19	9,09	1020	175	8,11	158	16,4		
decodlifast	27	128.32.14	11,9	4330	315	10,7	458	25,7		

La représentation sous forme d'histogrammes, du temps de calcul et de la mémoire nécessaires pour les 3 méthodes, permet de mieux mettre en valeur ces résultats. Représentons par exemple dans les Figure V.6 et Figure V.7, les histogrammes des structures sur lesquelles nous avons testé les 3 méthodes:

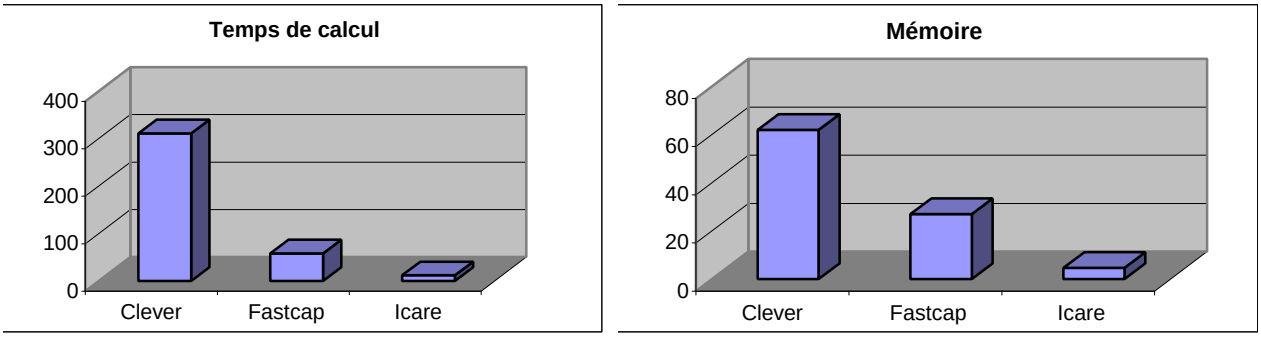


Figure V.6 cel_réel : comparaison des temps de calcul et mémoire pour les 3 méthodes

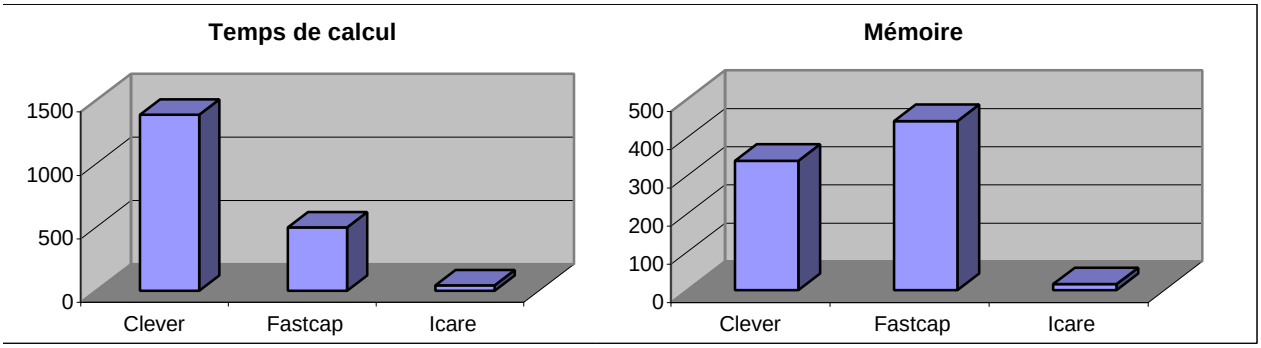
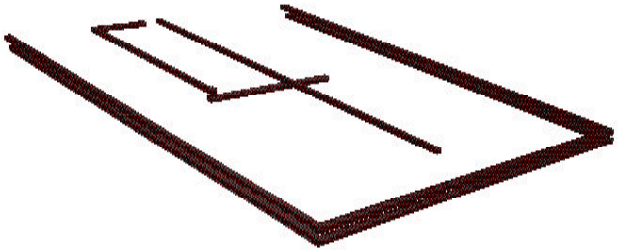


Figure V.7 smult2b_poly : comparaison des temps de calcul et mémoire pour les 3 méthodes

Dans le Tableau V.6, nous présentons à présent des résultats sur les deux structures ci-dessous, fournies par ST, et pour lesquelles nous disposons de valeurs expérimentales de capacités.



C4L1a



c4l3a

Ces structures sont un peu particulières, les lignes sont longues par rapport à leur section, et les structures sont peu denses. Une méthode uniquement surfacique comme Fastcap est plus efficace sur de telles structures que sur des structures denses. D'autre part, la valeur mesurée n'est pas ici la valeur de la plus grande capacité calculée, et l'influence du plan de masse sur certaines lignes est importante devant les influences mutuelles des lignes. La précision dans les calculs sur cette valeur est donc moins bien maîtrisée, en particulier pour le logiciel Clever, dont les valeurs calculées s'éloignent nettement des mesures.

