



UNIVERSITATEA POLITEHNICA DIN BUCUREȘTI

Școala Doctorală de INGINERIE ELECTRICĂ

Rezumatul Tezei de Doctorat
Tehnici de Modelare și Simulare a
Dispozitivelor
MEMS

Autor: As. Ing. Mihai POPESCU

Conducător de doctorat: Prof. dr. ing. Daniel IOAN

BUCUREȘTI 2021

Cuprins

1	Calcul de înaltă performanță	4
2	Aspecte fizice	7
3	Aspecte matematice	10
4	Aspecte numerice	12
5	Aspecte computaționale	14
6	Concluzii	21
6.1	Concluzii generale	21
6.2	Contribuții originale	25
6.3	Perspective	28
	Bibliografie selectivă	30

Abstract

Cuvinte cheie: *model mulyifizic, calcul de înaltă performanță, câmp electromagnetic, elasticitate liniară, analiză funcțională, formulări slabe, element finit, procesare paralelă*

Ultimele două decenii ne-au făcut martorii unei creșteri exponențiale a cererii de putere de calcul, atât din partea comunității științifice, cât și din partea aplicațiilor comerciale. Pe măsură ce costurile de proiectare și testare a noilor produse de înaltă tehnologie sunt în continuă creștere, simularea acestor dispozitive complexe cu ajutorul calculatorului a devenit din ce în ce mai necesară. Faptul a dus la dezvoltarea completă a unei ramuri științifice de sine stătătoare și anume *modelarea multifizică*.

Modelarea echipamentelor moderne necesită simularea cuplajului dintre mai multe fenomene fizice care interacționează pe parcursul funcționării respectivului dispozitiv. Frecvent, sunt întâlnite cuplaje între fenomene electromagnetice, mecanice, termice, de curgere a fluidelor.

Teza de față descrie o metodă de abordare a simulărilor multifizice prin prisma interacțiunii dintre trei domenii științifice fundamentale, și anume: fizica, matematică și calculul numeric. Pe parcursul lucrării este subliniată *interdisciplinaritatea* dintre cele trei domenii științifice. Această abordare este cunoscută sub numele de *CSE - Computational Science and Engineering*.

Capitolul 1

Calcul de înaltă performanță

Primul capitol al lucrării pune în evidență resursele de calcul atât hardware, cât și software strict necesare implementării algoritmilor generați în cadrul *CSE*. Sunt punctate, pe scurt, etapele ce au marcat dezvoltarea arhitecturilor hardware ale unităților centrale de procesare ale computerelor, pornind de la arhitectura Neumann și terminând cu procesoarele multinucleu (în engleză *multicore*), dotate fiecare cu câte o memorie temporară rapidă (*cache*), capabile de a rula seturi de instrucțiuni în paralel. La ora actuală, volumul mare de prelucrări solicitate de modelarea multifizică este efectuat în paralel, pe grupări de computere (*cluster-e*) dotate cu procesoare multinucleu (v. fig. 1.1).

Dezvoltarea rapidă a arhitecturilor hardware, a atras după sine, deschiderea către aplicații software noi, materializate prin algoritmi dedicați, preocupați mai puțin de a face economie de memorie, ci mai mult de creșterea și controlul acurateții calculelor numerice, precum și de reducerea timpului de calcul. Modelul clasic al programării structurate, utilizat pentru implementarea algoritmilor seriali a fost înlocuit cu modele ale programării paralele, prezentate în subcap. ???. Este subliniat aici faptul că modalitățile de paralelizare ale unui algoritm nu se pot înscrie unor așa zise rețete, ci, mai degrabă, trebuie să respecte anumite principii, având ca scop esențial îndeplinirea unor criterii generale de eficiență ale programului. Tot în acest capitol sunt prezentate două metodologii de paralelizare:

- una datorată din 1995 lui Foster([30]) și descriabilă prin secvența: „Partition -> Communication -> Agglomeration -> Mapping” (prescurtat PCAM);
- cealaltă datorată lui Mattson [59] ce propune în 2004 o sistematizare a procesului de programare paralelă, grupând multitudinile de tehnici tipice acestui proces (v. fig.??) - în grupe de *modele (patterns)* definite la nivel

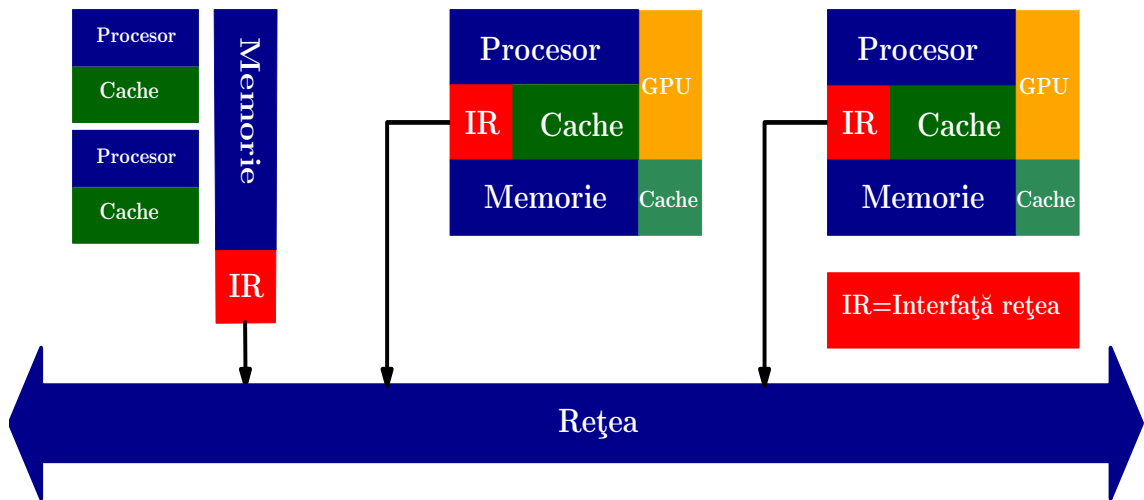


Figura 1.1: Organizare de cluster hibridă cu mașini independente și SMP. În mașinile independente este folosit și procesorul grafic (GPU).

abstract.

Pentru ca tabloul să fie complet, era necesară și prezentarea instrumentelor software utilizate pentru implementarea practică a principiilor descrise mai sus. Dintre acestea sunt enumerate cele mai des utilizate în momentul de față:

- biblioteca software Pthreads;
- biblioteca software OpenMP;
- modelul de programare „Message Passing Interface” (MPI);

Pentru fiecare dintre aceste instrumente sunt discutate:

- modul în care, pe parcursul execuției procesului principal al programului, se inițiază și se încheie sub-procese, sau secvențe scurte (threads) care rulează în paralel pe mai multe procesoare și/sau pe mai multe nuclee ale aceluiași procesor;
- modul în care sunt rezolvate situațiile critice care pot apărea pe parcursul rulării proceselor paralele pomenite la punctul anterior și aici putem vorbi de două mari clase de astfel de situații - numite și *porțiuni critice de cod*:
 - un set de date este accesat la momente nepotrivite și în mod necontrolat de către diverse secvențe de program ce rulează în paralel: fie datele sunt

neprelucrate suficient pentru a fi preluate de către procesul respectiv, fie modificarea lor de către procesul în cauză ar fi prematură întrucât mai sunt și alte procese care ar trebui să preia acele date în forma curentă (nemodificată încă);

- două sau mai multe procese/secvențe se interblochează între ele așteptând unul de la altul instrucțiuni pentru continuarea activității;
- modul în care se utilizează instrumentele software respective: sub formă de biblioteci de funcții, sau sub formă de seturi de directive de compilare, care generează în momentul etapei de compilare codul necesar inițierii setului de procese ce vor rula în paralel.

Capitolul 2

Aspecte fizice

Universul multifizic poate fi caracterizat, din punct de vedere material, printr-o mulțime de domenii spațiale disjuncte sau nu, în care se manifestă simultan sau secvențial mai multe fenomene fizice. Fiecare dintre acestea reprezintă obiectul unei teorii științifice caracterizată de:

- mărimi fizice primitive și derivate;
- un set de axiome (legi) independente, consistente (necontradictorii), respectiv complete;
- teoreme demonstrate pe baza setului de axiome menționat.

Capitolul 2 se referă la aspectele fizice de mai sus ce caracterizează teoria câmpului electromagnetic, respectiv teoria elasticității în medii liniare.

Un punct în spațiu este caracterizat complet din punct de vedere electromagnetic de către următorul set de vectori, reprezentați matematic de funcții de spațiu și timp:

- **E** intensitatea câmpului electric;
- **D** inducția electrică;
- **H** intensitatea câmpului magnetic;
- **B** inducția magnetică;

Schimbarea stării electromagnetice a corpurilor în urma interacțiunii dintre acestea și câmpul electromagnetic sunt puse în evidență prin următoarele mărimi locale:

- densitatea de sarcină ρ - care reflectă starea de electrizare;

- densitatea de curent \mathbf{J} - care reflectă starea electrocinetică.

Ambele sunt funcții de spațiu și timp - ρ o funcție scalară, iar \mathbf{J} o funcție vectorială.

Mărimile globale ale câmpului electromagnetic, sunt scalare și se obțin prin integrarea mărimilor locale prezentate mai sus pe varietăți spațiale de ordin 1 (curbe C), ordin 2 (suprafețe S), respectiv ordin 3 (volum V):

- tensiunea electrică - $u(t) = \int_C \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \cdot d\mathbf{r}$;
- fluxul electric - $\psi(t) = \int_S \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{n} dA$;
- tensiunea magnetică - $u_m(t) = \int_C \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) \cdot d\mathbf{r}$;
- fluxul magnetic - $\phi(t) = \int_S \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{n} dA$;
- intensitatea curentului electric - $i(t) = \int_S \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{n} dA$.
- sarcina electrică - $q(t) = \int_\Omega \rho(\mathbf{r}, t) d\Omega$, unde Ω poate fi o varietate spațială 1D, 2D or 3D.

