

# M2 MIR – Microsystèmes Multiphysiques

Utilisation de la méthode des éléments finis pour la simulation  
numérique des équations multi-physiques

Vincent Laude & Mahmoud Addouche

Institut FEMTO-ST, Université de Bourgogne Franche-Comté et CNRS,  
15 B avenue des Montboucons, F-25030 Besançon Cedex, France  
vincent.laude@femto-st.fr  
<http://members.femto-st.fr/vincent-laude/>

v2.2, septembre 2017

# Contenu du cours

- 1 Principes, 2D, problèmes scalaires (électrostatique, acoustique)
- 2 Modèles 3D, éléments finis vectoriels (élasticité)
- 3 Couplages multi-physiques

# Organisation du cours

## Objectifs :

- Formuler des modèles simples mais multi-physiques
- Comprendre et utiliser la méthode des éléments finis

## Vincent Laude :

- Modélisation, maillage, choix des méthodes (5h CM)
- Acoustique, modes de vibration élastique (4h TP)
- Électrostatique (4h TP)
- Couplage déformation mécanique–électrostatique (4h TP)
- Couplage acoustique–structure (4h TP)

## Mahmoud Addouche :

- Performance énergétique d'une façade d'habitation (4h TP)
- Dissipateurs pour CPU. Couplage Thermoélectrique; Effet Joule (4h TP)

# Équations aux dérivées partielles

Toute équation du type

$$\mathcal{L}u = f$$

avec  $u(x, y)$  une fonction définie sur un domaine  $\Omega$  de l'espace physique,  $\mathcal{L}$  un opérateur différentiel contenant  $x, y, u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y} \dots$  et des fonctions de ces quantités.

Exemples :

- Équation de Laplace :  $-\nabla \cdot (\nabla u) = 0$
- Équation de Poisson :  $-\nabla \cdot (\epsilon \nabla \phi) = \rho$
- Équation de Helmholtz :  $-\nabla \cdot (c \nabla u) - k^2 u = 0$

## Méthode de Galerkin (*for the dummies*)

$\mathcal{L}u = f$  est définie sur un certain domaine  $\Omega$ . On choisit de représenter  $u$  sur une base de fonctions  $w_j$ , soit

$$u(x, y) = \sum_{j=1}^n a_j w_j(x, y)$$

où  $a_j$  sont des coefficients (réels ou complexes).

On projette l'équation différentielle sur les fonctions  $w_i$

$$\int_{\Omega} w_i \mathcal{L}u = \int_{\Omega} w_i f, \forall i = 1 \dots n$$

On obtient une équation linéaire

$$A\mathbf{a} = \mathbf{f}$$

avec  $A_{ij} = \int_{\Omega} w_i \mathcal{L}w_j$  et  $f_i = \int_{\Omega} w_i f$ . La solution formelle est  $\mathbf{a} = A^{-1}\mathbf{f}$ .

# Il ne faut pas avoir peur des équations linéaires !

Il existe beaucoup de programmes informatiques pour résoudre les équations linéaires. Exemples : Matlab, Comsol, etc.

- Inversion de matrice

$$A^{-1}A = I$$

- Problème linéaire : trouver  $\mathbf{x}$  tel que

$$A\mathbf{x} = \mathbf{f}$$

- Problème aux valeurs propres : trouver  $(\lambda, \mathbf{x})$  tels que

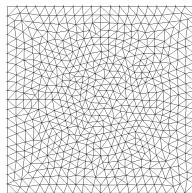
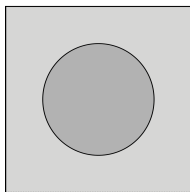
$$A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$$

- Problème aux valeurs propres généralisé : trouver  $(\lambda, \mathbf{x})$  tels que

$$A\mathbf{x} = \lambda B\mathbf{x}$$

# Maillage et régions

- On divise le domaine  $\Omega$  en régions dans lesquelles les coefficients de l'équation différentielle sont homogènes, ou dans lesquelles on sait que la solution doit être continue.
- Chacune des régions est maillée. La qualité du maillage est très importante pour obtenir des solutions de qualité. Un maillage trop serré conduit à des temps de calcul très longs ; un maillage trop lâche conduit à des erreurs importantes.



