

Méthodes numériques innovantes pour la simulation thermique de composants électroniques

Gaël Bonithon

▶ **To cite this version:**

Gaël Bonithon. Méthodes numériques innovantes pour la simulation thermique de composants électroniques. Génie mécanique [physics.class-ph]. Arts et Métiers ParisTech, 2010. Français. NNT : 2010ENAM0047 . pastel-00547880

HAL Id: pastel-00547880
https://pastel.hal.science/pastel-00547880

Submitted on 17 Dec 2010

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.

2010-ENAM-0047

École doctorale n°432 : Sciences des Métiers de l' Ingénieur

Doctorat ParisTech

T H È S E

pour obtenir le grade de docteur délivré par

l'École Nationale Supérieure d'Arts et Métiers

Spécialité " Génie mécanique – procédés de fabrication "

présentée et soutenue publiquement par

Gaël BONITHON

le 2 décembre 2010

Méthodes numériques innovantes pour la simulation thermique de composants électroniques

Directeur de thèse : **Francisco CHINESTA**
Co-encadrement de la thèse : **Pierre JOYOT, Pierre VILLON**

Jury

M. Jean-Luc BATTAGLIA, Professeur, TREFLE, Université Bordeaux 1	Président
M. Marc BONNET, Directeur de recherche, LMS, Ecole Polytechnique	Rapporteur
M. Alain CIMETIERE, Professeur, Institut PPRIME, ENSMA	Rapporteur
M. Francisco CHINESTA, Professeur, GeM, ECN	Examinateur
M. Pierre JOYOT, Maître de Conférences, ESTIA Recherche, ESTIA	Examinateur
M. Pierre VILLON, Professeur, Laboratoire Roberval, UTC	Examinateur
M. Jean-Pierre FRADIN, Directeur, EPSILON Ingénierie	Invité

T H È S E

Arts et Métiers ParisTech - Centre de Paris
Procédés et Ingénierie en Mécanique et Matériaux

A mes grands-parents,
à mes parents,
à ma sœur.

Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier la société EPSILON Ingénierie et l'école d'ingénieurs ESTIA de m'avoir accueilli dans leurs locaux pour réaliser cette thèse. J'ai ainsi pu évoluer dans un excellent cadre de travail tout au long de ces trois années.

Je remercie Marc Bonnet et Alain Cimetière d'avoir accepté de rapporter sur mon travail, et de m'avoir fait bénéficier de leurs remarques. Merci également à Jean-Luc Battaglia d'avoir présidé mon jury de thèse.

Un grand merci à Francisco Chinesta, Pierre Joyot et Pierre Villon d'avoir accepté de diriger cette thèse, ainsi qu'à Jean-Pierre Fradin d'avoir assuré mon encadrement au sein d'EPSILON. Leurs conseils et leur soutien m'auront été plus que précieux pendant ces trois années.

Merci à Nadine Couture et Jean-Roch Guiresse de m'avoir aidé à préparer et organiser ma soutenance de thèse à l'ESTIA. Merci également à celles et ceux qui m'ont fait le plaisir d'y assister. Je pense notamment à Jean Esterle, Patrick Reuter, Alexis Clay et Guillaume Rivière.

Je remercie enfin toutes les personnes qui ont contribué plus discrètement au bon déroulement de ma thèse, aussi bien à l'ESTIA qu'à EPSILON, mais également hors du cadre professionnel.

Méthodes numériques innovantes pour la simulation thermique de composants électroniques

Résumé : Les composants électroniques présentent des facteurs d'échelle géométrique importants, et font intervenir des matériaux aux conductivités thermiques très différentes. L'expérience montre que dans ce cadre, la méthode des éléments de frontière est un choix judicieux pour la simulation thermique en régime permanent. En régime transitoire, la dimension temporelle ajoute un certain nombre de difficultés. Parmi celles-ci figurent classiquement l'augmentation des temps de calcul et les critères de stabilité, ou d'un manière plus générale les liens entre discrétisations spatiale et temporelle. Plus spécifiquement, un des enjeux actuels en électronique est de mesurer l'impact de phénomènes très localisés, comme des commutations ou des courts-circuits, sur la thermique globale d'un composant. Il s'agit alors de coupler différentes échelles espace-temps, en assurant en particulier des changements d'échelle sans perte d'information. Dans la première partie de ce travail, on propose d'utiliser la méthode des éléments de frontière transitoire pour répondre à cette problématique. On combine tout d'abord différentes formulations intégrales et des techniques d'optimisation pour réduire le coût de la méthode. On réutilise ensuite ce travail pour développer une approche multi-échelles, et généraliser la méthode des éléments de frontière aux matériaux non linéaires. Une seconde partie est consacrée au développement d'une méthode alternative, visant à réduire les temps de calcul de manière plus significative tout en conservant une base éléments de frontière. Il s'agit d'une méthode de décomposition propre généralisée, qui permet de construire une représentation à variables séparées de la solution de manière non incrémentale. On étudie la convergence de l'algorithme sur différents cas de test, en proposant des techniques pour traiter des conditions aux limites et initiales non homogènes, ainsi que des termes sources non linéaires.

Mots clés : formulations intégrales, éléments de frontière, décomposition propre généralisée, temps courts, multi-échelles.

Innovative numerical methods for the thermal simulation of electronic components

Abstract : Electronic components have large geometric scale factors, and involve materials with very different thermal conductivities. Experience shows that in this context, the boundary element method is a good choice for thermal simulation in steady state. In transient regime, the temporal dimension adds a number of difficulties. Among these are typically higher computation time and stability criteria, or more generally the links between spatial and temporal discretizations. More specifically, a current issue in electronics is to measure the impact of highly localized phenomena, such as switching or short circuit on the overall thermal component. This is then coupled space-time scales, ensuring in particular the changes of scale without loss of information. In the first part of this work, we propose to use the transient boundary element method to address this problem. We combine first integral formulations and various optimization techniques to reduce the computational cost of the method. We then reuse this work to develop a multi-scale approach, and generalize the boundary element method for nonlinear materials. A second part is devoted to developing an alternative method, to reduce computation time more significantly while retaining a boundary element basis. This is a proper generalized decomposition method, which builds a separate representation of the solution within a non-incremental strategy. We study the convergence of the algorithm on different test cases, providing techniques for dealing with non-homogeneous boundary conditions and initial data, and nonlinear source terms.

Keywords : integral formulations, boundary elements, proper generalized decomposition, short time, multi-scale.

Table des matières

1 Introduction Générale **11**

I Utilisation de la méthode des éléments de frontière en contexte industriel **13**

2 Introduction **15**

3 Méthode des éléments de frontière pour les matériaux linéaires **19**
3.1 Introduction 19
3.2 Propriétés du noyau de la chaleur 20
3.3 Passage à la formulation intégrale 21
3.4 Discrétisation de la formulation intégrale 22

4 Contribution du passé et formulations éléments de frontière **27**
4.1 Introduction 27
4.2 Contribution surfacique du passé 28
4.3 Contribution volumique du passé 31
4.4 Contribution adaptative du passé (classé confidentiel) 33
4.5 Résultats numériques 33
4.5.1 Cas de test monodimensionnels 34
4.5.2 Cas de test industriel 36

5 Approche multi-échelles pour la simulation de phénomènes thermiques en temps court **45**
5.1 Introduction 45
5.2 Formulation éléments de frontière en temps court (classé confidentiel) . . 46
5.3 Calcul effectif de l'initialisation (classé confidentiel) 46
5.4 Résultats numériques 46

6 Une généralisation de la méthode des éléments de frontière aux matériaux non linéaires **51**
6.1 Introduction 51
6.2 Transformation de l'équation forte 52
6.3 Equation intégrale non linéaire 53

6.4 Résolution itérative 54
6.5 Résultats numériques 55

7 Conclusion **61**

II Décomposition propre généralisée et méthode des éléments de frontière **63**

8 Introduction **65**

9 Decomposition propre généralisée : motivations **67**

10 PGD-BEM pour l'équation de la chaleur **71**
10.1 Procédure de décomposition dans un cadre continu 71
10.2 Discrétisation et éléments de frontière 73

11 Résultats numériques **77**
11.1 Conditions aux limites homogènes 77
11.2 Conditions aux limites non homogènes 83
11.3 Terme source non linéaire 94

12 Conclusion et Perspectives **97**
12.1 Conditions aux limites mixtes 97
12.2 Problèmes multi-domaines 99
12.3 Matériaux non linéaires 100

13 Conclusion Générale **105**

A Intégration du noyau de la chaleur **107**
A.1 Critères d'intégrabilité 107
A.2 Intégration analytique de la singularité 108

B Partie du mémoire classée confidentielle **117**
B.1 Section 4.4 117
B.2 Section 5.2 119
B.3 Section 5.3 122

Chapitre 1

Introduction Générale

Cette thèse s'inscrit dans le contexte industriel de la simulation thermique de composants électroniques. Elle fait également partie du projet de recherche européen MEDEA$^+$ ELIAS (End of Life Investigations for Automotive Systems), cofinancé du côté français par la DGCIS, et dont l'objet d'étude est la durée de vie des composants électroniques dans le secteur automobile. La miniaturisation des composants et l'augmentation des dissipations de puissance ont en effet amené ces dernières années de nouveaux besoins en simulation numérique. Un des enjeux majeurs est ainsi de pouvoir mesurer l'impact de phénomènes de commutation ou de court circuit, très localisés en espace-temps, sur la thermique globale d'un composant.

La société Epsilon Ingénierie qui a financé cette thèse, développe depuis plusieurs années son propre logiciel de simulation thermique, basé sur la méthode des éléments de frontière. L'expérience a ainsi montré que cette méthode était assez bien adaptée au cas des composants électroniques, notamment pour sa capacité à gérer les forts facteurs d'échelle que présentent ce type de géométries. Cependant l'implémentation réalisée en régime transitoire, basée sur un couplage entre éléments de frontière en espace et différences finies en temps, ne permettait pas de réaliser de simulations fiables en deça de la milliseconde. Par ailleurs le couplage avec les différences finies affectait globalement la robustesse de la méthode. L'enjeu était donc de proposer une approche plus fiable, permettant de résoudre des problèmes réels de thermique en temps court, en conservant autant que possible les avantages des éléments de frontière.

Nous nous sommes donc orienté dans un premier temps vers la méthode des éléments de frontière transitoire, c'est à dire basée sur l'utilisation du noyau de la chaleur espace-temps. Les premiers tests ont montré qu'il était possible de descendre à des pas de temps compris entre la nanoseconde et la microseconde, ce qui correspondait au cahier des charges industriel. Cela permettait de conserver de fait les atouts géométriques des éléments de frontière, en donnant au code de calcul une cohérence appréciable entre régimes transitoire et permanent. La principale contrepartie était une complexité et un coût de stockage élevés, directement liés à l'utilisation du noyau espace-temps. Cependant les bons comportement observés en temps court, et la grande robustesse de cette méthode

nous ont incités à chercher des voies d'optimisation. Nous avons donc exploré différentes possibilités, et étudié plusieurs variantes de la formulation éléments de frontière, pour à la fois réduire son coût et couvrir l'ensemble de la problématique industrielle. Cela fait l'objet de la première partie de cette thèse.

Les optimisations apportées à la méthode des éléments de frontière ont permis de faire avancer cette problématique sur plusieurs points. Mais dans l'optique de réduire les temps de calcul de manière plus significative en conservant toujours la base éléments de frontière, nous avons également contribué au développement d'une méthode alternative. Elle consiste à construire une représentation à variables séparées de la solution, en décorrélant totalement les discrétisations spatiale et temporelle. Les éléments de frontière peuvent alors être utilisés pour la partie spatiale, ce qui satisfait un des objectifs. De plus, contrairement aux méthodes classiques, il s'agit d'une approche non incrémentale. En d'autres termes, le nombre de systèmes algébriques à résoudre au cours de l'algorithme est indépendant de la taille du pas de temps. Celui-ci n'a donc pas d'impact significatif sur le coût global. Cette méthode n'est pas encore applicable à des problèmes réels, et nous ne l'avons donc pas implémentée en contexte industriel. Mais un certain nombre de résultats encourageants ont pu être obtenus au cours de cette thèse, et cela ouvre la voie à des perspectives intéressantes. La seconde partie de ce document est consacrée à ce travail.

Première partie

Utilisation de la méthode des éléments de frontière en contexte industriel

Chapitre 2

Introduction

Cette partie est consacrée à l'utilisation de la méthode des éléments de frontière pour apporter une réponse au problème industriel motivant cette thèse. Les trois principaux axes développés sont l'optimisation de la méthode élements de frontière pour la résolution de problèmes linéaires, la simulation de phénomènes thermiques en temps court, et la résolution de problèmes non linéaires. Après quelques rappels concernant les éléments de frontière pour l'équation de la chaleur en régime transitoire, on détaille la formulation choisie et les optimisations apportées pour la résolution de problèmes linéaires. On propose ensuite une méthode pour la simulation multi-échelles de phénomènes thermiques en temps court. On présente enfin une généralisation de la méthode des éléments de frontière aux matériaux non linéaires.

Voici une description générale du problème industriel. On introduit également les notations utilisées par la suite, en précisant quelque peu le cadre mathématique de l'étude. Le contexte étant la simulation thermique de composants électroniques, les modèles réels seront toujours multi-matériaux, avec des rapports de diffusivités et d'échelles géométriques importants. Pour les problèmes linéaires, on considérera l'équation de la chaleur orthotrope et homogène

$$\rho C_p \partial_t u(t,x) - \operatorname{div}\left(\Lambda \nabla u(t,x)\right) = f(t,x) \tag{2.1}$$

ou encore sous forme développée

$$\rho C_p \partial_t u(t,x) - \sum_{i=1}^{3} \lambda_i \partial_{x_i}^2 u(t,x) = f(t,x)$$

où

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{pmatrix}$$

est la matrice de conductivité thermique, ρ la densité volumique, C_p la chaleur massique et f une source de chaleur. On notera par la suite

$$\alpha_i = \frac{\lambda_i}{\rho C_p}$$

la diffusivité thermique dans la direction x_i.

Dans notre cas l'équation 2.1 sera posée dans un domaine Ω borné de $\mathbb{R}^3$ de frontière Γ et sur un intervalle de temps $[0, T]$. On notera ν la normale unitaire sortante sur Γ, et φ le flux sortant défini par

$$\varphi(t, x) = \Lambda\left(\nabla u(t, x)\right) \cdot \nu$$

A l'équation 2.1 viendront donc s'ajouter des conditions aux limites, qui pourront être de type température imposée ou flux imposé, mais qui le plus souvent seront de type mixte pour prendre en compte la convection avec le milieu extérieur. Le flux et la température seront alors liés par la relation

$$\varphi = h(u_{ref} - u)$$

où le coefficient h pourra éventuellement dépendre de la température. La donnée initiale du problème pourra être considérée quelconque, même si elle sera souvent constante en pratique.

Un modèle réel de simulation thermique en microélectronique fait nécessairement intervenir plusieurs matériaux, aux caractéristiques physiques sensiblement différentes. On est donc en fait amené à résoudre un système d'équations liées entre elles par des conditions de raccordement aux interfaces. Dans notre cas ces conditions seront souvent la continuité du flux et de la température, et parfois un saut de température du type

$$u_+ - u_- = R\varphi$$

pour prendre en compte l'influence de fils de bonding dont le coefficient R représente la résistance.

Cet aspect multi-domaines est évidemment très important du point de vue industriel, mais lors de l'implémentation la gestion des conditions de raccordement tout comme celle des conditions aux limites ont pu être traitées de manière assez transparente. En effet les développements déjà effectués en régime permanent pour gérer ces aspects pouvaient en grande partie être réutilisés. Nous ne considérerons donc souvent par la suite, notamment du point de vue théorique, que le cas d'un seul matériau sans nécessairement détailler les conditions aux limites. Ces points sont largement traités dans la thèse de J.P. Fradin [Fra94], dont est issue l'implémentation éléments de frontière en régime permanent.

Le problème restera le même pour la simulation des phénomènes thermiques en temps court, où le terme source nécessitera cependant une approche multi-échelles. Pour les problèmes non linéaires, le cadre restera également le même si ce n'est bien sûr que l'on considérera l'équation de la chaleur non linéaire isotrope et homogène :

$$\rho(u)C_p(u)\partial_t u - \operatorname{div}\left(\lambda(u)\nabla u\right) = f$$

pour des lois de comportement λ, ρ, C_p que nous préciserons au chapitre 6.

Sans fixer très précisément le cadre mathématique de l'étude, notons tout de même que l'on doit pouvoir rendre compte de l'injection de puissance par crénaux dans un composant, ou encore d'un changement brutal d'ambiance extérieure à l'instant initial ou en cours de simulation. Cela se traduit d'une manière générale par des discontinuités sur les données du problème, qui seront donc considérées continues par morceaux et bornées. Concernant la géométrie, les domaines que nous avons du traiter s'obtiennent par opérations ensemblistes sur des parallélépipèdes rectangles. Cependant du point de vue théorique, ce qui suit est valable dans le cas plus général de domaine lipschitzien ([AF03]).

Chapitre 3

Méthode des éléments de frontière pour les matériaux linéaires

3.1 Introduction

Le premier avantage de la méthode des éléments de frontière est de réduire un problème tridimensionnel à un problème bidimensionnel. Mais au delà de cette propriété continue, la méthode présente un certain nombre d'avantages numériques appréciables pour l'ingénieur. Elle est notamment connue pour supporter des maillages assez grossiers et peu réguliers, ainsi que des facteurs d'échelle importants. En contrepartie sa complexité est assez élevée, car le système matriciel résultant est plein et ne possède en général aucune propriété particulière.

Dans le cas de l'équation de la chaleur en régime transitoire, la gestion du passé vient s'ajouter à cette complexité et rend la méthode trop couteuse pour être utilisée sans optimisation en contexte industriel. Le chapitre 4 étant entièrement dédié à ce problème, on se contente ici de faire une présentation générale de la méthode. Après un bref rappel des propriétés du noyau de la chaleur, on détaille le passage à la formulation intégrale. On expose ensuite le schéma de discrétisation en introduisant la problématique traitée au chapitre 4.

La méthode des éléments de frontière est assez ancienne, et la littérature sur le sujet abondante. Nous avons donc choisi pour cette première partie d'introduire au fur et à mesure les références nécessaires à l'exposé. Rappelons simplement que les premiers cas d'utilisation de la méthode des éléments de frontière en thermique transitoire remontent à une quarantaine d'années. On peut notamment citer [CKC73] et [Cha87] comme références "historiques". Parmi les ouvrages de référence plus récents sur la méthode des éléments de frontière en général, citons [BSD08], [Bon99] et [Wro01]. Le chapitre 4 de [Wro01] regroupe plus particulièrement un certain nombre de références importantes concernant les éléments de frontière en thermique transitoire.

3.2 Propriétés du noyau de la chaleur

D'une manière générale une fonction de Green, encore appelée solution fondamentale ou élémentaire d'une équation aux dérivées partielles linéaire, est une solution au sens des distributions, lorsque le terme source est égal à la masse de Dirac à l'origine. Dans le cas de l'équation 2.1, les fonctions de Green sont appelées noyaux de la chaleur, et sont donc définis par

$$\rho C_p \partial_t g(t,x) - \operatorname{div}\left(\Lambda \nabla g(t,x)\right) = \delta_{\{(t,x)=(0,0)\}}$$

On peut choisir de poser cette équation dans un domaine de $\mathbb{R}^3$ ou dans l'espace entier, c'est à dire d'imposer ou non des conditions aux limites. Il est cependant assez rare de disposer d'une formule numériquement performante pour approcher les valeurs d'une fonction de Green, lorsqu'elle vérifie des conditions aux limites. Nous avons donc choisi, comme c'est très souvent le cas en pratique, de considérer le noyau de la chaleur dans tout l'espace

$$g(t,x) = \frac{1}{(4\pi t)^{\frac{3}{2}}} \prod_{i=1}^{3} \exp\left(-\frac{x_i^2}{4\alpha_i t}\right)$$

et on notera h le flux associé, c'est à dire

$$h = \Lambda\left(\nabla g(t,x)\right) \cdot \nu$$

Voici quelques propriétés de g utiles pour la suite. Tout d'abord

$$g \in C^{\infty}\left(]0,+\infty[\times\mathbb{R}^3\right)$$

ce qui autorise tout calcul différentiel une fois la singularité du noyau isolée. Soit maintenant Ω un ouvert de $\mathbb{R}^3$, $x \in \overline{\Omega}$, et $0 \leq t_0 < t$, alors

$$\int_{t_0}^{t}\int_{\Omega} g^p(t-s,x-y)dyds < +\infty \iff 1 \leq p < \frac{5}{3}$$

et

$$\int_{t_0}^{t}\int_{\Omega} \partial_t g(t-s,x-y)dyds = \int_{t_0}^{t}\int_{\Omega} \operatorname{div}\left(\Lambda \nabla g(t-s,x-y)\right)dyds = +\infty$$

Ces condition d'intégrabilité sont démontrées en annexe A dans le cas général d'un ouvert Ω de $\mathbb{R}^d$. La dernière propriété importante de g, que possède en fait tout noyau de la chaleur, est de tendre quand t tend vers zéro vers un multiple de la masse de Dirac à l'origine dans $\mathcal{D}'(\Omega)$. Pour l'équation 2.1, et dans le cadre des fonctions continues par morceaux que nous nous sommes précedemment donné, on peut énoncer cette propriété de la manière suivante : pour toute fonction ψ continue au voisinage de x, on a

$$\rho C_p \int_{\Omega} \psi(y) g(t,x-y)dy \xrightarrow[t \longrightarrow 0]{} c(x)\psi(x) \text{ dans } \mathbb{R}$$

où $c(x)$ est un multiple de l'angle solide sous lequel est vu Ω depuis x. Ce coefficient peut être défini par

$$c(x) = \rho C_p \int_\Omega g(t-t_0, x-y)dy - \int_{t_0}^{t}\int_\Gamma h(t-s, x-y)d\Gamma(y)ds$$

On peut montrer que si la frontière Γ est régulière, ou plus généralement si x appartient à une partie régulière de Γ, en notant

$$c_\Omega = \rho C_p \prod_{i=1}^{3}\sqrt{\alpha_i} \quad \text{et} \quad c_\Gamma = \frac{c_\Omega}{2}$$

$c(x)$ est simplement donnée par

$$c(x) = \begin{cases} c_\Omega & \text{si } x \in \Omega \\ c_\Gamma & \text{si } x \in \Gamma \\ 0 & \text{si } x \in \mathbb{R}^3 \setminus \Omega \end{cases} \tag{3.1}$$

3.3 Passage à la formulation intégrale

La formulation intégrale directe de l'équation 2.1 s'obtient par convolution avec le noyau de la chaleur sur $[t_0, t]\times\Omega$. Pour éviter tout problème de définition lié aux conditions d'intégrabilité du noyau, on multiplie dans un premier temps 2.1 par $g(t-s, x-y)$ et on intègre sur $[t_0, t-\varepsilon]\times\Omega$

$$\begin{aligned} &\rho C_p \int_{t_0}^{t-\varepsilon}\int_\Omega \partial_t u(s,y) g(t-s,x-y)dyds \\ &- \int_{t_0}^{t-\varepsilon}\int_\Omega \operatorname{div}\left(\Lambda\nabla u(s,y)\right) g(t-s,x-y)dyds \\ &= \int_{t_0}^{t-\varepsilon}\int_\Omega f(s,y)g(t-s,x-y)dyds \end{aligned}$$

Pour le premier terme, une intégration par parties nous donne

$$\begin{aligned} &\int_{t_0}^{t-\varepsilon}\int_\Omega \partial_t u(s,y)g(t-s,x-y)dyds \\ &= \int_\Omega u(t-\varepsilon,y)g(\varepsilon,x-y)dy - \int_\Omega u(t_0,y)g(t-t_0,x-y)dy \\ &+ \int_{t_0}^{t-\varepsilon}\int_\Omega u(s,y)\partial_t g(t-s,x-y)dyds \end{aligned}$$

Pour le second terme la formule de Green donne tout d'abord

$$\begin{aligned} &\int_{t_0}^{t-\varepsilon}\int_\Omega \operatorname{div}\left(\Lambda\nabla u(s,y)\right) g(t-s,x-y)dyds \\ &= \int_{t_0}^{t-\varepsilon}\int_\Gamma \phi(s,y)g(t-s,x-y)d\Gamma(y)ds \\ &- \int_{t_0}^{t-\varepsilon}\int_\Omega \Lambda\nabla u(s,y)\cdot\nabla g(t-s,x-y)dyds \end{aligned}$$

Ensuite la symétrie de Λ et une seconde intégration par partie conduisent à

$$\begin{aligned}
&\int_{t_0}^{t-\varepsilon}\int_{\Omega} \mathrm{div}\left(\Lambda\nabla u(s,y)\right) g(t-s,x-y)dyds \\
&= \int_{t_0}^{t-\varepsilon}\int_{\Gamma} \phi(s,y)g(t-s,x-y)d\Gamma(y)ds \\
&- \int_{t_0}^{t-\varepsilon}\int_{\Gamma} u(s,y)h(t-s,x-y)d\Gamma(y)ds \\
&+ \int_{t_0}^{t-\varepsilon}\int_{\Omega} u(s,y)\mathrm{div}\left(\Lambda\nabla g(t-s,x-y)\right)dyds
\end{aligned}$$

Puisque par définition

$$\rho C_p \partial_t g(t-s,x-y) - \mathrm{div}\left(\Lambda\nabla g(t-s,x-y)\right) = 0 \quad \text{pour tout } s \leq t-\varepsilon$$

la somme des différents termes donne

$$\begin{aligned}
&\rho C_p \int_{\Omega} u(t-\varepsilon,y)g(\varepsilon,x-y)dy - \rho C_p \int_{\Omega} u(t_0,y)g(t-t_0,x-y)dy \\
&+ \int_{t_0}^{t-\varepsilon}\int_{\Gamma} u(s,y)h(t-s,x-y)d\Gamma(y)ds \\
&- \int_{t_0}^{t-\varepsilon}\int_{\Gamma} \phi(s,y)g(t-s,x-y)d\Gamma(y)ds \\
&= \int_{t_0}^{t-\varepsilon}\int_{\Omega} f(s,y)g(t-s,x-y)dyds
\end{aligned}$$

Le comportement du noyau au voisinage de zéro et la régularité des différentes intégrandes nous permettent alors de passer à la limite en ε pour obtenir

$$\begin{aligned}
&c(x)u(t,x) + \int_{t_0}^{t}\int_{\Gamma} u(s,y)h(t-s,x-y)d\Gamma(y)ds \\
&- \int_{t_0}^{t}\int_{\Gamma} \phi(s,y)g(t-s,x-y)d\Gamma(y)ds \\
&= \int_{t_0}^{t}\int_{\Omega} f(s,y)g(t-s,x-y)dyds + \rho C_p \int_{\Omega} u(t_0,y)g(t-t_0,x-y)dy
\end{aligned} \tag{3.2}$$

Si x appartient à Γ, cette expression localise donc les inconnues uniquement au bord du domaine, tandis que subsistent à droite de l'égalité deux intégrations volumiques sur les données du problèmes.

3.4 Discrétisation de la formulation intégrale

Pour la discrétisation en temps de l'équation 3.2, il existe deux principales approches selon le choix de la borne inférieure d'intégration t_0. La première consiste à faire coincider t_0 avec le temps initial du problème aux limites. La seconde consiste à prendre $t_0 = t_{k-1}$ au pas de temps t_k, c'est à dire à changer la donnée initiale du problème à chaque pas de temps.

Dans le premier cas on aura donc $t_0 = 0$. En notant u_0 la donnée initiale du problème, l'intégrale volumique sur $u(t_0, \cdot)$ s'écrira donc au pas de temps t_k

$$\int_\Omega u_0(y) g(t_k, x - y) dy$$

La dépendance en t_k de g impose donc de recalculer l'intégrale à chaque pas de temps. Mais comme elle portera toujours sur u_0, il sera possible de la faire disparaitre dans le cas constant, et d'une manière générale d'optimiser son traitement avec un bon contrôle de l'erreur. En contrepartie une intégrale sur le passé au bord va apparaître

$$\int_{t_0}^{t_{k-1}} \int_\Gamma u(s, y) h(t_k - s, x - y) d\Gamma(y) ds - \int_{t_0}^{t_{k-1}} \int_\Gamma \phi(s, y) g(t_k - s, x - y) d\Gamma(y) ds$$

La convolution en temps impose alors de recalculer entièrement la contribution du passé à chaque pas de temps, ce qui conduit très vite à des temps de calcul prohibitifs. Cette approche est cependant souvent privilégiée dans la littérature, car elle est la plus robuste et permet de minimiser les intégrations volumiques. Un certain nombre d'optimisations ont donc été proposées, dont la méthode multipôles sur laquelle nous reviendrons au chapitre 4.

La seconde approche règle de fait ce problème, en le remplaçant par l'estimation d'une intégrale volumique sur la solution calculée au temps précédent

$$\int_\Omega u(t_{k-1}, y) g(t_k - t_{k-1}, x - y) dy$$

Cette gestion du passé élimine la convolution en temps, et elle peut-être bien moins couteuse que la précédente. En contrepartie l'utilisation de la solution dans le volume perturbe la convergence de la méthode, et cette intégrale est difficilement calculable pour les faibles pas de temps. Cela nous a donc amené à introduire une formulation adaptative, sur laquelle nous reviendrons plus en détail au chapitre 4. Mais avant de s'intéresser à la discrétisation du terme source de l'équation 3.2, précisons celle de l'opérateur intégral.

On se donne un maillage $\{\Gamma_j\}_{1 \leq j \leq N}$ du bord Γ, isolant ses singularités. En d'autres termes, en notant γ_j le bord de Γ_j et $\gamma = \cup_j \gamma_j$, γ doit contenir toutes les singularités de Γ. Dans le cas de géométries polyédrique qui nous concerne, cela revient à s'assurer que γ contient toutes les arêtes et les coins de Ω. Cela permet d'éviter les éventuels problèmes de définition de la formule 3.2, et de s'assurer qu'en un point du bord $c(x)$ sera toujours donné par la formule 3.1. On place ensuite les points de collocation au centre de chaque maille. Ce choix a l'avantage d'être simple tout en assurant un placement des points à distance raisonnable des singularités du bord. On approche ensuite la température et le flux par des constantes comme c'est souvent le cas en pratique, notamment pour ne pas complexifier l'intégration du noyau. Dans notre cas ce choix est également motivé par la cohérence avec l'implémentation préexistante en régime permanent.