Sursele câmpului electromagnetic sunt specificate prin legile sale fundamentale: legea fluxului electric, legea fluxului magnetic, legea inducției electromagnetice, legea circuitului magnetic, legea conservării sarcinii. În lucrare sunt prezentate atât forma locală (diferențială), precum și forma globală (integrală). Aceste legi sunt completate de legile constitutive, care, în baza proprietăților de material ale mediului, stabilesc legături între intensitățile de câmp și fluxurile acestora:

- \mathbf{D} - \mathbf{E} prin intermediul permitivității electrice ε ,
- \mathbf{B} - \mathbf{H} prin intermediul permeabilității magnetice μ ,
- \mathbf{J} - $(\mathbf{E} + \mathbf{E}_i)$, unde \mathbf{E}_i este intensitatea câmpului electric imprimat, prin intermediul conductivității electrice σ .

În cele din urmă este expusă teorema de conservare a energiei electromagnetice. Teorema este mai departe folosită pentru evidențierea forțelor generalizate electrice și magnetice ce acționează asupra unui corp plasat în câmp electromagnetic. Aceste forțe pot fi de volum caz în care sunt caracterizate prin densitatea de volum a forței, sau de suprafață caz în care sunt descrise prin tensorul tensiunilor maxwelliene.

Conform teoriei mecanicii mediilor continue, efectele acțiunii unor forțe asupra corpurilor sunt descrise prin determinarea stărilor de tensiune, deformație și deplasare. Forțele pot fi caracterizate punctual prin următoarele mărimi vectoriale, dependente de spațiu și timp:

- densitatea de forță de volum - $\mathbf{b} = \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{\Delta \mathbf{F}_V}{\Delta V}$;
- densitatea de forță de suprafață - $\mathbf{t} = \lim_{\Delta A \rightarrow 0} \frac{\Delta \mathbf{F}_S}{\Delta A}$;
- densitatea de volum a cuplului - $\mathbf{m}_V = (\mathbf{r}_V \times \mathbf{b})dV$;
- densitatea de suprafață a cuplului - $\mathbf{m}_A = (\mathbf{r}_A \times \mathbf{t})dA$;
- tensorul tensiunilor $\bar{\sigma}$; acest tensor de ordin 2 este simetric în absența cuplului de suprafață;

Forțele și cuplurile pe întreg corpul (globale) sunt determinate prin integrarea câmpurilor vectoriale locale pe varietățile spațiale respective (suprafețe sau volume).

Deformarea este caracterizată local prin tensorul deformațiilor $\bar{\epsilon}$. Acest tensor este legat de vectorul deplasărilor \mathbf{u} prin ecuația de compatibilitate geometrică:

$$\bar{\epsilon} = \frac{1}{2} \left([\nabla \mathbf{u}] + [\nabla \mathbf{u}]^T \right)$$

Legătura dintre tensiuni și deformații este dată de ecuația constitutivă Hooke, a elasticității: $[\sigma] = [d] \cdot [\epsilon]$. $[d]$ este matricea de rigiditate, care pentru medii liniare, omogene și izotrope depinde numai de proprietățile materiale ale mediului. Acestea sunt date de constante de material: modulul de elasticitate longitudinală E (modulul Young), modulul de elasticitate transversală G , coeficientul Poisson ν .

Descrierea stărilor mecanice este completată cu enunțarea legilor de conservare ale mecanicii mediilor continue: legea conservării masei, legea conservării impulsului, legea conservării cuplului impulsului.

În final este enunțat și discutat primul principiu al termodinamicii, ca unul dintre principiile fundamentale care încadrează atât teoria electromagnetismului, dar și pe cea a elasticității.

Din cele prezentate în acest capitol rezultă că pentru descrierea fenomenelor fizice distribuite în spațiu se folosesc mărimi fizice locale, reprezentate de câmpuri scalare sau vectoriale ce satisfac ecuații diferențiale cu derivate parțiale, de regulă, de ordinul doi. Ecuațiile sunt obținute din relațiile fundamentale/generale ce caracterizează câmpul și din ecuațiile constitutive, care descriu comportarea materialelor caracteristice domeniului fizic respectiv. Membrul stâng al acestor ecuații este o reflectare a proprietăților de material din domeniul fizic considerat, conținând toate constantele de material. Membrul drept conține mărimile ce descriu sursele de câmp, fie interne, fie externe, caz în care sunt reprezentate prin condiții de frontieră.

Capitolul 3

Aspecte matematice

Capitolul 3 este dedicat laturii matematice care permite, în mod natural, abordarea fenomenelor multifizice și anume *analiza funcțională*, prin conceptul ei fundamental de *spațiu abstract*. Este discutată clasa spațiilor vectoriale Banach din care derivă spațiile Sobolev ca spații ale soluțiilor ecuațiilor cu derivate parțiale. Din această ultimă clasă este reținută categoria spațiilor Hilbert, înzestrate cu produs scalar din care derivă norma spațiului respectiv, precum și definirea proprietății de ortogonalitate. Se arată că elementele spațiilor Sobolev pot fi approximate oricât de bine cu funcții de test definite pe \mathbb{R}^N .

Analiza funcțională transformă formulările matematice caracteristice universului fizic (denumite *formulări tari*) în formulări corespunzătoare (denumite *formulări slabe*) universului spațiilor abstracte. În acest scop este necesară demonstrarea echivalenței dintre sistemele cu ecuații cu derivate parțiale, asociate unei anumite formulări tari, cu sistemele de ecuații ale formulării slabe corespondente, scrise cu funcții generalizate din spațiile Sobolev. Practic trebuie demonstrat că transformarea păstrează proprietățile de continuitate în sens slab. Deoarece frontierele ce închid domeniul pe care se definesc formulările conțin un număr finit de porțiuni singulare (pe care funcțiile nu mai sunt derivabile, respectiv continue) spațiile Sobolev asociate acestora nu sunt aceleași cu cele asociate interiorului domeniului de simulare. Este motivul pentru care capitolul 3 conține discuții separate referitoare la:

- spațiile Sobolev întregi și operatorii diferențiali care pot echivala formulările tari definite pe interiorul domeniului asociat problemei de rezolvat;
- spațiile Sobolev fracționare și operatorii diferențiali superficiali asociați, care pot echivala formulările tari definite pe frontiera domeniului asociat problemei;
- legătura care se face între cele două spații Sobolev cu ajutorul *operatorilor de*

urmă, reprezentând restricții pe frontieră ale funcțiilor definite în interiorul domeniului problemei.

Transformarea se efectuează prin proiecția formulărilor tari pe un set de funcții de bază ce generează spațiul abstract respectiv. Forma slabă a problemelor multifizice, presupune existența în membrul stâng a unei funcționale biliniare - $\mathcal{A}(u, v)$ - respectiv în membrul drept a unei funcționale liniare - $\mathcal{F}(v)$. Pe baza formulării slabe se demonstrează existența și unicitatea soluțiilor, în virtutea teoremei *Lax-Milgram*. Cum ecuațiile de rezolvat sunt diferențiale, soluțiile lor aparțin unui spațiu funcțional Sobolev întreg, iar condițiile de frontieră (excitațiile) aparțin unui spațiu Sobolev fracționar. Totodată este interesant de menționat că pe spațiile funcționale abstracte se poate defini noțiunea de (spațiu) infinit, putându-se găsi formulări funcționale slabe echivalente formulărilor tari definite pe spații infinite.

Pentru fiecare tip de operator diferențial generalizat (*grad, rot, div*) ce intervin în expresia formulării slabe se alege un spațiu funcțional compatibil, care să asigure continuitatea slabă a funcționalelor definite cu acești operatori pe întreg domeniul problemei:

- Spațiul L^2 al funcțiilor de pătrat integrabil:

$$L^2(\Omega) = \left\{ v : \int_{\Omega} |v(x)|^2 dx < +\infty \right\}; \quad (3.1)$$

- Spațiul H^1 ce conține funcții din L^2 și au gradientul generalizat tot în L^2 :

$$H^1(\Omega) := \{ \varphi \in L^2(\Omega) \mid \nabla \varphi \in [L^2(\Omega)]^d \}, \text{ where } d \in \{2, 3\}; \quad (3.2)$$

- Spațiul $H(\mathbf{curl})$ ce conține funcții ce au rotorul generalizat în L^2 :

$$H(\mathbf{rot}, \Omega) := \{ \vec{u} \in [L^2(\Omega)]^3 \mid \nabla \times \vec{u} \in [L^2(\Omega)]^3 \}; \quad (3.3)$$

- Spațiul $H(\mathbf{div})$ ce conține funcții ce au divergență generalizată în L^2 :

$$H(\mathbf{div}, \Omega) := \{ \vec{u} \in [L^2(\Omega)]^d \mid \nabla \cdot \vec{u} \in L^2(\Omega) \}. \quad (3.4)$$

Legătura dintre aceste spații, precum și metoda de construcție a unui spațiu dintr-altul este evidențiată de secvența exactă De Rham :

$$\mathbb{R} \rightarrow H^1(\Omega) \xrightarrow{\nabla} H(\mathbf{rot}, \Omega) \xrightarrow{\nabla \times} H(\mathbf{div}, \Omega) \xrightarrow{\nabla \cdot} L^2(\Omega) \rightarrow \{0\}. \quad (3.5)$$

Ultimele două secțiuni ale cap. 3 conțin tratarea completă din punct de vedere funcțional a unei ecuații eliptice în formele sale generale și particulare, precum și a unui sistem de ecuații caracteristic unei probleme de elasticitate liniară: forma tare, forma slabă, demonstrarea existenței și a unicității soluției, cazuri particulare.