Tableau V.6 Structures fournies par ST

Structure	# cond.	Grille $n_x.n_y.n_s$	Clever 5%			Icare			Fastcap 2.0		Mesures (fF)
			Valeur (fF)	cpu (sec.)	Mém. (MB)	Valeur (fF)	cpu (sec.)	Mém. (MB)	cpu (sec.)	Mém. (MB)	
c4l3a	3	64.64.15	0,47	1507	387	0,84	14	3,5	17	8	0,688 ± 0,33
C4L1a	3	64.64.15	7,1	1900	430	10,3	18	5,5	18	13	10,3 ± 0,4

2.1.3 Deuxième série de structures

Une deuxième série de cellules, dont certaines très simples, a été cette fois simulée avec Clever, Quickcap, et Icare. Ces cellules ont été dessinées et réalisées au LETI, en technologie SOI 0,25µm. Nous disposons ainsi de mesures expérimentales des capacités.

D'autre part, ces structures ont été simulées avec le logiciel Quickcap par Sophie Gabillet, de Mentor Graphics, en vue d'une comparaison de performances entre Quickcap et Icare. Cependant, au moment où ces calculs ont été réalisés, nous ne disposions que d'estimations a priori des caractéristiques réelles des couches diélectriques et largeur des lignes métalliques. Les valeurs obtenues par le calcul pour Quickcap ne peuvent donc pas réellement être comparées aux mesures. Nous présentons donc dans ce paragraphe, des comparaisons des valeurs calculées avec Clever, Quickcap, et Icare. Puis, dans le paragraphe 2.2, nous comparerons les résultats de calcul d'Icare pour le procédé réel, avec les mesures.

- Epaisseurs des couches métalliques et diélectriques :

Une structure est grossièrement caractérisée par la géométrie 2D des interconnexions sur chaque niveau de métal, et les épaisseurs des couches métalliques et diélectriques. Pour donner un ordre d'idée des dimensions des différentes couches, nous présentons dans le Tableau V.7, les épaisseurs des différentes couches diélectriques et métalliques intervenant dans les structures pour lesquelles nous présentons des résultats.

Tableau V.7 Epaisseurs a priori des couches métalliques et diélectriques

COUCHE	EPAISSEUR (en µm)		PERMITTIVITE
Air	5		1
Diel	0,9	4,1	3,9
Met3	0,71		
Via2	0,88		
Met2	0,71		
Via1	0,9		
Met1	0,5	0,5	
Contact	0,5	0,5	
Poly	0,18	0,74	
Oxyde	0,56		

Nous complétons la structure à simuler par une couche de quelques microns d'air au-dessus de la dernière couche diélectrique, pour avoir des conditions aux limites réalistes sur le haut de la structure.

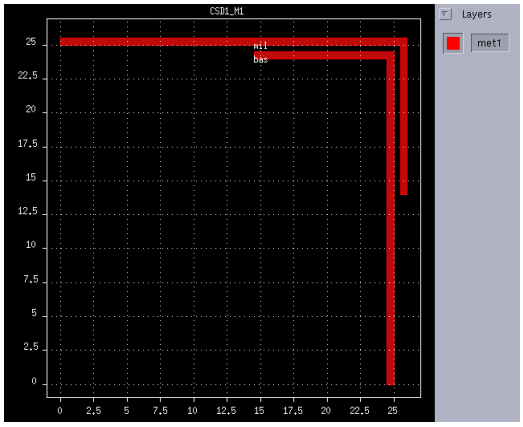
- Remarques sur les calculs :

a) Seules les valeurs des capacités ayant fait l'objet de mesures sont données ici.

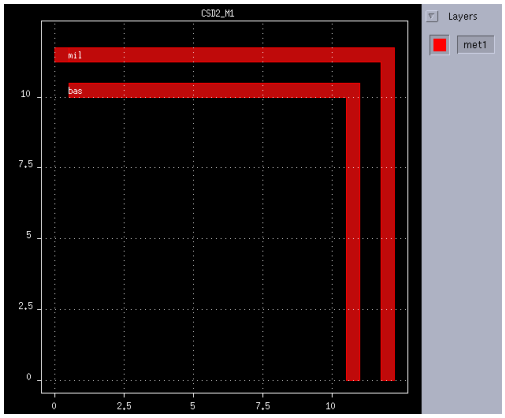
b) Nous ne cherchons pas ici à obtenir des résultats plus précis que cinq à dix pour cent. Les simulations ont été réalisées avec Clever pour une précision de 5%, et avec Icare pour les maillages par défaut. Mais les simulations avec Quickcap ont été réalisées pour une précision requise de 3%. La précision étant a priori mieux maîtrisée dans Quickcap que dans Clever, et peut-être que dans Icare, les résultats présentés ici pour Quickcap sont sans doute légèrement pénalisés. Mais ce sont les seuls résultats dont nous disposons, et ils permettent tout de même de donner un ordre d'idée des performances relatives des logiciels.

c) Le domaine de calcul de Clever et Icare est un volume parallélépipédique englobant le circuit, avec des conditions de symétrie ($\frac{\partial u}{\partial n} = 0$) sur les faces du parallélépipède autres que la base, qui est considérée comme un plan de masse. Tandis que pour Quickcap le domaine de calcul est l'espace entier. Le choix de Quickcap est peut-être plus judicieux lorsque les capacités sont considérées comme réellement isolées. Et celui de Clever et Icare est peut-être plus judicieux lorsque les interconnexions caractérisées représentent une portion d'un circuit, et sont entourées d'autres interconnexions non représentées. Cependant, ici le but est de comparer les logiciels sur un même problème, nous avons donc pris pour Icare et Clever, un domaine de calcul englobant très largement les interconnexions. Pour une méthode comme les domaines fictifs où tout le domaine de calcul est maillé par une grille régulière, ce choix est pénalisant.

