

*50 376
2000
139

THÈSE

présentée par

Sébastien BOZEK

pour obtenir le grade de Docteur
de l'Université des Sciences et Technologies de Lille
(Arrêté ministériel du 23 novembre 1998)

Spécialité : électronique

Génération de Maillage Automatique pour la Simulation Tridimensionnelle de Procédés de Fabrication de Circuits Intégrés

Soutenue le le 26 Mai 2000 devant la commission d'examen :

Président :	R. Fauquembergue	IEMN
Rapporteurs :	J.L. Coulomb	LEG
	A. Poncet	CNET
Examineurs :	P.L. George	INRIA
	H. Jaouen	ST-Microelectronics
	B. Baccus	MEMC
	D. Collard	IEMN
	V. Senez	IEMN

Thèse préparée au sein de l'Institut d'Electronique et de Microélectronique du Nord

SCD LILLE 1



D 030 189545 2

à mes parents,
à Michèle,
à mes frères,
à mes amis.

Cette thèse a été préparée à l'Institut Supérieur d'Electronique du Nord
au sein du laboratoire de
l'Institut d'Electronique et de Micro-électronique du Nord
(IEMN-UMR CNRS 9929)
et a été cofinancée par
la Région Nord/Pas-de-Calais

Pour commencer, je tiens à remercier les membres du jury.

- Monsieur R. Fauquemberg, Professeur de l’université de Lille I, qui m’a fait l’honneur de présider ce jury.
- Messieurs J.L. Coulomb et A. Poncet d’avoir accepté de rapporter cette thèse.
- Monsieur P.L. George pour les nombreux conseils qu’il a prodigués tout au long de ce travail. Son expérience et la pertinence de ses remarques nous ont été d’un précieux secours.
- Monsieur H. Jaouen pour le point de vue utilisateur qu’il a apporté à ce travail ; il est primordial que nous gardions à l’esprit les exigences liées à l’environnement économique de nos clients.
- Monsieur D. Collard d’avoir accepté de diriger mes recherches.
- Monsieur B. Baccus, qui est à l’origine de ce travail. Il a été, à de nombreuses reprises, un interlocuteur de qualité lorsque des stratégies de maillage devaient être discutées.
- Monsieur V. Senez, qui a repris le flambeau après Bruno Baccus, et fortement contribué à la réussite de ces travaux. Merci pour sa tenacité et sa persévérance.

Je tiens également à remercier mes amis et anciens collègues de travail :

- Emmanuel Augendre, Bruno Baccus, Dorothée Brocard, Jean-Marc Capron, Pierre Castelein, Guillaume de Crémoux, Jean-Michèle Droulez, Emmanuel Dubois, Gérard Fayolles, Paul Ferreira, Paul-Aymeric Fontaine, Jérôme Herbeaux, Thomas Hoffmann, Andréas Kaiser, Evelyne Lampin, Ian Oconnor, Laurent Quiquerez, Etienne Robilliart, Pascal Salomé, Vincent et Florence Senez, Bruno Stéfaneli, Valérie Vandenance, et Zhi Zhong Wang.

J’adresse également un merci à Michèle, Jeannine et Atholl pour les lectures répétées de ce manuscrit qui ont permis de fructueuses chasses aux fautes.

Enfin, j’adresse mes remerciements les plus chaleureux à ma famille, en particulier mes parents, pour le soutien qu’ils m’ont apporté tout au long des trois années de recherche active, et Michèle, pour sa patience et son soutien au cours de ces derniers mois de rédaction et de ces nombreux week-ends que nous n’avons pu pleinement partager.



Table des matières

1	Introduction	1
1.1	Différents types de simulation	2
1.2	Nouvelle génération de simulateurs de procédés	2
1.3	Projets PROMPT et PROMPT II	3
1.4	L'importance du maillage	4
1.5	Organisation de ce manuscrit	4
2	Modélisation Numérique des Phénomènes de Recuits Thermiques	7
2.1	Intérêt des étapes de recuits thermiques	8
2.1.1	Nature semi-conductrice d'un matériau	8
2.1.2	Cas du silicium	9
2.1.3	Amélioration des propriétés électriques par dopage	10
2.1.4	Isolation électrique par oxyde de champ	14
2.2	Modèles physiques	19
2.2.1	Diffusion des dopants	20
2.2.2	Oxydation du silicium	22
2.3	Résolution numérique	27
2.3.1	Type de maillage	28
2.4	Bilan	29
3	Dégradation du Maillage et Stratégies de Maintien	31
3.1	Critères de qualité	31
3.1.1	Critères physiques	32
3.1.2	Critères géométriques	33
3.2	Déplacement de domaines et dégradations	38
3.2.1	Bilan	41
3.3	Mise à jour par déformation	42
3.3.1	Application à la croissance d'un LOCOS	42
3.3.2	Limitations	43

3.4	Amélioration de la qualité par lissage	45
3.4.1	Lissage des nœuds internes	45
3.4.2	Lissage des nœuds-interfaces	45
3.5	Interpolation	51
3.5.1	Interpolation surfacique dans \mathbb{R}^n	51
3.5.2	Interpolation surfacique dans \mathbb{N}^n	54
3.5.3	α -coplanarité et interpolation par projection	56
3.5.4	Interpolation volumique	61
3.5.5	Effets de l' α -coplanarité	63
3.6	Remaillage local des zones creuses	64
3.6.1	Déplacement des domaines et des interfaces.	64
3.6.2	Déplacement limité aux interfaces.	65
3.7	Remaillage des interfaces déplacées	70
3.7.1	Avantages	70
3.7.2	Inconvénients	71
3.8	Remaillage complet	72
3.8.1	Avantages	72
3.8.2	Inconvénients	73
3.9	Conclusions sur les propriétés nécessaires	73
3.9.1	Solutions retenues	73
3.9.2	Propriétés du mailleur	74
4	Génération de Maillage	75
4.1	Propriétés fondamentales du mailleur	75
4.1.1	Maillage conforme	75
4.1.2	Nuage de points et frontières triangularisées	76
4.2	Différentes stratégies de génération de maillage	77
4.2.1	Produit tensoriel de grilles	77
4.2.2	Octree	78
4.2.3	Méthodes frontales	80
4.2.4	Méthodes de Voronoï-Delaunay	80
4.2.5	Approches multi-bloques	82
4.3	Fondements théoriques du mailleur	83
4.3.1	Dérivation des \mathcal{M}_i	84
4.3.2	Propriétés géométriques fondamentales	87
4.4	Respect des frontières	90
4.4.1	Frontière bien décrite	90
4.4.2	Correction des faces mal décrites	91
4.4.3	Frontière régulière	92
4.4.4	Correction des faces singulières	92
4.4.5	Ajout de nœuds internes	93

4.4.6	Récupération du maillage de Ω	93
4.5	Implantation numérique en dimension 3	94
4.5.1	Simplification de la dérivation	94
4.5.2	Recherche du simplexe de \mathcal{M}_i qui contient N_{i+1}	95
4.5.3	Importance de la précision numérique	98
4.5.4	Approche ε -Delaunay	100
4.5.5	Création de la boule \mathcal{B}_{i+1}	105
4.6	Modifications locales du maillage	106
4.6.1	Basculement d'arête	106
4.6.2	Déraffinement de maillage	108
4.7	Conclusion	111
5	Respect des frontières	113
5.1	Causes de l'absence d'une face d'un maillage	113
5.1.1	Absence d'une arête $\{A, B\}$ d'un maillage	114
5.1.2	Absence d'une face $\{A, B, C\}$ d'un maillage	117
5.1.3	Conséquences de ces lacunes sur la simulation	119
5.2	Recherche d'une arête dans un maillage	119
5.3	Reconstruction d'une arête	121
5.3.1	Remaillage d'un tube	121
5.3.2	Remaillage d'une coquille globale	125
5.3.3	Intersection entre une arête et un nœud	130
5.4	Reconstruction d'une face imposée	131
5.5	Reconstruction d'une face	137
5.5.1	Recherche du nœud ou de l'arête intersectrice	138
5.5.2	Recherche des sous-faces: cas général	140
5.6	Conclusion	142
6	Conclusion et perspectives	143
6.1	Structures tests	143
6.2	Analyse de maillages produits par MESHGEN	151
6.2.1	Ajout de nœuds par le mailleur	151
6.2.2	Rediscretisation des interfaces	153
6.2.3	Nombre de tétraèdres dans ces maillages	154
6.2.4	Vitesse et temps de maillage	154
6.3	Comparaison avec d'autres mailleurs	155
6.3.1	Taille du maillage	156
6.3.2	Qualité des maillages pour la simulation	157
6.4	Bilan	161
6.5	Perspectives	162

Table des figures

2.1	Liaisons de covalence dans un cristal de silicium pur.	9
2.2	Création d'un trou (resp. d'un électron surnuméraire) à l'aide d'un atome de bore (resp. d'arsenic).	10
2.3	Implantation ionique.	11
2.4	Principe de TILT pour neutraliser la canalisation des impu- retés lors de l'implantation ionique.	12
2.5	Différents types de défauts cristallins.	12
2.6	Locos enterré: étapes de gravure et d'oxydation.	14
2.7	Interface plane idéale entre milieu oxydant et substrat de silicium.	15
2.8	Déplacement des interfaces lors d'une oxydation plane idéale.	16
2.9	Courbure de l'interface Si/SiO_2 suite à la diffusion des agents oxydants sous le masque de nitrure (la nouvelle couche SiO_2 est représentée avec l'hypothèse d'un rapport volumique Si/SiO_2 égale à 1).	17
2.10	Courbure du masque de nitrure et de l'interface entre le di- oxyde de silicium et le milieu gazeux lors de la création d'un LOCOS.	17
2.11	Apparition de contraintes mécaniques en tension lors de l'oxyda- tion d'un cylindre de silicium.	18
2.12	Apparition de contraintes mécaniques en compression lors de l'oxydation d'un cylindre de silicium creux.	19
3.1	Convergence vers $\frac{\pi}{2}$ du plus grand angle d'un triangle lorsque le plus petit angle tend vers 0.	33
3.2	Sphères inscrite et circonscrite d'un simplexe.	34
3.3	Triangle équilatéral ($\rho = \frac{1}{2}$ et $\lambda = 2$).	35
3.4	Triangles dégénérés.	35
3.5	Formes de tétraèdres dégénérés.	37
3.6	Nœud M avec une connectivité égale à 12.	37
3.7	Croissance d'un LOCOS pendant un pas de temps et déformation du maillage.	38

3.8	Déplacement de l'interface Si/SiO_2 et retournement d'éléments. 39	
3.9	Génération de boucle lors d'une étape d'oxydation pour créer un LOCOS enterré.	40
3.10	Recouvrement partiel du masque de nitrure par le champ d'oxyde pendant la croissance d'un LOCOS.	41
3.11	Déformation du maillage d'une chambre à combustion en fonction de la position du piston d'un moteur.	42
3.12	Mise à jour du maillage par dilatation et contraction de do- maines.	43
3.13	LOCOS pseudo 2D obtenu par déformation du maillage lors des étapes d'oxydation (5950 nœuds, 26315 tétraèdres). . . .	44
3.14	Détail d'un oxyde de champ tridimensionnel obtenu par déformation du maillage lors des étapes d'oxydation. Cette structure contient 16484 nœuds et 86091 tétraèdres, dont 24576 dans l'oxyde. . .	44
3.15	Lissage de nœuds-interfaces limité aux faces coplanaires. . .	46
3.16	Lissage d'un nœud-interface situé sur des faces non copla- naires.	46
3.17	Erreur de coplanarité due à l'arithmétique de l'ordinateur. .	47
3.18	Points alignés à un angle α près.	47
3.19	Comparaison angulaire entre faces voisines.	48
3.20	Comparaison angulaire entre toutes les faces: $\forall i, j \in [1..4],$ $(\vec{n}_i, \vec{n}_j) \leq \alpha$	48
3.21	Comparaison angulaire avec le vecteur de référence \vec{n}	49
3.22	Influence de la discrétisation sur l' α -coplanarité.	50
3.23	Limite de la courbure admissible pour $\alpha = 5^\circ$	50
3.24	Lissage barycentrique le long d'un segment $[A, B]$	51
3.25	Lissage barycentrique d'une surface.	53
3.26	Configuration cyclique dans laquelle il est possible de par- courir les simplexes de proche en proche en ne passant que par des faces séparatrices sans jamais atteindre l'élément qui contient le nœud N	55
3.27	Déplacement nodale numériquement incorrect.	55
3.28	Trace d'un nœud N_8 lors d'un lissage α -coplanaire en 2D. .	56
3.29	Trace d'un nœud N_1 lors d'un lissage α -coplanaire en 2D. .	57
3.30	Secteur angulaire associé à la tolérance angulaire α	58

3.31	Exploitation du projeté orthogonal sur l'arête commune à deux faces α -coplanaires dans une configuration avec des projections orthogonales multiples dues au lissage α -coplanaire dans \mathbb{R}^3 . Les plans π_1 et π_2 , perpendiculaires aux faces F_1 et F_2 , sont α -parallèles entre eux.	58
3.32	Absence de projection orthogonale due au lissage α -coplanaire dans \mathbb{R}^3 , et exploitation du projeté orthogonal sur l'arête commune aux faces α -coplanaires.	59
3.33	Exploitation du sommet H commun à plusieurs faces α -coplanaires dans une configuration avec projections orthogonales multiples suite au lissage α -coplanaire de N dans \mathbb{R}^3	59
3.34	Exploitation du sommet H commun à plusieurs faces α -coplanaires dans une configuration sans projection orthogonale, suite au lissage α -coplanaire de N dans \mathbb{R}^3	60
3.35	Interpolation d'un nœud N lissé dans une configuration en forme de "selle de cheval".	60
3.36	Cas inextricable si α est trop grand.	61
3.37	Recherche par voisinage de l'élément qui contient un nœud.	62
3.38	Changement de domaine lors d'une interpolation volumique après lissage α -coplanaire.	63
3.39	Echec de la méthode d'interpolation basée sur l'interface la plus proche.	63
3.40	Déplacement du masque de nitrure et de l'oxyde de champ sous la pression de l'oxyde créé pendant l'étape d'oxydation et identification des couches minces de silicium et d'oxyde à mailler.	65
3.41	Destruction des éléments balayés par les interfaces oxyde/nitrure et oxyde/silicium, et identification des zones à (re)mailler.	66
3.42	Rediscrétisation des interfaces avec boucles (a) et élimination des sous-enveloppes inutiles (b).	66
3.43	Rediscrétisation de faces triangulaires qui s'intersectent. Les intersections sont réduites à un point, à un segment, ou couvrent une surface.	67
3.44	Rediscrétisation des interfaces avec boucles et élimination des sous-enveloppes inutiles.	68
3.45	Génération et élimination d'une boucle aplatie en 2D.	69
3.46	Rediscrétisation des interfaces correspondant à des recouvrements de domaines, et assimilation du recouvrement à un des domaines.	69

3.47	Mise à jour du maillage par insertion des nœuds-interfaces déplacés (certains nœuds-interfaces peuvent être placés hors du maillage courant) et restauration des faces manquantes. . .	71
3.48	Remaillage complet de la structure à partir des interfaces déformées.	72
4.1	Maillages triangulaires a) conforme et b) non conforme. . .	76
4.2	Maillage obtenu par produit tensoriel de grille.	77
4.3	Propagation du raffinement selon les plans générateurs. . . .	78
4.4	Maillage d'une structure par quadtree.	79
4.5	Maillage d'une structure par quadtree avec éléments mixtes. . .	79
4.6	Maillage d'une structure par méthode frontale.	80
4.7	Maillage triangulaire qui vérifie le critère de la sphère vide (a) et maillage triangulaire qui ne respecte pas cette propriété (b).	81
4.8	Dérivation d'un maillage triangulaire M_i en un maillage M_{i+1} à l'aide du critère de la sphère vide a) en excavant une cavité définie par les triangles de M_i dont la sphère circonscrite contient le sommet N_{i+1} à insérer (zone grisée) et b) en ajoutant de nouveaux triangles construits avec le nœud N_{i+1} et les faces de la cavité obtenue en (a).	81
4.9	Domaine creux et frontières avec boucles.	84
4.10	Dérivation de \mathcal{M}_i lorsque $N_{i+1} \in \Omega_i$	86
4.11	Dérivation de \mathcal{M}_i lorsque $N_{i+1} \notin \bigcup_{j=1}^{m_i} \{B_j\}$	86
4.12	Dérivation de \mathcal{M}_i quand $N_{i+1} \notin \Omega_i$ et $N_{i+1} \in \bigcup \{B_j\}$	87
4.13	Séparation d'un nœud N et d'un simplexe S par l'hyperplan Δ_i issu de F_i , la i -ième face de ce simplexe.	88
4.14	Exemples d'une cavité étoilée pour un nœud N_1 (a) et d'une cavité non étoilée pour un nœud N_2 , la face F n'étant pas visible pour ce point (b).	89
4.15	Pyramide $\{N_1, N_2, N_3, N_4, N_5\}$ avec sa face $F_i = \{N_1, N_2, N_3\}$ bien décrite car la boule circonscrite à F_i ne contient que les sommets de F_i	90
4.16	Pyramide $\{N_1, N_2, N_3, N_4, N_5\}$ avec sa face $F_i = \{N_1, N_2, N_3\}$ mal décrite car la boule circonscrite à F_i contient le sommet N_4	90
4.17	Surface plane triangularisée par un générateur de structures. . .	91
4.18	Élimination des faces mal décrites en déplaçant les sommets. . .	91

4.19	Exemple 2D d'une face F_i singulière : la boule circonscrite au triangle $\{F_i, N_1\}$ contient le sommet N_2 alors que N_1 et N_2 appartiennent à des demi-plans engendrés par Δ_i qui sont différents.	93
4.20	Cube initial englobant le nuage de points \mathcal{N} à mailler.	95
4.21	Recherche du simplexe qui contient le nœud N_{i+1} en partant d'un élément ${}_iS_{j_0}$ et en parcourant les éléments voisins de face séparatrice en face séparatrice.	95
4.22	Configuration cyclique dans laquelle il est possible de parcourir les simplexes de proche en proche en ne passant que par des faces séparatrices sans jamais atteindre l'élément qui contient le nœud N_{i+1}	96
4.23	a) insertion du nœud N_{i+1} dans un maillage et b) détermination du simplexe ${}_iS_{j_0}$ proche de N_{i+1} via un treillis.	97
4.24	Maillage non conforme suite à une erreur de précision quant à l'appartenance de N à la boule circonscrite aux éléments T_1 et T_2 . a) le maillage avant dérivation, et b) le maillage dérivé non conforme : le calcul a conclut que la boule circonscrite à T_2 contenait N alors que celle circonscrite à T_1 ne le contenait pas (bien que les deux sphères soient confondues).	99
4.25	Le nœud N_{i+1} , situé à une faible distance de la surface de la boule ${}_iB_j$ circonscrite au simplexe ${}_iS_j$, est considéré hors de ${}_iB_j$	100
4.26	Indétermination sur l'appartenance d'un point N_{i+1} à une boule ${}_iB_j$ (circonscrite au simplexe ${}_iS_j$) quand la position du centre de cette boule et la valeur de son rayon sont approximatives.	101
4.27	Transport du centre des sphères circonscrites aux simplexes de la cavité \mathcal{C}_{i+1} vers ceux des sphères circonscrites aux simplexes de la boule \mathcal{B}_{i+1}	102
4.28	Calcul du centre ${}_{i+1}O_j^k$ à partir du centre ${}_iO_j$ et du vecteur ${}_i\vec{n}_j^k$ normal à la face ${}_iF_j^k$	103
4.29	a) Cavité $\{T_1, T_2, T_3, T_4\}$ non étoilée par rapport au nœud N et b) élimination de T_4 pour restituer la propriété d'étoilement.	104
4.30	Triangle avec trois voisins et la position de chacun des sommets dans la structure interne de chacun de ces triangles indiquée dans chacun des angles.	105
4.31	Remaillage d'un convexe formé de deux triangles $\{A, C, D\}$ et $\{B, C, D\}$ en deux triangles $\{A, B, C\}$ et $\{A, B, D\}$ via le basculement d'une arête.	107

4.32	Remaillage d'un convexe formé de deux tétraèdres $\{A, C, D, E\}$ et $\{B, C, D, E\}$ en trois tétraèdres $\{A, B, C, D\}$, $\{A, B, C, E\}$ et $\{A, B, D, E\}$ via le basculement d'une arête.	107
4.33	La condition d'application de l'opérateur $2 \rightarrow 3$ est que B appartienne au cône $\{A, \bar{A}C, \bar{A}D, \bar{A}E\}$	108
4.34	Application de l'opérateur $4 \rightarrow 4$ à un ensemble de quatre tétraèdres.	109
4.35	Déraffinement de maillage par attraction du sommet N par un sommet P visible de toutes les faces extérieures à la boule B_N	110
4.36	Déraffinement de maillage par attraction du sommet N (a-b) avec génération de trois tétraèdres plats croisés (c).	110
4.37	a) Prisme dont la frontière triangulée ne permet pas un maillage tétraédrique sans l'ajout d'un nœud de Steiner ; b) maillage volumique obtenu avec un sommet interne N	110
5.1	Absence d'une arête $\{A, B\}$ suite à la présence d'une face $\{\alpha, \beta, \gamma\}$ entre ces deux sommets.	114
5.2	Absence d'une arête $\{A, B\}$ suite à la présence d'une arête $\{\alpha, \beta\}$ entre ces deux sommets.	114
5.3	Absence d'une arête $\{A, B\}$ suite à la présence d'un nœud $\{\alpha\}$ entre ces deux sommets.	114
5.4	Tube contenant 3 tétraèdres dont les faces $\{\alpha, \beta, \gamma\}$, $\{\alpha, \gamma, \delta\}$ et $\{\gamma, \delta, \varepsilon\}$ coupent $[A, B]$ en I_1 , I_2 et I_3 provoquant ainsi l'absence de $\{A, B\}$	115
5.5	Coquille locale de 7 tétraèdres engendrée par une arête $\{\alpha, \beta\}$ qui coupe le segment $[A, B]$ et s'oppose à la présence de l'arête $\{A, B\}$	115
5.6	Coquille composée d'une coquille locale engendrée par l'arête $\{\alpha_1, \beta_1\}$, d'une seconde coquille locale enroulée autour de l'arête $\{\alpha_2, \beta_2\}$, et d'un tube composé des tétraèdres $\{\alpha_2, \beta_2, \gamma, \delta\}$ et $\{\beta_2, \gamma, \delta, B\}$	116
5.7	Arête $\{A, B\}$ découpée en deux sous-arêtes $\{A, I\}$ et $\{I, B\}$ suite à la présence du nœud I sur $]A, B[$	116
5.8	Arête $\{A, B\}$ segmentée en deux parties ($[A, I]$ et $[I, B]$) suite à la présence d'un nœud I sur $]A, B[$. Le premier segment contient un tube (la face $\{\alpha_1, \beta_1, \gamma_1\}$ coupe $[A, I]$) et le second contient une coquille locale (l'arête $\{\beta_2, \delta_2\}$ coupe $[I, B]$).	117

5.9	Face $\{A, B, C\}$ absente d'un maillage malgré la présence des trois arêtes $\{A, B\}$, $\{A, C\}$ et $\{B, C\}$: l'arête $\{\alpha, \beta\}$ traverse $\{A, B, C\}$	118
5.10	Face $\{A, B, C\}$ tronçonnée en 5 sous-faces suite à la présence des nœuds I_1 et I_2 sur cette face. Ces sous-faces sont $\{A, I_1, B\}$, $\{A, I_1, C\}$, $\{I_1, I_2, B\}$, $\{I_1, I_2, C\}$ et $\{I_2, B, C\}$,	118
5.11	Résultat du forçage d'une arête $\{A, B\}$ après avoir appliqué trois basculements d'arêtes pour éliminer le tube décrit figure 5.4.	122
5.12	Application de l'opérateur $2 \rightarrow 3$ afin de réduire la taille du tube $\{\dots, \{N_1, N_2, N_3, N_4\}, \{N_1, N_3, N_4, N_5\}, \dots\}$, issu des sommets $\{A, B\}$, au tube $\{\dots, \{N_1, N_2, N_3, N_5\}, \dots\}$	122
5.13	Réduction d'un tube avec une configuration (b) où le basculement d'arête ne réduit pas la taille du tube.	123
5.14	Ajout de nœuds de façon à rendre convexe un tube concave.	123
5.15	Ajout de nœuds à l'intersection entre l'arête $\{A, B\}$ et les faces $\{\alpha, \beta, \gamma\}$, $\{\alpha, \gamma, \delta\}$ et $\{\gamma, \delta, \varepsilon\}$ afin d'éliminer le tube de la figure 5.4 page 115.	124
5.16	Calcul d'intersection à l'aide de coordonnées a) Réelles, b) entières et c) entières corrigées.	124
5.17	a) Intersection proche d'un sommet P et b) tronçonnement de l'arête $\{A, B\}$ avec ce sommet.	125
5.18	Coquille $\{\{\alpha, \beta\}, \{N_1, N_2, N_3, N_4, N_5, N_6, N_7\}\}$ (a) remaillée par des basculements d'arêtes (b) avec leurs vues de dessus respectives (c) et (d).	127
5.19	Coquille $\{\{\alpha, \beta\}, \{N_1, N_2, N_3, N_4\}\}$ dont le remaillage en une autre coquille $\{\{N_1, N_3\}, \{\alpha, N_2, \beta, N_4\}\}$ requiert l'opérateur $4 \rightarrow 4$	127
5.20	Réduction de la taille d'une coquille enroulée autour de l'arête $\{\alpha, \beta\}$ en appliquant l'opérateur $2 \rightarrow 3$ sur les tétraèdres $\{\alpha, \beta, N_{i-1}, N_i\}$ et $\{\alpha, \beta, N_i, N_{i+1}\}$: l'arête $\{N_{i-1}, N_{i+1}\}$ est créée et le sommet N_i est retiré de la coquille. Cette dernière voit les éléments $\{\alpha, \beta, N_{i-1}, N_i\}$ et $\{\alpha, \beta, N_i, N_{i+1}\}$ remplacés par $\{\alpha, \beta, N_{i-1}, N_{i+1}\}$: son nombre de tétraèdres décroît strictement.	128
5.21	Coquille locale $\{\{\alpha, \beta\}, \{N_1, N_2, N_3, N_4, N_5\}\}$ non remaillable par basculement d'arête à cause de la surface concave définie par les faces $\{\beta, N_1, N_2\}$, $\{\beta, N_2, N_3\}$, $\{\beta, N_3, N_4\}$, $\{\beta, N_4, N_5\}$ et $\{\beta, N_5, N_1\}$: aucun basculement d'arête ne peut être appliqué sur cette coquille locale.	129

5.22	Coquille locale de 4 tétraèdres $\{\{\alpha, \beta\}, \{N_1, N_2, N_3, N_4, N_5\}\}$ non remaillable par basculement d'arête: l'opérateur $4 \rightarrow 4$ (seul possible dans cette situation) transforme l'arête $\{\alpha, \beta\}$ en $\{N_1, N_3\}$ ou $\{N_2, N_4\}$. Or, l'arête à forcer $\{A, B\}$ coupe cette coquille locale en J , intersection commune à ces trois arêtes.	129
5.23	Coquille locale concave $\{\{\alpha, \beta\}, \{N_1, N_2, N_3, N_4, N_5\}\}$ (a) transformée en une coquille locale convexe $\{\{\alpha, \beta\}, \{P_1, P_2, P_3, P_4, P_5\}\}$ (b) grâce à l'ajout des sommets P_1, P_2, P_3, P_4 et P_5	129
5.24	Coquille locale concave $\{\{\alpha, \beta\}, \{N_1, N_2, N_3, N_4, N_5\}\}$ (a) remaillée en insérant un nœud I à l'intersection entre l'arête $\{A, B\}$ à forcer et l'arête $\{\alpha, \beta\}$ qui engendre la coquille locale.	130
5.25	Face $\{A, B, C\}$ subdivisée en sous-faces suite à l'ajout de nœuds lors du forçage des arêtes.	131
5.26	Parcours circulaire des nœuds sur les arêtes d'une face $\{A, B, C\}$ et extraction des sous-faces composées de trois sommets consécutifs (faces grisées).	133
5.27	Face subdivisée en sous-faces non coplanaires: a) vue de dessus par rapport au plan $\{A, B, C\}$ b) vue latérale par rapport à ce même plan.	134
5.28	Face $\{A, B, C\}$ tronçonnée en sous-faces et rendue concave en N_5 . Si la sous-face $\{C, N_5, A\}$ est présente dans le maillage, alors l'algorithme de recherche des sous-faces détecte cette face et transforme <code>listeNoeuds</code> en $\{A, N_1, N_2, N_3, N_4, C, A\}$: il n'y a alors plus convergence puisqu'aucune sous-face n'est formée des sommets A, C et N_i avec i compris entre 1 et 4.	134
5.29	Face subdivisée en sous-faces fortement non coplanaires: a) vue de dessus et b) vue latérale.	135
5.30	Recherche de la sous-face $\{N_i, N_j, N_k\}$ en parcourant la coquille engendrée par $\{N_i, N_j\}$	137
5.31	Face dont une sous-face est intersectée par une arête $\{\alpha, \beta\}$	137
5.32	Face dont une sous-face contient un nœud interne α	137

5.33	Coquille locale $\{\{N_1, N_2\} \{\alpha, \beta, \gamma, \delta, \varepsilon\}\}$ à parcourir jusqu'à ce que le secteur angulaire défini par les dièdres $\{N_1, N_2, I\} - \{N_1, N_2, J\}$ (où I et J représentent deux sommets consécutifs parmi $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ et ε) contienne le sommet C . En a), on s'arrête sur le dièdre défini par $\{N_1, N_2, \alpha\} - \{N_1, N_2, \beta\}$: on a alors trouvé l'arête $\{\alpha, \beta\}$ qui coupe la sous-face $\{N_1, N_2, C, N_5\}$. En b), on s'arrête soit sur le dièdre défini par $\{N_1, N_2, \alpha\} - \{N_1, N_2, \beta\}$, soit sur le dièdre défini par $\{N_1, N_2, \alpha\} - \{N_1, N_2, \varepsilon\}$: on a alors trouvé le nœud α qui est situé sur la sous-face $\{N_1, N_2, C, N_5\}$	138
5.34	Détection de toutes les sous-faces d'une face $\{A, B, C\}$ à forcer, y compris celles qui contiennent un ou des nœuds internes à cette face.	141
6.1	Maillage d'un LOCOS bi-dimensionnel composé d'un masque de nitrure, d'une couche d'oxyde et d'un substrat de silicium. Ce maillage, plongé dans la boîte englobante décrite page 94, contient 869 nœuds et 4921 tétraèdres, et a été obtenu en 3.96 secondes sur une station SUN ULTRA II.	144
6.2	LOCOS bi-dimensionnel: détail du maillage dans le substrat de silicium.	145
6.3	LOCOS bi-dimensionnel: détail du maillage dans le dioxyde de silicium.	146
6.4	Structure LOCOS tri-dimensionnelle composée d'un masque de nitrure, d'une couche d'oxyde et d'un substrat de silicium (cette structure est présentée dans la boîte englobante décrite page 94).	147
6.5	LOCOS tri-dimensionnel: détail du maillage extérieur à la structure à mailler (maillage de la boîte englobante décrite page 94). Le maillage final (boîte + LOCOS) contient 4671 nœuds, 29324 tétraèdres et a été obtenu en 32.01 secondes sur une station SUN ULTRA II.	148
6.6	LOCOS tri-dimensionnel: détail du maillage dans l'oxyde de champ.	149
6.7	Maillage d'une structure LOCOS 3D simple de type îlot.	150
6.8	Détail de la surface du maillage produit par MESH pour un champ d'oxyde en forme de bec d'oiseau.	160
6.9	Détail de la surface du maillage produit par MESHGEN pour un champ d'oxyde en forme de bec d'oiseau.	160

Chapitre 1

Introduction

Au cours des dernières décennies, les progrès acquis dans le domaine des semi-conducteurs ont engendré une course effrénée visant à accroître la puissance de calcul et la capacité-mémoire des ordinateurs tout en réduisant leurs coûts de fabrication et leur consommation d'énergie. Un des aspects remarquables de cette quête est qu'elle s'appuie directement sur son fruit : puissance de calcul et capacité-mémoire augmentant, coûts de fabrication et de consommation diminuant, les outils informatiques, largement impliqués dans l'étude des matériaux, de la physique qui les gouverne et des procédés qui permettent leur fabrication, rendent possibles du point de vue technique et financier des travaux de recherche jusqu'alors inconcevables.

Ainsi dans le cas des procédés de fabrication, le fruit de ces travaux a permis une forte miniaturisation des composants : la densité d'intégration a doublé à chaque génération de composants alors que la dimension des motifs élémentaires de la technologie a été réduite de 33% dans le même laps de temps [1, 2, 3]. La fréquence d'horloge des circuits, directement corrélée à la puissance de calcul, a évolué de façon similaire.

Si les simulateurs constituent un maillon important dans la chaîne des outils informatiques impliqués dans cette progression, cela tient au fait qu'ils permettent de déterminer les caractéristiques d'un objet (circuit, transistor, jonction, ...) à partir de modèles physiques. Bien que prédictifs dans des plages de valeurs restreintes, ce qui est souvent perçu comme leur principal défaut, ils ont pris un essor considérable dans l'étude et la compréhension de phénomènes physiques complexes. Aujourd'hui indispensables, ils interviennent essentiellement en complément des méthodes d'investigation basées sur l'analyse physique d'échantillons, dont le recours systématique est désormais inconcevable pour des raisons économiques. Les simulateurs constituent donc d'excellents outils pour approcher un problème ; ils rendent rapide et peu coûteuse l'ébauche d'une solution qui peut ensuite être affinée à l'aide de tests

physiques effectués sur des échantillons. Ceci se vérifie dans des domaines aussi variés que la mécanique, la physique, la chimie ou la biologie.

1.1 Différents types de simulation

En électronique, les simulateurs sont regroupés en trois familles, fonction de la nature des résultats qu'ils fournissent.

- **Les simulateurs de procédés de fabrication**¹ concernent les étapes de fabrication des composants (dépot/gravure, implantation ionique, diffusion, oxydation, ...). Leur rôle est de définir l'état physique du composant électronique, c'est à dire sa géométrie et la répartition des dopants et/ou des contraintes mécaniques. Les résultats qu'ils fournissent servent de données en entrée pour les simulateurs de dispositifs.
- **Les simulateurs de dispositifs**² déterminent le comportement électrique des composants à partir de la description de leur état physique. Ils interviennent dans la phase de caractérisation.
- **Les simulateurs de circuits**³ permettent de connaître le comportement d'un circuit complet (intégration des composants précédents).

Pour un industriel, cette chaîne de simulation doit être constituée d'outils performants et compatibles entre eux [4, 5, 6, 7, 8, 9].

1.2 Nouvelle génération de simulateurs de procédés

Par le passé, le passage de la simulation unidimensionnelle [10] à la simulation bidimensionnelle [11, 12, 13, 14, 15] a été le produit de deux phénomènes :

- l'importance croissante des effets 2D
- et l'amélioration des outils informatiques.

1. process simulators

2. device simulators

3. circuit simulators

Aujourd'hui, la réduction des dimensions a atteint un degré tel que certains effets tridimensionnels ne peuvent plus être totalement négligés [16, 17, 18]. Il est donc nécessaire de développer une nouvelle génération d'outils capable de rendre compte de ces effets.

1.3 Projets PROMPT et PROMPT II

Contrairement à la simulation tridimensionnelle de dispositifs, qui a déjà atteint une grande maturité [19, 20], la simulation 3D de procédés en est à ses premiers balbutiements. Il est communément admis que cette différence est due essentiellement à la complexité des problèmes géométriques affrontés [19, 21]. Ces difficultés, détaillées dans le chapitre qui suit, sont :

- de fortes déformations volumiques
- et l'entrée en collision de volumes.

A cela viennent se greffer des contraintes physiques telles que :

- la rapide variation spatiale et temporelle de certaines grandeurs physiques (concentration des dopants),
- et la discontinuité de champs scalaires et vectoriels (contraintes mécaniques, ségrégation des dopants à l'interface Si/SiO₂).

La réalité économique et l'ampleur de la tâche à réaliser ont conduit plusieurs laboratoires et industriels à associer leurs efforts pour réaliser une chaîne de simulation de procédés multi-dimensionnelle, intégrant des simulateurs 1D, 2D et 3D, capable de fournir des données d'entrée pour des simulateurs 3D de dispositifs tels que Dessis [22].

Dans le projet ESPRIT 8150 PROMPT⁴, puis ESPRIT 24038 PROMPT II, les compétences respectives des différents partenaires ont permis l'élaboration d'outils qui génèrent de telles structures 3D à partir des résultats de simulation de procédés 1D, 2D et 3D, ainsi que la réalisation de différents modules tridimensionnels (dépot/gravure, diffusion/oxydation et implantation ionique).

Au sein de ces deux projets, l'ISEN avait pour mission d'implanter le code de simulation tridimensionnelle de la diffusion d'éléments III et V dans le silicium couplée à l'oxydation du silicium.

4. **Process Optimization in Multiple Dimensions for Semi-conductor Technology**

1.4 L'importance du maillage

La performance des simulateurs et la qualité des résultats qu'ils produisent sont étroitement liées aux maillages utilisés [23, 24].

Dans un espace à une dimension, le maillage d'une "structure", pour le moins trivial, n'a jamais été un obstacle pour les simulateurs.

Lors du passage de la simulation de structures 1D à celle d'objets 2D, les mailleurs sont apparus comme des éléments-clés. Cette transition n'a cependant pas été significativement freinée par les mailleurs 2D, déjà suffisamment avancés.

En 3D, la situation est bien différente. L'écriture du code lié aux étapes d'oxydation a été fortement gênée par l'inexistence de mailleurs adaptés. A ce jour, des problèmes résolus en 2D restent encore ouverts en 3D. Ainsi, si des algorithmes permettent d'améliorer la qualité du maillage d'une surface quelconque en 2D [25], l'existence d'une solution n'est toujours pas établie en 3D.

Le consortium des partenaires de PROMPT/PROMPT II a donc pris le parti de développer une compétence adaptée à ses besoins dans le domaine de la génération de maillage. L'ISEN avait pour tâche le maintien de la qualité du maillage dans les étapes de diffusion et d'oxydation.

1.5 Organisation de ce manuscrit

Le contexte de ce travail rapidement brossé, le maintien de la géométrie des structures apparaît clairement comme essentiel pour la simulation de procédés. Les chapitres suivants détaillent les solutions envisagées et justifient le choix de celles qui ont été implantées.

Le second chapitre présente les phénomènes physiques qui régissent les différentes étapes de la simulation et discute différentes méthodes de résolution numérique possibles. Les modèles utilisés sont volontairement simples, l'objectif n'étant pas de rendre compte avec précision de la physique des phénomènes impliqués mais de mettre l'accent sur les conséquences qui se répercutent au niveau de la géométrie des structures simulées.

Le troisième chapitre dresse le tableau des différentes dégradations que subit un maillage au cours des étapes de simulation et présente différentes stratégies pour y remédier.

Le quatrième chapitre inventorie différentes techniques de maillage, décrit leurs avantages, leurs inconvénients et conclut sur leur capacité à répondre à nos besoins. Une fois déterminée la technique de maillage qui répond le mieux à nos besoins, il décrit son implantation. Cette phase de la réalisation d'un maillage est critique car la plupart des algorithmes sont pensés dans un espace réel alors que les calculs sont réalisés dans des espaces discrets. Ce fossé conduit à des améliorations indispensables pour aboutir à une solution acceptable.

Le chapitre cinq se focalise sur un point délicat : le respect des frontières. Il présente différentes techniques utilisées pour forcer des arêtes et des faces, et conclut sur l'intérêt de notre approche dans le traitement des boucles et des recouvrements de domaines qui apparaissent avec le déplacement et la déformation des structures simulées.

Enfin, la conclusion de ce mémoire dresse le bilan de ce travail et définit les axes à approfondir.

Chapitre 2

Modélisation Numérique des Phénomènes de Recuits Thermiques

Ce chapitre détaille le domaine dans lequel a été effectuée cette étude. Il débute avec un bref rappel des propriétés électriques des composants semi-conducteurs en silicium et une présentation succincte des techniques pour les améliorer. Cet aspect reflète le souci premier des industriels : ils mettent en œuvre ces techniques dans les étapes de fabrication et cherchent à les améliorer afin de mieux répondre aux besoins du monde de l'électronique. L'amélioration de ces méthodes s'appuie sur des outils tels que la modélisation et la simulation.

La phase de modélisation passe par l'étude des phénomènes physiques impliqués dans ces procédés. Elle permet une meilleure compréhension de ces phénomènes et conduit généralement à des expressions formelles. Les modèles physiques décrits dans ce mémoire concernent la diffusion des dopants dans le substrat de silicium et l'oxydation de ce substrat pour réaliser des structures d'isolation. Ces modèles sont simples, donc discutables. L'objectif n'est pas ici de modéliser de façon fidèle la diffusion et l'oxydation mais de nous focaliser sur les problèmes géométriques qu'ils induisent.

L'étape de simulation exploite les équations issues de la modélisation en les implantant sur ordinateur à l'aide d'outils numériques sophistiqués. L'exécution du code informatique obtenu fournit des données qui servent à valider les modèles, dans la mesure où elles témoignent de leur capacité à refléter la réalité physique, et à étudier des processus complexes dans lesquels plusieurs phénomènes interagissent. Nous concluons donc ce chapitre en déterminant la méthode numérique à appliquer pour résoudre les systèmes

différentiels décrits, ainsi que les propriétés que nous attendons du maillage.

2.1 Intérêt des étapes de recuits thermiques

Parmi les différentes étapes qui interviennent dans la fabrication d'un composant semi-conducteur, on peut distinguer celles qui nécessitent une élévation de température très importante (800 °C à 1100 °C). Elles sont regroupées sous l'appellation générique d'étapes de recuits thermiques.

Afin de mieux cerner l'intérêt de ces traitements, rappelons comment les dispositifs semi-conducteurs se comportent électriquement et de quelle façon améliorer ce comportement.

2.1.1 Nature semi-conductrice d'un matériau

La nature isolante, conductrice ou semi-conductrice d'un matériau tient à sa propension plus ou moins importante à conduire l'électricité sous l'action d'une différence de potentiel électrique. Plus précisément, l'apparition d'un courant électrique résulte de la capacité à fournir aux porteurs de la charge électrique (électron ou trou) une énergie suffisante pour leur permettre de se déplacer au sein du matériau. Ainsi, dans le cas des matériaux conducteurs, il y a création d'un courant électrique avec un apport d'énergie minimum.

Au contraire, les matériaux isolants et semi-conducteurs se prêtent plus difficilement à l'établissement d'un tel courant : il faut donner aux porteurs de ce courant électrique une énergie relativement grande pour les libérer de leurs atomes. La différence entre un semi-conducteur et un isolant ne tient qu'à la quantité d'énergie nécessaire pour libérer ses charges : moins de 2 eV pour un semi-conducteur, plus pour un isolant.

Avec moins de 2 eV pour libérer des particules électriques, les matériaux semi-conducteurs basculent aisément d'un état isolant à un état conducteur. C'est cette propension à devenir conducteur qui leur vaut cette appellation. Tout l'art de l'industrie des semi-conducteurs consiste à affiner cette propriété et à canaliser l'énergie mise à disposition.

2.1.2 Cas du silicium

Le silicium appartient à la colonne IV A du tableau de classification périodique des éléments chimiques (tab. 2.1).

III A		IV A		V A	
5	10,811	6	12,011	7	14,0067
B bore		C carbone		N azote	
13	26,9815	14	28,0855	15	30,9737
Al aluminium		Si silicium		P phosphore	
31	69,723	32	72,61	33	74,9216
Ga gallium		Ge germanium		As arsenic	
49	114,818	50	118,710	51	121,757
In indium		Sn étain		Sb antimoine	

TAB. 2.1 – Extrait des colonnes III A à V A du tableau de classification périodique de Mendeleïev.

Tout comme le carbone, il satisfait quatre liaisons de covalence (fig. 2.1). Ce sont les électrons de ces liaisons qui, une fois libérés, se déplacent sous l'effet d'un champ électrique.

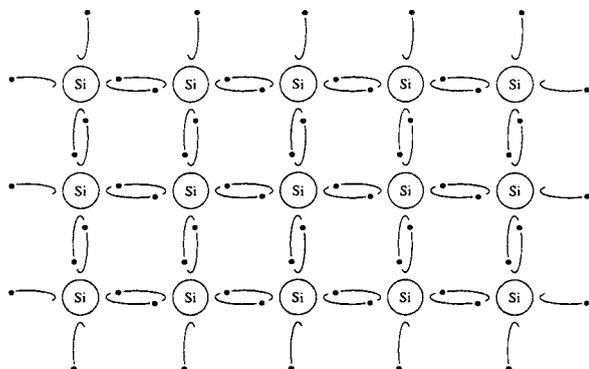


FIG. 2.1 – Liaisons de covalence dans un cristal de silicium pur.

Si des atomes des colonnes III A ou V A du tableau de classification périodique prennent la place d'atomes de silicium dans le cristal (fig. 2.2),

les populations de trous et d'électrons susceptibles de se déplacer dans le silicium deviennent dissymétriques (ajout d'un trou avec un atome de la colonne III A et d'un électron surnuméraire avec un atome de la colonne V A). A 300 °K, ces atomes reçoivent suffisamment d'énergie thermique pour être ionisés. Chaque atome de la colonne III A fournit alors un trou pour l'établissement d'un courant électrique si une tension est appliquée. De même, chaque atome de la colonne V A libère un électron pour ce courant. Dans le cas des semi-conducteurs, ce sont les porteurs provenant de ces atomes ionisés qui constituent le courant électrique.

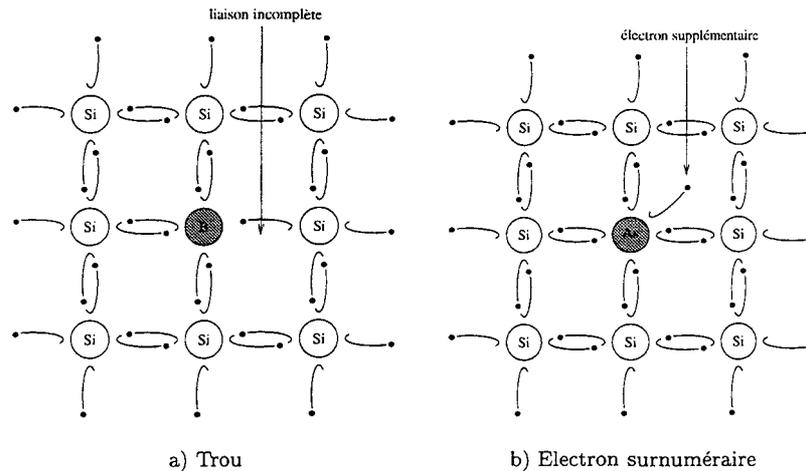


FIG. 2.2 –Création d'un trou (resp. d'un électron surnuméraire) à l'aide d'un atome de bore (resp. d'arsenic).

2.1.3 Amélioration des propriétés électriques par dopage

Les atomes des colonnes III A et V A du tableau de Mendeleïev améliorant les qualités électriques du silicium, il apparaît intéressant de doper l'édifice cristallin à l'aide de ces impuretés. Les techniques utilisées pour disposer ces atomes dans le silicium nécessitent généralement deux étapes: la première consiste à les placer aléatoirement dans le cristal et la seconde à les activer électriquement.

Implantation ionique

La phase d'implantation ionique consiste à bombarder une zone du cristal afin d'y injecter une certaine quantité d'impuretés. Pour réaliser cette étape,

il faut déterminer les zones à atteindre et protéger les autres régions à l'aide de masques faits de résine, de nitrure ou d'oxyde (fig. 2.3) [26].

La profondeur d'implantation est fonction de l'énergie d'implantation (de l'ordre de 15 à 200 keV). Les dopants pénètrent le substrat de silicium avec une vitesse initiale puis sont freinés par les interactions avec les particules présentes dans le cristal. Ces interactions prennent la forme de chocs élastiques, d'attraction ou de répulsion électrique avec d'autres ions (théorie de Lindhard, Scharff et Schiøtt) [27].

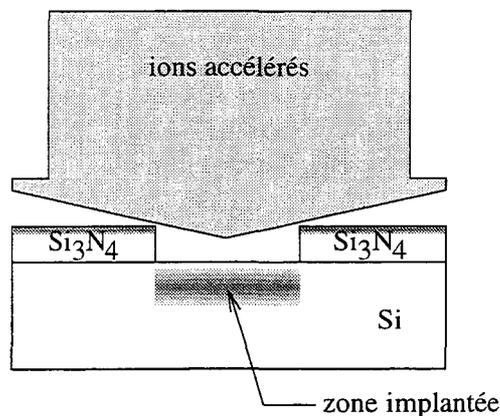


FIG. 2.3 – *Implantation ionique.*

Effet de canalisation La nature cristalline du substrat peut engendrer des phénomènes particuliers, tel que l'effet de canalisation¹. Dans de tels cas, une impureté injectée se déplace dans un couloir constitué d'atomes de silicium. La diminution de la fréquence des chocs élastiques avec les atomes a pour conséquence de réduire plus lentement l'énergie cinétique de la particule injectée : cette dernière est donc implantée plus profondément. L'effet est d'autant plus important que l'atome ou l'ion injecté est petit. Il est donc plus prononcé avec des atomes légers comme le bore qu'avec des atomes lourds comme l'indium. Comme il est généralement nécessaire d'avoir de faibles profondeurs de jonction, cet effet est neutralisé en réalisant l'implantation avec un angle de l'ordre de 7°, appelé TILT (fig. 2.4).

In fine, on obtient un profil de concentration proche d'une gaussienne. L'objectif de répartir des impuretés à une certaine profondeur dans le substrat de silicium est donc atteint. Cependant, l'état de l'édifice cristallin après ce bombardement ne permet pas l'obtention des propriétés électriques souhaitées.

1. channeling effect

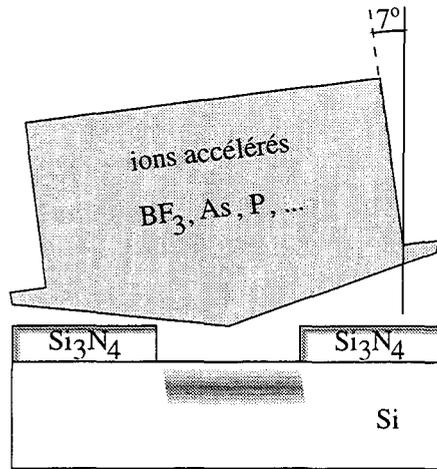


FIG. 2.4 – Principe de TILT pour neutraliser la canalisation des impuretés lors de l'implantation ionique.

Défauts cristallins

L'implantation ionique modifie l'arrangement atomique. En effet, si avec de faibles doses d'implantation la majorité des atomes de silicium reste dans le réseau cristallin, une faible proportion d'entre eux est éjectée des positions dites "substitutionnelles" : ce sont les "silicium interstitiels" ou "interstitiels" (fig. 2.5) ; ils laissent des positions vacantes dans le réseau appelées lacunes.

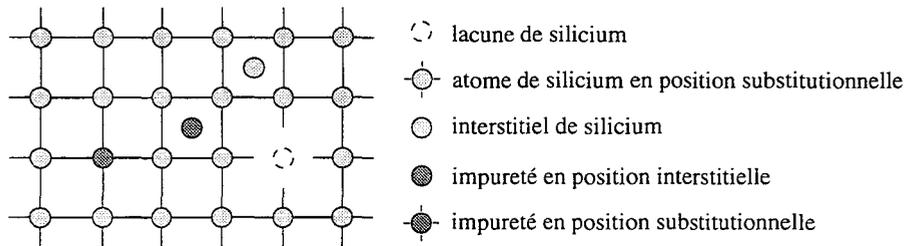


FIG. 2.5 – Différents types de défauts cristallins.

La même situation est observée pour les ions qui ont été implantés avec, toutefois, des proportions inverses : la majorité d'entre eux se trouvent en site interstitiel. Les quelques pourcents qui s'immobilisent à la place d'un atome de silicium dans le réseau cristallin sont appelés "dopants en site substitutionnel". Seuls ces derniers sont actifs électriquement car ils ont établi les liaisons de covalence avec les atomes de silicium voisins. Si la dose d'ions injectés augmente, la modification de l'arrangement atomique devient fort importante. A l'extrême, le silicium perd sa structure cristalline et devient amorphe. Ses propriétés conductrices sont alors complètement modifiées [28].

Réarrangement de l'édifice cristallin et activation électrique

La configuration cristalline étant celle qui demande le moins d'énergie, le substrat de silicium peut être "réparé" en fournissant aux atomes de silicium et aux dopants l'énergie nécessaire à leur migration vers cet état ordonné. Cet apport est réalisé par élévation de température lors d'une étape appelée *recuit thermique*.

Dans le cas de faibles doses d'implantation, ce recuit permet aux atomes de silicium et aux dopants d'atteindre un minimum d'énergie potentielle en gagnant des sites substitutionnels. Dans le cas de doses élevées, le recuit thermique entraîne une recristallisation complète du substrat de silicium dopé. L'intérêt de cette étape est donc double :

- elle réduit les défauts dans le substrat, défauts qui peuvent entraîner des dysfonctionnements électriques sévères ;
- elle permet de créer les liaisons de covalence entre la matrice de silicium et les dopants qui sont en site substitutionnel. Ces liaisons atomiques sont indispensables pour améliorer les caractéristiques électriques d'un composant semi-conducteur [29].

Conséquences négatives de l'étape de recuit thermique

Pendant un recuit thermique, l'apport énergétique, difficile à doser, est accompagné d'effets indésirables car les dopants qui reçoivent un surplus d'énergie peuvent se déplacer dans le substrat de silicium et migrer vers des positions très éloignées de celles où ils s'étaient arrêtés après l'étape d'implantation. La présence de défauts ponctuels, notamment, favorise cette migration parasite [13]. Le phénomène de diffusion a donc pour conséquence d'élargir le profil des dopants, ce qui est opposé au but recherché.

Dans le cas de fortes doses d'implantation, l'excès d'énergie thermique peut conduire à la réorganisation de zones amorphes en structures cristallines particulières contenant des défauts étendus (défauts d'empilement, boucles de dislocation, ...) [30]. Ces défauts constituent de véritables pièges pour les porteurs électriques et sont à l'origine d'importants dysfonctionnements.

La modélisation physique de l'étape de recuit thermique tient compte de ces phénomènes suivant le niveau de précision requis. Un premier niveau de modèle consiste à ne considérer que la diffusion des dopants (les interactions avec les défauts ponctuels et les défauts étendus sont négligées).

2.1.4 Isolation électrique par oxyde de champ

La réalisation d'un composant semi-conducteur peut être comparée à celle de voies d'irrigation. Nous avons vu que le dopage de certaines zones a pour objet de créer des canaux pour que les charges électriques puissent circuler plus facilement. De tels ouvrages s'accompagnent généralement de digues pour canaliser les flots et protéger les rives d'éventuels débordements.

En micro-électronique, les barrages s'appuient sur la notion de barrière de potentiel et sont bâties à l'aide de jonctions polarisées en inverse ou de matériaux isolants [31]. Parmi les techniques d'isolation utilisées pour réaliser ces digues, les LOCOS² constituent une de celles les plus fréquemment mises en œuvre.

