

# Un code 1D de diffraction aux éléments finis

- Éléments finis en 1D
- Formulation en champ diffracté
- Conditions de bord de Robin
- *Perfectly Matched Layers* PML

## 1 Synthèse de la méthode

Ce qui suit est un résumé très bref des références [1] et [2] permettant de programmer un code FEM 1D pour résoudre un problème de diffraction 1D. Il s'agit en l'occurrence du problème 1D du "slab" en incidence normale.

### 1.1 Énoncé du problème

Considérons le problème mono-dimensionnel, dit de Sturm-Liouville, suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} (\alpha u'(x))' + \beta u(x) = S(x) \quad \text{sur } ]a, b[ \\ + \text{conditions aux limites en } a \text{ et } b \end{array} \right. \quad (1)$$

avec

- $S$  une fonction connue sur  $]a, b[$  (sources en physique)
- $\alpha$  et  $\beta$  des fonctions connues de  $\mathcal{L}^2$

**N.B.** Les conditions aux limites garantissent l'unicité de la solution.

### 1.2 Application

Sous forme variationnelle, il s'agit de trouver la fonction  $u$  de  $\mathcal{H}^1([a, b])$  telle que pour tout  $v$  dans  $\mathcal{H}^1([a, b])$  :

$$\begin{aligned} & - \int_a^b \alpha u'(x) \overline{v'(x)} \, dx + \left[ \alpha u'(x) \overline{v(x)} \right]_a^b \\ & + \int_a^b \beta u(x) \overline{v(x)} \, dx \\ & = \int_a^b S(x) \overline{v(x)} \, dx \end{aligned} \quad (2)$$

Le terme de bord de l'intégration par partie en rouge dans l'équation précédente permet de prendre en compte les conditions aux limites.

### 1.3 Conditions aux limites

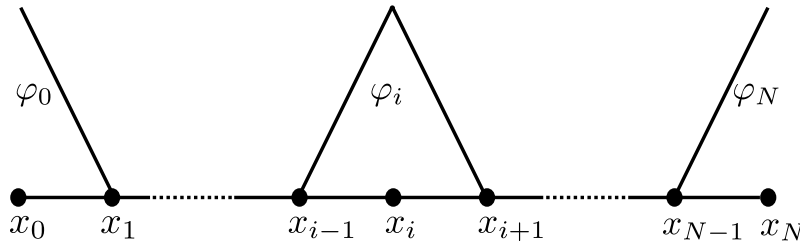
- Conditions de **Dirichlet** (ou essentielles)  
 $u(a)$  et/ou  $u(b)$  sont donnés (connus)  
 Par exemple,  $u(a) = u(b) = 0$   
 Notre solution vit donc dans  $\mathcal{H}_0^1[a, b] := \{u \in \mathcal{L}^2 / u' \in \mathcal{L}^2, u(a) = u(b) = 0\}$   
 Alors,  $[\alpha u'(x) \overline{v(x)}]_a^b = 0$  **puisque**  $u(a) = u(b) = 0$

- Conditions de **Neumann** (ou naturelles)  
 $u'(a)$  et/ou  $u'(b)$  sont donnés (connus)  
 $u(a)$  et/ou  $u(b)$  sont inconnus  
 Par exemple, dans le cas  $u'(a) = u'(b) = 0$ , on **force**  $[\alpha u'(x) v(x)]_a^b$  à zéro en "oubliant ce terme"
- Conditions de **Robin** (ou mixtes)  
 Dans le cas général, on connaît une relation linéaire entre  $u$  et  $u'$  :  
 $\eta_1 u(a) + \eta_2 u'(a) = \eta_3$   
 Plus de détails sont donnés en section 2.8.
- Conditions de **quasi-périodicité**  
 On impose  $u(a) = \eta u(b)$

## 1.4 Fonctions de base

$$\overline{\varphi_i(x)} = \begin{cases} \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} & \text{pour } x \in [x_{i-1}, x_i], \\ \frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i} & \text{pour } x \in [x_i, x_{i+1}], \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (3)$$

+ 2 demi fonctions chapeau en  $x_0 = a$  et  $x_N = b$ .