Nous présentons à présent des vues de dessus de chaque cellule simulée, et les résultats de simulation associés. Lorsqu'il y a plusieurs niveaux de métal (il y a plusieurs noms de couches dans la zone grisée à droite de la structure), toutes les couches sont représentées superposées.



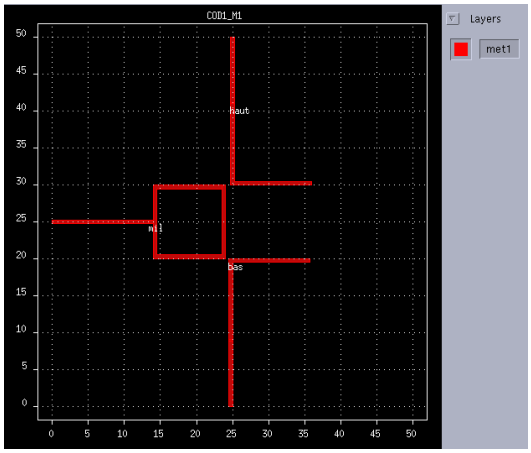
csd1_m1



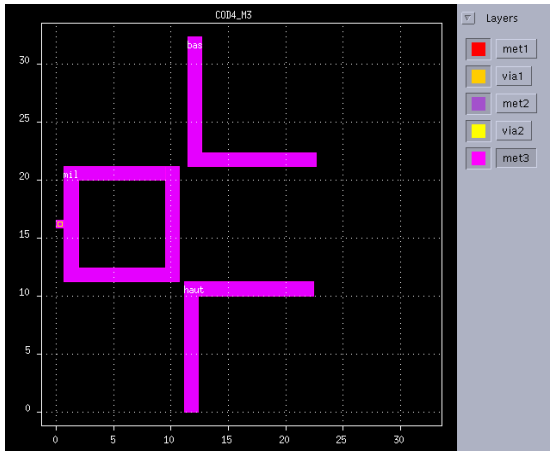
csd2_m1

csd1_m1	Clever	Quickcap	Icare
Temps de calcul (sec.)	3'16"	0'04"	0'04"
Mémoire (MB)	67		1,7
Valeurs (femtoF)	1,60	1,51	1,47

csd2_m1	Clever	Quickcap	Icare
Temps de calcul (sec.)	2'30"	0'05"	0'01"
Mémoire (MB)	60		0.6
Valeurs (femtoF)	1.13	1.08	1.03



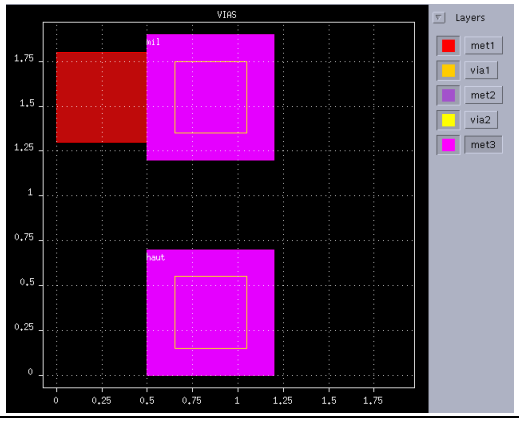
cod1_m1

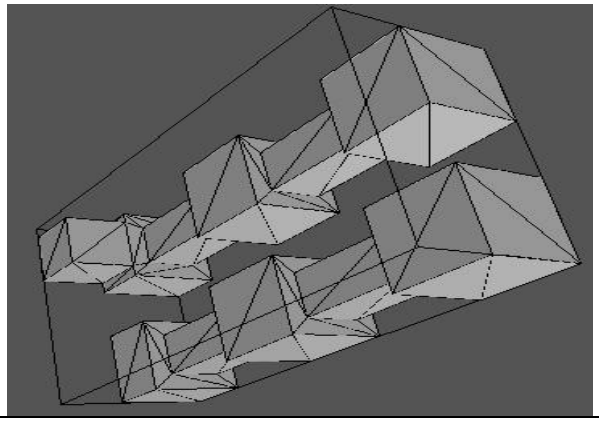


cod4_m3

cod1_m1		Clever	Quickcap	Icare
Temps de calcul (sec.)		3'13	3'01"	0’06’’
Mémoire (MB)		50		3.2
Valeurs (femtoF)	mil - bas	0,138	0,142	0,135
	mil - haut	0,132	0,127	0,113
	bas - haut	0,019	0,012	0,013