Cet aspect de la fabrication débute par la définition de la cartographie du composant silicium, c'est à dire la séparation des zones actives (transistors) des zones inactives (oxydes de champ). Cette phase conduit à la définition de masques qui servent à protéger certaines zones soit pendant les étapes de gravure, pour réaliser des LOCOS enterrés [32] par exemple, soit pendant les étapes d'oxydation (fig. 2.6). Le nitrure de silicium, qui s'oxyde faiblement en regard du silicium, est généralement employé pour réaliser ces masques.

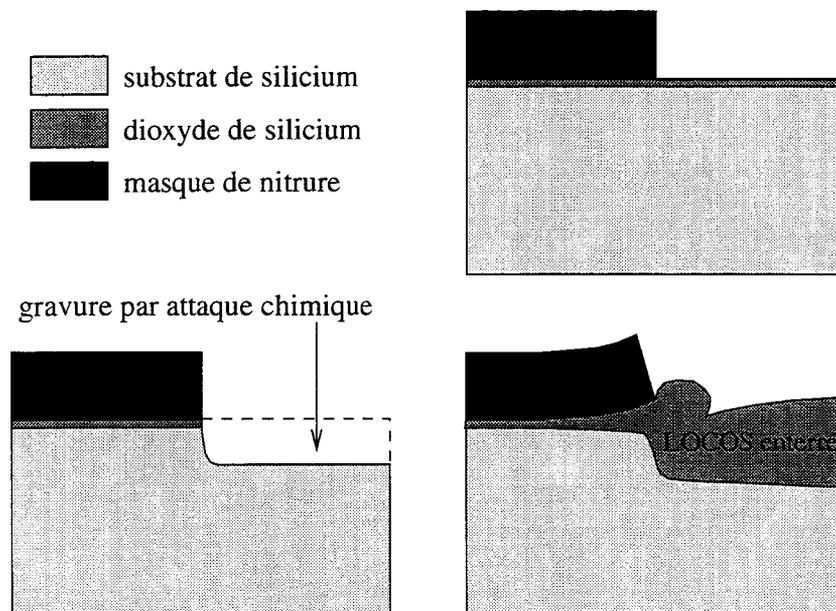


FIG. 2.6 – *Locos enterré: étapes de gravure et d'oxydation.*

Cependant, les gigantesques contraintes internes dont il est le siège peuvent entraîner d'importantes ruptures dans l'édifice cristallin. Ces dislocations s'accompagnent généralement d'une dégradation des propriétés électriques catastrophique pour le dispositif fabriqué. Aussi, une mince couche d'oxyde de silicium est-elle créée à la surface du substrat de silicium avant de déposer le masque de nitrure. Ce piédestal constitue un tampon qui réduit très significativement le risque de dislocation évoqué ci-avant [33].

Oxydation et élévation de température

L'étape d'oxydation implique une réaction chimique entre le silicium et un agent oxydant (O_2 pour une oxydation en ambiance sèche et H_2O pour une oxydation en ambiance humide). Ce phénomène physique est très lent à température ambiante, donc incompatible avec les besoins de l'industrie. Aussi cette réaction chimique est-elle catalysée en apportant de l'énergie sous forme de chaleur. La plage de températures couramment utilisée pour cette phase se situe entre $800\text{ }^\circ\text{C}$ et $1100\text{ }^\circ\text{C}$.

Interface silicium plane idéale

Afin de mieux comprendre les différents phénomènes physiques impliqués dans cette étape importante de la fabrication d'un composant électronique, séparons l'espace tridimensionnel à l'aide d'un plan infini. Le demi-espace supérieur définit le milieu oxydant, et le demi-espace inférieur, la couche de silicium (fig. 2.7). En pratique, l'existence d'une fine couche d'oxyde natif à l'interface *Silicium/milieu oxydant* est communément admise.

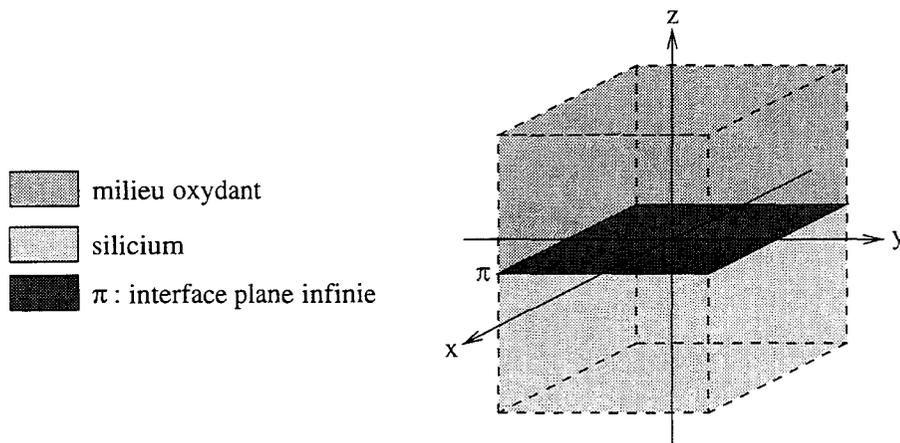


FIG. 2.7 – Interface plane idéale entre milieu oxydant et substrat de silicium.

Notons que l'interface entre un édifice cristallin (substrat de silicium) et un milieu amorphe (dioxyde de silicium) est complexe [34]. Nous négligeons cet aspect dans la suite de ce mémoire et faisons l'hypothèse d'interfaces géométriquement et physiquement idéales.

Une oxydation nécessite la mise en présence des éléments du couple oxydant-oxydé. L'existence d'une couche de dioxyde de silicium entre le substrat et le milieu gazeux implique donc la diffusion du silicium à travers cette couche depuis ce substrat jusqu'à l'interface *oxyde/milieu oxydant* ou celle des agents oxydants depuis le milieu gazeux jusqu'à l'interface *silicium/oxyde*. Comme la diffusion des agents oxydants est prépondérante [35, 36], elle seule est prise en compte dans ce mémoire.

A l'interface Si/SiO_2 , les agents oxydants réagissent avec le silicium pour former une nouvelle couche d'oxyde qui s'intercale entre la couche d'oxyde initialement présente et le substrat de silicium. Le rapport volumique entre le dioxyde de silicium créé et le silicium consommé pendant la réaction chimique étant supérieur à un, la couche d'oxyde est repoussée vers le haut ; les interfaces planes sont translatées verticalement (fig. 2.8).

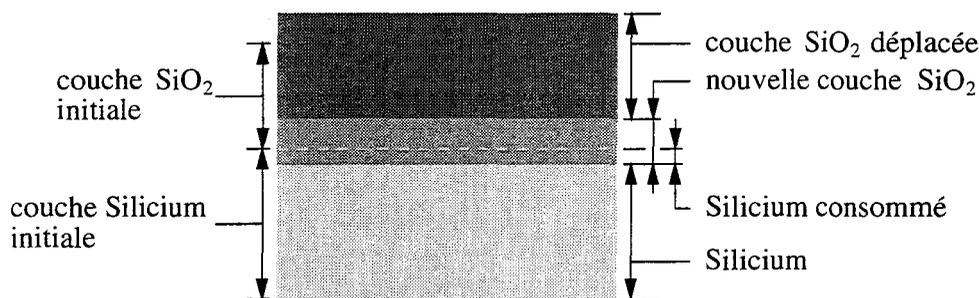


FIG. 2.8 – Déplacement des interfaces lors d'une oxydation plane idéale.

Interface silicium courbe

La présence des masques de nitrure modifie ce comportement idéal ; des interfaces courbes naissent de la diffusion des agents oxydants sous le nitrure et de l'oxydation du silicium qui s'y trouve. Le flux de diffusion dessine une courbe qui définit la nouvelle frontière entre le substrat et l'oxyde (fig. 2.9).

Au contraire d'une oxydation plane idéale, l'oxyde ne peut croître librement car le masque de nitrure, rigide, s'oppose à son extension. L'interface entre le dioxyde de silicium et le milieu gazeux va donc se déformer. Enfin, sous la pression croissante du dioxyde de silicium, le masque de nitrure se courbe lui aussi (fig. 2.10).

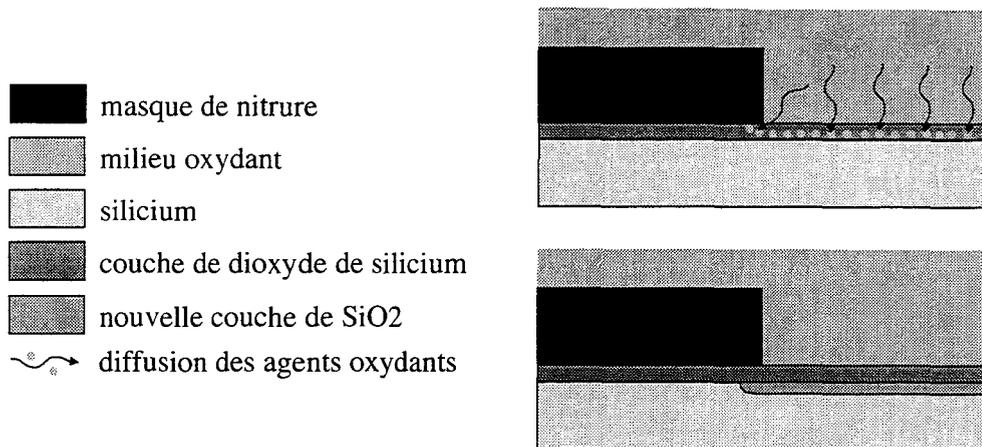


FIG. 2.9 – Courbure de l'interface Si/SiO₂ suite à la diffusion des agents oxydants sous le masque de nitrure (la nouvelle couche SiO₂ est représentée avec l'hypothèse d'un rapport volumique Si/SiO₂ égale à 1).

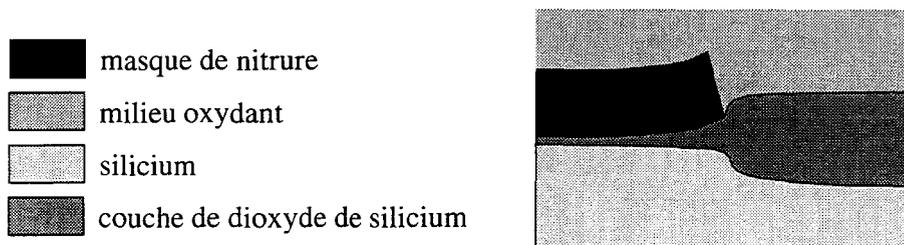


FIG. 2.10 – Courbure du masque de nitrure et de l'interface entre le dioxyde de silicium et le milieu gazeux lors de la création d'un LOCOS.

Conséquences négatives de la croissance d'oxyde de silicium

La croissance d'oxyde de silicium dans une structure de type LOCOS entraîne une déformation des matériaux et donc l'apparition de contraintes mécaniques. Celles-ci ont des conséquences nuisibles importantes.

En effet, outre les risques de dislocation dans le substrat de silicium, les contraintes mécaniques modifient également la cinétique d'oxydation [37]. Ainsi, les agents oxydants diffusent moins vite dans l'oxyde en compression. De plus, l'énergie d'activation de la réaction d'oxydation augmente lorsque la surface de silicium est comprimée. Enfin, un fort niveau de contraintes de cisaillement dans le dioxyde de silicium réduit sa viscosité.

Ces différents effets entraînent une modification des épaisseurs d'oxyde ce qui affecte la qualité de l'isolation électrique. Comme pour la modélisation

de l'étape de recuit thermique, ils sont intégrés ou non dans les modèles en fonction de la précision souhaitée.

Origine des contraintes mécaniques

Au cours des paragraphes qui précèdent, nous avons mentionné la présence de contraintes mécaniques dans le composant. Dans le cas d'une oxydation plane (fig. 2.8 p. 16), ces contraintes sont inexistantes. Dans le cas d'une interface silicium courbe, des contraintes en tension ou compression peuvent apparaître; elles sont le résultat de la croissance d'une couche d'oxyde sur un substrat de rayon de courbure finie. Nous allons à présent décrire l'origine des forces de tension et de compression.

Tension. Prenons le cas d'un barreau de silicium qui s'oxyde à sa périphérie (fig. 2.11). La mince couche d'oxyde créée à l'interface Si/SiO_2 repousse l'oxyde vers l'extérieur: étiré autour d'un cylindre de rayon ρ_1 supérieur au rayon initial ρ_0 , l'oxyde devient le théâtre de forces latérales en tension.

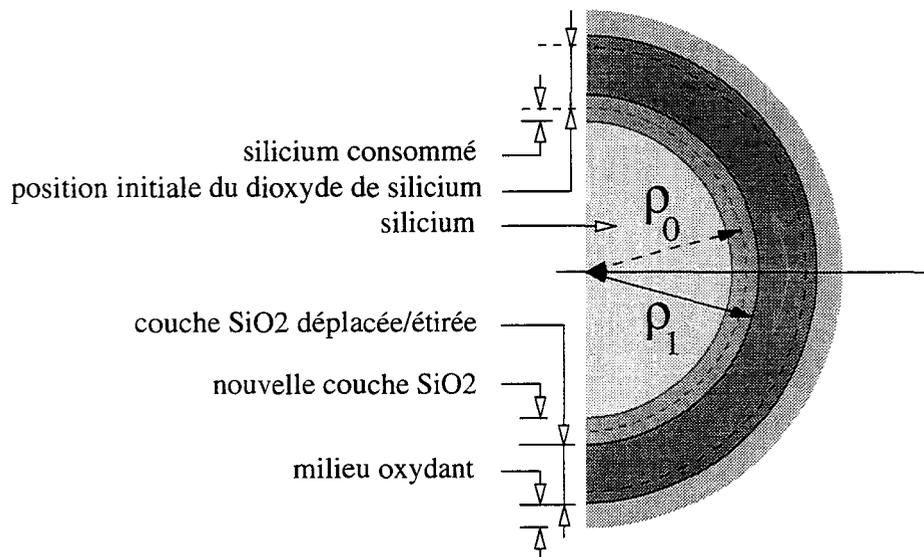


FIG. 2.11 – Apparition de contraintes mécaniques en tension lors de l'oxydation d'un cylindre de silicium.

Compression. Au contraire, si le barreau de silicium est creux et qu'il s'oxyde à la périphérie du cylindre intérieur (fig. 2.12), la mince couche

d'oxyde qui apparaît à l'interface Si/SiO_2 repousse l'oxyde vers le centre : l'oxyde est comprimé autour d'un cylindre de rayon ρ_1 inférieur au rayon initial ρ_0 . Il s'y développe un champ de forces latérales en compression.

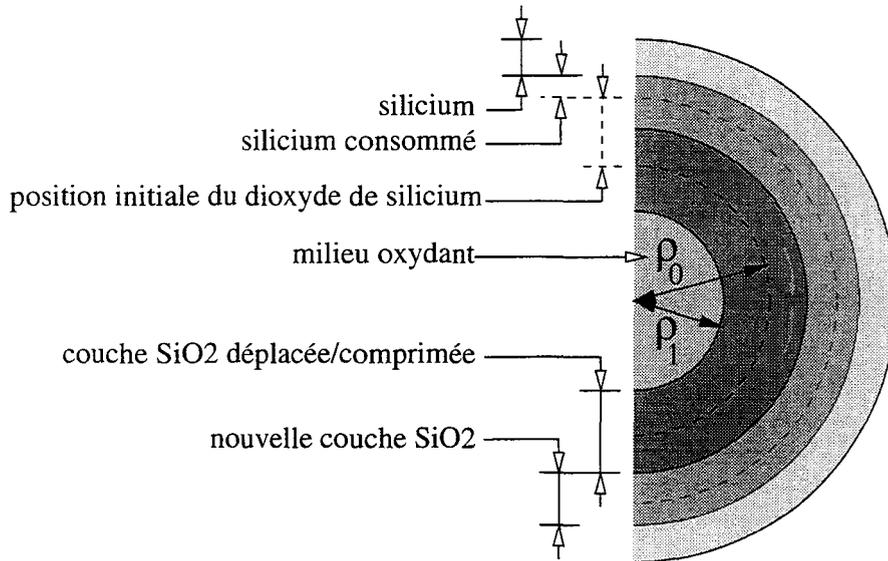


FIG. 2.12 -Apparition de contraintes mécaniques en compression lors de l'oxydation d'un cylindre de silicium creux.

En résumé, la fabrication des LOCOS déforme les domaines et engendre des contraintes mécaniques. En outre, elle nécessite le couplage de la diffusion et de l'oxydation car l'apport de chaleur nécessaire à la réaction d'oxydation fait diffuser les impuretés dans le substrat de silicium (cf. 2.1.3 p. 13).

2.2 Modèles physiques

Les recuits thermiques apparaissent comme une étape essentielle dans la fabrication des structures d'isolation et l'activation des dopants. Toutefois, ils s'accompagnent d'effets parasites tels que la diffusion des impuretés et la génération de contraintes mécaniques. Nous allons à présent donner une expression mathématique à ces différents mécanismes physiques. Les équations obtenues interviendront dans l'élaboration du schéma de résolution numérique.

2.2.1 Diffusion des dopants

Le mécanisme de diffusion est physiquement complexe ; de nombreuses études ont abouti à des modèles très évolués et robustes [14]. Cependant, les objectifs ambitieux des projets PROMPT et PROMPT II ont conduit à une approche pragmatique : résoudre les difficultés d'implantation numérique en s'appuyant sur des modèles simples avant d'étendre des modèles bidimensionnels plus sophistiqués à la troisième dimension. Le modèle présenté ici se veut donc rudimentaire ; il s'appuie principalement sur les lois de Fick.

Lois de Fick

La première loi de Fick relie le flux \vec{J}_i d'une impureté i à son gradient de concentration $\vec{\nabla}C_i$:

$$\vec{J}_i = -D_i \vec{\nabla}C_i \quad (2.1)$$

Dans cette expression, D_i représente le coefficient de diffusion de l'impureté i . Le dopant pouvant être ionisé, ses déplacements sont également gouvernés par le champ électrique engendré par les ions présents dans le cristal. L'expression du flux devient :

$$\vec{J}_i = -D_i \vec{\nabla}C_i - Z_i \cdot \mu_i \cdot C_i \cdot \vec{E} \quad (2.2)$$

Z_i vaut ± 1 suivant que i soit un ion une fois positif ou négatif, μ_i représente la mobilité (en $\text{cm}^2\text{v}^{-1}\text{s}^{-1}$) et \vec{E} le champ électrique local. L'application de la relation d'Einstein sous l'hypothèse statistique de Boltzmann permet de relier le coefficient de diffusion à la mobilité de l'impureté i :

$$D_i = \frac{kT}{q} \cdot \mu_i \quad (2.3)$$

La seconde loi de Fick, quant à elle, établit la conservation de masse :

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_i \quad (2.4)$$

Le phénomène de diffusion qui gouverne une impureté i peut donc s'exprimer mathématiquement de la façon suivante :

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = +\vec{\nabla} \cdot \left(D_i \cdot \left(\vec{\nabla}C_i + Z_i \cdot \frac{q}{kT} \cdot C_i \cdot \vec{E} \right) \right) \quad (2.5)$$

Nous arrêtons ici l'élaboration du modèle de diffusion qui, comme on peut le constater, reste très simple.

Conditions aux limites

L'expression obtenue ci-avant modélise la diffusion d'une impureté dans un matériau donné; elle ne prend pas en compte les conditions particulières qui s'appliquent à l'interface entre deux matériaux. Ces conditions aux limites varient en fonction de la nature des interfaces.

Interface gazeuse. A l'interface silicium/gaz, on impose généralement une condition d'évaporation (si le milieu gazeux ne contient pas de dopant en forte concentration) :

$$J_i = -h_e \cdot C_i \quad (2.6)$$

J_i représente le flux défini positif du milieu gazeux vers le milieu solide, h_e le coefficient de transport de masse (en $cm.s^{-1}$) et C_i la concentration surfacique de l'impureté i . Si le dopant est présent dans le gaz, une condition de prédépôt est appliquée :

$$J_i = h_p \cdot (C_{is} - C_i) \quad (2.7)$$

Le flux J_i dépend alors de la concentration surfacique C_{is} due au dépôt. La valeur de h_p étant généralement importante ($10^{-6} cm.s^{-1}$), une condition de Dirichlet est appliquée :

$$C_i = C_{is} \quad (2.8)$$

Enfin, cette formulation est majorée par la solubilité de l'impureté i dans le silicium. Cette grandeur physique spécifie la concentration à partir de laquelle aucune impureté i ne peut plus être introduite dans le substrat, qui a alors atteint son niveau de saturation pour le dopant i . Sa valeur dépend de la nature du dopant ainsi que de la température du milieu.

Interfaces latérales et inférieures. La composante normale du flux de dopants est nulle aux interfaces extérieures, latérales ou inférieures, de la structure :

$$\frac{\partial C_i}{\partial n} = 0 \quad (2.9)$$

Phénomène de ségrégation. A l'interface Si/SiO_2 la concentration des dopants est discontinue, suite à un phénomène de ségrégation. Ce phénomène est modélisé de façon empirique dans ce mémoire: un flux de dopants est appliqué du silicium vers l'oxyde :

$$\vec{J}_{Si/SiO_2} = -h \cdot (C_{Si} - m_{Si/SiO_2} \cdot C_{SiO_2}) \quad (2.10)$$

avec C_{Si} et C_{SiO_2} les concentrations dans le silicium et l'oxyde à l'interface Si/SiO_2 , h le coefficient de transport de masse, et m_{Si/SiO_2} le coefficient de ségrégation à l'équilibre :

$$m_{Si/SiO_2} = \left. \frac{C_{Si}}{C_{SiO_2}} \right|_{\text{éq.}} \quad (2.11)$$

2.2.2 Oxydation du silicium

Nous avons vu lors de la description de l'étape d'oxydation que l'on peut admettre l'existence d'une fine couche d'oxyde à la surface du silicium (cf. 2.1.4). En pratique, nous supposons la présence d'une couche native de quelques angströms d'épaisseur. Partant de ces hypothèses, la modélisation de l'oxydation implique trois phénomènes physiques :

1. la diffusion des agents oxydants à travers la couche d'oxyde ;
2. la réaction d'oxydation, qui se traduit par la création d'une nouvelle couche d'oxyde à l'interface Si/SiO_2 ;
3. la déformation des matériaux due à la croissance du dioxyde de silicium dont le volume est supérieur au volume de silicium consommé.

Diffusion des agents oxydants

Le modèle de Deal & Grove [38] établit une loi linéaire-parabolique de croissance de l'oxyde de silicium en se basant sur l'hypothèse de la diffusion des agents oxydants dans l'oxyde. Il s'appuie sur l'égalité entre trois flux : le transport des agents oxydants du milieu gazeux vers la surface de l'oxyde (F_1), la diffusion de ces agents dans l'oxyde (F_2) et leur réaction avec le silicium (F_3).

Le flux d'agents oxydants F_1 du milieu gazeux vers la surface d'oxyde est fonction de la différence de concentration entre ces deux milieux :

$$\vec{F}_1 = h \times (C^* - C_0) \times \vec{n} \quad (2.12)$$

avec h le coefficient de transfert de masse, C^* la solubilité des agents oxydants dans l'oxyde, C_0 leur concentration à la surface de l'oxyde et \vec{n} le vecteur normal à l'interface SiO_2/gaz .

La diffusion de ces agents à travers la couche d'oxyde est gouvernée par les lois de Fick :

$$\begin{aligned}\vec{F}_2 &= -D_{ox} \times \vec{\nabla} C_{ox} \\ \frac{\partial C_{ox}}{\partial t} &= -\vec{\nabla} \vec{F}_2\end{aligned}\tag{2.13}$$

où D_{ox} représente le coefficient de diffusion des agents oxydants et C_{ox} leur concentration dans l'oxyde. Cependant, comme l'état stationnaire est atteint instantanément, la distribution des agents oxydants dans SiO_2 est réduite à la résolution de l'équation de Laplace :

$$D_{ox} \times \Delta C = 0\tag{2.14}$$

Sur les faces latérales de la structure, une condition de flux nul est imposée :

$$\vec{F}_2 \cdot \vec{n} = 0\tag{2.15}$$

Enfin, le flux de réaction \vec{F}_3 à l'interface Si/SiO_2 vérifie :

$$\vec{F}_3 = k_{si} \times C_i \times \vec{n}\tag{2.16}$$

avec k_{si} la constante de réaction, C_i la concentration des agents oxydants à l'interface Si/SiO_2 et \vec{n} le vecteur normale à cette interface.

Réaction d'oxydation à l'interface Si/SiO₂

La modélisation de la réaction chimique entre les agents oxydants (O_2 ou H_2O) se limite, en ce qui nous concerne, au calcul de l'épaisseur de la couche d'oxyde. Dans un système unidimensionnel, l'égalité entre les trois flux F_1 , F_2 et F_3 conduit à l'expression :

$$\frac{X_{ox}^2}{B} + \frac{X_{ox}}{A} = t + \tau\tag{2.17}$$

où X_{ox} représente l'épaisseur de la couche d'oxyde, B et A sont les constantes linéaire et parabolique, t correspond à la durée de la réaction et τ définit un décalage temporel fonction de l'épaisseur de la couche d'oxyde présente avant la réaction. Notons que B et A vérifient :

$$B = 2 \cdot D_{ox} \cdot \frac{C^*}{N_1}\tag{2.18}$$

$$\frac{B}{A} = \frac{C^*}{N_1(k_{si}^{-1} + h^{-1})} \approx k_{si} \cdot \frac{C^*}{N_1} \quad (\text{car } h \gg k_{si})\tag{2.19}$$

avec N_1 le nombre de molécules d'agents oxydants intervenant dans la formation d'un volume unitaire d'oxyde de silicium.

La vitesse d'oxydation le long de l'interface Si/SiO_2 est calculée à l'aide du rapport entre le flux d'agents oxydants absorbés et N_1 :

$$\vec{V}_{ox} = \frac{\vec{F}_3}{N_1} \quad (2.20)$$

Déformation des matériaux

Pour une configuration non plane, la détermination de la topographie après un pas d'oxydation nécessite une approche numérique basée sur un calcul de structure. Les déformations de la géométrie dues à l'augmentation de volume imposée à l'interface entre le silicium et le dioxyde de silicium sont calculées pour l'ancien oxyde et le masque de nitrure. Elles sont obtenues en appliquant la relation fondamentale de la dynamique à la structure étudiée. Si nous faisons l'hypothèse d'une source de contraintes réduite à la croissance d'oxyde, l'égalité entre la somme des forces extérieures et la somme des forces internes à la structure conduit aux équations suivantes :

$$\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial z} = 0 \quad (2.21)$$

$$\frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial z} = 0 \quad (2.22)$$

$$\frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z} = 0 \quad (2.23)$$

avec σ_{ij} les éléments du tenseur (symétrique) des contraintes mécaniques internes au système oxyde/nitrure. Notons que le calcul tensoriel qui intervient dans la résolution de ce problème mécanique est simplifié dans la mesure où :

- l'hypothèse des petits déplacements s'applique dans notre cas (relation linéaire entre déformations et déplacements) ;
- les matériaux impliqués sont isotropes et homogènes.

Tenseur des contraintes

Les forces extérieures surfaciques et massiques appliquées à la structure en équilibre génèrent des forces intérieures suite au déplacement des différentes

parties de la structure, les unes par rapport aux autres. Si nous prenons le cas d'un volume élémentaire cubique, le tenseur des contraintes a pour expression [39] :

$$[\sigma_{ijk}] = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \quad (2.24)$$

avec σ_{xx} , σ_{yy} et σ_{zz} les composantes normales, et σ_{xy} , σ_{xz} , σ_{yx} , σ_{yz} , σ_{zx} et σ_{zy} les composantes de cisaillement. Ce tenseur peut être décomposé en deux composantes : la composante sphérique (ou de dilatation) $[\sigma^V]$ et celle de déviation $[\sigma^S]$. Ces deux tenseurs vérifient :

$$[\sigma^V] = \frac{1}{3} \times \text{trace} [\sigma_{ijk}] \times [I] \quad (2.25)$$

$$[\sigma^S] = [\sigma_{ijk}] - [\sigma^V] \quad (2.26)$$

Tenseur linéarisé des déformations

Les déplacements internes des différentes parties de la structure entraînent des déformations. Ces changements de forme altèrent les dimensions (variation de longueur) et les angles entre les différents plans du corps. Le tenseur des déformations a pour expression :

$$[\varepsilon_{ijk}] = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} \quad (2.27)$$

Dans ce tenseur, la variation relative des longueurs u , v et w suivant les axes (O, \vec{i}) , (O, \vec{j}) et (O, \vec{k}) est représentée par :

$$\varepsilon_{xx} = \frac{\partial u}{\partial x} \quad (2.28)$$

$$\varepsilon_{yy} = \frac{\partial v}{\partial y} \quad (2.29)$$

$$\varepsilon_{zz} = \frac{\partial w}{\partial z} \quad (2.30)$$

tandis que les variations angulaires entre les trois plans (\vec{i}, \vec{j}) , (\vec{i}, \vec{k}) et (\vec{j}, \vec{k}) correspondent à :

$$\varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yx} = \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \quad (2.31)$$

$$\varepsilon_{xz} = \varepsilon_{zx} = \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \quad (2.32)$$

$$\varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zy} = \frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \quad (2.33)$$

Ce tenseur peut également être décomposé en une composante sphérique $[\varepsilon^V]$ et une composante de dilatation $[\varepsilon^S]$:

$$[\varepsilon^V] = \frac{1}{3} \times \text{trace} [\varepsilon_{ijk}] \times [I] \quad (2.34)$$

$$[\varepsilon^S] = [\varepsilon_{ijk}] - [\varepsilon^V] \quad (2.35)$$

Modèle rhéologique

Le comportement mécanique d'une structure dépend de la relation qui lie contraintes et déformations. Dans le cas de matériaux isotropes subissant de petits déplacements, et étant donnée la symétrie des tenseurs de contraintes et de déformations, cette relation prend la forme suivante :

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{xy} \\ \sigma_{xz} \\ \sigma_{yz} \end{bmatrix} = [D] \times \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ \varepsilon_{xy} \\ \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yz} \end{bmatrix} \quad (2.36)$$

où D est appelée matrice de rigidité. Dans notre cas, la sollicitation initiale qui déforme la structure est imposée par la vitesse d'oxydation (éq. 2.20 p. 24). La structure se relaxe ensuite conformément à son comportement rhéologique. Dans ce mémoire, nous faisons l'hypothèse d'une structure solide élastique (solide de Hooke) :

$$[D] = \chi \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}}_{\text{dilatation}} + G \underbrace{\begin{bmatrix} 4/3 & -2/3 & -2/3 & 0 & 0 & 0 \\ -2/3 & 4/3 & -2/3 & 0 & 0 & 0 \\ -2/3 & -2/3 & 4/3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}}_{\text{déviation}} \quad (2.37)$$

avec χ et G les modules de compressibilité et de rigidité, dont l'expression est fonction du module d'Young (E) et du coefficient de Poisson (ν) :

$$\chi = \frac{E}{3(1-2\nu)} \quad (2.38)$$

$$G = \frac{E}{2(1 + \nu)} \quad (2.39)$$

Cette modélisation est évidemment très simple, donc parfaitement discutable. Néanmoins, si un modèle visco-élastique est préférable [15], il complique la formulation du problème sans rien apporter à la recherche d'une solution au problème du maillage.

Conditions aux limites

Aux équations 2.21, 2.22 et 2.23 viennent s'ajouter des conditions imposées aux différentes frontières de la structure. Ainsi, le déplacement de l'interface Si/SiO_2 découle de l'équation 2.20. Les nœuds des interfaces latérales ont, quant à eux, un déplacement limité aux plans définis par ces interfaces. Enfin, la composante normale du champ de contraintes est continue aux interfaces telles que celle entre le nitrure et le dioxyde de silicium, et nulle aux interfaces libres telles que celles entre le milieu oxydant et le nitrure, ou encore entre le milieu oxydant et l'oxyde.

2.3 Résolution numérique

Simuler les phénomènes physiques impliqués dans les étapes de recuits thermiques nécessite de résoudre numériquement les équations différentielles décrites dans la partie modélisation. Les méthodes numériques couramment rencontrées dans le domaine de la simulation électronique sont les différences finies, les boîtes finies et les éléments finis. Ces approches ont en commun la discrétisation des structures étudiées à l'aide d'un maillage constitué de polyèdres dont les sommets, appelés nœuds, représentent les points où est calculé l'état physique du système. Elles diffèrent néanmoins sur de nombreux points et, en particulier, la nature de ce maillage.

Ainsi, les **différence finies**, basées sur la discrétisation de l'opérateur différentiel à l'aide du développement limité des fonctions analytiques intervenant dans les différentes équations différentielles, nécessitent l'utilisation d'un maillage de type Manhattan. En 3D, cela signifie l'utilisation d'éléments cubiques et de frontières discrétisées à l'aide de carrés. Si cette méthode est communément rencontrée dans le domaine de la simulation de dispositifs, elle est inappropriée dans notre cas. Ses lacunes sont essentiellement son manque de souplesse dans la discrétisation de structures complexes (bien que des solutions existent pour réduire cette carence), l'excès de nœuds dû à une discrétisation régulière selon des plans perpendiculaires, et le fait que ce type de maillage ne peut subir de déformation.

La méthode des **Boîtes finies** est, quant à elle, une extension de celle des différences finies avec, contrairement à celle-ci, l'utilisation possible d'un maillage composé de polyèdres quelconques. Cependant, son utilisation est restreinte par la qualité géométrique qu'elle exige des éléments du maillage : ils doivent impérativement respecter le critère de Voronoï. Une fois encore, de fortes déformations du maillage rendent cette approche peu praticable.

Enfin, apparue en même temps que les différences finies, la méthode des **éléments finis** calcule une solution dans un espace fonctionnel discret. Cet espace est tel que la solution numérique converge vers la solution théorique du système différentiel à résoudre quand le pas de discrétisation de l'espace fonctionnel tend vers 0. Fort employée dans le domaine de la mécanique, cette méthode permet d'utiliser des polyèdres quelconques avec une contrainte sur la qualité géométrique beaucoup plus souple. Ainsi, pour un maillage composé de tétraèdres, la qualité de la solution dépend du plus grand angle entre les faces triangulaires et entre les arêtes de ces faces. Plus cet angle est petit, meilleure est la convergence [40]. Mais contrairement aux boîtes finies, l'existence d'angles obtus ne fait pas échouer cette méthode. Cette adéquation entre cette approche et nos besoins fait de cette technique numérique la plus appropriée.

2.3.1 Type de maillage

La méthode des éléments finis autorise l'utilisation d'une large variété de polyèdres. Cependant, tout comme pour le code développé pour résoudre des problèmes en 2D, nous n'utilisons que des éléments de type P1 (triangles en 2D, tétraèdres en 3D). Ces éléments présentent en effet de nombreux avantages :

- ils font appel à des fonctions de forme linéaires pour interpoler la valeur des grandeurs physiques dans le volume qu'ils définissent ;
- le temps de calcul pour l'assemblage reste raisonnable en comparaison de celui requis avec des éléments plus sophistiqués ;
- ils conduisent à des systèmes discrets très stables en regard de ceux basés sur des polyèdres plus complexes ;
- ils permettent de discrétiser des structures quelconques ;
- les maillages qu'ils définissent supportent mieux les déformations ;
- l'ajout de nœuds dans le maillage est trivial puisqu'un tétraèdre peut être découpé sans difficulté en deux, trois ou quatre tétraèdres suivant que le point ajouté se trouve sur une de ses arêtes, une de ses faces ou à l'intérieur ;

- le retrait de nœud est également possible dans une certaine mesure (limitation due aux nœuds de Steiner);
- des basculements d'arêtes peuvent être appliqués de façon à améliorer la qualité du maillage.

Ces différents points sont détaillés dans la suite de ce mémoire.

2.4 Bilan

A travers les phénomènes physiques que nous simulons et une modélisation simple pour les aborder, ce chapitre laisse poindre les obstacles à surmonter pour maintenir un maillage adéquat à chaque pas de temps d'une simulation. Ces difficultés, principalement dues à la déformation de certains domaines (suite à la croissance de l'oxyde) constituent le cœur du chapitre suivant.

Chapitre 3

Dégradation du Maillage et Stratégies de Maintien

La simulation se décompose en pas de temps au cours de chacun desquels l'état physique du système discrétisé évolue (les dopants diffusent, les oxydes de champ croissent, les contraintes mécaniques augmentent, ...). Le maillage, qui est adapté à un état donné du système simulé, voit ses qualités varier à chacune de ces évolutions. En général, elles se dégradent car plus le système évolue, moins le maillage est adéquat. Cette perte d'adéquation entre le système discrétisé et son état physique se traduit par une dégradation de la solution numérique. Il est donc nécessaire de maintenir le maillage en accord avec l'état physique de la structure discrétisée. C'est dans ce but que nous allons détailler les dégradations rencontrées et les solutions pour y remédier. Pour cela, il nous faut commencer par fixer des critères de qualité.

3.1 Critères de qualité

Le maillage définit un espace fonctionnel discret dans lequel sont calculées les solutions numériques des équations différentielles. Dans notre cas, il est composé uniquement de simplexes, et les différentes grandeurs physiques sont approximées à l'aide de polynômes continus et linéaires par morceau. En conséquence, deux maillages différents conduisent à des interpolations polynomiales par morceau différentes. Ce constat aboutit à la définition d'un critère de qualité basé sur l'erreur entre la solution numérique idéale (celle qui est accessible avec la méthode de résolution employée) et la solution qu'un maillage définit (celle que cette même méthode peut atteindre avec ce

maillage) : plus cette erreur est petite, meilleure est la qualité. La définition d'un bon maillage implique alors une discrétisation suffisamment fine pour prendre en compte à la fois les variations spatiales des grandeurs physiques à chaque instant τ_i (courbure des domaines, profils de dopage, répartition des contraintes mécaniques, ...) et les variations temporelles de ces grandeurs (évolution des grandeurs physiques entre les instants τ_i et τ_{i+1}). Cet objectif dépend certes de la différence $\Delta\tau = \tau_{i+1} - \tau_i$, mais également de la qualité de la discrétisation. Pour pouvoir définir rationnellement cette qualité, il est nécessaire de mettre en place des critères.

3.1.1 Critères physiques

L'adéquation entre l'état physique du système étudié et sa représentation numérique est une propriété des plus importantes en simulation. Elle est obtenue en disposant un nombre de nœuds suffisant dans le maillage. Pour déterminer si la concentration locale de nœuds est adéquate, il faut définir des critères, qualifiés de physiques car étroitement liés aux grandeurs physiques des phénomènes simulés. Ces critères peuvent être regroupés en deux classes : les critères empiriques et les critères analytiques.

Les **critères empiriques** s'appuient sur des informations physiques telles que la présence d'un fort gradient de concentration dans une zone. Bien que pertinents, ils ne permettent pas d'évaluer quantitativement l'erreur due à la discrétisation. Dans le cas des dopants, ils conduisent à une adaptation empirique du nombre de nœuds pour prendre en compte la variation du profil de concentration et la forte diffusion qu'elle produit [41]. En règle générale, toute variation locale importante d'une grandeur physique implique une densité de nœuds accrue. Cependant, rien ne permet d'affirmer que les nœuds ajoutés sont indispensables, que leur nombre est suffisant, ou encore que la région raffinée couvre la zone affectée par ce gradient. Ce type de critère est donc purement qualitatif.

Au contraire, les **critères analytiques** prennent la forme d'un estimateur d'erreur dont la valeur, calculée à partir de la formulation analytique du phénomène physique simulé, majore l'erreur commise [42, 43]. Toutefois, il reste à donner un sens aux valeurs numériques obtenues car elles ne sont en général pas révélatrices de l'importance de l'écart commis. Pour cela, les estimateurs doivent être calibrés. Néanmoins, cette approche est plus rationnelle que la précédente.

Dans tous les cas, il faut également tenir compte du fait qu'un trop grand nombre de nœuds produit une erreur numérique importante, des temps de calcul prohibitifs et peut saturer l'espace mémoire.

3.1.2 Critères géométriques

Si la qualité de la solution numérique est sensible au nombre de nœuds dans la structure, elle est également influencée par la géométrie du maillage. Ainsi, des propriétés telles que la connectivité nodale ou la forme des éléments influent fortement sur le résultat calculé à l'aide de la méthode des éléments finis. Cette seconde classe de critères découle de ces propriétés.

Qualité d'un simplexe

De nombreuses propriétés peuvent être utilisées pour évaluer la qualité géométrique d'un tétraèdre ou d'un triangle. Bien que le principal critère soit angulaire [40], des critères équivalents peuvent être employés [44]. Nous allons en décrire deux, basés respectivement sur les angles et sur les rayons de sphères.

Contraintes angulaires. L'application de la méthode des éléments finis sur un maillage composé de simplexes nécessite de limiter la valeur du plus grand angle [40]. Cependant, en pratique, on cherche plutôt à maximiser la valeur du plus petit angle. Cela se justifie pleinement puisque la maximisation du plus petit angle entraîne la minimisation du plus grand angle. Ainsi, en 2D on a

$$\sum_{i=1}^3 \theta_i = 2\pi \quad (3.1)$$

avec θ_i le i -ième angle d'un triangle. Si on pose θ_{min} le plus petit de ces angles et θ_{max} le plus grand, on obtient

$$\theta_{max} \leq 2\pi - 2\theta_{min} \quad (3.2)$$

La réciproque est fautive : la minimisation du plus petit angle ne conduit pas à la maximisation du plus grand angle (fig. 3.1).

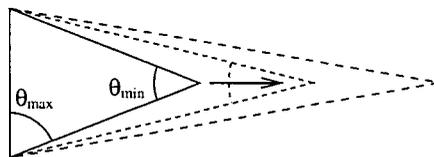


FIG. 3.1 – Convergence vers $\frac{\pi}{2}$ du plus grand angle d'un triangle lorsque le plus petit angle tend vers 0.

De même, la somme des angles solides θ_i d'un tétraèdre vérifie [45] :

$$0 \leq \sum_{i=1}^4 \theta_i \leq 2\pi \quad (3.3)$$

Si on pose θ_{min} et θ_{max} le plus petit et le plus grand de ces angles, on obtient

$$\theta_{max} \leq 2\pi - 3\theta_{min} \quad (3.4)$$

La réciproque est fautive pour la même raison qu'en 2D.

Quotient des rayons de sphères¹. Dans le cas des simplexes, le rapport ρ entre le rayon de la sphère inscrite (r_i) et celui de la sphère circonscrite (r_c) est un des critères les plus répandus (fig. 3.2) :

$$\rho = \frac{r_i}{r_c} \quad (3.5)$$

Ce rapport est normalisé à l'aide d'un coefficient λ qui vaut respectivement 2 en 2D et 3 en 3D :

$$0 \leq \lambda \times \rho \leq 1 \quad (3.6)$$

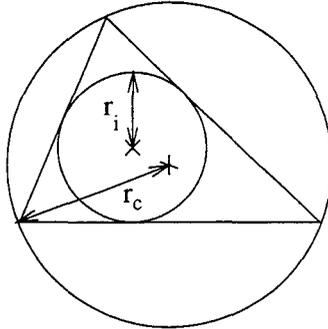


FIG. 3.2 – Sphères inscrite et circonscrite d'un simplexe.

Lorsqu'un simplexe a une forme idéale, c'est à dire qu'il a tous ses angles égaux, $\lambda\rho$ vaut 1. Plus il s'en éloigne, plus la valeur de $\lambda\rho$ devient petite.

1. En 2D, la sphère est réduite à un cercle.

Formes dégénérées de simplexes

Dans un maillage, les éléments ont des formes qui vont du cas idéal, tel que le triangle ou le tétraèdre équilatéral dont la qualité est optimale (fig.3.3), aux cas dégénérés qui sont caractérisés par une qualité voisine de zéro.

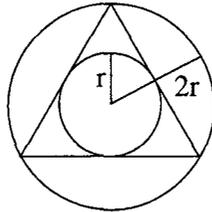


FIG. 3.3 - Triangle équilatéral ($\rho = \frac{1}{2}$ et $\lambda = 2$).

Les **triangles dégénérés** prennent deux formes, toutes deux liées par un quotient surface sur périmètre qui tend vers zéro. Le premier cas correspond au triangle avec le plus petit angle qui tend vers 0 alors que le plus grand angle reste éloigné de π (fig. 3.4a). Il a peu d'incidence sur la qualité de la solution numérique. Au contraire, le second groupe, qui comprend les triangles dont le plus grand angle tend vers π (fig. 3.4b), perturbe la qualité de la solution [40]. Ce type de triangle est donc à éviter.

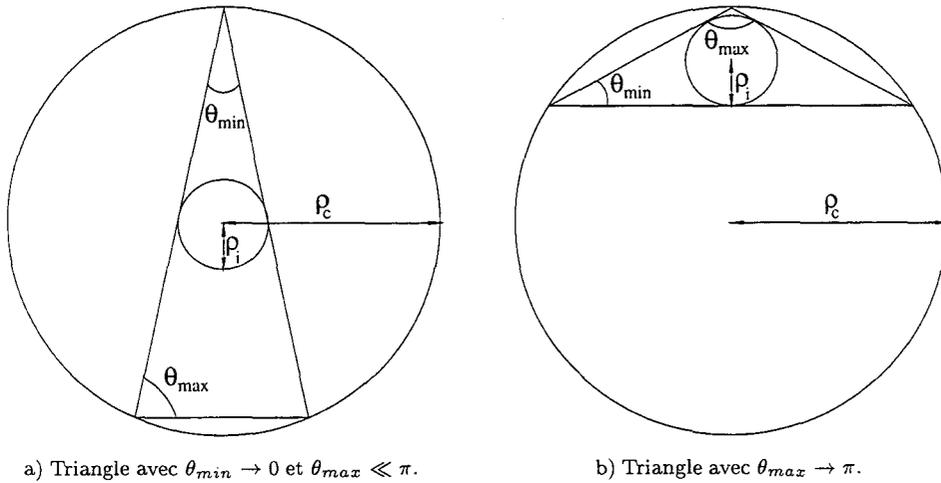


FIG. 3.4 - Triangles dégénérés.

Notons que si le critère angulaire permet de séparer ces deux formes de dégénérescence, le ratio des rayons des cercles inscrits et circonscrits les confond.

La variété de **tétraèdres dégradés** est beaucoup plus riche que celle des triangles. Il existe en effet cinq formes de dégénérescence :

- le premier groupe comprend les tétraèdres dont une seule des arêtes a sa longueur nettement inférieure à celle des autres arêtes (fig. 3.5a) ;
- la seconde forme correspond aux éléments avec deux arêtes opposées dont la longueur est beaucoup plus petite que celle des autres arêtes (fig. 3.5b) ;
- la troisième catégorie regroupe les tétraèdres avec trois arêtes d'une même face dont les longueurs sont à la fois voisines et infiniment petites en comparaison des autres arêtes (fig. 3.5c) ;
- la quatrième famille décrit les tétraèdres dont un des sommets est infiniment proche de la face opposée (fig. 3.5d) ;
- enfin, le cinquième ensemble comprend les éléments dont les quatre sommets sont presque sur un même cercle (fig. 3.5e).

Notons que, comme pour le cas des triangles, le quotient du rayon de la sphère inscrite par le rayon de la sphère circonscrite tend vers zéro pour tous ces tétraèdres alors que seuls les éléments avec une face dont l'angle est proche de π ou avec deux faces définissant un secteur angulaire voisin de π perturbent la résolution numérique à l'aide des éléments finis [40].

Connectivité nodale.

La dernière propriété géométrique qui influe sur la résolution numérique des équations différentielles par la méthode des éléments finis est le nombre d'arêtes en chaque nœud du maillage. En effet, la connectivité nodale fixe la largeur de bande des matrices creuses utilisées pour résoudre les systèmes linéaires. Plus cette connectivité est importante, plus la largeur de bande est grande. Ceci se traduit par un accroissement de l'espace mémoire requis pour stocker ces matrices, du temps CPU consommé par les solveurs linéaires et de l'erreur numérique. En pratique, ce critère intervient principalement dans la réduction de l'espace mémoire et du temps CPU requis par la simulation (certaines configurations peuvent rapidement saturer une station SUN sparc ultra II dotée de 1024 méga-octets de mémoire vive ou nécessiter plusieurs dizaines d'heures de calcul).

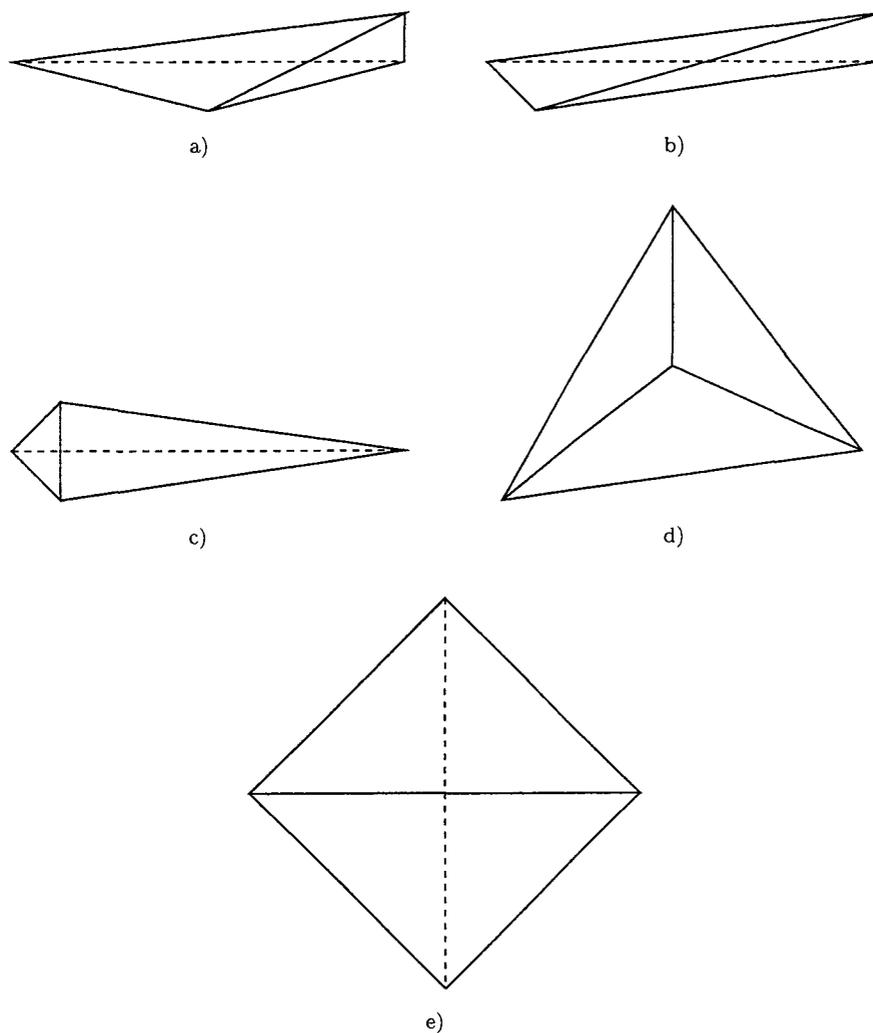


FIG. 3.5 - *Formes de tétraèdres dégénérés.*

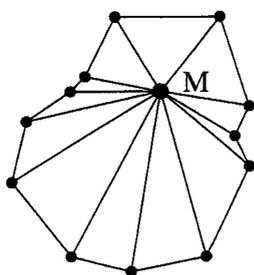


FIG. 3.6 - *Nœud M avec une connectivité égale à 12.*

3.2 Déplacement de domaines et dégradations

Les déformations mécaniques qui accompagnent la réaction d'oxydation à l'interface Si/SiO_2 se répercutent sur le maillage du système étudié (fig. 3.7). Nous allons à présent détailler les différentes dégradations géométriques que subit un maillage en nous appuyant sur le cas particulier de la croissance du dioxyde de silicium dans une structure d'isolation de type LOCOS ou un LOCOS enterré (figures 2.6, 2.8 et 2.10 pages 14, 16 et 17).

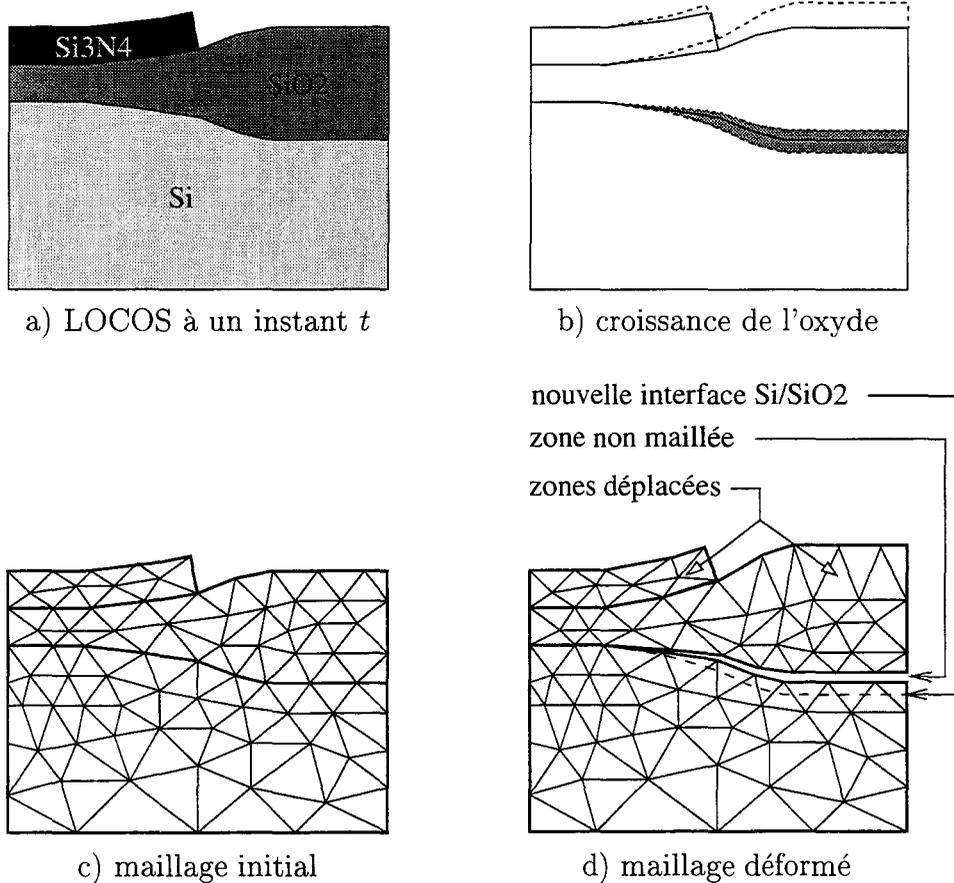


FIG. 3.7 - Croissance d'un LOCOS pendant un pas de temps et déformation du maillage.

Apparition de régions non maillées

La première des détériorations que subit le maillage lors d'un pas de temps d'oxydation prend la forme d'une zone creuse, non maillée. En effet, la couche d'oxyde créée pendant un pas de temps pousse l'oxyde initial vers le haut et laisse apparaître une zone mince sans élément fini, ce qui équivaut à l'absence d'information physique dans cette partie de la structure (fig. 3.7d). Ces zones creuses doivent impérativement être traitées.

Dégénérescence des tétraèdres et des triangles

L'application d'un champ de déplacement aux nœuds du maillage modifie la forme des polyèdres², donc leur qualité géométrique. Ainsi, un tétraèdre peut s'aplatir et avoir un des ses angles qui devient trop important. De même, la qualité des triangles qui définissent des interfaces déplacées peut se dégrader. Comme les éléments de mauvaise qualité détériorent la solution numérique et perturbent la méthode de résolution, ils doivent être corrigés.