Pour la discrétisation temporelle, on rencontre essentiellement dans la littérature le choix d'approximations constantes ou linéaires. Nous avons finalement opté pour des approximations constantes, car le gain apporté par des éléments linéaires en terme de précision ne justifiait pas le surcoût occasionné en temps de calcul. En notant (u_i^k, φ_i^k) l'approximation des champs sur la $i^{\text{ième}}$ maille au temps t_k, on obtient donc finalement le système suivant :

$$\left.\begin{array}{l} c_\Gamma u_i^k + \sum_{j=1}^{N} u_j^k \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{\Gamma_j} h(t_k - s, x_i - y) d\Gamma(y) ds \\ - \sum_{j=1}^{N} \varphi_j^k \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{\Gamma_j} g(t_k - s, x_i - y) d\Gamma(y) ds \\ = \int_{t_0}^{t_k} \int_{\Omega} f(s,y) g(t_k - s, x_i - y) dy ds + p_i^k \end{array}\right. \quad \begin{array}{l} 1 \leq i \leq N, \\ 1 \leq k \leq M \end{array} \tag{3.3}$$

où p_i^k est la contribution du passé que nous détaillons au chapitre 4, et qui déterminera le choix de la borne inférieure d'intégration t_0.

On considère en pratique un pas de temps δt constant, ou ne changeant qu'un nombre limité de fois en cours de simulation, car le calcul des coefficients matriciels est une opération assez couteuse qui doit donc être factorisée. Ainsi en notant

$$\begin{aligned} G &= \left(\int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{\Gamma_j} g(t_k - s, x_i - y) d\Gamma(y) ds \right)_{1 \leq i,j \leq N} \\ &= \left(\int_{0}^{t_1} \int_{\Gamma_j} g(s, x_i - y) d\Gamma(y) ds \right)_{1 \leq i,j \leq N} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} H &= \left(\int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{\Gamma_j} h(t_k - s, x_i - y) d\Gamma(y) ds \right)_{1 \leq i,j \leq N} \\ &= \left(\int_{0}^{t_1} \int_{\Gamma_j} h(s, x_i - y) d\Gamma(y) ds \right)_{1 \leq i,j \leq N} \end{aligned}$$

et

$$F_k = \left(\int_{t_0}^{t_k} \int_{\Omega} f(s,y) g(t_k - s, x_i - y) dy ds \right)$$

le système 3.3 peut être réecrit sous la forme matricielle

$$(c_\Gamma I + H)\, U_k - G \Phi_k = F_k + P_k \tag{3.4}$$

La résolution de ce système permet ensuite de reconstruire le champ de température en tout point x appartenant à Ω. Il suffit en effet de réecrire la formulation 3.3 en x

$$
\begin{aligned}
c_\Omega u^k(x) = & \sum_{j=1}^{N} u_j^k \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{\Gamma_j} h(t_k - s, x - y) d\Gamma(y) ds \\
& - \sum_{j=1}^{N} \varphi_j^k \int_{t_{k-1}}^{t_k} \int_{\Gamma_j} g(t_k - s, x - y) d\Gamma(y) ds \\
& + \int_{t_0}^{t_k} \int_{\Omega} f(s, y) g(t_k - s, x - y) dy ds + p_x^k
\end{aligned}
\tag{3.5}
$$

On trouvera par exemple dans [SdH04] et [HW08] les principales propriétés numériques du système 3.3. Retenons en particulier que sa matrice est pleine et ne présente en général aucune autre propriété que l'inversibilité. Si l'on omet pour l'instant le terme P_k, le calcul et la résolution du système 3.4 sont donc de complexité $O(N^3)$. Le calcul du terme F_k est quand à lui de complexité $O(N)$ indépendamment du choix de t_0, et il ne peut en général pas être factorisé. Les calculs de complexité cubique dans la résolution du système 3.4 peuvent par contre être factorisés en amont de la boucle en temps, il en résulte donc à ce stade une complexité globale en $O(MN^2)$, et un cout de stockage en $O(N^2)$.

Concernant le calcul des coefficients matriciels, nous avons pu tirer bénéfice des géométries parallélépipédiques. Elles conservent en effet la séparation de variables du noyau de la chaleur orthotrope. Les intégrations spatiales ont donc pu être explicitées, de manière à ne laisser qu'une intégration numérique en temps. Une attention particulière a donc simplement du être portée à l'intégration de la singularité du noyau. On donne en annexe A le détail du calcul permettant de se ramener à une intégrale définie, par soustraction d'une singularité explicitement intégrable.

Chapitre 4

Contribution du passé et formulations éléments de frontière

4.1 Introduction

Ce chapitre est consacré à l'optimisation du calcul de la contribution du passé au calcul du terme source. On s'intéresse tout d'abord à la contribution surfacique du passé. Elle correspond à la formulation la plus couramment rencontrée dans la littérature, que nous appellerons formulation surfacique. Elle demeure pour nous la formulation de référence en terme de convergence de la méthode élément de frontière. Elle est également la plus robuste, et elle permet d'atteindre les faibles pas de temps. Mais c'est en général la plus couteuse. On propose ici de l'optimiser en s'inspirant de la méthode multipôles.

On considère ensuite la contribution volumique du passé. La formulation associée est également bien connue, elle consiste à réinitialiser le problème aux limites à chaque pas de temps, et nous l'appellerons formulation volumique. Cette formulation est moins couteuse que son pendant surfacique pour les larges pas de temps, mais elle peut s'avérer moins robuste. Nous proposerons dans ce cas un critère de maillage interne, permettant de retrouver les ordres de convergence de la formulation surfacique.

On s'intéresse enfin à la formulation la plus générale, comportant à la fois des termes surfaciques et un terme volumique. On propose alors de s'appuyer sur le critère de maillage interne pour décider quelle partie du passé doit être conservée dans les termes surfaciques, et quelle partie peut être résumée dans le terme volumique, afin de limiter au maximum le coût de la méthode. Cette formulation sera qualifiée d'adaptative, car la répartition du passé dans les contributions surfacique et volumique dépendra de la taille du pas de temps.

Au cours de ce chapitre, on détaille donc le calcul du terme P_k du système matriciel 3.4. Pour conserver une vue d'ensemble de la méthode, rappellons ici l'équation intégrale générique du chapitre 3

$$
\begin{aligned}
&c(x)u(t,x) + \int_{t_0}^{t}\int_{\Gamma} u(s,y)h(t-s,x-y)d\Gamma(y)ds \\
&- \int_{t_0}^{t}\int_{\Gamma} \phi(s,y)g(t-s,x-y)d\Gamma(y)ds \\
&= \int_{t_0}^{t}\int_{\Omega} f(s,y)g(t-s,x-y)dyds + \rho C_p \int_{\Omega} u(t_0,y)g(t-t_0,x-y)dy
\end{aligned}
\tag{4.1}
$$

Chaque formulation correspond à un choix différent du temps initial d'intégration t_0. On particularisera donc l'équation 4.1 à chaque section, avant de passer au détail des calculs sur la forme matricielle.

4.2 Contribution surfacique du passé

On se place ici dans le cas où la borne inférieure d'intégration dans l'équation 4.1 reste toujours égale au temps initial du problème aux limites, c'est à dire $t_0 = 0$. Au temps t_k, l'équation 4.1 aura donc la forme suivante

$$
\begin{aligned}
&c(x)u(t_k,x) + \int_{t_{k-1}}^{t_k}\int_{\Gamma} u(s,y)h(t_k-s,x-y)d\Gamma(y)ds \\
&- \int_{t_{k-1}}^{t_k}\int_{\Gamma} \phi(s,y)g(t_k-s,x-y)d\Gamma(y)ds \\
&= \int_{0}^{t_k}\int_{\Omega} f(s,y)g(t_k-s,x-y)dyds + \rho C_p \int_{\Omega} u_0(y)g(t_k,x-y)dy \\
&- \int_{0}^{t_{k-1}}\int_{\Gamma} u(s,y)h(t_k-s,x-y)d\Gamma(y)ds \\
&+ \int_{0}^{t_{k-1}}\int_{\Gamma} \phi(s,y)g(t_k-s,x-y)d\Gamma(y)ds
\end{aligned}
$$

On note P_k^{Γ} la forme discrétisée de la contribution surfacique du passé, c'est à dire

$$
P_k^{\Gamma} = \left(\begin{array}{l}
\displaystyle\sum_{l=1}^{k-1}\sum_{j=1}^{N} \varphi_j^l \int_{t_{l-1}}^{t_l}\int_{\Gamma_j} g(t_k-s,x_i-y)d\Gamma(y)ds \\
\displaystyle -\sum_{l=1}^{k-1}\sum_{j=1}^{N} u_j^l \int_{t_{l-1}}^{t_l}\int_{\Gamma_j} h(t_k-s,x_i-y)d\Gamma(y)ds
\end{array} \right) \quad 1 \leq i \leq N
$$

ou encore sous forme matricielle

$$
P_k^{\Gamma} = \sum_{l=1}^{k-1} \left(G_k^l \Phi_l - H_k^l U_l \right)
$$

avec

$$
G_k^l = \left(\int_{t_{l-1}}^{t_l}\int_{\Gamma_j} g(t_k-s,x_i-y)d\Gamma(y)ds \right)_{1\leq i,j\leq N}
$$

et

$$H_k^l = \left(\int_{t_{l-1}}^{t_l} \int_{\Gamma_j} h(t_k - s, x_i - y) d\Gamma(y) ds \right)_{1 \leq i,j \leq N}$$

Sans optimisation, le calcul de P_k^Γ nécessite de l'ordre de $(k-1)N^2$ opérations. Cela porte donc la complexité globale de la méthode à $O(M^2N^2)$. En pratique pour un pas de temps constant, on ne calcule à chaque itération que les matrices d'exposant $l = 1$. Un changement de variable immédiat permet en effet de réutiliser les matrices précédemment calculées pour obtenir P_k^Γ. Ces matrices doivent cependant être stockées, ce qui a pour conséquence un coût de stockage en $O(MN^2)$. Ces ordres de grandeur rendent cette formulation des éléments des frontière inutilisable en contexte industriel.

Un certain nombre de méthodes ont donc été proposées pour remédier à ce problème. La plus ancienne est certainement l'utilisation de la transformée de Laplace ([ACB92],[BCG92]). La convolution en temps est alors remplacée par le produit des transformées de Laplace du noyau et de la température. Mais se pose ensuite le problème du calcul de la trasformée inverse, notamment pour les faibles pas de temps. Une autre approche basée sur la transformée en ondelettes a plus récemment été proposée dans ([Bar07]), mais là aussi le passage à la transformation inverse peut être problématique. Nous avons donc préféré opter pour une approche inspirée de la méthode multipôles, qui nous semblait être la plus prometteuse. On trouvera dans [LN06] un tutoriel introductif en dimension deux, dans [LS07] un exemple d'application en dimension trois et un exposé plus complet dans la thèse de K. Yoshida ([Yos01]).

Le principe général de la méthode multipôles est de séparer les variables de convolution et d'intégration du noyau, de manière à factoriser les calculs. Dans notre cas la taille géométrique du problème ne justifiait pas d'appliquer cette méthode pour les variables spatiales, et nous nous sommes en fait contentés de séparer les variables espace-temps du noyau. Nous verrons en effet que la séparation des temps d'intégration et de convolution n'était pas appropriée à notre cas.

Pour séparer les variables espace-temps du noyau nous avons suivi le choix fait dans [Tau07] d'une interpolation lagrangienne. On utilise donc la formule bien connue

$$\mathcal{P}(g)(t,x) = \sum_{1 \leq n \leq d} g(\omega_n, x) L_n(t)$$

où les L_n sont les polynômes de Lagrange donnés par

$$L_n(t) = \prod_{\substack{0 \leq j \leq d \\ j \neq n}} \frac{t - \omega_j}{\omega_n - \omega_j}, \ 0 \leq n \leq d$$

pour les noeuds de Gauss-Tchebytchev

$$\omega_n = \cos\left(\frac{\pi}{2} \frac{2n+1}{d+1} \right)$$

Chaque coefficient polynomial $g(\omega_n, x)$ est donc une matrice de taille N^2. Il ne sera alors avantageux de remplacer le noyau par son interpolation sur un intervalle donné, que si celui-ci contient un nombre de pas de temps supérieur au degré du polynôme d'interpolation. Un pas de temps critique τ_0 apparait donc en deça duquel l'interpolation est considérée en échec. L'intervalle de temps restant est lui découpé en un ensemble de sous intervalles $\{]\tau_n, \tau_{n+1}]\}_{(0\leq n\leq m-1)}$, pour obtenir globalement une séparation de variables du noyau du type

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}_0(g)(t,x) &= g(t,x) & 0 < t \leq \tau_0 \\
\mathcal{P}_1(g)(t,x) &= \sum_{1\leq n_1\leq d_1} L_{n_1}(t) g(\omega_{n_1}, x) & \tau_0 < t \leq \tau_1 \\
&\vdots & \\
\mathcal{P}_m(g)(t,x) &= \sum_{1\leq n_m\leq d_m} L_{n_m}(t) g(\omega_{n_m}, x) & \tau_{m-1} < t \leq \tau_m
\end{aligned}$$

En notant

$$G_x^n = \left(\int_{\Gamma_j} g(\omega_n, x_i - y) d\Gamma(y) \right)_{1\leq i,j\leq N}$$

et

$$G_t^{n,l} = \int_{t_{l-1}}^{t_l} L_n(s) ds$$

on substitura donc à G_k^l la décomposition suivante

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}_0(G_k^l) &= G_k^l & 0 < t_{l-1} < t_l \leq \tau_0 \\
\mathcal{P}_1(G_k^l) &= \sum_{1\leq n_1\leq d_1} G_t^{n_1,l} G_x^{n_1} & \tau_0 < t_{l-1} < t_l \leq \tau_1 \\
&\vdots & \\
\mathcal{P}_m(G_k^l) &= \sum_{1\leq n_m\leq d_m} G_t^{n_m,l} G_x^{n_m} & \tau_{m-1} < t_{l-1} < t_l \leq \tau_m
\end{aligned}$$

pour obtenir

$$\sum_{l=1}^{k-1} G_k^l \Phi_l = \sum_{\tau_q\leq t_{k-1}} \sum_{n_q=1}^{d_q} G_x^{n_q} \sum_{\tau_{q-1}<t_{l-1}<t_l\leq\tau_q} G_t^{n_q,l} \Phi_l$$

Le calcul de ce terme initialement de complexité $(k-1)N^2$ ne compte donc plus que $\beta_k N^2$ opérations, où

$$\beta_k = \sum_{\tau_q\leq t_{k-1}} d_q$$

En pratique pour $k \leq K = 1000$ et $d_q \leq 20$, on obtient classiquement $5 \leq m \leq 10$ et donc $100 \leq \beta_K \leq 200$. Nous avons donc pu réduire les temps de calcul d'un facteur cinq à dix sur des cas de tests industriels. Cela n'était pas forcément suffisant, mais le principal problème subsistant après cette optimisation restait le coût de stockage. C'est la raison pour laquelle nous n'avons pas poursuivi par la séparation des variables de convolution

et d'intégration. Cela aurait en effet augmenté le nombre de sous intervalles, l'ordre de grandeur à attendre étant une élévation au carré.

4.3 Contribution volumique du passé

On se place maintenant dans le cas où, au temps t_k, la borne inférieure d'intégration de l'équation 4.1 est égale à t_{k-1}. Cette équation aura donc ici la forme suivante

$$\begin{aligned} & c(x)u(t_k,x) + \int_{t_{k-1}}^{t_k}\int_\Gamma u(s,y)h(t_k-s,x-y)d\Gamma(y)ds \\ & - \int_{t_{k-1}}^{t_k}\int_\Gamma \phi(s,y)g(t_k-s,x-y)d\Gamma(y)ds \\ & = \int_{t_{k-1}}^{t_k}\int_\Omega f(s,y)g(t_k-s,x-y)dyds \\ & + \rho C_p \int_\Omega u(t_{k-1},y)g(t_k-t_{k-1},x-y)dy \end{aligned}$$

On note P_k^Ω la forme discrétisée de la contribution volumique du passé, c'est à dire

$$P_k^\Omega = \left(\rho C_p \int_\Omega u(t_{k-1},y)g(t_k-t_{k-1},x_i-y)dy\right) \quad 1 \le i \le N$$

Lorsque $k = 1$, il s'agit de calculer l'intégrale volumique sur u_0 qui n'est pas ici le problème central. Sa contribution en terme de complexité est la même que celle du terme F_k dans la formulation 3.4, et leur coûts en temps de calcul seront proches si les variations de f et u_0 sont du même ordre. Dans notre cas f ne dépendait souvent que du temps pour une donnée initiale constante, ce qui constitue évidemment le cas le plus favorable. Notons tout de même qu'un certain nombre de techniques ont été proposées pour optimiser ces calculs lorsque les données varient dans le volume. On peut en particulier citer la Multiple Reciprocity Method ([NN94]), et les méthodes basées sur l'approximation d'une solution particulière ([Col90],[ZPTC91]).

On suppose maintenant $k > 1$ pour un pas de temps $\delta t = t_k - t_{k-1}$ constant. On a donc

$$P_k^\Omega = \left(\int_\Omega u(t_{k-1},y)g(\delta t,x_i-y)dy\right) \quad 1 \le i \le N$$

La manière la plus simple de traiter cette intégrale consiste à discrétiser Ω, à reconstruire u_{k-1} au centre de chaque maille par la formule 3.5, et considérer ensuite u_{k-1} constante par maille. On obtient ainsi une formule du type

$$\int_\Omega u(t_{k-1},y)g(\delta t,x_i-y)dy = \sum_j \overline{u}_j^{k-1}\int_{\Omega_j} g(\delta t,x_i-y)dy \tag{4.2}$$

Cette approche a finalement été retenue car c'est la seule pour laquelle nous avons pu trouver un critère de maillage ne nécessitant pas d'intervention de l'utilisateur, et couvrant l'ensemble des cas que nous devions traiter. La contribution volumique du passé introduit en effet une perturbation de la convergence, due à l'approximation de u_{k-1}.

Nous avons essayé, en s'inspirant de l'utilisation faite des fonctions radiales dans [Col90] et [ZPTC91], d'interpoler le champ de température à l'aide de gaussiennes. Comme à δt fixé le noyau de la chaleur est lui même une gaussienne, cette approche permet de conserver une formulation explicite du type 4.2. Mais l'interpolation introduit un bruit numérique que nous n'avons pas réussi à maîtriser pour des géométries complexes.

Par ailleurs, quel que soit le choix des interpolants, le principal problème dans le calcul de P_k^Ω reste l'échantillonage de u_{k-1}. En effet le domaine effectif sur lequel est calculé l'intégrale est le support du noyau, ou plus exactement son intersection avec Ω. Il faudra donc reconstruire u_{k-1} en suffisamment de points dans cette intersection pour estimer correctement l'intégrale. Rappelons que le noyau de la chaleur isotrope est donné par

$$g(t, x-y) = \frac{1}{(4\pi t)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{|x-y|^2}{4\alpha t}\right) \tag{4.3}$$

A t fixé, $g(t,\cdot)$ est donc une gaussienne centrée en x dont la largeur à mi-hauteur dépend de t et α. Son support au sens mathématique du terme n'est donc jamais borné. Mais numériquement, les valeurs prises au delà d'une certaine distance de x sont négligeables. C'est donc la notion de support numérique qui nous intéresse, et par abus de langage nous parlerons simplement du support du noyau en ce sens. Dans la formule 4.2, ce support dépend donc de δt, et se réduit à un point quand δt tend vers zéro. Par ailleurs la convolution spatiale va le déplacer en chaque point de collocation x_i dans la formule 4.2, et également en chaque point de reconstruction interne dans la formule 3.5. Si bien que finalement, le maillage adapté au support du noyau devra être appliqué à tout Ω.

On voit donc que le calcul de P_k^Ω posera problème pour les faibles pas de temps. Cependant lorsque le support du noyau ne nécessite pas un maillage interne très fin, le calcul de la contribution volumique sera bien moins couteux que celui de la contribution surfacique. En effet dans la formule 4.2, la dépendance en k ne porte que sur u. Les calculs lourds d'intégration peuvent donc être factorisés, pour ne laisser dans la boucle en temps que des multiplications matrice-vecteur. Il s'agit donc de trouver un critère de maillage lié au support du noyau, assurant que l'intégrale 4.2 soit une bonne estimation de P_k^Ω, et permettant de savoir quelle contribution du passé sera la moins couteuse.

La formule 4.3 montre que le support du noyau est essentiellement lié au rapport $\frac{x^2}{4\alpha t}$. On définit alors un pas de temps critique δt_c par

$$\frac{\delta x_\Gamma^2}{\alpha \delta t_c} = \sigma \tag{4.4}$$

où δx_Γ est la taille de maille maximale au bord, α la diffusivité thermique du domaine et σ une valeur seuil. On impose ensuite au maillage interne de satisfaire le critère 4.4 pour tout pas de temps, c'est à dire

$$\frac{\delta x_\Omega^2}{\alpha \delta t} = \sigma$$

ce qui conduit à la règle de maillage suivante

$$\begin{cases} \delta x_\Omega = \delta x_\Gamma & \text{si } \delta t \geq \delta t_c \\ \delta x_\Omega = \sqrt{\dfrac{\delta t}{\delta t_c}} \delta x_\Gamma & \text{si } \delta t < \delta t_c \end{cases} \tag{4.5}$$

En réglant le paramètre σ, on assure d'avoir plus ou moins de points de recontruction dans le support du noyau. Comme nous le verrons par la suite, il apparait que la valeur $\sigma = 0.1$ assure un ordre de convergence équivalent à celui de la formulation surfacique. Il est cependant possible dans certains cas de relaxer cette condition jusqu'à $\sigma = 1$, en conservant une bonne description du phénomène transitoire et la convergence en temps limite vers le régime permanent. Notons que puisque le maillage interne ne sert qu'à reconstruire la solution, il ne doit pas nécessairement respecter de propriétés très strictes de compatibilité avec le maillage de frontière. Il est par contre nécessaire d'avoir au moins $\delta x_\Omega \leq \delta x_\Gamma$, pour s'assurer de ne pas diverger.

Au vu du critère 4.5 on peut donc estimer la complexité de cette approche à $O(\beta^3 M N^3)$, et son coût de stockage à $O(\beta^3 N^3)$, où

$$\beta = \begin{cases} 1 & \text{si } \delta t \geq \delta t_c \\ \sqrt{\dfrac{\delta t}{\delta t_c}} & \text{si } \delta t < \delta t_c \end{cases}$$

ce qui conduit dans notre cas à des temps de calcul satisfaisants si $\delta t \geq \delta t_c$. Au delà, ce critère fait évidemment croître de manière importante le nombre de maille interne, et la contribution volumique du passé devient rapidement plus couteuse que son pendant surfacique.

4.4 Contribution adaptative du passé (classé confidentiel)

Cette section est classée confidentielle, et portée en annexe B de la version complète du mémoire.

4.5 Résultats numériques

On montre ici au travers de cas de test la validité du critère de maillage 4.5. On considère tout d'abord des problèmes monodimensionnels pour lesquels on dispose de la solution analytique. La taille de ces problèmes nous permet alors de comparer les ordres de convergence des formulations surfacique et volumique. On montre ensuite que la règle de maillage reste valable sur cas réel en détaillant un exemple de simulation industrielle. On compare alors les temps de calcul des formulation volumique et adaptative, et la taille de pas de temps qu'elles permettent d'atteindre. Notons que certains problèmes sont considérés adimensionnés, tandis que dans les cas plus réalistes on précise les unités.

Mais le code de calcul implémente de toutes façons un adimensionnement pour limiter les erreurs d'arrondi.

4.5.1 Cas de test monodimensionnels

On s'intéresse tout d'abord au problème de Dirichlet adimensionné sur un segment

$$\begin{cases} \partial_t u(t,x) - \partial_x^2 u(t,x) = 1 \\ u(t,0) = u(t,1) = 0 \\ u(0,x) = 0 \end{cases}$$

pour $(t,x) \in [0,1] \times [0,1]$. La solution de ce problème s'obtient classiquement par la méthode de séparation de variable :

$$u(t,x) = u_s(x) + \sum_{n=1}^{\infty} C_n \sin(n\pi x) \exp\left(-n^2\pi^2 t\right) \tag{4.6}$$

où u_s est la solution en régime permanent donnée par

$$u_s(x) = -\frac{1}{2}x(x-1)$$

et les C_n sont les coefficients de Fourier de $-u_s$:

$$C_n = 2\int_0^1 -u_s \sin(n\pi x)\, dx = \begin{cases} -\dfrac{4}{n^3\pi^3} & \text{si } n = 2k+1 \\ 0 & \text{si } n = 2k \end{cases}$$

Pour porter ce problème en dimension trois d'espace, on considère un cube de coté 1 en imposant les conditions de Dirichlet sur deux faces opposées, et un flux nul sur les autres faces. Le tableau 4.5.1 donne les erreurs absolues $L^2([0,1]^2)$ et $L^\infty([0,1]^2)$ pour la formulation surfacique des éléments de frontière. Le calcul d'erreur est effectué sur 100 points de reconstruction pour chaque pas de temps. δx_Γ désigne le pas d'espace au bord dans la direction où la solution varie, les faces à température imposée n'ayant qu'une seule maille. Le tableau 4.5.2 donne les erreurs pour la formulation volumique des éléments de frontière.

δt	δx_Γ	Erreur L^2	Erreur L^∞
0.1	0.1	$1e-3$	$1e-3$
	0.01	$1e-3$	$1e-3$
0.01	0.1	$3e-4$	$4e-4$
	0.01	$2e-4$	$4e-4$
0.001	0.1	$9e-5$	$2e-4$
	0.01	$6e-5$	$2e-4$

TABLEAU 4.5.1 – Erreurs L^2 et L^∞, formulation surfacique

δt	δx_Γ	δx_Ω	$\sigma = \frac{\delta x_\Omega^2}{\delta t}$	Erreur L^2	Erreur L^∞
0.1	0.1	0.1	0.1	$1e-3$	$1e-3$
	0.01	0.01	0.001	$1e-3$	$1e-3$
0.01	0.1	0.1	1	$6e-3$	$6e-3$
		0.03	0.1	$2e-4$	$4e-4$
	0.01	0.01	0.01	$3e-4$	$4e-4$
0.001	0.1	0.1	10	$2e-2$	$3e-2$
		0.03	1	$3e-3$	$4e-3$
		0.01	0.1	$3e-4$	$5e-4$
	0.01	0.01	0.1	$2e-4$	$5e-4$

TABLEAU 4.5.2 – Erreurs L^2 et L^∞, formulation volumique

On voit donc que pour ce cas de test, on retrouve bien l'ordre de convergence de la formulation surfacique pour $\frac{\delta x_\Omega^2}{\delta t} = 0.1$. On observe également une évolution inversement proportionnelle de la valeur de ce rapport et de l'ordre de convergence.

Le second problème monodimensionnel auquel on s'intéresse est le cas du mur semi infini soumis à un échelon de flux

$$\begin{cases} \partial_t u(t,x) - \alpha \partial_x^2 u(t,x) = 0 \\ \lambda \partial_\nu u(t,0) = q \\ u(0,x) = 0 \end{cases}$$

pour $(t,x) \in [0,T] \times [0,\infty]$. On peut par exemple utiliser la transformée de laplace pour trouver la solution de ce problème :

$$u(t,x) = -\frac{q}{\lambda} x \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{\alpha t}}\right) + 2\frac{q}{\lambda}\sqrt{\frac{\alpha t}{\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{4\alpha t}\right)$$

Afin de tester la capacité de la méthode implémentée à décrire les phénomènes en temps court dans du silicium, on prends pour λ, α et q des valeurs réalistes

$$\lambda = 110\ W/mK, \quad \alpha = 6.21e-5\ m^2/s, \quad q = 1.6e+8\ W/m2$$

De la même façon que pour le problème précédent, en dimension trois on impose un flux nul au bord dans les directions où la solution ne varie pas. On borne par ailleurs l'intervalle de variation de x à 200 microns, en imposant une température égale à zéro sur la face "à l'infini". Cette modélisation n'est valable que si la solution analytique est effectivement proche de zéro pour cette valeur de x, c'est à dire pour un temps limite suffisamment faible. Nous prenons ici T égal à 20 microsecondes ce qui garantit cette condition. Comme pour le problème de Dirichlet les taprojetbleaux 4.5.3 et 4.5.4 permettent de comparer les deux formulations éléments de frontière. Les erreurs sont calculées de la même façon mais sont cette fois-ci relatives.

δt (μs)	δx_Γ (μm)	Erreur L^2	Erreur L^∞
1	1.75	$2e-2$	$1e-2$
0.1	1.75	$2e-3$	$1e-3$
0.01	1.75	$3e-4$	$4e-4$
0.001	1.75	$9e-5$	$2e-4$

TABLEAU 4.5.3 – Erreurs L^2 et L^∞, formulation surfacique

δt (μs)	δx_Γ (μm)	δx_Ω (μm)	$\sigma = \frac{\delta x_\Omega^2}{\alpha \delta t}$	Erreur L^2	Erreur L^∞
1	1.75	1.75	$5e-2$	$4e-2$	$3e-2$
0.1	1.75	1.75	$5e-1$	$8e-3$	$9e-3$
		0.8	0.1	$3e-3$	$5e-3$
0.01	1.75	1.75	5	$1e-1$	$2e-1$
		0.8	1	$3e-2$	$4e-2$
		0.25	0.1	$4e-4$	$6e-4$
0.001	1.75	1.75	50	$9e-1$	$9e-1$
		0.25	1	$3e-2$	$4e-2$
		0.08	0.1	$3e-4$	$5e-4$

TABLEAU 4.5.4 – Erreurs L^2 et L^∞, formulation volumique

On observe donc comme précédemment des résultats très proches pour les deux formulations éléments de frontière lorsque $\frac{\delta x_\Omega^2}{\alpha \delta t} = 0.1$. L'erreur reste inférieure à 1% pour $\frac{\delta x_\Omega^2}{\alpha \delta t} <= 1$ et dépasse 10% pour $\frac{\delta x_\Omega^2}{\alpha \delta t} = 5$.