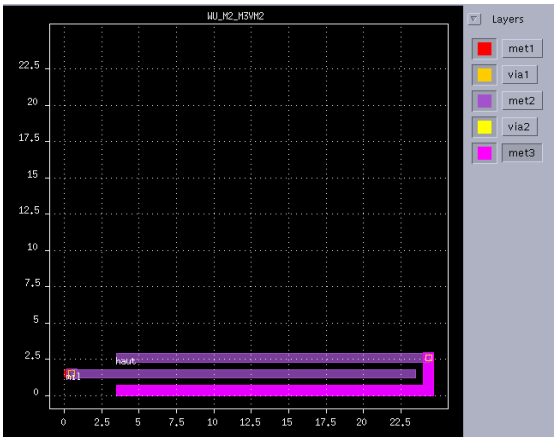
Cod4_m3		Clever	Quickcap	Icare
Temps de calcul (sec.)		1'55	1’59’’	0’06’’
Mémoire (MB)		28		1,7
Valeurs (femtoF)	mil - haut	0,283	0,253	0,245
	bas - mil	0,250	0,232	0,218
	haut - bas	0,061	0,035	0,034

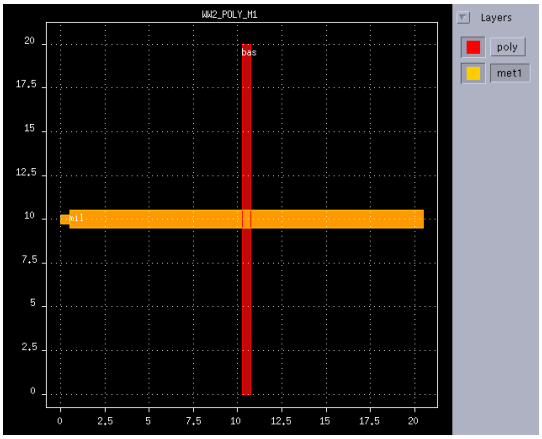


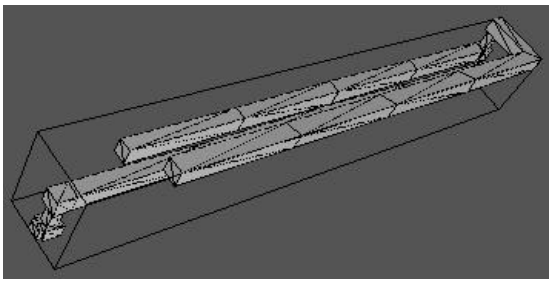


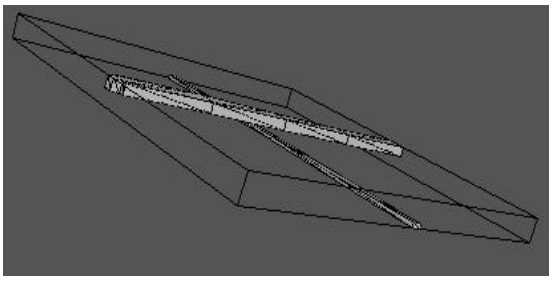
vias : vue en coupe et vue 3D

vias	Clever	Quickcap	Icare
Temps de calcul (sec.)	6’47’’	0'09	0’04’’
Mémoire (MB)	143		1,9
Valeurs (femtoF)	0,302	0,282	0,291





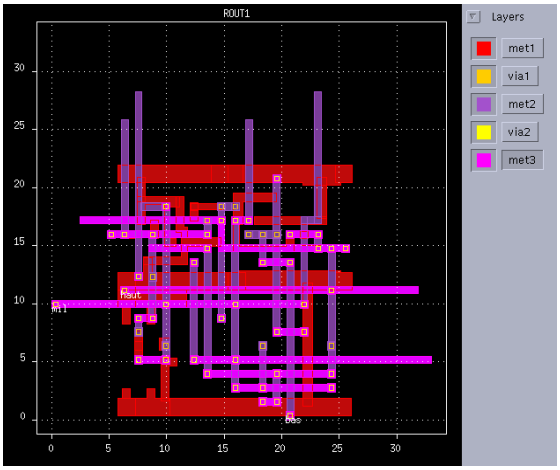




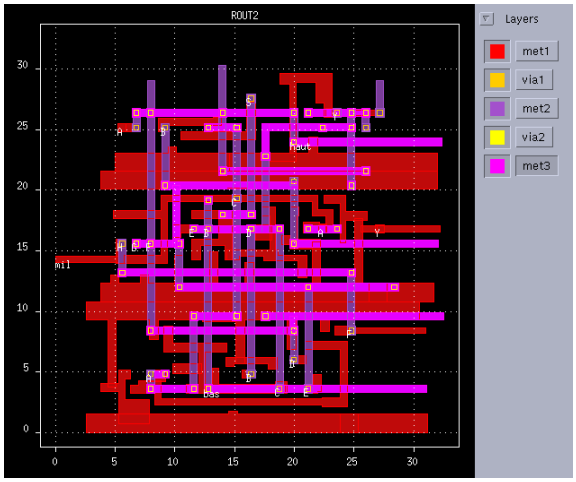
wu_m2_m3vm2 **ww2_poly_m1**

wu_m2_m3vm2	Clever	Quickcap	Icare
Temps de calcul (sec.)	6'09’’	0'08’’	0’04’’
Mémoire (MB)	153		2,1
Valeurs (femtoF)	2.70	2,68	2.49

ww2_poly_m1	Clever	Quickcap	Icare
Temps de calcul (sec.)	2'17	0'09"	0’06’’
Mémoire (MB)	56		2,1
Valeurs (femtoF)	0,272	0,257	0,251



rout1



rout2

rout1		Clever	Quickcap	Icare
Temps de calcul (sec.)		18'21"	1'11"	0'19"
Mémoire (MB)		251		9
Valeurs (femtoF)	mil/haut haut/bas mil/bas	9,27 2,22 1,85	8,90 2,09 1,74	8,63 1,99 1,72

rout2		Clever	Quickcap	Icare
Temps de calcul (sec.)		17'55"	0'53"	0'22"
Mémoire (MB)		190		11
Valeurs (femtoF)	mil/haut haut/bas mil/bas	5,96 5,80 5,30	5,61 5,57 4,88	5,56 5,53 4,96