Retournement d'éléments et volumes négatifs

La consommation du silicium pendant la réaction d'oxydation déplace l'interface Si/SiO_2 . Ce déplacement, qui se répercute sur les nœuds de cette frontière, peut provoquer le retournement d'éléments qui contiennent ces sommets, les nœuds du substrat ne se déplaçant pas (fig. 3.8).

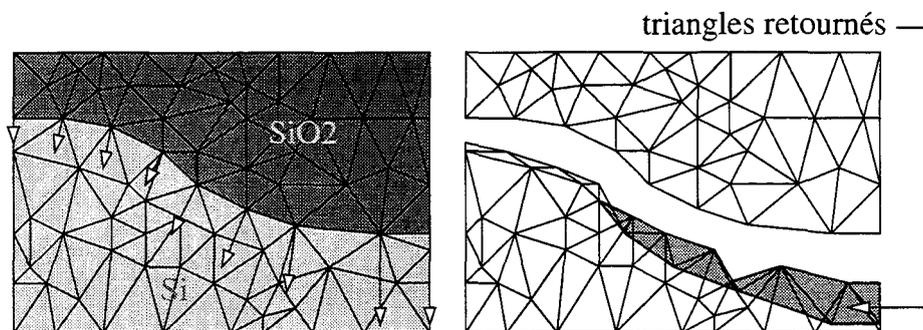


FIG. 3.8 - Déplacement de l'interface Si/SiO_2 et retournement d'éléments.

2. polygones pour un maillage 2D

La détection de ces tétraèdres s'appuie sur le calcul de volume. En effet, si les sommets $\{A, B, C, D\}$ d'un tétraèdre définissent un trièdre direct, alors le produit mixte

$$(\vec{AB} \wedge \vec{AC}) \cdot \vec{AD} \quad (3.7)$$

qui est proportionnel au volume du tétraèdre, est positif. Lorsque $\{A, B, C, D\}$ se retourne, le signe du produit mixte change. Par convention, les éléments d'un maillage sont généralement définis positifs et la recherche d'éléments retournés se ramène à la détection de volumes négatifs.

Notons que si ce troisième type de détérioration n'est en fait qu'une forme plus sévère d'aplatissement de tétraèdres ou de triangles, la structure étudiée atteint un état non physique: la simulation ne peut être poursuivie sans correction du maillage.

Génération de boucles

Les boucles constituent une dégradation similaire à celle soulevée par le déplacement de l'interface Si/SiO_2 : des nœuds-interfaces se déplacent et génèrent des boucles dans les surfaces qui définissent les frontières des domaines (fig. 3.9). Le maillage des enveloppes, bien que topologiquement correct, devient alors métriquement incorrect.

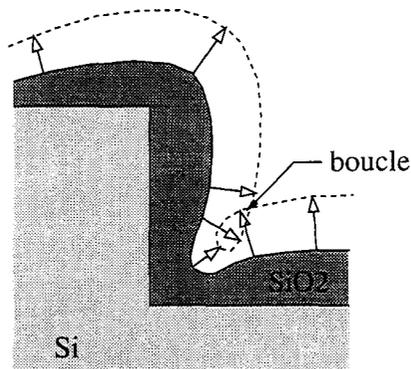


FIG. 3.9 – Génération de boucle lors d'une étape d'oxydation pour créer un LOCOS enterré.

Notons que la présence d'une boucle implique également le retournement de tétraèdres, donc l'apparition de volumes négatifs. Il est donc indispensable d'éliminer ces boucles ou d'empêcher leur formation.

Recouvrement de domaines

Le déplacement de la frontière supérieure d'une couche d'oxyde génère une courbure de la surface à proximité des masques de nitrure. La méthode utilisée ne permettant pas de détecter l'entrée en contact des surfaces d'oxyde et de nitrure, ces domaines peuvent se superposer localement (fig. 3.10). Toutefois, cette détérioration n'a pas le caractère critique des retournements d'éléments car elle ne rend pas impraticable la méthode des éléments finis.

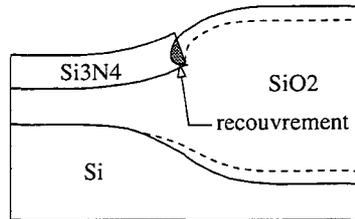


FIG. 3.10 – *Recouvrement partiel du masque de nitrure par le champ d'oxyde pendant la croissance d'un LOCOS.*

Concentration nodale inadaptée

Pour conclure ce portrait des dégradations, l'évolution de l'état physique du système étudié implique l'ajout ou le retrait de nœuds dans certaines régions. Par exemple, un phénomène migratoire tel que la diffusion requiert l'adaptation de la concentration nodale au cours de la simulation afin de suivre le front de diffusion. D'autre part, le champ de déplacement appliqué à certains domaines peut étaler une zone dense, neutralisant le raffinement réalisé lors d'un pas de temps antérieur. Il est, par conséquent, souhaitable de recalculer la répartition des nœuds afin qu'elle réponde mieux aux exigences de la simulation numérique.

3.2.1 Bilan

L'ensemble des détériorations que subit le maillage au cours des recuits thermiques témoigne de la difficulté de simuler les étapes du procédé de fabrication d'un composant semi-conducteur et conforte le constat fait par Marcus Orłowski [19]. Les formes de dégradations les plus sévères sont sans nul doute les boucles et les recouvrements de domaines car elles sont les plus difficiles à détecter et à corriger. Toutefois, il existe un certain nombre d'approches pour parer ces difficultés. Nous allons à présent les décrire et peser leurs avantages et inconvénients.

3.3 Mise à jour par déformation

L'une des approches les plus simples pour faire face à l'apparition de zones creuses non-maillées consiste à dilater les régions en expansion et contracter celles qui sont consommées. Cette technique a été employée avec succès pour étudier la chambre à combustion d'un moteur [46] (fig. 3.11).

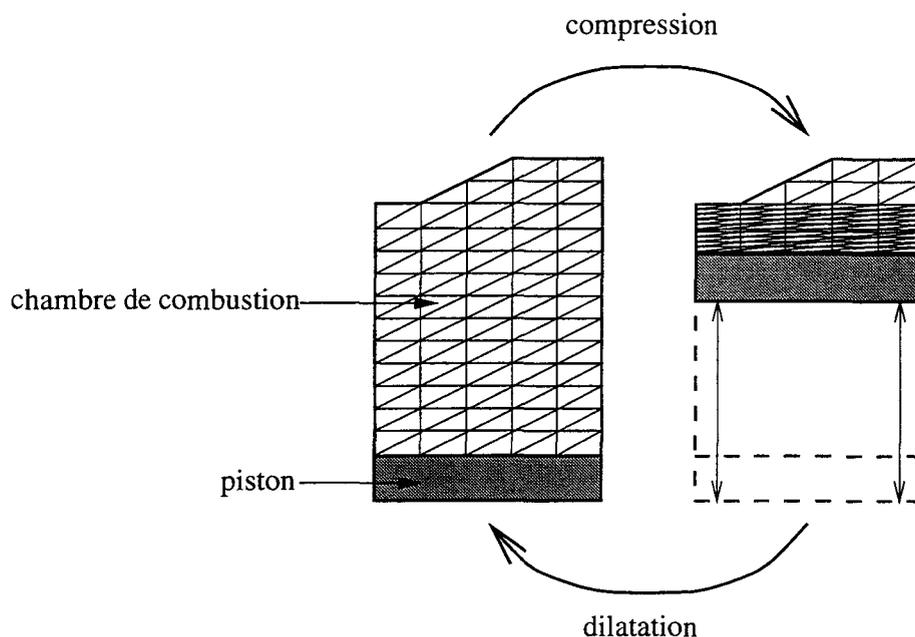


FIG. 3.11 – Déformation du maillage d'une chambre à combustion en fonction de la position du piston d'un moteur.

3.3.1 Application à la croissance d'un LOCOS

L'application de cette méthode à la croissance d'un LOCOS se fait en trois étapes. Tout d'abord, les nœuds du maillage sont déplacés conformément au champ de vecteurs-déplacements issu du calcul des déformations. Puis, une seconde structure est déformée en se basant sur la dilatation de l'oxyde et la contraction du silicium (fig. 3.12c : seuls les nœuds situés sur les frontières ont été déplacés). Enfin, les nœuds de la seconde structure qui subissent un déplacement artificiel sont interpolés à l'aide du premier maillage. La figure 3.12c montre des nœuds situés à l'intérieur de l'oxyde qui sont restés immobiles : ils ont donc subi un déplacement artificiel nul et n'ont pas pris la position imposée par la croissance de l'oxyde. De cette façon, l'apparition de zones creuses est évitée.

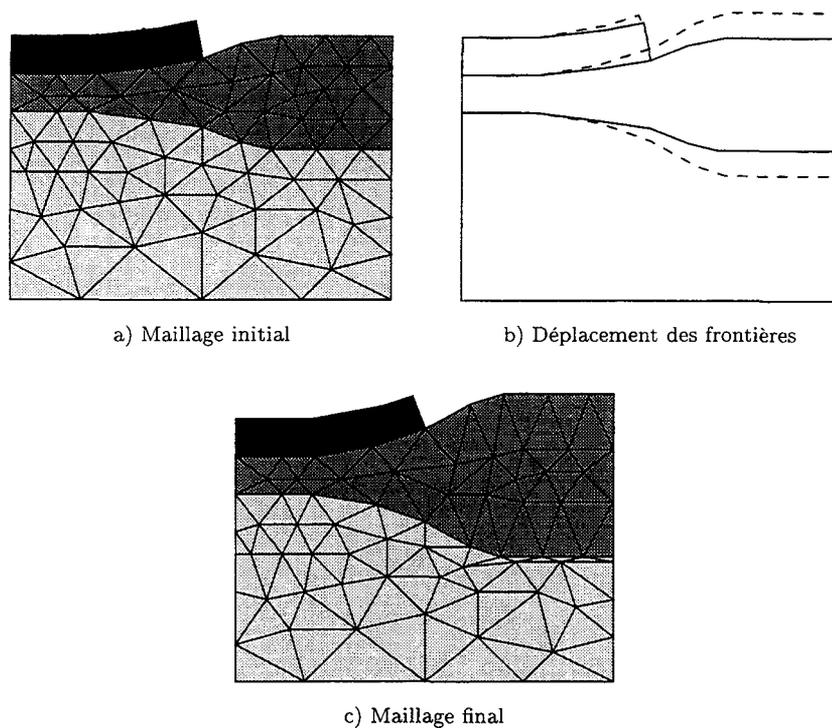


FIG. 3.12 – *Mise à jour du maillage par dilatation et contraction de domaines.*

3.3.2 Limitations

Si cette méthode évite aisément l'absence de maillage dans certaines zones, son utilisation suppose la connaissance des déformations a priori. En effet, empêcher le retournement d'éléments et la génération de volumes négatifs dans le maillage nécessite de répartir les nœuds dans le domaine déformé. Dans le cas de la chambre à combustion, le déplacement du cylindre est parfaitement défini a priori. Il est donc possible de répartir les nœuds de la chambre de façon optimale à chaque étape de la translation. En simulation de procédés de fabrication de composants en silicium, cette technique est plus difficile à mettre en œuvre car les structures générales subissent des déformations complexes dont le résultat n'est connu qu'a posteriori. De plus, le maillage utilisé nécessite une intervention humaine forte car il s'appuie sur une construction en couches permettant des contractions et des dilatations dans les directions associées aux déformations. Enfin, rien ne permet d'éviter la formation de boucles, le recouvrement de domaines et la dégradation de la qualité des tétraèdres et des faces triangulaires. Néanmoins, cette technique donne de bons résultats sur des structures rudimentaires telles que certains LOCOS [47] (fig. 3.13 et 3.14).

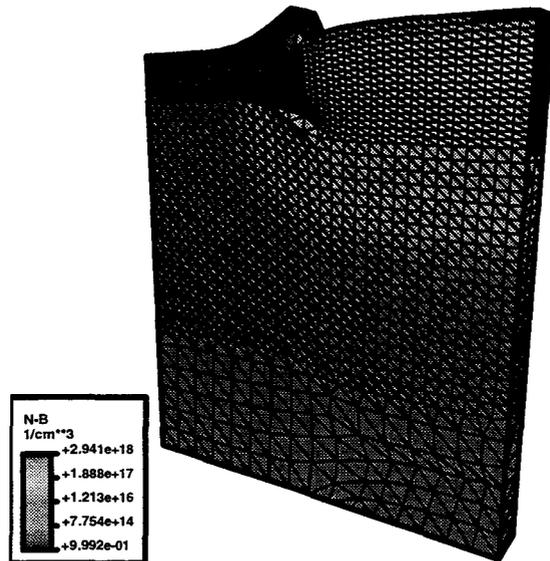


FIG. 3.13 –LOCOS pseudo 2D obtenu par déformation du maillage lors des étapes d'oxydation (5950 nœuds, 26315 tétraèdres).

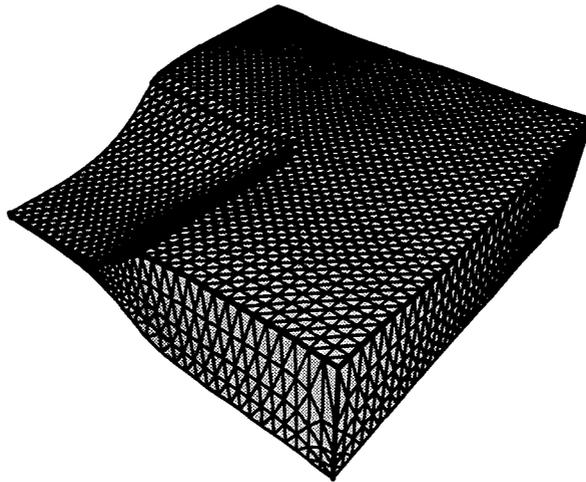


FIG. 3.14 –Détail d'un oxyde de champ tridimensionnel obtenu par déformation du maillage lors des étapes d'oxydation. Cette structure contient 16484 nœuds et 86091 tétraèdres, dont 24576 dans l'oxyde.

3.4 Amélioration de la qualité par lissage

Certains inconvénients de la méthode précédente, i.e. la dégradation de la qualité des tétraèdres et des faces triangulaires, peuvent être réduits grâce à l'utilisation d'une méthode éprouvée en génération de maillage : le lissage. Cette technique consiste à déplacer les nœuds d'un maillage \mathcal{M} sans modifier leur connectivité. Posons N_k , un nœud de \mathcal{M} , E_k l'ensemble des éléments tétraédriques qui contiennent N_k , F_k l'ensemble des faces triangulaires qui contiennent N_k , f_i et \vec{n}_i la i -ième face de F_k et son vecteur normal unitaire tourné vers l'extérieur du domaine, et détaillons ce processus pour les nœuds internes (hors frontières) et les nœuds-interfaces.

3.4.1 Lissage des nœuds internes

N_k est interne s'il est situé dans une région ($F_k = \emptyset$). La nouvelle position de N_k peut être obtenue en calculant le barycentre des nœuds voisins (liés à N_k par une arête) ou par bougé optimal [48, 49]. Si la qualité des éléments de E_k s'est améliorée alors N_k conserve sa nouvelle position, sinon il reprend sa position antérieure. Ce traitement est réitéré sur les nœuds internes tant que la qualité de \mathcal{M} croît.

3.4.2 Lissage des nœuds-interfaces

Pour les nœuds-interfaces (situés sur la frontière des domaines) il nous faut prendre en compte la courbure des interfaces. Cette contrainte conduit à plusieurs approches possibles.

Lissage de surfaces planes

La technique la plus simple consiste à déplacer N_k si et seulement si toutes les faces de F_k sont coplanaires. Dans ce cas, on utilise le barycentre des nœuds-interfaces voisins de N_k ou le bougé optimal par rapport à ces nœuds (comme pour les nœuds internes). Cependant, cette approche a pour principal inconvénient de ne jamais déplacer les nœuds situés sur la frontière des surfaces planes, ce qui limite fortement la qualité théoriquement accessible par lissage (fig. 3.15).

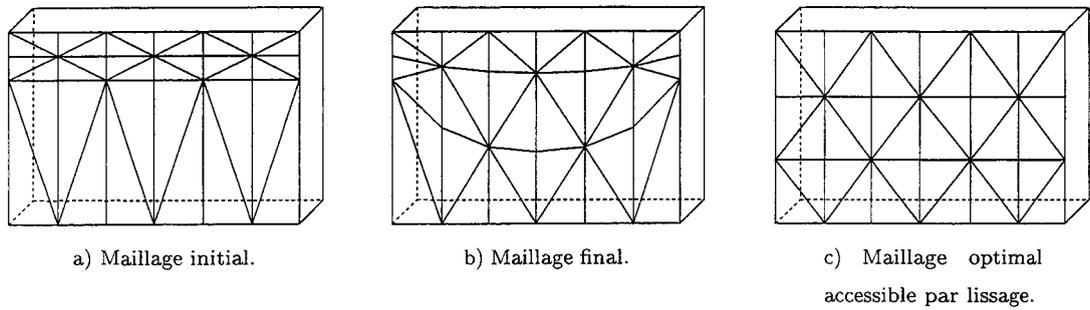


FIG. 3.15 – *Lissage de nœuds-interfaces limité aux faces coplanaires.*

Lissage en fonction des degrés de liberté

La restriction imposée par la contrainte de planéité d'une surface peut être évitée en calculant les degrés de liberté de N_k . Pour cela, il faut définir les sous-ensembles de faces coplanaires de F_k , vérifier que la frontière commune à ces morceaux d'interface est limitée à deux arêtes, $[N_k N_i]$ et $[N_k N_j]$, et que N_i , N_j et N_k sont alignés. Si c'est le cas, N_k peut être déplacé le long de $[N_i, N_j]$ (fig. 3.16).

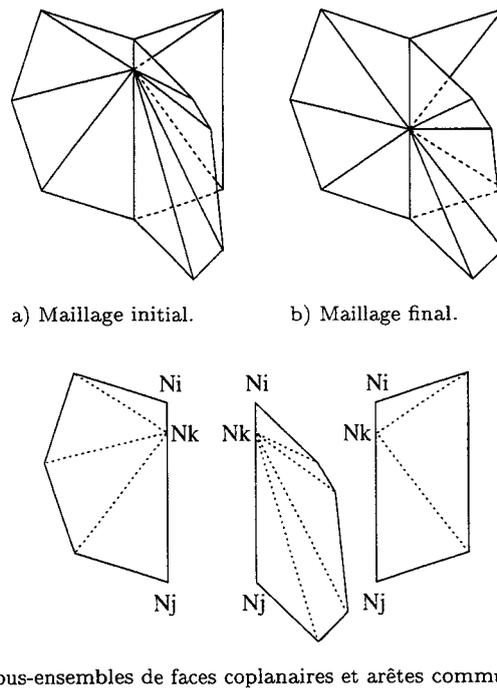


FIG. 3.16 – *Lissage d'un nœud-interface situé sur des faces non coplanaires.*

Notons que s'il n'y a qu'un sous-ensemble, on retrouve le cas précédent.

Lissage avec tolérance à la coplanarité

Enfin, dans le cas le plus général, il arrive que des surfaces coplanaires deviennent non coplanaires. Par exemple, si un nœud est ajouté au milieu d'un segment, il peut être légèrement décalé suite aux erreurs d'arrondis dues à l'arithmétique de l'ordinateur, en coordonnées entières comme en coordonnées flottantes (fig. 3.17).

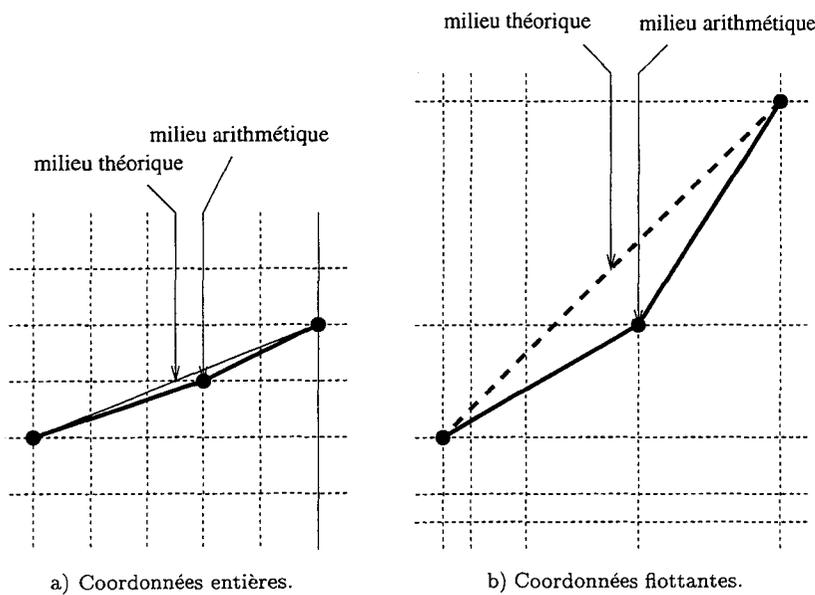


FIG. 3.17 - Erreur de coplanarité due à l'arithmétique de l'ordinateur.

Pour palier ce type de problème, il est possible de définir l'alignement de trois points à un angle α près (fig. 3.18).

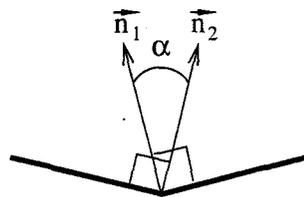


FIG. 3.18 - Points alignés à un angle α près.

De même, deux faces peuvent être jugées coplanaires à un angle α près, propriété que nous dénommons α -coplanarité. La courbure des surfaces et des lignes est alors légèrement modifiée par le lissage. Cependant, si l'erreur commise demeure faible, cette technique permet d'améliorer significativement la qualité du maillage de surfaces complexes. Nous allons présenter les approches que nous avons étudiées et analyser leur influence sur le résultat.

Comparaison angulaire entre faces voisines. Une première possibilité consiste à comparer les angles entre les faces voisines de F_k (fig. 3.19.a). Cette solution nécessite peu de comparaisons angulaires ($\text{card}(F_k)$) mais elle peut fortement modifier la courbure locale (fig. 3.19.b).

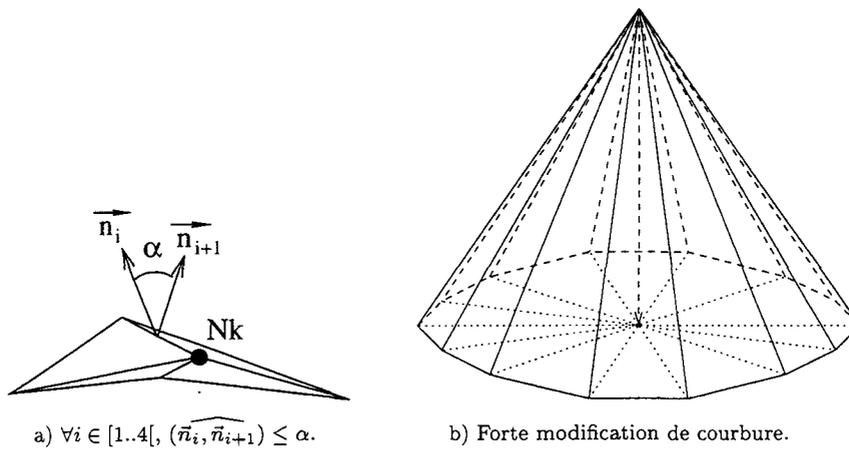


FIG. 3.19 - *Comparaison angulaire entre faces voisines.*

Comparaison angulaire entre toutes les faces. La comparaison des angles entre toutes les faces de F_k neutralise le problème de forte modification de courbure provoqué par la méthode précédente (fig. 3.20). Toutefois, cette approche est plus consommatrice en temps CPU puisqu'elle fait intervenir $\text{card}(F_k) \times (\text{card}(F_k) - 1)$ comparaisons angulaires.

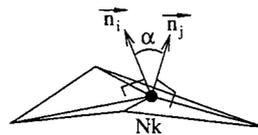


FIG. 3.20 - *Comparaison angulaire entre toutes les faces: $\forall i, j \in [1..4], (\widehat{\vec{n}_i, \vec{n}_j}) \leq \alpha.$*

Comparaison angulaire avec une face de référence. Pour résoudre ce compromis temps/précision, on peut prendre une des faces de F_k comme référence et comparer les angles qu'elle fait avec les autres faces, ce qui ramène la complexité de ce calcul en $\mathcal{O}^{card(F_k)}$. Cependant, cette technique a un inconvénient majeur : le résultat de la comparaison dépend de la face utilisée comme référence. En effet, si nous posons \vec{n}_1 , \vec{n}_2 et \vec{n}_3 les trois vecteurs normaux aux faces f_1 , f_2 et f_3 de F_k et que ces vecteurs vérifient :

$$\widehat{(\vec{n}_1, \vec{n}_2)} = \alpha \quad (3.8)$$

$$\widehat{(\vec{n}_1, \vec{n}_3)} = \alpha \quad (3.9)$$

$$\widehat{(\vec{n}_2, \vec{n}_3)} = 2 \times \alpha \quad (3.10)$$

alors f_2 et f_3 sont α -coplanaires à f_1 bien qu'elles ne le soient pas entre elles. Le choix de f_1 comme face de référence conduit donc à un lissage de N_k , contrairement à celui de f_2 ou de f_3 .

Construction d'un vecteur référence. Le comportement aléatoire de la solution précédente peut être neutralisé en prenant comme référence la moyenne arithmétique des vecteurs unitaires normaux aux faces de F_k :

$$\vec{n} = \sum_{i=1}^{card(F_k)} \frac{\vec{n}_i}{card(F_k)} \quad (3.11)$$

et en comparant les angles $\widehat{(\vec{n}, \vec{n}_i)}$ avec α (fig. 3.21).

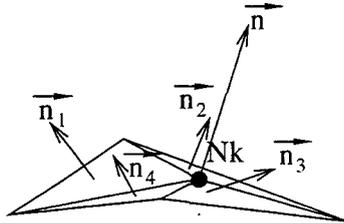


FIG. 3.21 – Comparaison angulaire avec le vecteur de référence \vec{n} .

Si le résultat est déterministe et la complexité maintenue en $\mathcal{O}^{card(F_k)}$, cette méthode a le défaut d'être sensible à la discrétisation d'une surface courbe. En effet, prenons le cas où F_k est divisible en deux sous-ensembles de faces strictement coplanaires, notés $F_{k,1}$ et $F_{k,2}$. Posons $\vec{n}_{k,1}$ et $\vec{n}_{k,2}$ les vecteurs-sommes respectifs des \vec{n}_i associés aux faces de $F_{k,1}$ et $F_{k,2}$. Par suite, nous avons

$$card(F_k) \times \vec{n} = \sum_{i=1}^{card(F_k)} \vec{n}_i = \vec{n}_{k,1} + \vec{n}_{k,2} \quad (3.12)$$

Posons $\gamma = \widehat{(\vec{n}_{k,1}, \vec{n}_{k,2})}$ et $\alpha = \frac{\gamma}{2}$.

Si $\text{card}(F_{k,1}) = \text{card}(F_{k,2})$, alors $\widehat{(\vec{n}, \vec{n}_{k,1})} = \widehat{(\vec{n}, \vec{n}_{k,2})} = \alpha$: les faces de F_k sont α -coplanaires (fig. 3.22.a). Par contre, si $\text{card}(F_{k,1}) > \text{card}(F_{k,2})$, alors $\widehat{(\vec{n}, \vec{n}_{k,1})} < \alpha$ et $\widehat{(\vec{n}, \vec{n}_{k,2})} > \alpha$: les faces de F_k ne sont plus α -coplanaires (fig. 3.22.b). Bien qu'il s'agisse de la même surface, les résultats diffèrent.

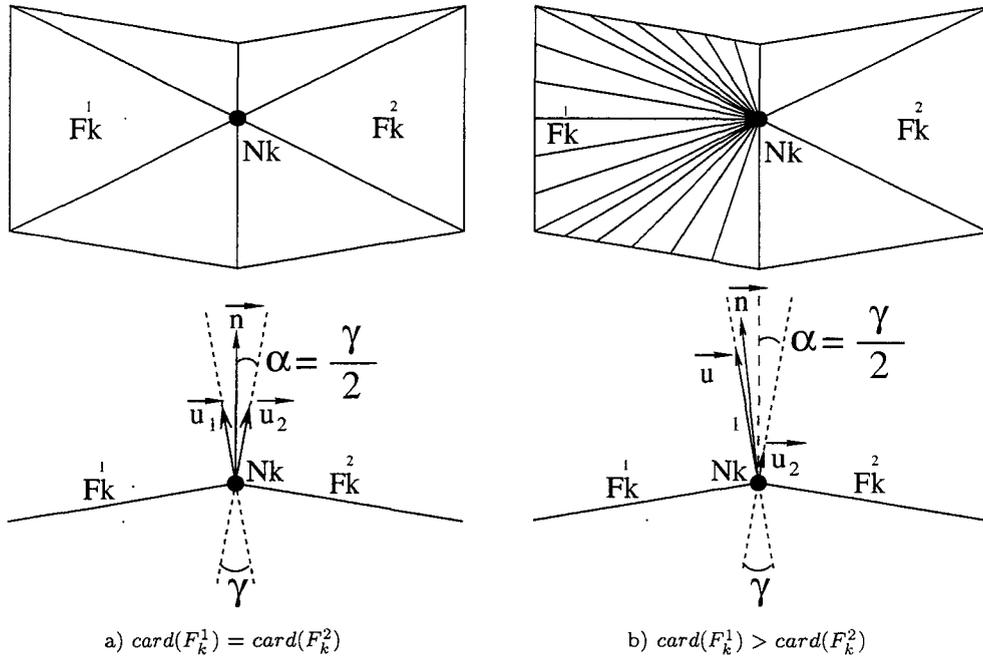


FIG. 3.22 – Influence de la discrétisation sur l' α -coplanarité.

Malgré ce handicap, nous avons privilégié cette approche pour sa faible complexité et son déterminisme. De plus, nous estimons que la différence de comportement liée à la discrétisation a très peu d'influence sur les structures que nous simulons car ces situations sont peu fréquentes et leurs conséquences négligeables. En pratique, $\alpha = 5^\circ$ (fig. 3.23).

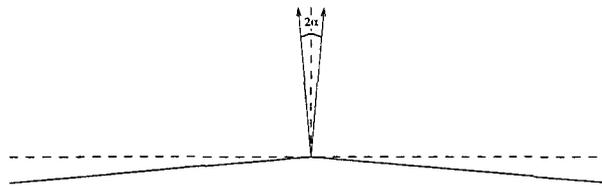


FIG. 3.23 – Limite de la courbure admissible pour $\alpha = 5^\circ$.

3.5 Interpolation

Le lissage effectué, il faut mettre à jour l'état physique des nœuds déplacés en les interpolant polynomialement à l'aide du maillage avant lissage (cela impose de dupliquer la structure : éléments, faces, arêtes et nœuds). Simple d'apparence, cette technique requiert certaines précautions au moment de son implantation sur machine. En effet, si dans \mathbb{R}^2 ou \mathbb{R}^3 le déplacement d'un nœud est précis, sans erreur d'aucune sorte, son codage produit très vite des configurations incorrectes. La description algorithmique de l'interpolation, dans le cas des nœuds-interfaces puis celui des nœuds internes, soulève les différentes difficultés rencontrées.

3.5.1 Interpolation surfacique dans \mathbb{R}^n

Considérons une interpolation après lissage dans un espace continu et observons les modifications introduites par l'utilisation d'espaces discrets.

Interpolation le long d'une arête

Prenons le cas d'une interface (A, B) de \mathbb{R}^2 sur laquelle se déplacent trois nœuds N_1, N_2 et N_3 . Initialement situés en M_1, M_2 et M_3 , ils prennent les positions P_1, P_2 et P_3 après lissage (fig. 3.24). L'état du système en ces

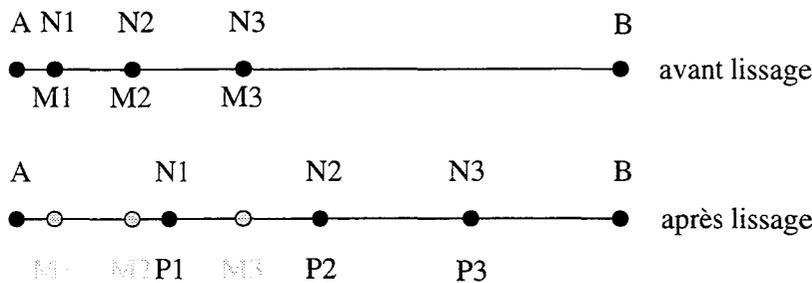


FIG. 3.24 - Lissage barycentrique le long d'un segment $[A, B]$.

nouvelles positions est fourni par l'interpolation des différentes grandeurs physiques à l'aide de la structure avant lissage. Soit ϕ une de ces grandeurs. Sa valeur en N_1 vérifie :

$$\phi(N_1) = \frac{|P_1M_2| \times \phi(M_3) + |P_1M_3| \times \phi(M_2)}{|M_2M_3|}. \quad (3.13)$$

Il reste à trouver la face qui contient P_1 . Cette recherche s'appuie sur la fonction $\text{voisin}(AB, A)$, qui retourne C si $[A, B]$ et $[B, C]$ sont deux arêtes voisines, et sur la propriété vectorielle suivante :

Propriété 3.1. *Un point P , colinéaire à deux points P_1 et P_2 , se trouve sur $[P_1, P_2]$ si et seulement si*

$$\forall i, j \in \{1, 2\}, \overrightarrow{P_i P_j} \cdot \overrightarrow{P_i P} \geq 0 \quad (3.14)$$

Si $(\overrightarrow{P_i P_j} \cdot \overrightarrow{P_i P}) < 0$, alors P appartient à la demi-droite définie par :

$$\{M \in \mathbb{R}^2, \overrightarrow{P_i M} = k \times \overrightarrow{P_j P_i} \text{ et } k \in \mathbb{R}^+\} \quad (3.15)$$

Il suffit alors de prendre une des faces contenant M_1 et de parcourir successivement les faces voisines jusqu'à atteindre celle qui contient P_1 :

```

R1 ← A
R2 ← M1
FLAG ← VRAI
TQ (FLAG) FAIRE
  c ←  $\overrightarrow{R_1 R_2} \cdot \overrightarrow{R_1 P_1}$ 
  SI (c < 0) ALORS
    R2 ← voisin(R1 R2, R2)
  SINON
    c ←  $\overrightarrow{R_2 R_1} \cdot \overrightarrow{R_2 P_1}$ 
    SI (c < 0) ALORS
      R1 ← voisin(R1 R2, R1)
    SINON
      FLAG ← FAUX
  FIN_SI
FIN_SI
FIN_TQ

```

Cet algorithme converge systématiquement car A et B sont immobiles, et les nœuds N_i restent sur le segment $[A, B]$,

Interpolation sur une interface

Dans le cas d'une interface plane de \mathbb{R}^3 discrétisée à l'aide de triangles (fig. 3.25), la formule d'interpolation d'une grandeur ϕ devient :

$$\phi(N_1) = \frac{S_{P_1 M_3 M_4} \times \phi(M_2) + S_{P_1 M_2 M_4} \times \phi(M_3) + S_{P_1 M_2 M_3} \times \phi(M_4)}{S_{M_2 M_3 M_4}} \quad (3.16)$$

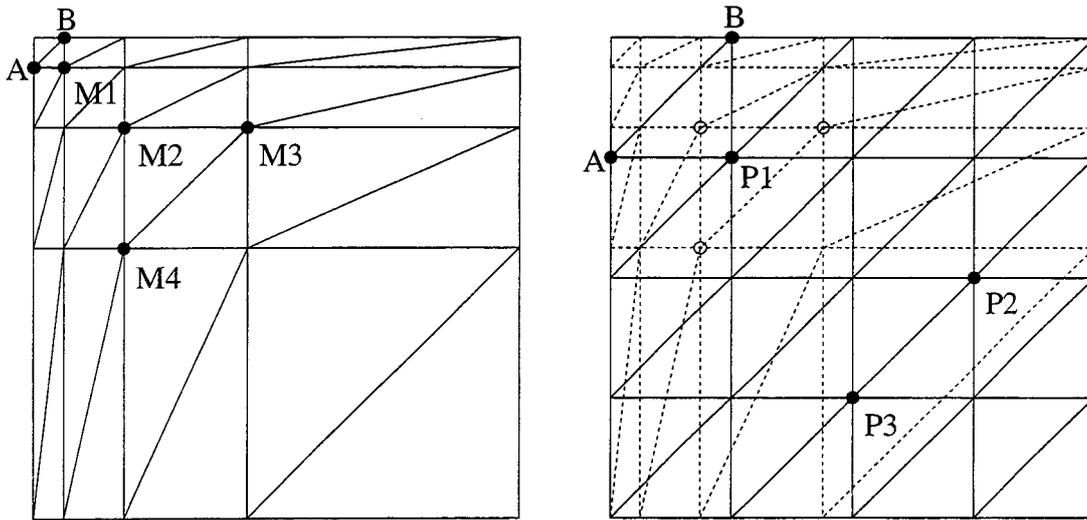


FIG. 3.25 – Lissage barycentrique d'une surface.

où N_1 représente le nœud déplacé de la position M_1 à P_1 , et S_{ABC} correspond à la surface d'un triangle A, B, C . La recherche de la face contenant P_1 est basée sur la fonction $\text{voisin}(ABC, A)$, qui retourne le nœud D si (A, B, C) et (B, C, D) sont deux faces voisines, et sur la propriété suivante :

Propriété 3.2. *Un point P , coplanaire à trois points P_1, P_2 et P_3 , se trouve à l'intérieur du triangle défini par ces points si et seulement si :*

$$\forall i, j, k \in [1..3], \text{ avec } i \neq j, i \neq k, j \neq k, \\ (\overrightarrow{P_i P_j} \wedge \overrightarrow{P_i P_k}) \cdot (\overrightarrow{P_i P_j} \wedge \overrightarrow{P_i P}) \geq 0 \quad (3.17)$$

Si le triangle $\{P_1, P_2, P_3\}$ admet une unique arête séparatrice $[P_1, P_3]$ par rapport à un point Q_1 , alors on a :

$$(\overrightarrow{P_1 P_3} \wedge \overrightarrow{P_1 P_2}) \cdot (\overrightarrow{P_1 P_3} \wedge \overrightarrow{P_1 Q_1}) < 0 \quad (3.18)$$

$$(\overrightarrow{P_2 P_3} \wedge \overrightarrow{P_2 P_1}) \cdot (\overrightarrow{P_2 P_3} \wedge \overrightarrow{P_2 Q_1}) \geq 0 \quad (3.19)$$

$$(\overrightarrow{P_3 P_1} \wedge \overrightarrow{P_3 P_2}) \cdot (\overrightarrow{P_3 P_1} \wedge \overrightarrow{P_3 Q_1}) \geq 0 \quad (3.20)$$

Si le triangle $\{P_1, P_2, P_3\}$ admet deux arêtes séparatrices $[P_1, P_2]$ et $[P_1, P_3]$ par rapport à un point Q_2 , alors on a :

$$(\overrightarrow{P_1 P_2} \wedge \overrightarrow{P_1 P_3}) \cdot (\overrightarrow{P_1 P_2} \wedge \overrightarrow{P_1 Q_2}) < 0 \quad (3.21)$$

$$(\overrightarrow{P_1 P_3} \wedge \overrightarrow{P_1 P_2}) \cdot (\overrightarrow{P_1 P_3} \wedge \overrightarrow{P_1 Q_2}) < 0 \quad (3.22)$$

$$(\overrightarrow{P_3 P_1} \wedge \overrightarrow{P_3 P_2}) \cdot (\overrightarrow{P_3 P_1} \wedge \overrightarrow{P_3 Q_2}) \geq 0 \quad (3.23)$$

L'algorithme proposé pour les arêtes de \mathbb{R}^2 peut être aisément étendu aux faces triangulaires de \mathbb{R}^3 :

```

R1 ← A
R2 ← B
R3 ← M1
FLAG ← VRAI
TQ (FLAG) FAIRE
  i ← alea(3)
  j ← ((i + 1) mod 3) + 1
  k ← ((i + 2) mod 3) + 1
   $\vec{v}_{ij} \leftarrow \overrightarrow{R_i R_j}$ 
   $\vec{v}_{ik} \leftarrow \overrightarrow{R_i R_k}$ 
   $\vec{v} \leftarrow \overrightarrow{R_i P_1}$ 
   $\vec{n}_{ijk} \leftarrow \vec{v}_{ij} \wedge \vec{v}_{ik}$ 
   $\vec{n} \leftarrow \vec{v}_{ij} \wedge \vec{v}$ 
  SI ( $\vec{n}_{ijk} \cdot \vec{n} < 0$ ) ALORS
    Rk ← voisin(RiRjRk,k)
  SINON
     $\vec{n} \leftarrow \vec{v} \wedge \vec{v}_{ik}$ 
    SI ( $\vec{n}_{ijk} \cdot \vec{n} < 0$ ) ALORS
      Rj ← voisin(RiRjRk,j)
    SINON
       $\vec{v}_{jk} \leftarrow \overrightarrow{R_j R_k}$ 
       $\vec{v} \leftarrow \overrightarrow{R_j P_1}$ 
       $\vec{n} \leftarrow \vec{v}_{jk} \wedge \vec{v}$ 
      SI ( $\vec{n}_{ijk} \cdot \vec{n} < 0$ ) ALORS
        Rj ← voisin(RiRjRk,j)
      SINON
        FLAG ← FAUX
      FIN_SI
    FIN_SI
  FIN_TQ

```

La fonction $\text{alea}(n)$, qui retourne une valeur entière aléatoire comprise entre 1 et n , est indispensable si on veut éviter de tourner autour du simplexe qui contient un point sans jamais l'atteindre [50] (fig. 3.26).

3.5.2 Interpolation surfacique dans \mathbb{N}^n

Sur ordinateur, les espaces numériques sont discontinus, qu'il s'agisse de nombres entiers ou flottants. La différence entre ces deux types de nombres est liée à la plage de valeurs admissibles et à leur répartition (régulière pour les entiers et logarithmique pour les flottants). Dans ces espaces, un nœud

lissé le long d'une interface peut quitter la droite ou le plan qui le contenait.

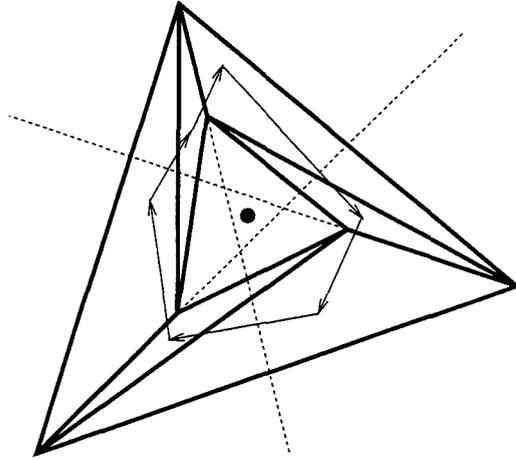


FIG. 3.26 – Configuration cyclique dans laquelle il est possible de parcourir les simplexes de proche en proche en ne passant que par des faces séparatrices sans jamais atteindre l'élément qui contient le nœud N .

Prenons le cas d'un nœud N_1 initialement situé en M_1 et déplacé en P_1 , milieu de $[A, B]$, par lissage barycentrique (fig. 3.27). Comme cette nouvelle position n'a pas de représentant numérique sur l'ordinateur, une erreur ε est commise et N_1 prend la position P_1' . Si on cherche à interpoler N_1 , on s'aperçoit que son image a quitté l'interface: elle n'est ni sur $[M_1A]$, ni sur $[M_1B]$. Les deux algorithmes précédemment exposés sont insensibles à cette situation car la méthode utilisée est suffisamment robuste dans ces cas de figure. La seule précaution à prendre consiste à calculer les coefficients d'interpolation avec plus de rigueur de façon à ce que leur somme vaille 1.

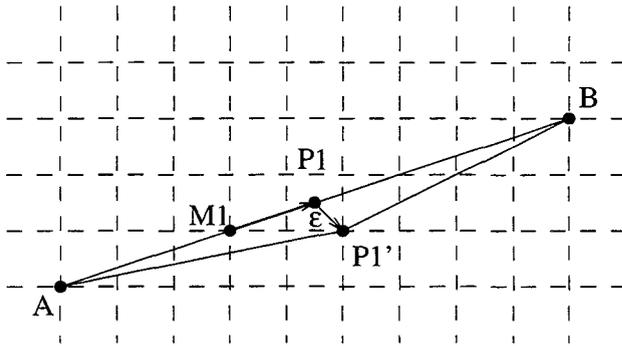


FIG. 3.27 – Déplacement nodale numériquement incorrect.

Les formules d'interpolation 3.13 p. 51 et 3.16 p. 52 s'écrivent alors :

$$\phi(N1) = \frac{|P'_1 M_2| \times \phi(M_3) + |P'_1 M_3| \times \phi(M_2)}{|P'_1 M_2| + |P'_1 M_3|} \quad (3.24)$$

$$\phi(N1) = \frac{S_{P'_1 M_3 M_4} \phi(M_2) + S_{P'_1 M_2 M_4} \phi(M_3) + S_{P'_1 M_2 M_3} \phi(M_4)}{S_{P'_1 M_3 M_4} + S_{P'_1 M_2 M_4} + S_{P'_1 M_2 M_3}} \quad (3.25)$$

3.5.3 α -coplanarité et interpolation par projection

Lors d'un lissage α -coplanaire dans \mathbb{R}^n ou dans \mathbb{N}^n , un nœud N_i n'appartient plus forcément à la face qui sert à son interpolation, et les faces à parcourir pour retrouver la face à utiliser ne sont plus toujours coplanaires. Pour parer à cette difficulté, on peut s'aider de la projection du vecteur déplacement $\overrightarrow{M_i P'_i}$ sur la surface [non plane]. L'interpolation se fait alors avec la face désignée par la projection de l'extrémité de ce vecteur déplacement.

La figure 3.28 donne un exemple 2D où un nœud N_8 lissé en P_8 est projeté orthogonalement sur la droite (M_8, M_9) en un point H_1 qui détermine la face voisine à utiliser (ici, $[M_9, M_{10}]$) grâce à la propriété 3.1. En réitérant ce procédé jusqu'à ce que le projeté orthogonal appartienne à la face du maillage avant lissage, on détermine la valeur d'interpolation en P_8 (ici $\phi(H_3)$).

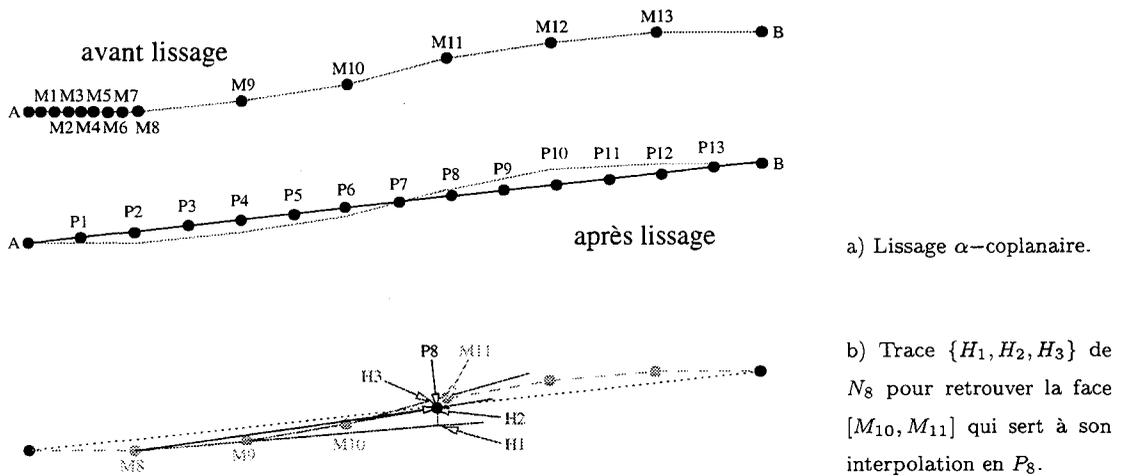


FIG. 3.28 - Trace d'un nœud N_8 lors d'un lissage α -coplanaire en 2D.

La définition de la trace suit le même principe en 3D : il faut calculer les projections orthogonales sur les plans définis par les faces triangulaires et rechercher la face à considérer pour l'interpolation à l'aide de l'algorithme utilisé pour \mathbb{R}^3 .

Cas de non convergence en 2D

En 2D les situations de non convergence prennent deux formes : soit la trace admet plusieurs projetés orthogonaux situés sur les faces de référence (fig. 3.29.b), soit elle n'en admet aucun (fig. 3.29.c). Dans le premier cas, il y a plusieurs solutions possibles, et dans le second, aucune.

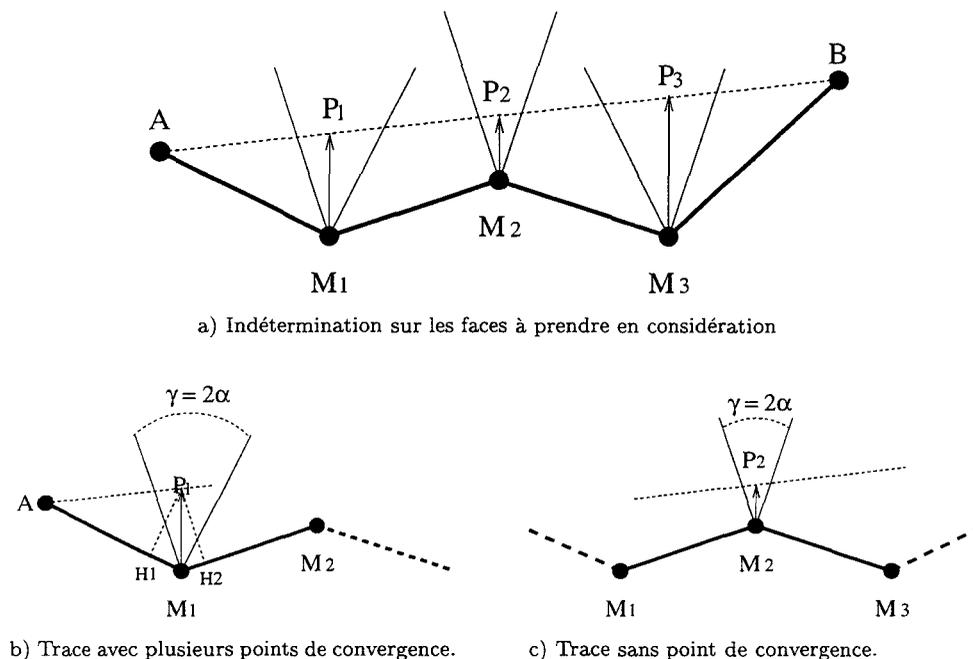


FIG. 3.29 - Trace d'un nœud N_1 lors d'un lissage α -coplanaire en 2D.

Nous avons vu que $\alpha \neq 0$ entraîne la création de secteurs angulaires particuliers en ce sens que les points qui s'y trouvent n'ont pas leur trace qui converge vers un unique point. Pour résoudre ce problème, faisons tendre α vers 0 : on constate que ces secteurs se réduisent à la droite Δ qui passe par A (fig. 3.30). Or, lorsque N appartient à cette droite, on attribue à $\phi(N)$ la valeur $\phi(A)$.

Par extension, admettre que trois points puissent être colinéaires à un angle α près revient à considérer que des droites puissent être parallèles ou perpendiculaires à un angle α près. Il paraît alors naturel d'interpréter ces secteurs angulaires comme des droites α -perpendiculaires aux faces (ou α -parallèles entre elles) et d'attribuer à la grandeur ϕ la valeur $\phi(A)$ pour tout nœud N qui s'y trouve.

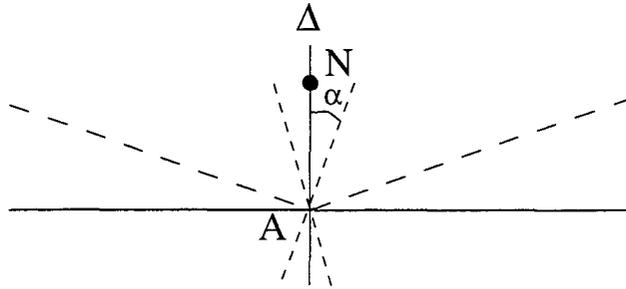


FIG. 3.30 – Secteur angulaire associé à la tolérance angulaire α .

Cas de non convergence en 3D

De même qu'en 2D, les angles entre les faces conduisent à des situations ambiguës.

Ainsi, lorsque deux faces F_1 et F_2 forment un angle diédrique θ inférieur à π , un point N peut avoir deux projetés orthogonaux H_1 et H_2 (fig. 3.31). Si dans cette situation, la recherche du projeté orthogonal de N sur la surface α -coplanaire converge vers une solution, elle converge aléatoirement vers l'une ou l'autre de ces deux solutions distinctes. Toutefois, on remarque que lorsque l'angle θ tend vers π les plans π_1 et π_2 orthogonaux aux faces F_1 et F_2 se confondent et les deux projetés orthogonaux H_1 et H_2 tendent vers H . La notion de plan α -perpendiculaire à une face fait écho à la notion de droite α -perpendiculaire en 2D. Dans cette situation, nous interpolons N avec H et levons l'aléa.

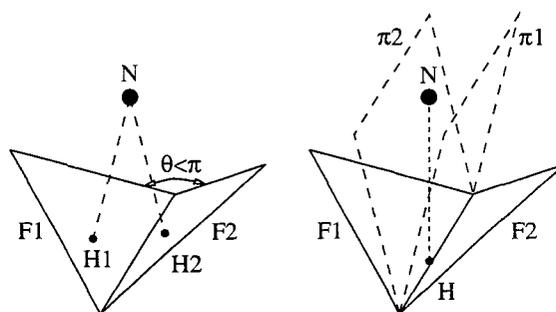


FIG. 3.31 – Exploitation du projeté orthogonal sur l'arête commune à deux faces α -coplanaires dans une configuration avec des projections orthogonales multiples dues au lissage α -coplanaire dans \mathbb{R}^3 . Les plans π_1 et π_2 , perpendiculaires aux faces F_1 et F_2 , sont α -parallèles entre eux.

De façon similaire, lorsque deux faces F_1 et F_2 forment un angle diédrique θ supérieur à π , un point N peut ne pas avoir de projeté orthogonal H sur les faces (fig. 3.32). Cependant, l'algorithme précédent ne converge plus : il bascule indéfiniment d'une face à l'autre sans jamais trouver de projeté orthogonal. Dans cette situation, nous interpolons également N avec H , son projeté orthogonal sur l'arête commune aux faces F_1 et F_2 .

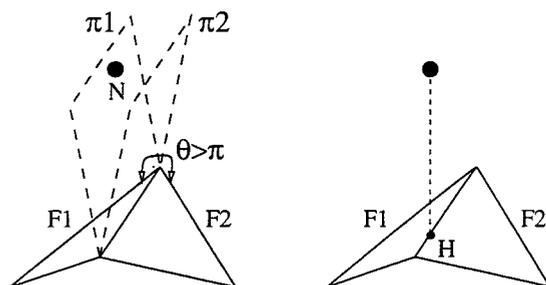


FIG. 3.32 – Absence de projection orthogonale due au lissage α -coplanaire dans \mathbb{R}^3 , et exploitation du projeté orthogonal sur l'arête commune aux faces α -coplanaires.