Capitolul 4

Aspecte numerice

Capitolul 4 este dedicat rezolvării numerice a sistemelor de ecuații cu derivate parțiale, în forma lor slabă, prin metoda elementului finit, utilizând tehnica Galerkin. Aici sunt evidențiate aspectele esențiale ce însoțesc trecerea ecuațiilor din universul funcțional abstract continuu în universul digital (discret):

- Domeniul inițial Ω , deschis, este aproximat prin domeniul finit, discretizat $\Omega_h = \bigcup_{k \in \mathcal{T}_h(\Omega)} \Omega_k$, cunoscut sub numele de *triangularizarea* $\mathcal{T}_h(\Omega)$. Pe acest ultim domeniu, se definește forma slabă discretizată a problemei multifizice, descrisă în membrul stâng de funcționala biliniară $\mathcal{A}(u_h, v_h)$, iar în membrul drept de către funcționala liniară $\mathcal{F}(v_h)$. u_h este soluția aproximativă a problemei, iar v_h reprezintă elementele spațiului aproximat al funcțiilor de test. În fiecare punct al spațiului Ω soluția aproximativă este calculată cu ajutorul unui polinom de interpolare a soluțiilor locale fiecărui element finit determinate pe spațiul său propriu, Ω_k ;
- în universul digital noțiunea de infinit se pierde, fiind înlocuită cu relații de evaluare a erorii cu care se aproximează această noțiune. Această eroare este dependentă de finețea de discretizare a triangulației $\mathcal{T}_h(\Omega)$, precum și de gradul polinomului de interpolare menționat mai sus; în lucrarea de față sunt considerate doar polinoame de interpolare de gradul I;
- elementul finit este de fapt un obiect ce însumează atât caracteristici de ordin pur geometric, cât și caracteristici de ordin funcțional: pe domeniul geometric se definesc două spații duale, cel al funcțiilor de formă, respectiv cel al gradelor de libertate; conform tehnicii Galerkin ambele spații admit ca bază același set de funcții de test;

- în funcție de forma diferențială ce descrie formularea slabă, spațiile elementelor finite sunt spații Hilbert discrete, *grad*-, *rot*-, *div*-, respectiv *L²-conforme*, ce păstrează proprietatea de continuitate pe întreg domeniul de calcul, conform proprietăților garantate de către fiecare formă diferențială în parte. Spațiile funcționale ale funcțiilor de formă și ale gradelor de libertate sunt determinate pe un element de referință (master) triunghiular pentru problemele 2D, respectiv tetraedral pentru problemele 3D. El este proiectat pe fiecare din elementele fizice cu ajutorul unei transformări afine.

În funcție de operatorul diferențial caracteristic formulării slabe, soluția numerică trebuie căutată în unul din următoarele spații funcționale:

- \mathcal{W}_h^1 pentru soluții slabe căutate în $H^1(\Omega)$:

$$\mathcal{W}_h^1 = \{u_h(\mathbf{x}) \in H^1(\Omega) \mid u_h^k(\mathbf{x}) \in P^{H1_k}(\Omega_k) \subset H^1(\Omega_k), \forall \Omega_k \in \mathcal{T}_h\},$$

unde $P^{H1_k}(\Omega_k)$ este spațiul funcțiilor de formă ale elementelor finite *grad* conforme de ordin I definite pe (Ω_k) ;

- $\mathcal{V}_{h,I}^1$ pentru soluții slabe căutate în $H(\mathbf{rot}, \Omega)$:

$$\mathcal{V}_{h,I}^1 = \{\vec{u}_h(\mathbf{x}) \in H(\mathbf{rot}, \Omega) \mid \vec{u}_h^k(\mathbf{x}) \in R_k(\Omega_k) \subset H(\mathbf{rot}, \Omega_k), \forall \Omega_k \in \mathcal{T}_h\}.$$

unde $R_k(\Omega_k)$ este spațiul funcțiilor de formă ale elementelor finite *rot* conforme de ordin I (Nédélec of ordin I) definite pe (Ω_k) ;

- \mathcal{Q}_h^1 pentru soluții slabe căutate în $H(\mathbf{div}, \Omega)$:

$$\mathcal{Q}_h^1 = \{\vec{u}_h(\mathbf{x}) \in H(\mathbf{div}, \Omega) \mid \vec{u}_h^k(\mathbf{x}) \in D_k(\Omega_k) \subset H(\mathbf{div}, \Omega_k), \forall \Omega_k \in \mathcal{T}_h\}.$$

unde $D_k(\Omega_k)$ este spațiul funcțiilor de formă ale elementelor finite *div* conforme de ordin I (Raviart-Thomas de ordin I) definite pe (Ω_k) ;

- \mathcal{S}_h^1 pentru soluții slabe căutate în L^2 :

$$\mathcal{S}_h^1 = \{\varphi \in L^2(\Omega) \mid \varphi_h^k \in P_0(\Omega_k) \subset L^2(\Omega_k), \forall \Omega_k \in \mathcal{T}_h\}.$$

unde $P_0(\Omega_k)$ este spațiul funcțiilor de formă ale elementelor finite *L²* conforme de ordin I definite pe spațiul (Ω_k) ;

- spațiile funcționale de mai sus se pot genera unul dintr-altul conform secvenței De Rham discrete, echivalentă cu cea din universul funcțional continuu:

$$\mathbb{R} \rightarrow \mathcal{W}_h^1 \xrightarrow{\nabla} \mathcal{V}_{h,I}^1 \xrightarrow{\nabla \times} \mathcal{Q}_h^1 \xrightarrow{\nabla \cdot} \mathcal{S}_h^1 \rightarrow \{0\}. \quad (4.1)$$

Concluzia esențială este că *forma diferențială, prin imaginea secvenței De Rham, reprezintă legătura esențială între aspectele fizice, matematice și numerice ale problemelor multifizice.*

Capitolul 5

Aspecte computaționale

Capitolul tratează, sub toate aspectele discutate în capitolele precedente, o problemă mutificică de actualitate și anume modelarea unui microșunt capacitiv. Dispozitivul face parte din categoria sistemelor microelectromecanice (presurtat în limba engleză - MEMS).

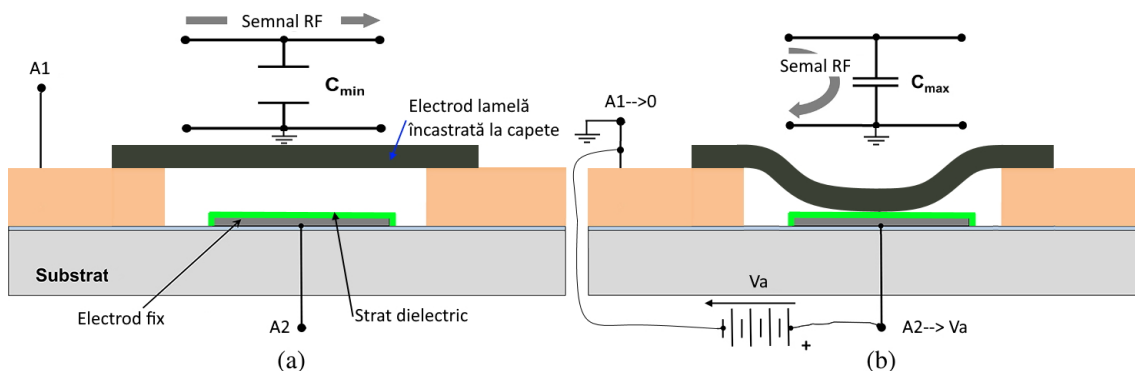


Figura 5.1: Principiul de funcționare al unui șunt capacitiv realizat cu un microcomutator integrat. Șuntul este deschis atunci când nu este aplicată tensiunea continuă de comandă V_a (a); Șuntul se închide complet dacă se aplică tensiunea critică $V_a = V_{PI}$; se poate observa că valoarea capacității (deci și a frecvenței de tăiere) poate fi controlată în tensiune atâta timp cât $0 < V_a \leq V_{PI}$.

Pe parcursul procesului de modelare, au fost parcurși următorii pași:

1. este elaborat un model conceptual în două variante 2D, respectiv 3D;
2. pentru ambele variante sunt descrise formulările matematice tari și slabe;

3. este descris un model analitic aproximativ 1D ce admite o soluție analitică care permite evaluarea calitativă a funcționării dispozitivului; aici este evidențiat caracterul neliniar al cuplajului dintre două probleme liniare: una de electrostatică, iar cealaltă de elasticitate liniară; problema cuplată este neliniară din două motive:
 - (a) Forța electrostatică \vec{F}_e care reprezintă legătura dintre cele două probleme este dependentă de pătratul excitației V_a ;
 - (b) Domeniul Ω_e pe care se rezolvă problema electrică este dependent de deplasarea u a contactului mobil elastic, care, la rândul lui, se determină din rezolvarea problemei mecanice, în funcție de F_e .
4. În consecință, este propus un algoritm iterativ pentru rezolvarea problemei cuplate neliniare;
5. Modelele numerice 2D și 3D sunt construite prin tehnica elementului finit, cu ajutorul unui software specializat: **FreeFEM++**. Acest software permite alegerea elementelor finite conforme exact după definițiile discutate în capitolul precedent. Descrierea problemei se face direct prin scrierea expresiilor formulărilor slabe, așa cum au fost discutate în capitolul dedicat aspectelor matematice. Anexele 1 și 2 conțin listingurile programelor scrise pentru problemele 2D, respectiv 3D, listinguri din care rezultă clar abordarea funcțională a problemelor.
6. Sunt prezentate și discutate rezultatele obținute pentru diverse simulări efectuate cu elemente grad-conforme de ordin I și II;
7. Forța electrostatică ce acționează asupra suprafeței armăturii mobile poate fi determinată prin două metode:
 - (a) evaluarea tensiunii maxwelliene într-un punct de pe suprafața armăturii;
 - (b) evaluare energetică prin aplicarea primei legi a termodinamicii: forța este determinată din lucrul mecanic efectuat de către câmpul electrostatic pentru deplasarea armăturii pe o distanță suficient de mică - notată cu δy - pentru a putea considera această forță constantă:

$$\delta W_e = \delta L = F_e \delta y, \quad (5.1)$$

unde:

$$\delta W_e = W_e(g + \delta y) - W_e(g), \quad (5.2)$$

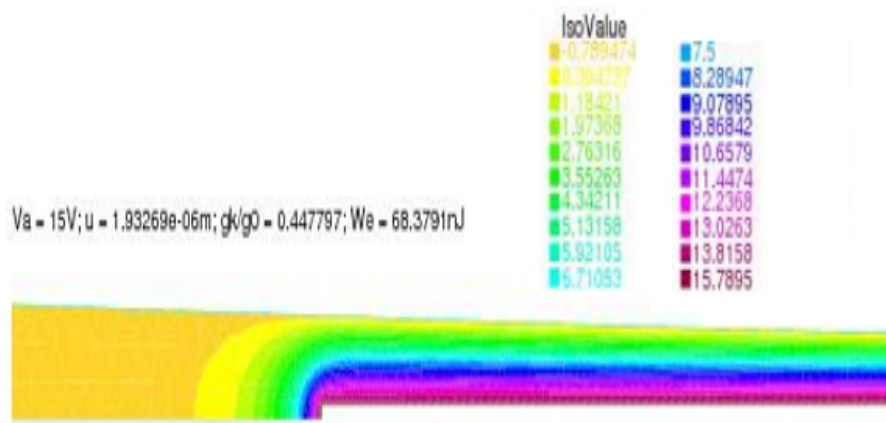


Figura 5.2: Distribuția potențialului electric în domeniul Ω_E , pentru rețeaua Ref \times 2 și $V_a = 15V$, penultima iterație ($u = 1,932\mu m$).

