Rapport TP AMS304
TP4

Aurélien Valade

1 Introduction

Le but de ce TP est la mise en place d'un code de calcule efficace d'interaction entre différents points d'une sphère plongée dans un espace à trois dimensions. On va pour cela considérer une méthode multipôle ainsi qu'une aproximation par décomposition en ondes planes pour la fonction de Green qui modélise l'intéraction mentionnée. Ces approximations sont valables *i.e.* donnent de bons résultats sous certaines conditions qui seront précisées plus tard.

On donne la fonction de Green complexe

$$G(x, y) = \frac{\exp(ik|x-y|)}{4\pi|x-y|}, \tag{1}$$

et un maillage de la sphère[1] dont les sommets seront notés par la suite les $\{x_i\}_{1,N}$. En considérant le vecteur aléatoire $\rho \in \mathbb{R}^N$, nous allons essayer de calculer de la manière la plus rapide possible une approximation de $V \in \mathbb{R}^N$ défini par

$$V_i = \sum_{j \neq i} G(x_i, x_j)\rho_j. \tag{2}$$

Remarque 1. *Cette fonction se réécrit avec un unique argument* $r > 0$

$$G(r) = \frac{\exp(ikr)}{4\pi r}.$$

2 Approximation harmonique de la fonction d'onde

On peut montrer par le calcul que la fonction d'onde peut se réécrire sous la forme d'une somme de contributions harmoniques donnée en 3 sous condition que les points x et y soient *assez* éloignés. Considérons un emsemble de points $\{x_i\}_{1,N_x}$ au voisinage de x_0 et un second ensemble de points $\{y_i\}_{1,N_y}$ dans le voisinage de y_0. On peut donner comme condition suffisante pour définir le voisinage que à k donné, il faut

$$\max_{i \in [1,N_x]} \left(|x_i - x_0|\right) \geq 0.3\frac{2\pi}{k}$$

et de même pour les $\{y_i\}_{1,N_y}$. On définit alors $r_0 = y_0 - x_0$ et $r = y - x - r_0$.

$$G(x, y) = \lim_{L \to \infty} \int_{\hat{s} \in S^2} e^{ik\hat{s}\cdot r} \mathcal{G}_L(\hat{s}, r_0) \tag{3}$$

ou $\mathcal{G}_L(\hat{s}, r_0)$ désigne la somme

$$\mathcal{G}_L(\hat{s}, r_0) = \frac{ik}{16\pi^2} \sum_{p \leq L} (2p+1) i^p h_p^{(1)}(k|r_0|) P_p(cos(\hat{s}, r_0)) \tag{4}$$

avec $h_p^{(1)}$ la première fonction de Hankel sphérique et P_p le polynôme de Legendre d'ordre p.

[1] En réalité on en prendra trois différents, avec trois tailles de mailles.

Remarque 2. *Dans la suite on notera $G_L(r, r_0)$ la somme partielle de la série convergent vers $G(r)$:*

$$G_L(r, r_0) = \int_{\hat{s} \in S^2} e^{ik\hat{s}\cdot r} \mathcal{G}_L(\hat{s}, r_0)$$

Trois grandes difficultés se présentent :

1. il faudra faire une quadrature sur la sphère unité pour calculer l'intégrale ;
2. la fonction $\mathcal{G}_L$ est relativement compliquée ;
3. il faudra faire un découpage adapté de la sphère avec de bons voisinages pour que l'approximation reste correcte.

3 Quadrature sur la sphère unité

Tout point $\hat{s}$ de la sphère peut être paramétré par les angles θ et φ. On peut donc définir la quadrature générale suivante pour une fonction $f : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$

$$\int_{S^2} f = \sum_{i,j} w_i^{\varphi} w_j^{\theta} f(x(\theta_j, \varphi_i), y(\theta_j, \varphi_i), z(\theta_j, \varphi_i))$$

reste à savoir quels points et quels poids prendre.

On choisie une quadrature optimale pour les harmoniques sphériques. Soit $L \in \mathbb{N}$, on pose $I = 2L+1$ et $J = L+1$.

- On fait une quadrature uniforme d'ordre I sur la variable φ :

$$\begin{cases} \varphi_i = \frac{2\pi i}{I} \\ w_i^{\varphi} = 1/I \end{cases} \quad \forall i \in [1, I].$$

- On fait une quadrature de Gauss-Legendre d'ordre J sur la variable θ. Cette quadrature permet d'intégrer exactement des polynômes d'ordre $2J+1$ sur le segment $[-1, 1]$.