2.2. COMPARAISON AVEC DES MESURES EXPERIMENTALES

Les procédés actuels de fabrication ne permettent pas d'obtenir précisément les dimensions prévues, et particulièrement les épaisseurs des couches diélectriques, avec une bonne précision. Nous avons donc repris avec Icare des simulations sur des structures précédentes, mais avec des valeurs des épaisseurs des couches diélectriques, et des largeurs de certaines lignes d'interconnexion mesurées a posteriori (les dimensions dans les dessins du paragraphe 2.1.3 sont donc légèrement modifiées).

Les structures en technologie SOI 0,25µm, dont les résultats de simulations sont présentés ici, ont été testées sur cinq plaques différentes, comportant chacune environ dix exemplaires de chaque structure. Les dimensions et capacités ont ainsi été mesurées après fabrication, pour chaque structure de chaque plaque. Cependant, en raison de la dispersion importante des mesures des épaisseurs des diélectriques, nous avons choisi une plaque (LOT 6560 – plaque 03), sur laquelle les dispersions sont moins importantes. Les épaisseurs mesurées sont données dans le Tableau V.8 :

Tableau V.8 Epaisseurs mesurées des couches

COUCHE	EPAISSEUR (en µm)		PERMITTIVITE
Air	5		1
Diel	0,9	4,13	3,9
Met3	0,71		
Via2	0,93 +/- 0,05		
Met2	0,71		
Via1	0,88 +/- 0,05		
Met1	0,50	0,50	
Contact	0,53 +/- 0,05	0,53	
Poly	0,20	0,785	
Oxyde	0,585		

Nous avons repris pour les calculs quatre structures : deux structures très simples, et les deux structures les plus compliquées rout1 et rout2. Les résultats de simulation d'Icare présentés dans le Tableau V.9 sont à nouveau les résultats obtenus avec les choix par défaut des maillages. En effet, étant donné les incertitudes assez fortes, tant sur les données technologiques que sur les mesures de capacités, nous ne recherchons pas une très grande précision.

Tableau V.9. Comparaisons des calculs et des mesures expérimentales

Structure	Electrodes	Mesure (femtoF)	Icare (femtoF)
csd1_m1	mil-bas	1,66 ± 0,04	1,68
csd2_m1	mil-bas	1,27 ± 0,02	1,34
	mil-bas + mil-substr.	2,85 ± 0,05	3,16
rout1	mil-bas	1,72 ± 0,04	1,72
	mil-haut	8,15 ± 0,45	8,71
rout2	mil-bas	4,95 ± 0,15	4,99
	mil-haut	5,2 ± 0,45	5,56

Nous constatons que, pour la plupart des capacités considérées, les résultats de simulation sont très proches des mesures. Certaines valeurs sont assez éloignées, cela peut s'expliquer par le fait que les circuits de mesures utilisés pour mesurer les grandeurs électriques (courants, tensions, …) dont on va déduire les capacités, ne sont pas garantis ne pas apporter eux-mêmes des parasites importants. Nous avons d'ailleurs observé ce problème sur certains exemples (non présentés dans le tableau).

3. UNE UTILISATION POUR TRAITER DES CIRCUITS COMPLETS

Les programmes ne sont actuellement pas capables de calculer directement les charges à la surface des conducteurs sur un circuit entier. C'est pourquoi une approche couramment utilisée pour extraire les capacités sur un circuit entier, est de découper ce circuit en reconnaissant des cellules élémentaires prédéfinies, pour lesquelles on a préalablement fabriqué des modèles analytiques approchés. Le calcul sur chaque structure élémentaire étant ainsi très rapide, une fois ces modèles définis, il est possible d'extraire les capacités d'un circuit entier en un jour ou deux de calcul.

C'est en particulier l'approche utilisée par le logiciel Xcalibre de la société Mentor Graphics, logiciel dont dispose le groupe Conception Masques du département

Microtechnologies du LETI. Ce logiciel s'appuie sur des fichiers créés par un logiciel nommé Xcalibrate, contenant, pour un certain nombre de structures géométriques élémentaires, des équations donnant de façon approchée les capacités entre les lignes de la structure. Ces équations font intervenir divers paramètres de la géométrie (largeur des lignes de métal, écartement, etc, …), et permettent donc de calculer immédiatement les capacités de toute structure de cette forme, quelles que soient ses dimensions.