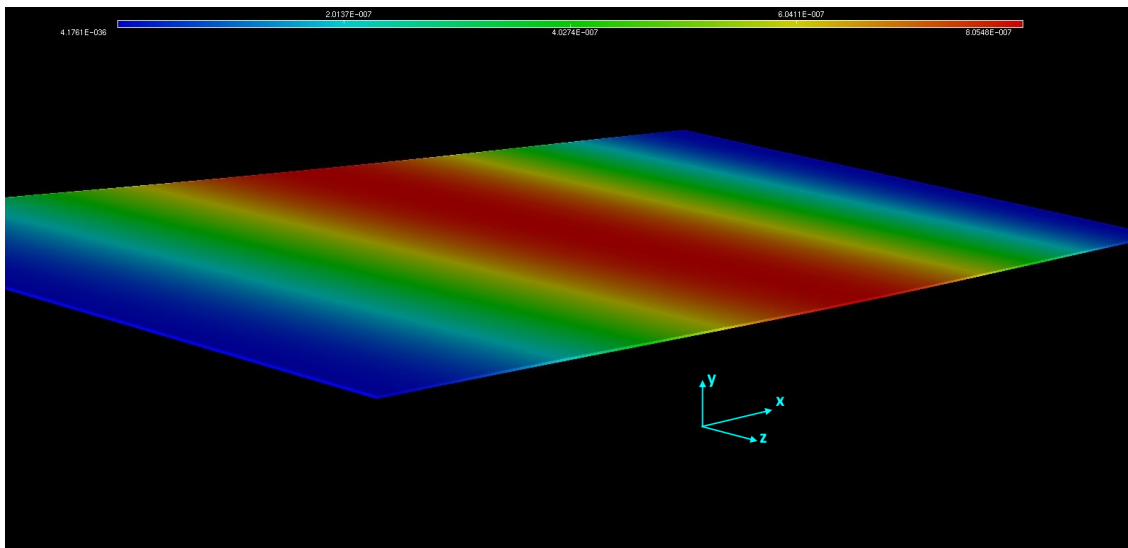


Figura 5.3: Distribuția componentei u_y a vectorului deplasare pe domeniul lamei elastice Ω_M . Deplasarea este maximă în zona de mijloc a lamei. Valorile, indicate prin codul culorilor sunt cele corespunzătoare simulării pentru $V_a = 15V$.

8. scopul final al simulărilor este de a determina *tensiunea critică* V_{PI} de închidere a microswitch-ului capacitiv;
9. sunt prezentate și comparate rezultate între simulările 2D și 3D, atât din

punct de vedere al acurateții simulării, dar și al timpului de calcul (v. fig. 5.4). Comparația grafică din fig.5.4 validează modelul 3D în raport cu cel 2D. Caracteristica 3D este mai aproape de realitate întrucât surprinde mai realist distribuția câmpului electric, în comparație cu modelul 2D. Cu toate acestea, simularea 3D a durat 153 minute, presupunând rezolvarea a 1.160.000 de ecuații, în comparație cu cea 2D care a durat numai 148sec., corespunzând rezolvării a 5.100 ecuații, deci de aproximativ 60 de ori mai mult! Calculele su fost executate pe un laptop Dell Inspiron, dotat cu procesor i7-8550U @1,80Ghz și 16Gb RAM, sub sistemul de operare Windows10©.

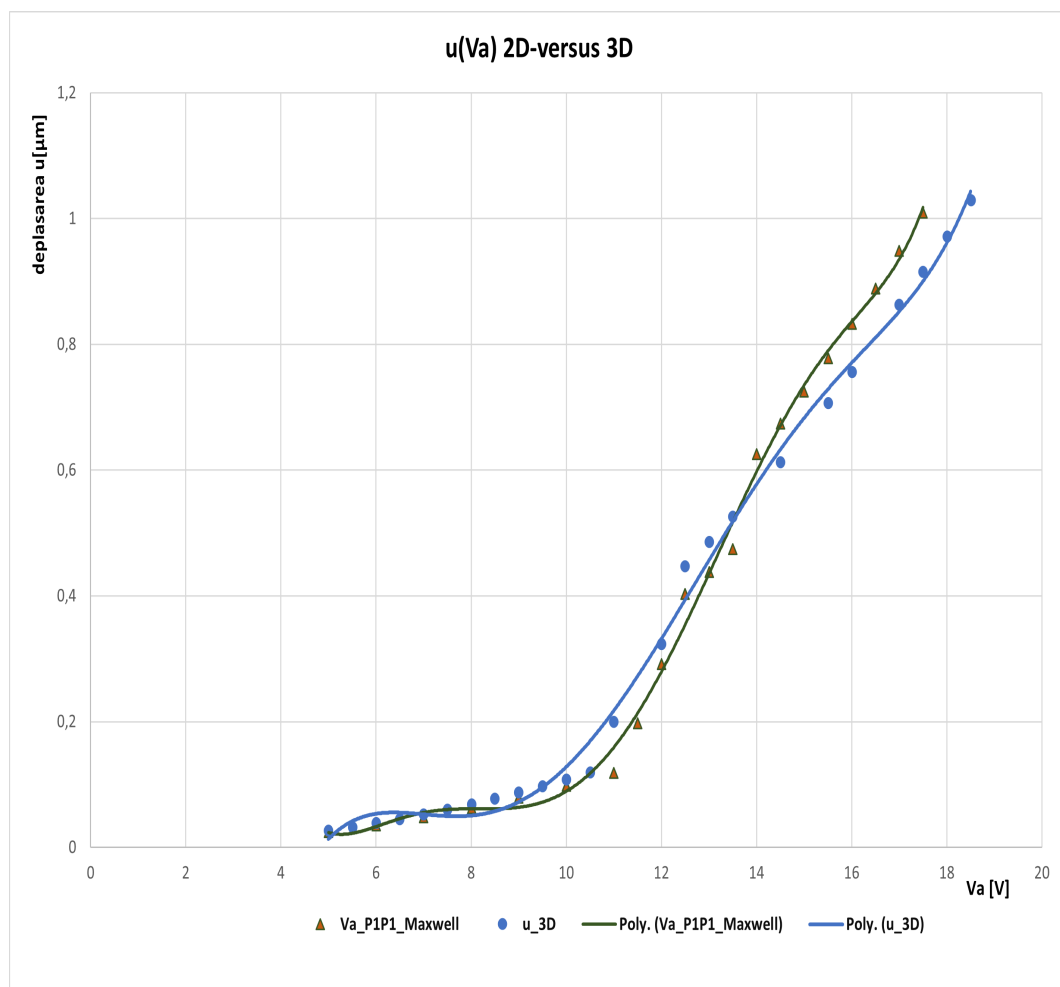


Figura 5.4: Curba deplasării u a armăturii mobile funcție de tensiunea de acționare V_a . Comparație între caracteristica trasată prin simulări cu modelul 2D (punctele verzi/triunghiulare și cea trasată prin simulări cu modelul 3D (punctele albastre/ovale).

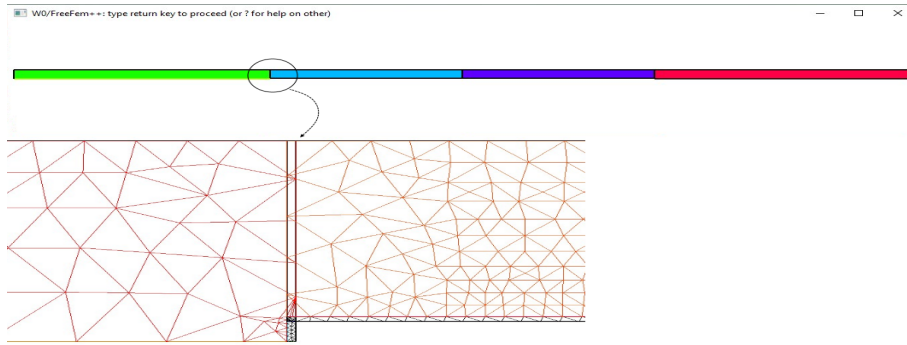


Figura 5.5: Domeniul Ω_E împărțit în patru subdomenii care se suprapun pe câte o fâșie îngustă în jurul fiecărei frontiere comune.

10. în final este folosită o metodă de descompunere a domeniilor astfel încât să devină posibilă prelucrarea numerică pe mai multe procesoare în paralel, fiecărui procesor fiindu-i atribuit un subdomeniu; sunt prezentate rezultate comparative, sub aspectul timpului de calcul, între rezolvarea serială și cea paralelă. Domeniul problemei electrostatice a fost divizat în 4 subdomenii care se suprapun pe câte o porțiune îngustă, aleasă convenabil pentru a permite descrierea ușoară a geometriilor asociate (v. fig.5.5). Alegerea corespunde numărului de procesoare reale disponibile pe calculatorul pe care am efectuat simulările.

Procesul de rezolvare este unul iterativ:

$$-\nabla \cdot (\varepsilon \nabla v^{(k)}) = 0 \text{ pe } \Omega_i, \quad (5.3)$$

$$v_i^{(k)} = v_j^{(k-1)} \text{ pe } \Gamma_{ij}, \text{ pentru } j = 1, \dots, na_i \quad (5.4)$$

$$v_i^{(k)} = V_a \text{ pe suprafața electrodului fix}, \quad (5.5)$$

$$v_i^{(k)} = 0 \text{ pe suprafața electrodului mobil}, \quad (5.6)$$

$$\frac{\partial v_i}{\partial n} = 0 \text{ pe suprafețele substratului izolant},$$

unde na_i este numărul de subdomenii vecine cu Ω_i , iar Γ_{ij} reprezintă frontiera comună a subdomeniilor Ω_i și Ω_j . Pe parcursul iterațiilor valorile v_i și v_j pe Γ_{ij} devin foarte apropiate. Figurile 5.6 și 5.7 surprind această evoluție.