# Conditions aux limites

Le comportement de la solution aux frontières est décrite par des conditions aux limites (CL). Il en existe 2 types principaux.

- 1 Dirichlet, ou conditions aux limites essentielles :

$$u = 0, \text{ ou } u = u_0, \text{ sur } \sigma$$

- 2 Neumann, ou conditions aux limites naturelles :

$$\frac{\partial u}{\partial n} = 0$$

où  $n$  est la normale à la frontière  $\sigma$ .

Les logiciels permettent aussi parfois des conditions de type mixte (Neumann + Dirichlet), périodicité, symétrie, rayonnement, absorption, etc.



# Espace d'éléments finis

- Étant donné un domaine  $\Omega$  et son maillage  $Th$ , on choisit de décrire la solution par un nombre fini de degrés de liberté (*dof*), par exemple les valeurs nodales  $u_j^e$  pour les  $j$  nœuds de l'élément  $e$ .
- L'espace d'éléments finis  $Wh$  est l'ensemble des fonctions représentables par ce choix. Propriété importante en pratique : c'est un espace fonctionnel de dimension finie.
- Représentation *dans* un élément fini  
 $u^e(x, y) = \sum_j N_j^e(x, y) u_j^e$  où  $N_j^e(x, y)$  sont les fonctions de base.
- Pour les éléments de Lagrange,  $P_n$ , il y a continuité de  $u(x, y) = \sum_e u^e(x, y)$  entre les éléments.

# Formulation faible

- Supposons que nous avons choisi un espace d'éléments finis  $Wh$  (pour un domaine  $\Omega$  et son maillage  $Th$ ).
- On remplace le problème initial  $\mathcal{L}u = f$  par une approximation : Trouver  $u \in Wh$  tel que  $\int_{\Omega} w \mathcal{L}u = \int_{\Omega} wf$  pour toutes les fonctions test  $w \in Wh$ .
- $u$  et  $w$  sont complètement déterminés par les valeurs aux nœuds  $\mathbf{U} = \{u_j^e\}$  et  $\mathbf{W} = \{w_j^e\}$ .
- Il existe donc une matrice  $K$  et un vecteur  $\mathbf{B}$  tels que

$$\mathbf{W}^T K \mathbf{U} = \mathbf{W}^T \mathbf{B}, \forall \mathbf{W}$$

- Et donc l'équation linéaire :  $K \mathbf{U} = \mathbf{B}$

# Résolution pratique par le logiciel FEM ?

- 1 Dessiner (ou définir) le domaine et les régions
- 2 Mailler le domaine (discrétisation du domaine)
- 3 Choisir le type des éléments finis
- 4 Définir les conditions aux limites
- 5 Définir les coefficients des équations physiques, les constantes utiles
- 6 Choisir le solveur (et ses options si nécessaire)
- 7 Résoudre le problème
- 8 Post-traiter les résultats

# Électrostatique 2D

Equation de Poisson :

$$-\nabla \cdot (\epsilon \nabla \phi) = \rho$$

avec  $\epsilon$  la constante diélectrique et  $\rho$  une densité de charge.

**Exemple pratique** : 2 cylindres métalliques portant des charges, séparés par une courte distance

- Définition du domaine ?
- Conditions aux limites internes (potentiel électrique, charge de surface) ?
- Conditions aux limites externes ?
- Utiliser le maillage par défaut et analyser le résultat
- Comment améliorer le maillage ?

# Cas 1D : Comment le logiciel FEM résout le problème ?

- ① Projection de l'équation différentielle sur les fonctions test

$$-\int_0^1 dx \psi(x) \frac{\partial}{\partial x} \left( \epsilon(x) \frac{\partial \phi(x)}{\partial x} \right) = \int_0^1 dx \psi(x) \rho(x)$$

- ② Intégration par parties

$$\int_0^1 dx \frac{\partial \psi}{\partial x} \epsilon \frac{\partial \phi}{\partial x} - \left[ \psi \epsilon \frac{\partial \phi}{\partial x} \right]_0^1 = \int_0^1 dx \psi \rho$$