4.5.2 Cas de test industriel

On considère maintenant un modèle réaliste de composant électronique, dont la figure 4.5.1 donne une vue d'ensemble dans le logiciel Epsilon-R3D. Le tableau 4.5.5 regroupe les propriétés physiques des différents domaines composant le modèle, et leur tailles de maille caractéristiques au bord. Le maillage de frontière est considéré comme une donnée, car il a été fixé au préalable pour que les résultats du code de calcul éléments de frontière en régime permanent soient stabilisés.

Le domaine PcbEq est en fait orthotrope de conductivité $(\lambda_x, \lambda_y, \lambda_z) = (30, 30, 0.3)\ W/mK$, mais pour le calcul du rapport $\frac{\delta x_\Omega^2}{\alpha \delta t}$ on considère ici par simplicité une conductivité isotrope pour la plus petite valeur $\lambda = 0.3\ W/mK$. La zone active est le domaine DissipatingZone au coeur du composant, où l'on injecte une puissance constante $p = 1.8\ W$. Concernant les conditions aux limites, le composant est en convection naturelle avec l'air ambiant. La donnée initiale est prise constante à $25^\circ C$. Le maillage de frontière comporte 6000 mailles, interfaces de contact inclues. On place trois points de mesure de la température : un au coeur du composant dans le domaine DissipatingZone,

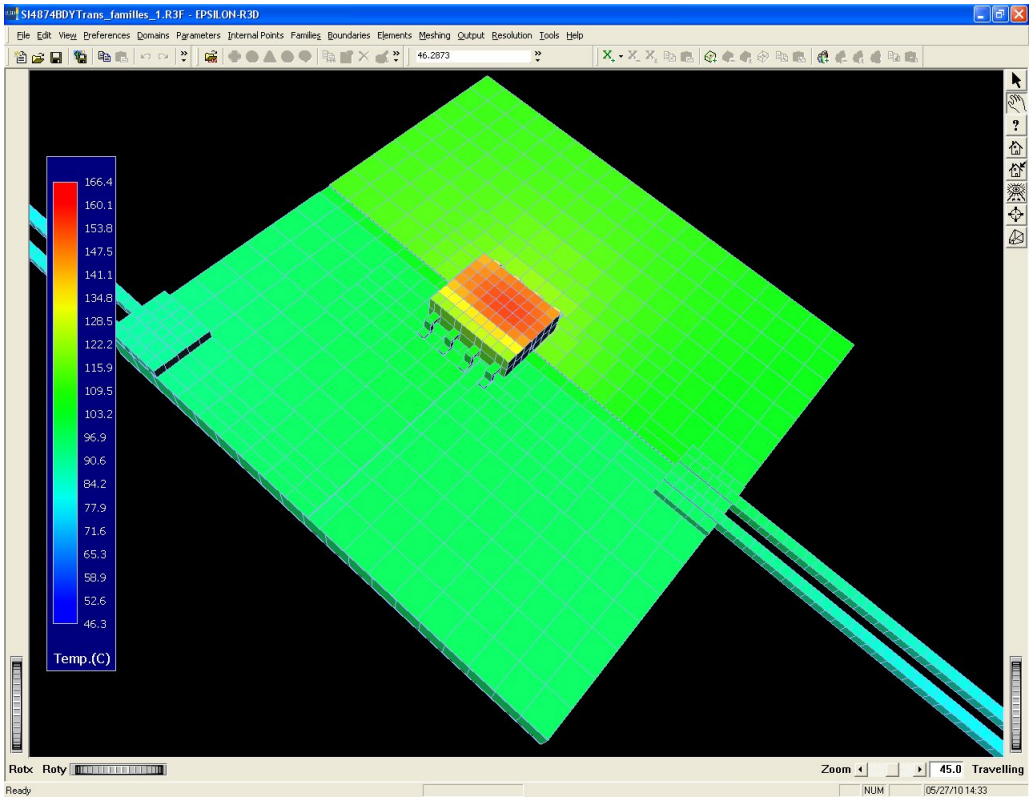


FIGURE 4.5.1 – Aperçu de la CAO du modèle

Domaine	$\lambda\ (W/mK)$	$\rho\ (kg/m^3)$	$C_p\ (J/kgK)$	$\alpha\ (m^2/s)$	$\delta x_\Gamma\ (mm)$
Leadframe	260	8780	38	$7.79e-004$	0.52
SolderPCB	27	1070	134	$1.88e-004$	0.52
DieAttach	20	11000	130	$1.40e-005$	0.52
Die	110	2330	760	$6.21e-005$	0.52
DissipatingZone	110	2330	760	$6.21e-005$	0.52
Metal	237	2700	897	$9.79e-005$	0.52
Mold	0.67	1800	1700	$2.19e-007$	0.52
TopPad	388	8930	38	$1.14e-003$	0.98
TopAverageLayer	388	8930	38	$1.14e-003$	1.33
PcbEq	0.4	1900	900	$2.34e-007$	1.33
BotAverageLayer	388	8930	38	$1.14e-003$	1.33
GridWire1	388	8930	38	$1.14e-003$	0.52
GridWire2	388	8930	38	$1.14e-003$	0.52
SourceWire1	388	8930	38	$1.14e-003$	0.52
SourceWire2	388	8930	38	$1.14e-003$	0.52
SourceSolder	27	1070	134	$1.88e-004$	0.52
GridSolder	27	1070	134	$1.88e-004$	0.52

TABLEAU 4.5.5 – Propriétés physiques des matériaux et maillage de frontière

un au sommet sur le domaine Mold et un au dessous sur le domaine PcbEq.

Version volumique

On compare les résultats obtenus pour $\delta t = 5$ secondes, $\delta t = 1$ seconde et $\delta t = 0.5$ secondes, avec et sans raffinement du maillage interne. Le tableau 4.5.6 donne la valeur du rapport $\frac{\delta x_\Omega^2}{\alpha \delta t}$ dans les différents cas de figure. Seuls les domaines Mold et PcbEq nécessitent un raffinement de maillage car les autres domaines ont un rapport $\frac{\delta x_\Omega^2}{\alpha \delta t}$ au moins inférieur à 1 pour chaque pas de temps.

Domaine	δt (s)	δx_Γ (m)	δx_Ω (m)	$\sigma = \frac{\delta x_\Omega^2}{\alpha \delta t}$
Mold	5	0.52	0.52	0.247
	1	0.52	0.52	1.237
	0.5	0.52	0.52	2.474
		0.52	0.3	0.823
PcbEq	5	1.33	1.33	1.512
	1	1.33	1.33	7.562
		1.33	0.5	1.069
	0.5	1.33	1.33	15.124
		1.33	0.4	1.368

TABLEAU 4.5.6 – Raffinement de maillage pour les domaines Mold et PcbEq

Le graphe 4.5.2 donne l'allure des trois courbes pour $\delta t = 5$ secondes. Les droites en pointillé correspondent aux températures données par le code de calcul éléments de frontière en régime permanent. Les graphes 4.5.3 et 4.5.4 correspondent respectivement aux pas de temps $\delta t = 1$ secondes et $\delta t = 0.5$ seconde, les courbes en pointillé représentant les résultats sans raffinement de maillage et les courbes en trait plein les résultats avec raffinement.

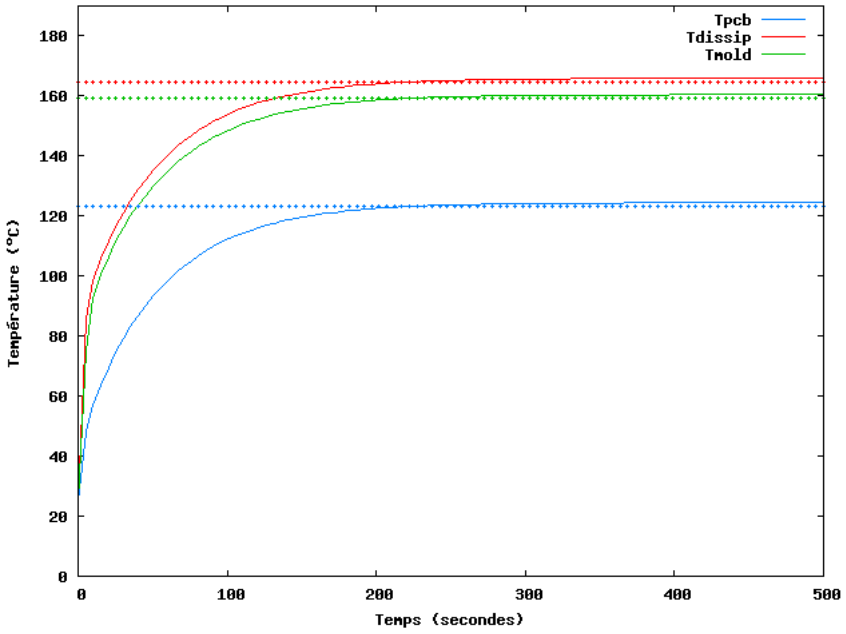


FIGURE 4.5.2 – Courbes de température pour $\delta t = 5$

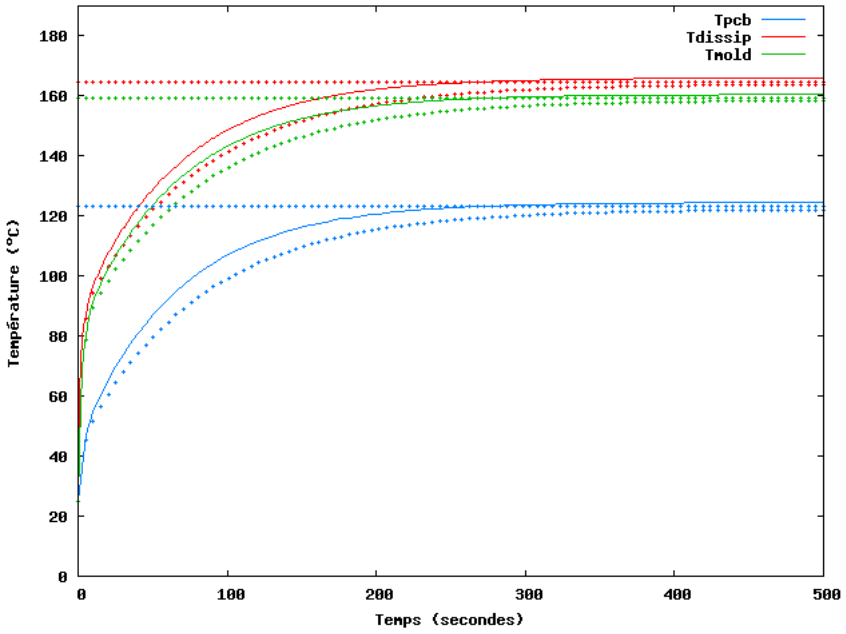


FIGURE 4.5.3 – Courbes de température pour $\delta t = 1$

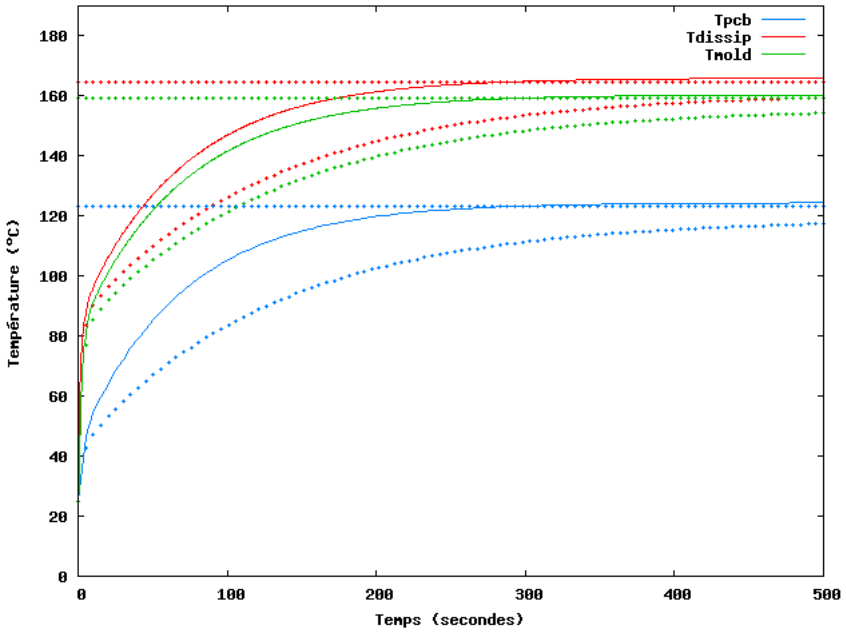


FIGURE 4.5.4 – Courbes de température pour $\delta t = 0.5$

projet On constate tout d'abord que le raffinement de maillage permet de retrouver en temps limite une convergence vers le régime permanent similaire à celle obtenue pour $\delta t = 5$ secondes. Le tableau 4.5.7 donne l'écart entre la température du régime permanent et celle du régime stationnaire avec raffinement de maillage en chaque point.

Point	$T_{permanent}$ $(^{\circ}C)$	δt (s)	$T_{stationnaire}$ $(^{\circ}C)$	Ecart relatif (%)
P_{dissip}	164.794	5	165.903	0.67
		1	165.988	0.72
		0.5	165.914	0.68
P_{mold}	159.324	5	160.447	0.7
		1	160.486	0.73
		0.5	160.361	0.65
P_{pcb}	123.455	5	124.443	0.8
		1	124.488	0.84
		0.5	124.392	0.76

TABLEAU 4.5.7 – Convergence en temps limite vers le régime permanent

projet Pour l'évolution de la partie transitoire, les graphes 4.5.5, 4.5.6 et 4.5.7 comparent respectivement les résultats obtenus aux points P_{dissip}, P_{mold} et P_{pcb} pour les différents pas de temps avec raffinement de maillage.

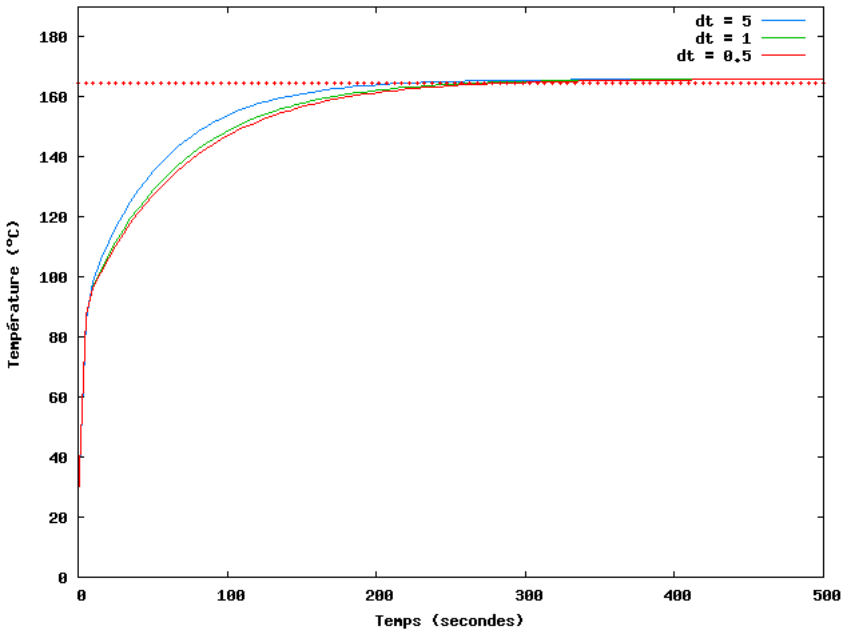


FIGURE 4.5.5 – Evolution de la courbe de température au point P_{dissip} en fonction du pas de temps

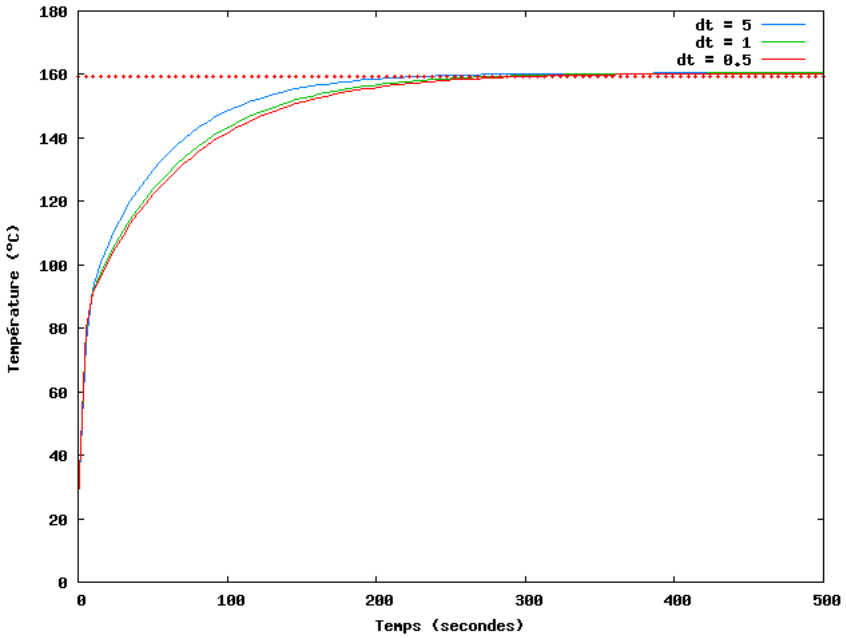


FIGURE 4.5.6 – Evolution de la courbe de température au point P_{mold} en fonction du pas de temps

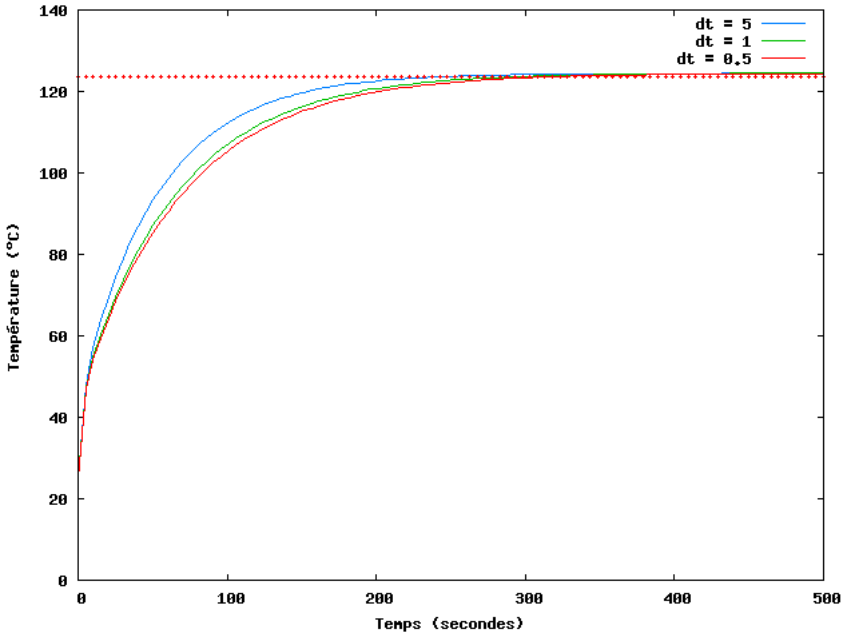


FIGURE 4.5.7 – Evolution de la courbe de température au point P_{pcb} en fonction du pas de temps

Version adaptative

On reprend maintenant le même cas de test pour montrer que la formulation adaptative donne de meilleurs temps de calcul que la formulation volumique en deça du pas de temps critique, et qu'elle permet d'accéder à des pas de temps plus faibles. Le graphe 4.5.8 superpose les courbes obtenues pour $\delta t = 0.5$ seconde, $\delta t = 0.1$ seconde et $\delta t = 0.01$ seconde par la formulation adaptative, et la courbe obtenue pour $\delta t = 0.5$ seconde par la formulation volumique, au point situé dans la zone active. Les courbes en $\delta t = 0.5$ sont très proches pour les deux formulations, et on observe ensuite une évolution prolongeant celle du graphe 4.5.5.

Le tableau 4.5.8 compare l'élévation des temps de calcul pour les formulations volumique et adaptative lorsque le pas de temps critique est dépassé. Les calculs ont été effectués sur une machine dotée d'un processeur Intel Core 2 Quad Q6600 cadencé à 2.4 GHz, et de 2 Go de mémoire vive.

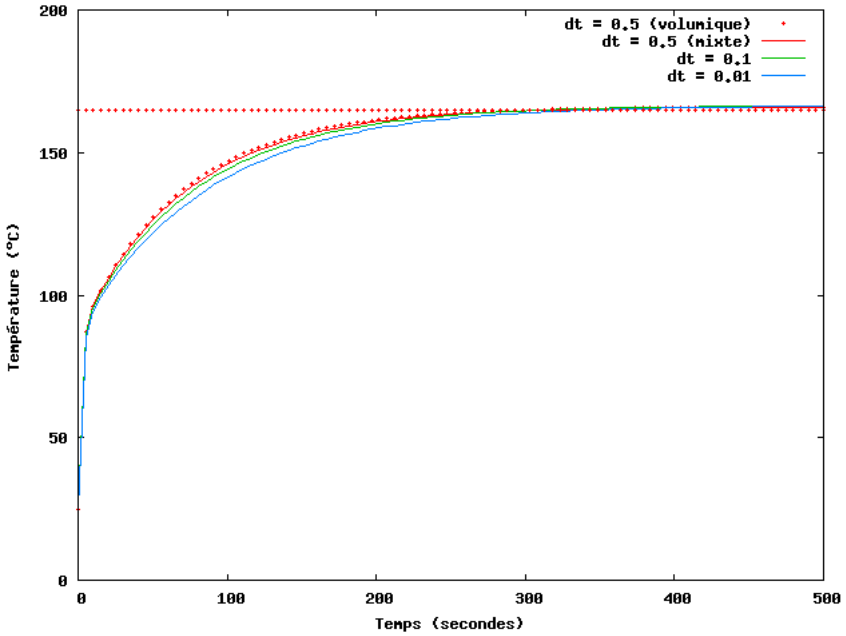


FIGURE 4.5.8 – Evolution de la courbe de température au point P_{dissip} en fonction du pas de temps

δt (s)	Formulation	Temps de calcul	Ratio adaptative/volumique
1	adaptative volumique	36 min 95 min	0.38
0.5	adaptative volumique	1.16 h 12.3 h	0.09
0.1	adaptative	9.8 h	———
0.01	adaptative	5.8 j	———

TABLEAU 4.5.8 – Temps de calcul au delà du pas de temps critique

Chapitre 5

Approche multi-échelles pour la simulation de phénomènes thermiques en temps court

5.1 Introduction

Un des enjeux actuels en microélectronique est de mesurer l'impact de phénomènes de commutation ou de court circuit localisés en espace-temps sur la thermique globale d'un composant. Les échelles de temps varient alors de la microseconde à la minute, et les échelles spatiales du micromètre au centimètre. Ces ordres de grandeur conduisent donc naturellement à adopter une approche multi-échelles.

Le nombre de commutations et leur fréquences permettent de fixer le pas de temps et la durée des simulations en temps court. Il est par contre plus délicat de localiser spatialement le phénomène pour restreindre a priori la taille du modèle. Nous reviendrons sur ce point à la section 5.4 consacrée aux exemples d'applications numériques.

Une fois les échelles espace-temps correctement fixées, il reste à choisir des schémas numériques adaptés pour chacune d'entre elles. Les simulations en temps long ont pour terme source la moyenne du profil de puissance en temps court. Elles peuvent donc être traitées indépendamment de tout phénomène en temps court, et directement par la formulation adaptative des éléments de frontière introduite au chapitre 4.

Les phases de calcul temps court doivent par contre être initialisées par une distribution de température provenant de la simulation en temps long. Or le chapitre 4 montre qu'à de telles échelles de temps, le calcul du terme volumique correspondant est très problématique. Cependant à géométrie fixée, le passage du temps long au temps court ne consiste qu'en un changement de pas de temps dans une simulation globale. L'approche proposée ici tire profit de ce point, et généralise en fait la formulation adaptative aux pas de temps semi-variables.

5.2 Formulation éléments de frontière en temps court (classé confidentiel)

Cette section est classée confidentielle, et portée en annexe B de la version complète du mémoire.

5.3 Calcul effectif de l'initialisation (classé confidentiel)

Cette section est classée confidentielle, et portée en annexe B de la version complète du mémoire.

5.4 Résultats numériques

On reprend le cas de test industriel du chapitre 4, mais cette fois-ci pour un profil de puissance plus particulier. On maintient les dix premières secondes une puissance constante de 2.2 watts dans la zone de dissipation, puis on passe à une phase de calcul en temps court. On injecte alors pendant 500 microsecondes des commutations de période 100 microsecondes, au milieu desquelles s'intercale un court circuit. Les pics de commutation s'élèvent à 20 et 110 watts sur 200 nanosecondes. Au moment du court-circuit le pic de puissance atteint 1000 watts et dure globalement 10 microsecondes. Ce profil de puissance est représenté sur le graphe 5.4.1.

La CAO du modèle en temps long est la même qu'à la section précédente et correspond donc à la figure 4.5.1. En temps court on compare les résultats obtenus pour deux CAO simplifiées. Tout d'abord le composant, c'est à dire le modèle d'origine privé des domaines constituant le circuit imprimé. Puis on enlève également le domaine Mold. Ces deux sous modèles sont respectivement représentés par les figures 5.4.2 et 5.4.3.

Le maillage du modèle avant et après simplification reste le même, et on impose un flux nul sur la frontière des modèles temps court. On conserve pour le modèle temps long les trois points de la section précédente, dont la figure 5.4.4 rappelle le graphe pour un temps de simulation limité à dix secondes, et un pas de temps Δt égal à une seconde.

Pour les modèles en temps court on ne conserve que le point dans la zone de dissipation, et on place quatre autres points régulièrement espacés de 50 microns, pour mesurer jusqu'où se propage l'effet des commutations et du court circuit. Les graphes 5.4.5 et 5.4.6 donnent respectivement les courbes en ces points pour le composant avec et sans le domaine Mold. Le pas de temps δt est dans tous les cas égal à une microseconde.