On peut également rencontrer des situations où il y a plus de deux projetés orthogonaux sur un ensemble de faces F_i qui partagent un sommet commun H (fig. 3.33). Ici encore, l'approche antérieure converge aléatoirement vers une des solutions distinctes. Dans ce cas, nous étendons à \mathbb{R}^3 la notion de droite α -perpendiculaire et utilisons le point commun H comme projeté orthogonal. Notons que le faisceau de droites perpendiculaires aux faces F_i et passant par H définit un angle solide qui tend vers une droite quand toutes les faces deviennent coplanaires, ce qui justifie le choix de la solution unique que nous envisageons.

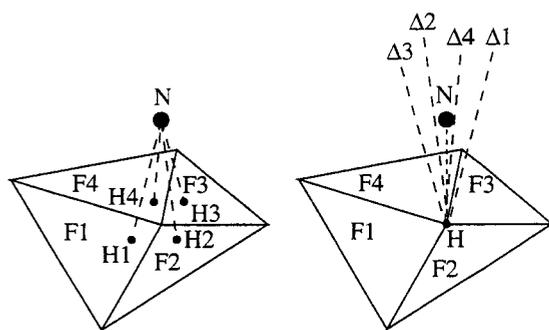


FIG. 3.33 – Exploitation du sommet H commun à plusieurs faces α -coplanaires dans une configuration avec projections orthogonales multiples suite au lissage α -coplanaire de N dans \mathbb{R}^3 .

Comme pour le cas des angles diédriques définis par deux faces, on peut rencontrer des situations où un ensemble de faces ont un point commun H tel que les arêtes des faces qui contiennent H séparent le sommet N , alors que les arêtes qui ne contiennent pas H ne le séparent pas (fig. 3.34). Dans une telle configuration, l'algorithme initialement décrit parcourt indéfiniment cet ensemble de faces sans jamais converger vers une solution. Une fois encore, la méthode que nous préconisons consiste à interpoler le nœud N avec les valeurs physiques définies en H . On retrouve le faisceau de droites α -perpendiculaires rencontré dans le cas ci-avant.

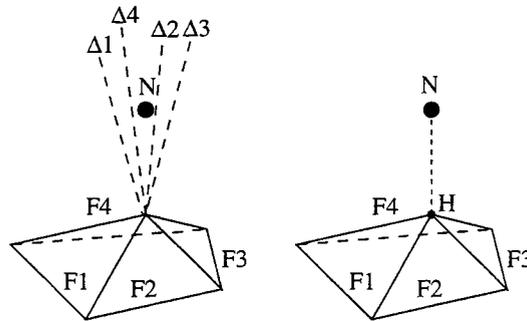


FIG. 3.34 – Exploitation du sommet H commun à plusieurs faces α -coplanaires dans une configuration sans projection orthogonale, suite au lissage α -coplanaire de N dans \mathbb{R}^3 .

Finalement, nous avons des situations alambiquées, comme “la selle de cheval”, pour lesquelles seules certaines des faces communes à un point H contiennent le projeté orthogonal de N . (fig. 3.35). Nous pouvons également utiliser H comme interpolation puisque l'idée de base de notre approche demeure valide.

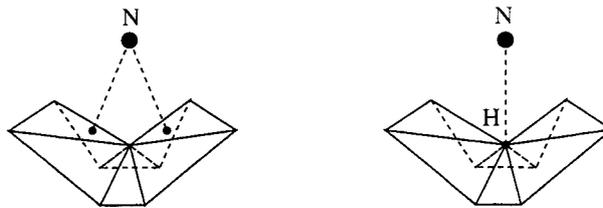


FIG. 3.35 – Interpolation d'un nœud N lissé dans une configuration en forme de “selle de cheval”.

Notons que plus α est grand, plus les secteurs angulaires sources de problèmes sont importants, plus cette technique est mise à mal. Bien que nous

convergions toujours vers une solution unique, on peut produire des situations incohérentes lorsque α est très important. Ainsi, dans le cas présenté en figure 3.36, il apparaît clairement qu'un nœud situé en M_1 et déplacé en M_2 par lissage barycentrique, sera interpolé à l'aide du point H situé sur une face qui ne correspond pas à celle qui devrait être utilisée. La tolérance α qui définit la coplanarité entre deux faces doit donc impérativement demeurer faible si on veut éviter des interpolations farfelues.

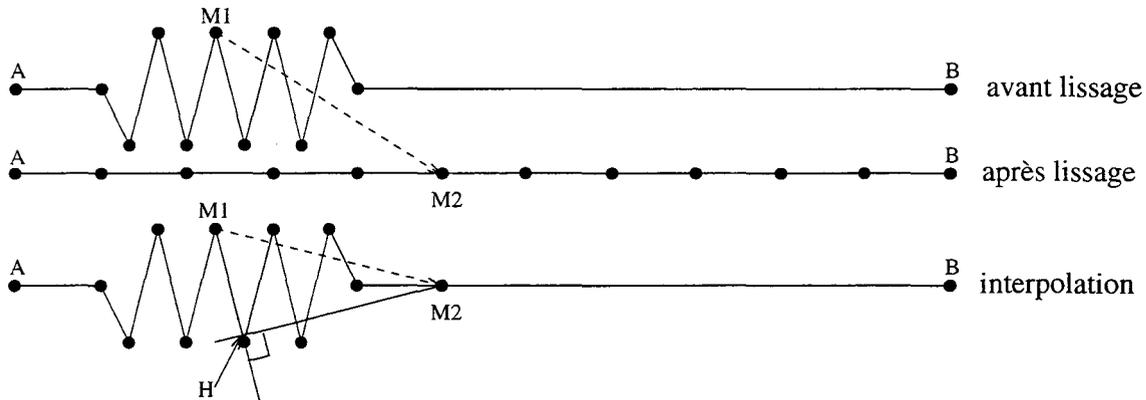


FIG. 3.36 - Cas inextricable si α est trop grand.

En pratique, nous utilisons $0^\circ \leq \alpha \leq 5^\circ$.

3.5.4 Interpolation volumique

L'interpolation de la grandeur physique ϕ d'un nœud interne N situé en un point M dans un tétraèdre $\{A, B, C, D\}$ a pour expression :

$$\phi(N) = \frac{V_{BCDM} \times \phi(A) + V_{ACDM} \times \phi(B)}{V_{ABCD}} + \frac{V_{ABDM} \times \phi(C) + V_{ABCM} \times \phi(D)}{V_{ABCD}} \quad (3.26)$$

où V_{ABCD} est le volume du tétraèdre défini par $\{A, B, C, D\}$. Pour interpoler ce nœud interne N , il faut rechercher l'élément qui le contient. Le principe de cette recherche est simple : on part d'un élément qui contient N dans le maillage avant lissage et tant que cet élément admet une face séparatrice par rapport à la nouvelle position de N , on prend comme nouvelle référence l'élément par rapport à cette face séparatrice. Si un élément admet plusieurs faces séparatrices, on tire au hasard celle qui va être utilisée pour passer à l'élément voisin [51] (fig. 3.37).

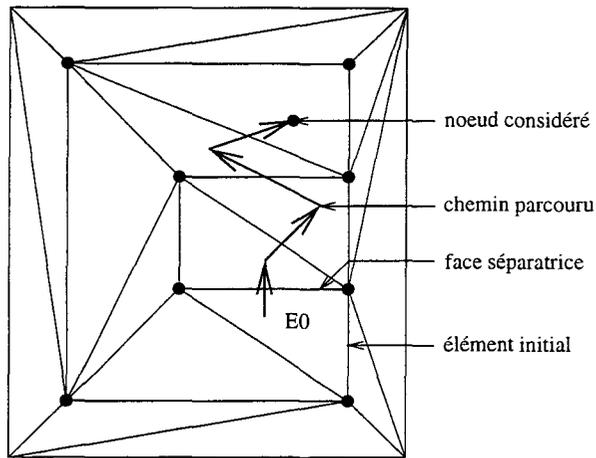


FIG. 3.37 – Recherche par voisinage de l'élément qui contient un nœud.

Si on pose E_0 l'élément qui contient N dans le maillage avant lissage, \vec{n}_i le vecteur normal de la i -ième face d'un élément (orienté vers l'extérieur de E), $\text{voisin}(E, i)$ le voisin de E par rapport à la face i et N_i le i -ième nœud d'un élément E , l'algorithme peut s'exprimer ainsi :

```

E ← E0
FLAG ← VRAI
TQ (FLAG) FAIRE
  i ← alea(4)
  j ← ((i + 1) mod 3) + 1
  k ← ((i + 2) mod 3) + 1
  l ← ((i + 3) mod 3) + 1
  SI ( $\vec{n}_j \cdot \overrightarrow{N_i N}$  > 0) ALORS
    E ← voisin(E, j)
  SINON
    SI ( $\vec{n}_k \cdot \overrightarrow{N_i N}$  > 0) ALORS
      E ← voisin(E, k)
    SINON
      SI ( $\vec{n}_l \cdot \overrightarrow{N_i N}$  > 0) ALORS
        E ← voisin(E, l)
      SINON
        SI ( $\vec{n}_i \cdot \overrightarrow{N_j N}$  > 0) ALORS
          E ← voisin(E, i)
        SINON
          FLAG ← FAUX
        FIN_SI
      FIN_SI
    FIN_SI
  FIN_TQ

```

3.5.5 Effets de l' α -coplanarité

Avec un lissage α -coplanaire, les enveloppes des domaines peuvent être légèrement modifiées. Cela implique qu'un nœud N interne à un domaine \mathcal{D}_1 du maillage avant lissage peut avoir sa position d'interpolation située dans un domaine \mathcal{D}_2 après lissage (fig. 3.38).

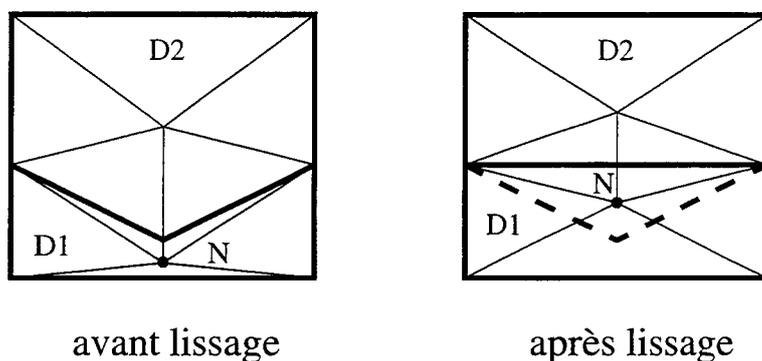


FIG. 3.38 – *Changement de domaine lors d'une interpolation volumique après lissage α -coplanaire.*

Ce type de configuration est détecté lorsque l'élément voisin n'appartient pas au même domaine. L'interpolation se fait alors sur la face d'interface qui intersecte le segment défini par l'ancienne et la nouvelle position du nœud. L'idéal serait de choisir la face la plus proche de l'interface, mais certaines configurations conduisent à un très mauvais choix (fig. 3.39).

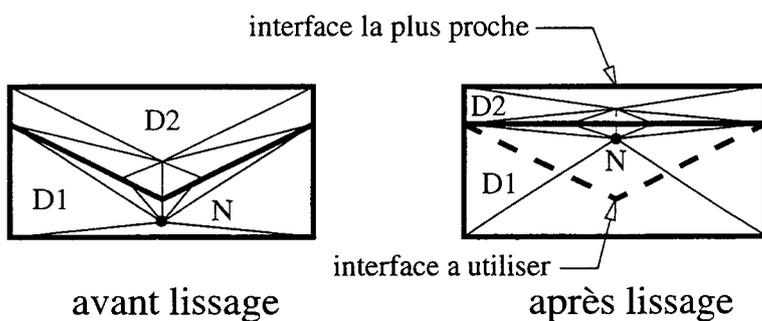


FIG. 3.39 – *Echec de la méthode d'interpolation basée sur l'interface la plus proche.*

En pratique, pour α petit, nous n'avons pas été confronté à ce type de situation.

3.6 Remaillage local des zones creuses

L'approche qui suit utilise une technique simple : identifier les zones non maillées qui apparaissent à chaque étape et les mailler de façon à maintenir cohérente la discrétisation du système simulé. Nous allons présenter deux versions possibles de cette méthode dans le cas de la simulation d'un LOCOS et faire le point sur leurs avantages et leurs limites.

3.6.1 Déplacement des domaines et des interfaces.

Si nous nous attachons à respecter le principe physique de création d'une fine couche d'oxyde à l'interface Si/SiO₂, il nous faut déplacer les éléments fins de l'oxyde vers le haut et l'interface Si/SiO₂ dans le substrat de silicium. Deux bandes sont alors à mailler :

- La première zone creuse naît du déplacement de l'ancien oxyde suite à la croissance du nouvel oxyde. Elle est donc située dans le domaine contenant l'oxyde avant déformation.
- La seconde, correspond aux éléments balayés par l'interface Si/SiO₂ qui se déplace dans le substrat de silicium suite à la consommation de silicium pendant le pas de temps d'oxydation. Pour intégrer cette nouvelle interface dans le maillage, une solution simple consiste à détruire ces éléments et remailler la couche mince qu'ils définissaient.

Cette approche s'appuie donc sur le maillage de deux couches minces, de part et d'autre de la nouvelle interface Si/SiO₂, et sur le déplacement du masque de nitrure et de l'oxyde présents avant le pas d'oxydation considéré (fig. 3.40).

Avantages

Le principal intérêt de cette méthode est de limiter le remaillage de la structure à de petites zones, ce qui réduit le temps passé dans la mise à jour de la géométrie. De plus, la déformation des domaines est répercutée sur la structure discrétisée. En conséquence, l'interpolation est limitée aux nœuds ajoutés dans les zones maillées ; elle ne s'étend pas aux nœuds présents dans le maillage avant le pas d'oxydation. Enfin, la prise en compte des interfaces déplacées est réduite au maillage de couches minces, ce qui peut être effectué par le générateur de maillage qui fournit le maillage initial.

Inconvénients

Toutefois, le maillage de couches minces est difficile à réaliser et, pour ce type d'approche, le mailleur doit être capable de respecter strictement la discrétisation des interfaces afin de connecter les couches maillées au reste de la structure. En outre, comme les éléments générés sont fortement aplatis, il faut améliorer leur qualité. Le recours à la relaxation ou au lissage implique une interpolation. Quant aux problèmes de boucles et de recouvrements qui sont produits dans les domaines déformés ou déplacés, ils restent entiers.

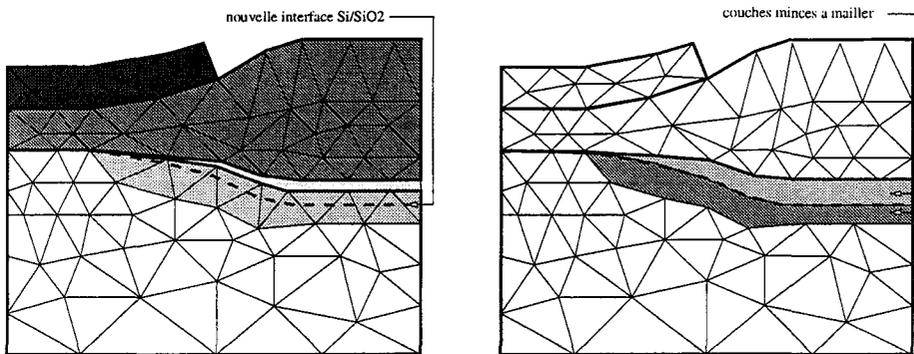


FIG. 3.40 – Déplacement du masque de nitrure et de l'oxyde de champ sous la pression de l'oxyde créé pendant l'étape d'oxydation et identification des couches minces de silicium et d'oxyde à mailler.

3.6.2 Déplacement limité aux interfaces.

Il est possible d'éviter de déplacer les éléments du maillage, et donc de les déformer, en généralisant l'approche présentée précédemment pour résoudre l'intégration de la nouvelle interface Si/SiO₂ dans le silicium. En effet, la destruction des éléments finis balayés par toute interface modifiée permet de créer des zones creuses qu'il ne reste qu'à remailler (fig. 3.41).

Avantages

Cette méthode permet, elle aussi, de limiter le remaillage de la structure à de petites zones, réduisant, là encore, le temps consacré à la mise à jour de la géométrie.

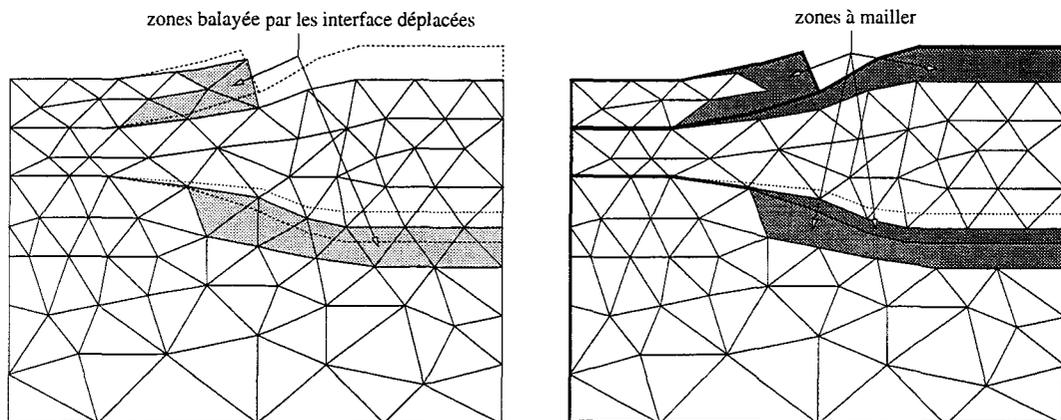


FIG. 3.41 – Destruction des éléments balayés par les interfaces oxyde/nitruure et oxyde/silicium, et identification des zones à (re)mailler.

Cependant, contrairement à la méthode ci-avant, les domaines physiquement déplacés et déformés ne le sont plus au niveau de la structure discrétisée. Les éléments issus des maillages précédents maintiennent donc leur qualité, ce qui réduit la dégradation géométrique du maillage.

Enfin, les boucles peuvent être détectées et corrigées au niveau des interfaces déplacées, ce qui permet de les éliminer avant le maillage des zones creuses. Une des solutions envisageables réside dans le calcul des intersections entre les faces triangulaires des interfaces déplacées et la rediscrétisation de ces faces avec ces nœuds (fig. 3.42 et et 3.43). Notons que les intersections entre faces peuvent se limiter à un point, à un segment, ou encore couvrir une surface.

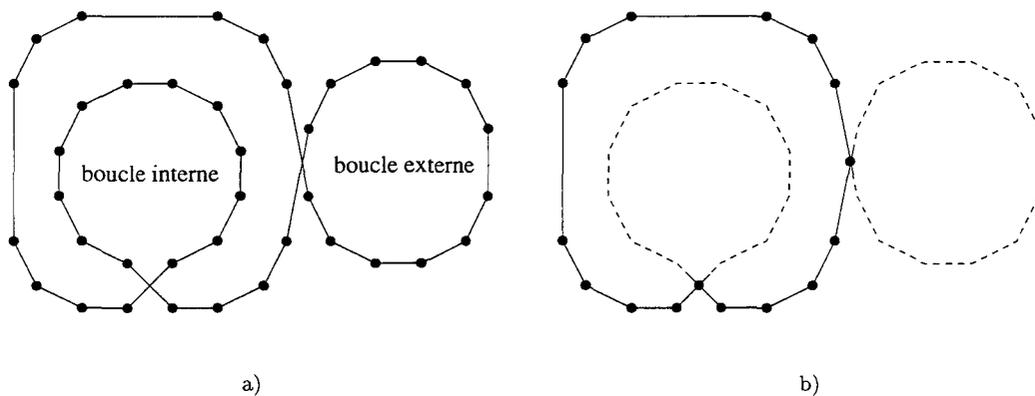


FIG. 3.42 – Rediscrétisation des interfaces avec boucles (a) et élimination des sous-enveloppes inutiles (b).

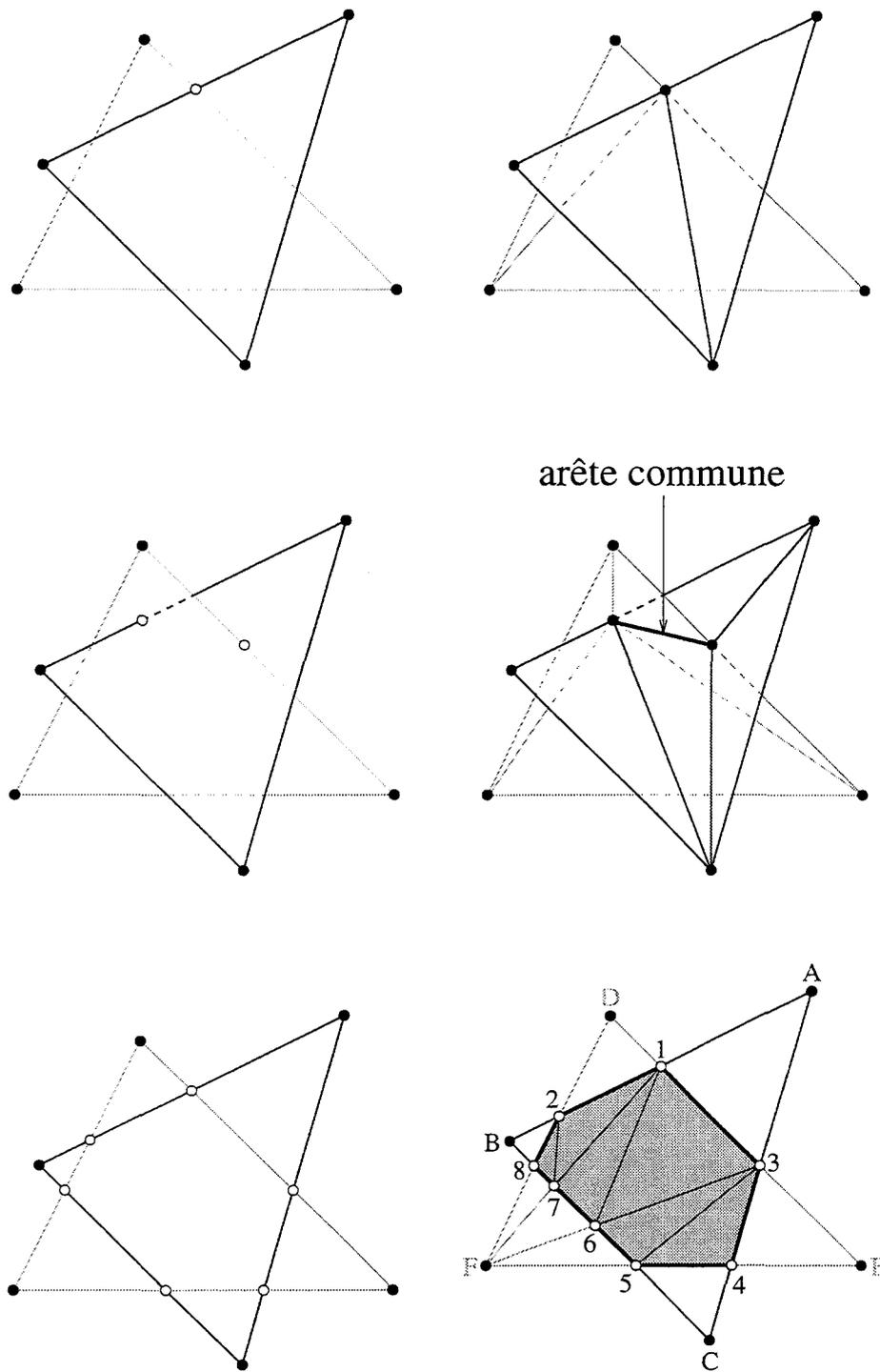


FIG. 3.43 - Rediscrétisation de faces triangulaires qui s'intersectent. Les intersections sont réduites à un point, à un segment, ou couvrent une surface.

Il reste toutefois à éliminer les sous-enveloppes de domaines inutiles, ce qui suppose la capacité à les définir. Pour cela on peut, par exemple, s'aider d'un algorithme de coloriage des domaines du maillage volumique. La boucle est interne au domaine si toutes ses faces sont voisines avec le même domaine, et externe si toutes ses faces sont voisines avec un autre domaine. Lorsque deux faces qui s'intersectent sont coplanaires, elles génèrent des faces qui sont considérées à la fois comme internes et externes (fig. 3.44).

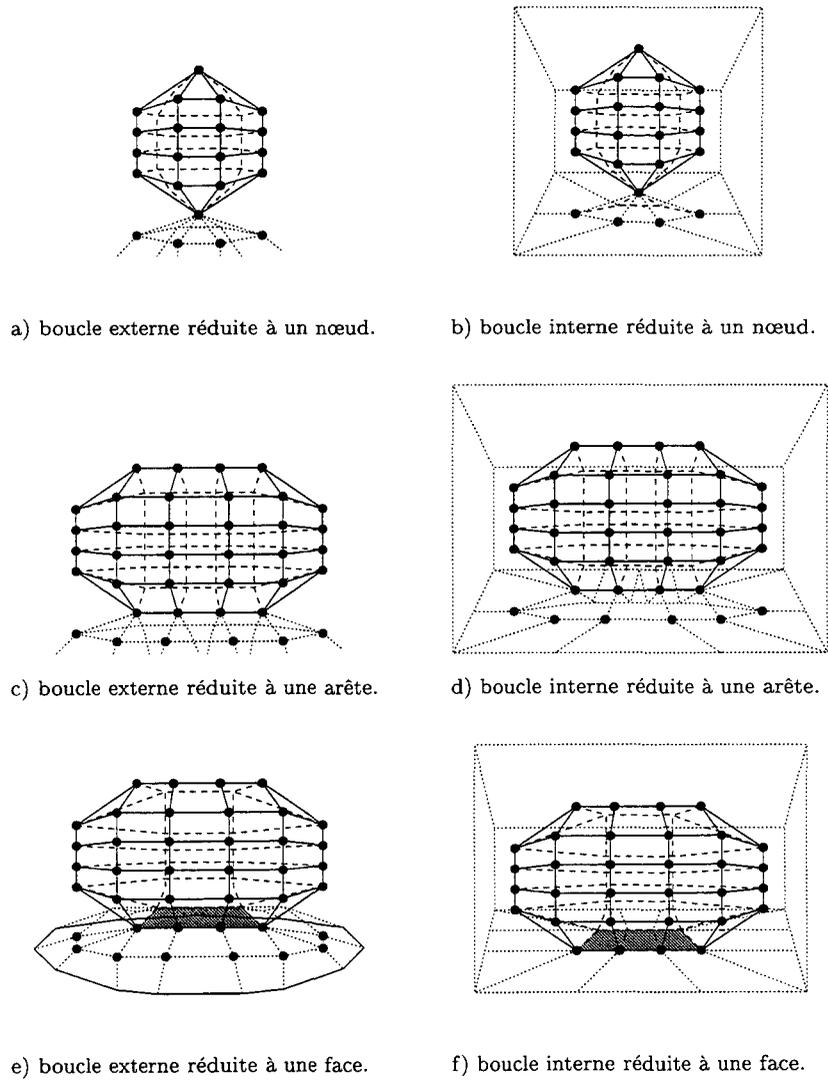


FIG. 3.44 – Rediscrétisation des interfaces avec boucles et élimination des sous-enveloppes inutiles.

Une boucle est aplatie si toutes ses faces sont simultanément internes et externes (fig. 3.45).

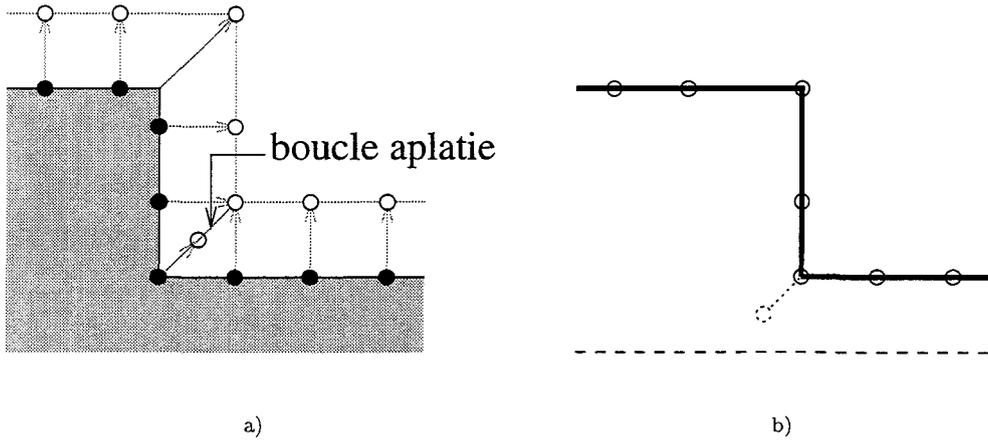


FIG. 3.45 – Génération et élimination d'une boucle aplatie en 2D.

De même, les recouvrements de domaines sont détectables en appliquant l'algorithme de coloriage sur les zones nées de l'intersection des interfaces déplacées (fig. 3.46).

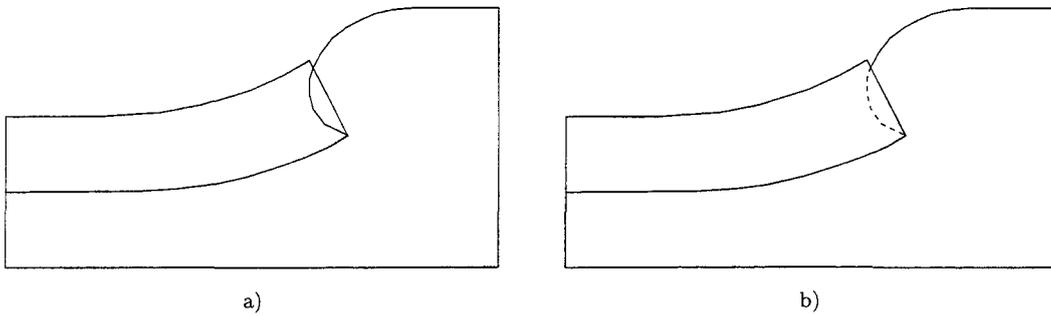


FIG. 3.46 – Rediscrétisation des interfaces correspondant à des recouvrements de domaines, et assimilation du recouvrement à un des domaines.

Inconvénients

Une fois les interfaces rediscrétisées de façon à prendre en compte les boucles et les recouvrements, il reste à éliminer les faces inutiles. Or, la détermination de ces portions d'enveloppes n'est pas triviale. A cela s'ajoute la nécessité de dupliquer la structure avant de mettre à jour la géométrie

de façon à avoir un maillage de référence pour interpoler les nœuds non déplacés des domaines déformés. En effet, si ces nœuds ne se déplacent pas, la valeur des grandeurs physiques en ces nœuds, elle, change conformément aux déformations et aux déplacements. Il faut donc les mettre à jour.

Enfin, le maillage de couches minces reste indispensable. Il y aura donc génération d'éléments très aplatis et recours à l'amélioration de la qualité par relaxation ou lissage, bien que l'effet du lissage se limite au voisinage des interfaces (puisque la qualité du maillage est maintenue dans l'ensemble de la structure à l'exception des zones creuses) et que l'interpolation est déjà requise pour une partie des nœuds.

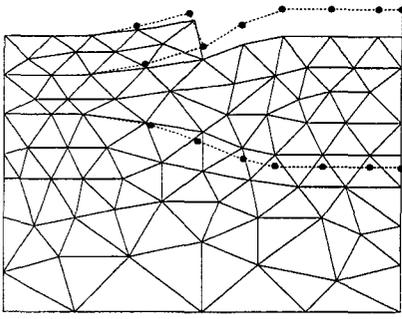
3.7 Remaillage des interfaces déplacées

Les méthodes basées sur la définition de zones creuses et leur remaillage ont la particularité de nécessiter la destruction locale du maillage pour prendre en compte les interfaces déplacées. La définition de ces zones requiert le calcul de tous les éléments balayés par ces interfaces. Cette activité peut être évitée si le mailleur est capable d'intégrer une interface dans un maillage volumique. Pour cela, il doit être capable d'ajouter les nœuds d'une interface déplacée dans un maillage et reconstruire toutes les faces de l'enveloppe (fig. 3.47).

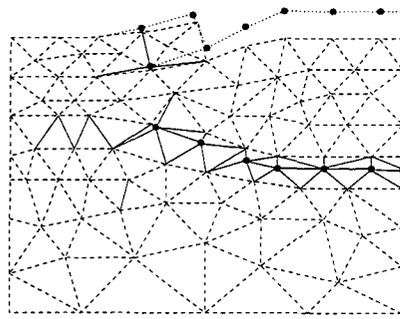
3.7.1 Avantages

Comme pour les approches précédentes, cette méthode limite l'activité de maillage à de petites régions. En outre, elle autorise l'ajout de nœuds sur les interfaces. Ceci s'avère avantageux lorsqu'on veut pouvoir rediscrétiser des interfaces tout en maintenant la conformité du maillage à la frontière entre deux régions d'une structure.

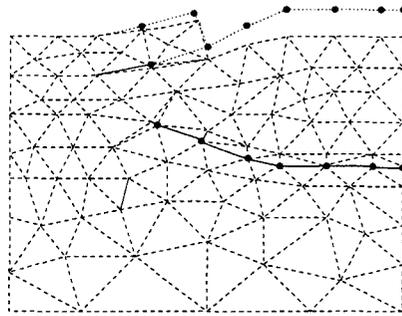
Le traitement des boucles et recouvrements, quant à lui, est grandement facilité car les nœuds situés à l'intersection de faces sont calculés par le mailleur au moment de la restauration des faces manquantes. Il n'est donc plus nécessaire de traiter les interfaces avant de les insérer dans le maillage. De plus, ce calcul d'intersection est accéléré puisque les faces qui s'intersectent sont détectées au moment où les nœuds sont insérés dans le maillage, les arêtes reconstruites et les faces restaurées. Enfin, l'élimination de ces boucles et recouvrements peut être obtenue en utilisant un algorithme de coloriage.



a) Nouvelle position des interfaces.



b) Insertion des nœuds déplacés dans le maillage initial.



c) Forçage des faces des enveloppes déplacées.

FIG. 3.47 – Mise à jour du maillage par insertion des nœuds-interfaces déplacés (certains nœuds-interfaces peuvent être placés hors du maillage courant) et restauration des faces manquantes.

3.7.2 Inconvénients

Cette approche s'appuie sur un mailleur capable de restaurer des faces dans un maillage volumique et suffisamment robuste pour tolérer des enveloppes tridimensionnelles métriquement incorrectes. En outre, ce mailleur doit être capable de respecter les interfaces qui n'ont pas été modifiées. Or, la restauration des interfaces peut être fortement gênée par la concentration nodale dans le voisinage des faces à reconstruire. C'est le cas lorsque l'interface se situe dans une zone fortement raffinée : elle entre alors en collision avec de nombreux éléments, ce qui rend difficile, voir impossible, la tâche de restauration. On peut néanmoins limiter ce problème en déraffinant ces zones denses. Enfin, certains nœuds sont situés hors du maillage (fig. 3.47). Le mailleur doit alors être capable de les connecter aux éléments finis existants.

3.8 Remaillage complet

Une solution évidente pour garantir le maintien de la qualité du maillage pendant la simulation de phénomènes physiques induisant de fortes déformations géométriques consiste à remailler intégralement le composant simulé à chaque pas de temps. Cette technique, mise en œuvre en 2D, donne de très bons résultats [13, 14, 15]. Le principe est simple. Chaque fois que la structure \mathcal{M}_i subit un champ de déformations, un nouveau maillage volumique \mathcal{M}_{i+1} est calculé à partir des enveloppes de \mathcal{M}_i déplacées. Le mailleur peut ensuite soit ajouter des nœuds internes en suivant ses propres critères [52, 53], soit utiliser des nœuds fournis en entrée par l'utilisateur. Les nœuds internes ajoutés par le mailleur dans \mathcal{M}_{i+1} seront alors interpolés à l'aide de \mathcal{M}_i , comme dans les méthodes précédentes (fig. 3.48).

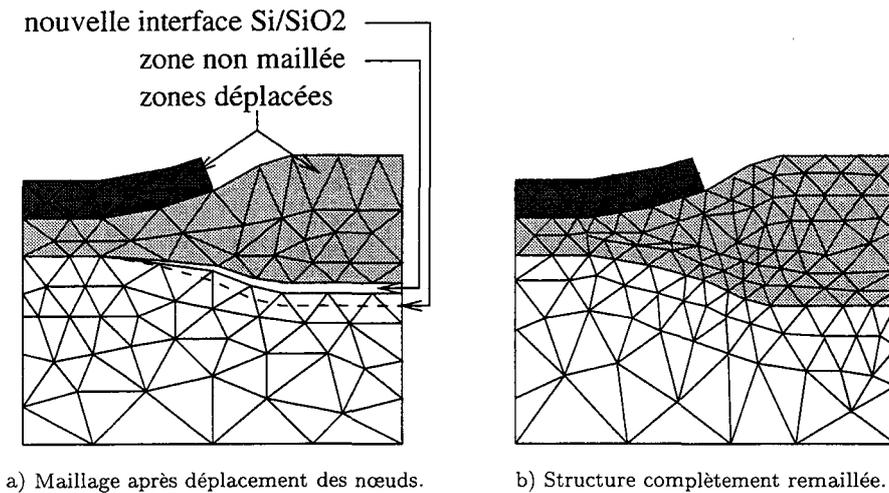


FIG. 3.48 – Remaillage complet de la structure à partir des interfaces déformées.

3.8.1 Avantages

Cette approche permet de corriger des défauts aux interfaces, avant ou pendant le maillage (sous réserve que le mailleur supporte les surfaces avec des boucles ou des recouvrements de domaines). Dans tous les cas, la qualité du maillage volumique peut être aisément maintenue à chaque pas de temps, ce qui rend les phases de relaxation et de lissage inutiles au cours de la simulation.

3.8.2 Inconvénients

Cependant, le temps nécessaire pour remailler une structure 3D complète est généralement important. Un remaillage complet à chaque pas de temps peut engendrer des durées de simulation prohibitives si la vitesse de maillage n'est pas suffisante. Quant aux nœuds internes recalculés à chaque remaillage, ils doivent être interpolés pour avoir des états physiques cohérents. Or, les interpolations produisent des erreurs numériques qui peuvent dégrader la qualité de la solution si elles sont répétées de façon intensive.

3.9 Conclusions sur les propriétés nécessaires

Après avoir exposé quelques critères pour évaluer la qualité d'un maillage à répondre aux besoins de la simulation numérique, différentes approches ont été envisagées pour la maintenir ou l'améliorer. Cependant, aucune d'entre elles ne satisfait complètement nos exigences. Il semble que la solution idéale soit une combinaison de ces solutions en fonction de la situation.

3.9.1 Solutions retenues

Ainsi, lorsque des nœuds se déplacent peu sur un pas de temps (en regard des dimensions des éléments du maillage), la déformation du maillage n'entraîne pas de diminution significative de la qualité géométrique. Cette approche est alors préférable car elle ne requiert pas de remaillage et peu d'interpolations.

Toutefois, répétée sur plusieurs pas de temps, cette technique conduit à un étirement des éléments du maillage. Lissage et relaxation peuvent alors être pratiqués tous les n pas de simulation afin de rétablir la qualité géométrique.

Par contre, lorsque les déplacements nodaux sur un pas de temps deviennent importants, ou que les interfaces ne sont plus métriquement correctes, il est nécessaire d'envisager des remaillages locaux. Parmi les stratégies possibles, nous privilégions celles qui sont universelles parce qu'elles réduisent le nombre d'outils impliqués dans la mise à jour de la géométrie. L'idéal est une méthode qui soit capable de résoudre tous les problèmes. De ce point de vue, celle basée sur le remaillage d'interfaces dans un volume donné en ne faisant appel qu'au mailleur (il n'y a pas de zone creuse à calculer ou de connexion à établir entre des régions maillées séparément) est la plus intéressante.

Le remaillage complet de la structure s'avère indispensable au début de la simulation et lorsque les techniques précédentes atteignent leurs limites.

Enfin le raffinement et le déraffinement de maillage sont nécessaires pour optimiser le nombre de nœuds dans les régions. En particulier, lorsqu'une interface est ajoutée dans un maillage volumique, il est préférable de réduire la densité de nœuds dans la zone où elle se trouve afin de limiter les interactions entre les nœuds internes et les faces à restaurer. Là encore, il est souhaitable que le mailleur soit capable de répondre à cette exigence afin d'éviter le recours à un outil différent.

3.9.2 Propriétés du mailleur

L'ensemble des solutions proposées fait appel à un certain nombre de qualités que doit posséder le mailleur, parmi lesquelles le respect des interfaces³. Cette propriété est effectivement indispensable pour mailler toute la structure et insérer les interfaces déplacées. A cela s'ajoute la capacité à ajouter et retirer des nœuds afin de raffiner et déraffinement des régions. En outre, l'ajout et le retrait de nœuds doivent être suffisamment souples pour permettre à l'utilisateur de spécifier les nœuds qu'il souhaite insérer ou ôter. Enfin, des diagnostics d'erreur sont indispensables pour l'avertir des problèmes rencontrés et lui permettre de prendre les décisions adéquates.

3. Par respect des surfaces, nous entendons le respect des courbures et non celui de la discrétisation car les modifications de maillage sont effectuées sur la structure complète, et non région par région. Il est donc possible d'ajouter des nœuds ou d'inverser des arêtes sur une surface plane. Les courbures que nous prenons comme contraintes ne sont pas des formules analytiques mais la discrétisation des surfaces en entrée.

Chapitre 4

Génération de Maillage

Le chapitre précédent a présenté les stratégies à mettre en œuvre pour adapter le maillage à nos besoins, et a conduit à l'identification des propriétés que doit vérifier le générateur de maillage. Nous allons à présent brièvement décrire différentes techniques de génération automatique de maillage tridimensionnel, étudier leur adéquation avec les besoins établis précédemment et enfin détailler l'approche que nous avons retenue.

4.1 Propriétés fondamentales du mailleur

Les diverses méthodes de décomposition d'une structure tridimensionnelle en polyèdres conduisent à des maillages aux propriétés très différentes. Le choix d'une approche et les fonctions d'interpolation utilisées dans la méthode de résolution numérique du système d'équations différentielles sont étroitement liés.

4.1.1 Maillage conforme

Ainsi, dans notre cas, le maillage doit être conforme, c'est à dire tel que l'intersection d'éléments soit réduite :

- à l'ensemble vide,
- au sommet commun à ces éléments,

- à l'arête commune à ces éléments,
- ou à la face commune à ces éléments.

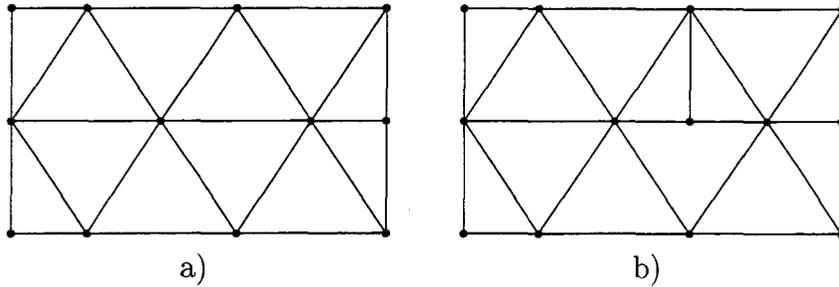


FIG. 4.1 – Maillages triangulaires a) conforme et b) non conforme.

Les maillages non conformes sont prohibés à cause des discontinuités qu'ils introduisent : la description des contraintes mécaniques ne pourrait vérifier la continuité de la composante normale.

Ajoutons enfin que nous faisons le choix d'utiliser des éléments finis isoparamétriques de classe P_1 (triangles en 2D et tétraèdres en 3D). Les fonctions d'interpolation sont donc linéaires par morceau. D'un point de vue numérique, ces éléments sont faciles à mettre en œuvre et très stables. D'un point de vue géométrique, ils permettent une discrétisation aisée de toute surface et de tout volume.

4.1.2 Nuage de points et frontières triangularisées

La description géométrique et physique des structures que nous simulons provient soit de générateurs de structures, soit de simulateurs de procédés technologiques tels que dépôts-gravures ou implantations ioniques. Quelles que soient leurs origines, les données fournies à notre module de diffusion et d'oxydation prennent la forme d'un nuage de points et d'une description des frontières de la structure à l'aide de faces triangulaires, carrées, ou encore d'un maillage volumique initial. Le générateur de maillage doit donc pouvoir supporter ces différents types de données, ce qui élimine les approches qui s'appuient sur la description analytique de la frontière des domaines.

4.2 Différentes stratégies de génération de maillage

Il existe de nombreuses techniques pour mailler une structure 3D décrite avec un nuage de points et de faces, parmi lesquelles on trouve le produit tensoriel de grilles, la méthode des "octrees", les méthodes frontales et celles de Voronoï-Delaunay. La suite de ce chapitre présente très succinctement ces techniques et dresse un rapide bilan de leurs avantages et inconvénients du point de vue de la simulation de procédés de fabrication de circuits intégrés.

4.2.1 Produit tensoriel de grilles

La génération de maillage par superposition de grilles est fréquemment utilisée quand la résolution d'un système d'équations différentielles s'appuie sur la méthode des différences finies. Bien appropriée à la discrétisation de structures géométriques élémentaires, cette méthode crée des nœuds et des éléments cubiques à partir d'intersections entre des plans, ce qui engendre des maillages de type Manhattan. Les orientations privilégiées de ces plans sont généralement perpendiculaires aux axes du repère spatial dans lequel est décrite la structure à discrétiser. Lorsque la surface qui définit le volume à mailler est déjà discrétisée, la position de ces différents plans est imposée par les nœuds situés sur l'enveloppe (fig. 4.2).

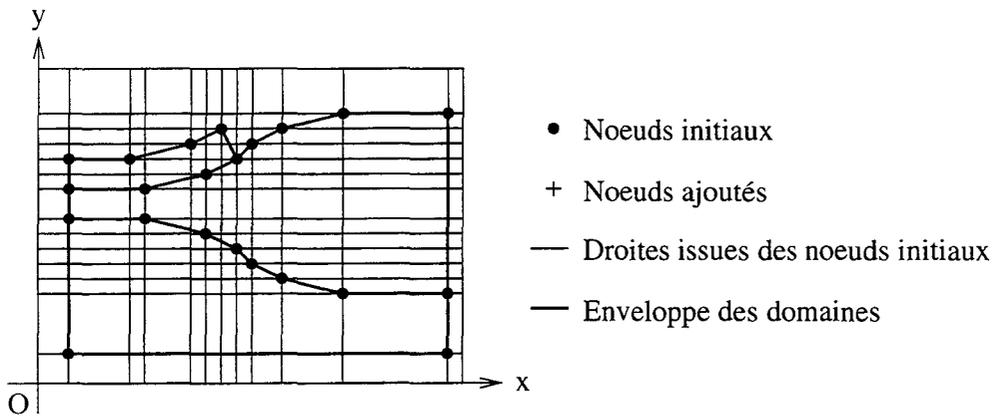


FIG. 4.2 - Maillage obtenu par produit tensoriel de grille.

Les principaux avantages de cette approche sont une implantation aisée et la génération d'éléments hexaédriques de très bonne qualité, les angles obtus étant limités à des angles droits.

Toutefois, elle produit une surabondance de nœuds à cause de la propagation des zones à forte densité de nœuds le long des plans générateurs (fig. 4.3), ce qui entraîne une surconsommation de l'espace mémoire et un accroissement du temps de calcul prohibitifs. Il est de plus difficile de mettre en œuvre cette méthode sur des structures dont les formes sont complexes. Enfin, si une structure est déformée, la perte de l'agencement des éléments selon un motif Manhattan implique le remaillage complet des volumes dès qu'un raffinement est nécessaire.

En conclusion, cette technique de maillage, utilisée dans le domaine de la simulation de dispositifs, s'avère globalement inadaptée à nos besoins.

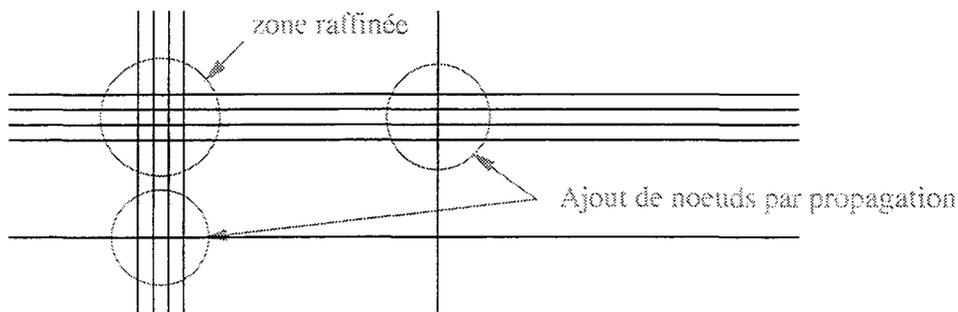


FIG. 4.3 – Propagation du raffinement selon les plans générateurs.

4.2.2 Octree

La méthode des “octrees” (“quadrees” en 2D) est une approche récente qui a très vite connu un franc succès dans le domaine de la simulation de dispositifs [54, 55, 56]. Basée sur la découpe cubique hiérarchisée d’une structure, cette technique s’avère très efficace lorsqu’on veut discrétiser des composants obtenus à l’aide de générateurs de structures. Elle permet en particulier un raffinement local du maillage de départ sans propagation le long de plans générateurs, point faible de la méthode précédente. Enfin, elle garantit une bonne qualité angulaire des éléments finis qu’elle produit (fig. 4.4).

Toutefois, la découpe hiérarchisée des volumes pose problème lorsque les étapes de la simulation déforment le dispositif car la structure arborescente sous-jacente au maillage perd certaines propriétés. On ne peut plus, par exemple, aisément déraffiner une région déformée. Par contre, un raffinement postérieur à une déformation du maillage demeure possible bien que la qualité angulaire des éléments finis soit alors incertaine. Pour cela, il est indispensable que le mailleur fournisse les éléments finis qu’il produit ainsi que l’arborescence qui les lie entre eux. De plus, il doit être capable d’accepter en entrée une telle arborescence. Enfin, le respect de frontières courbes

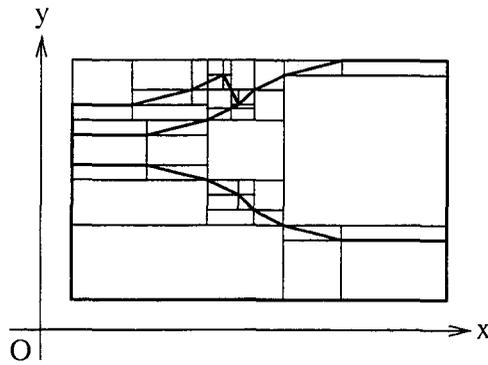


FIG. 4.4 – Maillage d'une structure par quadtree.

complexes est rendu difficile par de fortes restrictions sur l'angle des plans définis par les faces frontalières; il existe des configurations qui entraînent une surabondance de nœuds voir l'échec du générateur de maillage [56].

Cette technique est donc parfaitement adaptée à la production du maillage initial d'un composant issu d'un générateur de structures, mais peu adéquate pour des étapes de simulation qui font intervenir des phénomènes physiques tels que l'oxydation.

Remarque 4.1. Notons que l'utilisation d'éléments mixtes élimine les non-conformités nées de la structure arborescente sous-jacente au maillage [54, 55] (fig. 4.5).

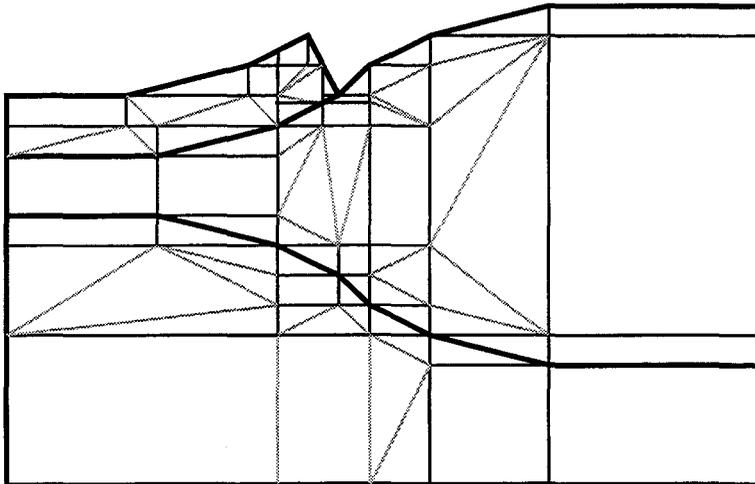


FIG. 4.5 – Maillage d'une structure par quadtree avec éléments mixtes.

4.2.3 Méthodes frontales

Les méthodes de front consistent à remplir le volume d'une structure de façon récursive en créant des éléments à partir des faces de l'enveloppe de ce volume, et en mettant à jour l'enveloppe du volume restant à mailler une fois ces nouveaux éléments créés (fig. 4.6) [57, 58, 59, 60]. Le mailleur ajoute des nœuds à l'intérieur du volume si nécessaire et s'arrête lorsqu'il ne reste plus d'espace non maillé.

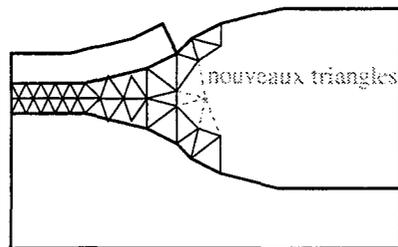


FIG. 4.6 – Maillage d'une structure par méthode frontale.

Cette méthode est certainement une de celles qui répondent le mieux à nos besoins. Des travaux ont montré qu'elle peut être rapide et efficace [61]. Le fait qu'elle garantisse le respect de la discrétisation des frontières est très avantageux pour mailler les zones creuses qui apparaissent pendant les étapes d'oxydation.

La raison pour laquelle nous ne l'avons pas retenue tient au fait qu'elle ne peut être employée pour raffiner une région. Ceci implique l'écriture de différents modules pour mailler les structures simulées puis les raffiner. Il est de plus difficile de justifier de façon théorique cette approche qui s'apparente plus à un ensemble de "recettes de cuisine". Enfin, la production d'un maillage lorsque deux domaines entrent en collision, ou qu'une boucle apparaît, semble difficile à obtenir sans traiter préalablement les surfaces des régions déplacées ou déformées.

4.2.4 Méthodes de Voronoï-Delaunay

Les méthodes de Voronoï-Delaunay s'appuient sur le critère de la "sphère vide" pour générer un maillage à partir d'un nuage de points. Ce critère impose que chaque simplexe du maillage ait sa boule ouverte circonscrite vide de tout nœud (fig. 4.7). Un tel mailleur peut être décrit à l'aide d'un opérateur qui dérive un maillage M_i , composé de i nœuds $\{N_1, \dots, N_i\}$, en un maillage M_{i+1} composé de ces i premiers nœuds et du nœud N_{i+1} . Cet

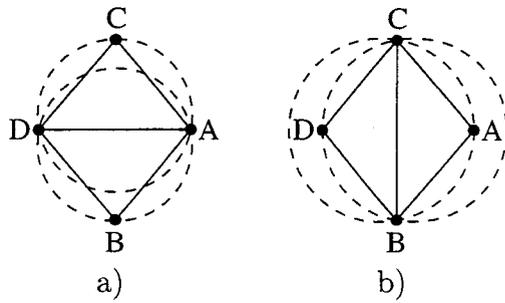


FIG. 4.7 - Maillage triangulaire qui vérifie le critère de la sphère vide (a) et maillage triangulaire qui ne respecte pas cette propriété (b).

opérateur, détaillé dans la suite de ce chapitre, consiste à déterminer les simplexes dont la sphère circonscrite contient le sommet N_{i+1} à insérer, détruire ces éléments (ce qui excave une cavité), et construire de nouveaux simplexes avec le sommet N_{i+1} (fig. 4.8).