Des modèles représentatifs des formes géométriques rencontrées dans un circuit intégré, ainsi que des équations approchées associées, dépendant des paramètres de la géométrie, sont prédéfinis par la société Mentor Graphics. En fonction de la technologie utilisée (épaisseurs des couches, permittivités diélectriques), Xcalibrate génère alors un certain nombre de variantes du modèle géométrique en faisant varier ses paramètres. Il appelle un solveur du type Icare pour calculer les capacités de chacune de ces variantes. Et à partir des valeurs des capacités obtenues, il calibre le modèle analytique approché, c'est-à-dire il calcule les coefficients des équations pour que les équations collent au mieux aux valeurs calculées.

Pour effectuer les calculs de capacités, le programme Xcalibrate laisse la possibilité d'appeler deux solveurs : le solveur 3D Quickcap de Random Logics Corporation, et le solveur 2D Raphael de TMA, mais il est prévu de pouvoir en utiliser éventuellement un autre. C'est ainsi que Marc Belleville, responsable du groupe Conception Masques, a proposé un stage pour utiliser Icare pour ces calculs. Remi Salieres a réalisé cette interface au cours d'un stage de 4 mois durant l'été 2000, et a obtenu des premiers résultats encourageants. En effet, pour la technologie choisie, le calibrage des 8 modèles existants dans Xcalibrate a nécessité l'appel d'Icare pour simuler plus de 2000 structures élémentaires différentes. Pour une première évaluation, la même grille de volume, relativement raffinée (grille de 128.128.64 points), a été utilisée pour toutes ces structures, même si cette grille était plus ou moins bien choisie selon les modèles. Sur un Sun Ultra 2 avec 512M de mémoire, l'exécution a pris environ 20 heures. A notre connaissance, le même calcul avec les autres solveurs est nettement plus coûteux. Nous pensons de plus qu'un travail sur le choix automatique de la grille, pour l'adapter à ce type de structure, un peu différent des structures habituelles plus complexes, ainsi éventuellement qu'un préconditionnement de l'algorithme du gradient conjugué, pourraient nettement améliorer ces résultats.

Ces essais permettent donc de montrer l'apport d'Icare, non seulement pour caractériser des cellules d'une taille de quelques centaines de microns, mais aussi pour la simulation de circuits entiers. Il permet en effet de faciliter le calibrage des modèles prédéfinis utilisés par les extracteurs, et donc de rendre ces méthodes moins lourdes d'utilisation.

Pour plus de précisions sur le logiciel Xcalibrate, et la réalisation de l'interface entre Xcalibrate et Icare, on pourra se référer au rapport de stage de Rémi Salieres.

Conclusion

La motivation de notre travail était de proposer un algorithme efficace de calcul des capacités parasites entre les interconnexions dans les circuits intégrés. Ces capacités sont obtenues par le calcul de la charge à la surface des conducteurs, c'est-à-dire de la dérivée normale du potentiel à la surface de ces conducteurs, le potentiel étant solution de l'équation de Laplace dans des couches diélectriques horizontales, avec conditions aux limites de Dirichlet. Le domaine de calcul étant un domaine 3D complexe, la méthode proposée doit être efficace en temps de calcul et en place mémoire. Nous avons utilisé une méthode de domaines fictifs avec multiplicateurs de Lagrange surfaciques, proposée par Glowinski, Pan et Périaux [GlPaPé 94] pour les problèmes elliptiques avec conditions aux limites de Dirichlet. Le potentiel et la charge (le multiplicateur) sont approchés respectivement sur une grille régulière du volume et sur un maillage de la surface des conducteurs, et les valeurs approchées sont obtenues par la résolution d'un système couplé. Cette résolution peut se faire en utilisant un solveur de Poisson rapide sur la grille.

Le problème du calcul des capacités des interconnexions présente des particularités qui font que cette approximation n'est pas bien adaptée. Les structures d'interconnexions comportent des lignes longues et de faible section, ce qui rend cette méthode peu efficace en pratique : en effet, pour que la condition inf-sup entre les espaces de discrétisation soit vérifiée, les pas des maillages doivent respecter une condition de compatibilité. De plus, les valeurs du multiplicateur, c'est-à-dire de la charge, sont en pratique peu précises.

L'originalité de ce travail a été de proposer et d'étudier un enrichissement de l'espace de discrétisation du potentiel, par des fonctions permettant d'approcher le saut du champ électrique, c'est-à-dire du gradient du potentiel, à travers la surface des conducteurs. L'approximation ainsi obtenue permet une plus grande souplesse dans le choix des maillages, et donne des résultats sur la charge nettement plus précis, pour tout choix des maillages, que l'approximation dont nous sommes partis. Et surtout, ce gain de précision ne se fait pas au prix d'une augmentation du temps de calcul ou de la mémoire : au contraire, le coût d'une itération de l'algorithme de résolution est à peu près équivalent pour les deux approximations, mais la convergence est plus rapide pour l'approximation obtenue avec l'espace de discrétisation enrichi. Cette approximation a été programmée en dimension 3, et nous avons de plus proposé un choix par défaut des maillages, adapté aux structures d'interconnexions, et qui rend le programme facile d'utilisation.