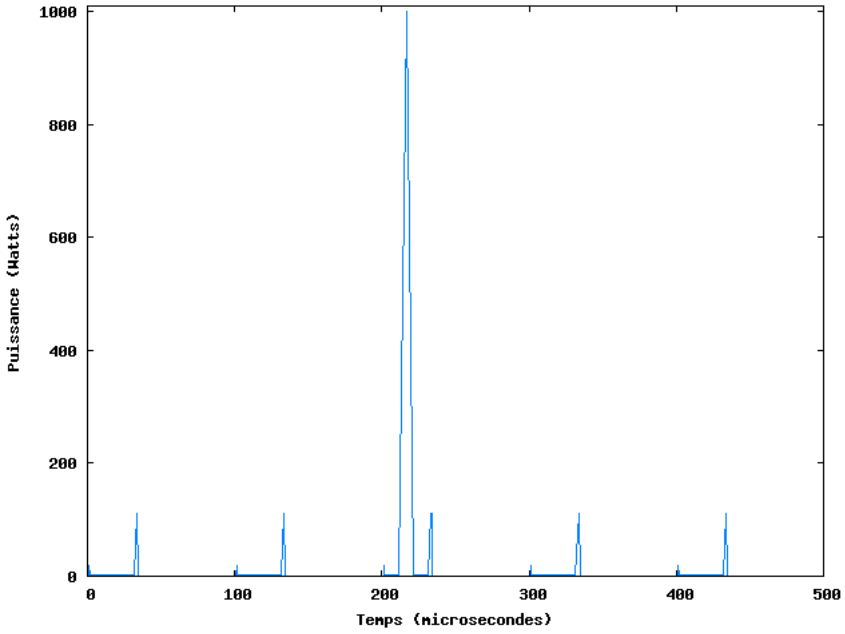


FIGURE 5.4.1 – Profil de puissance en temps court

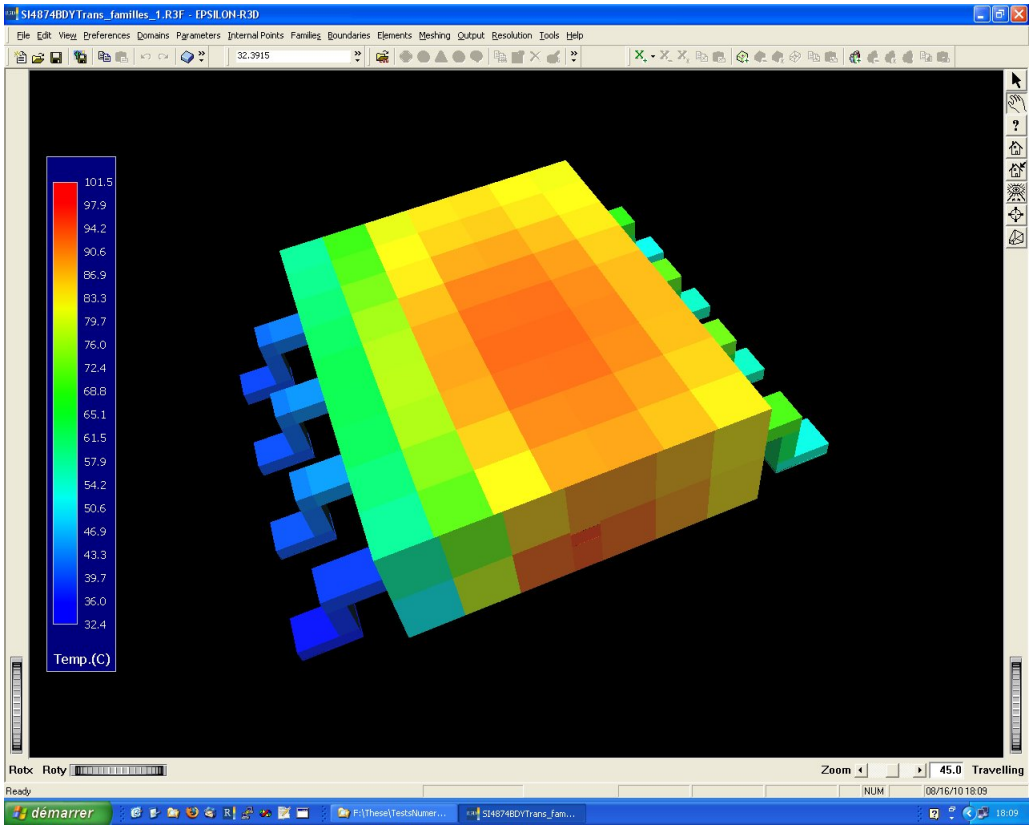


FIGURE 5.4.2 – Première simplification de la CAO du modèle

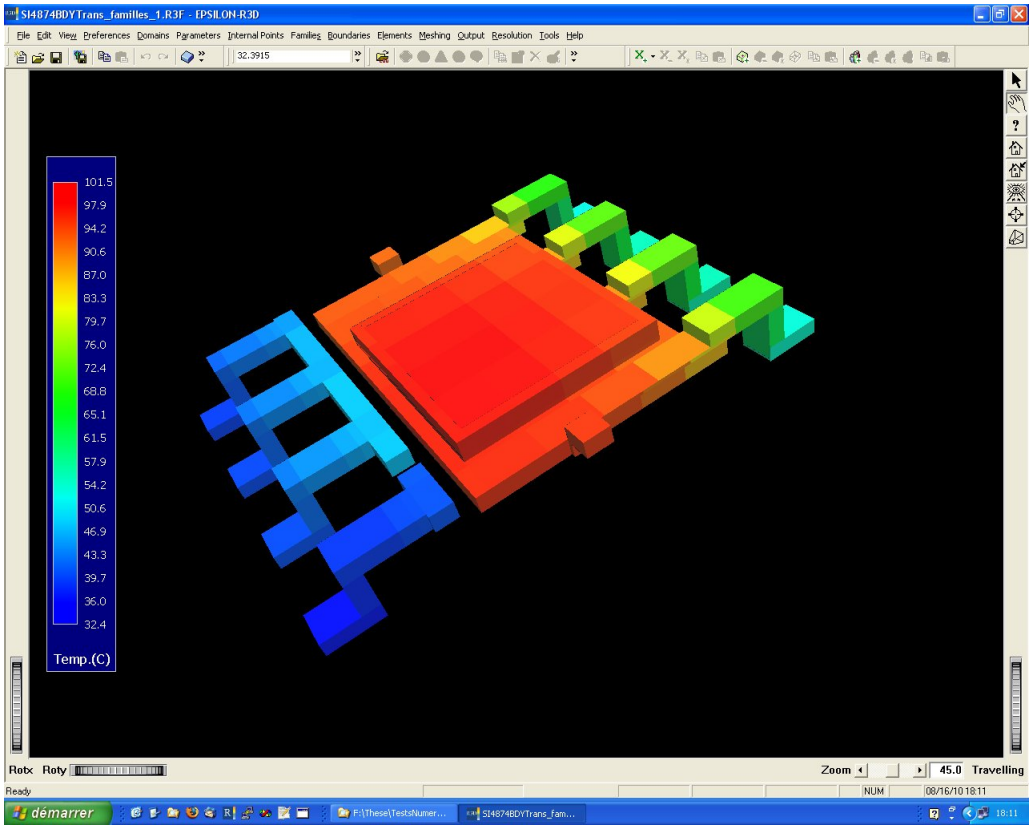


FIGURE 5.4.3 – Deuxième simplification de la CAO du modèle

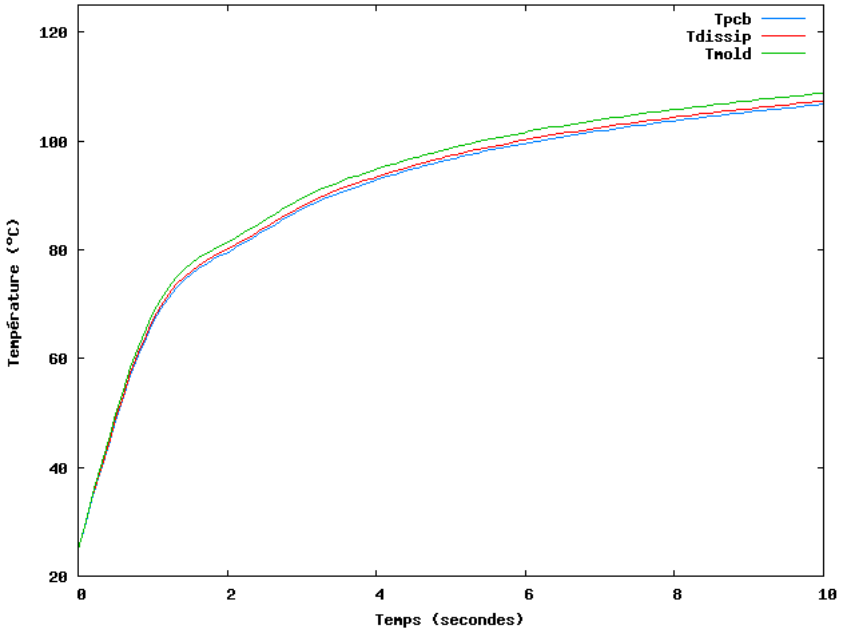


FIGURE 5.4.4 – Courbes de température en temps long pout $t < 10$ secondes

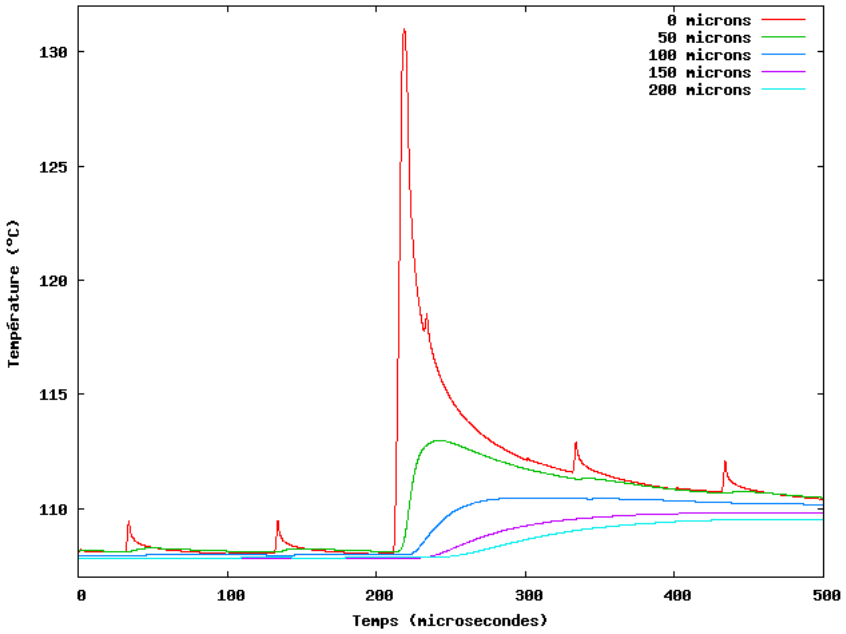


FIGURE 5.4.5 – Courbes de température pour le composant en temps court

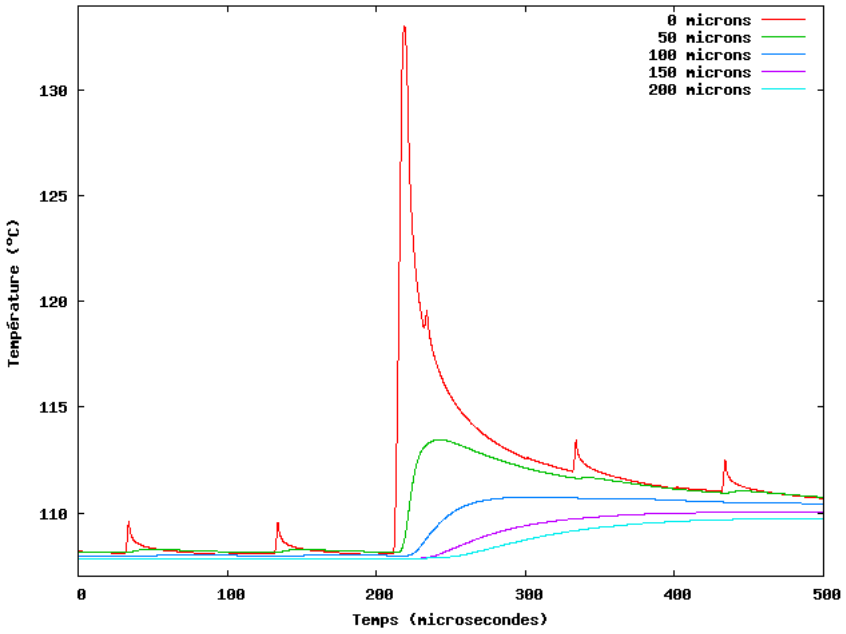


FIGURE 5.4.6 – Courbes de température pour le composant sans le domaine Mold en temps court

On constate donc qu'à une distance de 100 microns, l'effet des commutations a quasiment disparu. A 200 microns l'effet du court circuit est aussi largement atténué. A cette distance le profil de puissance choisi pourrait donc presque être remplacé par sa puissance moyenne. On note par ailleurs peu de différences entre les deux graphes, même si les températures sans le domaine Mold sont légèrement plus élevées, comme le laissait présager les conditions aux limites adiabatiques. Le graphe 5.4.7 permet de mieux visualiser cet aspect en superposant les courbes des deux modèles au point le plus chaud.

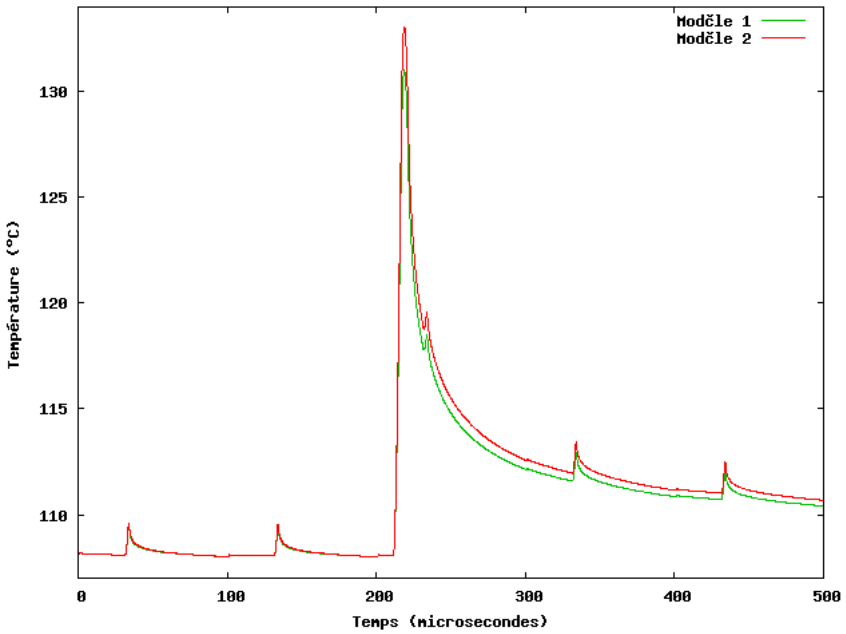


FIGURE 5.4.7 – Comparaison des deux modèles temps court au point le plus chaud

Chapitre 6

Une généralisation de la méthode des éléments de frontière aux matériaux non linéaires

6.1 Introduction

On s'intéresse dans ce chapitre à la partie non linéaire du problème industriel, c'est à dire plus précisément aux matériaux non linéaires isotropes et homogènes. Un de nos objectifs était de réutiliser les développements effectués dans le cas linéaire, en conservant la cohérence avec les résultats du régime permanent.

Parmi les solutions proposées dans la littérature, on peut tout d'abord citer la General Boundary Element Method ([WLZ05],[Lia97],[Lia95]), basée sur l'Homotopy Analysis Method ([Abb06],[Lia10]) et l'Homotopy Perturbation Method ([Gan06],[TGHG07]). Le principe de ces méthodes est de réaliser une homotopie entre un opérateur linéaire et la fonctionnelle non linéaire de l'équation que l'on souhaite résoudre. On développe ensuite la solution du problème non linéaire en série de Taylor par rapport au paramètre d'homotopie. Chaque terme de la série est alors solution d'un problème linéaire résolu par la méthode des éléments de frontière.

D'autres approches moins générales ont été proposées pour l'équation de la chaleur, utilisant la transformée de Kirchhoff. Cette transformation a pour effet de déplacer la non linéarité sur la dérivée en temps. On peut alors considérer ce terme comme le terme source d'un problème stationnaire, ou en extraire une partie linéaire pour conserver l'opérateur de la chaleur transitoire. Dans le premier cas le terme temporel est souvent discrétisé par différences finies, et les intégrales volumiques résultantes traitées par la Dual Reciprocity Method. On peut par exemple citer [AC09] où cette méthode est appliquée à des matériaux inhomogènes.

Dans le second cas une approche directe a été proposée dans [GS96]. Le terme non

linéaire volumique et les termes de bord y sont évalués à la borne supérieure de l'intervalle de temps, et des inconnues sont alors rajoutées dans le volume. Ce travail a ensuite été repris dans [AC08] où les termes volumiques et frontaliers sont évalués à la borne inférieure de l'intervalle de temps. Mais il faut alors placer les points de collocation en dehors du domaine, pour que toute la formulation intégrale soit évaluée au même pas de temps. La méthode que nous proposons ici s'inspire de ces travaux. Cependant nous ne souhaitions pas introduire d'inconnues volumiques, tout en gardant la disposition des points de collocation de l'algoritme linéaire. Nous avons donc opté pour un traitement itératif du terme non linéaire.

On rappelle tout d'abord comment la transformée de Kirchhoff permet de déplacer la non linéarité de l'équation sur la dérivée en temps. On passe ensuite à la formulation intégrale non linéaire du problème, puis à la méthode de résolution itérative. En dehors des propriétés matériaux, le problème industriel est le même qu'au chapitre 3. Par ailleurs la prise en compte de la non linéarité ne se justifie réellement que dans la zone active des composants, qui est la plupart du temps composée d'un seul domaine. On se contente donc pour les résultats numériques de montrer la convergence de la méthode sur des cas de test unidimensionnels.

6.2 Transformation de l'équation forte

Rappelons tout d'abord que pour des matériaux non linéaires isotropes et homogènes, l'équation de la chaleur est donnée par

$$\rho(u)C_p(u)\partial_t u - \operatorname{div}\left(\lambda(u)\nabla u\right) = f \tag{6.1}$$

En pratique les lois de comportement que nous devions traiter étaient essentiellement de la forme

$$\lambda(u) = \lambda_r \left(\frac{u}{u_r}\right)^a$$

avec souvent $a = -\frac{4}{3}$ ou $a = -\frac{5}{4}$, et pour ρ et C_p des polynômes de degré 2. L'approche présentée ici est cependant formellement valable pour toute lois de comportement. On se donne donc d'une manière plus générale des constantes u_r, λ_r, ρ_r et C_{p_r} telles que

$$\lambda(u_r) = \lambda_r, \quad \rho(u_r) = \rho_r \quad et \quad C_p(u_r) = C_{p_r}$$

On introduit alors la transformée de Kirchhoff

$$\psi = \Lambda(u) = \int_{u_r}^{u} \lambda(v)dv$$

où Λ est la primitive de λ qui s'annule en u_r.

On a donc

$$\nabla\psi = \lambda(u)\nabla u$$

et

$$\partial_t\psi = \lambda(u)\partial_t u$$

En notant

$$\alpha(u) = \frac{\lambda(u)}{\rho(u)C_p(u)} \quad \text{et} \quad \alpha_r = \alpha(u_r)$$

la nouvelle variable ψ vérifie donc l'équation

$$\frac{1}{\alpha(u)}\partial_t\psi - \Delta\psi = f$$

que l'on réecrit sous la forme

$$\frac{1}{\alpha_r}\partial_t\psi - \Delta\psi = f - \left(\frac{1}{\alpha(u)} - \frac{1}{\alpha_r}\right)\partial_t\psi \tag{6.2}$$

6.3 Equation intégrale non linéaire

Comme dans le cas linéaire, l'équation intégrale non linéaire s'obtient en convolant sur $[t_0, t]$ l'équation 6.2 par le noyau de la chaleur, pour la diffusivité α_r. En notant $q = \partial_\nu\psi$, on arrive donc de la même manière à l'identité suivante

$$\begin{aligned}
&\frac{c(x)}{\lambda_r}\psi(t,x) + \int_{t_0}^{t}\int_\Gamma \psi(s,y)h(t-s,x-y)d\Gamma(y)ds \\
&- \int_{t_0}^{t}\int_\Gamma q(s,y)g(t-s,x-y)d\Gamma(y)ds \\
&= \int_{t_0}^{t}\int_\Omega f(s,y)g(t-s,x-y)dyds + \frac{1}{\alpha_r}\int_\Omega \psi(t_0,y)g(t-t_0,x-y)dy \\
&+ \int_{t_0}^{t}\int_\Omega \frac{\alpha_r - \alpha(u(s,y))}{\alpha_r\alpha(u(s,y))}\partial_t\psi(s,y)g(t-s,x-y)dyds
\end{aligned} \tag{6.3}$$

La partie linéaire de 6.3 n'est autre que l'équation 3.2, à laquelle s'ajoute l'intégrale volumique non linéaire

$$\begin{aligned}
I &= \int_{t_0}^{t}\int_\Omega \frac{\alpha_r - \alpha(u(s,y))}{\alpha_r\alpha(u(s,y))}\partial_t\psi(s,y)g(t-s,x-y)dyds \\
&= \int_{t_0}^{t}\int_\Omega \left[\rho(u(s,y))C_p(u(s,y)) - \frac{\lambda(u(s,y))}{\alpha_r}\right]\partial_t u(s,y)g(t-s,x-y)dyds
\end{aligned}$$

On introduit alors comme dans [GS96] la fonctionnelle ξ définie par

$$\xi(u) = \int_{u_r}^{u}\left[\rho(v)C_p(v) - \frac{\lambda(v)}{\alpha_r}\right]dv$$

qui permet de réecrire I sous la forme

$$\begin{aligned} I &= \int_{t_0}^{t}\int_{\Omega} \partial_t \xi(s,y) g(t-s,x-y) dy ds \\ &= \left[\int_{\Omega} \xi(u(s,y)) g(t-s,x-y) dy\right]_{t_0}^{t} \\ &\quad + \int_{t_0}^{t}\int_{\Omega} \xi(u(s,y)) \partial_t g(t-s,x-y) dy ds \end{aligned}$$

Dans l'optique d'une discrétisation par éléments constants en temps, on suppose maintenant que $\psi(s,y) = \psi(t,y)$ sur $]t_0, t]$. Par suite u et $\xi(u)$ sont également constantes sur cet intervalle et égales à leur valeur en $s = t$. On obtient donc

$$\begin{aligned} I &= \left[\int_{\Omega} \xi(u(s,y)) g(t-s,x-y) dy\right]_{t_0}^{t} \\ &\quad - \int_{\Omega} \xi(u(t,y)) \left[g(t-s,x-y)\right]_{t_0}^{t} dy ds \\ &= \int_{\Omega} \left[\xi(u(t,y)) - \xi(u(t_0,y))\right] g(t-t_0,x-y) dy \end{aligned}$$

et l'équation 6.3 devient

$$\begin{aligned} &\frac{c(x)}{\lambda_r}\psi(t,x) + \int_{t_0}^{t}\int_{\Gamma} \psi(s,y) h(t-s,x-y) d\Gamma(y) ds \\ &- \int_{t_0}^{t}\int_{\Gamma} q(s,y) g(t-s,x-y) d\Gamma(y) ds \\ &= \int_{t_0}^{t}\int_{\Omega} f(s,y) g(t-s,x-y) dy ds + \int_{\Omega} \xi(u(t,y)) g(t-t_0,x-y) dy \\ &+ \int_{\Omega} \left[\frac{1}{\alpha_r}\psi(t_0,y) - \xi(u(t_0,y))\right] g(t-t_0,x-y) dy \end{aligned} \tag{6.4}$$

6.4 Résolution itérative

A ce stade l'équation 6.4 ne contient donc plus aucun terme dérivé, et l'intégrale

$$\int_{\Omega} \xi(u(t,y)) g(t-t_0,x-y) dy$$

regroupe toute la non linéarité du problème. Comme évoqué en introduction de ce chapitre, contrairement au choix fait dans [GS96] d'une résolution directe, on résout l'équation 6.4 de manière itérative. On initialise tout d'abord la procédure à $n = 0$ par la solution linéaire, c'est à dire par (ψ_0, q_0) solution de

$$\begin{aligned} &\frac{c(x)}{\lambda_r}\psi_0(t,x) + \int_{t_0}^{t}\int_{\Gamma} \psi_0(s,y) h(t-s,x-y) d\Gamma(y) ds \\ &- \int_{t_0}^{t}\int_{\Gamma} q_0(s,y) g(t-s,x-y) d\Gamma(y) ds \\ &= \int_{t_0}^{t}\int_{\Omega} f(s,y) g(t-s,x-y) dy ds + \frac{1}{\alpha_r}\int_{\Omega} \psi(t_0,y) g(t-t_0,x-y) dy \end{aligned}$$

Puis on cherche à l'itération $n \geq 1$ la solution (ψ_n, q_n) de l'équation

$$\begin{aligned}
&\frac{c(x)}{\lambda_r}\psi_n(t,x) + \int_{t_0}^{t}\int_{\Gamma}\psi_n(s,y)h(t-s,x-y)d\Gamma(y)ds \\
&- \int_{t_0}^{t}\int_{\Gamma} q_n(s,y)g(t-s,x-y)d\Gamma(y)ds \\
&= \int_{t_0}^{t}\int_{\Omega} f(s,y)g(t-s,x-y)dyds + \int_{\Omega}\xi(u_{n-1}(t,y))g(t-t_0,x-y)dy \\
&+ \int_{\Omega}\left[\frac{1}{\alpha_r}\psi(t_0,y) - \xi(u(t_0,y))\right] g(t-t_0,x-y)dy
\end{aligned}$$

La procédure est stoppée lorsque la distance entre les solutions de deux itérations successives est inférieure à une valeur seuil. Nous n'avons pas étudié la contractance de l'application non linéaire associée à cette procédure de point fixe, et nous n'avons donc pas de résultat mathématique de convergence. Il semble cependant que cet algorithme soit assez robuste, et qu'il ne soit pas nécessaire de recentrer très souvent la diffusivité α_r pour converger.

6.5 Résultats numériques

On ne considère ici que des cas de test monodomaines adimensionnés, pour lesquels on dispose soit d'une solution analytique soit de références bibliographiques permettant de comparer les résultats. On se limite par ailleurs au cadre isotrope et homogène de ce chapitre. Les maillages de frontière et volumiques, ainsi que les pas de temps choisis pour chaque exemple, sont ceux à partir desquels les résultats du programme sont stabilisés.

On s'intéresse tout d'abord au second exemple traité dans [GS96], c'est à dire au problème monodimensionnel suivant :

$$\begin{cases}
\rho(u(t,x))\partial_t u(t,x) - \partial_x\left(\lambda(u)\partial_x u\right)(t,x) = 0 \text{ pour } 0 < t,x < 1 \\
u(t,0) = 0 \\
u(t,1) = 1 \\
u(0,x) = 0
\end{cases}$$

avec

$$\rho(u) = 1 + \beta u \quad \text{et} \quad \lambda(u) = 1 + \kappa u$$

où β et κ sont des constantes.

Comme au chapitre 4, les problèmes monodimensionnels sont portés en dimension trois en imposant un flux nul au bord, dans les directions où la solution ne varie pas. On place quatre points régulièrement espacés sur le segment $[0,1]$, et on mesure la température à différents instants. Les résultats sont comparés à ceux obtenus par T. GOTO et M. SUZUKI dans [GS96]. On reprend également les résultats provenant de [LC91] et cités dans [GS96], pour les différences finies explicites (EFDM) et implicites (IFDM), le schéma de Crank-Nicolson (CNS) et les éléments finis avec transformée de Laplace

hybride (HLT FEM). La méthode directe proposée par T. GOTO et M. SUZUKI sera notée DNLBEM et la méthode itérative proposée ici INLBEM.

Le tableau 6.5.1 compare les différentes méthodes pour $\beta = 0.5$ et $\kappa = 1$ en $t = 0.1$, et le tableau 6.5.2 en $t = 1$. Pour les tableaux 6.5.3 à 6.5.6, t est fixé à 0.5 tandis que β et κ prennent les valeurs -0.5, 0.5 et 1. Le pas de temps δt est précisé pour chaque méthode, hormis pour la HLT FEM où la transformée de Laplace supprime ce paramètre.

Concernant la méthode proposée ici, nous avons pris dans tous les cas une taille de maille au bord δx_Γ égale à 0.05, comme dans [GS96] pour la DNLBEM. La taille de maille interne δx_Ω est égale à 0.01, pour un pas de temps δt égal à $\frac{1}{40}$. Les constantes ρ_r et λ_r sont quand à elles toujours égales à 1.

	INLBEM	DNLBEM	EFDM	CNS	IFDM	HLT FEM
δt	$\frac{1}{40}$	$\frac{1}{30}$	$\frac{1}{4110}$	$\frac{1}{100}$	$\frac{1}{300}$	——
$x = 0.2$	0.7366	0.7390	0.7406	0.7337	0.7363	0.7348
$x = 0.4$	0.4810	0.4863	0.4830	0.4705	0.4762	0.4718
$x = 0.6$	0.2665	0.2752	0.2645	0.2513	0.2587	0.2509
$x = 0.8$	0.1108	0.1191	0.1086	0.1003	0.1059	0.0986

TABLEAU 6.5.1 – Comparaison des résultats pour $\beta = 0.5$ et $\kappa = 1$ en $t = 0.1$

	INLBEM	DNLBEM	EFDM	CNS	IFDM	HLT FEM
δt	$\frac{1}{40}$	$\frac{1}{30}$	$\frac{1}{4110}$	$\frac{1}{100}$	$\frac{1}{300}$	——
$x = 0.2$	0.8439	0.8439	0.8439	0.8439	0.8439	0.8439
$x = 0.4$	0.6733	0.6733	0.6733	0.6733	0.6733	0.6733
$x = 0.6$	0.4832	0.4832	0.4832	0.4832	0.4832	0.4832
$x = 0.8$	0.2649	0.2649	0.2649	0.2649	0.2649	0.2649

TABLEAU 6.5.2 – Comparaison des résultats pour $\beta = 0.5$ et $\kappa = 1$ en $t = 1$

	INLBEM	DNLBEM	EFDM	CNS	IFDM	HLT FEM
δt	$\frac{1}{40}$	$\frac{1}{30}$	$\frac{1}{4110}$	$\frac{1}{100}$	$\frac{1}{300}$	——
$x = 0.2$	0.8283	0.8283	0.8283	0.8283	0.8283	0.8283
$x = 0.4$	0.6455	0.6455	0.6455	0.6455	0.6455	0.6456
$x = 0.6$	0.4492	0.4492	0.4492	0.4492	0.4492	0.4494
$x = 0.8$	0.2359	0.2359	0.2359	0.2359	0.2358	0.2360

TABLEAU 6.5.3 – Comparaison des résultats pour $\beta = -0.5$ et $\kappa = 0.5$ en $t = 0.5$

	INLBEM	DNLBEM	EFDM	CNS	IFDM	HLT FEM
δt	$\frac{1}{40}$	$\frac{1}{30}$	$\frac{1}{4110}$	$\frac{1}{100}$	$\frac{1}{300}$	——
$x = 0.2$	0.8237	0.8247	0.8234	0.8230	0.8230	0.8219
$x = 0.4$	0.6378	0.6394	0.6371	0.6365	0.6364	0.6347
$x = 0.6$	0.4411	0.4427	0.4404	0.4397	0.4396	0.4377
$x = 0.8$	0.2304	0.2315	0.2300	0.2296	0.2295	0.2283

TABLEAU 6.5.4 – Comparaison des résultats pour $\beta = 1$ et $\kappa = 0.5$ en $t = 0.5$

	INLBEM	DNLBEM	EFDM	CNS	IFDM	HLT FEM
δt	$\frac{1}{40}$	$\frac{1}{30}$	$\frac{1}{4110}$	$\frac{1}{100}$	$\frac{1}{300}$	——
$x = 0.2$	0.7213	0.7238	0.7201	0.7192	0.7195	0.7156
$x = 0.4$	0.4987	0.5021	0.4976	0.4970	0.4968	0.4918
$x = 0.6$	0.3115	0.3144	0.3108	0.3101	0.3102	0.3060
$x = 0.8$	0.1478	0.1494	0.1476	0.1469	0.1473	0.1451

TABLEAU 6.5.5 – Comparaison des résultats pour $\beta = 0.5$ et $\kappa = -0.5$ en $t = 0.5$

	INLBEM	DNLBEM	EFDM	CNS	IFDM	HLT FEM
δt	$\frac{1}{40}$	$\frac{1}{30}$	$\frac{1}{4110}$	$\frac{1}{100}$	$\frac{1}{300}$	——
$x = 0.2$	0.8430	0.8431	0.8431	0.8430	0.8429	0.8431
$x = 0.4$	0.6717	0.6719	0.6718	0.6718	0.6715	0.6718
$x = 0.6$	0.4815	0.4817	0.4815	0.4815	0.4812	0.4815
$x = 0.8$	0.2636	0.2637	0.2636	0.2636	0.2634	0.2636

TABLEAU 6.5.6 – Comparaison des résultats pour $\beta = 0.5$ et $\kappa = 1$ en $t = 0.5$

Les résultats obtenus sont donc en bon accord avec ceux des autres méthodes. Par ailleurs la procédure de point fixe converge assez vite, typiquement en quatre à cinq itérations au voisinage de $t = 0.1$ et en une à deux itérations au voisinage de $t = 1$. On peut cependant remarquer que la taille de maille interne est assez faible. Le rapport $\frac{\delta x_\Omega^2}{\delta t}$ est en effet égal à $4e-3$, ce qui est bien en deça de la valeur 0.1 préconisée au chapitre 6. Il semble donc que la non linéarité ait un impact sur le critère de maillage interne.