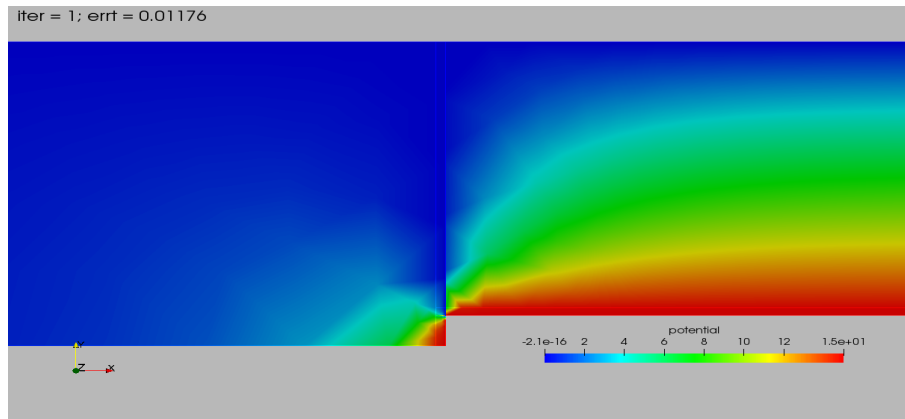


Figura 5.6: Distribuția potențialului electric pe frontiera comună dintre Ω_0 and Ω_1 în urma primei iterații. Inițial, pe această frontieră fuseseră impuse condiții omogene. Eroarea în sens euclidian dintre valorile din stânga și dreapta frontierei comune este de ordinul 10^{-2} . Potențialul de acționare a lamei elastice este $V_a = 15V$.

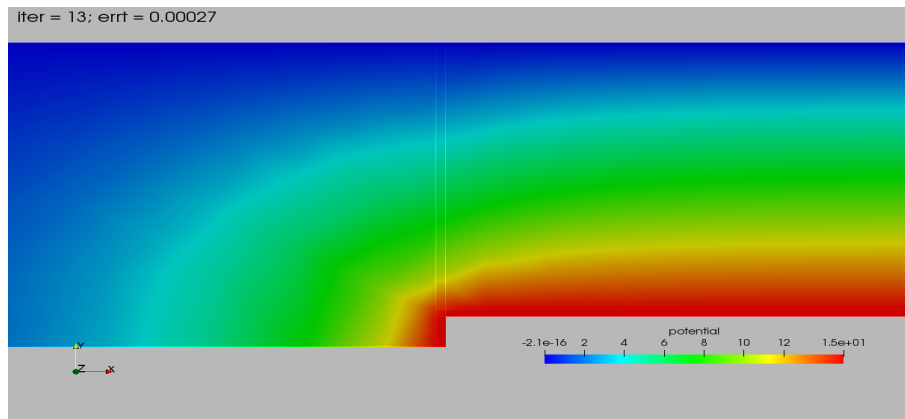


Figura 5.7: Distribuția potențialului electric pe frontiera comună Ω_0 and Ω_1 după ultima iterație. Eroarea în sens euclidian dintre valorile din stânga și dreapta frontierei comune este de ordinul 10^{-4} . Potențialul de acționare a lamei elastice este $V_a = 15V$.

Finețea de discretizare a unui domeniu este stabilită în **FreeFEM++** prin impunerea numărului de noduri pe fiecare frontieră a acestuia; rețeaua de discretizare este generată apoi automat. Consecința este că rețelele de discretizare asociate subdomeniilor rezultate din descompunere sunt sensibil mai fine decât rețeaua de discretizare care acoperă zona corespondentă din modelul întreg. Cu toate acestea, timpul de calcul consumat de implementarea paralelă este mai mic de aproximativ 2,3 ori decât varianta serială, acest timp

Procesare →	Serial			Paralel			S
Ordin EF ↓	DOF	t [s]	t_{spec} [μs/DOF]	DOF	t [s]	t_{spec} [μs/DOF]	
P1	4381	0,19	43	7073	0,13	18	2,39
P2	16492	0,86	52	26912	0,62	23	2,26

Tabela 5.1: Timpii de rulare pentru o iterație a problemei electrice. Comparativ între algoritmul serial și cel paralel (descompunerea domeniilor), pentru elemente finite de ordin 1 (P1), respectiv ordin 2 (P2). Numărul gradelor de libertate se referă la suma gradelor de libertate utilizate de toate procesele implicate. t_{spec} reprezintă timpul specific pe grad de libertate - determinat cu relația t/DOF .

fiind de fapt impus de cel mai lent dintre procesele paralele, la care se adaugă timpul consumat de secvența ce rulează serial. Pentru a putea efectua o comparație reală am determinat *timpul specific*, notat cu t_{spec} și determinat ca raportul dintre timpul total consumat de proces și numărul de grade de libertate (DOF) ce stabilesc dimensiunea problemei atribuită procesorului respectiv. Simulările au fost efectuate pentru elemente grad-conforme de ordin I (P1), respectiv de ordin II (P2)(v. tab.10).

Capitolul 6

Concluzii

6.1 Concluzii generale

Lumea digitală a devenit, pe departe, cea mai importantă resursă de informație solicitată în orice domeniu.

De aici tendința, aparent de neoprit, pentru posibilitatea de a prelucra și a stoca un volum cât mai mare de date, într-un timp cât mai redus, respectiv într-un spațiu cât mai redus. Comunitatea științifică are un dublu rol: pe de o parte cea de consumatoare masivă de resurse de calcul, iar pe de altă parte cea de creatoare și dezvoltatoare ale acelor resurse de calcul. Din punct de vedere hardware, o primă etapă de dezvoltare a fost aceea în care creșterea frecvenței de lucru per procesor a fost limitată de cantitatea mare de căldură degajată de acest regim de lucru. Acum ne aflăm în plină dezvoltare a etapei următoare și anume cea a folosirii a cât mai multe procesoare în paralel. În primul capitol sunt evidențiate principalele jaloane care au marcat evoluția arhitecturilor hardware ale procesoarelor, arhitecturi care, în ultimele lor variante, conțin ele însele unități logice ce pot rula seturi de instrucțiuni în paralel. Mai mult, procesorul ce conduce unitatea centrală a unui calculator poate lucra, pentru rezolvarea aceleiași probleme, în paralel cu procesorul grafic al aceluiași sistem. Dezvoltarea rapidă a arhitecturilor hardware, a atras după sine, deschiderea către aplicații software noi, materializate prin algoritmi dedicați, preocupați mai puțin de a face economie de memorie, ci mai mult de creșterea și controlul acurateții calculelor numerice, precum și de reducerea timpului de calcul. Modelul clasic al programării structurate, utilizat pentru implementarea algoritmilor seriali a fost înlocuit cu modele ale programării paralele. Este subliniat aici faptul că modalitățile de paralelizare ale unui algoritm nu se pot înscrie unor așa zise rețete, ci, mai degrabă, trebuie să respecte anumite principii, având ca scop

esențial îndeplinirea unor criterii generale de eficiență ale programului. Unul din cele mai potrivite modele de paralelizare ale unui algoritm complex, este un model hibrid de programare paralelă, reprezentativ pentru majoritatea cazurilor ce apar în practică, model ce poartă denumirea de „Single Program Multiple Data” (SPMD). Concluzia principală a primului capitol privește problemele științifice și ingineresti actuale, de mare complexitate, necesitând, pentru a fi rezolvate, o putere de calcul pe măsură. In consecință, s-a dezvoltat o nouă disciplină numită "Calcul Științifice de Inaltă Performanță" (High Performance Scientific Computing, prescurtat - HPSC). Caracteristica esențială a HPSC este interdisciplinaritatea: abordarea ei presupune cunoștințe de fizică, inginerie, matematică, metode numerice, precum și de tehnologia informației. Acest fapt explică ordinea tematicilor expuse în capitolele următoare ale tezei: aspecte fizice, matematice, numerice și în final computaționale.

Fenomenele fizice sunt descrise în fiecare punct al domeniului fizic de funcții scalare sau vectoriale, dependente de spațiu și timp, fiind atașate mărimilor primitive specifice. Comportamentul local al acestor mărimi este descris de către operatori diferențiali precum *grad*, *rot*, *div*. Mărimile globale sunt derivate din cele primitive prin integrarea acestora pe diverse varietăți geometrice de ordin unu, doi sau trei, respectiv curbe, suprafețe sau volume. Se poate evidenția legătura intimă dintre operatorii diferențiali și varietățile geometrice menționate mai sus:

- gradientul aplicat funcțiilor scalare, generează câmpuri vectoriale *conservative* ale căror integrale pe varietăți geometrice de ordin I (curbe), nu depind de drum, ci numai de valorile funcției vectoriale din capetele acestuia; în consecință circulația unei astfel de funcții este nulă pe orice curbă închisă;
- prin aplicarea operatorului **rot** câmpurilor vectoriale care admit acest operator, se obțin alte câmpuri vectoriale, ale căror *fluxuri* pe orice suprafață (varietate geometrică de ordin II) închisă este nulă;
- aplicând operatorul **div** unui câmp vectorial se crează un câmp scalar al cărei integrală pe o varietate geometrică de ordin III (volum) capătă semnificația unei surse de câmp;
- mulțimea funcțiilor scalare rezultate din aplicarea operatorului **div** unor funcții vectoriale, conține numai elemente integrabile; dintre acestea putem desprinde o submulțime de funcții *cu media nulă* (integrala lor) pe un anumit domeniu spațial.

Fiecare dintre operatorii diferențiali enumerați mai sus pot genera spații Hilbert

asociate (v. (3.2), (3.3), (3.4)). In termeni funcționali, putem emite următoarele observații:

- gradientul aplicat unor funcții scalare constante spațial se anulează; prin urmare, mulțimea numerelor reale constituie nucleul operatorului *grad* aplicat spațiului grad-conform H^1 ;
- operatorul **rot** aplicat oricărui câmp vectorial provenit dintr-un gradient se anulează; deci mulțimea funcțiilor vectoriale provenite dintr-un gradient constituie nucleul operatorului **rot** aplicat spațiului funcțional rot-conform $H(\mathbf{rot})$;
- operatorul **div** aplicat unui câmp vectorial provenit dintr-un rotor generează un câmp scalar nul; în consecință, mulțimea funcțiilor vectoriale provenite dintr-un rotor formează nucleul operatorului **div** aplicat spațiului funcțional div-conform, $H(\mathbf{div})$;
- mulțimea funcțiilor scalare din spațiul div-conform, cu medie nulă, formează nucleul spațiului funcțional al scalarilor reali;

Această secvență de implicații reprezintă secvența *De Rham* (v. (3.5)).