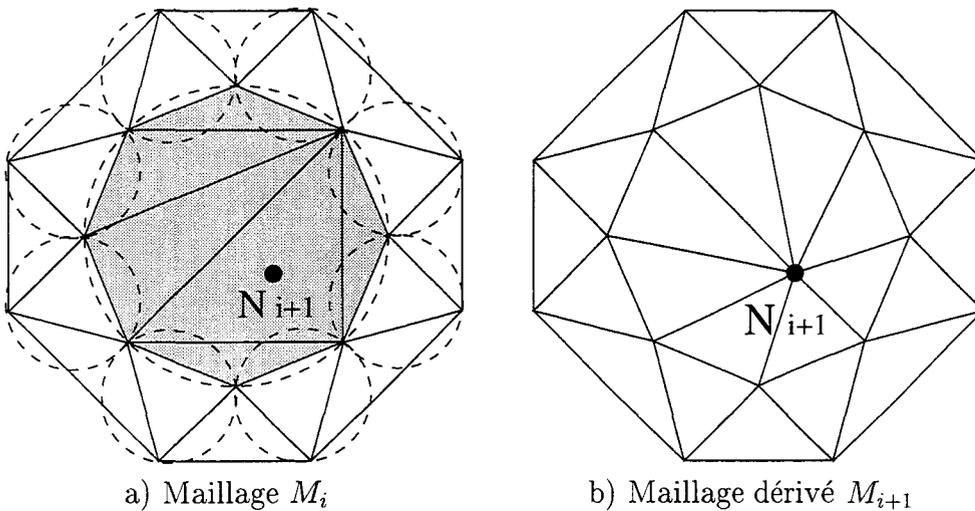


FIG. 4.8 - Dérivation d'un maillage triangulaire M_i en un maillage M_{i+1} à l'aide du critère de la sphère vide a) en excavant une cavité définie par les triangles de M_i dont la sphère circonscrite contient le sommet N_{i+1} à insérer (zone grisée) et b) en ajoutant de nouveaux triangles construits avec le nœud N_{i+1} et les faces de la cavité obtenue en (a).

Une des principales caractéristiques de cette méthode tient au fait qu'elle construit le maillage du plus petit domaine convexe défini par le nuage de points $\{N_i\}_{i=1,\dots}$. Si cette propriété est très éloignée de nos exigences, des travaux ont montré que cette méthode respecte les enveloppes non convexes discrétisées à l'aide de simplexes vérifiant certaines propriétés [52] (cf 4.4

page 90). Pour ce type de frontières, le maillage convexe final contient un sous-maillage fidèle à la structure non-convexe à mailler.

Mais ce qui frappe le plus dans cette approche, ce sont la simplicité de la propriété sur laquelle sont bâtis ces mailleurs et la solidité des bases théoriques qui servent à les implanter ; elles nous permettent de justifier de façon rationnelle les choix effectués au cours de l'implantation sur machine. De plus, les maillages obtenus sont optimaux¹ pour le nuage de points donné en entrée.

Enfin, le même algorithme sert à la fois au maillage initial d'un volume à partir du nuage de points issu de la discrétisation triangulaire de sa frontière et au raffinement local (dans la mesure où le raffinement consiste à insérer dans un maillage donné un nuage de points fourni par l'utilisateur). Notons que cette technique peut être utilisée après que le maillage ait été déformé, bien que les déformations puissent entraîner la perte de la propriété de la sphère vide. Cette utilisation particulière nécessite des adaptations que nous détaillons ultérieurement (cf 4.5.4 page 104) et fait que les maillages produits ne sont plus optimaux. Toutefois, des méthodes telles que le basculement d'arêtes peuvent être appliquées pour restituer la propriété de Delaunay à un maillage triangulaire ou tétraédrique [62, 63] (cf 4.6 page 106).

En conclusion, le contraste entre la formulation empirique des méthodes frontales et l'expression mathématique des méthodes de Voronoï-Delaunay, conjugué avec les propriétés des maillages de type Delaunay et l'existence de techniques pour maintenir cette propriété, a déterminé notre choix pour cette dernière approche.

4.2.5 Approches multi-bloques

Les approches multi-bloques s'apparentent à l'art d'utiliser un mailleur sur des structures alambiquées plutôt qu'à une technique de génération de maillage en tant que telle. Tous les mailleurs précédemment cités peuvent donc être employés avec ces méthodes qui consistent à décomposer un objet en différentes régions, à les mailler indépendamment les unes des autres et à assembler les différents maillages obtenus pour reconstituer la structure initiale. Les méthodes multi-bloques sont classées en fonction de la technique d'assemblage.

Si la méthode la plus simple (du point de vue du maillage) consiste à laisser les sous-maillages se chevaucher [64, 65, 66, 67], la discontinuité entre les différents sous-maillages rend cette technique impraticable dans notre cas.

1. du point de vue de la qualité angulaire des simplexes

Au contraire du cas précédant, l'approche multi-bloque "patched" impose le respect des frontières communes sans pour autant avoir des sous-maillages conformes à la frontière des domaines. Il y a donc discontinuité des fonctions aux interfaces, ce qui évite de propager le raffinement local d'une région à une autre. Cette technique, rencontrée en mécanique des fluides [68, 69, 70], ne répond pas à nos besoins dans la mesure où nous souhaitons maintenir à moindre coût la continuité des fonctions qui calculent de façon approximative les grandeurs physiques continues aux frontières des domaines.

L'approche multi-bloque composite est, quant à elle, le cas particulier de la méthode "patched" où la conformité des sous-maillages est imposée aux frontières. Cette technique requiert donc des mailleurs capables de respecter la discrétisation des interfaces, ou le traitement *a posteriori* des sous-maillages afin qu'ils soient conformes aux interfaces communes. Notons que des trois approches, celle-ci est la seule qui réponde à nos spécifications.

4.3 Fondements théoriques du mailleur

La nature des obstacles rencontrés dans la simulation de procédés de fabrication nous a conduit à privilégier la méthode de maillage basée sur le critère de la sphère vide de Delaunay [71]. Nous allons à présent détailler la méthode de dérivation qui conduit au maillage d'un domaine Ω de \mathbb{R}^d , $d \geq 2$, non dégénéré, c'est à dire de volume non nul.

L'enveloppe fermée $\partial\Omega$ du volume à mailler est discrétisée à l'aide d'un ensemble \mathcal{F} de f faces :

$$\mathcal{F} = \bigcup_{i=1}^f \{F_i\} \quad (4.1)$$

tel que chaque face F_i est définie à l'aide de d nœuds :

$$\forall F_i \in \mathcal{F}, F_i = \bigcup_{j=1}^d \{N_j\} \quad (4.2)$$

Les faces sont donc des arêtes dans \mathbb{R}^2 et des triangles dans \mathbb{R}^3 . De plus, nous supposons que pour tout couple de faces $\{F_i, F_j\}$ de \mathcal{F} , l'intersection entre F_i et F_j est réduite à :

- l'ensemble vide,
- un sommet,
- l'arête définie par deux sommets en commun.

Un soin particulier doit donc être apporté lorsque la frontière $\partial\Omega$ [du volume Ω à mailler] définit des zones creuses, ou contient des boucles (fig. 4.9).

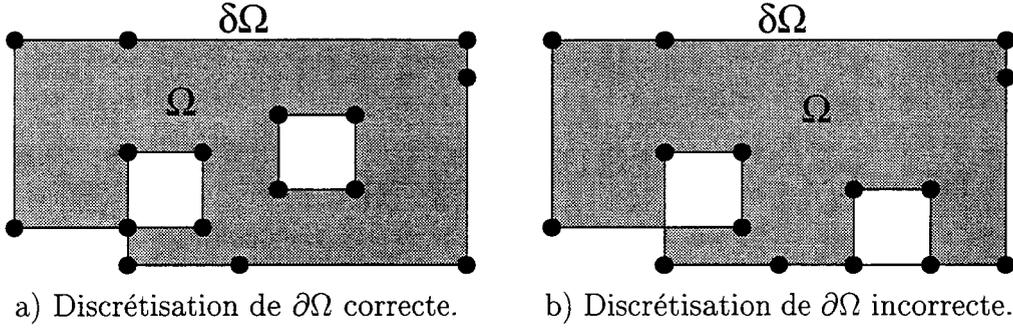


FIG. 4.9 – *Domaine creux et frontières avec boucles.*

L'ensemble des nœuds qui décrivent les faces de \mathcal{F} est noté :

$$\mathcal{N} = \bigcup_{i=1}^n \{N_i\} \quad (4.3)$$

4.3.1 Dérivation des \mathcal{M}_i

La méthode incrémentale choisie dérive un maillage \mathcal{M}_{i+1} à partir du maillage de Delaunay \mathcal{M}_i construit à l'aide des i premiers nœuds de \mathcal{N} et du nœud N_{i+1} . Chacun des maillages \mathcal{M}_i définit un ensemble de m_i simplexes :

$$\mathcal{M}_i = \bigcup_{j=1}^{m_i} \{S_j\} \quad (4.4)$$

la valeur de m_i dépendant de la configuration des nœuds N_1, \dots, N_i dans \mathbb{R}^d .

Chaque simplexe de \mathcal{M}_i est défini par $d + 1$ nœuds :

$${}_iS_j = \bigcup_{k=1}^{d+1} \{{}_iN_j^k\} \quad (4.5)$$

${}_iN_j^k$ représente donc le k -ième sommet du j -ième élément du maillage bâti avec les i premiers points de \mathcal{N} . Nous noterons de façon similaire ${}_iF_j^k$, la k -ième face de ${}_iS_j$ (i.e. celle qui est opposée au sommet ${}_iN_j^k$).

Le maillage initial \mathcal{M}_d consiste en un simplexe non dégénéré (de volume non nul). Nous supposons donc que les d premiers nœuds de \mathcal{N} sont non coplanaires et qu'ils définissent l'élément ${}_dS_1$ de \mathcal{M}_d .

La dérivation du maillage \mathcal{M}_i se limite au calcul de deux ensembles de simplexes qui ne dépendent que de la position du nœud N_{i+1} par rapport aux simplexes ${}_iS_j$:

1. **la cavité** \mathcal{C}_{i+1} , définie par l'ensemble des simplexes ${}_iS_j$ de \mathcal{M}_i dont la boule ouverte circonscrite ${}_iB_j$ contient N_{i+1} ;
2. **la boule**² \mathcal{B}_{i+1} définie par l'ensemble des simplexes créés avec N_{i+1} et un ensemble de faces appartenant à des éléments de \mathcal{M}_i .

La dérivation s'écrit simplement :

$$\mathcal{M}_{i+1} = \mathcal{M}_i - \mathcal{C}_{i+1} + \mathcal{B}_{i+1} \quad (4.6)$$

Si nous posons

- Ω_i l'ouvert de \mathbb{R}^d défini par \mathcal{M}_i
- $\bigcup_{j=1}^{m_i} \{{}_iB_j\}$ l'union des boules circonscrites aux simplexes ${}_iS_j$

alors la position de N_{i+1} par rapport à ces régions conduit à trois cas de figures :

$$N_{i+1} \in \Omega_i \quad (4.7)$$

$$N_{i+1} \notin \bigcup_{j=1}^{m_i} \{{}_iB_j\} \quad (4.8)$$

$$N_{i+1} \in \bigcup_{j=1}^{m_i} \{{}_iB_j\} \text{ et } N_{i+1} \notin \Omega_i \quad (4.9)$$

2. Ne pas confondre \mathcal{B}_{i+1} , l'ensemble des simplexes créés lors de l'insertion de N_{i+1} , avec ${}_iB_j$, la boule topologique circonscrite au j -ième simplexe de \mathcal{M}_i

Lorsque N_{i+1} appartient à Ω_i , la cavité comprend l'ensemble des ${}_iS_j$ dont la boule ${}_iB_j$ contient ce nœud. La boule \mathcal{B}_{i+1} est construite avec les faces externes de la cavité \mathcal{C}_{i+1} et N_{i+1} (fig. 4.10).

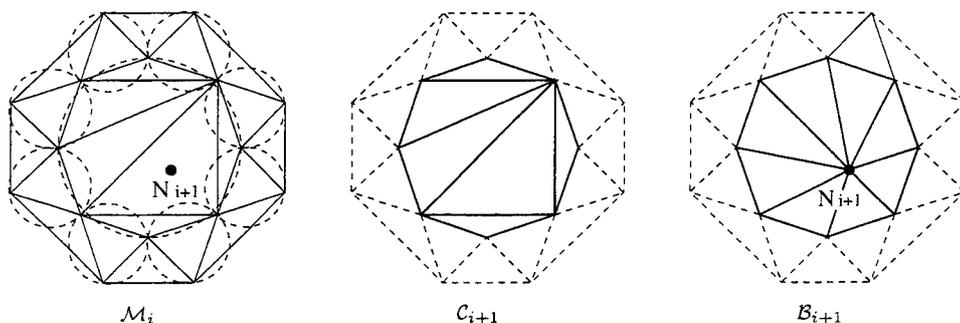


FIG. 4.10 -Dérivation de \mathcal{M}_i lorsque $N_{i+1} \in \Omega_i$.

Lorsque N_{i+1} ne se trouve dans aucune des boules ${}_iB_j$, la cavité est réduite à l'ensemble vide et les simplexes de \mathcal{B}_{i+1} sont construits à l'aide des faces externes de \mathcal{M}_i visibles par N_{i+1} (fig. 4.11, cf. faces séparatrices p. 87).

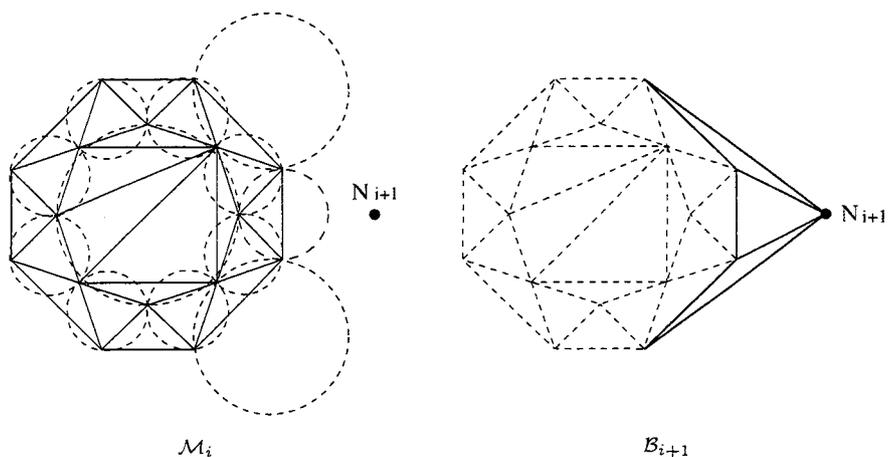


FIG. 4.11 -Dérivation de \mathcal{M}_i lorsque $N_{i+1} \notin \bigcup_{j=1}^{m_i} \{{}_iB_j\}$.

Enfin, si N_{i+1} se trouve hors du maillage \mathcal{M}_i tout en étant situé dans l'espace défini par l'union des sphères ${}_iB_j$, alors la boule \mathcal{B}_{i+1} est construite à l'aide des faces extérieures de $\mathcal{M}_i - \mathcal{C}_{i+1}$ visibles par N_{i+1} (fig. 4.12).

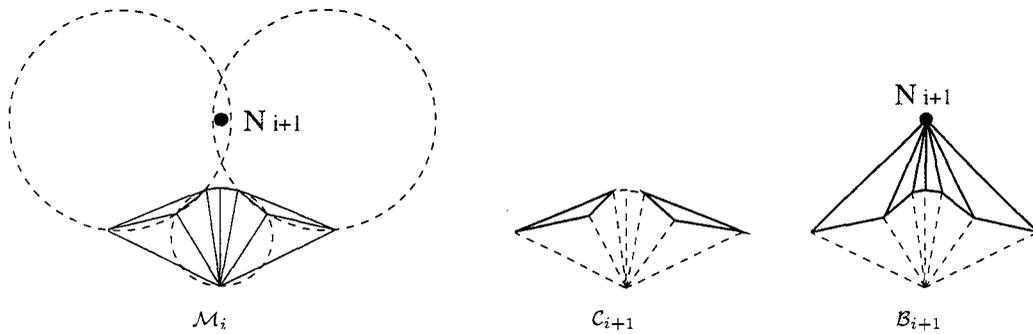


FIG. 4.12 – Dérivation de \mathcal{M}_i quand $N_{i+1} \notin \Omega_i$ et $N_{i+1} \in \bigcup \{ {}_i B_j \}$.

4.3.2 Propriétés géométriques fondamentales

Les dérivations successives des \mathcal{M}_i s'appuient sur deux propriétés géométriques fondamentales :

- l'existence d'une face séparatrice dans un simplexe,
- l'appartenance à la boule circonscrite à un simplexe.

Face séparatrice d'un simplexe

La première de ces deux propriétés permet de déterminer si le nœud N_{i+1} appartient à un élément de Ω_i . Elle permet également de définir les faces qui interviennent dans la construction de la boule \mathcal{B}_{i+1} lorsque N_{i+1} ne se situe pas dans Ω_i .

Notons N_i le i -ième sommet d'un simplexe S et ${}_i x_j$ la j -ième coordonnée de ce point. On peut alors associer au simplexe S le déterminant

$$\det (S) = \begin{vmatrix} 2x_1 - 1x_1 & \cdots & \cdots & d+1x_1 - 1x_1 \\ 2x_2 - 1x_2 & \cdots & \cdots & d+1x_2 - 1x_2 \\ \vdots & & & \vdots \\ 2x_d - 1x_d & \cdots & \cdots & d+1x_d - 1x_d \end{vmatrix} \quad (4.10)$$

dont la valeur absolue $|\det (S)|$ représente $d!$ fois le volume de S . Si les sommets N_i de S forment un trièdre direct, alors $\det (S)$ est positif.

Soit N un point de \mathbb{R}^d et x_j sa j -ième coordonnée. Posons

$$\det (S, N_i, N) = \begin{vmatrix} 1x_1 - x_1 & \cdots & i-1x_1 - x_1 & i+1x_1 - x_1 & \cdots & d+1x_1 - x_1 \\ 1x_2 - x_2 & \cdots & i-1x_2 - x_2 & i+1x_2 - x_2 & \cdots & d+1x_2 - x_2 \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1x_d - x_d & \cdots & i-1x_d - x_d & i+1x_d - x_d & \cdots & d+1x_d - x_d \end{vmatrix} \quad (4.11)$$

Par suite, N appartient au fermé défini par S si :

$$\forall i \in [1, d], \det (S) \times \det (S, N_i, N) \geq 0 \quad (4.12)$$

Par contre, si on a

$$\det (S) \times \det (S, N_i, N) < 0 \quad (4.13)$$

alors F_i , la i -ième face de S , définit un hyperplan séparateur pour N . Cet hyperplan coupe l'espace en deux demi-espaces : l'un qui contient N et l'autre qui contient le simplexe S (fig. 4.13).

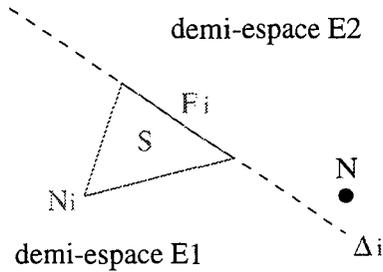


FIG. 4.13 - Séparation d'un nœud N et d'un simplexe S par l'hyperplan Δ_i issu de F_i , la i -ième face de ce simplexe.

Appartenance à la boule ouverte circonscrite d'un simplexe

Dans le calcul de la cavité \mathcal{C}_{i+1} , il faut déterminer les boules ${}_i B_j$ qui contiennent le nœud N_{i+1} à insérer. Cette propriété est également évaluée à l'aide de déterminants. En effet, un nœud N se situe dans une boule ouverte B circonscrite à un simplexe S si et seulement si :

$$\det (S) \times \Delta (S, N_j) < 0 \quad (4.14)$$

Dans cette expression, $\Delta (S, N)$ représente un déterminant défini par

$$\Delta (S, N) = \begin{vmatrix} l_1^2 - l^2 & \cdots & \cdots & l_{d+1}^2 - l^2 \\ 1x_1 - x_1 & \cdots & \cdots & d+1x_1 - x_1 \\ 1x_2 - x_2 & \cdots & \cdots & d+1x_2 - x_2 \\ \vdots & & & \vdots \\ 1x_d - x_d & \cdots & \cdots & d+1x_d - x_d \end{vmatrix} \quad (4.15)$$

avec $l_i^2 = \sum_{j=1}^d ({}_i x_j)^2$ et $l^2 = \sum_{j=1}^d (x_j)^2$.

Propriétés des maillages \mathcal{M}_i

Les maillages \mathcal{M}_i dérivés avec cette méthode vérifient quatre propriétés importantes [52] :

1. ils maillent l'enveloppe convexe de leurs nuages de points $\bigcup_{j=1}^i \{N_j\}$;
2. ils sont conformes ;
3. leurs simplexes vérifient tous le critère de la sphère vide ;
4. les cavités calculées pendant les dérivations constituent toutes des polyèdres étoilés par rapport aux points insérés, i.e. toute face d'une cavité \mathcal{C}_i est visible par le point N_i (fig. 4.14).

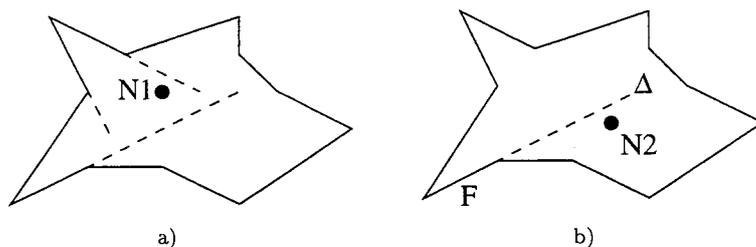


FIG. 4.14 – Exemples d'une cavité étoilée pour un nœud N_1 (a) et d'une cavité non étoilée pour un nœud N_2 , la face F n'étant pas visible pour ce point (b).

4.4 Respect des frontières

Les maillages \mathcal{M}_i générés itérativement étant convexes, il reste à extraire du maillage final \mathcal{M}_n le maillage du volume Ω (généralement concave). Cette étape nécessite donc de retrouver la frontière $\delta\Omega$ dans le maillage \mathcal{M}_n . Or, la surface $\delta\Omega$ n'est présente dans ce maillage que si elle est bien décrite et régulière [25, 52, 51].

4.4.1 Frontière bien décrite

Soit F_i une face de l'enveloppe $\delta\Omega$. Posons B_{F_i} la boule fermée circonscrite à cette face (en 3D B_{F_i} correspond à un cercle). Nous disons que la face F_i est *bien décrite* si l'intersection entre la boule fermée B_{F_i} et les nœuds de l'interface $\delta\Omega$ est réduite aux sommets de F_i (fig. 4.15 et 4.16).

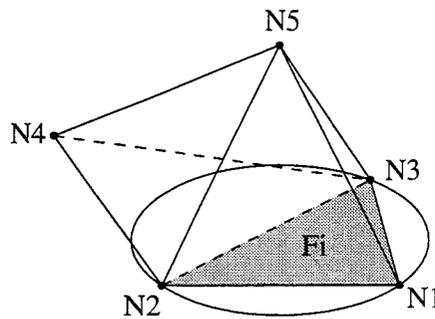


FIG. 4.15 –Pyramide $\{N_1, N_2, N_3, N_4, N_5\}$ avec sa face $F_i = \{N_1, N_2, N_3\}$ bien décrite car la boule circonscrite à F_i ne contient que les sommets de F_i .

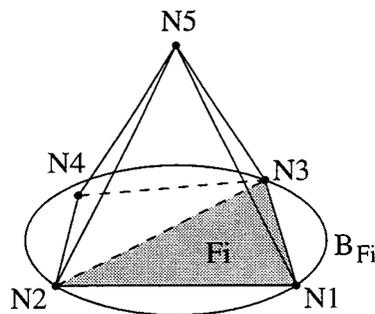


FIG. 4.16 –Pyramide $\{N_1, N_2, N_3, N_4, N_5\}$ avec sa face $F_i = \{N_1, N_2, N_3\}$ mal décrite car la boule circonscrite à F_i contient le sommet N_4 .

Par extension, la frontière $\delta\Omega$ est bien décrite si toutes ses faces sont bien décrites. Notons que pour $d = 2$, cette propriété est toujours vraie.

4.4.2 Correction des faces mal décrites

Les frontières des composants que nous utilisons dans les simulations sont généralement mal décrites car elles comprennent souvent de larges surfaces planes (faces latérales et inférieures). Or, les générateurs de structures maillent ces surfaces avec des rectangles qui, triangularisés, engendrent des faces mal décrites (fig. 4.17).

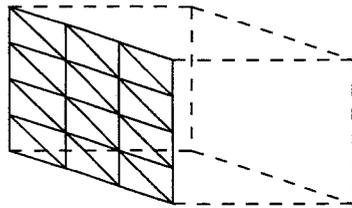


FIG. 4.17 – *Surface plane triangularisée par un générateur de structures.*

Toutefois, ceci n'est pas un réel obstacle dans la mesure où la forme des frontières est respectée : le mailleur choisit simplement aléatoirement les diagonales qui coupent les faces rectangulaires en triangles.

De plus, les faces mal décrites peuvent être corrigées. Il suffit par exemple de déplacer légèrement les sommets situés sur ces larges surfaces planes, dans les directions perpendiculaires à ces plans de façon à briser la coplanarité des couples de faces mal décrites (fig. 4.18).

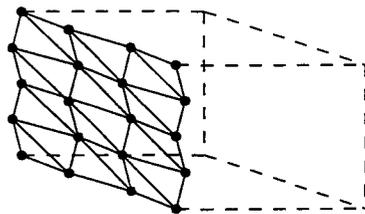


FIG. 4.18 – *Elimination des faces mal décrites en déplaçant les sommets.*

Enfin, le maillage final peut être modifié de manière à forcer les diagonales qui ont été permutées (cf 4.6 page 106 et 5 page 113).

4.4.3 Frontière régulière

Si on note Δ_i l'hyperplan engendré par la face F_i , et \mathcal{E}_i^1 et \mathcal{E}_i^2 les deux demi-espaces définis par Δ_i , alors le nuage de points \mathcal{N} peut être divisé en trois groupes :

- \mathcal{P}_i^1 : les points de \mathcal{N} qui appartiennent à \mathcal{E}_i^1
- \mathcal{P}_i^2 : les points de \mathcal{N} qui appartiennent à \mathcal{E}_i^2
- \mathcal{P}_i^Δ : les points de \mathcal{N} qui sont situés dans l'hyperplan Δ_i

Soient

- \mathcal{S}_i^1 l'ensemble des simplexes créés avec F_i et les nœuds de \mathcal{P}_i^1
- \mathcal{S}_i^2 l'ensemble des simplexes créés avec F_i et les nœuds de \mathcal{P}_i^2
- B_i^1 l'ensemble des boules circonscrites aux simplexes de \mathcal{S}_i^1
- B_i^2 l'ensemble des boules circonscrites aux simplexes de \mathcal{S}_i^2
- \tilde{B}_i^1 le sous-ensemble de boules de B_i^1 qui ne contiennent aucun point de \mathcal{P}_i^1
- \tilde{B}_i^2 le sous-ensemble de boules de B_i^2 qui ne contiennent aucun point de \mathcal{P}_i^2

Si toute boule de \tilde{B}_i^1 ne contient aucun nœud de \mathcal{P}_i^2 et toute boule de \tilde{B}_i^2 ne contient aucun nœud de \mathcal{P}_i^1 alors la face F_i est *régulière*. Sinon, F_i est dite *singulière* (fig. 4.19).

4.4.4 Correction des faces singulières

Le volume Ω ne peut être extrait du maillage \mathcal{M}_n qu'à la condition que la frontière $\delta\Omega$ ne contienne aucune face singulière [52]. Si en 2D toute frontière singulière peut être corrigée par ajout de nœuds sur les faces singulières [25], en 3D le problème de l'amélioration de la qualité d'une surface discrétisée est un problème ouvert. A ce jour, aucun algorithme ne permet d'améliorer la qualité des interfaces de façon générale. Néanmoins, il est possible de reconstruire les faces manquantes soit par des basculements d'arêtes, soit par l'ajout de nœuds (ce que nous détaillons ultérieurement). Si des points sont ajoutés sur $\delta\Omega$, la frontière est respectée, mais pas sa discrétisation.

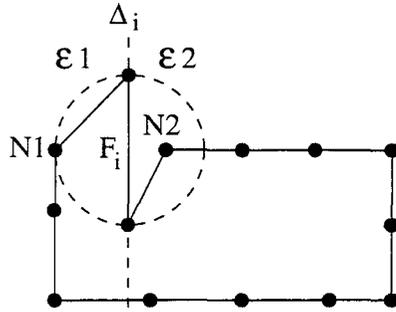


FIG. 4.19 – Exemple 2D d'une face F_i singulière: la boule circonscrite au triangle $\{F_i, N_1\}$ contient le sommet N_2 alors que N_1 et N_2 appartiennent à des demi-plans engendrés par Δ_i qui sont différents.

4.4.5 Ajout de nœuds internes

Une fois \mathcal{M}_n obtenu et $\delta\Omega$ reconstruite, il est généralement nécessaire d'ajouter des nœuds internes afin d'améliorer la description du système physique simulé (profil de dopage, de contraintes, ...) ou la qualité géométrique des éléments du maillage. Ceci n'est possible qu'à condition de veiller à la non destruction des faces de $\delta\Omega$. Pour cela, les faces imposées sont marquées et le calcul des cavités \mathcal{C}_i est modifié pour que ces faces soient conservées. Ces nœuds internes peuvent être soit fournis en entrée (s'ils sont issus d'autres simulateurs ou de générateurs de structures), soit générés par le mailleur à partir de critères géométriques [25], de critères empiriques tels que des gradients [41] ou d'estimateurs d'erreur [42, 43].

4.4.6 Récupération du maillage de Ω

Enfin, il reste à éliminer les éléments qui n'appartiennent pas à Ω . Cette phase peut être aisément réalisée à l'aide d'un algorithme de coloriage. Un premier simplexe est sélectionné et une couleur lui est attribuée. Cette couleur est propagée aux éléments voisins. Lorsqu'on détecte une face de $\delta\Omega$, l'élément voisin associé est mis à part.

Une fois tous les simplexes d'une même région coloriés, on attribue à l'élément précédemment mis à part une nouvelle couleur et on poursuit le coloriage à partir de ce simplexe.

Quand tous les éléments sont coloriés, il ne reste qu'à identifier Ω parmi les différentes régions définies par leurs couleurs.

4.5 Implantation numérique en dimension 3

Une fois la méthode de maillage décrite, il faut l'implanter sur machine. Cette phase est généralement critique car elle confronte le concept théorique d'une méthode avec la réalité numérique des ordinateurs, ce qui conduit à l'identification de coûts de calcul prohibitifs et la recherche de variantes pour accélérer la vitesse de génération et augmenter la taille des données admissibles en entrée.

4.5.1 Simplification de la dérivation

Dans notre cas, le premier problème qui apparaît est lié à la taille des données que nous manipulons. En effet, en pratique nous maillons un nombre de nœuds dont l'ordre de grandeur varie entre 10^4 et 10^5 , et générons un nombre de tétraèdres à peu près cinq fois plus grand. Or, lorsque la dérivation du maillage \mathcal{M}_i en \mathcal{M}_{i+1} fait intervenir un nœud N_{i+1} extérieur à \mathcal{M}_i , la recherche des éléments dont la boule circonscrite englobe N_{i+1} implique le calcul de

$$\det({}_iS_j) \times \Delta({}_iS_j, N_{i+1}) \quad (4.16)$$

pour tous les simplexes de \mathcal{M}_i (cf. 4.14). Si ce calcul est répété à chaque itération, cela aboutit à un calcul de cette expression de l'ordre de 10^8 à 10^{10} fois. La méthode est alors impraticable.

Boîte englobante

Pour éviter un balayage systématique de tous les tétraèdres d'un maillage \mathcal{M}_i , l'approche la plus efficace consiste à faire en sorte que les nœuds insérés se trouvent toujours à l'intérieur de \mathcal{M}_i . En effet, dans ce cas, la technique se limite à déterminer le ou les éléments ${}_iS_j$ qui contiennent le point N_{i+1} inséré, et à calculer la cavité \mathcal{C}_{i+1} à partir de cet ensemble de simplexes. Les éléments voisins sont ajoutés à la cavité tant que leurs boules circonscrites contiennent N_{i+1} .

En pratique, un cube dont le volume englobe le nuage de points \mathcal{N} est prémaillé avec six tétraèdres. Ce maillage, noté \mathcal{M}_0 , est alors dérivé à l'aide des sommets N_i . Le calcul de (4.14) se limite alors au voisinage de N_{i+1} .

Si cette approche simplifie la dérivation, elle brise la certitude de respecter les surfaces Delaunay-admissibles suite à l'interaction entre les sommets de \mathcal{M}_0 et ceux de \mathcal{N} . Toutefois, cette conséquence négative peut être atténuée si ces sommets sont suffisamment éloignés des faces F_i . En pratique, le cube

initial a des arêtes trois fois plus grandes que la plus grande arête du plus petit parallélépipède rectangle qui contient \mathcal{N} , et les points de ce nuage sont centrés dans \mathcal{M}_0 de façon à réduire cet effet parasite (fig. 4.20).

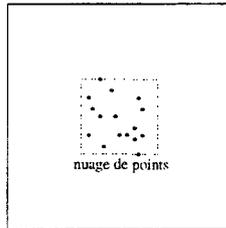


FIG. 4.20 – Cube initial englobant le nuage de points \mathcal{N} à mailler.

4.5.2 Recherche du simplexe de \mathcal{M}_i qui contient N_{i+1}

Une fois la méthode de dérivation optimisée, il reste à déterminer le ou les simplexes ${}_iS_j$ de \mathcal{M}_i qui contiennent³ le nœud N_{i+1} afin d'initialiser la cavité \mathcal{C}_{i+1} . Pour cela, un élément ${}_iS_{j_0}$ est "choisi" à partir duquel la recherche est amorcée. Cette recherche consiste à déterminer la présence d'une face séparatrice dans le tétraèdre atteint. S'il n'y en a aucune, nous avons trouvé le simplexe cherché. Sinon, il faut poursuivre la recherche avec l'élément voisin par rapport à la face séparatrice détectée (fig. 4.21)

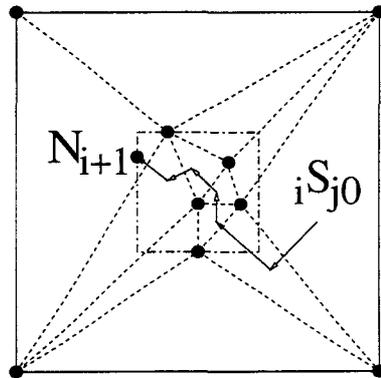


FIG. 4.21 – Recherche du simplexe qui contient le nœud N_{i+1} en partant d'un élément ${}_iS_{j_0}$ et en parcourant les éléments voisins de face séparatrice en face séparatrice.

³ par contenir, il faut comprendre dont le volume contient et non pas qui a pour sommet.

Configuration cyclique

Bien que cet algorithme soit simple et évident, il peut diverger si le maillage contient une configuration cyclique c'est à dire un jeu de simplexes tels que, de face séparatrice en face séparatrice, on finisse par retomber sur l'élément par lequel la recherche a été entamée (fig. 4.22).

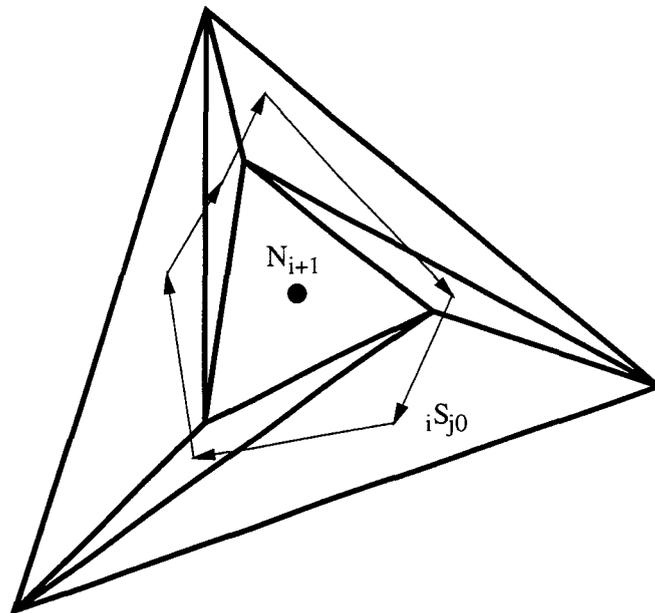


FIG. 4.22 – Configuration cyclique dans laquelle il est possible de parcourir les simplexes de proche en proche en ne passant que par des faces séparatrices sans jamais atteindre l'élément qui contient le nœud N_{i+1} .

Pour éviter de sombrer dans une boucle infinie, une solution possible consiste à calculer toutes les faces séparatrices puis à tirer au sort celle qui fournit l'élément voisin qui va remplacer le tétraèdre courant dans ce calcul. Cette technique peut être accélérée en tirant au sort l'ordre dans lequel les faces sont considérées, ce qui permet d'éviter l'évaluation systématique de toutes les faces des tétraèdres considérés.

Accélération de l'évaluation des faces séparatrices

Le calcul des faces séparatrices basé sur le calcul de déterminant (éq. 4.13 p. 88), relativement coûteux, est équivalent à calculer un produit mixte de vecteurs. En effet, Si nous notons A , B et C les trois sommets d'une face

triangulaire, alors le signe de

$$\overrightarrow{AN_{i+1}} \cdot (\overrightarrow{AB} \wedge \overrightarrow{AC}) \quad (4.17)$$

détermine la position de N_{i+1} par rapport à la face $\{A, B, C\}$.

L'intérêt de cette formulation est de faire apparaître le vecteur normal à la face $\{A, B, C\}$. En effet, dans l'évaluation du déterminant $\det(S, x_i, x_j)$ ce produit vectoriel est implicitement recalculé. Or, nous n'avons besoin de l'évaluer qu'une seule fois : lorsque la face est considérée pour la première fois dans l'algorithme de recherche de l'élément qui contient N_{i+1} . Il est donc préférable de calculer et de mémoriser les normales aux faces des tétraèdres lors de la création des simplexes au sein des boules \mathcal{B}_{i+1} .

Optimisation du choix du premier élément

Si l'amélioration de la vitesse de convergence vers l'élément qui se trouve au cœur de la cavité \mathcal{C}_{i+1} passe par la simplification des opérations qui interviennent dans la détermination de cet élément, elle passe également par la réduction du nombre d'appels à ces opérations.

En effet, plus le nombre de simplexes à parcourir pour atteindre le cœur de la cavité est petit, plus l'algorithme est rapide. Cette constatation conduit à l'utilisation d'un treillis qui fournit un premier élément ${}_iS_{j_0}$ "proche" de l'élément que nous cherchons.

En pratique, la boîte englobante est décomposée en 32^3 cubes auxquels sont associés des nœuds et non des tétraèdres (fig. 4.23). Lorsque N_{i+1} est

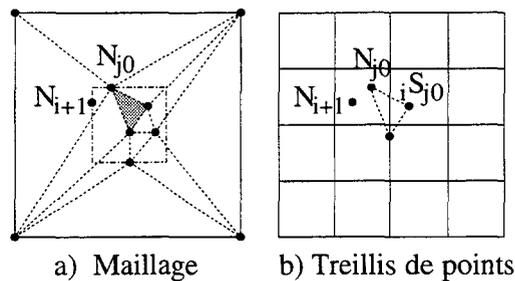


FIG. 4.23 -a) insertion du nœud N_{i+1} dans un maillage et b) détermination du simplexe ${}_iS_{j_0}$ proche de N_{i+1} via un treillis.

inséré dans le maillage, ses coordonnées sont utilisées pour déterminer le cube du treillis à considérer. Le nœud N_{j_0} associé à ce cube sert alors à sélectionner l'élément ${}_iS_{j_0}$: ce simplexe est un des éléments qui possède N_{j_0} pour sommet.

La raison pour laquelle le treillis est composé de nœuds et non de tétraèdres tient au fait que certains éléments sont détruits au cours des dérivations. L'utilisation de tableaux de simplexes impliquerait un traitement soigneux et coûteux en temps CPU pour maintenir une information cohérente. Il est donc préférable de stocker les sommets du maillage car ils sont permanents au cours des dérivations. L'obtention du simplexe ${}_iS_{j_0}$ à partir d'un sommet est immédiate si tout nœud inséré dans le maillage mémorise un des simplexes de la boule construite lors de son insertion. Cette information doit cependant être mise à jour à chaque dérivation. Cet objectif est aisément atteint en affectant à tous les sommets appartenant aux boules \mathcal{B}_{i+1} les simplexes de ces boules. Ainsi, tous les nœuds dont un des simplexes est éliminé lors du calcul de la cavité sont mis à jour.

Le treillis, initialement vide, est rempli au fur et à mesure que les maillages \mathcal{M}_i sont dérivés : chaque fois qu'un nouveau nœud est inséré dans le maillage, il est placé dans la case du treillis qui correspond à sa position dans le volume défini par la boîte englobante. On peut évidemment mémoriser plusieurs sommets par case et choisir le meilleur élément de départ (en prenant le sommet mémorisé le plus proche du nœud à insérer par exemple). Le nombre de points mémorisables dans chacune des cases peut également varier en fonction de la densité de points dans chacune des régions couvertes par ces cases. Dans notre cas, nous nous sommes limités à un point par case.

Notons qu'il n'est intéressant de faire appel à ce fournisseur de raccourcis que lorsque le nombre d'éléments dans les maillages à dériver est important et que le treillis contient suffisamment de données pour fournir un élément proche satisfaisant.

4.5.3 Importance de la précision numérique

Nous avons vu que l'appartenance d'un point à la boule ${}_iB_j$ circonscrite à un tétraèdre ${}_iS_j$ peut être décidée en calculant le signe de l'expression (4.14) page 88. Cette propriété, capitale pour maintenir les maillages cohérents, rend la précision numérique primordiale dans l'évaluation de cette grandeur. Cependant, lorsque le nœud N_i est très proche de la surface d'une sphère ${}_iB_j$, le déterminant tend vers 0. Toute erreur de calcul à ce stade conduit à la production d'un maillage \mathcal{M}_{i+1} non conforme (fig. 4.24). Il en est de même pour le calcul des faces séparatrices d'un tétraèdre, basé sur l'expression (4.13 p. 88) ou le produit mixte de vecteurs.

La seule solution pour garantir un calcul précis de ces expressions est d'abandonner les coordonnées numériques flottantes au profit de coordonnées numériques entières. Il reste à veiller à ce que la plage de valeurs utilisées ne conduise pas à des cas d'overflow. En dimension trois, le déterminant $\Delta({}_iS_j, N_{i+1})$ est de dimension quatre, ce qui implique vingt quatre sommes

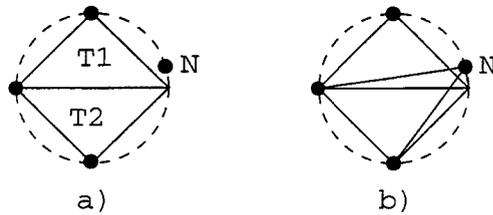


FIG. 4.24 - *Maillage non conforme suite à une erreur de précision quant à l'appartenance de N à la boule circonscrite aux éléments T_1 et T_2 . a) le maillage avant dérivation, et b) le maillage dérivé non conforme: le calcul a conclu que la boule circonscrite à T_2 contenait N alors que celle circonscrite à T_1 ne le contenait pas (bien que les deux sphères soient confondues).*

de quatre produits (la première ligne de la matrice contenant des distances au carré). Si on pose X la plus grande coordonnée admissible, la valeur maximale de $\Delta({}_iS_j, N_{i+1})$ peut être majorée de façon grossière en considérant l'expression

$$\begin{vmatrix} X^2 & X^2 & X^2 & X^2 \\ X & X & X & X \\ X & X & X & X \\ X & X & X & X \end{vmatrix} \quad (4.18)$$

et en supposant que tous les termes s'additionnent

$$\Delta({}_iS_j, N_{i+1}) \leq 24 \times X^5 \quad (4.19)$$

Comme une architecture k -bits fournit 2^{k-1} valeurs positives disponibles, les erreurs dues au dépassement des capacités arithmétiques sont évitées si la valeur maximale admise est :

$$\left[\sqrt[5]{\frac{2^{k-1}}{24}} \right] \quad (4.20)$$

De même, $\det({}_iS_j)$, déterminant d'ordre trois, peut être majoré par

$$\det({}_iS_j, N_k, N_{i+1}) \leq 6 \times X^3 \quad (4.21)$$

Ceci nous amène, dans le cas des architectures 64 bits (les plus fréquemment rencontrées), aux plages de coordonnées admissibles $[0..3288]$ pour $\Delta({}_iS_j, N_{i+1})$ et $[0..1003745]$ pour $\det({}_iS_j, N_k, N_{i+1})$.

Si la seconde plage est acceptable, la première ne répond absolument pas à nos besoins car cela réduit la distance minimale entre deux nœuds du maillage à 60 \AA , dans le cas de la simulation d'une jonction de $20 \mu\text{m}$. Le calcul de l'appartenance à une boule n'est donc pas praticable avec $\Delta({}_iS_j, N_{i+1})$.

4.5.4 Approche ε -Delaunay

Le coût du calcul du critère de la sphère vide en temps CPU et les limitations qu'il impose sur la plage de coordonnées admissibles ont conduit à la recherche d'une approche plus souple au détriment de la précision [51]. Cette technique, appelée ε -Delaunay, consiste à calculer l'appartenance à une boule ${}_iB_j$ en commettant une erreur de calcul et en corrigeant ses effets.

Calcul approximatif de $\det({}_iS_j, N_{i+1}) \times \Delta({}_iS_j, N_{i+1})$

La première démarche consiste à réintroduire les coordonnées flottantes pour évaluer (4.14). Les erreurs d'arrondis rendent alors le calcul de cette expression incertain lorsque le résultat est proche de 0. Dans ce cas, un point N_{i+1} situé dans la boule ouverte ${}_iB_j$ mais très proche de la frontière de cette boule est considéré comme extérieur à cette boule (fig. 4.25). Cette situation se traduit numériquement par

$$\det({}_iS_j, N_{i+1}) \times \Delta({}_iS_j, N_{i+1}) < 0 \quad \text{et} \quad |\Delta({}_iS_j, N_{i+1})| > \varepsilon \quad (4.22)$$

où ε représente une valeur numérique qui garantit l'appartenance de N_{i+1} à ${}_iB_j$ malgré les erreurs d'arrondi. Toutefois, si cette approche permet d'avoir une dynamique numérique suffisante pour effectuer des simulations réalistes, elle ne réduit pas le coût du calcul de la propriété de la sphère vide.

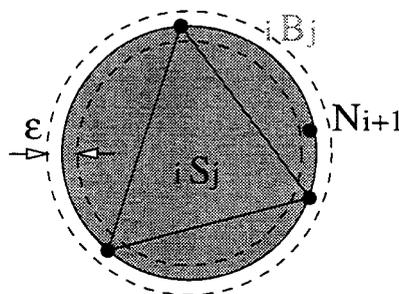


FIG. 4.25 – Le nœud N_{i+1} , situé à une faible distance de la surface de la boule ${}_iB_j$ circonscrite au simplexe ${}_iS_j$, est considéré hors de ${}_iB_j$.

Transport des centres de sphères

L'appartenance de N à une boule circonscrite ${}_iB_j$, basée sur un calcul de déterminant dans la variante précédente, peut également être évaluée à l'aide du centre ${}_iO_j$ et du rayon ${}_i\rho_j$ de ${}_iB_j$. On a alors

$$\{N_{i+1} \in {}_iB_j\} \iff \left\{ \overrightarrow{{}_iO_j N_{i+1}}^2 \leq {}_i\rho_j^2 \right\} \quad (4.23)$$

L'évaluation du critère ε -Delaunay, réduite au calcul d'une distance au carré, ne limite alors plus la valeur des coordonnées de façon prohibitive, même lorsque le calcul est réalisé à l'aide d'entiers.

Il reste cependant à déterminer les coordonnées de ${}_iO_j$ et la valeur de ${}_i\rho_j$, ce qui revient à résoudre un système de trois équations à trois inconnues. Ce type de calcul conduit inéluctablement à une approximation des coordonnées de ${}_iO_j$ et de la valeur de ${}_i\rho_j$, donc à une imprécision quant à l'appartenance de N à ${}_iB_j$. Si dans l'approche précédente les données sont exactes mais le calcul de la propriété ε -Delaunay imprécis, cette variante-ci effectue un calcul précis à l'aide de données approximatives. Notons que si dans le cas précédent il est possible de garantir l'appartenance de N à la boule circonscrite lorsque le calcul effectué répond "vrai", dans le cas présent c'est impossible à cause du déplacement du centre de la sphère de O vers \tilde{O} (fig. 4.26).

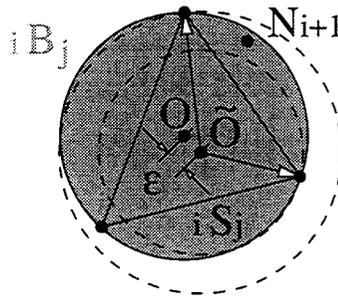


FIG. 4.26 - Indétermination sur l'appartenance d'un point N_{i+1} à une boule ${}_iB_j$ (circonscrite au simplexe ${}_iS_j$) quand la position du centre de cette boule et la valeur de son rayon sont approximatives.

A priori, le gain peut sembler nul, puisque l'évaluation d'un système d'équations à trois inconnues est coûteux en temps de calcul. Cela tient au fait que l'augmentation de la vitesse d'évaluation du critère ε -Delaunay passe par une astuce qui consiste précisément à ne pas résoudre un système de trois équations à trois inconnues mais à transporter les centres de sphères au cours des dérivations [50].

En effet, les tétraèdres de \mathcal{B}_{i+1} sont construits à partir des faces des simplexes de \mathcal{C}_{i+1} , dont les centres sont déjà connus. Posons (fig. 4.27)

- ${}_iS_j$ le simplexe de la cavité \mathcal{C}_{i+1}
- ${}_iO_j$ le centre de la sphère circonscrite à ${}_iS_j$
- ${}_iF_j^k$ la k -ième face de ${}_iS_j$
- ${}_i\vec{n}_j^k$ le vecteur unitaire normal à la face ${}_iF_j^k$
- ${}_{i+1}S_j^k$ le simplexe de la boule \mathcal{B}_{i+1} construit à partir de ${}_iF_j^k$ et de N_{i+1}
- ${}_{i+1}O_j^k$ le centre de la sphère circonscrite à ${}_{i+1}S_j^k$

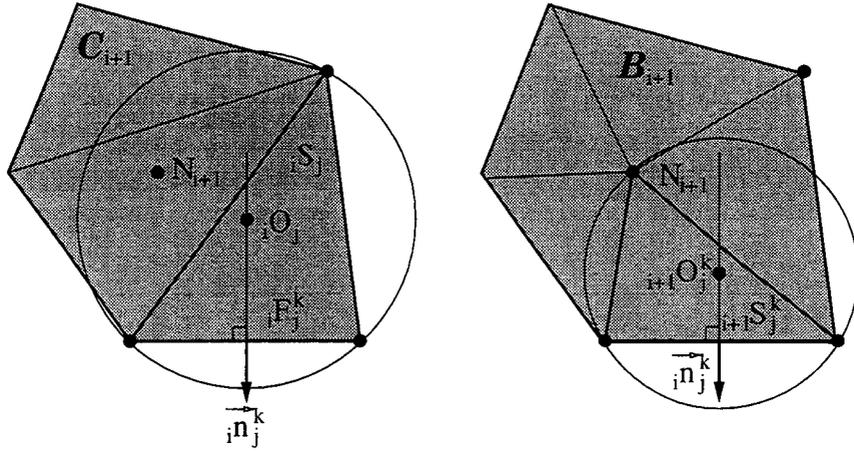


FIG. 4.27 – Transport du centre des sphères circonscrites aux simplexes de la cavité \mathcal{C}_{i+1} vers ceux des sphères circonscrites aux simplexes de la boule \mathcal{B}_{i+1} .

Le calcul des coordonnées de ${}_{i+1}O_j^k$ à partir de celles de ${}_iO_j$ découle du fait que le centre de la sphère circonscrite à un tétraèdre se situe sur les droites perpendiculaires aux faces triangulaires qui passent par l'orthocentre de ces faces. Par suite

$$\exists \lambda \in \mathbb{R} \text{ tel que } \overrightarrow{{}_iO_j {}_{i+1}O_j^k} = \lambda \times {}_i\vec{n}_j^k \quad (4.24)$$

que nous pouvons réécrire

$$\exists \lambda \in \mathbb{R} \text{ tel que } {}_{i+1}O_j^k = {}_iO_j + \lambda \times {}_i\vec{n}_j^k \quad (4.25)$$

Soit A un point quelconque de ${}_iF_j^k$ et M le milieu de $[AN_{i+1}]$ (fig. 4.28).

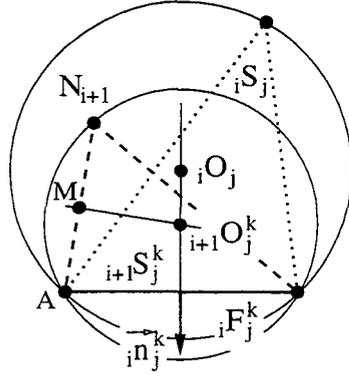


FIG. 4.28 – Calcul du centre ${}_{i+1}O_j^k$ à partir du centre ${}_iO_j$ et du vecteur ${}_i\vec{n}_j^k$ normal à la face ${}_iF_j^k$.