Le second exemple que l'on considère est le cas d'un mur semi-infini non linéaire

$$\begin{cases} \rho(u(t,x))\partial_t u(t,x) - \partial_x \left(\lambda(u)\partial_x u\right)(t,x) = 0 \\ \lambda(u)\partial_\nu u(t,0) = 1 \\ u(0,x) = 0 \end{cases}$$

avec

$$\rho(u) = \lambda(u) = 1 + 0.5u$$

On dispose pour ce problème de la solution analytique

$$u(t,x) = 2\left(\sqrt{1 + 2\sqrt{\frac{t}{\pi}}\exp\left(\frac{-x^2}{4t}\right) - x\mathrm{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{t}}\right)} - 1\right)$$

Le graphe 6.5.1 compare la présente méthode à la solution analytique pour $0 < t < 1$, en cinq points régulièrement espacés partant de $x = 0$. La taille de maille au bord δx_Γ est égale à 0.5, la taille de maille interne δx_Ω est égale à 0.1, et le pas de temps δt est égal à 0.01.

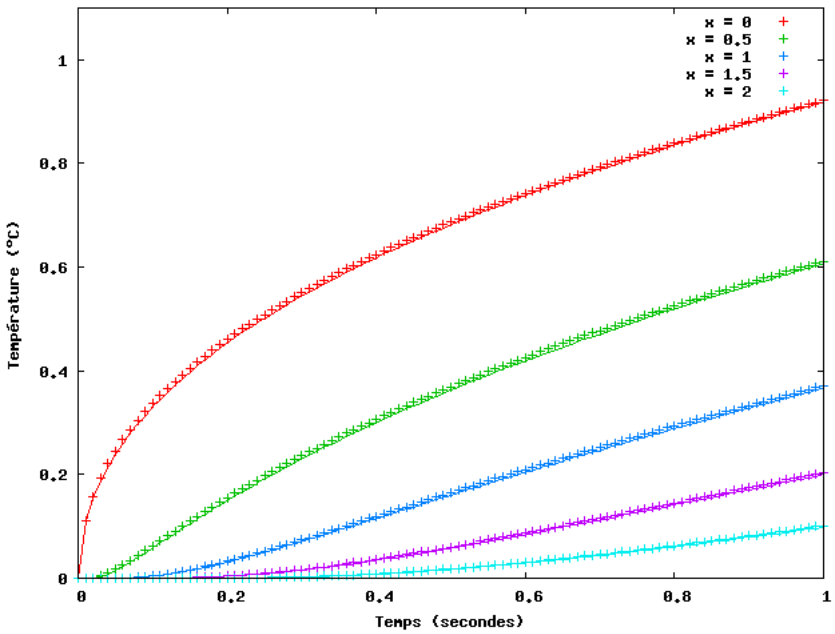


FIGURE 6.5.1 – Comparaison de la méthode proposée à la solution analytique

Les résultats obtenus sont très proches de la solution analytique, et le rapport $\frac{\delta x_\Omega^2}{\delta t}$ est cette fois-ci égal à 1. Il faut cependant noter que cet exemple est assez favorable puisque $\rho = \lambda$ et que la transformée de Kirchhoff linéarise donc complètement l'équation.

Chapitre 7

Conclusion

La méthode des éléments de frontière a permis de faire avancer la problématique industrielle sur plusieurs points. Tout d'abord la formulation adaptative introduite au chapitre 4 apporte une réponse pour les matériaux linéaires, à des échelles de temps supérieures à la milliseconde. L'introduction du terme volumique permet de réduire significativement les temps de calcul et le coût de stockage de la méthode, en contrôlant correctement l'erreur associée grâce au critère 4.5. La partie surfacique résiduelle permet d'atteindre les pas de temps compris entre la milliseconde et la seconde, et son calcul a été optimisé en s'inspirant de la méthode multipôles.

La généralisation de cette formulation au pas de temps semi-variables a permis de développer une approche multi-échelles. Celle-ci permet de mesurer l'impact de phénomènes en temps court sur la thermique globale d'un composant. La technique d'initialisation présentée au chapitre 5 assure la continuité des champs aux changements d'échelles pour un coût calculatoire faible.

La méthode proposée au chapitre 6 pour traiter les matériaux non linéaires permet d'utiliser la formulation volumique des éléments de frontière comme boite noire. Le terme non linéaire est traité de manière itérative sans introduire de nouvelles inconnues. L'obligation d'utiliser la formulation volumique impose cependant un raffinement de maillage pour les faibles pas de temps. Cette méthode est donc dédiée aux matériaux à forte diffusivité et de taille réduite, comme par exemple les zones actives de silicium dans notre cas.

D'une manière générale la méthode développée est assez fiable et robuste pour conduire à une industrialisation. Par ailleurs la gestion des données du problème aux limites est assez simple et générique en éléments de frontière. L'implémentation actuelle pourrait donc facilement évoluer de ce point de vue. En contrepartie le coût de la méthode reste élevé malgré les optimisations apportées. Si des améliorations sont encore possibles, il est peu probable qu'elles apportent un gain réellement significatif. Ceci est en particulier vrai lorsque la taille du pas de temps nécessite de conserver une grande partie du passé.

Cette difficulté tient essentiellement à l'utilisation du noyau de la chaleur transitoire. D'un autre côté, l'expérience a montré que les méthodes classiquement employées pour discrétiser séparemment le temps, en conservant les éléments de frontière en espace, ne conviennent pas dans notre cas. Elles posent des problèmes de stabilité ou ne permettent pas d'atteindre les faibles pas de temps. Il semble donc qu'à ce stade, pour changer réellement les ordres de grandeur en temps de calcul en conservant une base éléments de frontière, une autre alternative soit nécessaire. On propose dans la seconde partie de cette thèse une méthode qui tente de répondre à ces objectifs.

Deuxième partie

Décomposition propre généralisée et méthode des éléments de frontière

Chapitre 8

Introduction

Comme nous l'avons vu précedemment, la méthode des éléments de frontière permet de résoudre des problèmes réels de thermique mais pose des problèmes de complexité. Un certain nombre de techniques nous ont permis de l'optimiser suffisamment pour être viable en contexte industriel, mais sans pouvoir dépasser une certaine limite. Notre objectif est donc ici de proposer une alternative à l'utilisation du noyau de la chaleur transitoire, permettant d'atteindre les faibles pas de temps pour un coup calculatoire beaucoup plus faible.

L'approche proposée ici permet de construire une représentation à variables séparées de la solution de manière non incrémentale, en utilisant la méthode des éléments de frontière pour la partie spatiale. Supposant cette représentation connue, on l'injecte dans une formulation faible du problème espace-temps pour aboutir à deux formulations fortes séparées. Le problème spatial peut alors être résolu par la méthode des éléments de frontière, et le problème en temps est une équation différentielle ordinaire du premier ordre qui ne pose pas de difficulté particulière. Les représentations séparées ont déjà été utilisées pour résoudre des problèmes transitoires discrétisés par éléments finis [AMCK06, AMCK07, MPAC07, CAFL07, ACJ08, CAC09, Nou10], mais pas dans le cadre des éléments de frontière.

Concernant la terminologie, les méthodes consistant à produire une représentation séparée de la solution d'un problème aux limites sont aujourd'hui regroupées sous le nom de décomposition propre généralisée (PGD pour Proper Generalized Decomposition). La méthode proposée ici entre donc dans ce cadre. Par ailleurs sa particularité est d'utiliser la méthode des éléments de frontière (BEM pour Boundary Element Method) pour la résolution spatiale. Nous la désignerons donc par l'acronyme PGD-BEM.

On présente tout d'abord quelques motivations à la recherche d'une solution sous forme séparée. On expose ensuite la PGD-BEM pour l'équation de la chaleur, avec des conditions aux limites et initiale homogènes. On donne ensuite des résultats numériques, en proposant différentes techniques permettant de traiter des conditions aux limites et initiales plus générales. A l'heure actuelle cette méthode ne permet pas de résoudre le

problème industriel présenté dans la première partie de ce document. C'est pourquoi les exemples traités dans cette partie restent plus académiques que ceux des chapitres 4 et 5. Nous reviendrons donc en conclusion sur les perspectives à donner à ce travail pour pouvoir résoudre des problèmes plus réalistes.

Chapitre 9

Decomposition propre généralisée : motivations

La recherche d'une solution sous forme séparée est tout d'abord motivée par une analyse a posteriori. D'une manière générale, connaissant la solution u d'un problème transitoire en un certains nombre de couples (t_k, x_i) pour $1 \leq k \leq M$ et $1 \leq i \leq N$, il est possible de construire une représentation séparée discrète de cette solution. La méthode classiquement employée pour y parvenir est la SVD (Singular Value Decomposition), encore appelée POD (Proper Orthogonal Decomposition), dont voici le principe.

On note

$$U = (u(t_k, x_i))_{\left(\substack{1 \leq i \leq N \\ 1 \leq k \leq M}\right)}$$

la matrice des valeurs de u. La matrice UU^* est de taille $N \times N$, symétrique et positive. Elle est donc diagonalisable, ses valeurs propres sont positives ou nulles et l'on note U_x la matrice de ses vecteurs propres. De la même façon U^*U, de taille $M \times M$, est symétrique positive et l'on note U_t la matrice de ses vecteurs propres. On peut alors montrer que UU^* et U^*U ont les mêmes valeurs propres non nulles $(\lambda_j)_j$. En notant alors Σ la matrice $M \times N$ dont les éléments diagonaux sont les racines σ_j des λ_j, on a la décomposition suivante

$$U = U_t^* \Sigma U_x$$

Il est ensuite possible de reconstruire une approximation séparée de u en identifiant des interpolants aux n couples de vecteurs propres (u_t^j, u_x^j) :

$$u(t, x) \approx \sum_{j=1}^{n} \sigma_j u_t^j(t) u_x^j(x)$$

On remarque alors en pratique que lorsque u ne varie pas de manière trop brutale, il suffit d'un nombre restreint de couples pour obtenir une bonne approximation de la solution. Une part des calculs effectués pour obtenir la matrice U était donc inutile. Cette analyse a posteriori engage donc à chercher des techniques permettant d'éliminer tout ou

partie de ces calculs a priori.

Il est tout d'abord possible de considérer les vecteurs u_x^j comme une base réduite pouvant être réutilisée pour résoudre des problèmes proches, comme par exemple pour de faibles changements au niveau des conditions aux limites ou des paramètres du modèle [PC96] [MR05] [RHCA05]. Dans [RHCA05] cette approche à été couplée avec succès à une discrétisation éléments de frontière. Il est également possible de calculer la base réduite sur une petite partie de l'intervalle de temps, pour ensuite utiliser le modèle réduit sur le reste de l'intervalle. Ces techniques introduisent cependant une erreur, dont l'évaluation et le contrôle sont assez difficiles.

Une possibilité pour construire une base réduite adaptative est d'alterner une phase de réduction de type SVD, et des phases d'enrichissement permettant de recaler la base réduite à faible coût. Une technique d'enrichissement basée sur l'utilisation d'espaces de Krylov associés au résidu de l'équation a récemment été proposée. Cette méthode connue sous le nom de "réduction de modèle a prioiri" a été au départ proposée dans [Ryc05], largement décrite dans [RCCA06] et appliquée avec succès pour résoudre des modèles d'écoulement de fluides complexes [ARCK06], [CAFL07] et pour accélerer les discrétisations éléments de frontière [RHCA05] et les simulations thermomécaniques [CAL+08]. Cependant pour certains modèles comme l'équation des ondes, l'enrichissement de base est loin d'être optimal. Par ailleurs l'algorithme reste incrémental.

Mais au delà des cas où la SVD montre a posteriori qu'une part des calculs effectués était inutile, il est des problèmes pour lesquels ces calculs sont simplement impossibles à réaliser. C'est le cas des problèmes posés dans des espaces de grande dimension comme par exemple en mécanique quantique, ou pour les modèles transitoires lorsque le rapport entre le pas de temps et le temps de simulation devient trop grand.

Dans le premier cas une des solution est l'utilisation des "sparse grids" [BG04]. Cependant comme il est mentionné dans [AP05], l'utilisation des sparse grids est limité aux espaces de dimension inférieure à 20. Une solution plus générale est donc l'utilisation de représentations séparées, pour lesquelles on trouvera certains résultats mathématiques dans [RS95] et [BM05]. Cette idée n'est pas nouvelle, elle a largement été employée ces dernières années dans le cadre de la chimie quantique (voir par exemple [CDK+03]). Une approche capable de construire une représentation séparée de manière transparente pour l'utilisateur a au départ été proposée dans [AMCK06], puis étendue aux modèles transitoires dans [AMCK07]. Les représentations séparées ont également été utilisées pour des modèles plus complexes (comportant différents couplages et non linéarités) dans [MPAC07], et dans [CAFL07] pour des problèmes stochastiques. Une introduction à l'utilisation de représentations séparées pour la modélisation multi-échelle des matériaux pourra être trouvée dans [ACJ08].

Dans le second cas, Pierre Ladeveze a proposé il y a quelques années une puissante

technique appelée méthode LATIN [Lad99]. Cette méthode est particulièrement adaptée aux modèles transitoires non linéaires et multi-échelles. Elle permet le découplage entre un modèle linéaire global et un modèle non linéaire local, en séparant les variables de la solution pour accélérer la résolution du problème linéaire. Cette séparation de variables a été appelée “approximation radiale”, et c’est à notre connaissance la première fois où les représentations séparées ont été utilisées en calcul numérique. Le lecteur intéressé pourra se référer à [LPN10] pour un état de l’art plus complet et récent à ce sujet.

Chapitre 10

PGD-BEM pour l'équation de la chaleur

10.1 Procédure de décomposition dans un cadre continu

On présente ici la procédure de séparation de variables de la PGD-BEM pour l'équation de la chaleur. On conserve dans cette section un cadre continu, les méthodes de discrétisation faisant l'objet de la section suivante. On se place dans le cas de données homogènes, en essayant de donner un cadre mathématique relativement rigoureux à l'exposé. Le cas de données non homogènes sera abordé au chapitre 11, où nous proposerons un certain nombre de techniques pour traiter des cas plus réalistes. On considère donc pour l'instant le problème suivant

$$\begin{cases} L(u) = \partial_t u - \Delta u = f & \text{dans }]0,T[\times\Omega \\ u = 0 & \text{sur }]0,T[\times\Gamma \\ u(t=0) = 0 & \text{dans } \Omega \end{cases} \tag{10.1}$$

où Ω est un domaine de $\mathbb{R}^3$ que l'on pourra considérer lipschitzien comme au chapitre 2.

Trouver le cadre mathématique approprié pour les algorithmes PGD semble être un problème complexe. Des résultats de convergence existent pour l'opérateur de Laplace sous certaines conditions d'optimalité [BLM09]. Néanmoins pour l'algorithme décrit ci-dessous, des questions restent ouvertes en particulier pour l'opérateur de la chaleur transitoire. Nous nous contentons donc ici de reprendre le cadre fonctionnel classique de l'équation de la chaleur [LM72], en s'inspirant des travaux de A. Nouy [Nou10].

On suppose donc que f appartient à $L^2\left(0,T;H^{-1}\left(\Omega\right)\right)$, où $H^{-1}\left(\Omega\right)$ désigne le dual de $H_0^1(\Omega)$. On cherche alors u dans l'espace V défini par

$$V = \left\{ v \in L^2\left(0,T;H_0^1(\Omega)\right) | \partial_t v \in L^2\left(0,T;H^{-1}\left(\Omega\right)\right) \right\}$$

sous la forme

$$u(t,x) = \sum_j u^j(t,x) := \sum_j u_t^j(t) u_x^j(x)$$

où le nombre de couples (u_t^j, u_x^j) sera déterminé par l'algorithme PGD-BEM.

On suppose par ailleurs que les u_t^j appartiennent à V_t, défini par

$$V_t = \left\{ v_t \in H^1([0,T]) \,|\, v_t(t=0) = 0 \right\}$$

et que les u_x^j appartiennent à $V_x = H_0^1(\Omega)$. Ainsi l'ensemble des combinaisons linéaires d'éléments de $V_t \otimes V_x$ est dense dans V, et les u^j vérifient les conditions aux limites du problèmes 10.1 pour tout j.

Supposant connus les $n-1$ premiers couples, on note

$$u_{n-1} = \sum_{j=1}^{n-1} u^j$$

et on cherche le $n^{\text{ième}}$ couple u^n tel que $f - L(u_n)$ soit orthogonal au sens de la dualité à l'espace E^n, défini par

$$E^n = \{ v \in V | v = u_t^n v_x + u_x^n v_t, v_x \in V_x, v_t \in V_t \}$$

Cela qui donne donc le système suivant

$$\begin{cases} \displaystyle\int_0^T \int_\Omega (f - L(u_n))\, u_t^n v_x = 0 \quad \text{pour tout } v_x \in V_x \\ \displaystyle\int_0^T \int_\Omega (f - L(u_n))\, u_x^n v_t = 0 \quad \text{pour tout } v_t \in V_t \end{cases}$$

ou encore par linéarité de L

$$\begin{cases} \displaystyle\int_0^T \int_\Omega L(u^n) u_t^n v_x = \int_0^T \int_\Omega (f - L(u_{n-1}))\, u_t^n v_x \\ \displaystyle\int_0^T \int_\Omega L(u^n) u_x^n v_t = \int_0^T \int_\Omega (f - L(u_{n-1}))\, u_x^n v_t \end{cases} \tag{10.2}$$

Le cadre fonctionnel choisi permet ensuite d'obtenir le système de formulations fortes

$$\begin{cases} \displaystyle\int_0^T L(u^n) u_t^n = \int_0^T (f - L(u_{n-1}))\, u_t^n \\ \displaystyle\int_\Omega L(u^n) u_x^n = \int_\Omega (f - L(u_{n-1}))\, u_x^n \end{cases}$$

ou encore sous forme développée, et en notant simplement $(u_t, u_x) = (u_t^n, u_x^n)$

$$\begin{cases} \left(\displaystyle\int_0^T \partial_t u_t u_t \right) u_x - \left(\int_0^T u_t u_t \right) \Delta u_x = \int_0^T (f - L(u_{n-1}))\, u_t \\ \left(\displaystyle\int_\Omega u_x u_x \right) \partial_t u_t - \left(\int_\Omega u_x \Delta u_x \right) u_t = \int_\Omega (f - L(u_{n-1}))\, u_x \end{cases} \tag{10.3}$$

Remarquons que puisque $u_t \in V_t$, l'équation spatiale du système 10.3 est elliptique. On a en effet

$$\left(\int_0^T \partial_t u_t u_t\right) = \frac{1}{2}\left(u_t^2(T) - u_t^2(0)\right) = \frac{1}{2}u_t^2(T) \geq 0$$

Le système 10.3 est non linéaire et doit donc être résolu de manière itérative. La stratégie de résolution est détaillée à la section suivante car elle dépend en partie de la discrétisation spatiale choisie. Concluons pour l'instant cette section par quelques remarques d'ordre mathématique.

Si l'on suppose que f appartient à $L^2([0,T]\times\Omega)$, alors u appartient à

$$V = \left\{v \in L^2\left(0,T;(H^2\cap H_0^1)(\Omega)\right) | \partial_t v \in L^2([0,T]\times\Omega)\right\}$$

Il est donc légitime de chercher u_x^n dans $(H^2\cap H_0^1)(\Omega)$, de sorte que $L(u^n)$ appartienne à $L^2([0,T]\times\Omega)$. La dualité permet alors d'étendre E^n à

$$E^n = \left\{v \in L^2([0,T]\times\Omega) | v = u_t^n v_x + u_x^n v_t, v_x \in L^2(\Omega), v_t \in L^2([0,T])\right\}$$

On remarque alors que $L(u^n)$ appartient à E^n. Résoudre le système 10.2 revient donc à chercher u^n tel que $L(u^n)$ soit le projeté orthogonal de $f - L(u_{n-1})$ sur E^n, ou de manière équivalente chercher u^n tel que

$$L(u^n) = \arg\min_{v\in E^n} \|f - L(u_{n-1}) - v\|_{L^2([0,T]\times\Omega)}$$

On a donc en particulier

$$\int_0^T \int_\Omega (f - L(u_{n-1}))\, L(u^n) = \|L(u^n)\|^2_{L^2([0,T]\times\Omega)}$$

dont on déduit une estimation sur la norme du résidu $f - L(u_n)$

$$\begin{aligned}\|f - L(u_n)\|^2_{L^2([0,T]\times\Omega)} &= \|f - L(u_{n-1})\|^2_{L^2([0,T]\times\Omega)} - \|L(u^n)\|^2_{L^2([0,T]\times\Omega)} \\ &= \|f\|^2_{L^2([0,T]\times\Omega)} - \sum_{j=1}^{n} \left\|L(u^j)\right\|^2_{L^2([0,T]\times\Omega)}\end{aligned}$$

10.2 Discrétisation et éléments de frontière

Détaillons tout d'abord la stratégie de résolution itérative du système 10.3. Supposant calculé le $q^{\text{ième}}$ couple noté (u_t^q, u_x^q), on détermine le $(q+1)^{\text{ième}}$ par

$$\begin{cases} -\left(\int_0^T u_t^q u_t^q\right)\Delta u_x^{q+1} = -\left(\int_0^T \partial_t u_t^q u_t^q\right) u_x^q + \int_0^T (f - L(u_{n-1}))\, u_t^q \\ \left(\int_\Omega u_x^{q+1} u_x^{q+1}\right)\partial_t u_t^{q+1} - \left(\int_\Omega u_x^{q+1}\Delta u_x^{q+1}\right) u_t^{q+1} = \int_\Omega (f - L(u_{n-1}))\, u_x^{q+1} \end{cases} \tag{10.4}$$

On est ainsi ramené à la résolution d'une équation de laplace pour u_x^{q+1}, et une equation différentielle pour u_t^{q+1}. Les conditions aux limites homogènes sont fixées par le cadre fonctionnel, choisi en accord avec les conditions aux limites du problème 10.1. On peut

alors par exemple initialiser l'algorithme en $q = 0$ par $u_x^0 = 0$ et $u_t^0 = t$.

L'équation spatiale du système 10.4

$$-\left(\int_0^T u_t^q u_t^q\right) \Delta u_x^{q+1} = -\left(\int_0^T \partial_t u_t^q u_t^q\right) u_x^q + \int_0^T \left(f - L(u_{n-1})\right) u_t^q \tag{10.5}$$

définit donc un problème elliptique à coefficients constants.

Le terme

$$\left(\int_0^T \partial_t u_t^q u_t^q\right) u_x^q$$

est pris à l'itération q de manière à utiliser le noyau de l'équation de Laplace, plutôt que celui de l'équation elliptique globale. Notons que toutes les intégrales en temps dans l'équation 10.5 sont calculées à l'itération précédente, et qu'elles doivent l'être avec un schéma d'intégration cohérent avec le schéma de discrétisation en temps.

Dans l'équation en temps

$$\left(\int_\Omega u_x^{q+1} u_x^{q+1}\right) \partial_t u_t^{q+1} - \left(\int_\Omega u_x^{q+1} \Delta u_x^{q+1}\right) u_t^{q+1} = \int_\Omega \left(f - L(u_{n-1})\right) u_x^{q+1}$$

les intégrales spatiales sont par contre calculées à l'itération courante. Dans notre cas la formule de reconstruction des éléments de frontière doit être utilisée, là aussi en cohérence avec la finesse de la discrétisation spatiale.

Il est important de noter que le calcul du coefficient

$$\int_\Omega u_x^{q+1} \Delta u_x^{q+1}$$

ne nécessite pas de différentiation, car le terme Δu_x^{q+1} s'obtient directement à partir de l'équation 10.5. Il faut également remarquer que tous les calculs lourds comme ceux des matrices d'intégrations ne sont effectués qu'une seule fois, en amont de la procédure de séparation de la section précédente. Ensuite toutes les itérations de l'algorithme PGD-BEM ne consistent qu'en des multiplications matrices-vecteurs.

Pour les résultats numériques du chapitre 11, la procédure de point fixe 10.4 a été stoppée lorsque

$$\|u_n - u_{n-1}\|_{L^2([0,T]\times\Omega)} < 10^{-8}$$

où 10^{-8} représente la racine carrée de la précision machine. La procédure globale de détermination des couples de la décomposition a elle été stoppée pour

$$\frac{\|u - u_{ref}\|_{L^2([0,T]\times\Omega)}}{\|u_{ref}\|_{L^2([0,T]\times\Omega)}} < 10^{-6}$$

lorsqu'une solution de référence était connue, et

$$\frac{\|f - L(u)\|_{L^2([0,T]\times\Omega)}}{\|f\|_{L^2([0,T]\times\Omega)}} < 10^{-6}$$

sinon.

En notant $Q_1 \dots Q_N$ les nombres d'itérations des procédures de point fixe, où N est le nombre de couples nécessaires à l'approximation de la solution, et $Q = \frac{Q_1+\dots+Q_N}{N}$, l'algorithme PGD-BEM nécessite donc $N \times Q$ résolutions en espace et en temps. Dans la plupart des cas traités jusqu'à maintenant, N et Q sont de l'ordre de dix, ce qui correspond donc ici à quelques centaines de résolutions éléments de frontière. Le coût de résolution des équations différentielles reste quant à lui négligeable, même pour des pas de temps très fins. L'avantage par rapport à une approche incrémentale où plusieurs milliers, voire millions de problèmes de complexité spatiale seraient à résoudre est donc évident. Une première comparaison entre les deux types d'approches a par ailleurs été présentée dans [AND+10].

Chapitre 11

Résultats numériques

11.1 Conditions aux limites homogènes

On considère tout d'abord un problème simple afin d'étudier la convergence de la méthode

$$\begin{cases} \partial_t u - \Delta u = 1 & \text{dans } I \times \Omega \\ u = 0 & \text{sur } I \times \Gamma \\ u(t=0) = 0 & \text{dans } \Omega \end{cases} \tag{11.1}$$

où $\Omega = [0,1] \times [0,1]$, et $I = [0, 0.3]$ qui suffit à atteindre le régime permanent.

La solution de ce problème est donnée par ([CJ86])

$$u_{ref}(t,x) = \int_I \int_\Omega g(t-s,x,y)dyds$$

avec

$$g(\tau,x,y) = 4\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=1}^{\infty} \sin(n\pi x_1)\sin(m\pi y_1)\sin(n\pi x_2)\sin(m\pi y_2) \exp\left(-\pi^2(n^2+m^2)\tau\right)$$

Le bord Γ de Ω est discrétisé en $4n_\Gamma$ segments, et l'intervalle I par n_I noeuds uniformément distribués. Comme mentionné au chapitre 10, les conditions aux limites homogènes sont directement reportées en espace-temps dans le système 10.4.

On analyse maintenant la convergence de la méthode en fonction de la discrétisation espace-temps, et du nombre de couples de l'approximation. Pour un nombre de mailles spatiales n_Γ fixé, le nombre de noeuds en temps n_τ est adapté pour obtenir la précision maximale. Le tableau 11.1 et la figure 11.1.1 donnent l'évolution de l'erreur L^2 espace-temps, définie par

$$e_n = \frac{\|u_n - u_{ref}\|_{L^1_2(I\times\Omega)}}{\|u_{ref}\|_{L^1_2(I\times\Omega)}}$$

en fonction du degré d'approximation.

n_Γ	4	8	16	32	64
$\bar{e}_1$	9.9640	8.9397	8.7820	8.7442	8.7519
$\bar{e}_2$	5.7327	3.4744	3.5755	3.5846	3.5515
$\bar{e}_3$	4.9489	1.7439	2.0731	2.1270	2.1819
$\bar{e}_4$	5.9839	2.2748	2.2101	2.1536	2.1793
$\bar{e}_5$	5.9498	1.1472	1.2022	1.2752	1.3111
$\bar{e}_6$	5.9477	1.7641	1.4213	1.3425	1.3634
$\bar{e}_7$	5.9476	1.3769	0.5473	0.4681	0.4195
$\bar{e}_8$	5.9476	1.5295	0.5433	0.4505	0.3590
$\bar{e}_9$	5.9474	1.4631	0.4443	0.2992	0.2761

TABLEAU 11.1.1 – Erreur $\bar{e}_n = 10^2 \times e_n$ en fonction du nombre de couples et de la discrétisation n_Γ (pour $n_\tau = 256$)

On peut remarquer que pour un nombre de couples fixé, l'erreur e_n décroit quand n_Γ augmente, jusqu'à une valeur asymptotique. Pour réduire encore l'erreur on doit augmenter le nombre de couples, et également n_Γ. Pour cet exemple 9 couples sont nécessaires pour obtenir une convergence quadratique avec $4 \leq n_\Gamma \leq 64$.

La figure 11.1.2 donne la représentation graphique des trois premiers couples pour $n_\Gamma = 8$ et $n_\tau = 256$. La figure 11.1.3 compare cette approximation à la solution exacte. La figure 11.1.4 trace l'erreur correspondante pour $t = \{0.071s, 0.15s, 0.23s, 0.3s\}$.