Secvența evidențiază izomorfismul spațiilor vectoriale implicate, dând totodată și o metodă de generare a unui spațiu din celălalt. Tot cu ajutorul secvenței de Rham se poate pune în evidență ([63]-Teorema 3.45), într-o manieră foarte elegantă matematic, teorema de descompunere Helmholtz, fundamentală în analiza vectorială, care garantează posibilitatea descompunerii unice, a oricărui câmp vectorial $\vec{u} \in [L^2(\Omega)]^3$, într-un câmp irotațional, reprezentat prin gradientul unui potențial scalar și un câmp solenoidal, reprezentat prin rotorul unui potențial vector:

$$\vec{u} = \nabla\varphi + \nabla \times \vec{A}, \quad (6.1)$$

Fenomenele fizice sunt descrise matematic prin ecuații cu derivate parțiale în majoritatea cazurilor de ordin II. Aceste ecuații reprezintă formularea tare a problemei, presupunând continuitatea soluției în fiecare punct al domeniului. Prin identificarea corectă a spațiilor Hilbert în care există soluțiile căutate, se poate scrie formularea slabă a aceleiași probleme prin proiectarea ecuațiilor inițiale pe o bază a acestor spații Hilbert. Se pot pune apoi în evidență existența și unicitatea soluției slabe cu ajutorul teoremei Lax-Milgram. Această soluție păstrează proprietatea de continuitate, dar în sens generalizat (distribuțional).

Mergând pe calea găsirii soluției numerice pentru problema fizică, devine necesară găsirea unei formulări slabe numerice echivalentă cu cea matematică. In

acest scop, domeniului inițial (deschis și eventual mărginit) este aproximat cu un domeniu finit. Domeniul aproximativ se obține prin discretizarea celului inițial într-un set finit de elemente geometrice cu forme cunoscute: triunghiuri, tetraedre, dreptunghiuri, prisme, etc.. Pe fiecare dintre aceste domenii se definește o funcție de interpolare ce aproximează soluția exactă. Valorile soluției aproximative se numesc grade de libertate și sunt determinate pe anumite varietăți geometrice din domeniul finit. Ele pot fi:

- valori precizate în pe varietăți de ordin zero - reprezentate de anumite noduri (puncte);
- valori precizate ca integrale lineice pe varietăți de ordin I, reprezentate de laturile formelor geometrice amintite mai sus (muchiiile rețelei de discretizare);
- valori determinate ca fluxuri pe fețele rețelei de discretizare (varietăți geometrice de ordin II);
- valori scalare asociate volumelor în care este divizat domeniul aproximativ (varietăți geometrice de ordin III);

Soluția în orice alt punct local unui anumit element finit se determină prin interpolarea locală a gradelor de libertate. Polinomul de interpolare este construit cu ajutorul unor funcții de formă, la rândul lor definite pe domeniul elementului finit. În consecință, elementul finit presupune existența simultană a următoarelor entități:

- un domeniu geometric al elementului finit;
- un spațiu funcțional al gradelor de libertate ce pot fi scalari sau funcții;
- spațiul funcțiilor de formă dual cu cel al gradelor de libertate.

Soluția în orice punct a domeniului problemei se obține prin interpolarea globală, a tuturor gradelor de libertate locale. Acest lucru este posibil dacă și numai dacă operatorii ce descriu formularea slabă, păstrează proprietatea de continuitate și în forma lor discretă. Acest deziderat poate fi împlinit numai dacă se asociază corect operatorii diferențiali în cauză cu varietățile geometrice pe care sunt definite gradele de libertate:

- *grad* pentru grade de libertate definite pe noduri;
- *rot* pentru grade de libertate definite pe muchii;

- **div** pentru grade de libertate definite ca fluxuri pe fețele rețelei de discretizare;

În consecință spațiile funcționale conforme ale elementelor finite vor fi:

- grad-conforme (H^1) pentru grade de libertate definite pe noduri;
- rot-conforme ($H(\mathbf{curl})$) pentru grade de libertate definite pe muchii;
- div-conforme ($H(\mathbf{div})$) pentru grade de libertate definite ca fluxuri pe fețe;

Acum se poate observa coerența între secvența De Rham aplicată spațiilor conforme ale elementelor finite (v. (4.1))cu cea aplicată spațiilor operatorilor diferențiali generalizați (v.(3.5)). Se poate afirma, în concluzie că forma diferențială, prin imaginea secvenței de Rham, reprezintă legătura esențială între aspectele fizice, matematice și numerice ale problemelor multifizice.

6.2 Contribuții originale

1. Contribuții la elaborarea mai multor lucrări prezentate la conferințe de specialitate, dintre care câteva cotate ISI:
 - „An Object Oriented Data Structure Designed for Multiphysics Simulations on Parallel Computers”; autori: Mihai Popescu, Aurel-Sorin Lup , Gabriela Ciuprina, Daniel Ioan; lucrare prezentată la conferința ATEE-2015, București [74]. Lucrarea propune o structură de date orientată pe obiecte ce poate fi utilizată pentru implementarea algoritmilor specifici simulării multifizice. Structurile de date au fost implementate în C++ și testate parțial pe simularea unui microcomutator MEMS. Lucrarea a reprezentat un început de drum pentru generarea unei biblioteci de clase C++ dedicate modelării mulifizice;
 - „Using Object Oriented Data Structures for Optimizing MEMS Devices on Parallel Computers”; autori: Mihai Popescu, Aurel-Sorin Lup, Ruxandra Bărbulescu, Gabriela Ciuprina și Daniel Ioan; lucrare prezentată la The XVII International Symposium on Electromagnetic Fields in Mechatronics, Electrical and Electronic Engineering, Valencia, Spania, 2015 [72]. Lucrarea prezintă structura de date orientată pe obiecte propusă inițial în [74], dar mult îmbunătățită, în sensul că permite, împărțirea unui domeiu fizic în subdomenii și tratarea acestora pe procesoare paralele, fără a impune o comunicație interprocese intensivă,

deci consumatoare de timp. Sunt prezentate rezultate ale rulărilor pe cluster-ul Laboratorului de Modelare Numerică (v.subcap.??);

- „Parametric Multiphysics 3D Modelling of a Bridge Type MEMS Capacitive Switch”; autori: Aurel-Sorin Lup, Gabriela Ciuprina, Mihai Popescu și Daniel Ioan; lucrare prezentată la The XVII International Symposium on Electromagnetic Fields in Mechatronics, Electrical and Electronic Engineering, Valencia, Spania, 2015 [54]. Lucrarea prezintă simulări multifizice 3D ale unui microșunt capacitiv, realizate cu pachetul software Comsol Multiphysics V4.4. Simulările au fost efectuate atât în regim static, precum și dinamic pentru diverse tensiuni de acționare, dar și pentru diferite lungimi ale membranei elastice (v.cap.??);
- „HPC in Multiphysics Analysis of RF-mems Capacitive Switches”; autori: Sorin Lup, Gabriela Ciuprina, Mihai Popescu și Daniel Ioan; lucrare prezentată la SIELA 2018 - The XXth International Symposium on Electrical Apparatus and Technologies, Burgas, Bulgaria [55]. Lucrarea prezintă o comparație între simulările neliniare de regim static efectuate pe de o parte cu pachetul software Comsol Multiphysics și pe de altă parte cu **FreeFEM++** în scopul de a determina tensiunea de minimă acționare a unui microcomutator capacitiv. Iterațiile Comsol au fost efectuate serial, pe când cele cu **FreeFEM++** au fost efectuate în paralel pe 8 procesoare;
- „A Parallel Algorithm for Multiphysics Analysis of RF-MEMS”; autori: Mihai Popescu, Sorin Lup, Gabriela Ciuprina, Daniel Ioan și Ruxandra Bărbulescu, SCEE 2018 – The 12th International Conference on Scientific Computing in Electrical Engineering, 23 – 27 September 2018, Sicilia, Italia [73]. Lucrarea reia tema prezentată în [55], dar cu o abordare teoretică efectuată cu ajutorul formulărilor slabe. Implementarea cu **FreeFEM++** rezultă în acest mod natural, rularea pe procesoare paralele fiind mai eficientă. Comparațiile au fost efectuate cu un model de referință Comsol Multiphysics.

2. Prezentarea sintetică, într-un singur document, a celor mai importante instrumente hardware și software împreună cu modelele de programare, care sunt folosite în mod curent pentru programarea de înaltă performanță (High Performance Computing);
3. Sintetizarea, într-o ordine logică, a aparatului matematic, foarte complex, care stă la baza acelei laturi a analizei funcționale folosită în tratarea formulărilor

slabe ale problemelor multifizice. Sarcina nu a fost tocmai simplă, întrucât literatura matematică în domeniu este foarte bogată, avându-și începuturile în prima parte a sec. XIX. Mai mult, aproape fiecare matematician ce a adus contribuții importante în domeniu, a introdus notații, respectiv demonstrații proprii, care au îngreunat lectura, înțelegerea și mai ales conectarea cu lucrările altor matematicieni, precum și cu realitatea fizică;

4. Expunerea într-o ordine coerentă a întreg aparatului matematic ce duce la construcția elementului finit. Folosind acest aparat, sunt specificate modalitățile de construcție ale elementelor finite de ordin I, grad-, rot-, și div-conforme, în corespondență cu secvența de Rham discretă (4.1), discutată în ultima parte a capitolului dedicat aspectelor numerice.