Nous avons alors

$$\|\overrightarrow{{}_iO_j A}\| = {}_i\rho_j \quad (4.26)$$

$$\overrightarrow{{}_{i+1}O_j^k M} \cdot \overrightarrow{A N_{i+1}} = 0 \quad (4.27)$$

$$\overrightarrow{{}_iO_j M} = \frac{\overrightarrow{{}_iO_j N_{i+1}} + \overrightarrow{{}_iO_j A}}{2} \quad (4.28)$$

Or, nous avons également la relation vectorielle suivante

$$\overrightarrow{{}_{i+1}O_j^k M} = \overrightarrow{{}_{i+1}O_j^k {}_iO_j} + \overrightarrow{{}_iO_j M} \quad (4.29)$$

$$= \overrightarrow{{}_iO_j M} - \lambda \times {}_i\vec{n}_j^k \quad (4.30)$$

Les équations (4.27) et (4.30) nous donnent

$$\overrightarrow{A N_{i+1}} \cdot (\overrightarrow{{}_iO_j M} - \lambda \times {}_i\vec{n}_j^k) = 0 \quad (4.31)$$

qui, avec l'équation (4.28), conduit à

$$\left(\overrightarrow{{}_iO_j N_{i+1}} - \overrightarrow{{}_iO_j A} \right) \cdot \left(\frac{\overrightarrow{{}_iO_j N_{i+1}} + \overrightarrow{{}_iO_j A}}{2} - \lambda \times {}_i\vec{n}_j^k \right) = 0 \quad (4.32)$$

Finalement, l'équation (4.26) et l'expression (4.32) aboutissent à

$$\frac{\|\overrightarrow{{}_iO_j N_{i+1}}\|^2 - {}_i\rho_j^2}{2} - \lambda \times {}_i\vec{n}_j^k \cdot \overrightarrow{A N_{i+1}} = 0 \quad (4.33)$$

ce qui permet de déterminer la valeur de λ

$$\lambda = \frac{\|\overrightarrow{{}_iO_j N_{i+1}}\|^2 - {}_i\rho_j^2}{2 \times \overrightarrow{A N_{i+1}} \cdot {}_i\vec{n}_j^k} \quad (4.34)$$

En conclusion, nous sommes passés de la résolution d'un système de trois équations à trois inconnues à celle d'une unique équation à une inconnue : λ . Les expressions finales du centre et du rayon des sphères circonscrites qui apparaissent au cours de la dérivation d'un maillage \mathcal{M}_i vérifient donc

$${}_{i+1}O_j^k = {}_iO_j + \frac{\|\overrightarrow{{}_iO_j N_{i+1}}\|^2 - {}_i\rho_j^2}{2 \times \overrightarrow{AN_{i+1}} \cdot {}_i\vec{n}_j^k} \times {}_i\vec{n}_j^k \quad (4.35)$$

$${}_{i+1}\rho_j^k = \|\overrightarrow{{}_{i+1}O_j^k N_{i+1}}\| \quad (4.36)$$

Perte de l'étoilement de la cavité \mathcal{C}_{i+1}

Si ces techniques permettent d'élargir la plage de coordonnées admissibles pour les nœuds du maillage, elles conduisent à la rupture de deux propriétés :

- la propriété de la sphère vide
- l'étoilement des cavités \mathcal{C}_{i+1}

Si la première propriété n'est pas indispensable pour nos simulations, elle entraîne la perte de la seconde propriété qui, elle, garantissait la conformité des maillages \mathcal{M}_i nécessaire à nos calculs. La cavité \mathcal{C}_{i+1} doit désormais être corrigée de sorte que tout tétraèdre qui prive cet ensemble de la propriété de l'étoilement soit retiré de \mathcal{C}_{i+1} (fig 4.29).

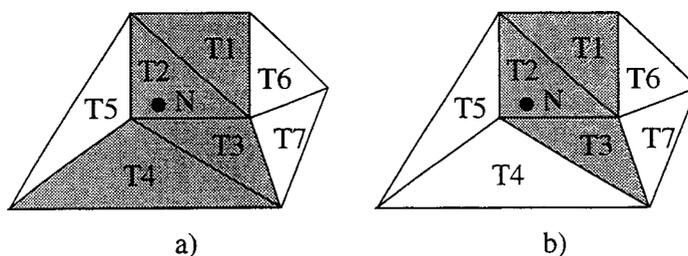


FIG. 4.29 -a) Cavité $\{T_1, T_2, T_3, T_4\}$ non étoilée par rapport au nœud N et b) élimination de T_4 pour restituer la propriété d'étoilement.

Pour atteindre cet objectif, il suffit de parcourir les faces extérieures de \mathcal{C}_{i+1} . Lorsqu'une face ${}_iF_j^k$ est séparatrice, le simplexe associé est retiré de la cavité et l'ensemble des faces extérieures de \mathcal{C}_{i+1} sont mises à jour. La vérification se poursuit tant qu'une face séparatrice est détectée et qu'un élément est ôté de la cavité.

4.5.5 Création de la boule \mathcal{B}_{i+1}

Le calcul de la cavité implanté, la seconde étape consiste à créer les tétraèdres de la boule. Si cette phase est moins sensible que la précédente, elle n'en reste pas moins importante. En particulier, c'est au cours de cette étape que la mise à jour des connexions entre tétraèdres est effectuée afin de permettre un rapide parcours des éléments de voisin en voisin.

Carte du voisinage d'un simplexe

La carte de voisinage fournit, pour chaque tétraèdre, l'élément voisin par rapport à un nœud et la position des nœuds en commun dans la structure de données voisine. Ainsi, dans le cas simplifié d'un triangle qui comprend trois nœuds $\{A, B, C\}$ (le sommet A étant le premier sommet et C , le dernier) et est entouré de trois éléments $\{D_1, C, B\}$, $\{C, A, D_2\}$ et $\{A, D_3, B\}$ (fig. 4.30), le graphe de connexion vaut :

$$C = \begin{bmatrix} 1 & 3 & 2 \\ 2 & 3 & 1 \\ 1 & 3 & 2 \end{bmatrix} \quad (4.37)$$

Dans cette table de connectivité, le numéro de ligne correspond au numéro du voisin et le numéro de la colonne au sommet dont on cherche la position dans cet élément voisin. Par exemple, le sommet B du triangle $\{A, B, C\}$, qui est le deuxième sommet de ce triangle, est le troisième sommet du triangle $\{D_1, C, B\}$ car $C[1, 2] = 3$. De même, le point C de $\{A, B, C\}$, qui est le troisième sommet de ce triangle, est le premier sommet du triangle $\{C, A, D_2\}$ puisque $C[2, 3] = 1$.

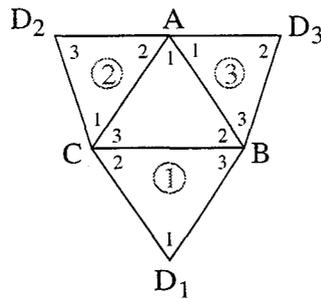


FIG. 4.30 – Triangle avec trois voisins et la position de chacun des sommets dans la structure interne de chacun de ces triangles indiquée dans chacun des angles.

Bien que cette carte des connectivités ne soit pas indispensable, elle accélère fortement la recherche des voisins, mais surtout elle permet de connecter facilement les éléments de la boule entre eux ainsi qu'à l'ensemble des simplexes de \mathcal{M}_i qui restent intacts dans \mathcal{M}_{i+1} [50].

4.6 Modifications locales du maillage

Une fois le maillage obtenu, il peut être nécessaire de réagencer certaines connexions entre sommets. Par exemple, la recherche d'une implantation efficace du cœur du mailleur a entraîné la perte du critère de Delaunay. Si nous avons négligé cette propriété lors de cette étude⁴, des résultats récents indiquent que la dégradation des angles entre faces perturbe la convergence des solveurs au point qu'ils fournissent des résultats non physiques [72]. Or, la propriété de la sphère vide est directement liée à cette relation d'angle entre faces dans \mathbb{R}^2 , alors que dans \mathbb{R}^3 le critère de Delaunay n'est pas suffisant. Ce constat indique qu'il est souhaitable de pouvoir modifier la connexion entre les sommets du maillage afin d'augmenter la qualité géométrique des tétraèdres. Couramment utilisé lorsqu'on veut restituer la propriété de la sphère vide à un maillage, le basculement d'arêtes est, parmi les solutions possibles, une des plus efficaces [62, 63].

De même, lorsqu'une zone contient des sommets en surabondance ou en sous-nombre, il est nécessaire d'adapter la quantité de nœuds. Si l'ajout de sommets est immédiat avec le mailleur implanté, la réduction de la quantité de nœuds, elle, fait appel à une technique spécifique. Nous allons à présent proposer différentes méthodes de modification locale de maillage qui diffèrent de l'insertion nodale.

4.6.1 Basculement d'arête

La première des stratégies consiste à modifier les connexions nodales. Cette technique, qui n'existe que sous une forme dans \mathbb{R}^2 (fig. 4.31), connaît trois formes distinctes dans \mathbb{R}^3 . Ces différents cas dépendent du nombre de tétraèdres dans les configurations initiales et finales.

4. achevée en Décembre 1997

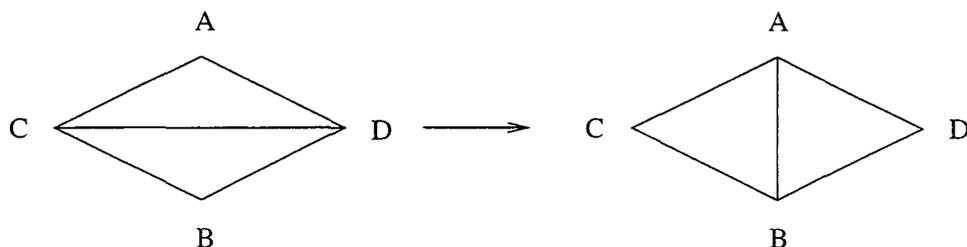


FIG. 4.31 – Remaillage d'un convexe formé de deux triangles $\{A, C, D\}$ et $\{B, C, D\}$ en deux triangles $\{A, B, C\}$ et $\{A, B, D\}$ via le basculement d'une arête.

Opérateur $2 \rightarrow 3$

La première méthode de basculement d'arête en 3D, appelée opérateur $2 \rightarrow 3$, consiste à remailler deux tétraèdres formant un domaine convexe en trois tétraèdres (fig. 4.32). La face triangulaire $\{C, D, E\}$ est ici remplacée

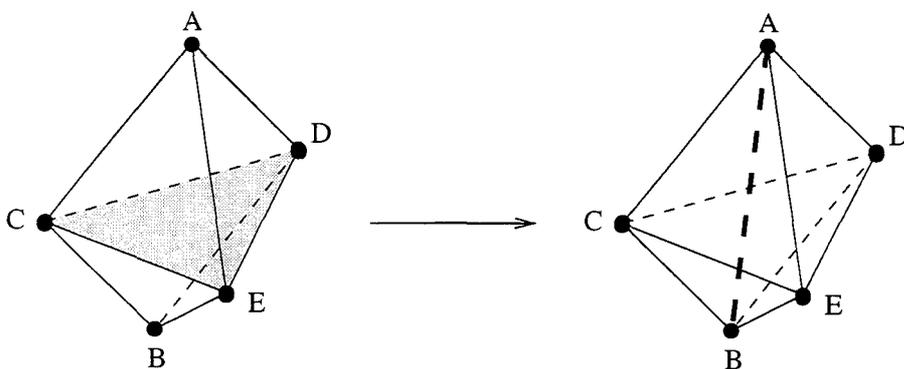


FIG. 4.32 – Remaillage d'un convexe formé de deux tétraèdres $\{A, C, D, E\}$ et $\{B, C, D, E\}$ en trois tétraèdres $\{A, B, C, D\}$, $\{A, B, C, E\}$ et $\{A, B, D, E\}$ via le basculement d'une arête.

par l'arête $\{A, B\}$. Notons que pour pouvoir appliquer cet opérateur, il est indispensable que $\{A, B, C, D, E\}$ soit convexe. Cette propriété est vérifiée si les faces $\{A, C, D\}$, $\{A, C, E\}$ et $\{A, D, E\}$ ne constituent pas des faces séparatrices pour B (fig. 4.33).

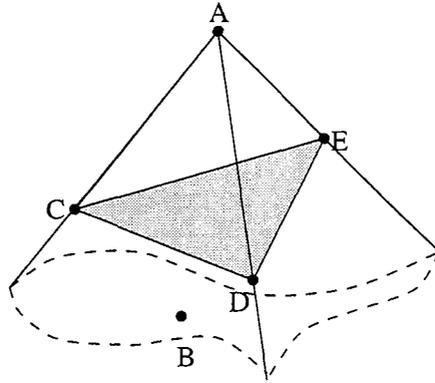


FIG. 4.33 – La condition d'application de l'opérateur $2 \rightarrow 3$ est que B appartienne au cône $\{A, \vec{AC}, \vec{AD}, \vec{AE}\}$.

Opérateur $3 \rightarrow 2$

La seconde méthode de basculement d'arête en 3D, appelée opérateur $3 \rightarrow 2$, correspond à l'opérateur inverse de l'opérateur $2 \rightarrow 3$. Il transforme donc l'arête $\{A, B\}$ du convexe $\{A, B, C, D, E\}$ en une face $\{C, D, E\}$. Contrairement à l'opérateur précédent, il est applicable pour toute coquille⁵ de trois tétraèdres, c'est à dire tout enroulement de trois tétraèdres autour d'une arête commune $\{A, B\}$.

Opérateur $4 \rightarrow 4$

Enfin, l'opérateur $4 \rightarrow 4$ remaille une coquille de quatre tétraèdres en une autre coquille de quatre tétraèdres (fig. 4.34). Contrairement aux deux opérateurs précédents, ce basculement-ci transforme une arête en une autre arête. De plus, il existe deux configurations finales possibles suivant le choix de la nouvelle arête.

4.6.2 Déraffinement de maillage

Au contraire du basculement d'arête, qui remaille localement une structure sans modifier ni le nombre de nœuds ni leurs positions, le déraffinement de maillage réduit la quantité de sommets. Une technique simple pour ôter

5. shell

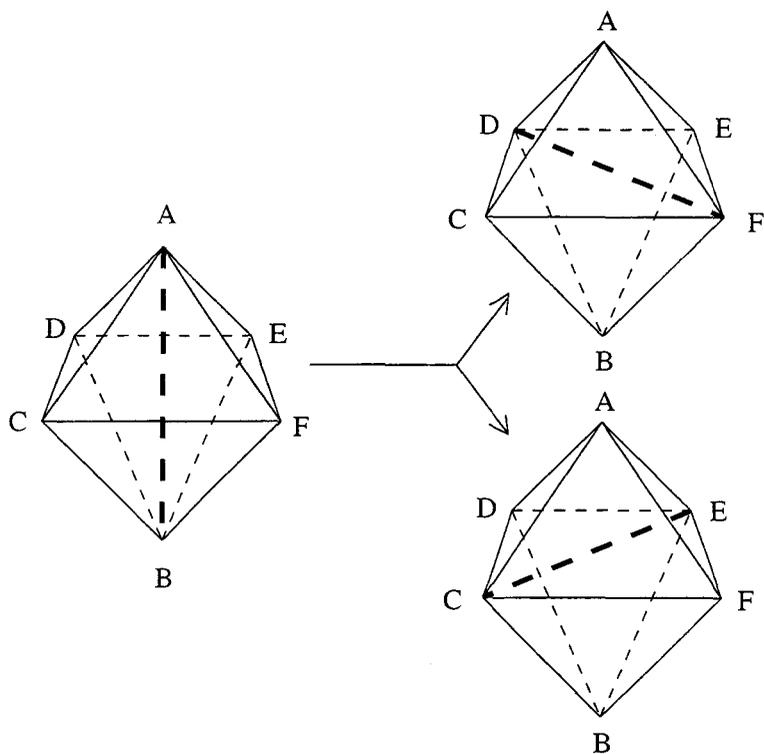


FIG. 4.34 - Application de l'opérateur $4 \rightarrow 4$ à un ensemble de quatre tétraèdres.

un nœud N du maillage consiste à calculer l'ensemble \mathcal{B}_N des simplexes qui ont ce point pour sommet et à chercher parmi les autres sommets de ces éléments, un nœud P visible de toutes les faces extérieures à cet ensemble (fig. 4.35).

Notons que les faces qui contiennent le sommet P génèrent des éléments plats qui sont ôtés du maillage. Cependant, si en 2D ce cas de figure est trivial, en 3D il faut veiller à ce que les éléments plats n'aient pas leurs arêtes opposées croisées (fig. 4.36).

Pour éviter ce problème, il faut que les éléments qui s'aplatissent le fassent selon le schéma (3.5a p. 37) et non le schéma (3.5e p. 37). Enfin, il existe des boules qui ne peuvent être déraffinées, telles que celles dont le nœud N est un nœud de Steiner. En effet, ces nœuds interviennent dans des polyèdres qui ne sont pas maillables sans l'ajout d'un sommet interne (fig. 4.37).

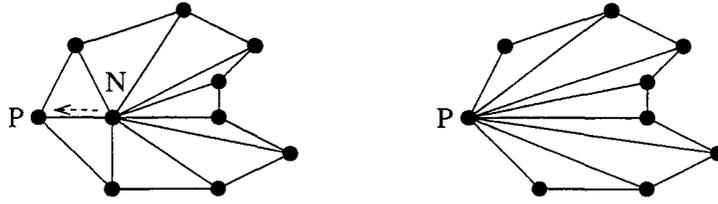


FIG. 4.35 - Déraffinement de maillage par attraction du sommet N par un sommet P visible de toutes les faces extérieures à la boule \mathcal{B}_N .

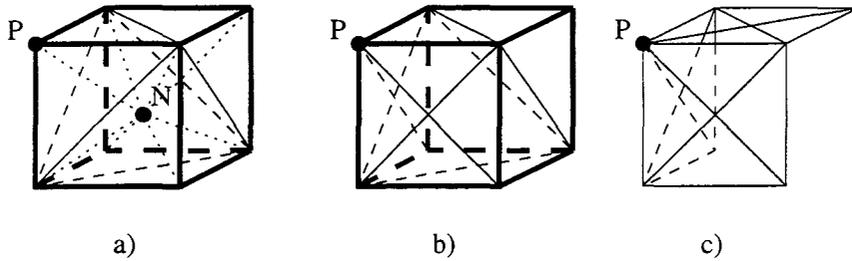


FIG. 4.36 - Déraffinement de maillage par attraction du sommet N (a-b) avec génération de trois tétraèdres plats croisés (c).

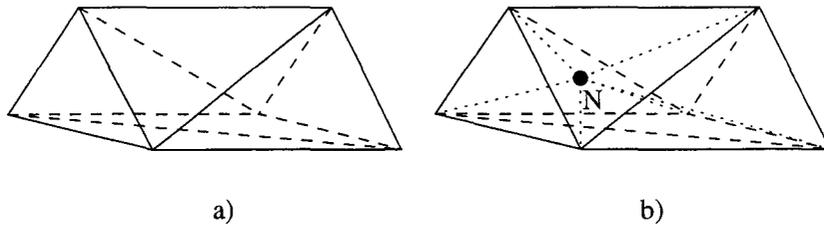


FIG. 4.37 - a) Prisme dont la frontière triangulée ne permet pas un maillage tétraédrique sans l'ajout d'un nœud de Steiner ; b) maillage volumique obtenu avec un sommet interne N .

4.7 Conclusion

Ce chapitre a parcouru à la fois d'un point de vue théorique et d'un point de vue pratique le cœur du mailleur que nous avons implanté. Ce double aspect dans la réalisation d'un mailleur met en valeur le clivage entre sa conception théorique, pensée dans \mathbb{R}^d , et son implantation dans un espace discret de dimension finie.

Cette méthode de maillage implantée, il reste à contrôler la présence des enveloppes et à reconstruire les faces qui ne sont pas présentes dans le maillage final, soit parce qu'elles ne sont pas Delaunay-admissibles, soit parce que les choix d'implantation ont réduit la capacité de ce mailleur à respecter des faces Delaunay-admissibles.

Chapitre 5

Respect des frontières

Une fois le nuage de points maillé, il reste à identifier les enveloppes des différents domaines. Cette étape se réduit à la recherche des arêtes et des faces qui les composent dans la mesure où les frontières régulières et bien décrites sont respectées (cf 4.4.1 et 4.4.3 pages 90 et 92). Cependant, les exigences de la simulation et les difficultés de mise en œuvre ont entraîné des modifications dans la méthode initialement conçue, modifications qui se traduisent par la perte de propriétés telles que le respect des frontières. De plus, les déformations que subissent les frontières au cours de la simulation réduisent la propension de ces interfaces à respecter ces propriétés. Nous avons donc intégré une phase de recherche des arêtes et des faces imposées, et implanté des outils pour forcer celles qui sont absentes du maillage final.

5.1 Causes de l'absence d'une face d'un maillage

En pratique, le fait qu'une face $\{A, B, C\}$ ne soit pas présente dans un maillage tient au fait :

- qu'une des arêtes n'apparaît pas dans le maillage,
- qu'une des arêtes est tronçonnée ou segmentée,
- que la face $\{A, B, C\}$ est traversée par une ou plusieurs arêtes,
- ou encore que des nœuds sont situés sur la surface triangulaire $\{A, B, C\}$.

Etudions à présent ces lacunes et leurs conséquences sur la simulation.

5.1.1 Absence d'une arête $\{A, B\}$ d'un maillage

Lorsqu'une arête $\{A, B\}$ n'apparaît pas dans un maillage, cela peut être dû à la présence d'une ou plusieurs faces entre les sommets A et B (fig. 5.1), à la présence d'une ou plusieurs arêtes entre ces deux sommets (fig. 5.2), à la présence de nœuds entre ces sommets (fig. 5.3), ou encore à la combinaison de ces différents cas de figure.

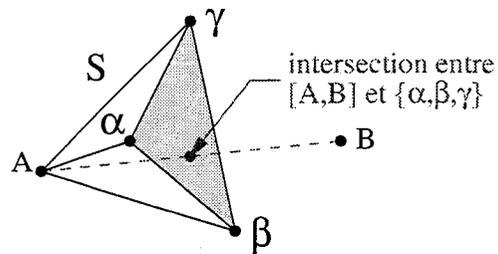


FIG. 5.1 – Absence d'une arête $\{A, B\}$ suite à la présence d'une face $\{\alpha, \beta, \gamma\}$ entre ces deux sommets.

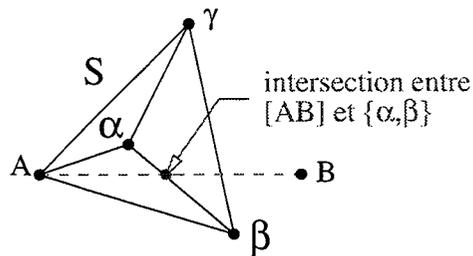


FIG. 5.2 – Absence d'une arête $\{A, B\}$ suite à la présence d'une arête $\{\alpha, \beta\}$ entre ces deux sommets.

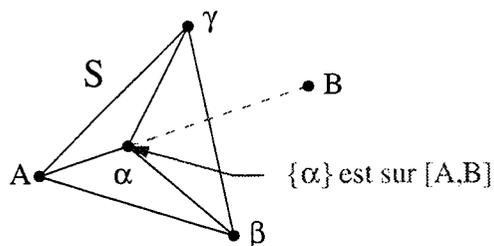


FIG. 5.3 – Absence d'une arête $\{A, B\}$ suite à la présence d'un nœud $\{\alpha\}$ entre ces deux sommets.

Notion de tube

Lorsque l'absence d'une arête $\{A, B\}$ est due à la présence de faces entre les sommets A et B , on appelle l'ensemble de tétraèdres consécutifs qui contiennent ces faces **un tube** [73] (fig. 5.4). Le forçage de l'arête $\{A, B\}$ (i.e. sa reconstruction) implique alors de remailler les simplexés qui forment ce tube.

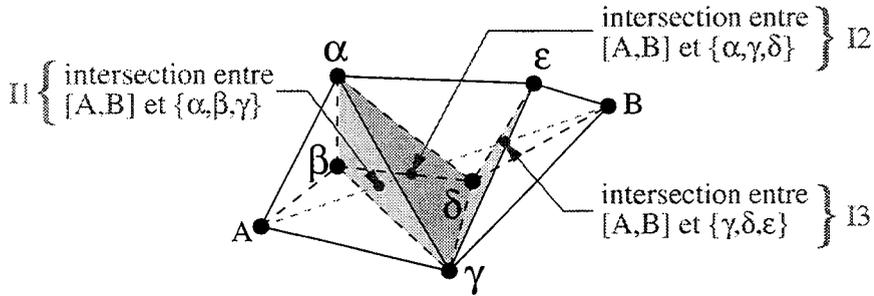


FIG. 5.4 - Tube contenant 3 tétraèdres dont les faces $\{\alpha, \beta, \gamma\}$, $\{\alpha, \gamma, \delta\}$ et $\{\gamma, \delta, \epsilon\}$ coupent $[A, B]$ en I_1 , I_2 et I_3 provoquant ainsi l'absence de $\{A, B\}$.

Notion de coquille

Une **coquille locale** est un ensemble de tétraèdres qui s'enroulent autour d'une arête. Lorsqu'une arête $\{\alpha, \beta\}$ se trouve entre les sommets A et B d'une arête manquante, le forçage de l'arête $\{A, B\}$ nécessite le remaillage des éléments de la coquille locale engendrée par $\{\alpha, \beta\}$ [73] (fig 5.5).

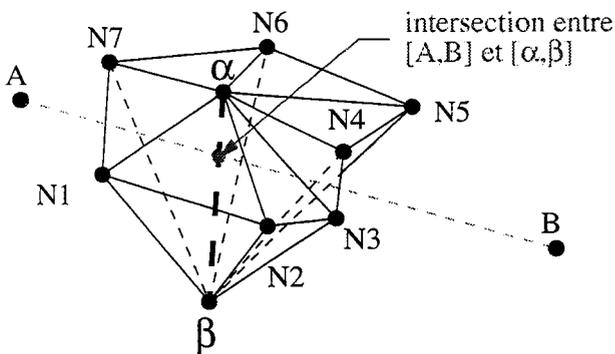


FIG. 5.5 - Coquille locale de 7 tétraèdres engendrée par une arête $\{\alpha, \beta\}$ qui coupe le segment $[A, B]$ et s'oppose à la présence de l'arête $\{A, B\}$.

De façon générale, on appelle **coquille**, ou encore **coquille globale**, un ensemble de tétraèdres comprenant une coquille locale et, éventuellement, des tubes et d'autres coquilles locales [73] (fig 5.6).

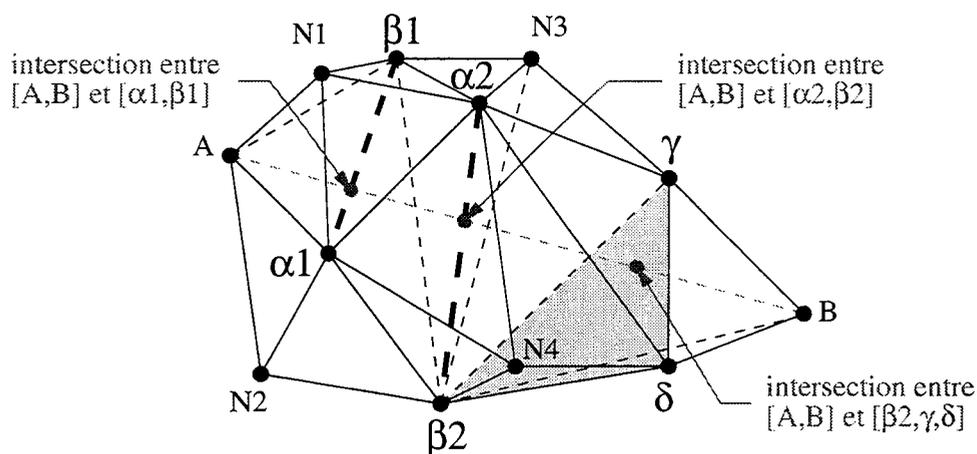


FIG. 5.6 – Coquille composée d'une coquille locale engendrée par l'arête $\{\alpha_1, \beta_1\}$, d'une seconde coquille locale enroulée autour de l'arête $\{\alpha_2, \beta_2\}$, et d'un tube composé des tétraèdres $\{\alpha_2, \beta_2, \gamma, \delta\}$ et $\{\beta_2, \gamma, \delta, B\}$.

Tronçonnement et segmentation d'une arête

Parmi les causes de l'absence d'une arête d'un maillage, on rencontre le cas où des nœuds se situent entre les sommets de cette arête et la tronçonnent en sous-arêtes (fig 5.7). Un tronçonnement est donc un ensemble de sous-arêtes consécutives.

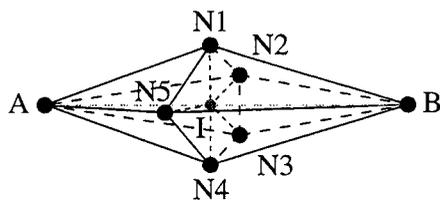


FIG. 5.7 – Arête $\{A, B\}$ découpée en deux sous-arêtes $\{A, I\}$ et $\{I, B\}$ suite à la présence du nœud I sur $]A, B[$.

Le forçage d'une arête découpée en tronçons implique la suppression des différents sommets situés entre les extrémités de l'arête.

Par extension, une segmentation est un tronçonnement où certaines des sous-arêtes sont absentes. De façon très générale, une arête segmentée peut contenir des coquilles globales, des tubes et des tronçonnements (fig 5.8).

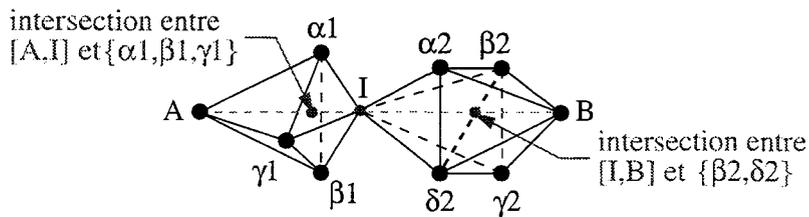


FIG. 5.8 - Arête $\{A, B\}$ segmentée en deux parties $([A, I]$ et $[I, B])$ suite à la présence d'un nœud I sur $]A, B[$. Le premier segment contient un tube (la face $\{\alpha_1, \beta_1, \gamma_1\}$ coupe $[A, I]$) et le second contient une coquille locale (l'arête $\{\beta_2, \delta_2\}$ coupe $[I, B]$).

Le forçage d'une arête segmentée entraîne le remaillage des coquilles et des tubes qui se trouvent sur les différents segments, ainsi que la suppression des nœuds situés entre les extrémités de cette arête.

5.1.2 Absence d'une face $\{A, B, C\}$ d'un maillage

Lorsqu'une face $\{A, B, C\}$ n'apparaît pas dans le maillage final, ça peut être dû :

- à l'absence d'une des arêtes qui constituent cette face,
- à la présence d'arêtes qui traversent cette face,
- ou encore à la présence de nœuds sur la surface triangulaire $\{A, B, C\}$.

Le premier cas ayant été détaillé ci-avant, nous ne décrivons que la présence d'arêtes qui transpercent une face ou celle de nœuds situés sur cette face.

Intersection entre une face imposée et une arête

De même qu'une arête imposée peut être absente d'un maillage parce qu'une face se trouve entre les sommets de cette arête (cf. notion de tube), une face dont les trois arêtes sont présentes dans le maillage peut être absente à cause de la présence d'une arête en travers de cette face (fig. 5.9).

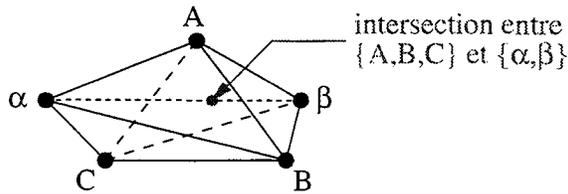


FIG. 5.9 – Face $\{A, B, C\}$ absente d'un maillage malgré la présence des trois arêtes $\{A, B\}$, $\{A, C\}$ et $\{B, C\}$: l'arête $\{\alpha, \beta\}$ traverse $\{A, B, C\}$.

Le forçage de la face $\{A, B, C\}$ s'appuie également sur le remaillage des coquilles engendrées par les différentes arêtes qui la transpercent.

Tronçonnement et segmentation d'une face

Ces formes de lacunes sont similaires à celles décrites pour les arêtes. Le tronçonnement comme la segmentation d'une face sont dus au tronçonnement d'une ou plusieurs des arêtes de cette face, ou encore à la présence de nœuds sur la surface triangulaire définie par cette face (fig. 5.10). Dans le cas d'un tronçonnement, toutes les sous-faces triangulaires qui divisent la face imposée sont présentes dans le maillage alors que dans le cas d'une segmentation, certaines des sous-faces ne sont pas respectées par le maillage (suite à la présence d'arêtes qui les traversent par exemple).

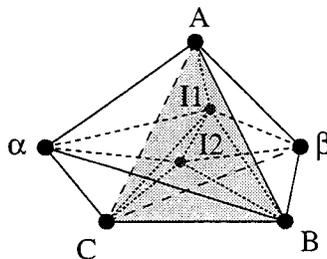


FIG. 5.10 – Face $\{A, B, C\}$ tronçonnée en 5 sous-faces suite à la présence des nœuds I_1 et I_2 sur cette face. Ces sous-faces sont $\{A, I_1, B\}$, $\{A, I_1, C\}$, $\{I_1, I_2, B\}$, $\{I_1, I_2, C\}$ et $\{I_2, B, C\}$,

Le forçage d'une face segmentée ou tronçonnée implique l'élimination des coquilles dont l'arête génératrice traverse ses sous-faces, et le retrait des nœuds situés sur sa surface triangulaire (ses trois sommets exclus).

5.1.3 Conséquences de ces lacunes sur la simulation

Les simulations que nous effectuons requièrent le respect de la forme des domaines de la structure étudiée. Cependant, la conservation de la forme des enveloppes n'implique pas celle de leur discrétisation. En conséquence, les tubes et coquilles qui empêchent la présence d'une arête, et les arêtes qui traversent une face imposée doivent être éliminés. Par contre, les faces qui sont imposées peuvent être tronçonnées en sous-faces. Nous verrons ultérieurement que cette souplesse permet de traiter de façon simple l'apparition de recouvrements de domaines ou de boucles.

5.2 Recherche d'une arête dans un maillage

La première étape dans la vérification des enveloppes et la reconstruction des faces consiste à contrôler que les arêtes de chaque face sont présentes dans le maillage. Nous avons vu que chaque sommet du maillage mémorise un des tétraèdres qui contient ce nœud (voir 4.5.2 p. 97). Si nous notons :

- S_A le tétraèdre mémorisé par un nœud A ,
- i_A la position du nœud A dans S_A ,
- S le tétraèdre en cours d'analyse,
- N_i le i -ième sommet de S (on a donc $N_{i_A} = A$),
- F_i la i -ième face de S (celle qui ne contient pas le sommet N_i),
- S_i le i -ième voisin de S (celui qui partage la face F_i),
- C_S et $C_S[i, j]$ la table de connectivité de S et la position de son j -ième sommet dans S_i (cf 4.5.5 p. 105),

la recherche d'un élément qui contient une arête $\{A, B\}$ peut alors s'exprimer de la façon suivante :

```

01  $S \leftarrow S_A$ 
02  $i_A \leftarrow$  position de  $A$  dans  $S_A$ 
03 poursuivre  $\leftarrow$  vrai
04 faire
05     /* Pour tous les sommets de  $S$  excepté le sommet  $A$  */
06      $i \leftarrow 1$ 
07     faire
08         si  $F_i$  sépare le point  $B$  alors
09             /* Poursuivre la recherche avec l'élément voisin  $S_i$  */
10              $i_A \leftarrow C_S[i, i_A]$ 
11              $S \leftarrow S_i$ 
12              $i \leftarrow 1$ 
13         sinon
14             /* Soient  $j$  et  $k$  les deux entiers de  $\{1, 2, 3, 4\}$ 
15             distincts de  $i$  et de  $i_A$  */
16             si  $B$  est dans le secteur angulaire  $(A, \overrightarrow{AN_j}, \overrightarrow{AN_k})$  alors
17                 si  $B$  est sur l'axe  $(A, N_j)$  alors
18                     si  $N_j = B$  alors
19                         /* l'arête  $\{A, B\}$  a été trouvée */
20                     sinon
21                         /* le sommet  $N_j$  est situé sur  $[A, B]$  */
22                     fin si
23                 sinon
24                     si  $B$  est sur l'axe  $(A, N_k)$  alors
25                         si  $N_k = B$  alors
26                             /* l'arête  $\{A, B\}$  a été trouvée */
27                         sinon
28                             /* le sommet  $N_k$  est situé sur  $[A, B]$  */
29                         fin si
30                     sinon
31                         /*  $[A, B]$  est coupée par l'arête  $\{N_j, N_k\}$  */
32                     fin si
33                 fin si
34             poursuivre  $\leftarrow$  faux
35         sinon
36              $i \leftarrow i + 1$ 
37         fin si
38     fin si
39 tant que  $i < 5$  et poursuivre

40 si  $i = 5$  alors
41     /*  $[A, B]$  est coupée par la face  $F_{i_A}$  de  $S$  */
42     poursuivre  $\leftarrow$  faux
43 fin si
44 tant que poursuivre

```

Lorsque la recherche d'une arête $\{A, B\}$ échoue, nous sommes confrontés aux trois lacunes décrites précédemment :

- ligne 21 : $\{A, N_j\}$ est un tronçon de $\{A, B\}$ (fig. 5.3 et 5.7) ;
- ligne 28 : $\{A, N_k\}$ est un tronçon de $\{A, B\}$;
- ligne 31 : la coquille locale engendrée par l'arête $\{N_j, N_k\}$ coupe le segment $[A, B]$ (fig. 5.2 et 5.5) ;
- ligne 41 : les tétraèdres qui partagent la face $\{N_i, N_j, N_k\}$ (la face qui est opposée au sommet A dans S) font partie d'un tube qui interfère avec $[A, B]$ (fig. 5.1 et 5.4).

Etudions à présent différentes techniques pour supprimer ces lacunes.

5.3 Reconstruction d'une arête

Il existe différentes approches pour reconstruire une arête $\{A, B\}$ qui n'apparaît pas dans un maillage. Nous allons à présent les décrire en fonction des configurations détectées par l'algorithme précédemment décrit.

5.3.1 Remaillage d'un tube

Le forçage d'une arête $\{A, B\}$ qui interfère avec un tube implique le remaillage des tétraèdres qui constituent ce tube. Pour cela, on peut appliquer des basculements d'arêtes et/ou ajouter des nœuds.

Remaillage d'un tube par basculement d'arêtes

Prenons le tube $\{ \{A, \alpha, \beta, \gamma\}, \{ \alpha, \beta, \gamma, \delta\}, \{ \alpha, \gamma, \delta, \varepsilon\}, \{ \gamma, \delta, \varepsilon, B\} \}$ décrit en figure 5.4. L'arête $\{A, B\}$ peut être forcée en basculant des arêtes internes à ce tube. La figure 5.11 présente le résultat de ce forçage après avoir appliqué :

1. l'opérateur $2 \rightarrow 3$, qui élimine la face $\{ \alpha, \beta, \gamma\}$, fait apparaître l'arête $\{A, \delta\}$ et réduit le tube à $\{ \{A, \alpha, \gamma, \delta\}, \{ \alpha, \gamma, \delta, \varepsilon\}, \{ \gamma, \delta, \varepsilon, B\} \}$;

2. l'opérateur $2 \rightarrow 3$, qui élimine la face $\{\alpha, \gamma, \delta\}$, fait apparaître l'arête $\{A, \varepsilon\}$ et réduit le tube à $\{ \{A, \gamma, \delta, \varepsilon\}, \{ \gamma, \delta, \varepsilon, B \} \}$;
3. et enfin l'opérateur $2 \rightarrow 3$, qui élimine la face $\{\gamma, \delta, \varepsilon\}$ et fait apparaître l'arête $\{A, B\}$.

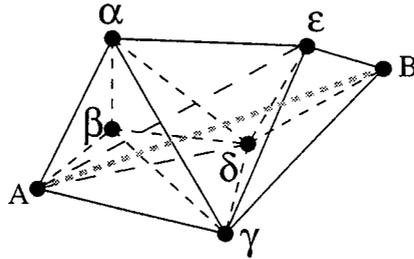


FIG. 5.11 – Résultat du forçage d'une arête $\{A, B\}$ après avoir appliqué trois basculements d'arêtes pour éliminer le tube décrit figure 5.4.

Pour cette méthode, l'algorithme le plus simple consiste à prendre deux éléments consécutifs du tube tels que l'application de l'opérateur $2 \rightarrow 3$ réduise le nombre total de simplexes dans le tube (fig 5.12).

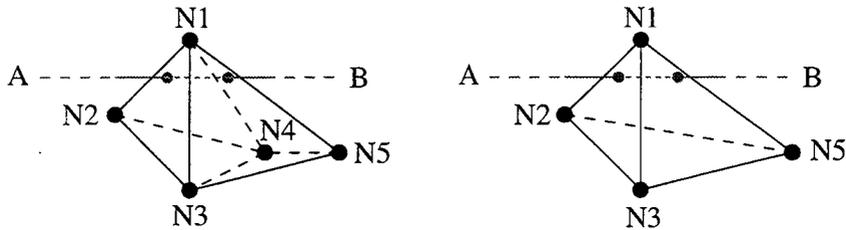


FIG. 5.12 – Application de l'opérateur $2 \rightarrow 3$ afin de réduire la taille du tube $\{\dots, \{N_1, N_2, N_3, N_4\}, \{N_1, N_3, N_4, N_5\}, \dots\}$, issu des sommets $\{A, B\}$, au tube $\{\dots, \{N_1, N_2, N_3, N_5\}, \dots\}$.

Toutefois, il existe des configurations où le basculement d'une arête, quelque choix que l'on fasse, ne permet pas de réduire le nombre d'éléments dans le tube. Ainsi, la figure 5.13 présente un tube 2D concave

$$\{ \{A, C, D\}, \{C, D, E\}, \{D, E, F\}, \{E, F, G\}, \{F, G, B\} \}$$

où les seuls basculements d'arêtes possibles sont $\{D, E\}$ en $\{C, F\}$, ou $\{E, F\}$ en $\{D, G\}$. Or, dans les deux cas, le nombre d'éléments dans le tube modifié reste égal au nombre de triangles dans le tube de départ.

Pour palier cette difficulté, des variantes basées sur le retournement aléatoire d'arêtes ont été proposées [49]. Mais ces approches ne convergent que sous réserve d'une analyse fine des configurations rencontrées.

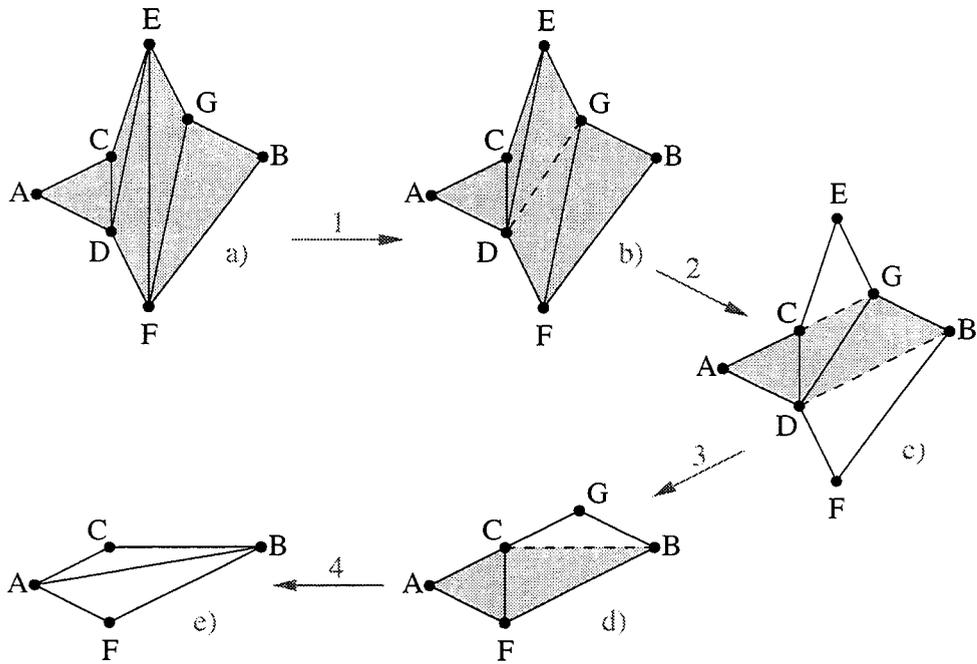


FIG. 5.13 – Réduction d'un tube avec une configuration (b) où le basculement d'arête ne réduit pas la taille du tube.

Remaillage d'un tube par ajout de nœuds

Afin de réduire la difficulté introduite par les tubes concaves, on peut faire appel à des techniques basées sur l'ajout de nœuds. Une première méthode consiste à rendre le tube convexe (fig. 5.14). Cette approche, dont la mise

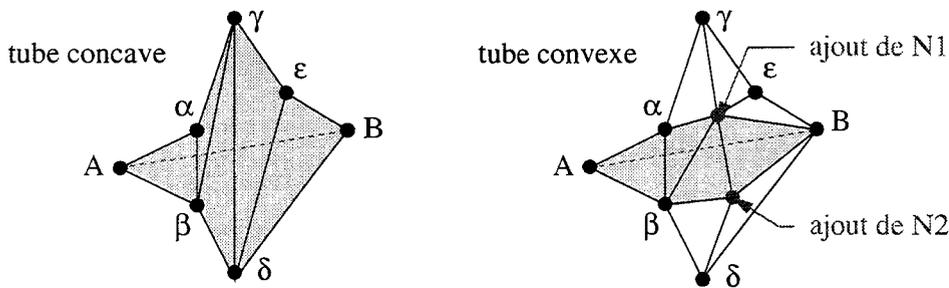


FIG. 5.14 – Ajout de nœuds de façon à rendre convexe un tube concave.

en œuvre n'est pas aisée, est principalement appliquée lorsque le respect de la discrétisation des frontières est capital [74]. Or, les simulations que nous effectuons n'interdisent pas [a priori] la rediscrétisation des frontières dans la mesure où la forme des polyèdres à mailler est conservée.

Aussi privilégions-nous le tronçonnement partiel des arêtes. Pour cela, des nœuds sont insérés dans le maillage aux intersections entre l'arête manquante et les faces internes du tube (fig. 5.15). Nous nous appuyons donc sur le cœur du maillage pour corriger ces lacunes. Ceci requiert néanmoins une variante dans le calcul des cavités \mathcal{C} afin de ne détruire aucune arête imposée lors de l'insertion des nouveaux sommets. Dans cette optique, nous restreignons les cavités aux simplexes qui contiennent les nœuds-intersections.

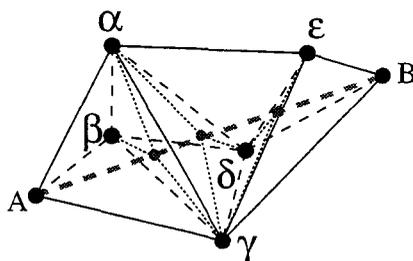


FIG. 5.15 – Ajout de nœuds à l'intersection entre l'arête $\{A, B\}$ et les faces $\{\alpha, \beta, \gamma\}$, $\{\alpha, \gamma, \delta\}$ et $\{\gamma, \delta, \varepsilon\}$ afin d'éliminer le tube de la figure 5.4 page 115.

Bien que cette approche simplifie le problème de l'élimination des tubes, elle introduit une autre difficulté. En effet, l'intersection d'une arête et d'une face engendre des coordonnées réelles. Or, ce type de calcul conduit à des erreurs numériques, quels que soient les nombres à virgule flottante utilisés. En outre, le maillage fait appel à des coordonnées entières pour calculer avec précision les faces séparatrices : les coordonnées obtenues doivent donc impérativement être converties en entiers naturels.

Par conséquent, ces contraintes numériques imposent une correction des intersections si on veut éviter des situations erronées. En particulier, il faut vérifier que le point de la grille de coordonnées entières utilisé à la place du point d'intersection réel est bien dans la cavité composée par les deux tétraèdres dont la face coupe l'arête à reconstruire. Si ce n'est pas le cas, on cherche un autre point parmi les points voisins (fig. 5.16).

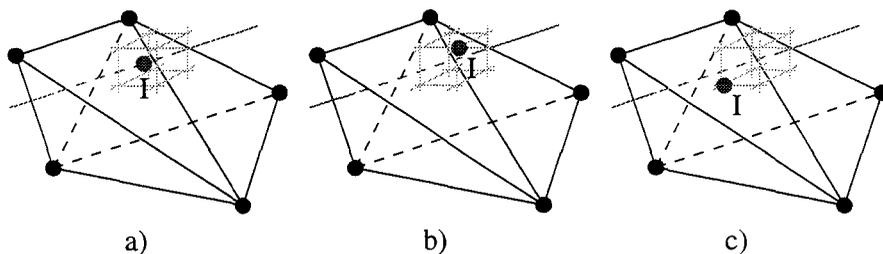


FIG. 5.16 – Calcul d'intersection à l'aide de coordonnées a) Réelles, b) entières et c) entières corrigées.

Le principal inconvénient de cette variante est qu'elle peut conduire à la génération de tétraèdres très aplatis. Pour limiter cet effet parasite, nous appliquons une technique d'attraction nodale. Ainsi, si l'intersection entre le segment $[A, B]$ et une face est relativement proche d'un des sommets de cette face, le nœud-intersection est remplacé par ce sommet (fig 5.17).

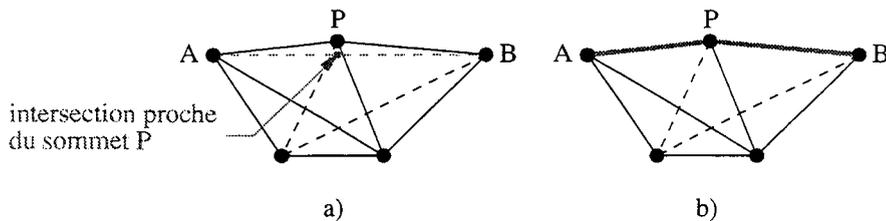


FIG. 5.17 -a) Intersection proche d'un sommet P et b) tronçonnement de l'arête $\{A, B\}$ avec ce sommet.

De même, si l'intersection est proche d'une arête, on considère que l'arête manquante n'est pas coupée par une face, mais par une arête; c'est alors un remaillage de coquille qui est effectué.

Enfin, il existe des cas où aucune intersection entière ne peut être utilisée, en particulier lorsque la distance entre les nœuds est trop faible ou la face trop aplatie. Dans le premier cas, il faut élargir la plage de coordonnées entières admissibles. Ceci est rendu possible grâce à des architectures 128 bits ou l'utilisation de types entiers étendus (coûteux en temps de calcul). Dans le second cas, il faut traiter le maillage afin d'éliminer les éléments de trop mauvaise qualité. Si aucune amélioration du maillage n'est possible, le mailleur échoue avec un diagnostic du problème. Bien que cette situation ne soit pas satisfaisante, il n'existe pas de mailleur capable de "tout mailler". Il faut alors envisager des calculs sur des structures plus grossières ou une intervention humaine pour résoudre des situations géométriques complexes.

5.3.2 Remaillage d'une coquille globale

Lorsque l'absence d'une arête $\{A, B\}$ est causée par une coquille, le forçage de $\{A, B\}$ s'appuie sur le remaillage de chacune des coquilles locales dont l'arête génératrice coupe $[A, B]$. Pour cela, nous utilisons également le basculement d'arête ou l'ajout de nœud. Une fois la coquille globale réduite à un tube, il ne reste qu'à utiliser une des techniques décrites ci-avant pour forcer l'arête $\{A, B\}$.

Rediscrétisation d'une coquille locale par basculement d'arêtes

Le remaillage d'une coquille locale par retournement d'arêtes s'inspire de la méthode utilisée pour réduire un tube. La figure 5.18 décrit la réduction d'une coquille $\{\{\alpha, \beta\} \{N_1, N_2, N_3, N_4, N_5, N_6, N_7\}\}$ avec l'opérateur $2 \rightarrow 3$:

1. l'opérateur $2 \rightarrow 3$ appliqué aux tétraèdres $\{\alpha, \beta, N_4, N_5\}$ et $\{\alpha, \beta, N_5, N_6\}$ fait apparaître l'arête $\{N_4, N_6\}$ et réduit la coquille à :

$$\{\{\alpha, \beta\} \{N_1, N_2, N_3, N_4, N_6, N_7\}\} ;$$

2. l'opérateur $2 \rightarrow 3$ appliqué aux tétraèdres $\{\alpha, \beta, N_2, N_3\}$ et $\{\alpha, \beta, N_3, N_4\}$ fait apparaître l'arête $\{N_2, N_4\}$ et réduit la coquille à :

$$\{\{\alpha, \beta\} \{N_1, N_2, N_4, N_6, N_7\}\} ;$$

3. l'opérateur $2 \rightarrow 3$ appliqué aux tétraèdres $\{\alpha, \beta, N_1, N_2\}$ et $\{\alpha, \beta, N_2, N_4\}$ fait apparaître l'arête $\{N_1, N_4\}$ et réduit la coquille à :

$$\{\{\alpha, \beta\} \{N_1, N_4, N_6, N_7\}\} ;$$

4. l'opérateur $2 \rightarrow 3$ appliqué aux tétraèdres $\{\alpha, \beta, N_4, N_6\}$ et $\{\alpha, \beta, N_6, N_7\}$ fait apparaître l'arête $\{N_4, N_7\}$ et réduit la coquille à :

$$\{\{\alpha, \beta\} \{N_1, N_4, N_7\}\} ;$$

et l'élimination de la coquille résiduelle $\{\{\alpha, \beta\} \{N_1, N_4, N_7\}\}$ en appliquant l'opérateur $3 \rightarrow 2$: l'arête $\{\alpha, \beta\}$ disparaît alors du maillage au profit de la face $\{N_1, N_4, N_7\}$.

Remarque 5.1. Dans certaines configurations, la coquille, réduite à quatre tétraèdres, ne peut être remaillée qu'en une autre coquille de quatre tétraèdres en appliquant l'opérateur $4 \rightarrow 4$ (fig. 5.19). Cette situation est due au fait que les segments $[N_1, N_3]$ et $[N_2, N_4]$ coupent tous deux l'arête $\{\alpha, \beta\}$.

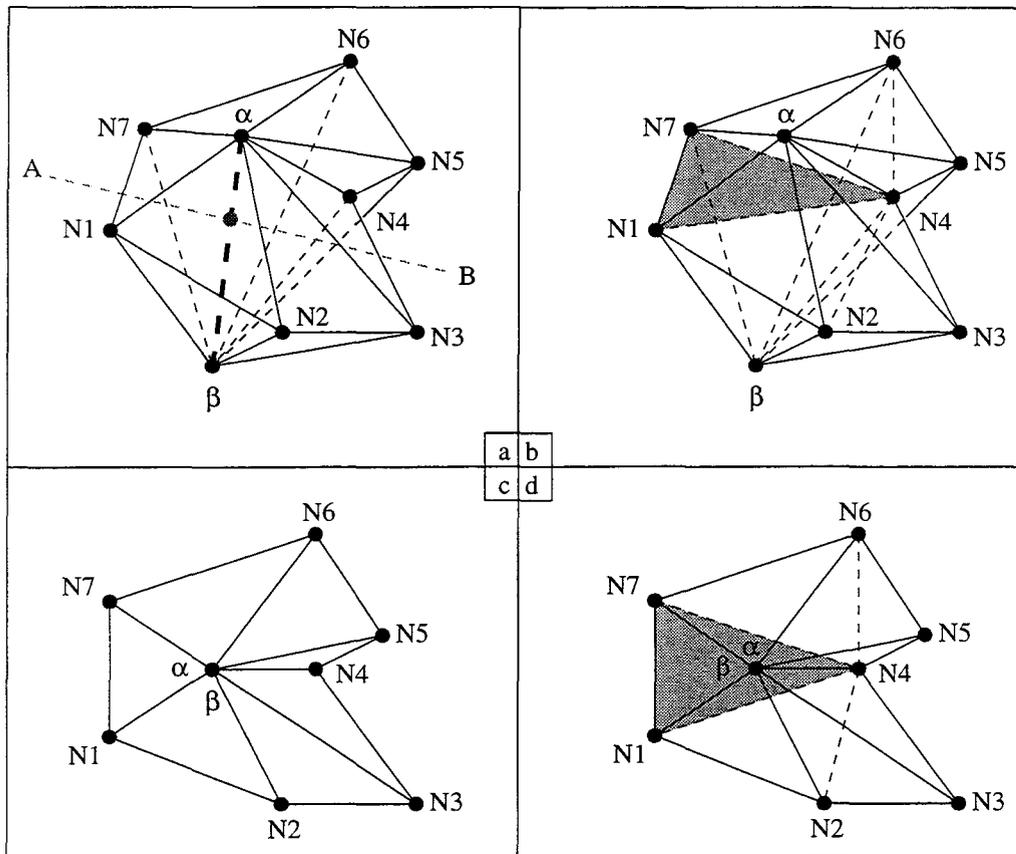


FIG. 5.18 - Coquille $\{\{\alpha, \beta\}, \{N_1, N_2, N_3, N_4, N_5, N_6, N_7\}\}$ (a) remaillée par des basculements d'arêtes (b) avec leurs vues de dessus respectives (c) et (d).