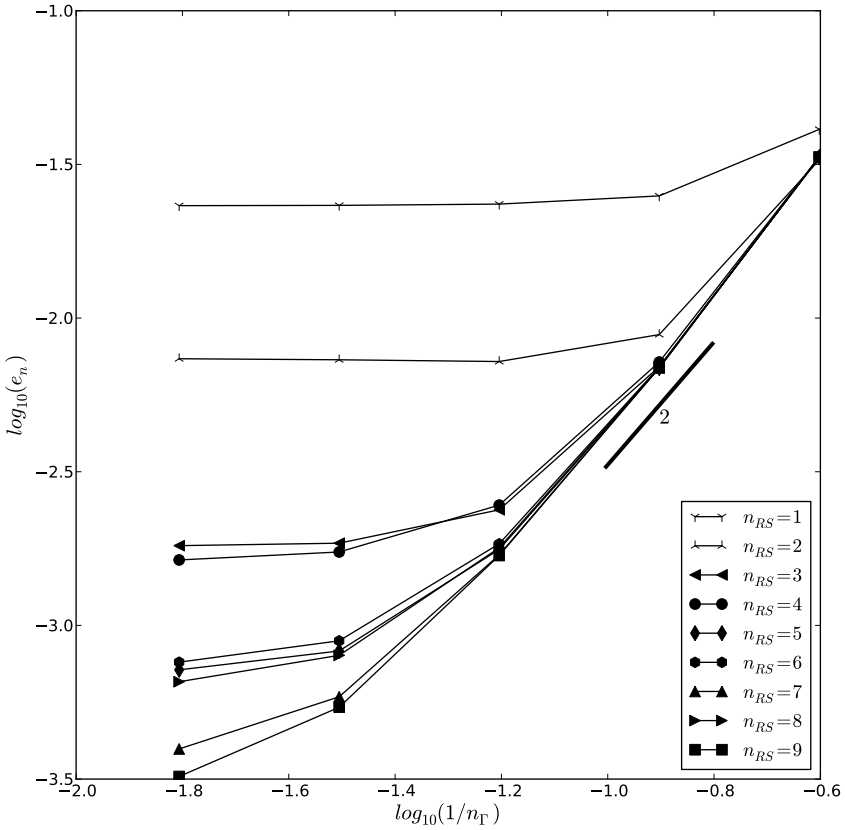


FIGURE 11.1.1 – Evolution de l'erreur e_n en fonction du degré d'approximation

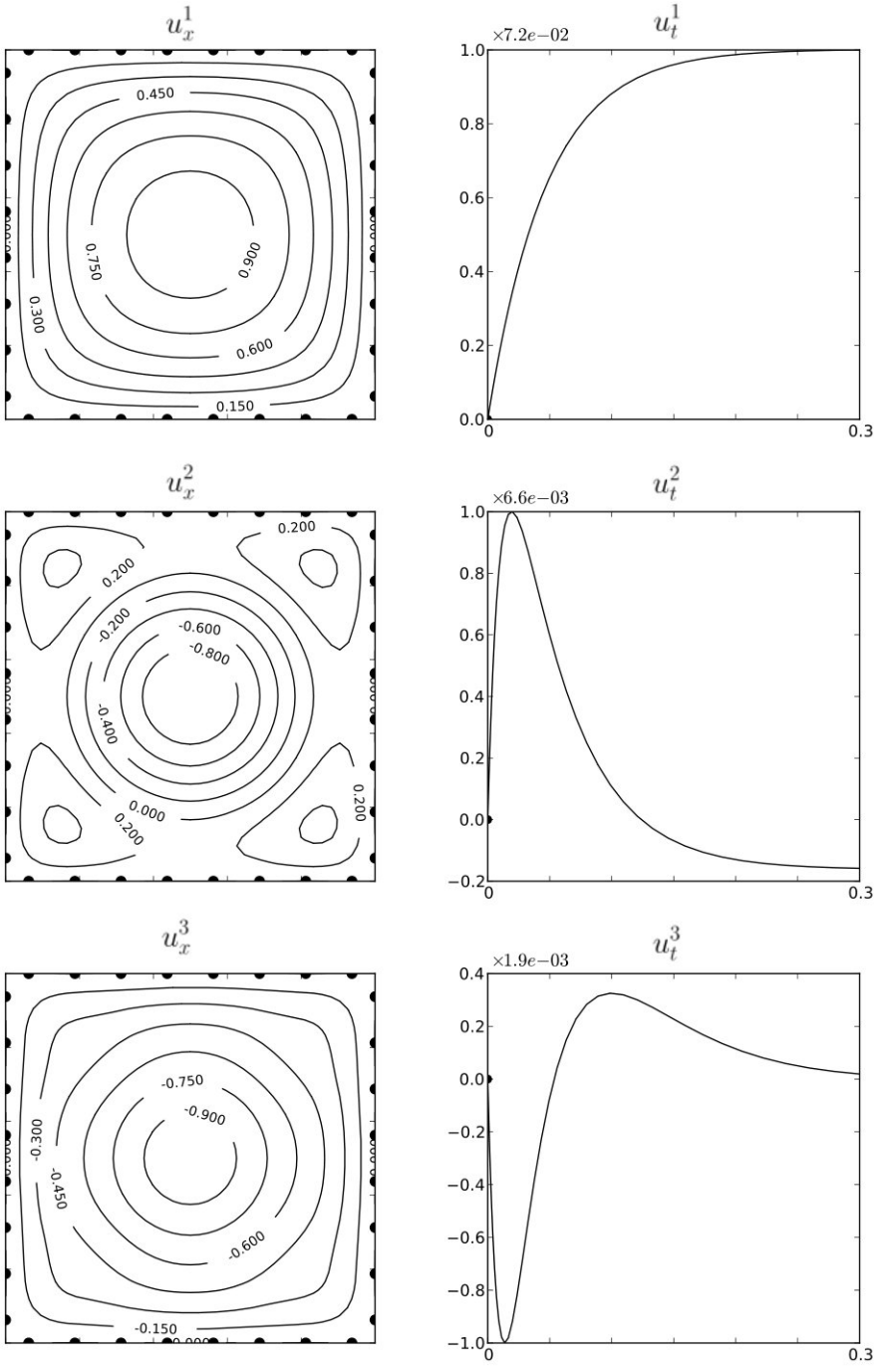


FIGURE 11.1.2 – Couples fonctionnels pour $n_\Gamma = 8$ et $n_\tau = 256$

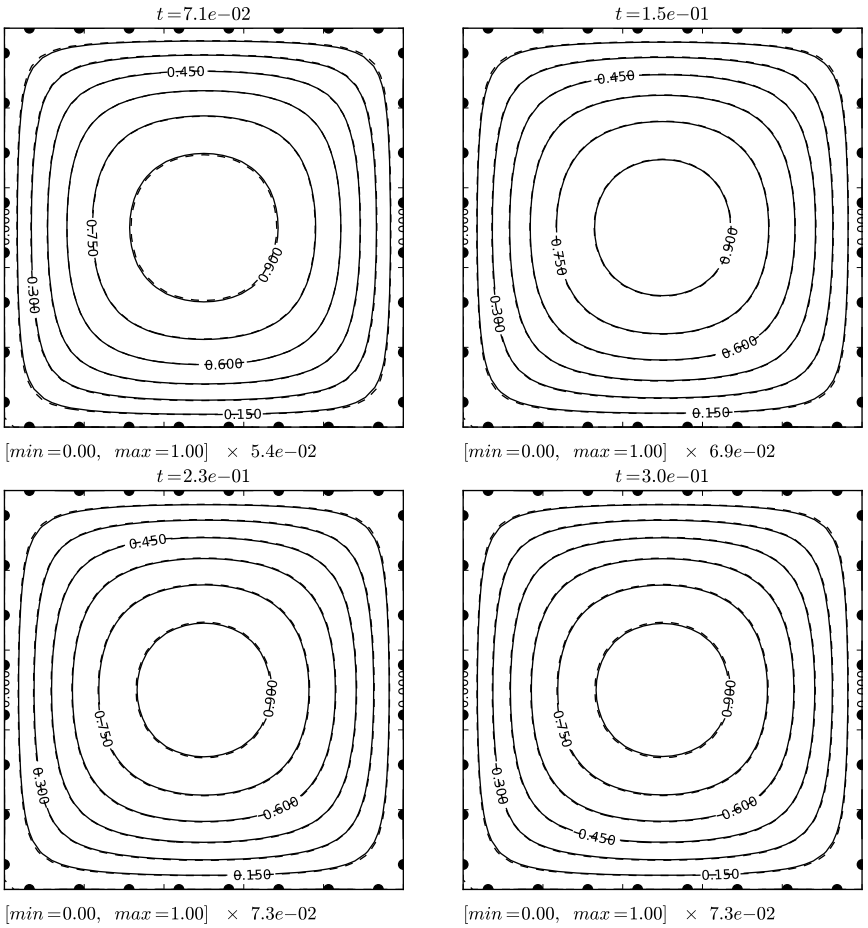


FIGURE 11.1.3 – Comparaison de la solution approchée et de la solution analytique (en pointillé)

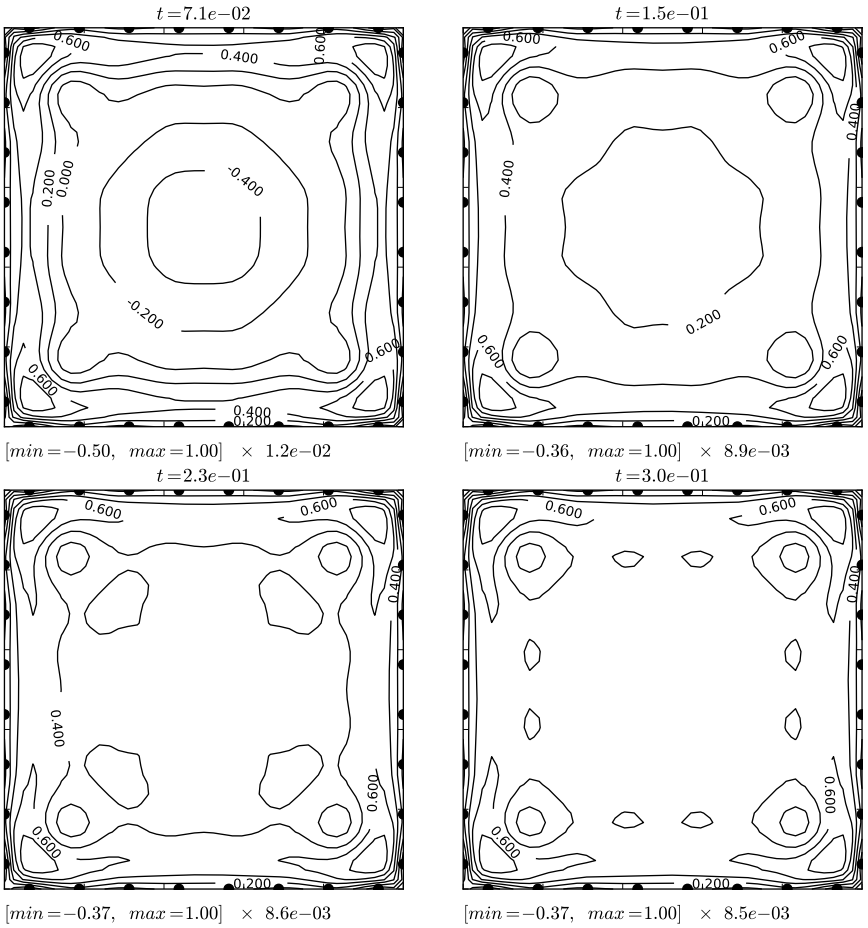


FIGURE 11.1.4 – Erreur d'approximation pour $t = \{0.071s, 0.15s, 0.23s, 0.3s\}$, $n_\Gamma = 8$ et $n_\tau = 256$

11.2 Conditions aux limites non homogènes

On considère maintenant le problème suivant

$$\begin{cases} \partial_t u - \Delta u = f & \text{dans } I \times \Omega \\ u = \overline{u} & \text{sur } I \times \Gamma_D \\ \partial_\nu u = \overline{q} & \text{sur } I \times \Gamma_N \\ u(t=0) = u_0 & \text{dans } \Omega \end{cases}$$

La gestion de données non homogènes dans le cadre de la PGD-BEM pose problème. Lorsque la donnée initiale reste nulle ou constante, on peut imaginer plusieurs façons d'incorporer les conditions aux limites au système 10.4. Mais pour une donnée initiale non constante, un changement d'inconnue semble nécessaire. On introduit donc la fonction $\hat{u}$ définie par $\hat{u}(t=0) = u_0$, et pour $t > 0$ fixé $\hat{u}(t, \cdot)$ est le relèvement harmonique des données du problèmes, c'est à dire

$$\begin{cases} \Delta \hat{u}(t,x) = 0 & \text{dans } \Omega \\ \hat{u}(t,x) = \overline{u}(t,x) & \text{sur } \Gamma_D \\ \partial_\nu \hat{u}(t,x) = \overline{q}(t,x) & \text{sur } \Gamma_N \end{cases} \tag{11.2}$$

On cherche ensuite la fonction $v = u - \hat{u}$, qui sera donc définie par

$$\begin{cases} \partial_t v - \Delta v = f + \partial_t \hat{u} & \text{dans } I \times \Omega \\ v = 0 & \text{sur } I \times \Gamma_D \\ \partial_\nu v = 0 & \text{sur } I \times \Gamma_N \\ u(t=0) = 0 & \text{dans } \Omega \end{cases} \tag{11.3}$$

L'intérêt de prendre pour $\hat{u}$ une famille de relèvements harmoniques est double. D'une part cela simplifie le calcul du terme source du problème 11.3, et d'autre part la discrétisation éléments de frontière du problème 11.2 est la même que celle du problème spatial du système 10.4. $\hat{u}$ est donc calculée par la méthode des éléments de frontière, sans ajouter d'autres opérations que des produits matrice-vecteur à l'algorithme.

Pour pouvoir appliquer la PGD-BEM au problème 11.3, il reste à construire une formulation séparée de $\hat{u}$. On applique pour ce faire la SVD à la matrice $C_{\hat{u}}$ des valeurs de $\hat{u}$. Les colonnes de cette matrice sont les valeurs de $\hat{u}$ au temps t_i pour lesquels on a résolu le problème 11.2, sauf la première colonne directement donnée par u_0. Le nombre de colonnes doit donc être suffisamment important pour décrire correctement $\hat{u}$, mais plus faible que le nombre de pas de temps de résolution de l'équation différentielle du système 10.4.

Pour illustrer cette approche on considère tout d'abord un problème régulier, où les conditions aux limites et la donnée initiale sont compatibles. On se place à nouveau dans le carré $\Omega = [0,1] \times [0,1]$ avec $I = [0, 0.3]$. On prend pour terme source $f = \frac{1}{4}(x^2 + y^2) - (t - 0.1)$, de manière à ce que la solution exacte du problème soit donnée par

$$u(t,x) = \frac{1}{4}(t-0.1)(x^2+y^2)$$

La figure 11.2.5 donne les deux principaux couples de la SVD de $C_{\hat{u}}$. Le champ v est correctement approché par un seul couple, comme la forme de la solution analytique le laissait présager. La PGD-BEM renvoie cependant deux couples, représentés sur la figure 11.2.6. La figure 11.2.7 donne l'évolution de l'erreur e_n en fonction de la discrétisation spatiale, et montre une convergence quadratique. La figure 11.2.8 compare les solutions approchées et analytiques, et la figure 11.2.9 trace l'erreur correspondante pour $t = \{0.071s, 0.15s, 0.23s, 0.3s\}$.

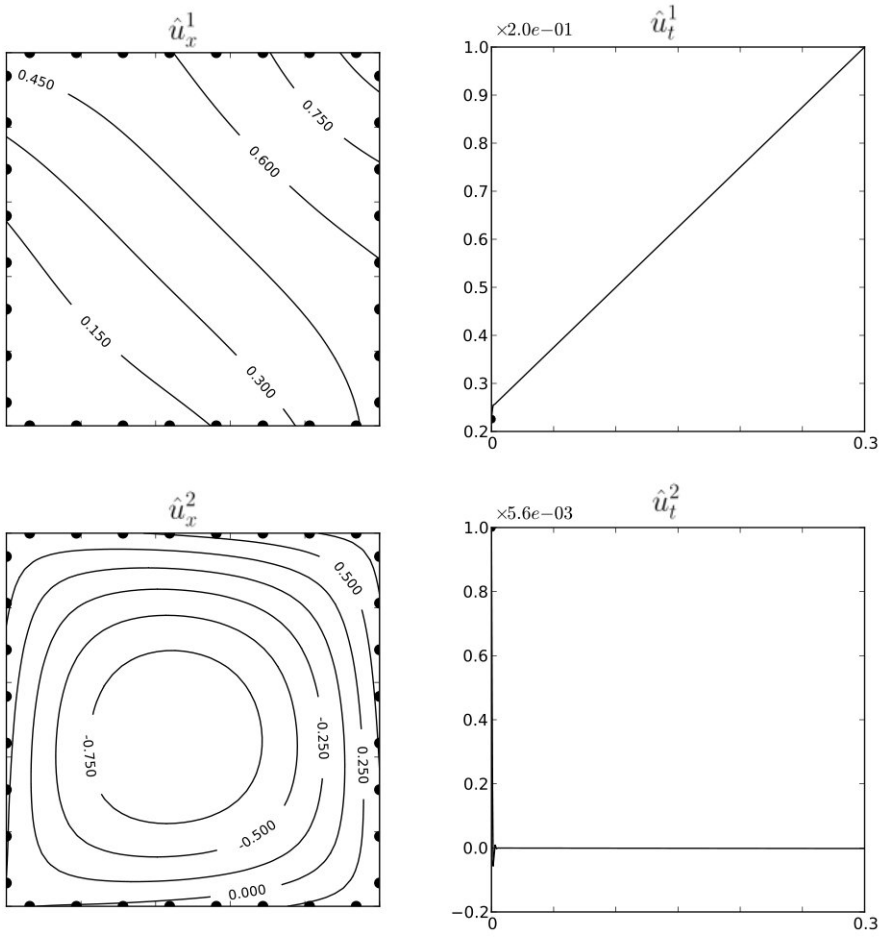


FIGURE 11.2.5 – Couples fonctionnels de $\hat{u}$ pour $n_\Gamma = 8$ et $n_\tau = 256$

On considère maintenant un problème moins régulier, présentant une incompatibilité entre donnée initiale et conditions aux limites

$$\begin{cases} \partial_t u - \Delta u = 0 & \text{dans } I \times \Omega \\ u = 0 & \text{sur } I \times \Gamma_D \\ u(t=0) = 1 & \text{dans } \Omega \end{cases}$$

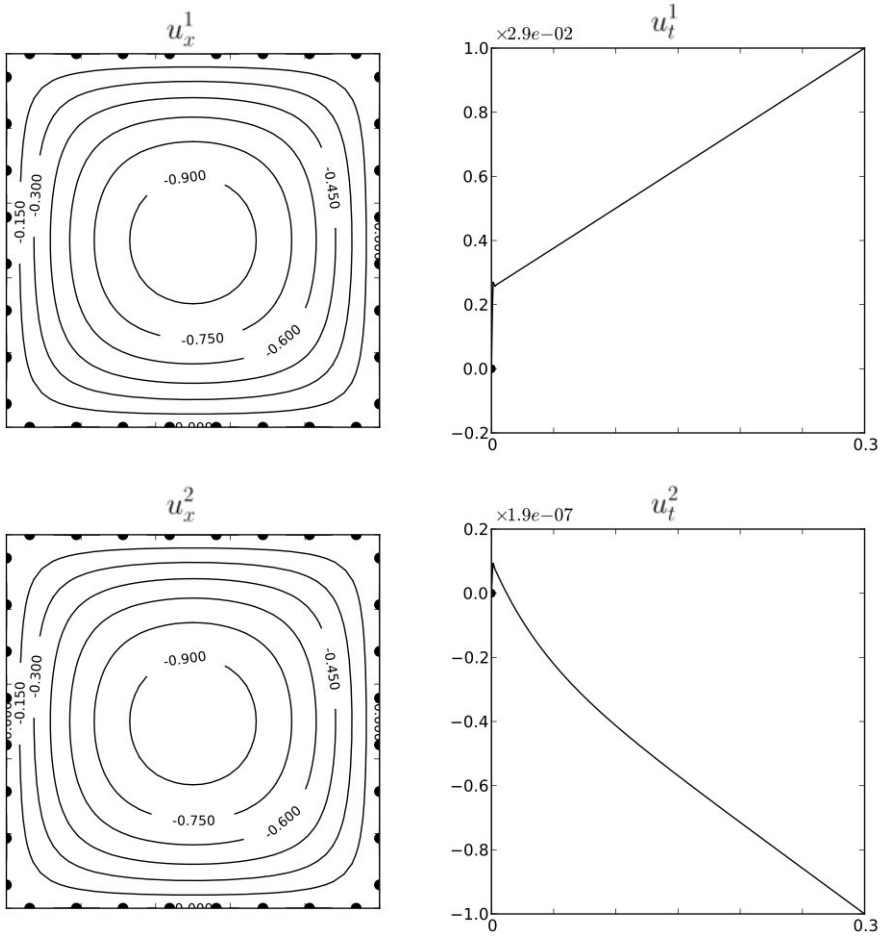


FIGURE 11.2.6 – Couples fonctionnels de u pour $n_\Gamma = 8$ et $n_\tau = 256$

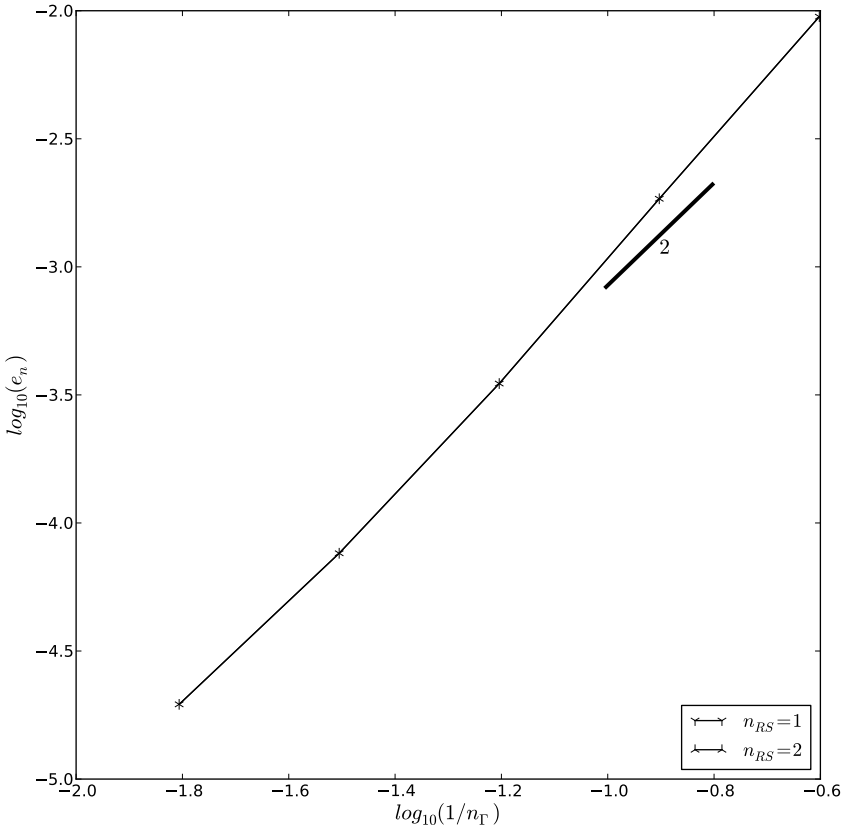


FIGURE 11.2.7 – Evolution de l'erreur e_n en fonction du degré d'approximation

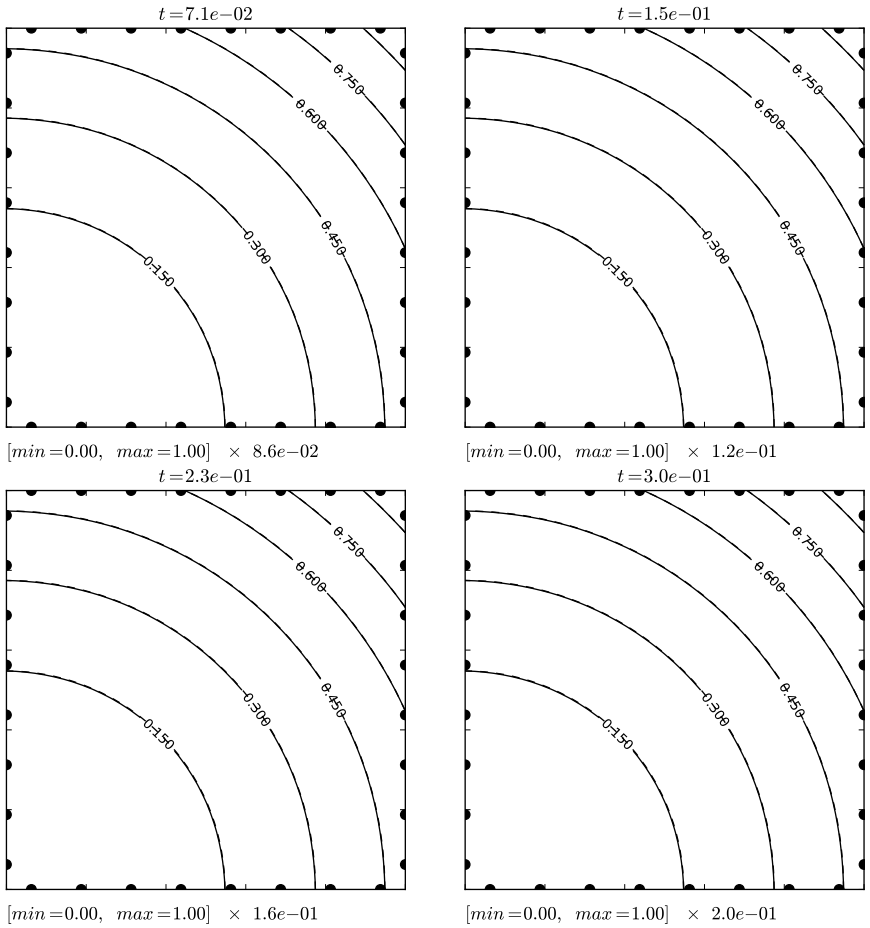


FIGURE 11.2.8 – Comparaison de la solution approchée et de la solution analytique (en pointillé)

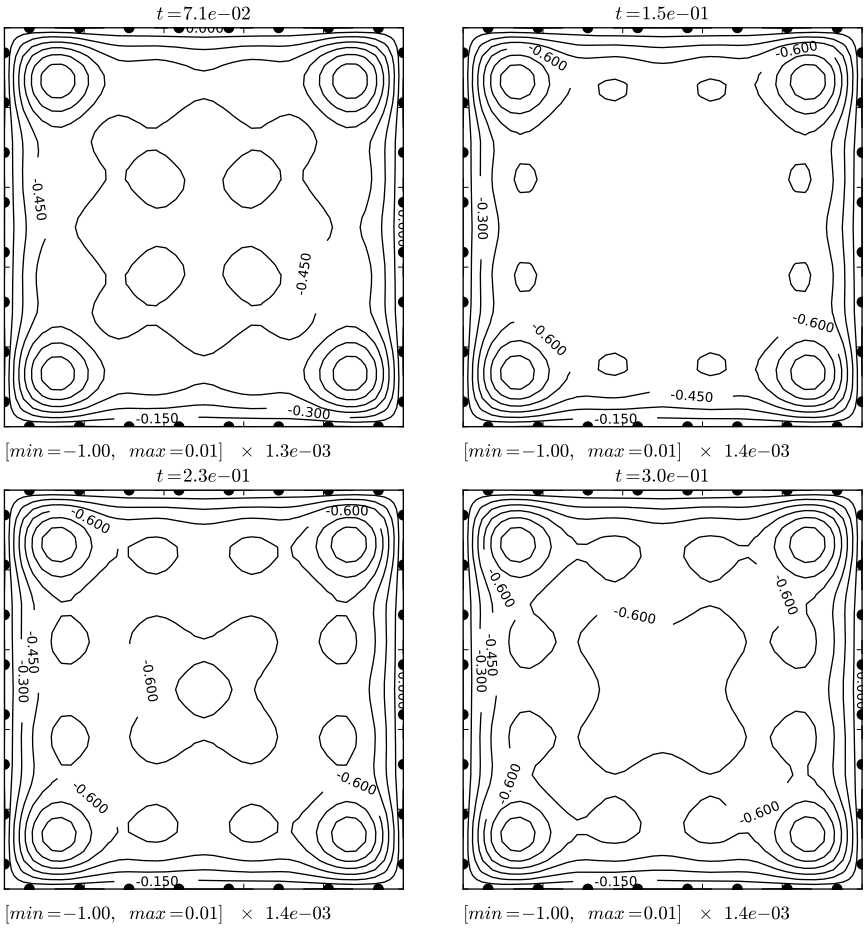


FIGURE 11.2.9 – Erreur d'approximation pour $t = \{0.071s, 0.15s, 0.23s, 0.3s\}$, $n_\Gamma = 8$ et $n_\tau = 256$

La solution exacte est donnée par ([CJ86])

$$u_{ref}(t,x) = \int_\Omega g(t-s,x,y)dyds$$

avec

$$g(\tau,x,y) = \left(1 + 2\sum_{n=1}^{\infty} \cos(n\pi x_1)\cos(n\pi y_1)\exp\left(-\pi^2 n^2 t\right)\right) \left(1 + 2\sum_{m=1}^{\infty} \cos(m\pi x_2)\cos(m\pi y_2)\exp\left(-\pi^2 m^2 t\right)\right)$$

La figure 11.2.10 donne le principal couple de la SVD de $C_{\hat{u}}$. La figure 11.2.11 donne les trois premiers couples approchant le champ v, pour $n_\Gamma = 16$ et $n_\tau = 256$. La figure 11.2.12 donne l'évolution de l'erreur e_n en fonction de la discrétisation spatiale, et montre à nouveau une convergence quadratique. On voit que l'incompatibilité des données du problème augmente significativement le nombre de couples. La figure 11.2.13 compare les solutions approchées et analytiques, et la figure 11.2.14 trace l'erreur correspondante pour $t = \{0.071s, 0.15s, 0.23s, 0.3s\}$.