- ③ Application des conditions aux limites :  $\left[ \psi \epsilon \frac{\partial \phi}{\partial x} \right]_0^1$  est connu ; par exemple :

- Dirichlet :  $\psi(0) = 0$
- Neumann :  $\frac{\partial \phi(1)}{\partial x} = 0$

# Cas 2D : Comment le logiciel FEM résout le problème ?

- ① Projection de l'équation différentielle sur les fonctions test

$$-\int_{\Omega} dr \psi(r) \nabla \cdot (\epsilon(r) \nabla \phi(r)) = \int_{\Omega} dr \psi(r) \rho(r)$$

- ② Théorème de Gauss (vrai en 2D et 3D)

$$\int_{\Omega} dr \nabla \psi \cdot (\epsilon \nabla \phi) - \int_{\sigma} dn \psi \epsilon \frac{\partial \phi(r)}{\partial n} = \int_{\Omega} dr \psi \rho$$

- ③ Application des conditions aux limites :  $\int_{\sigma} \psi \epsilon \frac{\partial \phi(r)}{\partial n}$  est connu ; par exemple :

- Dirichlet :  $\psi(r) = 0$  sur une partie de  $\sigma$
- Neumann :  $\epsilon \frac{\partial \phi(r)}{\partial n} = 0$  sur le reste de  $\sigma$

# Acoustique (harmonique)

Equation acoustique en régime harmonique, avec source :

$$\nabla \cdot (-1/\rho_0 \nabla p) - \omega^2 / (\rho_0 c_S^2) p = f$$

avec  $c_S$  la vitesse acoustique (m/s),  $\rho_0$  la densité (kg/m<sup>3</sup>),  $f$  un terme source (1/s<sup>2</sup>)

**Exemple pratique** : haut-parleur dans une pièce ou dehors

- Définition du domaine
- Conditions aux limites (pression, accélération normale, soft and hard boundary, radiation) ?
- Appliquer une force : Dirichlet ou Neumann ? Quelle réponse ?
- Qu'est-ce qu'un bon maillage pour une onde ?
- Changer les éléments finis ; la solution change t-elle ?

# Acoustique (valeurs propres)

Equation acoustique en régime harmonique, avec nombre d'onde axial :

$$\nabla \cdot (-1/\rho_0 \nabla p) + (k_z^2/\rho_0 - \omega^2/(\rho_0 c_S^2))p = 0$$

avec  $c_S$  la vitesse acoustique (m/s),  $\rho_0$  la densité (kg/m<sup>3</sup>) et  $k_z$  un nombre d'onde axial (1/m)

**Exemple pratique** : tuyau d'orgue

- Définition du domaine
- Conditions aux limites (soft and hard boundary) ?
- Trouver les modes propres. Que représentent-ils ?
- Varier  $k_z$  : tuyau d'orgue ?



# Problèmes aux valeurs propres (synthèse)

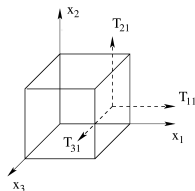
- Soit une matrice carrée  $M$  de dimension  $n$ , à valeurs réelles ou complexes. Une équation aux valeurs propres  $\lambda$  et aux vecteurs propres  $u$  est de la forme  $Mu = \lambda u$  ( $\sum_{i=1}^n M_{ij}u_j = \lambda u_i$ ). Les valeurs propres sont racines du polynôme caractéristique  $|M - \lambda I| = 0$ .
- Il y a exactement  $n$  valeurs propres et au plus  $n$  vecteurs propres (a priori complexes). Les vecteurs propres sont non nuls et donc normalisables (on ne les connaît qu'à une constante près).
- Si  $M$  est réelle symétrique (ou Hermitienne), les valeurs propres sont réelles et les vecteurs propres sont orthogonaux.
- Problème aux valeurs propres généralisé :  $Au = \lambda Bu$
- En pratique, il existe des algorithmes très performants pour déterminer valeurs et vecteurs propres.