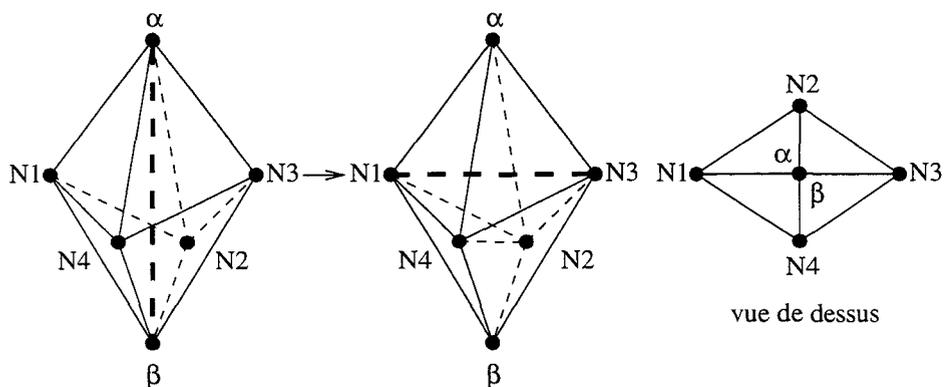


FIG. 5.19 - Coquille $\{\{\alpha, \beta\}, \{N_1, N_2, N_3, N_4\}\}$ dont le remaillage en une autre coquille $\{\{N_1, N_3\}, \{\alpha, N_2, \beta, N_4\}\}$ requiert l'opérateur $4 \rightarrow 4$.

L'algorithme de remaillage d'une coquille en basculant des arêtes est relativement simple: tant que la coquille contient plus de quatre éléments, on cherche deux éléments voisins pour lesquels l'opérateur $2 \rightarrow 3$ peut être appliqué et on la réduit d'un tétraèdre (fig. 5.20). Comme la taille de la coquille décroît à chaque étape, on converge vers un enroulement de quatre simplexes. Lorsqu'une coquille de quatre simplexes est obtenue, on applique les opérateurs $2 \rightarrow 3$ et $3 \rightarrow 2$, ou l'opérateur $4 \rightarrow 4$ suivant la configuration des éléments.

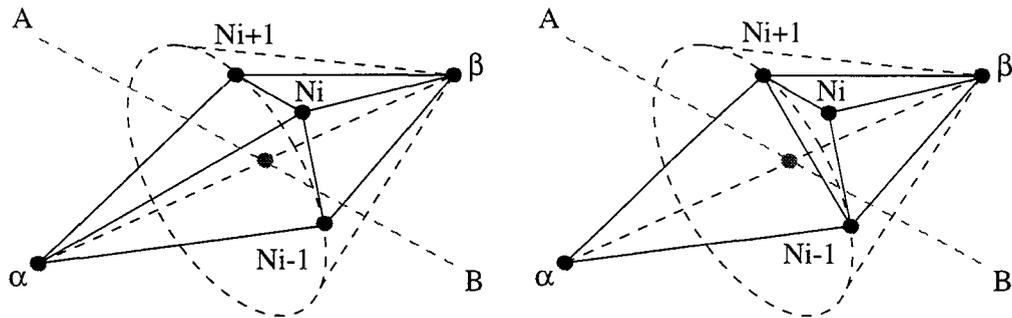


FIG. 5.20 – Réduction de la taille d'une coquille enroulée autour de l'arête $\{\alpha, \beta\}$ en appliquant l'opérateur $2 \rightarrow 3$ sur les tétraèdres $\{\alpha, \beta, N_{i-1}, N_i\}$ et $\{\alpha, \beta, N_i, N_{i+1}\}$: l'arête $\{N_{i-1}, N_{i+1}\}$ est créée et le sommet N_i est retiré de la coquille. Cette dernière voit les éléments $\{\alpha, \beta, N_{i-1}, N_i\}$ et $\{\alpha, \beta, N_i, N_{i+1}\}$ remplacés par $\{\alpha, \beta, N_{i-1}, N_{i+1}\}$: son nombre de tétraèdres décroît strictement.

Si cette approche permet d'éliminer les arêtes qui empêchent le forçage d'une arête imposée par la discrétisation d'une enveloppe, elle connaît les mêmes restrictions que celles rencontrées lors du remaillage de tubes. En particulier, il existe des coquilles concaves non remaillables par basculement d'arêtes (fig. 5.21) ou des configurations pour lesquelles le basculement d'arête crée une nouvelle coquille dont l'arête génératrice interfère avec l'arête que l'on cherche à forcer (fig. 5.22). La convergence peut donc être difficile à obtenir.

Remaillage de coquille locale par ajout de nœuds

Lorsqu'une coquille locale n'est pas remaillable par basculement d'arêtes parce qu'elle est concave, il est possible de la rendre convexe en ajoutant des sommets dans son voisinage (fig. 5.23).

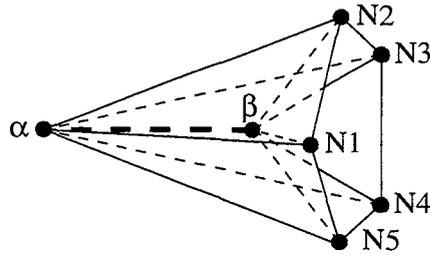


FIG. 5.21 - Coquille locale $\{\{\alpha, \beta\}, \{N_1, N_2, N_3, N_4, N_5\}\}$ non remaillable par basculement d'arête à cause de la surface concave définie par les faces $\{\beta, N_1, N_2\}$, $\{\beta, N_2, N_3\}$, $\{\beta, N_3, N_4\}$, $\{\beta, N_4, N_5\}$ et $\{\beta, N_5, N_1\}$: aucun basculement d'arête ne peut être appliqué sur cette coquille locale.

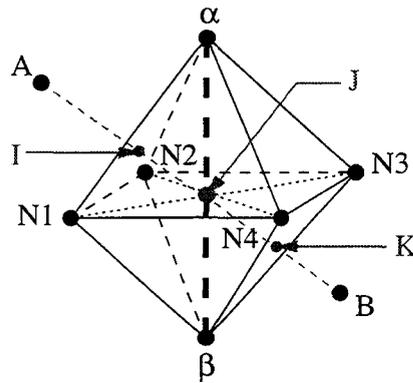


FIG. 5.22 - Coquille locale de 4 tétraèdres $\{\{\alpha, \beta\}, \{N_1, N_2, N_3, N_4, N_5\}\}$ non remaillable par basculement d'arête: l'opérateur $4 \rightarrow 4$ (seul possible dans cette situation) transforme l'arête $\{\alpha, \beta\}$ en $\{N_1, N_3\}$ ou $\{N_2, N_4\}$. Or, l'arête à forcer $\{A, B\}$ coupe cette coquille locale en J , intersection commune à ces trois arêtes.

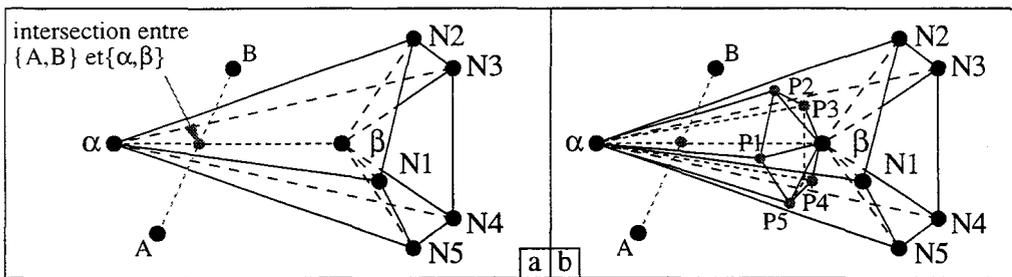


FIG. 5.23 - Coquille locale concave $\{\{\alpha, \beta\}, \{N_1, N_2, N_3, N_4, N_5\}\}$ (a) transformée en une coquille locale convexe $\{\{\alpha, \beta\}, \{P_1, P_2, P_3, P_4, P_5\}\}$ (b) grâce à l'ajout des sommets P_1, P_2, P_3, P_4 et P_5 .

Cette technique, introduite dans des travaux dont l'objectif est de mailler une structure tout en respectant fidèlement la discrétisation de ses enveloppes [74], est difficile à mettre en œuvre. Ces difficultés tiennent au fait que les sommets ajoutés doivent supprimer les concavités tout en n'interférant pas avec d'autres faces ou arêtes imposées. Or, cette restriction est délicate à garantir pour les faces et les arêtes qui ne sont pas encore présentes dans le maillage (faces et arêtes manquantes qui n'ont pas encore été forcées).

Aussi préférons-nous une seconde méthode qui consiste à calculer l'intersection entre l'arête manquante et celle qui engendre la coquille à remailler (fig. 5.24). L'approximation des coordonnées due aux erreurs numériques et à la conversion en coordonnées entières implique de contrôler la présence du nouveau nœud dans la cavité associée à la coquille en cours de remaillage. A ce stade, nous rencontrons les mêmes difficultés que celles décrites avec le remaillage d'un tube par ajout de sommets aux intersections entre les faces du tube et l'arête manquante. Les mêmes techniques d'attraction nodale sont appliquées afin de limiter la génération d'éléments dégénérés.

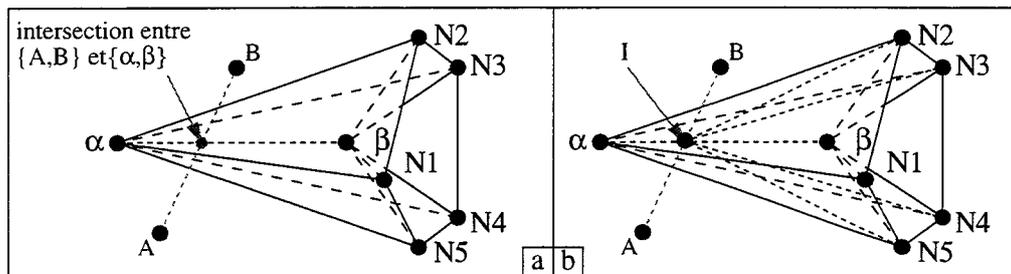


FIG. 5.24 – Coquille locale concave $\{\{\alpha, \beta\} \{N_1, N_2, N_3, N_4, N_5\}\}$ (a) remaillée en insérant un nœud I à l'intersection entre l'arête $\{A, B\}$ à forcer et l'arête $\{\alpha, \beta\}$ qui engendre la coquille locale.

5.3.3 Intersection entre une arête et un nœud

Dans ce dernier cas, le respect de la discrétisation d'une arête nécessite d'ôter le sommet qui est situé sur l'arête $\{A, B\}$. Il faut toutefois distinguer le cas d'une arête segmentée par la présence d'un nœud de celui d'une arête tronçonnée. En effet, dans le premier cas il faut éliminer les coquilles et les tubes afin que chacune des sous-arêtes apparaissent dans le maillage. Une fois l'arête segmentée transformée en arête tronçonnée, on peut appliquer la méthode de déraffinement introduite dans le chapitre précédent (cf. 4.6.2 p. 108) pour ôter les nœuds qui tronçonnent l'arête à forcer. (sous réserve que la configuration rencontrée ne génère pas d'éléments croisés). Notons qu'en ce qui nous concerne, le respect strict des frontières n'est pas nécessaire ; une arête peut donc très bien demeurer tronçonnée.

5.4 Reconstruction d'une face imposée

Une fois les trois arêtes $\{A, B\}$, $\{A, C\}$ et $\{B, C\}$ d'une face $\{A, B, C\}$ forcées, il reste à vérifier la présence de cette face dans le maillage. Or, les arêtes peuvent être tronçonnées en sous-arêtes suite à l'insertion de nœuds lors de leur forçage. Nous avons vu que ceci a pour effet de tronçonner la face $\{A, B, C\}$ en sous-faces (cf. 5.1.2 page 118) (fig. 5.25). Il faut donc, pour chaque face, identifier la ou les sous-faces qui la définissent.

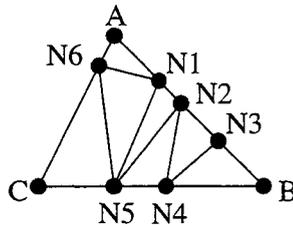


FIG. 5.25 – Face $\{A, B, C\}$ subdivisée en sous-faces suite à l'ajout de nœuds lors du forçage des arêtes.

Identification de sous-faces coplanaires

Supposons dans un premier temps que tous les points situés sur une arête sont alignés. La recherche des sous-faces qui constituent une face imposée $\{A, B, C\}$ peut alors être effectuée à l'aide d'une liste circulaire de nœuds avec les sommets qui constituent les tronçons des arêtes $\{A, B\}$, $\{B, C\}$ et $\{C, A\}$, et en parcourant cette liste. Chaque fois qu'on trouve une sous-face formée de trois sommets consécutifs de cette liste circulaire, on marque la sous-face dans le maillage (afin qu'elle soit considérée comme imposée) et on réduit la liste circulaire.

Posons `listeNoeuds[0..N - 1]` l'ensemble des nœuds situés sur les arêtes $\{A, B\}$, $\{B, C\}$ et $\{C, A\}$ et supposons qu'ils sont ordonnés selon leur ordre d'apparition quand on parcourt le périmètre de la face $\{A, B, C\}$. L'algorithme d'identification des sous-faces de $\{A, B, C\}$ peut alors s'écrire :

```
01 num ← N
02 k ← 2
03  $N_i$  ← listeNoeuds[0]
04  $N_j$  ← listeNoeuds[1]
05  $N_k$  ← listeNoeuds[2]
06 tant que num > 2 faire
07     si on trouve la sous-face  $\{N_i, N_j, N_k\}$  alors
```

```

08     Marquer cette sous-face imposée
09     Retirer  $N_j$  de la liste
10      $num \leftarrow num - 1$ 
11      $N_j \leftarrow N_k$ 
12      $k \leftarrow (k + 1) \text{ modulo } num$ 
13      $N_k \leftarrow \text{listeNoeuds}[k]$ 
14     sinon
15      $N_i \leftarrow N_j$ 
16      $N_j \leftarrow N_k$ 
17      $k \leftarrow (k + 1) \text{ modulo } num$ 
18      $N_k \leftarrow \text{listeNoeuds}[k]$ 
19     fin si
20 fin tant que

```

Cet algorithme converge pour deux raisons :

- à chaque étape le nombre de sommets à parcourir diminue ;
- le morceau de face restant à identifier forme un polygone convexe.

Prenons la figure 5.25. Dans cet exemple, `listeNoeuds` vaut initialement $\{A, N_1, N_2, N_3, B, N_4, N_5, C, N_6\}$. L'application de l'algorithme décrit ci-avant à cette face permet :

1. la détection de la sous-face $\{N_3, B, N_4\}$ et réduction de `listeNoeuds` à $\{A, N_1, N_2, N_3, N_4, N_5, C, N_6\}$;
2. la détection de la sous-face $\{N_5, C, N_6\}$ et réduction de `listeNoeuds` à $\{A, N_1, N_2, N_3, N_4, N_5, N_6\}$;
3. la détection de la sous-face $\{N_6, A, N_1\}$ et réduction de `listeNoeuds` à $\{N_1, N_2, N_3, N_4, N_5, N_6\}$;
4. la détection de la sous-face $\{N_2, N_3, N_4\}$ et réduction de `listeNoeuds` à $\{N_1, N_2, N_4, N_5, N_6\}$;
5. la détection de la sous-face $\{N_2, N_4, N_5\}$ et réduction de `listeNoeuds` à $\{N_1, N_2, N_5, N_6\}$;
6. la détection de la sous-face $\{N_5, N_6, N_1\}$ et réduction de `listeNoeuds` à $\{N_1, N_2, N_5\}$;
7. et enfin la détection de la sous-face $\{N_1, N_2, N_5\}$.

La figure 5.26 illustre cet exemple.

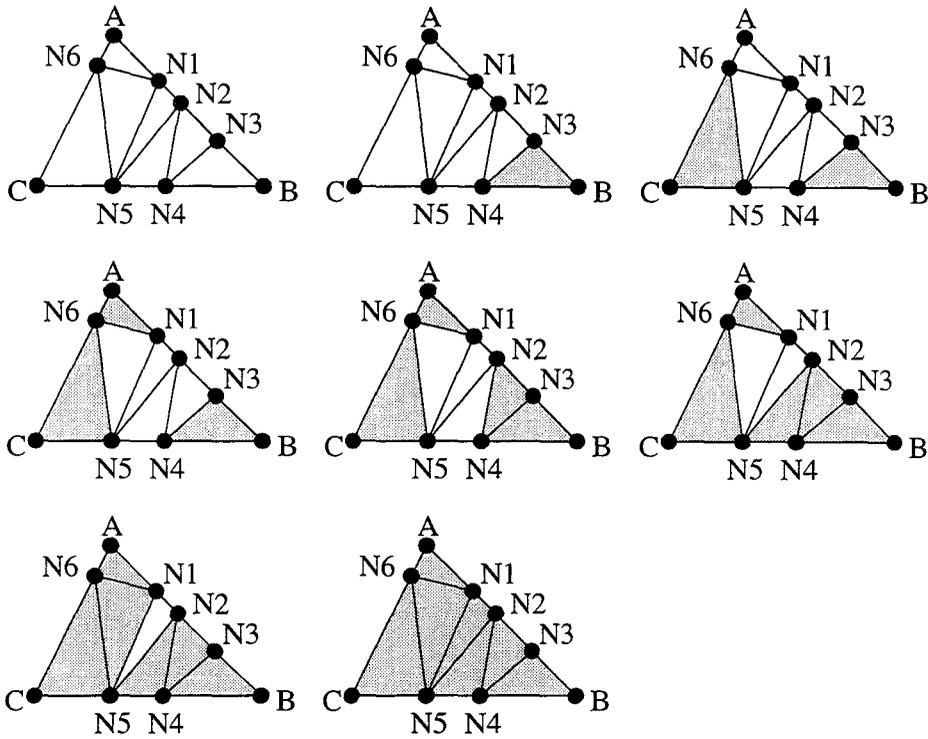


FIG. 5.26 – Parcours circulaire des nœuds sur les arêtes d'une face $\{A, B, C\}$ et extraction des sous-faces composées de trois sommets consécutifs (faces grisées).

Identification de sous-faces non coplanaires

En pratique, les erreurs d'arrondis et l'appartenance des coordonnées à un espace discret conduisent à une division des faces en sous-faces non convexes ou non coplanaires, et ruinent l'algorithme précédemment décrit.

Ainsi, la figure 5.27 montre le cas d'une face tronçonnée en sous-faces pour lesquelles cet algorithme réduit la liste `listeNoeuds`

$$\{A, N_1, N_2, N_3, B, N_4, C, N_5\} \quad (5.1)$$

en

$$\{A, N_1, N_2, N_3, N_4, C, N_5\} \quad (5.2)$$

Si la sous-face $\{C, N_5, A\}$ est présente dans le maillage, alors la réduction suivante est :

$$\{A, N_1, N_2, N_3, N_4, C\} \quad (5.3)$$

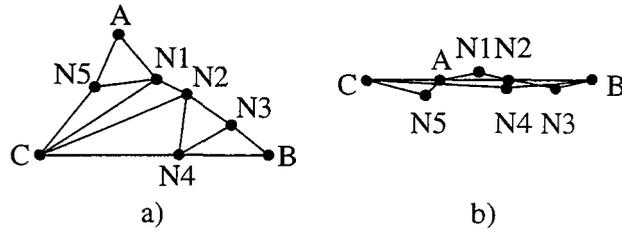


FIG. 5.27 – Face subdivisée en sous-faces non coplanaires : a) vue de dessus par rapport au plan $\{A, B, C\}$ b) vue latérale par rapport à ce même plan.

comme le montre la figure 5.28. Dans ce cas, on ne trouve aucune sous-face formée de l'arête $\{A, C\}$ et d'un des points N_1, N_2, N_3 ou N_4 ; notre méthode ne converge plus vers la solution.

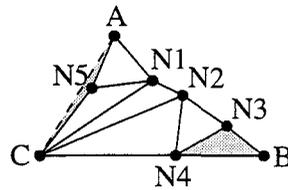


FIG. 5.28 – Face $\{A, B, C\}$ tronçonnée en sous-faces et rendue concave en N_5 . Si la sous-face $\{C, N_5, A\}$ est présente dans le maillage, alors l'algorithme de recherche des sous-faces détecte cette face et transforme `listeNoeuds` en $\{A, N_1, N_2, N_3, N_4, C, A\}$: il n'y a alors plus convergence puisqu'aucune sous-face n'est formée des sommets A, C et N_i avec i compris entre 1 et 4.

Pour pallier ce problème, il faut vérifier que trois points consécutifs ne créent pas une concavité. Cet objectif peut être atteint à l'aide du produit mixte entre le vecteur normal à la face $\{A, B, C\}$ et celui qui est engendré par le produit vectoriel entre $\overrightarrow{N_i, N_j}$ et $\overrightarrow{N_i, N_k}$. Ainsi, si on parcourt les arêtes $\{A, B\}$, $\{B, C\}$ et $\{C, A\}$, dans cet ordre et dans le sens des vecteurs \overrightarrow{AB} , \overrightarrow{BC} et \overrightarrow{CA} , on obtient la liste de nœuds indiquée en formule 5.1. Une sous-face composée de trois points consécutifs de cette liste $\{N_i, N_j, N_k\}$ est alors admissible si et seulement si on a :

$$\left(\overrightarrow{AB} \wedge \overrightarrow{BC}\right) \cdot \left(\overrightarrow{N_i N_j} \wedge \overrightarrow{N_i N_k}\right) > 0 \quad (5.4)$$

Notre algorithme devient :

```

01 num ← N
02 k ← 2
03 Ni ← listeNoeuds[0]
04 Nj ← listeNoeuds[1]
05 Nk ← listeNoeuds[2]
06  $\vec{v} = \overrightarrow{AB} \wedge \overrightarrow{AC}$ 
07 tant que num > 2 faire
08    $\vec{n} \leftarrow \overrightarrow{N_i N_j} \wedge \overrightarrow{N_i N_k}$ 
09   si  $\vec{v} \cdot \vec{n} > 0$  et on trouve la sous-face {Ni, Nj, Nk} alors
10     Marquer cette sous-face imposée
11     Retirer Nj de la liste
12     num ← num - 1
13   sinon
14     Ni ← Nj
15     Nj ← Nk
16     k ← (k + 1) modulo num
17     Nk ← listeNoeuds[k]
18   fin si
19 fin tant que

```

Toutefois, cette approche n'est valable que dans la mesure où les non coplanarités entre sous-faces sont faibles. Des sous-faces dont l'angle avec la face {A, B, C} est supérieur à $\frac{\pi}{2}$ (fig. 5.29) ne peuvent être traitées de façon sûre avec cette approche. En pratique cette propriété est respectée.

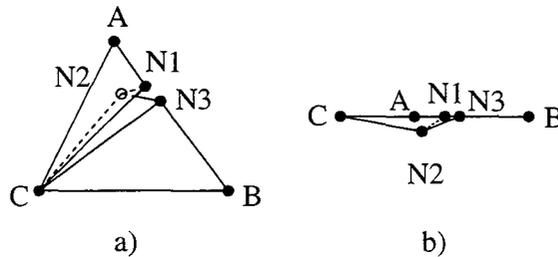


FIG. 5.29 – Face subdivisée en sous-faces fortement non coplanaires : a) vue de dessus et b) vue latérale.

Remarque 5.2. La possibilité d'une arête {A, C} tronçonnée en {A, N₅} et {N₅, C} alors que {A, C} est présente dans le maillage peut surprendre. Nous verrons ultérieurement que cette situation se produit lorsque le nœud N₅ n'est pas un nœud qui tronçonne une arête mais un nœud qui est situé sur la surface {A, B, C}.

Recherche d'une sous-face

Dans la méthode d'identification des sous-faces qui composent une face imposée $\{A, B, C\}$ il faut rechercher des faces constituées de trois sommets consécutifs N_i, N_j et N_k . La première étape de cet algorithme consiste à trouver un tétraèdre qui contient l'arête $\{N_i, N_j\}$. Ce polyèdre existe puisque, à ce stade, les trois arêtes ont été forcées. Pour l'obtenir, on peut utiliser la méthode décrite page 119. Posons :

- S_{N_i, N_j} le tétraèdre de la coquille locale engendrée par l'arête $\{N_i, N_j\}$ à partir duquel on amorce la recherche de la face $\{N_i, N_j, N_k\}$,
- S le tétraèdre que l'on examine,
- p_N la position du sommet N dans S ,
- C_S la table de connectivité de S ,
- $C_S[i, j]$ la position du i -ième sommet de S dans le j -ième voisin de S (i.e. le tétraèdre qui partage la j -ième face F_j de S).

L'algorithme de recherche de $\{N_i, N_j, N_k\}$, illustré par la figure 5.30 peut alors être décrit de la façon suivante :

```

01  $S \leftarrow S_{N_i, N_j}$ 
02  $p_{N_i} \leftarrow$  position de  $N_i$  dans  $S_{N_i, N_j}$ 
03  $p_{N_j} \leftarrow$  position de  $N_j$  dans  $S_{N_i, N_j}$ 
04  $p_{E_1} \leftarrow$  position de  $E_1$  dans  $S_{N_i, N_j}$ 
05  $p_{E_2} \leftarrow$  position de  $E_2$  dans  $S_{N_i, N_j}$ 
06  $N_0 \leftarrow E_2$ 
07
08 /* Tourner autour de l'arête  $\{N_i, N_j\}$  jusqu'à ce que  $E_1 = N_k$  */
09 /* ou  $E_1 = N_0$  */
10 tant que  $E_1 \neq N_k$  et  $E_1 \neq N_0$  faire
11      $p \leftarrow p_{E_2}$ 
12      $p_{N_i} \leftarrow C_s[p, p_{N_i}]$  /* position de  $N_i$  dans le  $p$ -ième voisin de  $S$  */
13      $p_{N_j} \leftarrow C_s[p, p_{N_j}]$  /* position de  $N_j$  dans le  $p$ -ième voisin de  $S$  */
14      $p_{E_1} \leftarrow C_s[p, p_{E_2}]$  /*  $E_1$  devient le sommet suivant de la coquille locale */
15      $p_{E_2} \leftarrow C_s[p, p_{E_1}]$  /*  $E_2$  prend la place de  $E_1$  */
16      $S \leftarrow$  voisin( $S, p$ ) /*  $S$  devient l'élément suivant de la coquille locale */
17 fin tant que
18 /* Si  $E_1 = N_k$  on a trouvé  $\{N_i, N_j, N_k\}$ , sinon la sous-face  $\{N_i, N_j, N_k\}$  */
23 /* n'est pas dans le maillage */

```

Une fois cette recherche achevée, soit $E_1 = N_k$ et on a trouvé la sous-face $\{N_i, N_j, N_k\}$, soit $E_1 = N_0$ et cette sous-face n'existe pas.

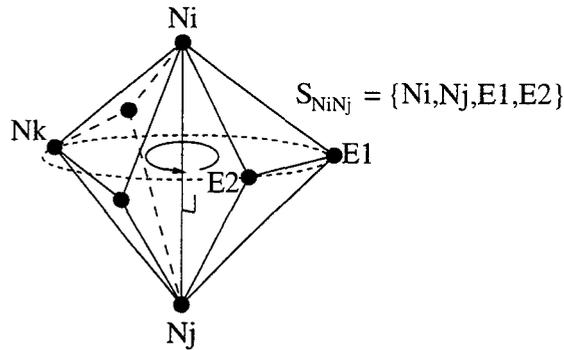


FIG. 5.30 – Recherche de la sous-face $\{N_i, N_j, N_k\}$ en parcourant la coquille engendrée par $\{N_i, N_j\}$.

5.5 Reconstruction d'une face

Il arrive que l'algorithme d'identification des sous-faces boucle indéfiniment sans jamais trouver toutes les sous-faces qui constituent une face imposée. Cela tient au fait que la présence des arêtes qui la définissent est une condition nécessaire pour qu'elle existe mais non une condition suffisante. En effet, une face dont toutes les arêtes ont été forcées peut être coupée par des arêtes (fig. 5.31) ou contenir des nœuds sur sa surface (fig. 5.32) (cf. 5.1.2 page 118).

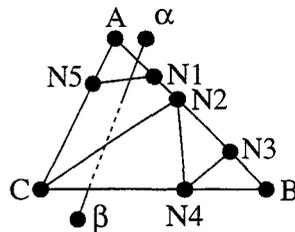


FIG. 5.31 – Face dont une sous-face est intersectée par une arête $\{\alpha, \beta\}$.

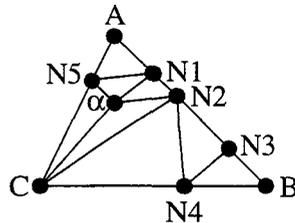


FIG. 5.32 – Face dont une sous-face contient un nœud interne α .

5.5.1 Recherche du nœud ou de l'arête intersectrice

Lorsque l'algorithme de recherche des sous-faces parcourt tous les sommets des arêtes sans détecter de sous-faces, il faut chercher l'arête ou le nœud interne qui coupe la ou les sous-faces restantes. Pour cela, on prend trois nœuds consécutifs $\{N_i, N_j, N_k\}$ parmi ceux qui définissent le périmètre de la partie de la face imposée en cours de forçage, tels qu'ils ne créent pas de concavité (ne pas prendre les points C , N_5 et A dans le cas de la figure 5.28 page 134 par exemple). Ensuite, on parcourt la coquille engendrée par $\{N_i, N_j\}$ jusqu'à ce que le secteur angulaire issu du dièdre défini par les deux faces du tétraèdre qui contiennent l'arête $\{N_i, N_j\}$ contienne le sommet N_k .

La figure 5.33 décrit cette technique pour les cas présentés en figures 5.31 et 5.32. En a) comme en b), la coquille locale $\{\{N_1, N_2\} \{\alpha, \beta, \gamma, \delta, \varepsilon\}\}$ engendrée par l'arête $\{N_1, N_2\}$ est parcourue jusqu'à ce qu'on ait atteint le dièdre défini par $\{N_1, N_2, \alpha\}$ et $\{N_1, N_2, \beta\}$: le secteur angulaire décrit par ce dièdre contient le sommet C . Notons que dans le cas b), on peut choisir arbitrairement le dièdre défini par $\{N_1, N_2, \alpha\}$ et $\{N_1, N_2, \beta\}$, ou celui défini par $\{N_1, N_2, \alpha\}$ et $\{N_1, N_2, \varepsilon\}$.

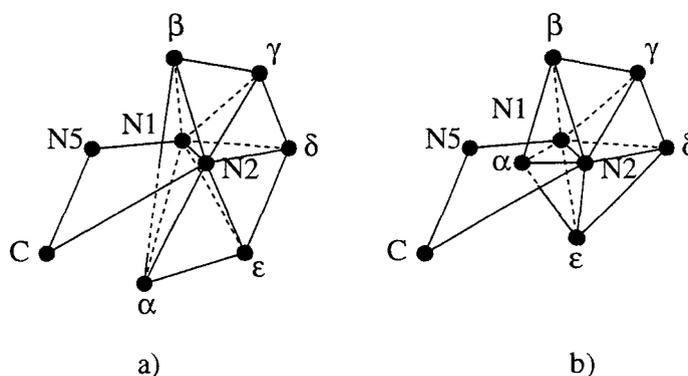


FIG. 5.33 – Coquille locale $\{\{N_1, N_2\} \{\alpha, \beta, \gamma, \delta, \varepsilon\}\}$ à parcourir jusqu'à ce que le secteur angulaire défini par les dièdres $\{N_1, N_2, I\} - \{N_1, N_2, J\}$ (où I et J représentent deux sommets consécutifs parmi $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ et ε) contienne le sommet C . En a), on s'arrête sur le dièdre défini par $\{N_1, N_2, \alpha\} - \{N_1, N_2, \beta\}$: on a alors trouvé l'arête $\{\alpha, \beta\}$ qui coupe la sous-face $\{N_1, N_2, C, N_5\}$. En b), on s'arrête soit sur le dièdre défini par $\{N_1, N_2, \alpha\} - \{N_1, N_2, \beta\}$, soit sur le dièdre défini par $\{N_1, N_2, \alpha\} - \{N_1, N_2, \varepsilon\}$: on a alors trouvé le nœud α qui est situé sur la sous-face $\{N_1, N_2, C, N_5\}$.

Si nous posons :

- S_{N_i, N_j} le tétraèdre de la coquille locale engendrée par l'arête $\{N_i, N_j\}$ à partir duquel on amorce la recherche de l'arête $\{\alpha, \beta\}$ (ou du nœud α) qui intersecte la sous-face restante,
- S le tétraèdre que l'on examine,
- p_N la position du sommet N dans S ,
- et F_N ou F_{p_N} la face de S qui ne contient pas le nœud N ,

alors cet algorithme peut être décrit de la façon suivante :

```
01  $S \leftarrow S_{N_i, N_j}$ 
02  $p_{N_i} \leftarrow$  position de  $N_i$  dans  $S_{N_i, N_j}$ 
03  $p_{N_j} \leftarrow$  position de  $N_j$  dans  $S_{N_i, N_j}$ 
04  $p_{E_1} \leftarrow$  position de  $E_1$  dans  $S_{N_i, N_j}$ 
05  $p_{E_2} \leftarrow$  position de  $E_2$  dans  $S_{N_i, N_j}$ 
06
07 /* Si  $\{N_i, N_j, E_2\}$  sépare le point  $N_k$  échanger le rôle de  $E_1$  et  $E_2$  */
08 Si  $F_{p_{E_2}}$  sépare le point  $N_k$  alors
09      $p_{E_1} \leftrightarrow p_{E_2}$ 
10 fin si
11
12 /* Tourner autour de l'arête  $\{N_i, N_j\}$  jusqu'à ce que le secteur */
13 /* angulaire issu du dièdre  $\{\{N_i, N_j, E_1\}, \{N_i, N_j, E_2\}\}$  contienne */
14 /* le point  $N_k$  */
15 tant que  $F^{p_{E_1}}$  sépare le point  $N_k$  faire
16      $p \leftarrow p_{E_2}$ 
17      $p_{N_i} \leftarrow C_s[p, p_{N_i}]$  /* position de  $N_i$  dans le p-ième voisin de  $S$  */
18      $p_{N_j} \leftarrow C_s[p, p_{N_j}]$  /* position de  $N_j$  dans le p-ième voisin de  $S$  */
19      $p_{E_1} \leftarrow C_s[p, p_{E_2}]$  /*  $E_1$  devient le nœud suivant de la coquille locale */
20      $p_{E_2} \leftarrow C_s[p, p_{E_1}]$  /*  $E_2$  devient  $E_1$  */
21      $S \leftarrow$  voisin( $S, i$ )
22 fin tant que
23 /* le tétraèdre contenant l'arête  $\{N_i, N_j\}$  est correctement orienté */
```

aboutit donc à deux situations :

- l'arête $\{E_1, E_2\}$ coupe la face $\{N_i, N_j, N_k\}$ (fig.5.33a) ;
- $E_1 = N_k$ (fig.5.33b).

Dans le premier cas, il faut remailler la coquille engendrée par $\{E_1, E_2\}$ de sorte que cette arête disparaisse (dans ce cas, la sous-face $\{N_i, N_j, N_k\}$ apparaît), ou alors qu'elle soit rediscrétisée avec le point-intersection entre $[E_1, E_2]$ et $\{N_i, N_j, N_k\}$.

Dans le second cas, il faut soit chercher à éliminer le nœud de la face par déraffinement, soit poursuivre le calcul des sous-faces qui subdivisent une face imposée en intégrant ce sommet.

5.5.2 Recherche des sous-faces : cas général

L'étape précédente peut conduire à des configurations où des nœuds internes se trouvent sur la face à contraindre. Cependant, l'algorithme de recherche des sous-faces est suffisamment robuste pour intégrer cette situation grâce à la modification apportée pour traiter les faces concaves (voir remarque 5.2 p. 135). La seule modification à apporter consiste à ajouter le nœud E_1 à la liste `listeNœuds` lorsque la sous-face $\{N_i, N_j, E_1\}$ est détectée. Ensuite, on continue la recherche de toute sous-face dont le vecteur normal donne un produit scalaire positif avec la face à forcer.

Prenons la figure 5.34 afin de décrire cette situation générale.

Au début, la liste de points `listeNœuds` vaut $\{A, N_1, N_2, N_3, B, N_4, C, N_5\}$. Puis, l'application de l'algorithme page 135 réduit cette liste à $\{N_1, N_2, N_4, C, N_5\}$ (fig. 5.34c). A ce stade, l'algorithme de recherche de sous-face non coplanaire ne comprenant que des nœuds-arêtes échoue. Il faut donc rechercher une arête ou un point qui coupe la sous-face restante.

La figure 5.34d montre le cas où on détecte le nœud interne P_1 en parcourant la coquille issue de $\{N_5, N_1\}$, puis la sous-face $\{N_5, P_1, N_1\}$. Dans cette situation, le nœud P_1 est ajouté à la liste `listeNœuds` qui devient $\{N_1, N_2, N_4, C, N_5, P_1\}$. La reprise de l'algorithme de recherche des sous-faces réduit ensuite `listeNœuds` à $\{N_1, N_2, N_4, C, P_1\}$.

De nouveau bloqués, nous cherchons une arête ou un point qui coupe la sous-face restante et trouvons P_4 en parcourant la coquille engendrée par $\{C, P_1\}$. La sous-face $\{C, P_1, P_4\}$ détectée, nous ajoutons P_4 à `listeNœuds`, qui devient alors $\{N_1, N_2, N_4, C, P_4, P_1\}$, et appliquons cet algorithme jusqu'à la réduction complète de la surface $\{A, B, C\}$ (fig. 5.34o).

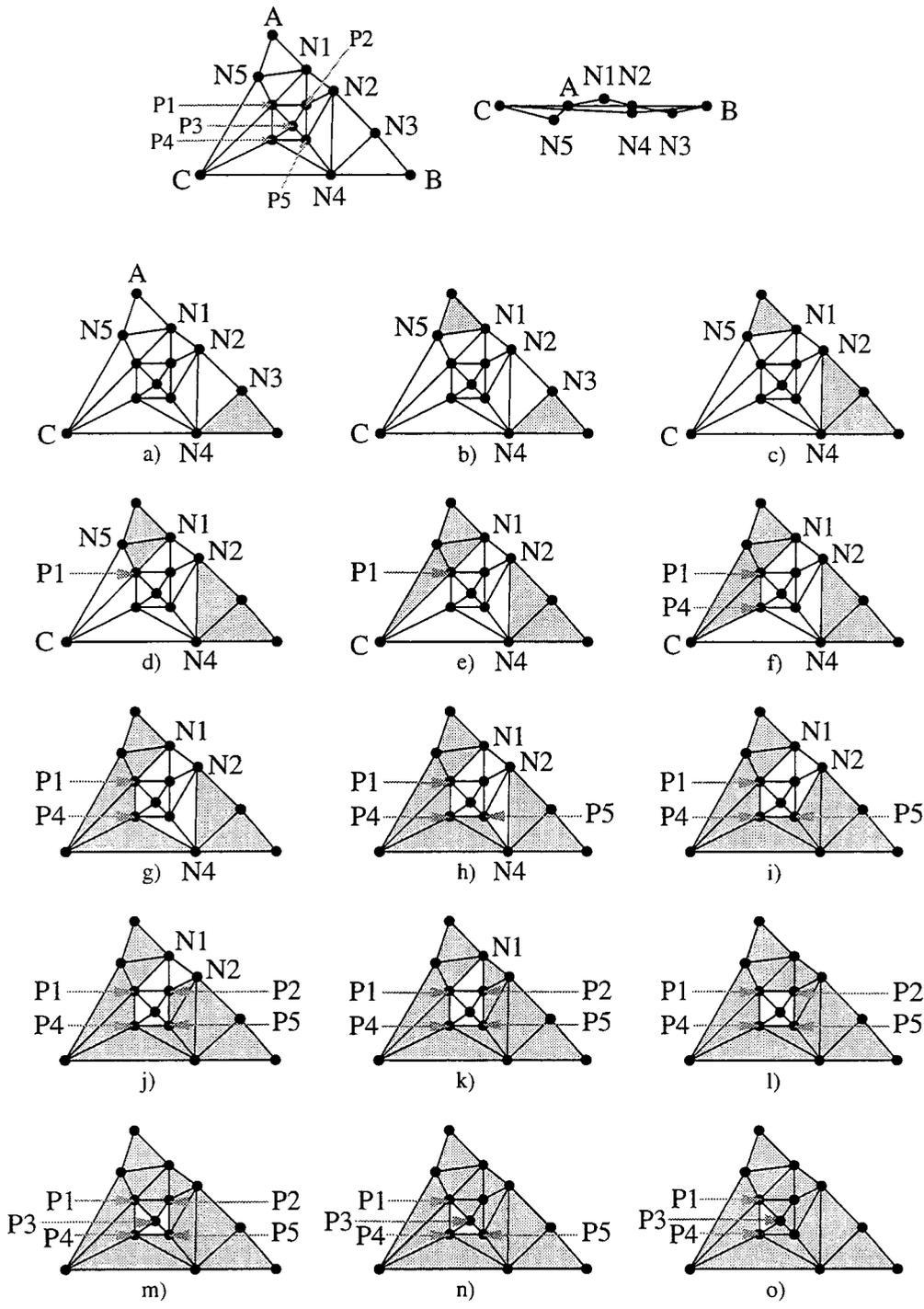


FIG. 5.34 – Détection de toutes les sous-faces d’une face $\{A, B, C\}$ à forcer, y compris celles qui contiennent un ou des nœuds internes à cette face.

5.6 Conclusion

A travers ce chapitre, nous avons rencontré quelques méthodes pour forcer les faces qui doivent être respectées par le mailleur. Nous avons en particulier distingué celles qui conduisent au respect absolu des faces et celles qui rediscrétisent les faces imposées en sous-faces.

Cette seconde catégorie de méthodes est amenée à jouer un rôle essentiel dans les mailleurs impliqués dans des simulations où le déplacement des enveloppes des domaines peut engendrer des boucles ou des recouvrement de domaines non prédictibles.

En effet dans ces situations, la collisions des interfaces rend impossible le respect absolu des frontières. Par contre, la prise en compte des intersections entre ces faces par le mailleur permet de rediscrétiser automatiquement les interfaces et détecter des boucles ou recouvrements. Aussi avons nous privilégié le calcul des intersections entre les arêtes ou les faces manquantes, et les arêtes génératrices de coquilles locales ou les faces de tubes.

La rediscrétisation des enveloppes de domaines qui se recouvrent ou des boucles reste toutefois du domaine de l'étude et nécessite encore des efforts d'investigation et d'implantation pour aboutir à un mailleur robuste capable de supporter les fortes contraintes que sont celles de la simulation de procédés de fabrication de composants semi-conducteurs.

Notons enfin qu'en pratique un seul sommet est ajouté à la plupart des faces qui sont rediscrétisées. Toutefois, le cas le plus complexe que nous avons rencontré a impliqué l'ajout de dix-sept nœuds sur une face triangulaire, nœuds-arêtes inclus.

Un travail ultérieur a montré que le recours aux opérateurs $2 \rightarrow 3$, $3 \rightarrow 2$ et $4 \rightarrow 4$ permet de réduire le nombre de nœuds ajoutés dans la phase de reconstruction des interfaces. Ceci s'avère très utile pour les larges surfaces planes discrétisées à l'aide de rectangles. En effet, ces faces conduisent à des surfaces mal décrites car les deux triangles qui sont créés en coupant un rectangle suivant une de ses diagonales ont le même cercle circonscrit. Ainsi, un rectangle $\{A, B, C, D\}$ discrétisé en deux triangles $\{A, B, C\}$ et $\{B, C, D\}$, est aléatoirement présent sous cette forme ou sous sa forme duale $\{A, B, D\}$ et $\{A, C, D\}$. Lorsque le maillage contient la forme duale $\{A, B, D\} - \{A, C, D\}$ l'approche basée sur le calcul de l'intersection entre l'arête manquante $\{B, C\}$ et l'arête $\{A, D\}$ entraîne l'ajout systématique d'un nœud. Ceci explique pourquoi dans la majorité des cas, un seul sommet est ajouté.

Chapitre 6

Conclusion et perspectives

Nous allons à présent faire le bilan de ce travail en analysant différents maillages obtenus avec MESHGEN à partir de la description géométrique (nœuds, arêtes et faces triangulaires) de LOCOS issue de générateurs de structures. Une étude comparée des outils que nous avons implantés avec ceux développés parallèlement par d'autres équipes nous permet d'avoir un œil critique sur notre approche tout en proposant les axes à approfondir pour améliorer les maillages susceptibles d'être utilisés dans le domaine de la simulation de procédés de fabrication des composants semi-conducteurs.

6.1 Structures tests

MESHGEN a été testé sur des LOCOS pseudo-bidimensionnels (fig. 6.1, 6.2, 6.3) et tridimensionnels (fig. 6.4, 6.5, 6.6) qui dégénèrent modérément au cours de la simulation de recuits thermiques¹. Ces LOCOS, issus de la simulation de recuits thermiques de structures de type Manhattan maillées par MESH², ne peuvent être remaillés par ce mailleur : ils constituent donc de bons exemples pour évaluer la capacité de MESHGEN à remailler des composants en cours de simulation.

1. Les boucles et les recouvrements de domaines peuvent être évités, et la proportion de tétraèdres dégénérés (fig. 3.5 page 37) qui apparaissent pendant la simulation reste faible.

2. le mailleur basé sur la méthode des "octrees" développé par ETH Zürich.

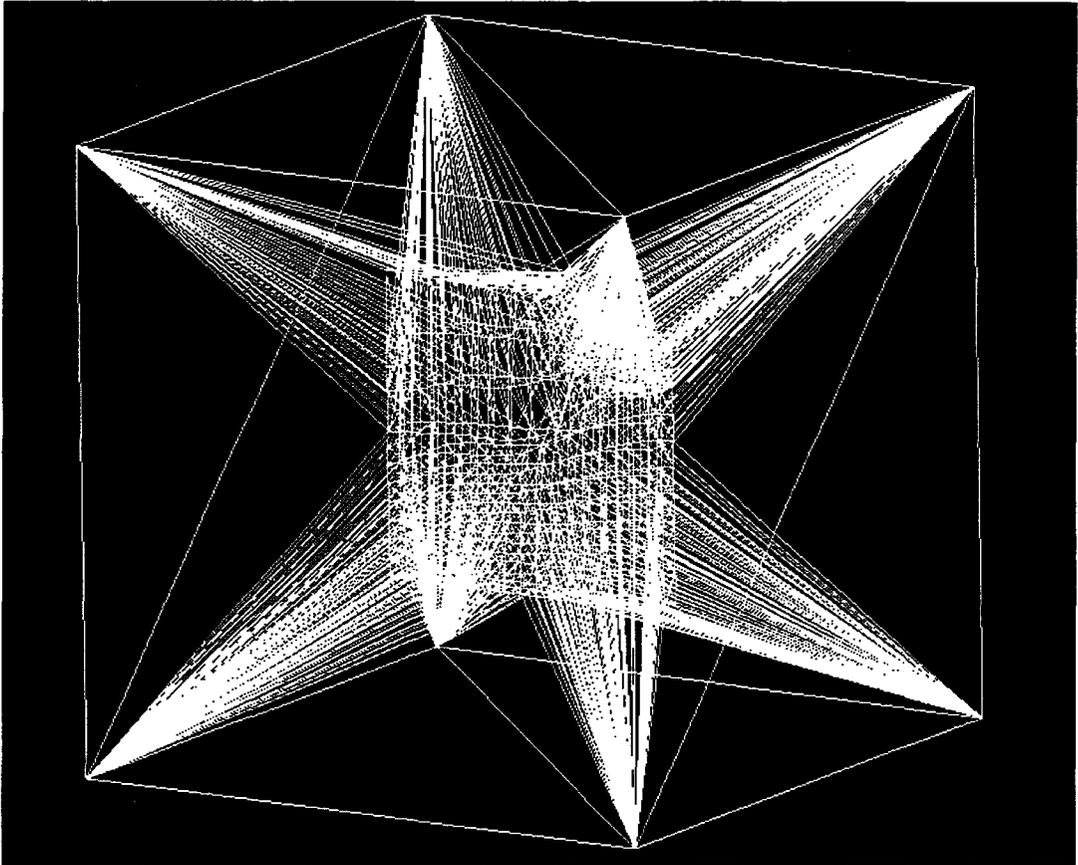


FIG. 6.1 -Maillage d'un LOCOS bi-dimensionnel composé d'un masque de nitrure, d'une couche d'oxyde et d'un substrat de silicium. Ce maillage, plongé dans la boîte englobante décrite page 94, contient 869 nœuds et 4921 tétraèdres, et a été obtenu en 3.96 secondes sur une station SUN ULTRA II.

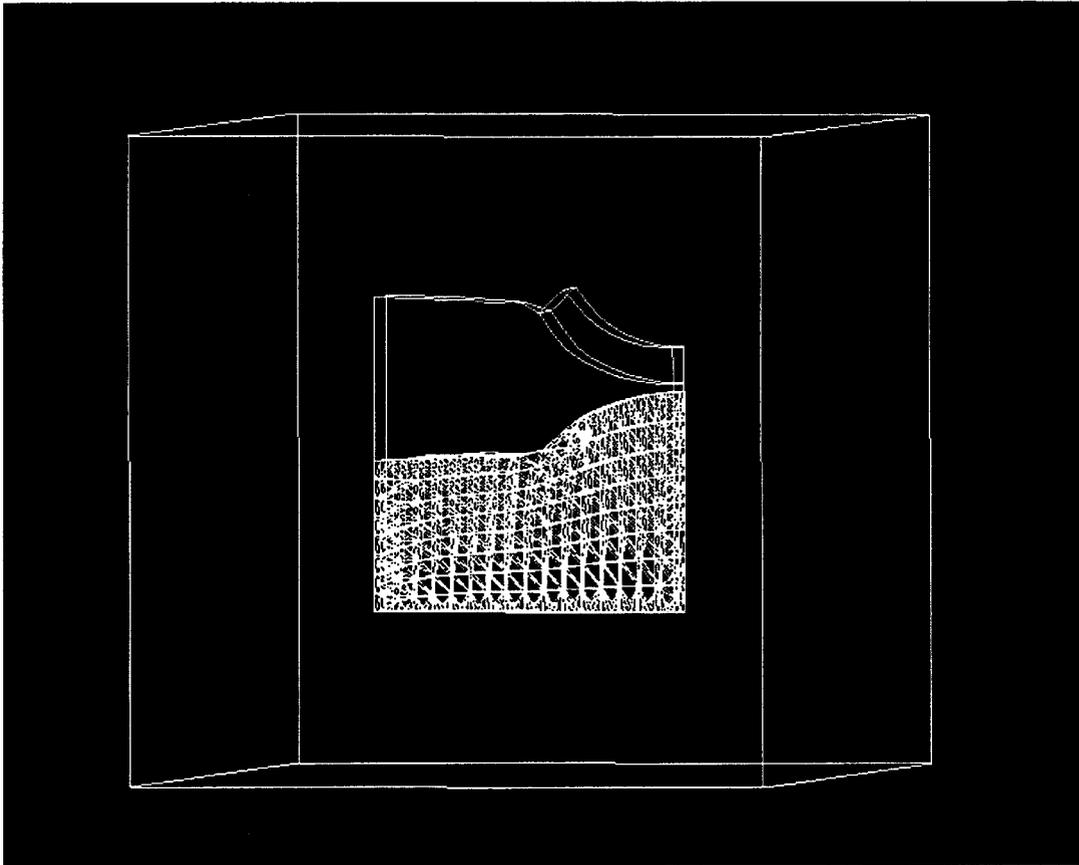


FIG. 6.2 –*LOCOS* bi-dimensionnel: détail du maillage dans le substrat de silicium.

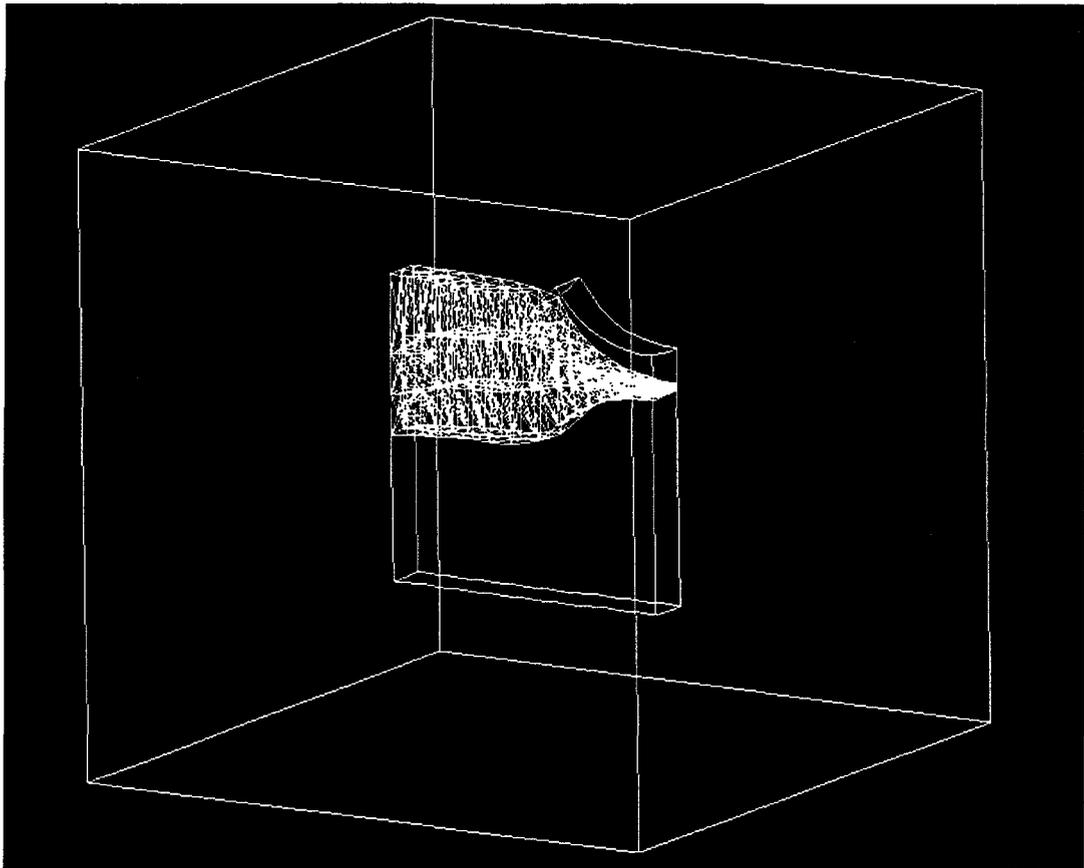


FIG. 6.3 – *LOCOS* bi-dimensionnel: détail du maillage dans le dioxyde de silicium.