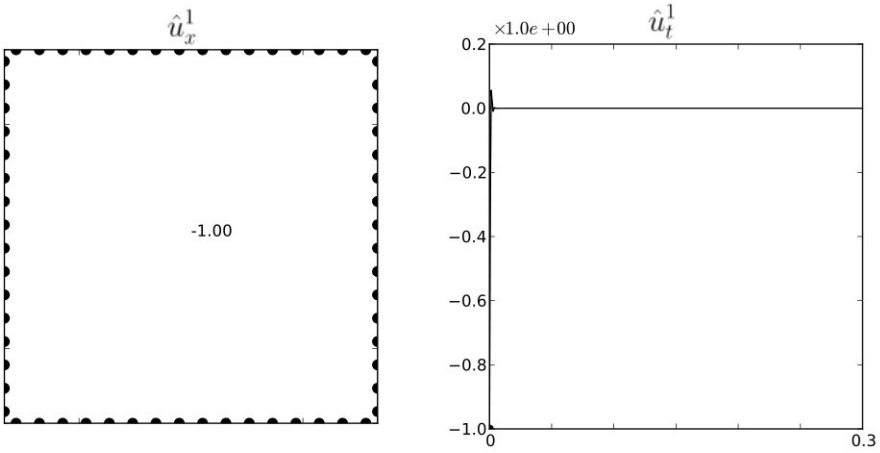


FIGURE 11.2.10 – Couple fonctionnel de $\hat{u}$ pour $n_\Gamma = 16$ et $n_\tau = 256$

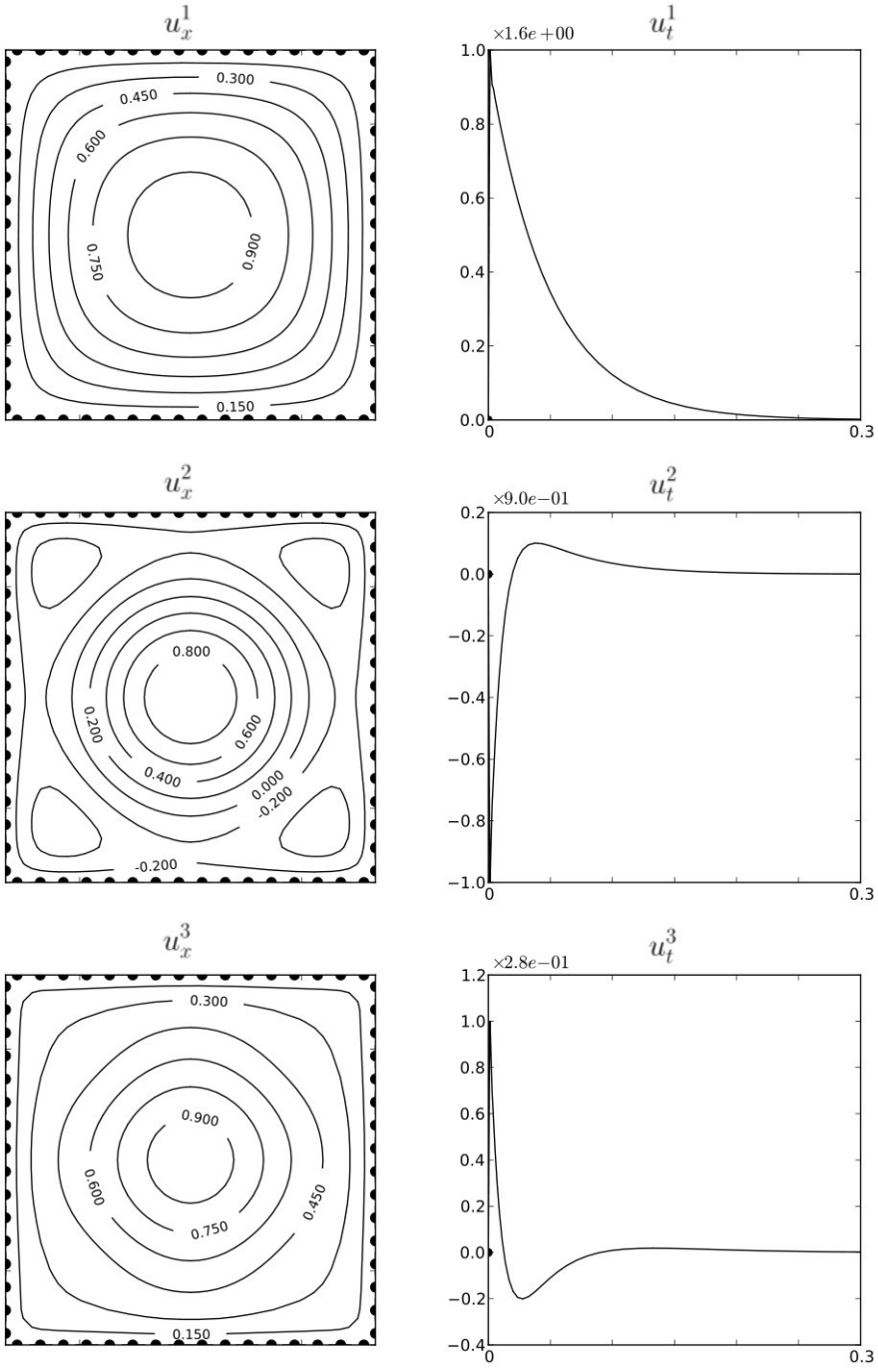


FIGURE 11.2.11 – Couples fonctionnels de u pour $n_\Gamma = 16$ et $n_\tau = 256$

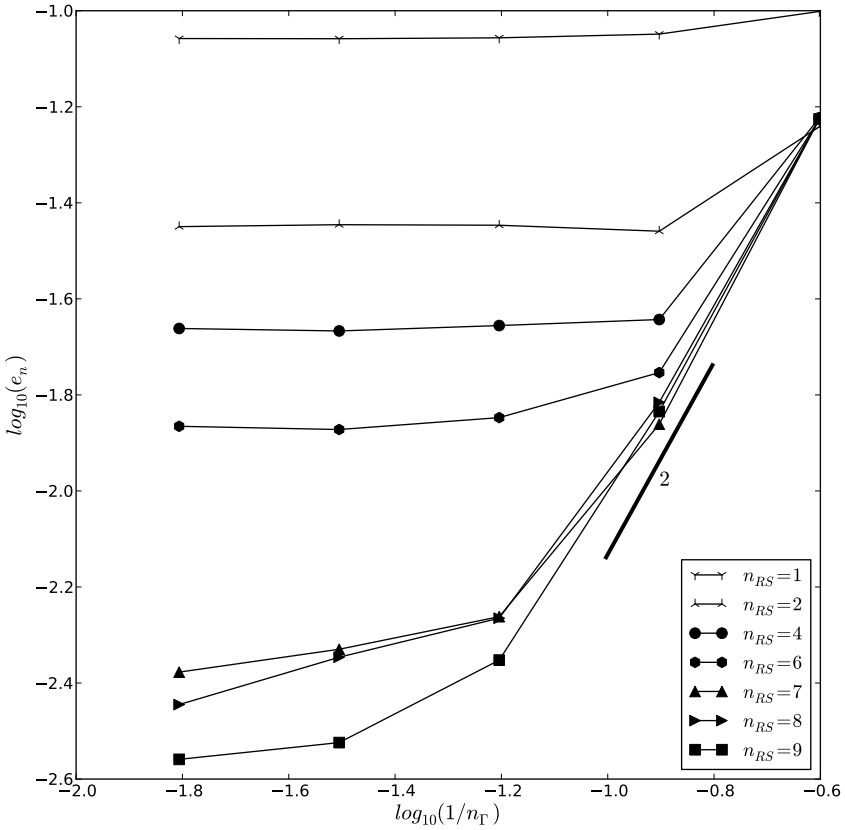


FIGURE 11.2.12 – Evolution de l'erreur e_n en fonction du degré d'approximation

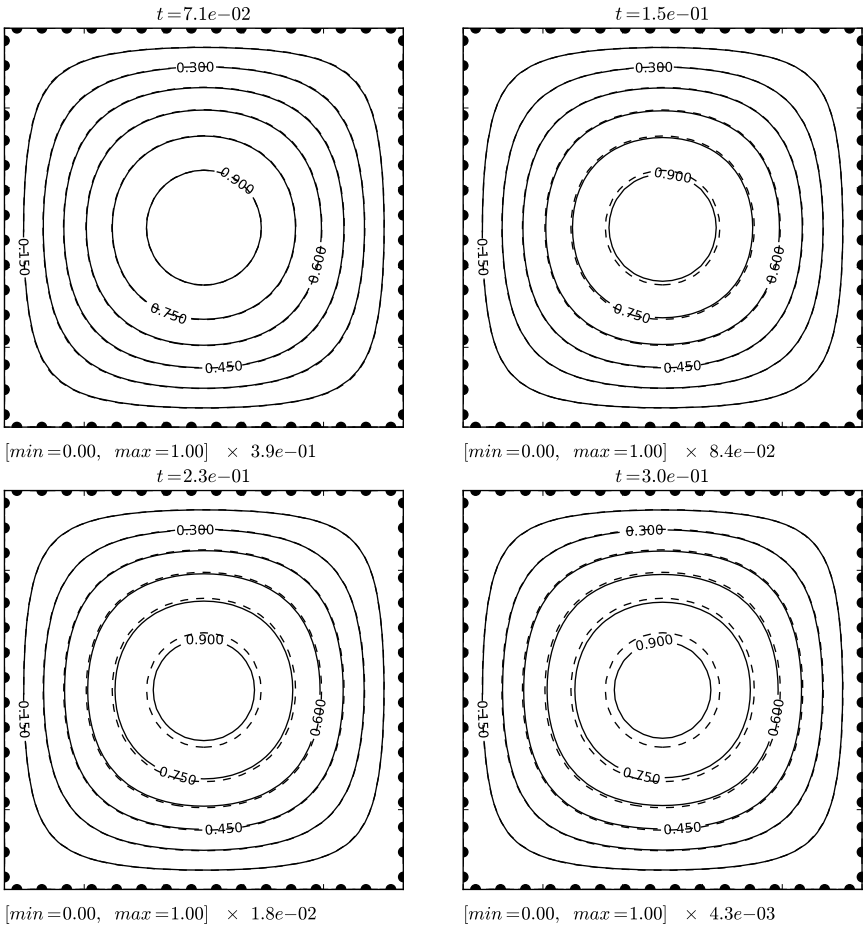


FIGURE 11.2.13 – Comparaison de la solution approchée et de la solution analytique (en pointillé)

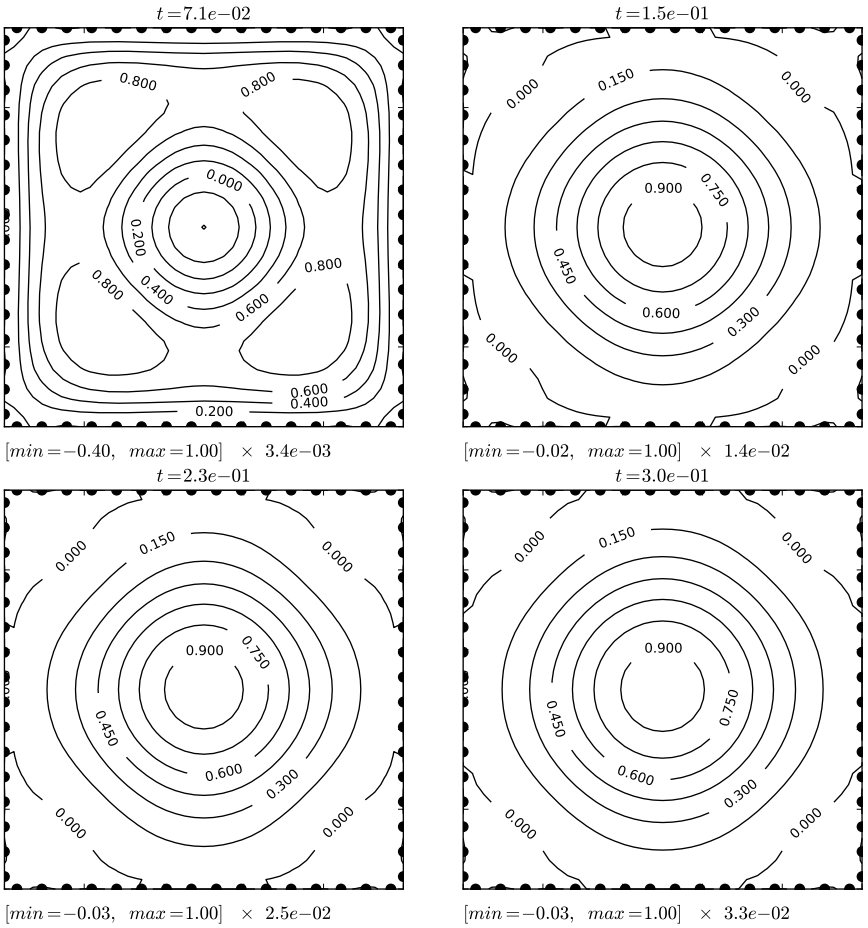


FIGURE 11.2.14 – Erreur d'approximation pour $t = \{0.071s, 0.15s, 0.23s, 0.3s\}$, $n_\Gamma = 16$ et $n_\tau = 256$

11.3 Terme source non linéaire

On s'intéresse maintenant à un problème dont le terme source est non linéaire

$$\begin{cases} \partial_t u - \Delta u = u^2(1-u) & \text{dans } I \times \Omega \\ u = u_{ref} & \text{sur } I \times \Gamma_D \\ u(t=0) = u_{ref}(t=0) & \text{dans } \Omega \end{cases}$$

où $\Omega = [0,1] \times [0,1]$, $I = [0,1]$ et u_{ref} est la solution analytique du problème posé dans $\mathbb{R}^2$, c'est à dire sans conditions aux limites. Cette solution est donnée par

$$u_{ref}(t,x) = \frac{\exp(\eta(t,x))}{2 + \exp(\eta(t,x))}$$

avec

$$\eta(t,x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(x + \frac{t}{\sqrt{2}})$$

Pour tenir compte de la non linéarité de $f(u) = u^2(1-u)$, on peut mettre à profit la procédure de point fixe de l'algorithme PGD-BEM déjà présente dans le cas linéaire. Le système 10.4 peut alors être réecrit de la manière suivante

$$\begin{cases} -\left(\int_0^T u_t^q u_t^q\right) \Delta u_x^{q+1} = -\left(\int_0^T \partial_t u_t^q u_t^q\right) u_x^q + \int_0^T \left(f\left(u_{n-1} + u_t^q u_x^q\right) - L(u_{n-1})\right) u_t^q \\ \left(\int_\Omega u_x^{q+1} u_x^{q+1}\right) \partial_t u_t^{q+1} - \left(\int_\Omega u_x^{q+1} \Delta u_x^{q+1}\right) u_t^{q+1} = \int_\Omega \left(f\left(u_{n-1} + u_t^q u_x^{q+1}\right) - L(u_{n-1})\right) u_x^{q+1} \end{cases}$$

L'algorithme de résolution de ce système est donc assez similaire au cas linéaire. Signalons tout de même que pour pouvoir calculer les projections du terme source en pratique, on doit disposer d'une formulation séparée de $f\left(u_{n-1} + u_t^q u_x^q\right)$ et de $f\left(u_{n-1} + u_t^q u_x^{q+1}\right)$. Nous avons ici pratiqué une SVD de ces termes à chaque itération, ce qui porte donc leur nombre total à $N \times Q$. Les temps de calcul sont forcément impactés par ce traitement supplémentaire, mais nous ne souhaitons montrer ici que la faisabilité de la méthode, son optimisation faisant l'objet d'un travail actuellement en progrès. La figure 11.3.15 compare les solutions approchées et analytiques, et la figure 11.3.16 trace l'erreur correspondante pour $t = \{0.24s, 0.5s, 0.76s, 1s\}$.

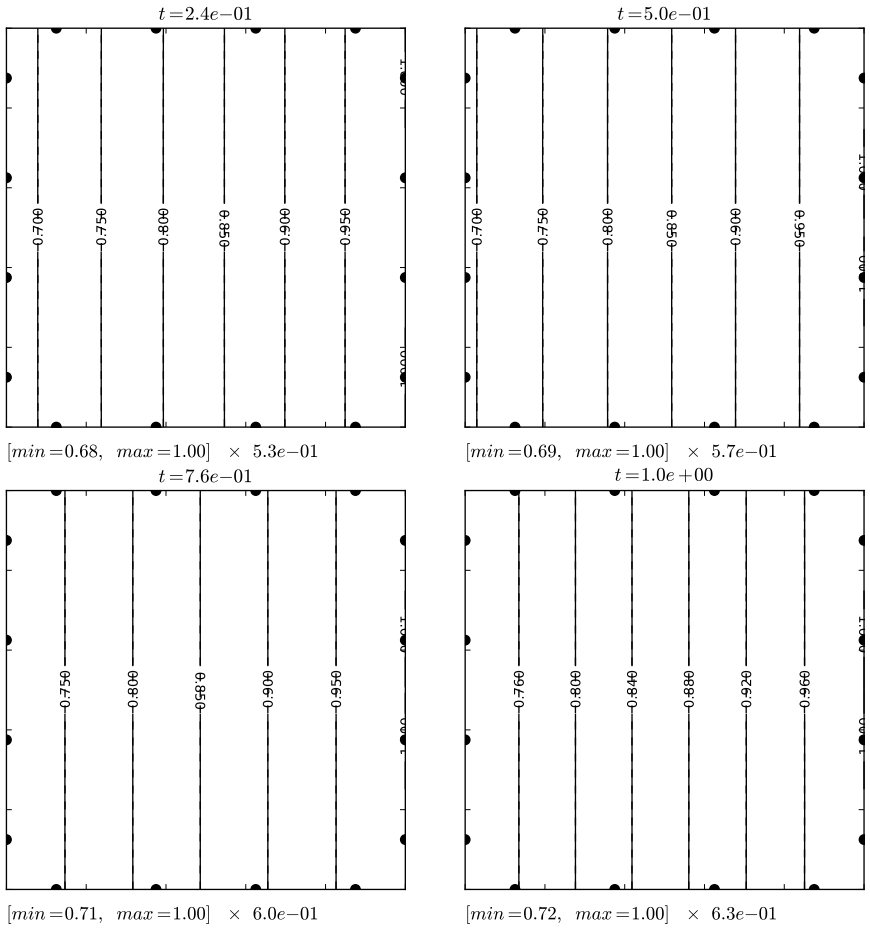


FIGURE 11.3.15 – Comparaison de la solution approchée et de la solution analytique (en pointillé)

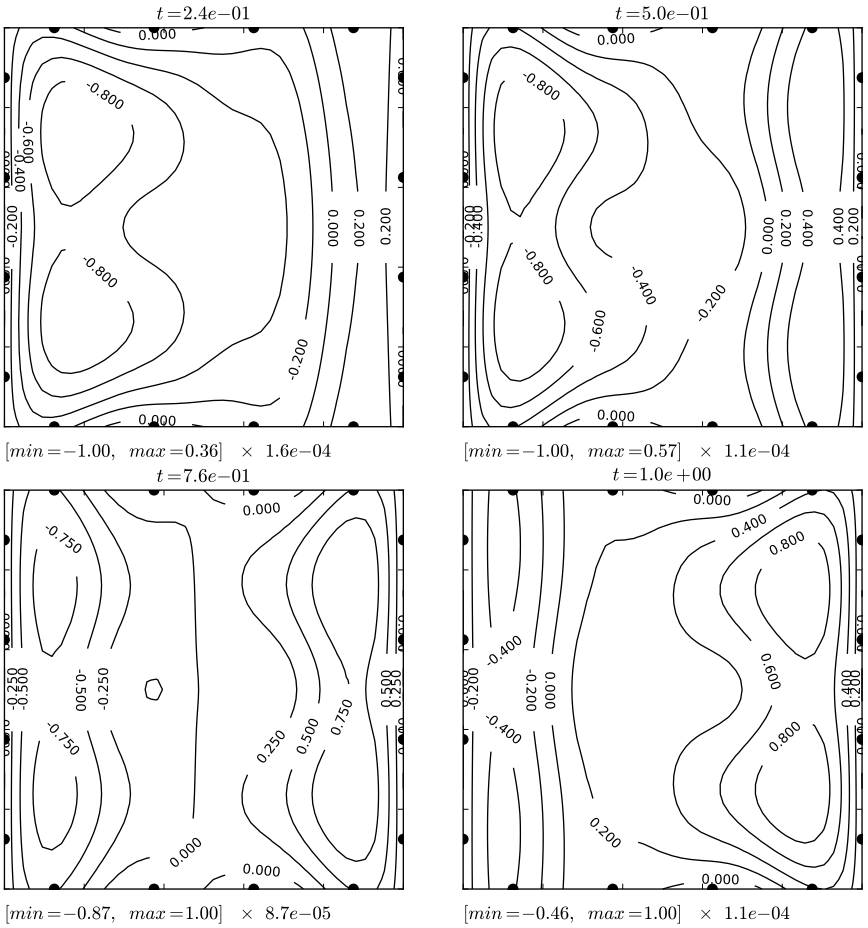


FIGURE 11.3.16 – Erreur d'approximation pour $t = \{0.24s, 0.5s, 0.76s, 1s\}$, $n_\Gamma = 4$ et $n_\tau = 256$

Chapitre 12

Conclusion et Perspectives

La méthode proposée dans cette partie permet de construire une formulation séparée de la solution, de manière non incrémentale en utilisant les éléments de frontière pour la partie spatiale. Elle permet donc de conserver les avantages géométriques des éléments de frontière, sans utiliser le noyau de la chaleur transitoire. Les problèmes de complexité et de coût de stockage liés à la convolution en temps sont de fait éliminés. Le caractère non incrémental de la méthode apporte un gain réellement significatif en temps de calcul, et permet d'atteindre des pas de temps très fins.

La gestion des conditions aux limites et initiales non homogènes demande une attention particulière. Les techniques introduites au chapitre 11 permettent de traiter des conditions aux limites de type Dirichlet et Neumann, dépendant de l'espace et du temps, ainsi que des données initiales quelconques. Une technique permettant de traiter les termes sources non linéaires a également été proposée. Elle donne des résultats d'une précision satisfaisante, mais nécessite quelques optimisations.

Un certain nombre de points doivent encore être étudiés avant de pouvoir utiliser cette méthode en contexte industriel. Parmi ceux-ci, il nous semble que les plus importants sont les conditions aux limites mixtes, l'aspect multi-domaines et les matériaux non linéaires. Voici donc quelques perspectives possibles au travail présenté dans cette partie.

12.1 Conditions aux limites mixtes

Les techniques proposées au chapitre 11 permettent de traiter des conditions aux limites non homogènes, mais uniquement de type Dirichlet ou Neumann. Un premier enjeu est donc de pouvoir gérer des conditions mixtes, c'est à dire

$$\varphi = h(u_{ref} - u) \tag{12.1}$$

au moins pour h et u_{ref} constants.

La difficulté réside dans le fait que la condition 12.1 implique à la fois la température

et le flux. Il n'est donc pas possible de l'isoler par un changement d'inconnue pour se ramener à des conditions homogènes. Mais il est peut-être possible d'appliquer cette condition à chaque couple de la décomposition, qui par linéarité la vérifira également. Considérons pour commencer le cas $u_{ref} = 0$, ou plus précisément le problème suivant

$$\begin{cases} \partial_t u - \Delta u = f \\ \partial_\nu u = -hu \\ u(t=0) = 0 \end{cases} \tag{12.2}$$

En reprenant les notations du chapitre 10, si l'on impose pour tout $1 \leq i \leq n$

$$\partial_\nu u_x^i(x) = -hu_x^i(x) \tag{12.3}$$

on aura également

$$u_t^i(t)\partial_\nu u_x^i(x) = -hu_t^i(t)u_x^i(x) \iff \partial_\nu u^i(t,x) = -hu^i(t,x)$$

et donc globalement

$$\partial_\nu u_n(t,x) = -hu_n(t,x)$$

Si maintenant u_{ref} et la donnée initiale ne sont pas nuls, c'est à dire que l'on considère le problème

$$\begin{cases} \partial_t u - \Delta u = f \\ \partial_\nu u = h(u_{ref} - u) \\ u(t=0) = u_0 \end{cases}$$

on peut employer la technique utilisée au chapitre 11 pour se ramener au problème 12.2.

On définit donc cette fois-ci la fonction $\hat{u}$ par $\hat{u}(t=0) = u_0$, et pour tout t positif fixé

$$\begin{cases} \Delta\hat{u}(t,x) = 0 \\ \partial_\nu\hat{u}(t,x) = h(u_{ref} - \hat{u}(t,x)) \end{cases}$$

On pourra donc ensuite chercher la fonction $v = u - \hat{u}$, qui vérifira bien

$$\partial_\nu v = \partial_\nu u - \partial_\nu\hat{u} = hu_{ref} - hu - hu_{ref} + h\hat{u}(t,x) = -hv$$

et bien sûr $v(t=0) = 0$.

Cette technique pourrait donc être appliquée à des problèmes impliquant à la fois des conditions aux limites de type Dirichlet, Neumann et mixtes. Il ne serait a priori pas génant que u_{ref} dépende de t et de x, puisque l'on pourrait toujours calculer $\hat{u}$. Par ailleurs la condition 12.3 aurait encore un sens si h dépendait de x. Par contre si h dépend de t, une autre approche doit être envisagée. C'est en particulier vrai si h dépend de u, ce qui est assez courant en pratique. Evidemment dans ce cas la non linéarité est une difficultée supplémentaire, puisque même si chaque couple vérifie la condition 12.1, la somme des couples ne la vérifira pas.

12.2 Problèmes multi-domaines

Le second point d'intérêt est l'aspect multi-domaines. Considérons tout d'abord le problème à deux domaines

$$\begin{cases} \partial_t u_1 - \lambda_1 \Delta u_1 = f_1 & \text{dans } \Omega_1 \\ \partial_t u_2 - \lambda_2 \Delta u_2 = f_2 & \text{dans } \Omega_2 \end{cases}$$

muni des conditions aux limites

$$\begin{cases} u_1 = 0 & \text{sur } \Gamma_1 \setminus \Gamma_2 \\ u_2 = 0 & \text{sur } \Gamma_2 \setminus \Gamma_1 \\ u_1 - u_2 = R\partial_\nu u_1 & \text{sur } \Gamma_1 \cap \Gamma_2 \\ \lambda_1 \partial_\nu u_1 = \lambda_2 \partial_\nu u_2 & \text{sur } \Gamma_1 \cap \Gamma_2 \end{cases}$$

pour une constante R positive ou nulle, et des données initiales

$$\begin{cases} u_1(t=0) = 0 & \text{dans } \Omega_1 \\ u_2(t=0) = 0 & \text{dans } \Omega_2 \end{cases}$$

Les conditions de raccordement aux interfaces ont ceci de commun aux conditions aux limites mixtes qu'on ne peut pas les isoler par un changement d'inconnue, car elles impliquent à la fois la température et le flux. On peut donc là aussi penser à les imposer à chaque couple de la décomposition, c'est à dire tout d'abord aux fonctions spatiales

$$\begin{cases} u^i_{x,1} - u^i_{x,2} = R\partial_\nu u^i_{x,1} & \text{sur } \Gamma_1 \cap \Gamma_2 \\ \lambda_1 \partial_\nu u^i_{x,1} = \lambda_2 \partial_\nu u^i_{x,2} & \text{sur } \Gamma_1 \cap \Gamma_2 \end{cases}$$

pour tout $1 \leq i \leq n$.

Si l'on ajoute maintenant les fonctions temporelles à la seconde condition, on aura en particulier

$$\lambda_1 u^i_{t,1}(t) \partial_\nu u^i_{x,1}(x) = \lambda_2 u^i_{t,2}(t) \partial_\nu u^i_{x,2}(x)$$

et donc

$$\lambda_1 u^i_{t,1}(t) = \lambda_2 u^i_{t,2}(t)$$

Cette démarche aboutit donc à deux obligations : les fonctions en temps doivent être communes aux différents domaines, et le nombre de couples de chaque décomposition doit être le même. A l'évidence cela n'est pas optimal, et l'on obtiendra donc une décomposition globale assez éloignée de ce que donnerait a posteriori une SVD sur la solution du problème. Cependant si la méthode converge malgré la globalité des fonctions temporelles, cela peut permettre de traiter des problèmes multi-domaines assez simplement.

Concernant les conditions aux limites et initiales plus générales, la technique introduite au chapitre 11 et généralisée dans la section précédente s'étend assez naturellement aux problèmes multi-domaines. En effet, si l'on a maintenant

$$\begin{cases} CL_1(u_1) & \text{sur } \Gamma_1 \setminus \Gamma_2 \\ CL_2(u_2) & \text{sur } \Gamma_2 \setminus \Gamma_1 \\ u_1 - u_2 = R\partial_\nu u_1 & \text{sur } \Gamma_1 \cap \Gamma_2 \\ \lambda_1 \partial_\nu u_1 = \lambda_2 \partial_\nu u_2 & \text{sur } \Gamma_1 \cap \Gamma_2 \end{cases}$$

où CL_1 et CL_2 peuvent être de type Dirichlet, Neumann ou mixte, et les données initiales

$$\begin{cases} u_1(t=0) = u_{0,1} & \text{dans } \Omega_1 \\ u_2(t=0) = u_{0,2} & \text{dans } \Omega_2 \end{cases}$$

on peut à nouveau définir les relèvements harmoniques $\hat{u_1}$ et $\hat{u_2}$ vérifiant l'ensemble de ces conditions.

On aura alors bien, pour $v_1 = u_1 - \hat{u_1}$ et $v_2 = u_2 - \hat{u_2}$

$$\begin{cases} v_1 - v_2 = u_1 - \hat{u_1} - u_2 + \hat{u_2} = R\partial_\nu u_1 - R\partial_\nu \hat{u_1} = R\partial_\nu v_1 \\ \lambda_1 \partial_\nu v_1 = \lambda_1 \partial_\nu u_1 - \lambda_1 \partial_\nu \hat{u_1} = \lambda_2 \partial_\nu u_2 - \lambda_2 \partial_\nu \hat{u_2} = \lambda_2 dn v_2 \end{cases}$$

et les conditions aux limites et initiales souhaitées pour v_1 et v_2.