# Élasticité 3D : Déformations

- Soit un point  $\mathbf{x}$  de coordonnées  $(x_1, x_2, x_3)$ .  
 $u_i(\mathbf{x} + d\mathbf{x}) = u_i(\mathbf{x}) + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} dx_j$  au premier ordre.  $\frac{\partial u_i}{\partial x_j}$  est le gradient des déplacements.
- On sépare ce gradient en partie symétrique (le tenseur des déformations  $S_{ij}$ ) et antisymétrique selon  
 $\frac{\partial u_i}{\partial x_j} = S_{ij} + AS_{ij}$ ,  $S_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$  et  $AS_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$
- Seule la partie symétrique du gradient des déplacements mesure une déformation locale (la partie antisymétrique mesure les rotations locales).
- La dilatation (variation locale du volume) est  
 $S = S_{11} + S_{22} + S_{33} = \nabla \cdot \mathbf{u}$ .
- Les termes  $S_{11}$ ,  $S_{22}$  et  $S_{33}$  correspondent à des mouvements longitudinaux, les termes  $S_{ij}$ ,  $i \neq j$ , à des mouvements de cisaillement.

# Élasticité 3D : Contraintes

- Trois forces indépendantes s'exercent sur une surface : une contrainte de traction-compression et deux contraintes de cisaillement.



- Sur la face orthogonale à  $x_1$  d'un cube, la force par unité de surface ou tension mécanique est  $T_{11} + T_{21} + T_{31}$ .  $T_{ij}$  est un tenseur de rang 2 symétrique, le tenseur des contraintes. Pour une surface de normale  $\mathbf{n}$ , la tension mécanique est le vecteur  $T_{ij}n_j$ .
- L'équation de la dynamique s'écrit (avec  $f_i$  les forces internes)

$$\frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j} + f_i = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}$$

# Élasticité 3D : Loi de Hooke

- L'expérience montre que le comportement élastique de la plupart des solides dans le cas de petites déformations obéit à la loi de Hooke :

$$T_{ij} = c_{ijkl} S_{kl}$$

c'est-à-dire que les contraintes sont une fonction linéaire des déformations.

- $c_{ijkl}$  est le tenseur des rigidités, de rang 4. Il a *a priori*  $3^4 = 81$  composantes. Mais la symétrie de  $T_{ij}$  et  $S_{kl}$  impose que  $c_{jikl} = c_{ijkl}$  et  $c_{ijkl} = c_{ijlk}$ . Il n'y a donc que 36 composantes indépendantes au plus.
- Avec la symétrie  $c_{ijkl} = c_{klij}$  on tombe à 21 composantes indépendantes au plus.

## Élasticité 3D : Notation contractée (ou matricielle)

$$(11) \rightarrow 1; (22) \rightarrow 2; (33) \rightarrow 3$$

$$(23) = (32) \rightarrow 4; (13) = (31) \rightarrow 5; (12) = (21) \rightarrow 6$$

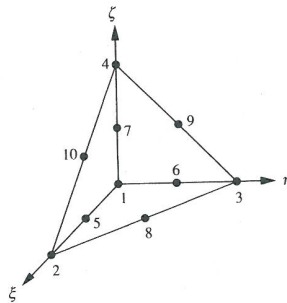
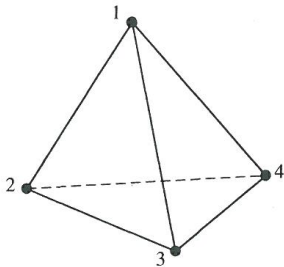
$$T_I = T_{ij}; c_{IJ} = c_{ijkl}; T_I = c_{IJ} S_J$$