Pour trouver les points et les poids de la quadrature de Gauss-Legendre plusieurs solutions s'offrent à nous. On décide d'utiliser la diagonalisaition de la matrice symétrique $\mathbb{T} \in \mathcal{M}_J(\mathbb{R})$

$$\mathbb{T} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & & \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & \ddots & 0 & \\ 0 & \ddots & \ddots & \frac{i}{\sqrt{4i^2-1}} & 0 \\ & 0 & \frac{i}{\sqrt{4i^2-1}} & 0 & \ddots \\ & & 0 & \ddots & \ddots \\ & & & & \end{pmatrix}$$

diagonalisable en

$$\mathbb{T} = PDP^{-1}$$

avec $D = \operatorname{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_J)$ et $P = (V_1 \ \ldots \ V_J)$. On peut déduire les valeurs nécessaires pour la quadrature:

$$\begin{cases} \theta_j = \arccos(\lambda_j) \\ w_j^{\theta} = 2V_j^2 \end{cases} \quad \forall j \in [1, J].$$

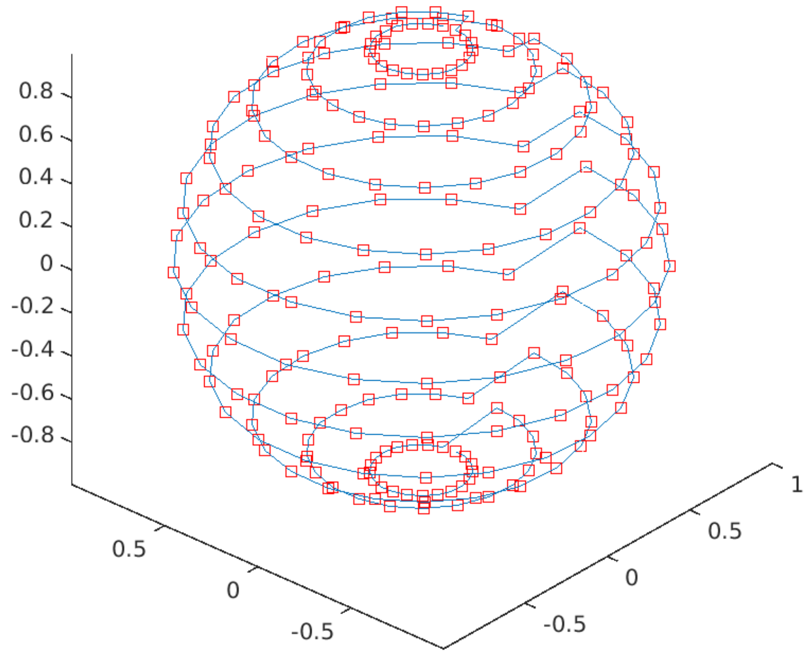

Figure 1: Représenation de la sphère pour $L = 10$.

Nous allons vérifier cette quadrature sur les harmoniques sphériques

$$Y_{lm}(\hat{s}) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_l^m(\cos(\theta)) e^{im\varphi} \quad \forall l \geq 0,\ \forall -l \leq m \leq l$$

dont on connaît la formule d'intégration théorique

$$\int_{S^2} Y_{lm} = \sum_{i,j} w_i^{\varphi} w_j^{\theta} Y_{lm}(\theta_j, \varphi_i) = \begin{cases} 2\sqrt{\pi} & \text{si } l = m = 0 \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

On obtient en effet les valeurs attendues avec des nombres complexes dont la norme est d'environs 10^{-16} pour les valeurs non nulles de l, m et est proche de $2\sqrt{\pi}$ pour $(l, m) = (0, 0)$ à la précision flottante près.

Cependant, on aimerait en savoir plus sur comment se comporte la valeur de cette intégrale en fonction du L, choisi pour l'instant arbitrairement. On oberve qualitativement dans un premier temps que pour un l fixé et pour tout $m \in [0, l]$, il y a une valeur seuil de L à partir de laquelle la valeur de l'intégrale chute de plusieurs ordres de grandeur en passant de l'unité à 10^{-16}. La dépendance de ce L_{seuil} par rapport au paramètre l est tracée en Figure 2, où on peut supposer une relation linéraire avec un coeficient d'environ 1/2.