12.3 Matériaux non linéaires

Une dernière perspective intéressante concerne les matériaux non linéaires, en particulier en temps court, et ce point fait l'objet de travaux actuellement en progrès. Considérons un problème où la seule difficulté réside dans la non linéarité de l'équation

$$\begin{cases} F(u) = \rho(u) C_p(u) \partial_t u - \text{div}\,(\lambda(u) \nabla u) = f \\ u = 0 \text{ ou } \partial_\nu u = 0 \\ u(t=0) = 0 \end{cases} \tag{12.4}$$

La non linéarité impose de réecrire en partie la procédure de séparation du chapitre 10. Cependant l'idée de départ reste la projection de $f - F(u_n)$ sur l'espace E^n, défini par

$$E^n = \{v \in V | v = u_t^n v_x + u_x^n v_t, v_x \in V_x, v_t \in V_t\}$$

L'objet n'est pas ici de préciser exactement le cadre fonctionnel approprié. V doit donc simplement être un espace vectoriel normé auquel appartient la solution u du problème. Les espaces V_t et V_x, dans lesquels on cherche respectivement les fonctions u_t^n et u_x^n, doivent être suffisamment réguliers pour que les écritures aient un sens. Enfin les combinaisons linéaires d'éléments de $V_t \otimes V_x$ doivent être denses dans V. On peut alors réecrire le système de départ

$$\begin{cases} \displaystyle\int_0^T \int_\Omega F(u_{n-1} + u_t^n u_x^n) u_t^n v_x = \int_0^T \int_\Omega f u_t^n v_x & \text{pour tout } v_x \in V_x \\ \displaystyle\int_0^T \int_\Omega F(u_{n-1} + u_t^n u_x^n) u_x^n v_t = \int_0^T \int_\Omega f u_x^n v_t & \text{pour tout } v_t \in V_t \end{cases}$$

Rappelons que notre objectif est d'aboutir à deux formulations fortes séparées. En l'état ce système va propager la non linéarité sur les termes dérivés aussi bien en temps qu'en espace. Or on sait que l'on aura toujours moins de difficultés pour résoudre l'équation différentielle en temps, que l'équation aux dérivées partielles en espace. Il est donc peut-être judicieux d'appliquer tout d'abord la transformée de Kirchhoff au problème 12.4, afin de localiser l'ensemble de la non linéarité sur la dérivée en temps. Avec les mêmes notations qu'au chapitre 6, on obtiendra donc le problème transformé

$$\begin{cases} \dfrac{1}{\alpha(u)}\partial_t\psi - \Delta\psi = f \\ \psi = 0 \\ \psi(t=0) = 0 \end{cases}$$

Pour clarifier la suite de la procédure, on note

$$\beta = \frac{1}{\alpha \circ \Lambda^{-1}}$$

où Λ^{-1} désigne la transformée de Kirchhoff inverse, et on introduit la fonctionnelle G définie par

$$G(\varphi, \psi) = \beta(\varphi)\partial_t\psi - \Delta\psi$$

pour isoler la non linéarité du problème. Ainsi l'équation transformée s'écrit

$$G(\psi, \psi) = \beta(\psi)\partial_t\psi - \Delta\psi = f$$

La projection sur E_n nous donne maintenant le système suivant

$$\begin{cases} \displaystyle\int_0^T\int_\Omega G(\psi_n, \psi^n)\psi_t^n v_x = \int_0^T\int_\Omega \left(f - G(\psi_n, \psi_{n-1})\right)\psi_t^n v_x \\ \displaystyle\int_0^T\int_\Omega G(\psi_n, \psi^n)\psi_x^n v_t = \int_0^T\int_\Omega \left(f - G(\psi_n, \psi_{n-1})\right)\psi_x^n v_t \end{cases}$$

pour toutes fonctions test v_t, v_x, et avec des notations similaires aux précedentes, c'est à dire

$$\psi^n = \psi_t^n\psi_x^n \quad \text{et} \quad \psi_n = \sum_{i=1}^n \psi^i$$

On omet maintenant l'exposant n de ψ^n, ψ_t^n et ψ_x^n pour écrire le système de formulations fortes

$$\begin{cases} \left(\displaystyle\int_0^T \beta(\psi_n)\psi_t\partial_t\psi_t\right)\psi_x - \left(\int_0^T \psi_t\psi_t\right)\Delta\psi_x = \int_0^T \left(f - G(\psi_n, \psi_{n-1})\right)\psi_t \\ \left(\displaystyle\int_\Omega \beta(\psi_n)\psi_x\psi_x\right)\partial_t\psi_t - \left(\int_\Omega \psi_x\Delta\psi_x\right)\psi_t = \int_\Omega \left(f - G(\psi_n, \psi_{n-1})\right)\psi_x \end{cases} \tag{12.5}$$

On voit donc que la transformée de Kirchhoff permet d'aboutir à une équation spatiale relativement simple, où la non linéarité porte sur le terme non dérivé. Cette non linéarité peut ensuite être traitée de manière itérative, au cours de la procédure de point fixe permettant de résoudre le système 12.5. Si de la même manière qu'au chapitre 10, on note (ψ_t^q, ψ_x^q) le couple obtenu à la $q^{\text{ième}}$ itération de cette procédure, et

$$\begin{cases} \psi_n^q = \psi_{n-1} + \psi_t^q \psi_x^q \\ \psi_n^{q,q+1} = \psi_{n-1} + \psi_t^q \psi_x^{q+1} \\ a^q = \displaystyle\int_0^T \psi_t^q \psi_t^q \\ b^q = \displaystyle\int_\Omega \psi_x^{q+1} \Delta \psi_x^{q+1} \end{cases}$$

on peut linéariser le système 12.5 de la manière suivante

$$\begin{cases} -a^q \Delta \psi_x^{q+1} = \displaystyle\int_0^T \left(f - G(\psi_n^q, \psi_{n-1})\right) \psi_t^q - \left(\int_0^T \beta(\psi_n^q) \psi_t^q \partial_t \psi_t^q\right) \psi_x^q \\ \left(\displaystyle\int_\Omega \beta(\psi_n^{q,q+1}) \psi_x^{q+1} \psi_x^{q+1}\right) \partial_t \psi_t^{q+1} - b^q \psi_t^{q+1} = \int_\Omega \left(f - G(\psi_n^{q,q+1}, \psi_{n-1})\right) \psi_x^{q+1} \end{cases}$$

En pratique, pour pouvoir calculer les intégrales, les terme $\beta(\psi_n^q)$ et $\beta(\psi_n^{q,q+1})$ doivent être décomposés sous forme de produits tensoriels. On peut par exemple leur appliquer une SVD, comme dans le cas du terme source non linéaire traité au chapitre 11. L'équation spatiale peut alors être résolue par la méthode des éléments de frontière de la même manière qu'au chapitre 10. L'équation en temps est un peu plus complexe que dans le cas linéaire, mais elle reste un problème unidimensionnel. Rappelons qu'à la fin de l'algorithme, la solution u du problème 12.4 est donné par la transformée de Kirchhoff inverse

$$u = \Lambda^{-1}\left(\sum_{i=1}^{N} \psi_t^i \psi_x^i\right)$$

Pour terminer, évoquons le cas de conditions aux limites et initiales plus générales que celle du problème 12.4. Dans le cas de conditions aux limites de type Dirichlet ou Neumann, la technique du changement d'inconnue peut s'appliquer sans trop de difficulté. En effet si l'on a

$$\begin{cases} u = \overline{u} & \text{sur } \Gamma_D \\ \lambda(u) \partial_\nu u = \overline{q} & sur \Gamma_N \end{cases}$$

on obtient pour la variable ψ

$$\begin{cases} \psi = \overline{\psi} := \Lambda(\overline{u}) & \text{sur } \Gamma_D \\ \partial_\nu \psi = \overline{q} & \text{sur } \Gamma_N \end{cases}$$

Il n'y a donc aucune non linéarité dans les conditions aux limites transformées. On peut ensuite définir comme dans les sections précédentes le relèvement harmonique $\hat{\psi}$, et appliquer le changement d'inconnue $\theta = \psi - \hat{\psi}$ pour homogénéiser le problème. Maintenant l'équation en la variable ψ qui s'écrivait

$$G(\psi, \psi) = \beta(\psi) \partial_t \psi - \Delta \psi = f$$

va devenir en la variable θ

$$G(\theta + \hat{\psi}, \theta) = \beta(\theta + \hat{\psi}) \partial_t \theta - \Delta \theta = f - \beta(\theta + \hat{\psi}) \partial_t \hat{\psi}$$

Sans détailler plus avant, on voit que ni la perturbation $\hat{\psi}$ en la première variable de G, ni la non linéarité du terme source ne vont modifier significativement l'algorithme décrit dans cette section. On peut en fait directement réécrire le système 12.5, et seules quelques adaptations seront ensuite nécessaires dans la procédure de point fixe.

Le cas de conditions mixtes est par contre tout à fait différent, car alors les conditions aux limites en ψ deviennent non linéaires. En effet

$$\lambda(u)\partial_\nu u = h(u_{ref} - u) \iff \partial_\nu \psi = h(u_{ref} - \Lambda^{-1}(\psi))$$

Comme dans le cas des conditions aux limites mixtes avec h dépendant de u, le changement d'inconnue n'est plus une solution. Ce type de problèmes reste donc à étudier.

Chapitre 13

Conclusion Générale

Ce travail a porté sur la simulation thermique de composants électroniques. Dans une première partie, nous avons utilisé la méthode des éléments de frontière transitoire pour faire avancer la problématique industrielle motivant cette thèse. Une formulation intégrale adaptative a été introduite. Celle-ci permet de simuler des modèles réalistes de composants pour des pas de temps supérieurs à la milliseconde, en réduisant significativement les temps de calculs de la méthode standard. Pour les pas de temps plus fins, compris entre la nanoseconde et la milliseconde, la formulation adaptative a été généralisée pour développer une approche multi-échelles. Cela permet de simuler l'impact de phénomènes localisés en espace-temps sur la thermique globale d'un composant. L'ensemble de ces procédures ont été automatisées et implémentées dans un code de calcul industriel unifié.

Dans une seconde partie, une approche alternative a été développée. Elle permet de conserver une base éléments de frontière sans utiliser le noyau de la chaleur transitoire. De plus le coût de cette méthode est quasi-indépendant de la taille du pas de temps, car elle construit une représentation séparée de la solution de manière non incrémentale. Elle apporte donc un gain significatif en temps de calcul. Cette méthode n'est pas encore utilisable pour simuler des modèles industriels, mais certaines avancées ont été faites en ce sens, notamment dans la gestion des conditions aux limites. Les perspectives possibles à ce travail et le fort potentiel de cette méthode laissent présager d'une future application industrielle.

Annexe A

Intégration du noyau de la chaleur

A.1 Critères d'intégrabilité

On démontre ici la

Proposition A.1.1 *Soit $0 < t_0 < t$, $\varepsilon > 0$, $x \in \mathbb{R}^d$ et B la boule de rayon ε centrée en x. Alors le noyau de la chaleur*

$$g(t,y) = \frac{1}{(4\pi t)^{\frac{d}{2}}} \prod_{i=1}^{d} \exp\left(-\frac{y^2}{4\lambda_i t}\right)$$

vérifie

$$\int_{t_0}^{t}\int_{B} g^p(t-s,x-y)dyds < +\infty \iff 1 \leq p < \frac{d+2}{d}$$

et pour tout $p \geq 1$

$$\int_{t_0}^{t}\int_{\Omega} \partial_t g^p(t-s,x-y)dyds = \int_{t_0}^{t}\int_{\Omega} \Delta g^p(t-s,x-y)dyds = +\infty$$

Preuve : On se limite à l'étude du cas $(t_0,x) = (0,0)$ et $\lambda_i = \frac{1}{4}$ pour $1 \leq i \leq d$, auquel on peut toujours se ramener par changement de variable. On considère donc l'intégrale

$$\begin{aligned}\int_0^t \int_B g^p(s,y)dyds &= \int_0^t \frac{1}{(4\pi s)^{\frac{pd}{2}}} \int_B \exp\left(-p\frac{|y|^2}{s}\right) dyds \\ &\propto \int_0^t \frac{1}{s^{\frac{pd}{2}}} \int_B \exp\left(-p\frac{|y|^2}{s}\right) dyds\end{aligned}$$

Le passage en coordonnées polaires nous donne

$$\int_0^t \int_B g^p(s,y)dyds \propto \int_0^t \frac{1}{s^{\frac{pd}{2}}} \int_0^{\varepsilon} \exp\left(-p\frac{r^2}{s}\right) r^{d-1} dyds$$

et le changement de variable $\xi = \frac{r}{\sqrt{s}}$ conduit à

$$\begin{aligned}\int_0^t \int_B g^p(s,y)dyds &\propto \int_0^t \frac{1}{s^{\frac{pd}{2}}} \int_0^{\frac{\varepsilon}{\sqrt{s}}} s^{\frac{d-1}{2}} \xi^{d-1} \exp\left(-p\xi^2\right) \sqrt{s} d\xi ds \\ &= \int_0^t \frac{1}{s^{\frac{(p-1)d}{2}}} \int_0^{\frac{\varepsilon}{\sqrt{s}}} \xi^{d-1} \exp\left(-p\xi^2\right) d\xi ds\end{aligned}$$

Maintenant au voisinage de $s = 0$ on a

$$\int_0^{\frac{\varepsilon}{\sqrt{s}}} \xi^{d-1} \exp\left(-p\xi^2\right) d\xi \sim \int_0^{+\infty} \xi^{d-1} \exp\left(-p\xi^2\right) d\xi$$

et donc au sens de la proportionnalité

$$\frac{1}{s^{\frac{(p-1)d}{2}}} \int_0^{\frac{\varepsilon}{\sqrt{s}}} \xi^{d-1} \exp\left(-p\xi^2\right) d\xi \sim \frac{1}{s^{\frac{(p-1)d}{2}}}$$

d'où finalement

$$\int_0^t \int_B g^p(s,y)dyds < +\infty \iff \frac{(p-1)d}{2} < 1 \iff p < \frac{d+2}{d}$$

Pour la seconde intégrale, on utilise l'identité

$$\partial_t g(t,y) = \left(\sum_{i=1}^{d} \frac{y^2}{4\lambda_i t^2} - \frac{d}{2t}\right) g(t,y)$$

pour aboutir par un calcul similaire à

$$\int_0^t \int_B \partial_t g^p(s,y)dyds < +\infty \iff \frac{(p-1)d}{2} + 1 < 1 \iff p < 1$$

ce qui termine la preuve.

A.2 Intégration analytique de la singularité

Dans le cas particulier de mailles rectangulaires, il est possible d'intégrer analytiquement la partie spatiale du noyau de la chaleur sur Γ, pour obtenir une intégrale en temps du type

$$\int_0^t \frac{z^n}{t^{\frac{n+1}{2}}} \exp\left(-\frac{z^2}{4t}\right) \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{t}}\right) \operatorname{erf}\left(\frac{y}{2\sqrt{t}}\right) dt$$

avec $n = 0$ pour l'intégrale du noyau, et $n = 1$ pour l'intégrale de sa dérivée normale. Pour une intégration numérique, le cas $n = 0$ et $z = 0$ est le plus problématique, car l'intégrande est alors équivalente au voisinage de $t = 0$ à $\frac{1}{\sqrt{t}}$. Mais d'une manière générale même si la limite en $t = 0$ est nulle, le comportement au voisinage du point de maximum $t = \frac{z^2}{2(n+1)}$ est souvent quasi-singulier. On extrait donc cette singularité en intégrant numériquement la fonction

$$\frac{z^n}{t^{\frac{n+1}{2}}} \exp\left(-\frac{z^2}{4t}\right) \left(\operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{t}}\right) \operatorname{erf}\left(\frac{y}{2\sqrt{t}}\right) - 1\right)$$

qui tends toujours vers zéro à l'origine de manière régulière. Il reste ensuite à ajouter la partie singulière, qui s'intègre analytiquement. On a en effet

$$\int_0^t \frac{z^n}{t^{\frac{n+1}{2}}} \exp\left(-\frac{z^2}{4t}\right) dt = \begin{cases} 2\left(\sqrt{t}\exp\left(-\frac{z^2}{4t}\right)\right. & \\ \left. +z\sqrt{\pi}\left(\operatorname{erf}\left(\frac{z}{2\sqrt{t}}\right) - \operatorname{sgn}(z)\right)\right) & \text{si } n = 0 \\ \sqrt{\pi}\left(\operatorname{erf}\left(\frac{z}{2\sqrt{t}}\right) - \operatorname{sgn}(z)\right) & \text{si } n = 1 \end{cases}$$

Bibliographie

[Abb06] S. Abbasbandy. The application of homotopy analysis method to nonlinear equations arising in heat transfer. *Physics Letters A*, 360 :109–113, 2006.

[AC08] M. I. Azis and D. L. Clements. Nonlinear transient heat conduction problems for a class of inhomogeneous anisotropic materials by bem. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 32 :1054–1060, 2008.

[AC09] W-T Ang and D. L. Clements. Nonlinear heat equation for nonhomogeneous anisotropic materials : A dual-reciprocity boundary element solution. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 26 :771–784, 2009.

[ACB92] Y. Abousleiman, A. H-D. Cheng, and T. Badmus. A laplace transform bem for axisymmetric diffusion utilizing pre-tabulated green's function. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 9(1) :39–46, 1992.

[ACJ08] A. Ammar, F. Chinesta, and P. Joyot. The nanometric and micrometric scales of the structure and mechanics of materials revisited : An introduction to the challenges of fully deterministic numerical descriptions. *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, 6(3) :191–213, 2008.

[AF03] R. A. Adams and J. J. F. Fournier. *Sobolev Spaces*, volume 140. Elsevier, second edition, 2003.

[AMCK06] A. Ammar, B. Mokdad, F. Chinesta, and R. Keunings. A new family of solvers for some classes of multidimensional partial differential equations encountered in kinetic theory modeling of complex fluids. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 139(3) :153–176, 2006.

[AMCK07] A. Ammar, B. Mokdad, F. Chinesta, and R. Keunings. A new family of solvers for some classes of multidimensional partial differential equations encountered in kinetic theory modelling of complex fluids : Part ii : Transient simulation using space-time separated representations. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 144(2-3) :98–121, 2007.

[AND+10] A. Ammar, M. Normandin, F. Daim, D. Gonzalez, E. Cueto, and F. Chinesta. Non incremental strategies based on separated representations : Applications in computational rheology. *Communications in Mathematical Sciences*, 8(3) :671–695, 2010.

[AP05] Y. Achdou and O. Pironneau. *Computational Methods for Option Pricing (Frontiers in Applied Mathematics)*. Society for Industrial and Applied Mathematic, 2005.

[ARCK06] A. Ammar, D. Ryckelynck, F. Chinesta, and R. Keunings. On the reduction of kinetic theory models related to finitely extensible dumbbells. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 134(1-3) :136–147, 2006. 2nd Annual European Rheology Conference.

[Bar07] S. Barmada. Improving the performance of the boundary element method with time-dependent fundamental solutions by the use of a wavelet expansion in the time domain. *Int. J. Numer. Meth. Engng*, 71 :363–378, 2007.

[BCG92] T. Badmus, A. H-D. Cheng, and S. Grilli. A laplace-transform-based three-dimensional bem for poroelasticity. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 36(1) :67–85, 1992.

[BG04] H-J. Bungartz and M. Griebel. Sparse grids. *Acta Numerica*, 13 :147–269, 2004.

[BLM09] C. Le Bris, T. Lelièvre, and Y. Maday. Results and questions on a nonlinear approximation approach for solving high-dimensional partial differential equations. *Constructive Approximation*, 30(3) :621–651, 2009.

[BM05] G. Beylkin and M. J. Mohlenkamp. Algorithms for numerical analysis in high dimensions. *SIAM J. Sci. Comput.*, 26(6) :2133–2159, 2005.

[Bon99] M. Bonnet. *Boundary integral equation methods for solids and fluids*. John Wiley & Sons, 1999.

[BSD08] G. Beer, I. Smith, and C. Duenser. *The boundary element method with programming*. Springer, 2008.

[CAC09] F. Chinesta, A. Ammar, and E. Cueto. Proper generalized decomposition of multiscale models. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2009.

[CAFL07] F. Chinesta, A. Ammar, A. Falco, and M. Laso. On the reduction of stochastic kinetic theory models of complex fluids. *Modeling Simulation in Materials Science Engineering*, 15 :639–652, 2007.

[CAL+08] F. Chinesta, A. Ammar, F. Lemarchand, P. Beauchene, and F. Boust. Alleviating mesh constraints : Model reduction, parallel time integration and high resolution homogenization. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 197(5) :400–413, 2008. Enriched Simulation Methods and Related Topics.

[CDK+03] E. Cancès, M. Defranceschi, W. Kutzelnigg, C. Le Bris, and Y. Maday. *Computational Quantum Chemistry : a primer*, volume X, pages 3–270. Handbook of Numerical Analysis, Elsevier, 2003.

[Cha87] A. Chaudouet. Three-dimensional transient thermo-elastic analyses by the bie method. *J. Num. Meth. Eng.*, 24 :25–45, 1987.

[CJ86] H. S. Carslaw and J. C. Jaeger. *Conduction of Heat in Solids*. Oxford University Press, USA, second edition, April 1986.

[CKC73] Y. P. Chang, C. S. Kang, and D. J. Chen. The use of fundamental green's functions for the solutions of problems of heat conduction in anisotropic media. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 16 :1905–1918, 1973.

[Col90] C. J. Coleman. A boundary element approach to some nonlinear equations from fluid mechanics. *Computational Mechanics*, 6 :197–202, 1990.

[Fra94] J. P. Fradin. *Application de la méthode éléments de frontière au calcul des conductances dans le cadre du controle thermique des engins spatiaux*. PhD thesis, ENSMA, 1994.

[Gan06] D. D. Ganji. The application of he's homotopy perturbation method to nonlinear equations arising in heat transfer. *Physics Letters A*, 355 :337–341, 2006.

[GS96] T. Goto and M. Suzuki. A boundary integral equation method for nonliinear heat conduction problems with temperature-dependent material properties. *Int. J. Heat Mass Transfer.*, 39(4) :823–830, 1996.

[HW08] G. C. Hsiao and W. L. Wendland. *Boundary Integral Equations*, volume 164. Springer, applied mathematical sciences edition, 2008.

[Lad99] P. Ladevèze. *Nonlinear Computational Structural Mechanics : New Approaches and Non-Incremental Methods of Calculation*. Mechanical Engineering Series. Springer, 1999.

[LC91] J. Y. Lin and H. T. Chen. Hybrid laplace transform technique for nor-linear transient thermal problems. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 34 :1301–1308, 1991.

[Lia95] S. Liao. The quite general bem for strongly non-linear problems. *Transactions on Modelling and Simulation*, 10 :67–74, 1995.

[Lia97] S. Liao. General boundary element method for non-linear heat transfer problems governed by hyperbolic heat conduction equation. *Computational Mechanics*, 20 :397–406, 1997.

[Lia10] S. Liao. An optimal homotopy-analysis approach for strongly nonlinear differential equations. *Communications in Nonlinear Science Numerical Simulation*, 15 :2003–2016, 2010.

[LM72] J. L. Lions and E. Magenes. *Non-homogeneous boudary value problems and applications*. 1972.

[LN06] Y. J. Liu and N. Nishimura. The fast multipole boundary element method for potential problems : A tutorial. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 30 :371–381, 2006.

[LPN10] P. Ladevèze, J. C. Passieux, and D. Neron. The latin multiscale computational method and the proper orthogonal decomposition. *Computer Methods in Applied Mechanics Engineering*, 199(21-22) :1287–1296, 2010.

[LS07] Y. J. Liu and L. Shen. An adaptive fast multipole boundary element method for three-dimensional potential problems. *Comput. Mech.*, 39 :681–691, 2007.

[MPAC07] B. Mokdad, E. Pruliere, A. Ammar, and F. Chinesta. On the simulation of kinetic theory models of complex fluids using the fokker-planck approach. *Applied Rheology*, 17(2) :1–14, 2007.

[MR05] Y. Maday and E. M. Ronquist. The reduced basis element method : Application to a thermal fin problem. *SIAM J. Sci. Comput.*, 26(1) :240–258, 2005.

[NN94] A. J. Nowak and A. C. Neves, editors. *The Multiple Reciprocity Boundary Element Method (Computational Engineering)*. WIT Press, 1994.

[Nou10] A. Nouy. A priori model reduction through proper generalized decomposition for solving time-dependent partial differential equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199(23-24) :1603–1626, 2010.

[PC96] H. M. Park and D. H. Cho. The use of the karhunen-loève decomposition for the modelling of distributed parameter systems. *Chem. Engineer. Science*, 51 :81–98, 1996.

[RCCA06] D. Ryckelynck, F. Chinesta, E. Cueto, and A. Ammar. On the a priori model reduction : Overview and recent developments. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 13(1) :91–128, Mar 2006.

[RHCA05] D. Ryckelynck, L. Hermanns, F. Chinesta, and E. Alarcón. An efficient "a priori" model reduction for boundary element models. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 29(8) :796–801, 2005.

[RS95] T. M. Rassias and J. Simsa. *Finite Sums Decompositions in Mathematical Analysis*. John Wiley & Sons Inc, 1995.

[Ryc05] D. Ryckelynck. A priori hyperreduction method : an adaptive approach. *Journal of Computational Physics*, 202(1) :346–366, 2005.

[SdH04] Erwin Stein, René de Borst, and Thomas J.R. Hughes, editors. *Encyclopedia of Computational Mechanics*, volume 1. Wiley, 2004.

[Tau07] J. Tausch. A fast method for solving the heat equation by layer potentials. *Journal of Computational Physics*, (224) :956–969, 2007.

[TGHG07] N. Tolou, D. D. Ganji, M. J. Hosseini, and Z. Z. Ganji. Application of homotopy perturbation method in nonlinear heat diffusion-convection-reaction equations. *The Open Mechanics Journal*, 1 :20–25, 2007.

[WLZ05] Y. Y. Wu, S. J. Liao, and X. Y. Zhao. Some notes on the general boundary element method for highly nonlinear problems. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 10 :725–735, 2005.

[Wro01] L. C. Wrobel. *The boundary element method : applications in thermo-fluids and acoustics*. John Wiley & sons, 2001.

[Yos01] K-I Yoshida. *Applications of Fast Multipole Method to Boundary Integral Equation Method*. PhD thesis, Dept. of Global Environment Eng. Kyoto Univ., Japan, 2001.

[ZPTC91] R. Zheng, N. Phan-Thien, and C. J. Coleman. A boundary element approach for non-linear boundary-value problems. *Computational Mechanics*, 8 :71–86, 1991.

METHODES NUMERIQUES INNOVANTES POUR LA SIMULATION THERMIQUE DE COMPOSANTS ELECTRONIQUES

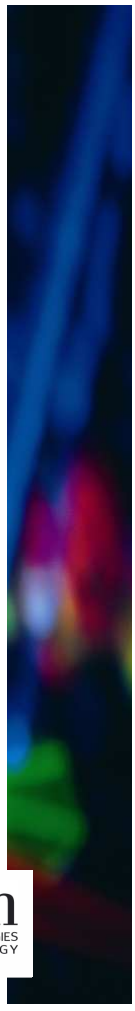
RESUME : Les composants électroniques présentent des facteurs d'échelle géométrique importants, et font intervenir des matériaux aux conductivités thermiques très différentes. L'expérience montre que dans ce cadre, la méthode des éléments de frontière est un choix judicieux pour la simulation thermique en régime permanent. En régime transitoire, la dimension temporelle ajoute un certain nombre de difficultés. Parmi celles-ci figurent classiquement l'augmentation des temps de calcul et les critères de stabilité, ou d'un manière plus générale les liens entre discrétisations spatiale et temporelle. Plus spécifiquement, un des enjeux actuels en électronique est de mesurer l'impact de phénomènes très localisés, comme des commutations ou des courts-circuits, sur la thermique globale d'un composant. Il s'agit alors de coupler différentes échelles espace-temps, en assurant en particulier des changements d'échelle sans perte d'information. Dans la première partie de ce travail, on propose d'utiliser la méthode des éléments de frontière transitoire pour répondre à cette problématique. On combine tout d'abord différentes formulations intégrales et des techniques d'optimisation pour réduire le coût de la méthode. On réutilise ensuite ce travail pour développer une approche multi-échelles, et généraliser la méthode des éléments de frontière aux matériaux non linéaires. Une seconde partie est consacrée au développement d'une méthode alternative, visant à réduire les temps de calcul de manière plus significative tout en conservant une base éléments de frontière. Il s'agit d'une méthode de décomposition propre généralisée, qui permet de construire une représentation à variables séparées de la solution de manière non incrémentale. On étudie la convergence de l'algorithme sur différents cas de test, en proposant des techniques pour traiter des conditions aux limites et initiales non homogènes, ainsi que des termes sources non linéaires.

Mots clés : formulations intégrales, éléments de frontière, décomposition propre généralisée, temps courts, multi-échelles.

INNOVATIVE NUMERICAL METHODS FOR THE THERMAL SIMULATION OF ELECTRONIC COMPONENTS

ABSTRACT : Electronic components have large geometric scale factors, and involve materials with very different thermal conductivities. Experience shows that in this context, the boundary element method is a good choice for thermal simulation in steady state. In transient regime, the temporal dimension adds a number of difficulties. Among these are typically higher computation time and stability criteria, or more generally the links between spatial and temporal discretizations. More specifically, a current issue in electronics is to measure the impact of highly localized phenomena, such as switching or short circuit on the overall thermal component. This is then coupled space-time scales, ensuring in particular the changes of scale without loss of information. In the first part of this work, we propose to use the transient boundary element method to address this problem. We combine first integral formulations and various optimization techniques to reduce the computational cost of the method. We then reuse this work to develop a multi-scale approach, and generalize the boundary element method for nonlinear materials. A second part is devoted to developing an alternative method, to reduce computation time more significantly while retaining a boundary element basis. This is a proper generalized decomposition method, which builds a separate representation of the solution within a non-incremental strategy. We study the convergence of the algorithm on different test cases, providing techniques for dealing with non-homogeneous boundary conditions and initial data, and nonlinear source terms.

Keywords : integral formulations, boundary elements, proper generalized decomposition, short time, multi-scale.



ARTS ET MÉTIERS ParisTech

ParisTech
INSTITUT DES SCIENCES ET TECHNOLOGIES
PARIS INSTITUTE OF TECHNOLOGY