Cu toate că proiectele materializate prin lucrările publicate și expuse mai sus au avut, prin colaboratorii săi și aspecte fizic practice, lucrarea de față nu și-a propus compararea rezultatelor simulărilor cu rezultate practice sau teoretice de referință, comparații care au fost de altfel subiect al lucrărilor prezentate în conferințele menționate. În lucrare am preferat evidențierea câtorva din problemele ce pot apărea pe parcursul simulării numerice, și unele din cauzele care le pot produce. Este importantă evidențierea multitudinii de aspecte (fără a avea pretenția că au fost epuizate toate) ce trebuie luate în considerare, pe parcursul procesului de modelare multifizică: ecuațiile formulării tari sunt fidele fenomenelor fizice studiate, reflectând continuitatea acestora. Trecerea în universul funcțional al formulărilor slabe este necesară ca metodă ce reprezintă un pas important spre formularea numerică. Această trecere relaxează condițiile de existență ale proprietății de continuitate, permițând analiza cu un aparat unitar a unei largi varietăți de domenii fizice. În momentul migrării în universul numeric, ce nu poate trata ecuațiile decât pe porțiuni, prin discretizare, calculele sunt afectate de erori numerice, care, dacă nu sunt controlate corect, duc la rezultate imprevizibile sau incoerente. De aici și importanța respectării modului de construcție al elementelor finite (v. secvența De Rham), deoarece conformitatea cu formele diferențiale ce descriu ecuațiile reprezintă garanția păstrării proprietăților de continuitate esențiale inclusiv în universul digital. Aici merită subliniat ceea ce am afirmat mai sus, și anume că formele diferențiale, prin imaginea secvenței de Rham, reprezintă legătura esențială între aspectele fizice, matematice și numerice ale problemelor multifizice.

5. Consider că acest parcurs, prezentat sintetic, dar complet și coerent, este

contribuția originală principală adusă de prezenta lucrare. Urmând exemplul din cap. 5, pot fi abordate și alte probleme multifizice, urmărind toate aspectele fizice, matematice și computaționale descrise în ordinea firească a aplicabilității lor, pe parcursul prezentei teze. Totodată această lucrare intenționează a atrage atenția asupra importanței însușirii, de către orice specialist, doritor a lucra în domeniul modelării problemelor multifizice, a principiilor analizei funcționale. Stăpânirea matematicii, în speță a analizei funcționale, este de o extremă importanță pentru înțelegerea și tratarea corectă a problemelor multifizice. În încheiere, merită accentuat faptul că fără o bună înțelegere a matematicii menționate, modelarea numerică multifizică se reduce la un interesant exercițiu de utilizare a unor pachete software dedicate, dar fără o reală și concretă utilitate practică.

6.3 Perspective

În mod cert metoda propusă pentru abordarea modelării multifizice nu este unică, dar la fel de cert este că și alte metode de lucru ar trebui să poposească cel puțin în fiecare din următoarele universuri:

1. mărimi și legi fizice ale tuturor fenomenelor implicate în modelul studiat;
2. analiză funcțională;
3. modelare numerică;
4. High Performance Computing (HPC).

O bună parte din lucrarea de față, este dedicată primelor trei aspecte enumerate mai sus. Deși teza conține informații de natură teoretică și practică, rămâne în perspectivă completarea acestora cu cercetări și lucrări dedicate următoarelor tematici:

- dezvoltarea unei metode de lucru, bogat documentată cu exemple și studii de caz, ce presupune descompunerea automată a domeniului multifizic studiat în mai multe subdomenii geometrice, în funcție de numărul de nuclee de procesare („cores”) disponibile. Fiecărui subdomeniu i se atașează atât câte o rețea de discretizare, precum și câte o implementare a unei formulări variaționale. În acest mod, întreaga problemă poate fi tratată numeric cu ajutorul mai multor nuclee de procesare, fiecare responsabil de câte un subdomeniu;

- pentru rezolvarea sistemului de ecuații global asamblat cu ajutorul procesoarelor menționate pot fi utilizate:
 - solvele paralele ce utilizează metode directe (de ex. MUMPS [4], PETSc [3]);
 - solvele paralele bazate pe metode semiiterative cum ar fi gradienti conjugați (GC), sau reziduu minim generalizat (GMRES), utilizând ca precondiționare descompunerea domeniilor menționată mai sus.
- provocarea la ora actuală este că tehnologia hardware avansează mult mai rapid decât aplicațiile soft dedicate: un software scris acum, nu va rula neapărat mai eficient pe o nouă generație hardware care bate la ușă. Iată motivul pentru care, varii metode de modelare multifizică ar trebui implementate cu ajutorul a cel puțin două sau trei pachete software disponibile în universul HPC, dintre care cel puțin, unul comercial.
- în lucrarea de față am folosit **FreeFEM++** care s-a îmbogățit în ultimii doi ani cu o bibliotecă de funcții dedicată metodelor menționate mai sus (<https://doc.freefem.org/documentation/ffddm/>);
- un pachet software similar, aflat în plină dezvoltare este și „ONELAB” (<https://onelab.info/>), care are la bază generatorul de rețea de discretizare **Gmsh** (<https://gmsh.info/>) [32] având avantajul unei interfețe grafice proprii mult mai performante decât **FreeFEM++** ; beneficiind și de un solver propriu, ONELAB poate fi interfațat cu ușurință cu diverse biblioteci matematice utile în modelarea multifizică prin tehnici de HPC;
- metode de analiză asemănătoare pot fi testate și cu pachete software comerciale, cum ar fi COMSOL Multiphysics ©(<https://www.comsol.com>); robustețea solverului, posibilitățile de pre și posprocesare, precum și suportul documentaristic de care se bucură un astfel de software, sunt umbrite de lipsa de flexibilitate impusă de lipsa de acces la codurile sursă ale programului.

Am enumerat mai sus câteva din perspectivele ce se deschid spre continuarea dezvoltării tematicii propuse de prezenta teză. O parte din ele vor constitui subiectul unor cercetări și publicații viitoare ale autorului, cu speranța că ele vor atrage și specialiști mai tineri pe această cale, nu tocmai ușoară, dar cu un deosebit potențial științific, al modelării multifizice.

Bibliografie selectivă

- [1] ***. *OpenMP Application Program Interface*. OpenMP Architecture, July 2013. Version 4.0.
- [2] ***. The guide to the program posix certified by ieee and the open group. Technical report, The IEEE Open Group, 2017.
- [3] ***. Petsc/tao users manual. <https://petsc.org/release/docs/manual/>, 2020.
- [4] ***. *Multifrontal Massively Parallel Solver (MUMPS 5.4.1)*, 2021.
- [5] R.A. Adams and J.J.F. Fournier. *Sobolev Spaces*. Elsevier, 2003.
- [6] Neculai Andrei. Modele matematice în mecanică. Research Institute for Informatics, Center for Advanced Modeling and Optimization, 2009.
- [7] Donu Arapura. Introduction to differential forms, jun 2016.
- [8] Stefan Banach. *Theorie des Operations Lineaires*. Z Subwencji Funduszu Kultury Narodowej, 1932.
- [9] A. Behzadan and M. Holst. Sobolev-slobodeckij spaces on compact manifolds, revisited. Technical report, Departament of Mathematics, University of California San Diego, 2018.
- [10] B. Blaise and L. Livermore. Posix threads programming. Technical report, Lawrence Livermore National Lab. HPC Tutorials, 2021.
- [11] Alain Bossavit. *Electromagnetisme, en vue de la modelisation*. Springer Verlag Paris, 1993.
- [12] Alain Bossavit. *Computational Electromagnetism*. Elsevier, Academic Press, 1997.

- [13] H. Brezis. *Functional Analysis, Sobolev Spaces and Partial Differential Equations*. Springer, 2010.
- [14] M. Brinskiy and M. Lubin. An introduction to mpi-3 shared memory programming. Technical report, Intel Corporation, 2018.
- [15] Louis L. Bucciarelli. Solid mechanics. MIT Civil and Environmental Engineering Course 1.050., 2004.
- [16] Theo Buhler and Dietmar Salamon. *FUNCTIONAL ANALYSIS*. ETH Zurich, 2017.
- [17] Jean Cea. Annales de l’institut fourier. In *Approximation variationnelle des problèmes aux limites*, volume 14, pages 345–444. Imprimerie Durand, 28 - Lusingant, 1964.
- [18] P. G. Ciarlet. *The Finite Element Method for Elliptic Problems*. North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 2nd edition, 1979.
- [19] Frank H. Clarke. Generalized gradients and applications. *Transactions of the American Mathematical Society*, 205, 1975.
- [20] Keith Conrad. Bilinear Forms. Technical report, University of Connecticut, 2017.
- [21] Bernard Dacorogna. *INTRODUCTION TO THE CALCULUS OF VARIATIONS*. Imperial College Press, 2004.
- [22] Daniel. *Bazele Teoretice ale Ingineriei Electrice*. Editura 2000, 1989.
- [23] Robert Resnick David Halliday and Jearl Walker. *Fundamentals of physics*. John Wiley & Sons, Inc., 9th edition, 2008.
- [24] A.S. Demidov. *Generalized functions in mathematical physics Main ideas and concepts*. Nova Science Publishers, 2000.
- [25] Leszek Demkowicz. *Computing With Hp-adaptive Finite Elements*. Institute for Computational Engineering and Sciences The University of Texas at Austin, 2005.
- [26] Victorita Dolean, Pierre Jolivet, and Frédéric Nataf. An Introduction to Domain Decomposition Methods: algorithms theory and parallel implementation. HAL archives-ouvertes.fr, May 2016.

- [27] J. V. Fernandez, W.H.A Schilders, and L. Miguel Silveira. Order reduction techniques for coupled multi-domain electromagnetic based models. Technical report, CASA, 2008.
- [28] Richard Feynman. *Fizica modernă*, volume 1. Editura Tehnică, 1969.
- [29] Mocanu Florentina. *Mecanica Mediilor Deformabile*. Universitatea Tehnică "Gheorghe Asachi" Iasi, 2000. Note de curs.
- [30] I. Foster. *Designing and Building Parallel Programs: Concept and Tools for Parallel Software Engineering*. Addison-Wesley, 1995.
- [31] M. Gander, F. Nataf, and L. Halpern. Optimized Schwartz Methods. *12th International Conference on Domain Decomposition Methods*, 2001.
- [32] C. Geuzaine and J.F. Remacle. Gmsh: a three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 79(11):1309–1331, 2019.
- [33] V. Girault and P.A. Raviart. *Finite Element Methods for Navier-Stokes Equations: Theory and Algorithms*. Springer Berlin Heidelberg, 2012.
- [34] C. Grossmann, H. Roos, and M Stynes. *Numerical Treatment of Partial Differential Equations*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 3rd edition edition, 2007.
- [35] S.D.A. Hannot. *Modeling Strategies for Electro–Mechanical Microsystems with Uncertainty Quantification*. Technische Universiteit Delft, 2010.
- [36] F. Hecht. New development in freefem++. *Journal of Numerical Mathematics*, 20(3-4):251–256, 2012.
- [37] F. Hecht. FreeFEM Documentation. Release 4.0, April 2019.
- [38] R. Hiptmair. Finite elements in computational electromagnetism. *Acta Numerica*, 11:237–339, 2002.
- [39] J. Necas I. Hlaváček. *Mathematical Theory of Elastic and Elasto-Plastic Bodies*, volume 3. ELSEVIER, 1st edition, 1981.
- [40] Ronald H.W. Hoppe. Finite element methods. University of Huston - Webpage, 2016.