$$S_1 = S_{11}; S_2 = S_{22}; S_3 = S_{33}; S_4 = 2S_{23}; S_5 = 2S_{13}; S_6 = 2S_{12}$$

Matériaux	Classe	Rigidités ( $10^{10}$ N/m <sup>2</sup> )					$\rho$ ( $10^3$ kg/m <sup>3</sup> )
<b>cub. ou isotrope</b>		$c_{11}$	$c_{12}$	$c_{44}$			
AsGa	$\bar{4}3m$	11.88	5.38	2.83			5.307
SiO <sub>2</sub>	isotrope	7.85	1.61	3.12			2.203
Si	$m\bar{3}m$	16.56	6.39	7.95			2.329
<b>hexagonal</b>		$c_{11}$	$c_{12}$	$c_{13}$	$c_{33}$	$c_{44}$	
PZT-4	trans. iso.	13.9	7.8	7.4	11.5	2.6	7.5
ZnO	$6mm$	21.0	12.1	10.5	21.1	4.2	5.676
<b>trigonal</b>		$c_{11}$	$c_{12}$	$c_{13}$	$c_{33}$	$c_{44}$	$c_{14}$
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	$\bar{3}m$	49.7	16.3	11.1	49.8	14.7	-2.3
LiNbO <sub>3</sub>	$3m$	20.3	5.3	7.5	24.5	6.0	0.9
quartz $\alpha$ (SiO <sub>2</sub> )	32	8.7	0.7	1.2	10.7	5.8	-1.8

# Maillage 3D

- Comme en 2D on peut mailler tout domaine connexe par des triangles...
- En 3D on peut utiliser des tétraèdres



# Éléments finis vectoriels

- On considère le vecteur  $(u_1, u_2, u_3)$ .
- Étant donné un domaine  $\Omega$  et son maillage  $Th$ , on décrit la solution par un nombre fini de degrés de liberté (*dof*), les valeurs nodales  $u_{ij}^e$  pour les  $j$  nœuds de l'élément  $e$ .
- L'espace d'éléments finis  $Wh$  est l'ensemble (fini) des fonctions représentables par ce choix.
- Représentation *dans* un élément fini  
 $u_i^e(x, y) = \sum_j N_j^e(x, y) u_{ij}^e$  où  $N_j^e(x, y)$  sont les fonctions de base (comme dans le cas scalaire).
- Pour les éléments de Lagrange,  $P_n$ , il y a continuité de  
 $u_i(x, y) = \sum_e u_i^e(x, y)$  entre les éléments.

# Formulation faible de l'élasticité 3D (1)

- 1 Équation de l'élastodynamique

$$-\nabla T + \rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = \mathbf{f}$$

- 2 Projection sur les fonctions test  $\mathbf{v}$

$$-\int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot \nabla T + \int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot \rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = \int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot \mathbf{f}$$

- 3 Théorème de Gauss

$$\int_{\Omega} \nabla \mathbf{v} T - \int_{\sigma} \mathbf{v} \cdot T_n + \int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot \rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = \int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot \mathbf{f}$$



# Formulation faible de l'élasticité 3D (2)

- ① Loi de Hooke :  $T_I = c_{IJ}S_J$  avec  $S = \nabla \mathbf{u}$

$$\int_{\Omega} S(\mathbf{v})_I c_{IJ} S(\mathbf{u})_J - \int_{\sigma} \mathbf{v} \cdot T_n + \int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot \rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = \int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot \mathbf{f}$$

- ② Conditions aux limites :  $\int_{\sigma} \mathbf{v} \cdot T_n$  est connu

- Dirichlet :  $\mathbf{v} = 0$  sur une partie de  $\sigma$  (blocage)
- Neumann :  $T_n = 0$  sur le reste de  $\sigma$  (traction nulle)

- ③ Cas monochromatique (ou excitation harmonique)

$$\int_{\Omega} S(\mathbf{v})_I c_{IJ} S(\mathbf{u})_J - \int_{\sigma} \mathbf{v} \cdot T_n - \omega^2 \int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot \rho \mathbf{u} = \int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot \mathbf{f}$$

# Déformation d'une poutre sous l'effet d'une force

- On se donne une poutre en silicium, ancrée d'un côté.
- Elle fléchit sous sa propre masse, en statique. De combien ?
- Visualiser la déformation.

# Modes propres de vibration d'une poutre

- On considère de nouveau la poutre en silicium, ancrée d'un côté, des deux, ou simplement "flottant" dans l'espace.
- On néglige la gravité, mais on veut estimer son comportement dynamique par ses modes propres de déformation.
- Obtenir ces modes propres.
- Que change la condition d'ancrage ou de traction nulle ?