La fonction inconnue vit dans un espace mathématique continu  $V$ . Nous introduisons l'espace  $V_h$ , l'espace des fonctions linéaires par morceaux (continues). Toute fonction  $v_h$  de  $V_h$  s'écrit dans cette base :

$$v_h(x) = \sum_{i=0}^N v_i \varphi_i(x).$$

Nous cherchons  $v$  dans cet espace, et il est possible de prouver que  $v_h \rightarrow_{N \rightarrow +\infty} v$

## 2 Discrétisation

### 2.1 Approximation dans $V_h$

Trouver la fonction  $u_h$  dans  $V_h$  telle que :

$$\begin{aligned} \forall v_h \in V_h, \quad & - \int_a^b \alpha u'_h(x) \overline{v'_h(x)} dx + \left[ \alpha u'_h(x) \overline{v_h(x)} \right]_a^b \\ & + \int_a^b \beta u_h(x) \overline{v_h(x)} dx \\ & = \int_a^b S(x) \overline{v_h(x)} dx \end{aligned} \quad (4)$$

avec des conditions aux limites connues en  $a$  et  $b$ . Ces conditions aux limites seront imposées via le terme de bord l'Eq. 4  $\left[ \alpha u'_h(x) \overline{v_h(x)} \right]_a^b$ .

La linéarité est essentielle ici :

Eq. (4) est vérifiée  $\forall v_h \in V_{0,h} \Leftrightarrow$  Eq. (4) est vérifiée pour une base  $V_{0,h}$

$\Leftrightarrow$  Eq. (4) est vérifiée pour la base de Lagrange

$\Leftrightarrow$  Eq. (4) est vérifiée pour tout  $\{\varphi_i\}$

Nous cherchons une approximation  $u_h$  de  $u$  dans  $V_h$

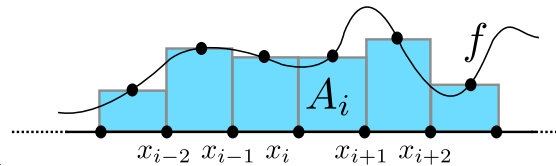
$u_h$  s'écrit comme :  $\sum_{j=0}^N u_j \varphi_j(x)$

Nous cherchons  $\{u_j\}_{j \in \{0, \dots, N\}}$  tel que pour tout  $i \in \{0, \dots, N\}$  :

$$\sum_{j=0}^N \left( - \int_a^b \alpha \varphi_j'(x) \overline{\varphi_i'(x)} dx + \int_a^b \beta \varphi_j(x) \overline{\varphi_i(x)} dx \right) u_j = \int_a^b S(x) \overline{\varphi_i(x)} dx \quad (5)$$

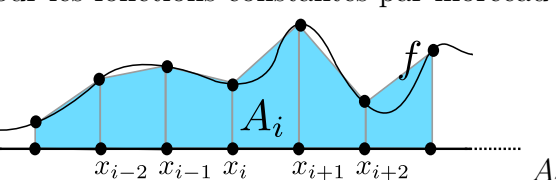
## 2.2 Quelle règle de quadrature utiliser ?

- point milieu



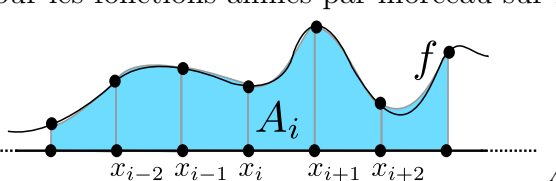
$$A_i = S\left(\frac{x_{i+1}+x_i}{2}\right)(x_{i+1} - x_i)$$

→ exacte pour les fonctions constantes par morceau sur le maillage (comme les  $\varphi'(x)$ !)
- trapèze



$$A_i = \frac{S(x_{i+1})+S(x_i)}{2}(x_{i+1} - x_i)$$

→ exacte pour les fonctions affines par morceau sur le maillage (comme les  $\varphi(x)$ !)
- Simpson



$$A_i = \frac{S(x_i)+4f\left(\frac{x_{i+1}+x_i}{2}\right)+S(x_{i+1})}{6}(x_{i+1} - x_i)$$

→ exacte pour des formes quadratiques (comme les  $\varphi^2(x)$ !)
- haut ordre : quadrature de Gauss à  $n$  points

→ exacte pour les polynômes de degré  $< 2n - 1$

## 2.3 Système matriciel

$$\sum_{j=0}^N \left( - \int_a^b \alpha \varphi_j'(x) \overline{\varphi_i'(x)} dx + \int_a^b \beta \varphi_j(x) \overline{\varphi_i(x)} dx \right) u_j = \int_a^b S(x) \overline{\varphi_i(x)} dx \quad (6)$$

soit en adoptant une notation matricielle :

$$AU = B$$

avec

- $A$  une matrice  $N \times N$  telle que :

$$A_{ij} = - \int_a^b \alpha \varphi_j'(x) \overline{\varphi_i'(x)} dx + \int_a^b \beta \varphi_j(x) \overline{\varphi_i(x)} dx$$

- $B$ , le membre de droite, un vecteur colonne :

$$B_i = \int_a^b S(x) \overline{\varphi_i(x)} dx$$

- $U$  le vecteur colonne des inconnues  $\{u_j\}_{j \in \{0, \dots, N\}}$

## 2.4 Définitions

$A$  est la somme de deux  $K$  et  $M$  :