Le domaine d'application de ce travail est pour l'instant assez restreint. Nous avons en effet utilisé le fait que le potentiel est constant sur la surface des conducteurs pour définir les fonctions de base supplémentaires. De plus, le système résolu en pratique ne correspond vraiment à cette nouvelle approximation, que dans le cas de conducteurs formés de juxtaposition de parallélépipèdes rectangles. C'est le cas de la plupart des structures d'interconnexions étudiées. Dans le cas où les surfaces des conducteurs sont quelconques, les résultats sont légèrement moins précis.

Mais, probablement en raison même de cette adéquation au problème particulier, l'algorithme programmé s'est révélé très efficace, en mémoire et en temps de calcul, par rapport aux logiciels existants que nous avons pu tester.

Bibliographie

Présentation du problème et méthodes existantes pour le calcul des capacités :

[Cr 98] C. Crégut. *Modélisation théorique et consolidation expérimentale des interconnexions en technologie silicium avancée*. Thèse, Université Joseph Fourier, 1998.

[Du] E. Durand. *Electrostatique II. Problème généraux, conducteurs*. Edition Masson.

[NaWh 91] K. Nabors and J. White. Fastcap : a multipole accelerated 3-D capacitance extraction program. *IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems*, vol. 10, pages 1447-1459, Nov. 1991.

[NaKiWh 92] K. Nabors, S. Kim, and J. White. Fast capacitance extraction of general 3-D structures. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, vol. 40, no. 7, pages 1496-1506, July 1992.

[RaSaHa 84] S.M. Rao, T.K. Sarkar, and R.F. Harrington. The electrostatic field of conducting bodies in multiple dielectric media. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, vol. 32, no. 11, pages 1441-1447, Nov. 1984.

[OhKuSc 94] K.S. Oh, D. Kuznetsov, and J.E. Schutt-Aine. Capacitance computations in a multilayered dielectric medium using closed-form spatial Green's functions. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, vol. 42, no. 8, pages 1443-1453, Aug. 1994.

[KrXiDePi 96] B. Krauter, Y. Xia, A. Dengi, L. T. Pileggi. A sparse image method for BEM capacitance extraction. ACM 33rd Design Automation Conference, 1996.

[CoIv 92] Y.L. Le Coz and R. B. Iverson. A stochastic algorithm for high speed capacitance extraction in integrated circuits. Solid-State Electronics, vol. 35, no. 7, pages 1005-1012, 1992.

[HoSuZhJiSoDa 96] W. Hong, W. Sun, Z. Zhu, H. Ji, B. Song, and W. Wei-Ming Dai. A novel dimension reduction technique for the capacitance extraction of 3D VLSI interconnects. *IEEE/ACM Int. Conf. Computer-Aided Design*, San Jose, CA, pages 381-385, nov. 1996.

[ZhJiHo 97] Z. Zhu, H. Ji, and W. Hong. An efficient algorithm for the parameter extraction of 3-D interconnect structures in the VLSI circuits : domain decomposition method. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, vol. 45, no. 8, pages 1496-1506, août 1997.

Méthodes de domaines fictifs, résolution numérique :

[AtDiGlHePe 90] C. Atamian, Q. V. Dinh, R. Glowinski, J. He, J. Périaux. Control approach to fictitious domain methods. Application to fluid dynamics and electro-magnetics. *4th International Symposium on Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations*, pages 275-309, mai 1990.

[GlPaPe 94] R. Glowinski, T.-W. Pan, and J. Periaux. A fictitious domain method for Dirichlet problem and application. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, pages 283-303, 1994.

[Ha 96] J. Haslinger. Comparison of different fictitious domain approaches used in shape optimization. University of Jyväskylä, Report 15, 1996.

[To 97] L. Tomas. *Optimisation de forme et domaines fictifs : analyse de nouvelles formulations et aspects algorithmiques*. Thèse, Ecole Centrale de Lyon, 1997.

[Ga 97] S. Garces. *Une méthode de domaines fictifs pour la modélisation des structures rayonnantes tridimensionnelles*. Thèse, Ecole Nationale Supérieure de l'Aéronautique et de l'Espace, 1997.

[GoMe 80] G.-H. Golub et G.A. Meurant. *Résolution des grands systèmes linéaires*. CEA-EDF-INRIA, Ecole d'été d'analyse numérique, été 1980.

[Sw 77] P. Swarztrauber. The methods of cyclic reduction, Fourier analysis and the FACR algorithm for the discrete solution of Poisson's equation on a rectangle. *SIAM Review*, vol. 19, n° 3, July 1977.

Analyse numérique

[GiGl 95] V. Girault and R. Glowinski. Error analysis of a fictitious domain method applied to a Dirichlet problem. *Japan J. Indust. Appl. Math.*, 12, pages 487-514, 1995.

[Br 74] F. Brezzi. On the existence, uniqueness and approximation of saddle-point problems arising from lagrangian multipliers. *R.A.I.R.O.*, pages 129-151, août 1974.

[Fo 77] M. Fortin. An analysis of the convergence of mixed finite element methods. *R.A.I.R.O.*, vol. 11, n° 4, pages 341-354, 1977.

[BrFo 91] F. Brezzi and M. Fortin. *Mixed and Hybrid Finite Element Methods.* Springer Series in Computational Mathematics, 1991.

[Ba 71] I. Babuska. Error bounds for finite element method. *Numer. Math.*, vol. 16, pages 322-333, 1971.