# Couplage des équations physiques

- Beaucoup de matériaux induisent un couplage de grandeurs physiques autrement considérées séparément
  - Électro-optique, magnéto-optique
  - Piézomagnétique, piézoélectrique
- Des relations constitutives relient les grandeurs physiques (*constantes matériaux*)
- *Il suffit de considérer un espace d'éléments finis vectoriel dont les inconnues sont les différentes grandeurs physiques.*

## Exemple : piézoélectricité

- Effet piézoélectrique direct : sous l'action d'une contrainte ou d'une déformation, une polarisation électrique apparaît
- Effet piézoélectrique inverse : un champ électrique appliqué provoque une déformation de la maille cristalline ou une contrainte. L'effet piézoélectrique n'apparaît que pour les structures cristallines non centro-symétriques.
- Équations couplées ( $e_{kij}$  : constantes piézoélectriques)

$$T_{ij} = c_{ijkl} S_{kl} - e_{kij} E_k; D_i = e_{ikl} S_{kl} + \epsilon_{ij} E_j$$

- Le champ électrique dérive d'un potentiel :  $E_i = -\frac{\partial \phi}{\partial x_i}$
- En notation contractée

$$T_I = c_{IJ} S_J - e_{kl} \phi_{,k}; D_i = e_{ij} S_j + \epsilon_{ij} \phi_{,j}$$

# Couplage par les conditions aux limites

- Dans de nombreux cas, le système considéré est composé de différentes régions, chacune gouvernée par un ensemble de lois physiques
  - Couplage fluide - structure
  - Couplage acoustique - élastique (transducteurs acoustiques)
  - Couplage électrostatique - piézoélectrique
- A l'interface entre les régions, les conditions aux limites permettent de coupler les équations d'éléments finis :
  - Milieu 1 :  $A_1 u_1 + (\text{intégrale de frontière sur } u_2) = f_1$
  - Milieu 2 :  $A_2 u_2 + (\text{intégrale de frontière sur } u_1) = f_2$
  - Système complet

$$\begin{pmatrix} A_1 & C_{12} \\ C_{21} & A_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix}$$

## Exemple : couplage acoustique - élastique

- Comment une membrane qui vibre communique t'elle son mouvement à l'air (ou l'eau) ? Et le problème inverse (le micro, ou le transducteur) ?
- Modèle élastique pour la membrane
- Modèle acoustique pour l'air ou l'eau
- A l'interface :
  - L'accélération normale de la membrane crée une variation de pression

$$\frac{\partial^2 u_n}{\partial t^2} = \frac{1}{\rho_F} \frac{\partial p}{\partial n}$$

- La pression du fluide exerce une force (de surface) sur la membrane

$$T_{ij} n_j = -p n_i$$

# Couplage indirect de modèles physiques

- On peut aussi modéliser des situations variées induisant des couplages multiphysiques
  - Un système produit une action à distance, par exemple une force, sur un autre système...
  - Une grandeur physique produit une déformation du système, le maillage est donc déformé et change la solution pour une autre grandeur qui était pourtant découplée...
- Il n'y a pas de règle simple pour savoir comment résoudre le problème : il faut improviser un modèle de couplage !



## Exemple : couplage électrostatique - déformations

- Soit une membrane diélectrique métallisée sur une face, séparée par un espace vide (un *gap*) d'une contre-électrode sur un substrat
- La membrane est ancrée à un cadre support, ce qui définit les conditions aux limites mécaniques
- On résout le problème électrostatique, qui dépend de la distance entre membrane et substrat
- La force électrostatique déforme la membrane... ce qui change le champ électrique... et ainsi de suite !
- (La solution doit donc être obtenue de façon itérative)

# Quelques théorèmes intégraux utiles

$V$  un volume,  $S$  une surface.  $\oint$  désigne une intégrale sur une surface ou un contour **fermés**.

- Théorème du gradient

$$\int_V dV \nabla f = \oint_S \mathbf{n} f dS$$

- Théorème de Gauss

$$\int_V dV \nabla \cdot \mathbf{f} = \oint_S dS \mathbf{n} \cdot \mathbf{f}$$

- Théorème du rotationnel

$$\int_V dV \nabla \times \mathbf{f} = \oint_S dS \mathbf{n} \times \mathbf{f}$$