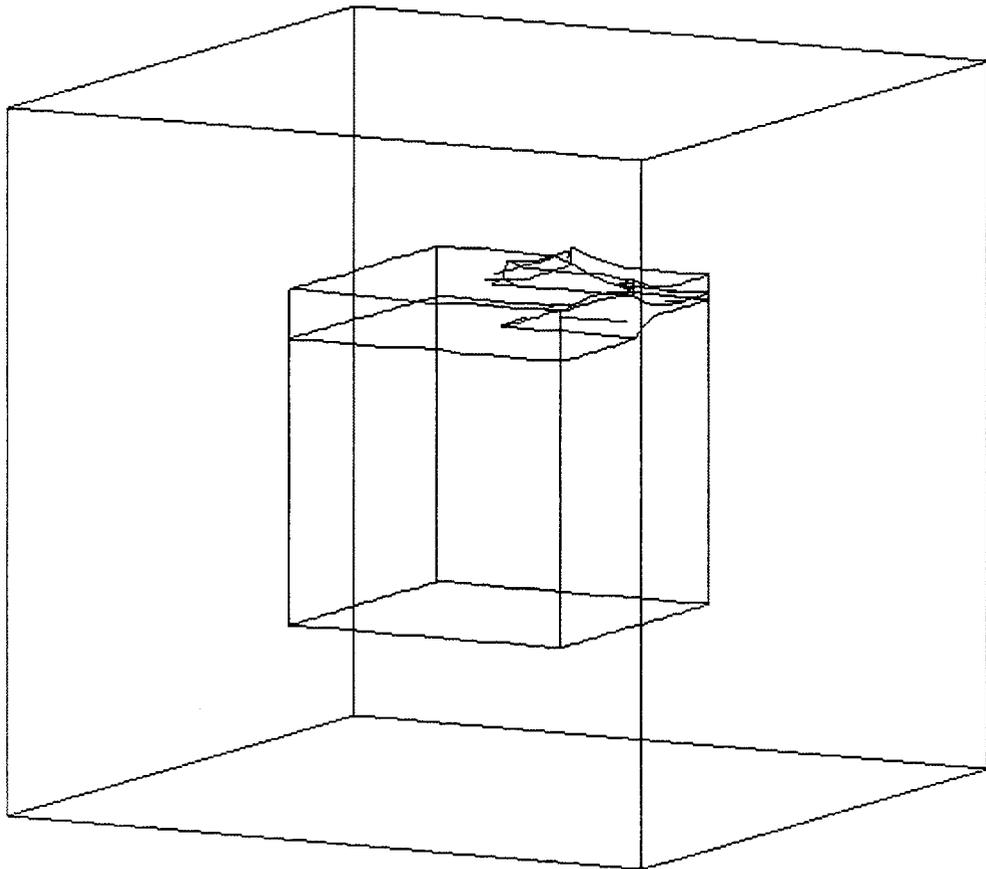


FIG. 6.4 - Structure LOCOS tri-dimensionnelle composée d'un masque de nitrure, d'une couche d'oxyde et d'un substrat de silicium (cette structure est présentée dans la boîte englobante décrite page 94).

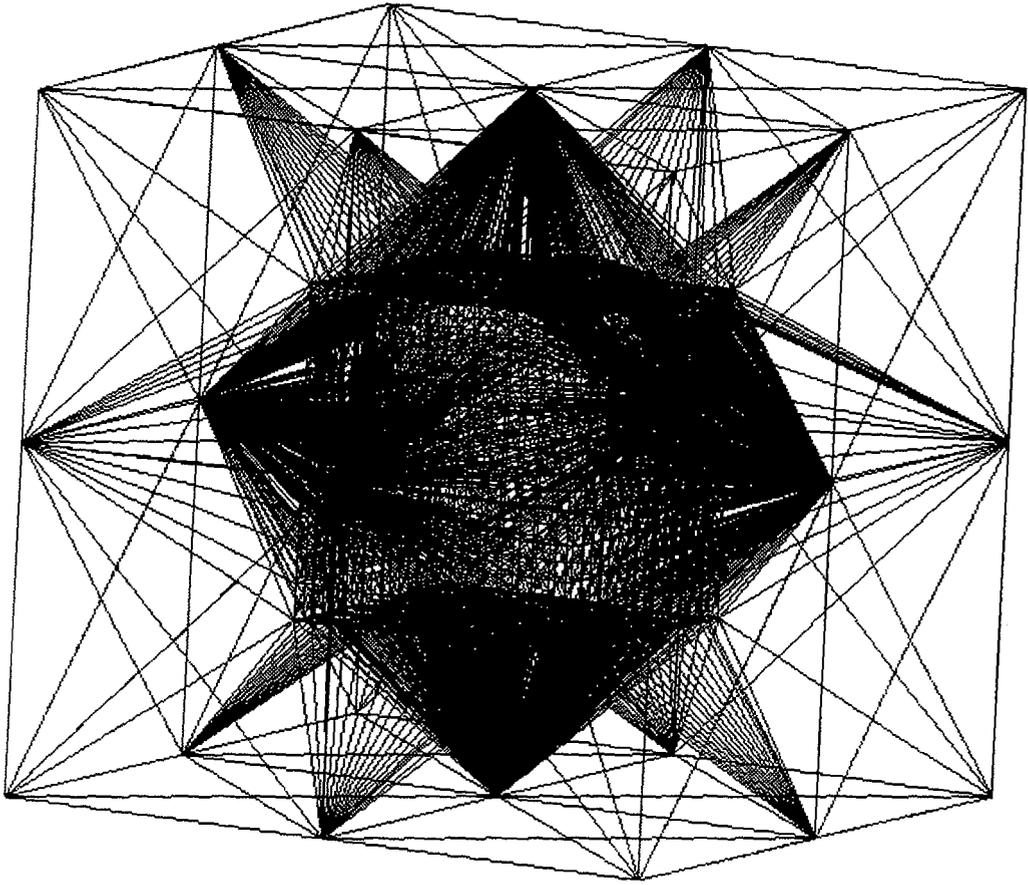


FIG. 6.5 -LOCOS tri-dimensionnel: détail du maillage extérieur à la structure à mailler (maillage de la boîte englobante décrite page 94). Le maillage final (boîte + LOCOS) contient 4671 nœuds, 29324 tétraèdres et a été obtenu en 32.01 secondes sur une station SUN ULTRA II.

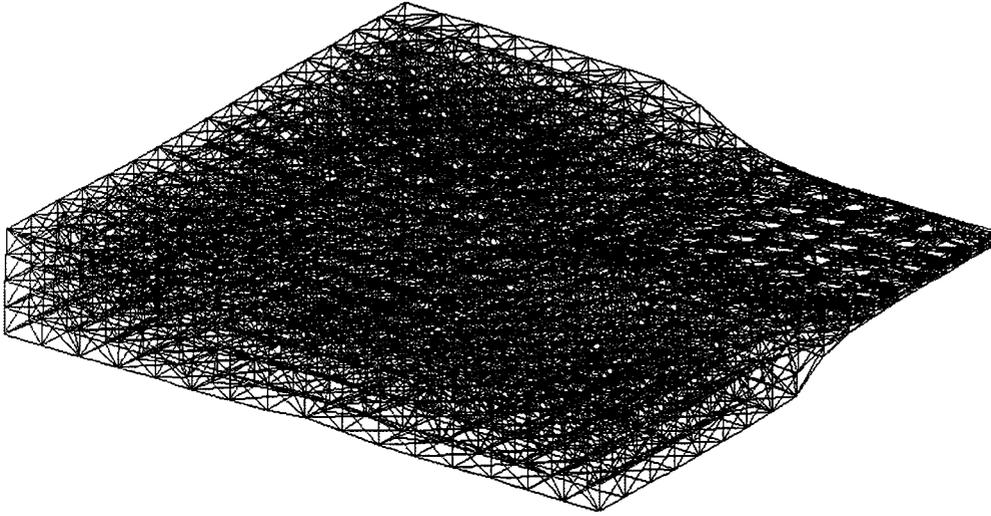


FIG. 6.6 -*LOCOS tri-dimensionnel: détail du maillage dans l'oxyde de champ.*

Enfin, nous avons choisi des LOCOS 3D maillables par MESH afin de réaliser une étude comparative entre différents maillages (dont MESH).

Le premier exemple correspond à une structure initiale composée d'un substrat de silicium avec une fine couche d'oxyde et un masque de nitrure. Cet exemple, de type Manhattan, comprend 176 nœuds, 376 faces et 548 arêtes. Il définit trois domaines, donc trois enveloppes à respecter.

Le second exemple définit un LOCOS 3D comprenant un substrat de silicium, une couche d'oxyde en forme de bec d'oiseau et un masque de nitrure qui détermine le profil de bec d'oiseau de la couche d'oxyde. Il contient 195 nœuds, 414 faces et 605 arêtes (fig. 6.7). Ce second exemple correspond à une version simplifiée du LOCOS 3D décrit ci-avant.

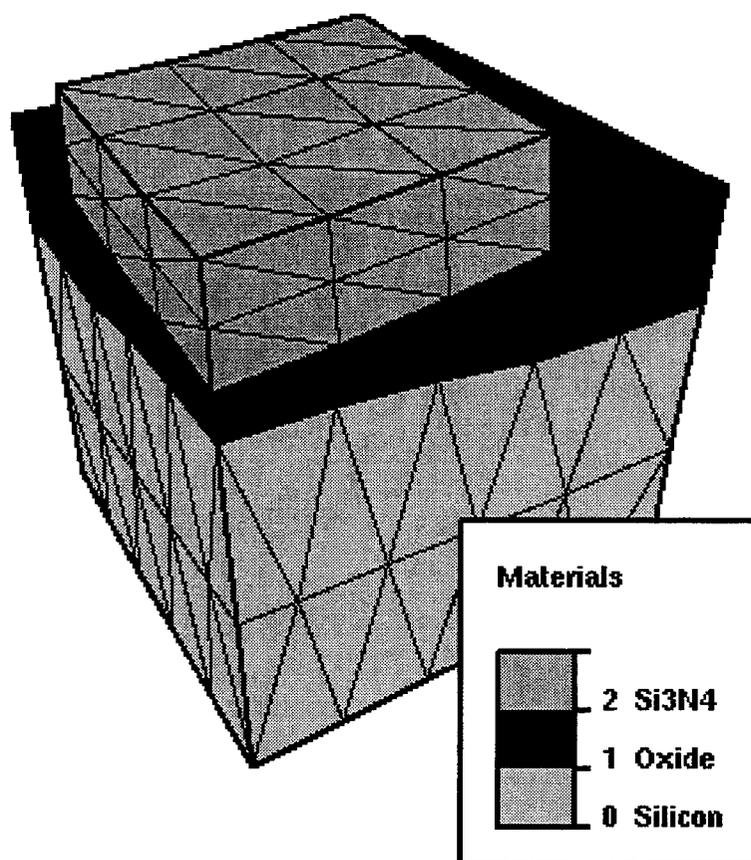


FIG. 6.7 - Maillage d'une structure LOCOS 3D simple de type îlot.

6.2 Analyse de maillages produits par MESHGEN

Nous allons à présent analyser les maillages générés par MESHGEN (fig. 6.1, 6.2, 6.3, 6.4, 6.5 et 6.6) afin d'évaluer les avantages et inconvénients de notre approche.

6.2.1 Ajout de nœuds par le mailleur

La méthode de maillage que nous utilisons est amenée à ajouter des nœuds afin de forcer les arêtes et les faces imposées : les tableaux 6.1 et 6.2 quantifient ces variations et décrivent la position des sommets ajoutés.

Structures	Initial	Interne	Interface	Final	Boîte
LOCOS 2D	721	157	564	869	26
LOCOS 3D	4088	2404	1684	4671	26

TAB. 6.1 – Nombre de nœuds situés à l'intérieur des structures, sur la frontière des domaines de ces structures, ou sur la boîte englobante.

Dans le tableau 6.1,

- **Initial** représente le nombre initial de nœuds à mailler ;
- **Interne** correspond au nombre initial de nœuds internes ;
- **Interface** définit le nombre initial de nœuds sur les enveloppes ;
- **Final** indique le nombre final de nœuds (ajout de nœuds par le mailleur) ;
- et **Boîte** prend en compte le nombre de nœuds pour décrire la boîte.

Structures	Nœuds		Arêtes		Faces	
	Initial	Final	Initial	Final	Initial	Final
LOCOS 2D	721	869	122	122	0	0
LOCOS 3D	4088	4671	557	503	54	54

TAB. 6.2 – Nombre de nœuds ajoutés ainsi que leurs positions.

Dans le tableau 6.2,

- la colonne **Nœuds** représente le nombre de nœuds ajoutés par le mailleur, leur pourcentage par rapport au nombre initial de nœuds, et leur pourcentage par rapport au nombre initial de nœuds situés sur les interfaces ;

- la colonne **Arêtes** définit le nombre de nœuds ajoutés sur les arêtes des enveloppes, et leur pourcentage par rapport au nombre de nœuds ajoutés ;
- et la colonne **Faces** correspond au nombre de nœuds ajoutés à l'intérieur des faces imposées, et leur pourcentage par rapport au nombre de nœuds ajoutés.

La proportion de sommets ajoutés lors de la reconstruction des interfaces est importante (de 22% à 33% des nœuds qui décrivent la frontière des différents domaines de ces structures). De plus, de 90% à 100% des sommets ajoutés sont situés sur des arêtes. Ce résultat est directement lié au fait que les interfaces des domaines que nous maillons sont mal décrites (cf. 4.4.1 page 90) : des pans entiers de ces structures sont discrétisés à l'aide de carrés (coupés en triangles). En conséquence, la plupart des nœuds ajoutés sont situés à l'intersection des diagonales de ces carrés.

L'importance du nombre de coquilles locales rencontrées lors du forçage de faces imposées, en comparaison du nombre de tubes remaillés au cours de cette étape (tableau 6.3), montre clairement l'importance du rôle joué par les coquilles dans l'absence de faces imposées, et appuie l'analyse que nous avons faite au paragraphe précédent.

La quantité de sommets ajoutés lors du remaillage des coquilles témoigne également de l'intérêt d'une stratégie de remaillage par basculement d'arêtes. Cette approche, utilisée avec succès pour remailler les tubes, faisait défaut dans le cas des coquilles. Une étude postérieure à ce travail a permis de réduire significativement cet excès de nouveaux nœuds grâce à l'extension des basculements d'arêtes au remaillage de coquilles locales.

Structures	Tubes	T-B	T-N	Coquilles
LOCOS 2D	29 20%	24 83%	5 17%	117 80%
LOCOS 3D	181 29%	135 75%	46 25%	457 71%

TAB. 6.3 – Nombre de tubes et de coquilles locales rencontrés, et méthodes de remaillage utilisées pour les éliminer.

Dans le tableau 6.3,

- la colonne **Tubes** définit le nombre de tubes rencontrés, et leur pourcentage par rapport au nombre total de tubes et de coquilles ;
- la colonne **T-B** représente le nombre de tubes éliminés en appliquant des basculements d'arêtes, et leur pourcentage par rapport au nombre total de tubes ;

- la colonne **T-N** correspond au nombre de tubes éliminés en ajoutant un nœud, et à leur pourcentage par rapport au nombre total de tubes ;
- et la colonne **Coquilles** indique le nombre de coquilles locales rencontrées, et leur pourcentage par rapport au nombre total de tubes et de coquilles (les coquilles locales sont toutes remaillées en ajoutant des nœuds).

6.2.2 Rediscrétisation des interfaces

L'ajout de nœuds pour reconstruire les faces imposées se traduit par le tronçonnement des arêtes et des faces forcées (cf. 5.1.1 page 116 et 5.1.2 page 118). Le tableau 6.4 décrit ces variations.

Structures	F-initial	F-final	A-N	F-N	S-F
LOCOS 2D	1176	1421 21%	0 2	0 0	1 5
LOCOS 3D	3456	4578 32%	0 6	0 7	1 21

TAB. 6.4 – *Tronçonnement des arêtes et des faces.*

Dans le tableau 6.4,

- la colonne **F-initial** représente le nombre initial de faces imposées ;
- la colonne **F-final** correspond au nombre final de faces, et au pourcentage de faces ajoutées par tronçonnement ;
- la colonne **A-N** indique les nombres minimaux et maximaux de nœuds ajoutés sur des arêtes ;
- la colonne **F-N** indique les nombres minimaux et maximaux de nœuds ajoutés à l'intérieur d'une face imposée ;
- et la colonne **S-F** représente les nombres minimaux et maximaux de sous-faces qui composent une face imposée.

A travers ces données, on remarque que le nombre maximum de nœuds insérés sur une arête ou à l'intérieur d'une face peut être important : le maillage LOCOS 3D possède une arête tronçonnée en 7 sous-arêtes et une face avec 7 nœuds intérieurs supplémentaires. Cette situation peut conduire au tronçonnement d'une face en 21 sous-faces.

Si, en général, les faces sont reconstruites aisément avec un faible ajout de sommets, il existe des configurations complexes qui aboutissent à de fort tronçonnements si on favorise trop l'ajout de nœuds. Le maillage de la structure LOCOS 3D démontre les limites de notre approche.

Notons enfin que pour le maillage de la structure LOCOS 2D, tous les sommets ajoutés sont situés sur des arêtes, et que la face la plus tronçonnée ne contient que 5 sous-faces.

6.2.3 Nombre de tétraèdres dans ces maillages

Le tableau 6.5 indique le nombre de tétraèdres générés par MESHGEN dans chacune des structures. Si on compare le nombre d'éléments dans le masque de nitrure, l'oxyde de champ et le substrat de silicium (Variations), avec le nombre de tétraèdres dans les structures avant remaillage (Initial), on remarque un accroissement d'environ un quart. Cette variation est due, pour l'essentiel, aux nœuds ajoutés lors de la reconstruction des faces imposées.

Structures	Initial	Final	Boîte	Variations
LOCOS 2D	2501	4921	1731 35%	3190 +689 +28%
LOCOS 3D	20003	29324	4479 15%	24845 +4842 +24%

TAB. 6.5 – *Evolution du nombre de tétraèdres au cours du remaillage.*

6.2.4 Vitesse et temps de maillage

Le tableau 6.6 présente les vitesses de maillage (nombre de nœuds et de tétraèdres maillés par minute) et de reconstruction des faces (nombre de faces reconstruites par minute) pour les structures LOCOS 2D et LOCOS 3D, sur une station SUN ULTRA II.

Structures	Nœuds/minute	Tétraèdres/minute	Faces/minute
LOCOS 2D	12772	75560	314181
LOCOS 3D	8706	54965	77132

TAB. 6.6 – *Vitesse de maillage et de forçage des faces imposées.*

Le tableau 6.7, quant à lui, présente les temps CPU pour mailler ces LOCOS sur une station SUN ULTRA II.

Structures	Cavité	Boule	Arêtes	Faces
LOCOS 2D	2.51s 64%	0.79s 34%	0.38s 58%	0.28s 42%
LOCOS 3D	19.62s 68%	9.21s 32%	1.13s 76%	2.05s 24%

TAB. 6.7 – Evolution du nombre de tétraèdres au cours du remaillage.

Le temps passé à calculer les cavités \mathcal{C}_i est deux fois plus important que celui passé à calculer les boules \mathcal{B}_i . Ce résultat, qui est en porte à faux avec les données de l'INRIA (temps réparti de façon équitable entre ces deux phases du maillage), indique que des améliorations sont encore possibles. En particulier, le temps mis pour trouver le tétraèdre qui contient le nœud inséré dans le maillage est beaucoup plus faible avec le mailleur de l'INRIA.

Notons également que la reconstruction des arêtes est significativement plus longue que celle des faces.

La vitesse de maillage a été une question longtemps débattue au sein des partenaires des projets PROMPT et PROMPT II. Nous avons très vite défendu l'idée de remaillages complets en cours de simulation alors que certains de nos partenaires pensaient que le temps nécessaire pour remailler une structure était prohibitif. Les résultats que nous avons obtenus (tableaux 6.6 et 6.7) démontrent clairement que cette approche est parfaitement praticable.

6.3 Comparaison avec d'autres mailleurs

Afin de mieux cerner les capacités de MESHGEN, nous avons confronté différentes techniques de maillage à l'aide de LOCOS simples (fig. 6.7 page 150). La série de tests effectuée permet d'évaluer la qualité de nos outils de maillage et de mettre en lumière les stratégies à privilégier parmi celle décrites aux deuxième et troisième chapitres [75]. Pour cela, nous avons utilisé trois mailleurs :

- MESH, un mailleur qui utilise les octrees. Conçu par l'université ETH Zürich, il est commercialisé par ISE-AG.
- TETMESH, un mailleur qui est basé sur le critère de Delaunay. Conçu par l'INRIA, il est commercialisé par Simulog.
- MESHGEN, le mailleur que nous avons développé.

Le choix du mailleur MESH, conçu au départ pour la simulation de dispositifs semi-conducteurs, réside dans le fait qu'il a été modifié tout au long des

projets PROMPT et PROMPT II dans le but de mieux répondre aux exigences de la simulation de procédés de fabrication de ces composants. Ce mailleur, très efficace sur des composants de type Manhattan produits par des générateurs de structures, constitue une excellente référence lorsque nous maillons un composant avant d'entamer la simulation (ces composants étant précisément de type Manhattan).

Le choix de TETMESH réside quant à lui dans le fait qu'il s'appuie sur la même approche que celle que nous avons privilégiée. Robuste et rapide, il constitue un excellent indicateur des performances que l'on peut attendre de l'approche que nous défendons.

Enfin, ces deux mailleurs ont l'avantage d'une maturité acquise au cours de nombreuses années d'étude et de développement. Ils constituent donc d'excellentes références pour évaluer nos acquis. Il manque toutefois à cette comparaison un mailleur basé sur la méthode frontale pour lui donner un caractère exhaustif.

6.3.1 Taille du maillage

La première qualité que nous considérons pour comparer ces mailleurs est la taille des maillages qu'ils produisent. Les caractéristiques que nous utilisons pour cela sont :

- le nombre de nœuds (N),
- le nombre de tétraèdres (T),
- le nombre de faces triangulaires (F),
- le nombre d'arêtes (A),
- et la connectivité nodale maximale (C).

La pertinence de ces critères tient au fait qu'ils fournissent de bons indicateurs pour évaluer la qualité des matrices creuses qui interviennent dans les systèmes linéaires à résoudre. En particulier, plus les rapports N/T et A/T sont grands, meilleures sont les matrices creuses. Il permet en outre de mettre en valeur la facilité (ou la difficulté) qu'ont les mailleurs à discrétiser certaines structures.

Le tableau 6.8 fournit la taille des maillages finaux pour les exemples décrits ci-avant.

Structures	Mailleurs	N	T	F	A	C	N/T	A/T
Exemple 1	Mesh	203	658	1474	1016	26	0.31	1.54
	Tetmesh	192	596	1346	946	12	0.32	1.58
	Meshgen	212	708	1570	1073	14	0.30	1.52
Exemple 2	Mesh	9250	47544	97667	59642	150	0.20	1.25
	Tetmesh	238	814	1801	1224	19	0.29	1.50
	Meshgen	298	1128	2443	1616	23	0.26	1.43

TAB. 6.8 – *Taille des maillages.*

Ces chiffres montrent que TETMESH produit les meilleurs résultats :

- nombre minimal de nœuds, de tétraèdres et de faces,
- faible connectivité nodale,
- ainsi que rapports N/T et A/T maximaux.

Les rapports N/T et A/T indiquent que MESH est mieux adapté que MESHGEN pour les structures de type Manhattan, et que MESHGEN est mieux adapté que MESH pour des structures avec des courbures. Enfin, la connectivité nodale est généralement très mauvaise avec MESH. Ceci s'explique par la structure cubique sous-jacente au maillage : une connectivité de valeur 26 correspond au cas d'un sommet connecté à ses 26 nœuds voisins dans une structure cubique régulière. Le second exemple, dont la connectivité nodale atteint 150, reflète l'incapacité de MESH à mailler efficacement des structures avec de légères courbures.

6.3.2 Qualité des maillages pour la simulation

Le second critère pris en compte est l'aptitude des mailleurs à fournir des maillages adéquats pour la simulation par éléments finis. En particulier, nous nous intéressons à la stabilité de notre schéma numérique. Pour la diffusion, cette stabilité est liée au fait que le Jacobien associé au membre gauche du système linéaire à résoudre est une M-Matrice [76] (les termes diagonaux ne doivent pas être négatifs et les termes hors diagonale ne doivent pas être positifs).

Des travaux ont permis la définition de propriétés qui garantissent une M-Matrice dans notre système linéaire. Pour cela, il suffit que

- le maillage tétraédrique respecte le critère de Delaunay ;
- le centre des sphères circonscrites aux tétraèdres soit situé à l'intérieur du domaine de simulation ;
- la matrice soit assemblée avec la méthode OSC (Orthogonal Subdomain collocation) [77].

Toutefois, la méthode OSC entraîne un temps d'assemblage des matrices prohibitif. Il était donc souhaitable de déterminer un critère efficace pour que la méthode de Galerkin, plus rapide, puisse être utilisée. Des études très récentes ont déterminé les propriétés que doivent respecter les maillages tétraédriques³ [72].

Afin d'évaluer la qualité des maillages fournis par chacun des mailleurs, nous avons simulé la diffusion des agents oxydants sur les deux structures décrites ci-avant. Nous nous sommes intéressés en particulier au nombre de :

- sphères circonscrites (SC) dont le centre se situe hors de son tétraèdre,
- tétraèdres (CD) qui ne respectent pas le critère de Delaunay,
- termes diagonaux négatifs (DN),
- termes hors diagonale positifs (HDP),
- nœuds avec une concentration finale négative (CN).

Le tableau 6.9 présente la valeur que prennent ces caractéristiques lors de simulations effectuées sur les structures décrites en exemple pour les méthodes d'assemblage OSC et de Galerkin. Une fois encore, TETMESH donne les meilleurs résultats (excepté pour un assemblage OSC sur une structure de type Mahattan où MESH s'impose).

Toutefois, aucun des mailleurs ne permet l'obtention d'une M-Matrice. Cette lacune prend toute sa signification avec MESHGEN : le nombre important de tétraèdres qui ne respectent pas le critère de Delaunay et de centres de sphères circonscrites qui se situent hors du domaine simulé fait converger notre système vers une solution non physique (d'où l'apparition de concentrations négatives). Si TETMESH ne faillit pas pour ces exemples, il est loin de

3. Ces résultats n'étaient pas connus au moment où nous avons effectué ce travail de recherche

Structures	Mailleurs	SC	CD	Galerkin			OSC		
				DN	HDP	CN	DN	HDP	CN
Exemple 1	Mesh	145	0	0	172	0	0	34	0
	Tetmesh	246	108	0	134	0	0	56	0
	Meshgen	435	316	0	348	8	0	122	0
Exemple 2	Mesh	-	-	-	-	-	-	-	-
	Tetmesh	529	301	0	300	0	0	238	0
	Meshgen	777	473	0	568	1	0	298	27

TAB. 6.9 – *Qualité des maillages pour la simulation ('-' indique que le simulateur n'a pas pu converger avec le maillage fourni).*

garantir la stabilité de notre schéma numérique. Ainsi, pour le calcul des contraintes mécaniques, le maillage produit par TETMESH, bien qu'il soit le meilleur parmi ceux générés par ces trois mailleurs, ne permet pas à notre simulateur de converger une fois sur deux. Le problème tient au fait qu'aucun de ces mailleurs ne prend en compte le critère géométrique fondamental qui garantit une M-Matrice, et ce pour une méthode d'assemblage de type OSC comme de type Galerkin.

Notons enfin que sur une structure courbe, le maillage fournit par MESH ne permet pas à notre simulateur de converger lors du calcul de la diffusion des dopants (d'où l'absence de donnée dans les colonnes Galerkin et OSC du tableau ci-dessus). La comparaison du maillage produit par MESH (fig. 6.8) avec celui généré par MESHGEN (fig. 6.9) permet de souligner la difficulté qu'a MESH à mailler un domaine avec une légère courbure. La forte dégradation du maillage surfacique du champ d'oxyde révèle les lacunes d'une approche octree sur ce type de structure. Pour cet exemple, seul TETMESH respecte fidèlement la discrétisation des enveloppes et n'ajoute aucun point sur ces surfaces.

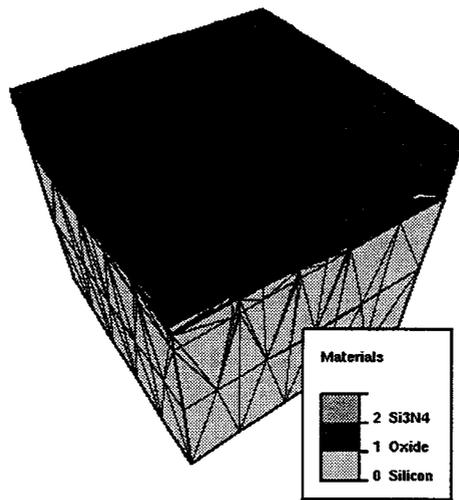


FIG. 6.8 –*Détail de la surface du maillage produit par MESH pour un champ d'oxyde en forme de bec d'oiseau.*

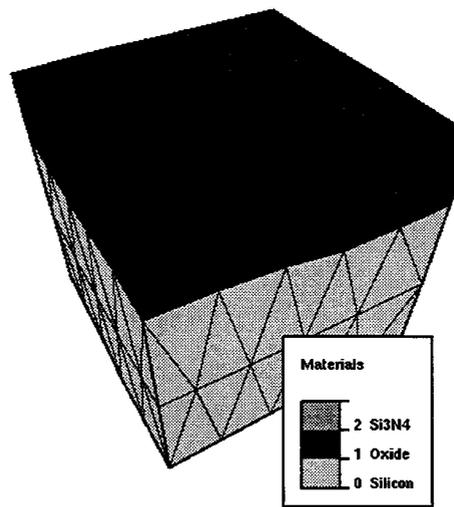


FIG. 6.9 –*Détail de la surface du maillage produit par MESHGEN pour un champ d'oxyde en forme de bec d'oiseau.*

Vitesse et temps de maillage

Une des caractéristiques utilisées pour mesurer la qualité d'un mailleur est sa vitesse, c'est à dire le nombre de points insérés par unité de temps, le nombre d'éléments créés par unité de temps, ou encore le temps requis pour mailler une structure de taille donnée.

Le tableau 6.10 présente ces données pour les exemples décrits ci-avant.

Structures	Mailleurs	N	T	Temps (sec.)	$N s^{-1}$	$T s^{-1}$
Exemple 1	Mesh	203	658	3.99	50.87	164.91
	Tetmesh	192	596	1.48	129.72	402.70
	Meshgen	212	708	1.73	122.54	409.24
Exemple 2	Mesh	9250	47544	169.21	56.66	280.97
	Tetmesh	238	814	1.71	139.18	476.02
	Meshgen	298	1128	2.53	117.78	445.85

TAB. 6.10 – *Vitesses et temps CPU pour générer ces maillages sur une station SUN ULTRA II.*

On remarque que malgré le nombre important de faces mal décrites et la nature cubique du premier exemple, les mailleurs de type Delaunay sont significativement plus rapides (presque deux fois plus rapides). Ces valeurs sont toutefois relativement faibles ici puisque ces mailleurs ont des vitesses qui atteignent plus de 100000 tétraèdres à la minute (1670 tétraèdres par seconde) sur des structures telles que des avions. Nous avons enregistré une vitesse de 13500 nœuds par minute (75000 tétraèdres par minute) avec MESHGEN sur des LOCOS.

6.4 Bilan

La réalisation d'un générateur de maillages tridimensionnels s'avère être une tâche ardue qui requiert un effort de longue haleine; nous avons obtenu un premier maillon capable de produire des maillages tétraédriques tout en respectant des frontières imposées. Le forçage des faces manquantes s'appuie sur des techniques de basculement d'arêtes et d'ajout de nœuds (ce qui entraîne la rediscrétisation des enveloppes).

Les tests effectués ont démontré la capacité de MESHGEN à mailler rapidement des structures de type LOCOS (75000 tétraèdres par minute et 13500

nœuds par minute), permettant ainsi de remailler complètement une structure en cours de simulation sans en affecter la durée.

Du point de vue de la qualité des éléments finis, notre mailleur ne permet pas l'obtention de M-Matrice. Cette lacune rend MESHGEN peu utilisable dans la mesure où les simulations risquent de converger vers des solutions incorrectes. Les LOCOS 3D que nous avons présentés ont mis en valeur ce problème au cours de simulations. Nos outils ont néanmoins rendu possible le calcul de la pression hydrostatique dans des LOCOS 3D [78].

En ce qui concerne le respect des frontières, la technique de forçage des faces imposées permet de restituer la majorité des faces sans les tronçonner. Toutefois, l'élimination de coquilles locales conduit trop souvent à l'ajout de nœuds. De plus, dans certaines configurations, des faces peuvent être exagérément divisées (jusqu'à 21 sous-faces).

Enfin, MESHGEN est encore loin de pouvoir mailler des structures PBL, l'apparition de boucles et de recouvrements de domaines constituant toujours un obstacle important.

6.5 Perspectives

De nombreux perfectionnements sont nécessaires si nous voulons apporter à MESHGEN toutes les qualités d'un mailleur adapté à la simulation de procédés de fabrication de transistors en silicium.

Privilégier le basculement d'arêtes à l'ajout de nœuds

Nous avons fait le choix de recourir systématiquement à l'ajout de nœuds dès que l'application des opérateurs $2 \rightarrow 3$, $3 \rightarrow 2$ et $4 \rightarrow 4$ se heurte à des zones concaves. Des travaux postérieurs à cette étude ont montré l'importance de privilégier les basculements d'arêtes afin de limiter l'ajout de sommets dans le maillage.

Améliorer le calcul de la cavité

De même, les tests effectués ont mis en lumière le rôle de la qualité des éléments nés de l'ajout de points sur les arêtes ou les faces lors de la phase de forçage de faces manquantes. Cet aspect est critique car, dans ces cas particuliers, nous restreignons la cavité à remailler aux tétraèdres qui contiennent

le nœud inséré, ce qui conduit à la génération de tétraèdres de très mauvaise qualité. Si cet inconvénient peut être réduit en appliquant les opérateurs de retournement d'arêtes sur des tétraèdres voisins lorsqu'ils ne respectent pas le critère de la sphère vide, il semble souhaitable de modifier l'algorithme qui restreint si fortement la cavité des sommets ajoutés pendant la reconstruction des faces imposées. Ceci est possible à condition que les cavités soient corrigées lorsqu'il y a présence d'arêtes imposées, (ce contrôle a pour objet d'éviter la destruction d'arêtes qui interviennent dans la reconstruction d'une face).

Traitement des boucles et des recouvrements de domaines

Un des points inachevés de cette étude concerne la prise en compte des techniques d'ajout de nœuds aux intersections entre les domaines qui se recouvrent ou à la base des boucles. Il reste donc à mettre en œuvre les solutions que nous avons conçues et à vérifier leur validité sur des structures plus complexes telles que des PBL. Cette propriété fournirait à MESHGEN un avantage sérieux sur TETMESH.

S'il existe des approches qui corrigent les frontières avant de mailler le volume qu'elles décrivent, nous restons persuadés que la rediscrétisation des frontières lors de la génération de maillage est préférable car

- elle évite un traitement inutile lorsque la frontières des domaines ne présente aucune lacune,
- et elle facilite la détection de ces dégénérescences.

Combiner les techniques de maillage

Les générateurs de structures produisent généralement des structures de types Manhattan. Ces structures comprennent de larges surfaces planes découpées en rectangles. Cette caractéristique rend les mailleurs de type Delaunay peu appropriés au maillage de ces structures car leurs enveloppes sont mal décrites (cf. 4.4.1 p. 90). L'approche octree, au contraire répond bien à la nature de ces structures initiales.

Par contre, une fois les domaines déformés, la présence de surfaces courbes rend l'approche octree inefficace: les mailleurs de type Delaunay produisent alors de meilleures discrétisations.

Nous maillons donc nos structures de type Manhattan avec MESH, et faisons appel à MESHGEN pour relaxer et lisser le maillage, et à TETMESH pour

remailler des structures en cours de simulation (TETMEH étant plus robuste que MESHGEN).

Remaillage complet systématique

Bien que le remaillage complet des structures à chaque pas de temps ait longtemps été considéré comme trop coûteux en temps de calcul, les tests que nous avons effectués démontrent que cette approche est raisonnablement praticable avec des mailleurs de Delaunay [75].

Propriétés à apporter aux futurs mailleurs

Les travaux récents conduits par l'équipe du professeur Selberherr ont mis en lumière les propriétés angulaires que doivent respecter les maillages tétraédriques pour que les simulateurs puissent converger vers des solutions physiques [72]. A ce jour, aucun des outils que nous avons développés ou évalués ne respecte ces propriétés. Cette amélioration constitue un des points essentiels dans la recherche de techniques de maillages adaptées à la simulation de procédés de fabrication des composants semi-conducteurs.

Enfin, l'utilisation de maillages anisotropes permet d'améliorer la qualité des solutions numériques et de réduire le temps de calcul pour les obtenir. Il reste toutefois à étudier la pertinence de l'utilisation de ces maillages dans notre domaine et la difficulté de leur mise en œuvre sur des structures qui sont encore, à ce jour, difficilement maillables avec des mailleurs isotropes.

Bibliographie

- [1] G.E. MOORE. In *IEEE Spectrum*, volume 16, page 30, 1979.
- [2] E.R. HNATEK. *Integrated Circuit Quality and Reliability*. Marcel Dekker, Inc., 1995.
- [3] K. KASHIMOTO and M. KASHIWAGI. ULSI Research and Development in JAPAN. In *Proceedings of the Fourth International Symposium on Ultra Large Scale Integration Science and Technologie*, page 30, 1993.
- [4] B. BAYLAC. From Process to Circuit Simulation : How to Use the Modeling Chain. In J.J.H. Miller, editor, *The Interfaces and Integration of Process Device and Circuit Models*, volume 8, pages 1–7. Boole Press Limited, 1987.
- [5] E. CAQUOT, J. DANGLA, M. LAPORTE, J.F. PALMIER, A. MAROCCO, F. HECHT, and K. SOUISSI. Integration of Process, Device and Circuit Models for III-V Devices. In J.J.H. Miller, editor, *The Interfaces and Integration of Process Device and Circuit Models*, volume 8, pages 8–18. Boole Press Limited, 1987.
- [6] K. DE MEYER. Process and Device Modeling and Parameter Extraction in a Research and Development Environment. In J.J.H. Miller, editor, *The Interfaces and Integration of Process Device and Circuit Models*, volume 8, pages 19–30. Boole Press Limited, 1987.
- [7] C. LOMBARDI. The Interfaces Between Process, Device and IC Models. In J.J.H. Miller, editor, *The Interfaces and Integration of Process Device and Circuit Models*, volume 8, pages 62–70. Boole Press Limited, 1987.
- [8] A. PONCET, H. BELHADDAD, C. CORBEX, A. GERODOLLE, S. MARTIN, and M. PEROCESCHI. General Purpose, Data and Structure and Software Tools for Process-Device Simulator Integration. In J.J.H. Miller, editor, *The Interfaces and Integration of Process Device and Circuit Models*, volume 8, pages 83–96. Boole Press Limited, 1987.

- [9] A. YOSHII. Device Simulation and its Integration with Process and Circuit Simulations. In J.J.H. Miller, editor, *The Interfaces and Integration of Process Device and Circuit Models*, volume 8, pages 97–108. Boole Press Limited, 1987.
- [10] D.A. ANTONIADIS, S.E. HANSEN, and R.W. DUTTON. SUPREM-II-A Program for IC Process Modeling and Simulation. In *Stanford Electronics Laboratories Technical Report No. 5019-2*, June 1978.
- [11] E. CAQUOT and A. MAROCCO. Numerical Simulation with Finite Elements of Non-Linear Impurity Diffusion in Silicon. In *2nd Int. Conf. on Numerical Analysis of Semiconductor Devices and I.C.'s*, Ireland, Dublin, June 1981.
- [12] Dominique COLLARD. *Application de la Méthode des Eléments Finis à la Simulation de Technologie Silicium*. PhD thesis, Université des Sciences et Techniques de Lille, 1984.
- [13] Bruno BACCUS. *Simulation Bidimensionnelle de Technologie Silicium : l'Approche Multicouche*. PhD thesis, Université des Sciences et Techniques de Lille, 1990.
- [14] Eric VANDENBOSSCHE. *Contribution à la Modélisation de la Diffusion des Dopants en Fortes Concentrations dans le Silicium*. PhD thesis, Université des Sciences et Techniques de Lille, 1994.
- [15] Vincent SENEZ. *Modélisation Bidimensionnelle de l'Oxydation du Silicium : Analyse Viscoélastique de la Relaxation des Contraintes*. PhD thesis, Université des Sciences et Techniques de Lille, 1995.
- [16] H. UMIMOTO, S. ODANAKA, and A. GOHDA. A Three-Dimensional Process Simulation using Advanced SMART-P Program. In J. Lorenz, editor, *3-Dimensional Process Simulation*, pages 30–56. Springer-Verlag/Wien, September 1995.
- [17] M.E. LAW and S. CEA. Three-Dimensional Simulation of Thermal Processes. In J. Lorenz, editor, *3-Dimensional Process Simulation*, pages 77–94. Springer-Verlag/Wien, September 1995.
- [18] J. LORENZ, E. BÄR, A. BURENKOV, W. HENKE, K. TIEZEL, and M. WEIß. 3D Simulation of Topography and Doping Processes at FhG. In J. Lorenz, editor, *3-Dimensional Process Simulation*, pages 109–135. Springer-Verlag/Wien, September 1995.
- [19] M. ORLOWSKI. 3D Process Simulation Requirements and Tradeoffs from Industrial Perspective. In J. Lorenz, editor, *3-Dimensional Process Simulation*, pages 178–195. Springer-Verlag/Wien, September 1995.
- [20] G. HEISER. *Design and Implementation of a Three-Dimensional, General Purpose Semiconductor Device Simulator*. PhD thesis, ETH Zürich, 1991.

- [21] M. WESTERMANN, T. FEUDEL, N. STRECKER, S. GAPPISCH, A. HÖFLER, and W. FICHTNER. Multi-Dimensional TCAD: the PROMPT/DESSIS Approach. In J. Lorenz, editor, *3-Dimensional Process Simulation*, pages 162–177. Springer-Verlag/Wien, September 1995.
- [22] S. MÜLLER. *An Object-Oriented Approach to Multidimensional Semiconductor Device Simulation*. PhD thesis, ETH Zürich, 1994.
- [23] M.E. LAW. Challenges to Achieving Accurate Three-Dimensional Process Simulation. In S. Selberherr, H. Stippel, and E. Strasser, editors, *Simulation of Semiconductor Devices and Processes*, volume 5, pages 1–8. Springer-Verlag/Wien, September 1993.
- [24] Z.H. SAHUL, R.W. DUTTON, and M. NOELL. Grid and Geometry Techniques for Multi-Layer Process Simulation. In S. Selberherr, H. Stippel, and E. Strasser, editors, *Simulation of Semiconductor Devices and Processes*, volume 5, pages 417–420. Springer-Verlag/Wien, September 1993.
- [25] F. HERMELINE. Triangulation Automatique d'un Polyèdre en Dimension N. *R.A.I.R.O. Analyse numérique*, 16(3):211–242, 1982.
- [26] S.M. SZE. *VLSI Technologie*. McGraw-Hill Book Company, 1988.
- [27] J. LINDHARD, M. SHARFF, and H. SHIØTT. Range Concepts and Heavy Ion Ranges. *Mat. Fys. Med. Dan*, 33(14), 1963.
- [28] U. GOSELE. Current Understanding of Diffusion Mechanisms in Silicon. In *Semiconductor Silicon*, page 541, Pennington, NJ, 1986. Huff, Abe and Kolbesen.
- [29] J.F. GIBBONS. Ion Implantation in Semiconductor - Part II: Damage Production and Annealing. *Proc. IEEE*, 60:1062, 1960.
- [30] E. LAMPIN, V. SENEZ, and A. CLAVERIE. Modeling of the Transient Enhanced Diffusion of Boron Implanted into Preamorphised Silicon. *J. Applied Physics*, June 1999.
- [31] J.A. APPELS, E. KOOI, M.M. PAFFEN, and J.J.H. SCHATOYE. Local Oxidation of Silicon and its Application in Semiconductor Device Technologie. *Philips Research Report*, 25:118, 1970.
- [32] N. SHIMIZU Y. NAITO Y. ITOH Y. SHIBATA K. HASHIMOTO M. NISHIO A. ASAI K. OHE H. UMIMOTO and Y. HIROFUJI. A Poly-Buffer Recessed LOCOS Process for 256 Mbit DRAM Cells. *IEDM 92*, page 279, 1992.
- [33] P.M. FAHEY, S.R. MADER, S.R. STIFFLER, R.L. MOHLER, J.D. MIS, and J.A. SLINKMAN. Stress-induced Dislocations in Silicon Integrated Circuits. *IBM Journal of R&D*, 36(2), March 1970.

- [34] S.T. PANTELIDES and M. RAMAMOORTHY. Dynamics During Silicon Oxidation and the Nature of Defects at the si/sio_2 Interface. *Mat. Res. Soc. Sym. Proc.*, 490:59, March 1998.
- [35] P.J. JURGENSEN. *Journal of Chemical Physics*, 37:874, 1962.
- [36] C.J. HAN and C.R. HELMS. Silicon dry oxydation kinetics: Effects of the choice of integration constant on fits to the linear parabolic model. *Journal of the Electrochemical Society: Solid State Science and Technology*, 134(2):504, February 1987.
- [37] D.B. KAO, J.P. MCVITTIE, W.D. NIX, and K.C. SARASWAT. Two-Dimensional Oxidation of Silicon - I: Experiments. *IEEE Trans. on Electro. Devices*, 35(5):1008, May 1987.
- [38] B.E. DEAL and A.S. GROVE. General Relationship for the Thermal Oxidation of Silicon. *J. Applied Physics*, 36(12):3770, December 1965.
- [39] C.T. WANG. *Applied Elasticity*. McGraw-Hill, New-York, 1953.
- [40] I. BABUSKA and A.K. AZIZ. On the Angle of Condition in the Finite Element Method. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 13:214–226.
- [41] B. BACCUS, D. COLLARD, and E. DUBOIS. Adaptative Mesh Refinement for Multilayer Process Simulation using the Finite Element Method. *IEEE Trans. on Computer-Aided Design*, 11(3):396, 1992.
- [42] R.E. BANK and A. WEISER. Some A Posteriori Error Estimators for Elliptic Partial Differential Equations. *Math. Computation*, 44:283, 1985.
- [43] D. BROCARD, V. SENEZ, S. BOZEK, J. HERBAUX, and R. BOSSUT. Automatic Mesh Refinement for 3D Numerical Simulation of Thermal Diffusion in Silicon. In *Simulation of Semiconductor Processes and Devices*, September 1998.
- [44] A. LIU and B. JOE. Relationship Between, Tetrahedron Shape Measures. *BIT*, 34:268–287, 1994.
- [45] J.W. GADDUM. The Sums of Dihedral and Trihedral Angles in a Tetrahedron. *Amer. Math. Monthly*, 59:370–371, 1952.
- [46] B. NKONGA and H. GUILLARD. Godunov Type Method on Non-Structured Meshes for Three-Dimensional Moving Boundary Problems. Technical Report 1883, INRIA, Avril 1993.
- [47] V. SENEZ, S. BOZEK, and B. BACCUS. 3-Dimensional Simulation of Thermal Diffusion and Oxidation Processes. *IEDM 96*, pages 705–708, December 1996.
- [48] H. BOROUCAKI and P.L. GEORGE. Aspects of 2D Delaunay Mesh Generation. *Int. J. Num. Meth. Eng.*, 40:1957–1975, 1997.

- [49] H. BOROUCAKI and P.L. GEORGE. Quelques Conclusions sur la Construction d'un Maillageur 2D de Type Delaunay. Technical Report 2463, INRIA, Avril 1995.
- [50] H. BOROUCAKI and P.L. GEORGE. Encore Delaunay. Technical Report 2461, INRIA, Janvier 1995.
- [51] P.L. GEORGE and F. HERMELINE. Delaunay's Mesh of a Convex Polyhedron in Dimension d . Application to Arbitrary Polyhedra. *Int. J. Num. Meth. Eng.*, 33:975–995, 1992.
- [52] F. HERMELINE. *Une Méthode Automatique de Maillage en Dimension N*. PhD thesis, Paris XI, 1980.
- [53] A. GOLGOLAB. Maillageur 3D Automatique pour des Géométries Complexes. Technical Report 1004, INRIA, Mars 1989.
- [54] N. HITSCHFELD. *Grid Generation for Three-Dimensional Non-Rectangular Semiconductor Devices*. PhD thesis, ETH Zürich, 1993.
- [55] P. CONTI. *Grid Generation for Three-Dimensional Semiconductor Device Simulation*. PhD thesis, ETH Zürich, 1991.
- [56] N. HITSCHFELD, P. CONTI, and W. FITCHNER. Mixed Elements Trees: A Generalization of Modified Octrees for the Generation of Meshes for the Simulation of Complex 3D Semiconductor Devices Structures. In *IEEE Trans. Computer Aided Design of Integrated Circuits and Systems*, volume 12, pages 1714–1725, 1993.
- [57] S.H. LO. A New Mesh Generation Scheme for Arbitrary Planar Domains. In *Int. j. numer. methods engrg.*, volume 21, pages 1403–1426, 1985.
- [58] R. LÖHNER. Generation of Three-Dimensional Unstructured Grids by Advancing-Front Method. In *Proceedings AIAA 26th Aerospace Sciences Meeting*, page 515, 1988.
- [59] J. PERAIRE and K. MORGAN. A General Triangular Mesh Generator. In *Int. j. numer. methods engrg.*
- [60] J. PERAIRE, J. PEIRO, L. FORMAGGIA, K. MORGAN, and O.C. ZIENKIEWICZ. Finite Element Euler Computations in Three Dimensions. In *Proceedings AIAA 26th Aerospace Sciences Meeting*, page 32, 1988.
- [61] A. SHOSTKO and R. LÖHNER. Three-Dimensional Parallel Unstructured Grid Generation. In *Int. j. numer. methods engrg.*, volume 38, pages 905–925, 1995.
- [62] N.A. GOLIAS and T.D. TSIBOUKIS. Three-Dimensional Adaptive Mesh Generation. *IEEE Trans. on Magn.*, 28(2):1700–1703, March 1992.

- [63] N.A. GOLIAS and T.D. TSIBOUKIS. An Approach to Refining Three-Dimensional Tetrahedral Mesh Based on Delaunay Transformations. *Int. j. numer. methods engrg*, 37:793–812, 1994.
- [64] E. ATTA. Component-Adaptive Grid Interfacing. In *Proceedings AIAA 19th Aerospace Sciences Meeting*, page 382, 1981.
- [65] J.A. BENEK, J.L. STEGER, and F.C. DOUGHERTY. A Flexible Grid Embedding Technique with Application to the Euler Equations. In *Proceedings AIAA 6th Computational Fluid Dynamics Conference*, page 1944, 1983.
- [66] J.A. BENEK, P.G. BUNING, and J.L. STEGER. A 3-D Chimera Grid Embedding Technique. In *Proceedings AIAA 7th Computational Fluid Dynamics Conference*, page 1523, 1985.
- [67] J.A. BENEK, T.L. DONEGAN, and N.E. SUHS. Extended Chimera Grid Embedding Scheme with Application to Viscous Flows. In *Proceedings AIAA 8th Computational Fluid Dynamics Conference*, page 1126, 1987.
- [68] T.J. BAKER, A. JAMESON, and R.E. VERMELAND. Three Dimensional Euler Solutions with Grid Embedding. In *Proceedings AIAA 23rd Aerospace Meeting*, page 121, 1985.
- [69] J. FLORES, S.G. REZNICK, T.L. HOLST, and K. GUNDY. Transonic Navier-Stokes Solutions for a Fighter-like Configuration. In *Proceedings AIAA 25th Aerospace Meeting*, page 32, 1987.
- [70] R.L. SORESON. Elliptic Generation of Compressible Three-Dimensional Grids about Realistic Aircraft. In J. Hauser and C. Taylor, editors, *International Conference on Numerical Grid Generation in Computational Fluid Dynamics*, 1986.
- [71] B. DELAUNAY. Sur la Sphère Vide. *Bul. Acad. Sci. URSS Class. Sci. Nat.*, pages 793–800, 1934.
- [72] P. FLEISCHMANN, B. HAINDL, R. KOSIK, and S. SELBERHERR. Investigation of a Mesh Criterion for Three Dimensional Finite Element Diffusion Simulation. In *Proceedings of SISPAD'99*, pages 71–74, September 1999.
- [73] E. SALTEL P.L. GEORGE, F. HECHT. Automatic 3D Mesh Generation with Prescribed Meshed Boundaries. *IEEE Trans. Magn.*, 26:771–774, March 1990.
- [74] P.L. GEORGE. Automatic Mesh Generator using the Delaunay Voronoi Principle. *Survey on Mathematics for Industry*, 4:239–247, 1995.
- [75] V. SENEZ, S. BOZEK, and R. BOSSUT. Final Software Release Including Remeshing Techniques for Oxydation. Deliverable D509, ESPRIT Project 24038 PROMPT II, 1999.

- [76] R.S. VARGA. *Matrix Iterative Analysis*. Prentice-hall edition, 1962.
- [77] M. PUTTI and C. CORDES. Finite Element Approximation of the Diffusion Operator on Tetrahedra. *SIAM J. Sci. Comput.*, 19(4):1154–1163, July 1998.
- [78] T. HOFFMANN and V. SENEZ. Final Software Release for the Advanced Oxidation Model. Deliverable D407, ESPRIT Project 24038 PROMPT II, 1999.

Résumé

Ce travail s'inscrit dans le cadre des projets européens ESPRIT/JESSI 8150 PROMPT et ESPRIT 24038 PROMPT II dont l'objectif est de réaliser une chaîne de simulation de procédés de fabrication de composants semi-conducteurs multi-dimensionnelle capable de rendre compte d'effets 3D dus à la forte miniaturisation des transistors dans les circuits intégrés.

L'importance des maillages dans cette chaîne de simulation tient à la difficulté de générer des maillages adaptés aux exigences des modules de diffusion des impuretés dans un substrat de silicium et d'oxydation de ce substrat. Ce mémoire fait l'inventaire des contraintes que ces modules entraînent sur le maillage d'une structure, et propose un éventail de solutions.

Enfin, il décrit les outils que nous avons implantés pour générer et modifier des maillages tétraédriques, conformes, isotropes, à l'aide du critère de la sphère vide de Delaunay. Une attention particulière est portée au respect des enveloppes qui définissent les volumes à mailler.

mots clés : maillage, 3D, conforme, isotrope, tétraèdre, simplexe, Delaunay, éléments finis, simulation, procédés, fabrication, semi-conducteur, silicium.

Abstract

This work is set within the European projects ESPRIT 8150 **PROMPT** and ESPRIT 24038 **PROMPT II**, which aim to develop the next generation of tools dedicated to the design of advanced semiconductor technologies and optimization of deep submicron Silicon devices.

A new TCAD combines mesh generators with multi-dimensional process simulators capable of rendering 3D effects which are now critical in emerging ULSI technologies. The requirements imposed on mesh generation by simulators for dopant diffusion and silicon oxidization are enumerated and various solutions offered.

Tools that generate and modify isotropic, conformal, tetrahedral meshes, with the help of Delaunay's empty sphere criterion, are fully described. Particular care is paid to the respect of hulls which define volumes to be meshed.

keywords : mesh, 3D, conformal, isotropic, tetrahedron, simplexe, Delaunay, finite elements, simulation, process, manufacturing, semiconductor, silicon.