[Cl 75] P. Clément, Approximation by finite element functions using local regularization. *RAIRO Anal. Numer.*, vol. 9, pages 77-84, 1975.

[Ba 73] I. Babuska. The finite element method with Lagrange multipliers. *Numer. Math.*, vol. 20, pages 179-192, 1973.

[BrPi 84] F. Brezzi, J. Pitkäranta. On the stabilization of finite element approximations of the Stokes equations. *Efficient solutions of elliptic systems*, Notes on numerical fluid mechanics, vol. 10, (W. Hackbush, ed.), Braunscweig, Wiesbaden, 1984.

[HuFrBa 86] T.J.R. Hugues, L.P. Franca et M. Balestra. A new finite element formulation for computational fluid dynamics : V. Circumventing the Babuska-Brezzi condition : a stable Petrov-Galerkin formulation of the Stokes problem accommodating equal-order interpolation. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 59, pages 85-99, 1986.

[HuFr 87] T.J.R. Hugues et L.P. Franca. A new finite element formulation for computational fluid dynamics : VII. The Stokes problem with various well-posed boundary conditions : symmetric formulations that converge for all velocity/pressure spaces. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 65, pages 85-96, 1987.

[ArBrFo 84] D. N. Arnold, F. Brezzi et M. Fortin. A stable finite element for the Stokes equations, *Calcolo*, vol. 21, pages 337-344, 1984.

[CrRa 73] M. Crouzeix et P.A. Raviart. Conforming and non conforming finite element methods for solving the stationary Stokes equations, *RAIRO Anal. Numér.*, R3, pages 33-76, 1973.

[Pi 88] R. Pierre. Simple C^0 approximations for the computation of incompressible flows, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 68, pages 205-227, 1988.

[BaBrFr 93] C. Baiocchi, F. Brezzi et L.P. Franca. Virtual bubbles and Galerkin-least-squares type methods, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 105, pages 125-141, 1993.

[BrFrMaRu 98] F. Brezzi, L.P. Franca, D. Marini, A. Russo. Stabilization techniques for domain decomposition methods with non-matching grids. In Domain decomposition methods in science and engineering (9^{th} International Conference, Bergen, Norway, 1996), P. Bjorstad et al., ed., Domain Decomposition Press, Bergen, 1998, pp. 1-11.

Résumé : Cette thèse présente une méthode performante pour le calcul des capacités parasites dues aux interconnexions des circuits intégrés. Il s'agit de calculer la charge des conducteurs, comme la dérivée normale à la surface de ces conducteurs, du potentiel solution de l'équation de Laplace sur des couches horizontales, la valeur du potentiel étant fixée constante sur chaque conducteur. La difficulté de la résolution numérique provient de la complexité des structures : sur une portion de circuit d'une surface d'un centimètre carré et d'une hauteur de quelques microns, il peut y avoir plus d'un kilomètre d'interconnexions, c'est-à-dire de fils conducteurs enchevêtrés. Une méthode de domaines fictifs avec multiplicateurs de Lagrange surfaciques est utilisée. Elle donne une formulation mixte du problème, couplant le potentiel sur un domaine parallélépipédique contenant le circuit, et la charge à la surface des conducteurs. Nous en proposons une approximation, qui tient compte du saut du gradient du potentiel à travers la surface des conducteurs dans la discrétisation du potentiel, tout en menant à un système que l'on peut résoudre par une méthode rapide. Cette approximation garantit une bonne convergence du calcul de la charge vers la valeur réelle, sans condition de compatibilité contraignante entre les maillages de volume et de surface. Une implémentation efficace en dimension 3, avec laquelle nous avons effectué des tests numériques sur des structures réelles, permet de montrer l'intérêt de la méthode, en temps de calcul et en place mémoire.

Title : Computation by a fictitious domain method of parasitic capacitance due to interconnects in integrated circuits.

Abstract : This thesis presents an efficient method for the computation of parasitic capacitance due to the interconnects in integrated circuits. For this, we calculate the charge on the conductors, by the normal derivative of the potential on the surfaces of conductors. The potential is solution of Laplace equation in horizontal layers, with Dirichlet boundary conditions on the surfaces of conductors. The difficulty of this computation comes from the geometric complexity : a portion of circuit of surface one square centimetre, and height a few microns, can contain more than a kilometre of interconnects, that is of conductor wires. A fictitious domain method with Lagrange multiplier is used. It leads to a mixed formulation of the problem, that couples the potential in a parallelepiped embedding the circuit, and the charge on the surfaces of conductors. We propose an approximation that takes into account the jump of the gradient of potential across the surfaces of conductors in the discretization of the potential, while leading to a system that can be solved using a fast solver. The charge is thus computed with a good accuracy, without restricting compatibility conditions on surface and volume meshes. The method has been implemented for two and three - dimensional problems, and tested on real structures. Thus, the accuracy and computational efficiency of the method have been validated, in comparison to existing methods.

Discipline : Mathématiques Appliquées

Mots-clés : capacités parasites d'interconnexions, équation de Laplace, domaines fictifs, multiplicateurs de Lagrange, condition inf-sup, approximation non conforme.

Keywords : interconnects parasitic capacitance, Laplace equation, fictitious domains, Lagrange multipliers, inf-sup condition, non conforming approximation.