On ne s'attend pas à avoir un comportement identique plus tard mais on peut espérer trouver des similarités, sinon cette étude nous à au moins permis de savoir de quel ordre de grandeur on doit choisir L pour des cas simples.

4 Éléments de calculs de la fonction $\mathcal{G}_L$

Remarque 3. *Dans la suite on note $\circ$ le produit terme à terme (aussi appelé produit de Schur).*

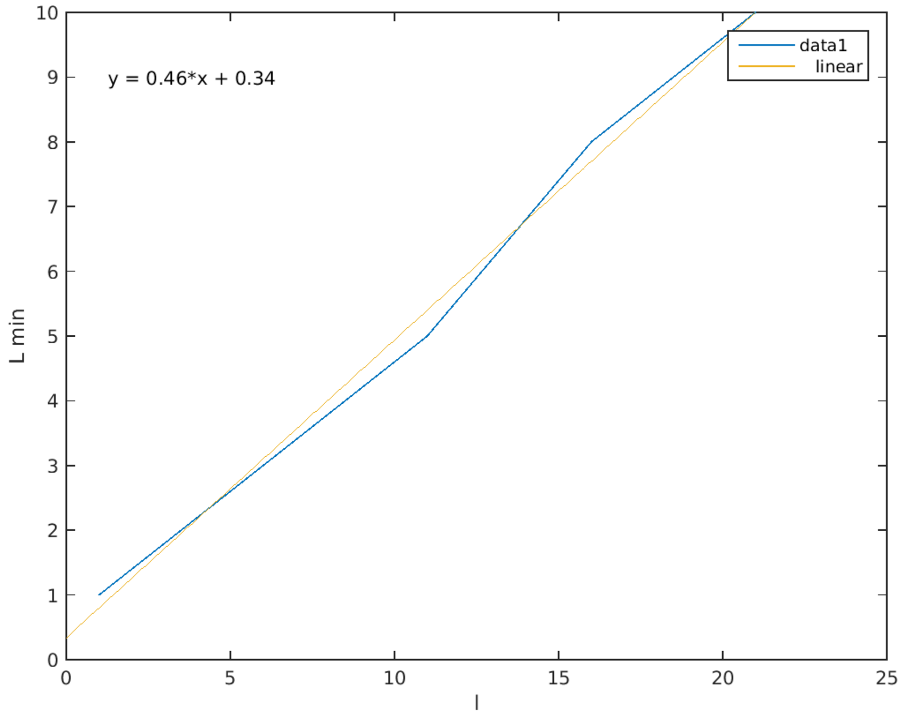

Figure 2: Valeur de L_{seuil} à partir de laquelle l'intégrale est supposée juste en fonction de l.

On rappelle que les fonctions Hankel sphériques $h_n^{(1)}$ s'obtiennent à partir des fonctions de Hankel $H_n^{(1)}$ cartésiennes implémentées dans MATLAB avec la formule

$$h_n^{(1)}(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} H_{n+1/2}^{(1)}(z), \quad \forall z \in \mathbb{C}, \forall n \in \mathbb{N}$$

Le calcul vectorialisé de la valeur de $\mathcal{G}_L(\hat{s}, r_0)$ avec $N_{\hat{s}}$ points de quadrature se fait comme suit

1. Créer le vecteur $F \in \mathbb{C}^L$ tel que $F_p = (2p+1)i^p, \forall 1 \leq p \leq L$
2. Créer le vecteur $H \in \mathbb{C}^L$ tel que $H_p = h_p^{(1)}(k|r_0|)$
3. Calculer le vecteur $K \in \mathbb{C}^L$ tel que $K = \frac{ik}{16\pi^2} F \circ H$
4. Créer la matrice $\mathbb{P} \in \mathcal{M}_{N_{\hat{s}} \times L}(\mathbb{C})$ telle que $\mathbb{P}_{sp} = P_p(\cos(\hat{s}_s, r_0))$
5. Calculer le vecteur $G \in \mathbb{C}^{N_{\hat{s}}}$ tel que $G = \mathbb{P}K$.

Le vecteur G est le résultat vectorialisé pour les tous les points de la sphère : $G_s = \mathcal{G}_L(\hat{s}_s, r_0),\ \forall s < N_{\hat{s}}$.

Pour vérifier que cette fonction donne de bons résultats, on les compare avec ceux de $G(r)$ pour plusieurs paramètrisations de L, r_0 et k.