- [41] Jacopo Iannacci. *RF-MEMS Technology for High-Performance Passives*. 2053-2563. IOP Publishing, 2017.
- [42] D. Ioan and G Ciuprina. *Reduced Order Models of On-Chip Passive Components and Interconnects, Workbench and Test Structures*, chapter III.8, pages 447–467. Springer Berlin Heidelberg, 2008.
- [43] D. Ioan, G. Ciuprina, and W.H.A. Schilders. *Model order reduction, applications*, chapter „Complexity reduction of electromagnetic systems”, pages 145–200. De Gruyter, 2021.
- [44] Marsden J.E. and Hughes Thomas J.R. *Mathematical Foundations of Elasticity*. Dover Publications Inc., 1983.
- [45] D. Kanter. Inside nehalem: Intel’s future processor and system. <https://www.realworldtech.com/nehalem/>, 2008.
- [46] Robert C. Kirby, A. Logg, and A. Terrel. Common and unusual finite elements. <http://www.logg.org/anders/pub/papers/KirbyLoggEtAl2012a.pdf>, 2015.
- [47] A.M. Krall. A review of orthogonal polynomials satisfying boundary value problems. In *Othogonal Polynomials and their Applications*, volume 1329. Springer-Verlag, 1986.
- [48] Erwin Kreyszig. *Introductory Functional Analysis with Applications*. Wiley & Sons, 1989.
- [49] Cornelius Lanczos. *The Variational Principles of Mechanic*. University of Toronto Press, 1970.
- [50] Peter D. Lax. *Functional Analysis*. John Wiley & Sons, Inc., 2002.
- [51] G. Leoni. *A First Course in Sobolev Spaces*, volume v. 105. American Mathematical Society, 2009.
- [52] Christian Lessig. A primer on differential forms. *Computing + Mathematical Sciences California Institute of Technology*, 2012.
- [53] R.M. Lin and W.J. Wang. Structural dynamics of microsystems current state of research and future directions. In *Mechanical systems and signal processing*, volume 20, pages 1015–1043, 2006.

- [54] S. Lup, G. Ciuprina, M. Popescu, and D. Ioan. Parametric multiphysics 3d modelling of a bridge type mems capacitive switch. In *ISEF*, 2015.
- [55] S. Lup, M. Popescu, G. Ciuprina, and D. Ioan. Hpc in multiphysics analysis of rf-mems capacitive switches. In *XXth International Symposium on Electrical Apparatus and Technologies.*, 2018.
- [56] N. et alii MacDonald. Writing message passing parallel programs with mpi. a two day course on mpi usage. Technical report, Edinburgh Parallel Computing Centre, 2013.
- [57] Lawrence E. Malvern. *Introduction to the Mechanics of Continuous Medium*. Prentice-Hall, Inc, 1969.
- [58] Tarek P.A. Mathew. *Domain Decomposition Methods for the Numerical Solution of Partial Differential Equations*. Springer, 2008.
- [59] B. Mattson, B. Sanders, and B. Massingill. *Patterns for Parallel Programming*. Addison-Wesley Professional, 2004.
- [60] W. McLean. *Strongly Elliptic Systems and Boundary Integral Equations*. Cambridge University Press, 2000.
- [61] R. M. C. Mestrom. *Multiphysics Modelling and Experimental Validation of Microelectromechanical Resonator Dynamics*. PhD thesis, Technische Universiteit Eindhoven, 2009.
- [62] C. I. Mocanu. *Teoria câmpului electromagnetic*. Editura Didactică și Pedagogică, București, 1981.
- [63] Peter Monk. *Finite Element Methods for Maxwell's Equations*. Clarendon Press. Oxford, 2003.
- [64] Jean-Claude Nédélec. Mixed finite element in 3d in $h(\text{div})$ and $h(\text{curl})$. *Equadiff 6*, Proceedings of the International Conference on Differential Equations and Their Applications held in Brno, Czechoslovakia, Aug. 26 - 30, 1985:321–325, August 1985.
- [65] J. Necas. *Direct Methods in the Theory of Elliptic Equations*. Springer Monographs in Mathematics. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2012.

- [66] J. C. Nédélec. Mixed finite elements in \mathbb{R}^3 . In *Numerical Mathematics*. Springer-Verlag, 1980.
- [67] Patrick Newberry. Differential forms. Mathematics Department of the University of Colorado Boulder, sep 2016.
- [68] Jarkko Niiranen. Finite Element Methods for 2d and 3d Elasticity. Aalto University, Helsinki, Engineering Computation and Simulation, 31.10.2016-20.12.2016, Course 9.
- [69] Mícheál O’Searcoid. *Metric Spaces*. Springer Science & Business Media, 2006.
- [70] P. S. Pacheco. *An Introduction to Parallel Programming*. Morgan Kaufmann Publishers, 2011.
- [71] Iordan Petrescu. Introducere în metoda elementelor finite, cu aplicații în mecanica construcțiilor. Note de curs, 2012.
- [72] M. Popescu, S. Lup, and R. Bărbulescu. Using object oriented data structures for optimizing mems devices on parallel computers. In *ISEF*, 2015.
- [73] M. Popescu, S. Lup, G. Ciuprina, R. Bărbulescu, and D. Ioan. A parallel algorithm for multiphysics analysis of rf-mems. In *SCEE 2018 – The 12th International Conference on Scientific Computing in Electrical Engineering*, 2018.
- [74] M. Popescu, S. Lup, G. Ciuprina, and D. Ioan. An object oriented data structure designed for multiphysics simulations on parallel computers. In *ATEE*, 2015.
- [75] M. Preda, P. Cristea, and F. Spinei. *Bazele Electrotehnicii*, volume I și II. Editura Didactică și Pedagogică, București, 1980.
- [76] J.Y. Qian, G.P. Li, and F. De Flaviis. A parametric model of mems capacitive switch operating at microwave frequencies. In *IEEE MTT-S International Microwave Symposium digest*, 2000.
- [77] A. Quarteroni and A. Valli. *Numerical Approximation of Partial Differential Equations*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, second edition, 2008.
- [78] G. Rebeiz. Rf mems switches: Status of the technology. In *The 12th Conference on Solid State Sensors, Actuators and Microsystems*, 2003.

- [79] G. M. Rebeiz. *RF MEMS: Theory, Design and Technology*. John Wiley & Sons, 2003.
- [80] M. Rognes, Kirby R., et al. Efficient assembly of $h(\text{div})$ and $h(\text{curl})$ conforming finite elements. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 31(6):pp. 4130–4151, 2009.
- [81] W. Rudin. *Functional Analysis*. McGraw-Hill, Inc, 2-nd edition, 1991.
- [82] D Rusu. *Analiză funcțională*. Ed. Performantica, 2005.
- [83] M. Rychlik. An introduction to orthogonal polynomials. Technical report, University of Arizona, 2009.
- [84] W.H.A. Schilders, Henk A. van der Vorst, and J Rommes, editors. *Model order reduction: theory, research aspects and applications*, volume 13. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1 edition, 2008.
- [85] J. A. Scott. Some examples of the use of areal coordinates in triangle geometry. *The Mathematical Gazette*, 83(498):472–477, 1999.
- [86] Marián Slodička. Partial Differential Equations. Lecture Notes for Master Courses - Department of Mathematical Analysis Ghent University, 2012.
- [87] Barry Smith. *Domain Decomposition. Parallel Multilevel Methods for Elliptic Partial Differential Equations*. Cambridge University Press, 1996.
- [88] Edwin H. Spanier. *Algebraic Topology, Cap. 4.5*. McGraw-Hill Book Company, 1995.
- [89] Mircea Stan. *Mecanica mediilor continue*. Matrixrom, 2001.
- [90] A. Timotin, V. Hortopan, A. Ifrim, and M. Preda. *Lecții de Bazele Electrotehnicii*. Editura Didactică și Pedagogică, 1970.
- [91] F. M. G. Tomescu and A. Tomescu. *Bazele electrotehnicii. Câmp electromagnetic*. Matrix Rom, 2000.
- [92] E. Tonti. The reason for analogies between physical theories. In C. Brebbia, editor, *Applied Mathematical Modelling*, volume 1, pages 37–50. IPC Science and Technology Press Ltd, UK, Dept. of Civil Engineering, University of Southampton, UK, 1976.

- [93] J. Ubranic. Introduction to openmp. Technical report, Pittsburgh Supercomputing Center, 2021.
- [94] Mark van Kraaij. Strain and deformation, a global overview, may 2006.
- [95] Piero Villagio. *Mathematical Models for Elastic Structures*. Cambridge University Press, 1997.
- [96] H. Whitney. *Geometric Integration Theory*. Princeton University Press, 1957.
- [97] O. Windlund and A. Toselli. *Domain Decomposition Methods - Algorithms and Theory*, volume 34 of *Springer Series in Computational Mathematics*. Springer Verlag, 2005.
- [98] Hugh Young and Roger Freedman. *University Physics with Modern Physics*. Addison-Wesley, the 13th edition, 2012.
- [99] Sabine Zaglmayr. *High Order Finite Element Methods for Electromagnetic Field Computation*. PhD thesis, JOHANNES KEPLER UNIVERSITÄT LINZ, 2006.
- [100] Bai Zhaojun, M. Patrick, Dewilde Roland, and W. Freund. Reduced-order modeling. *Handbook of Numerical Analysis*, 13, 2005.