- $K$  Matrice de raideur :

$$K_{ij} = \int_a^b \alpha \varphi'_j(x) \overline{\varphi'_i(x)} dx$$

- $M$  Matrice de masse :

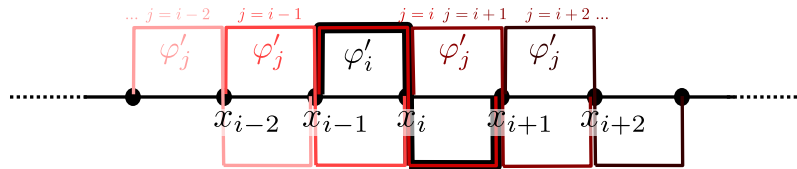
$$M_{ij} = \int_a^b \beta \varphi_j(x) \overline{\varphi_i(x)} dx$$

- $U$  est le vecteur colonne des inconnues  $\{u_j\}_{j \in \{0, \dots, N\}}$

$B$  est appelé *Right Hand Side* **RHS** ou **vecteur de charge**. Tous ces noms proviennent de la littérature mécanique, les éléments finis ayant été développés à l'origine pour des calculs de structure.

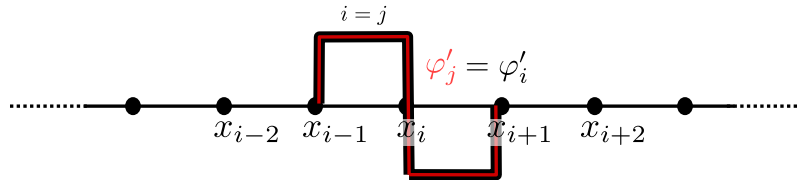
## 2.5 Coefficients de la matrice de raideur

$$K_{ij} = \int_a^b \alpha_j \varphi'_j(x) \overline{\varphi'_i(x)} dx = \sum_{n=0}^N \int_{x_n}^{x_{n+1}} \alpha_j \varphi'_j(x) \overline{\varphi'_i(x)} dx$$



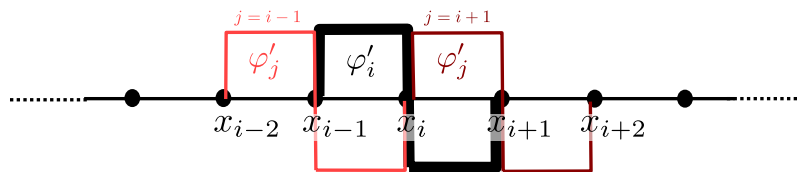
On obtient seulement trois coefficients  $K_{ij}$  non nuls par valeur de  $i$  (sauf en  $a$  et  $b$ ) :

- cas  $i = j$  (diagonale)



$$K_{ii} = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} = \alpha_i / (x_{i+1} - x_i) + \alpha_{i+1} / (x_{i+1} - x_i)$$

- cas  $j = i + 1$  et  $j = i - 1$  (premières diagonales)



$$K_{i,i-1} = \int_{x_{i-1}}^{x_i} \alpha_{i-1} \varphi'_{i-1}(x) \overline{\varphi'_i(x)} dx \quad K_{i,i+1} = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \alpha_i \varphi'_i(x) \overline{\varphi'_{i+1}(x)} dx = -\alpha_{i+1} / (x_{i+1} - x_i)$$

Le processus d'assemblage est décrit dans Algo. refal :stiff.

**Algorithm 1** Assemblage de la matrice de raideur

---

```

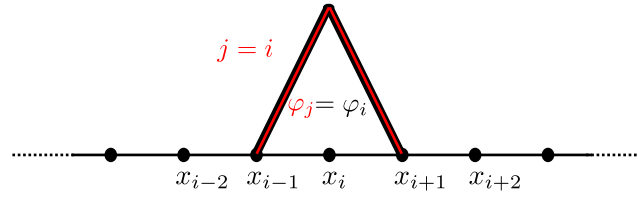
1: déclarer  $K$ , une matrice  $(N + 1) \times (N + 1)$ 
2: for  $iteration = 0, 1, \dots, N - 1$  do
3:   Calculer la matrice locale  $2 \times 2$   $\hat{K} = 1/h_i \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$  avec  $h_i = x_{i+1} - x_i$ 
4:   Ajouter  $\alpha_i \hat{K}_{0,0}$  à  $K_{i,i}$ 
5:   Ajouter  $\alpha_i \hat{K}_{0,1}$  à  $K_{i,i+1}$ 
6:   Ajouter  $\alpha_i \hat{K}_{1,0}$  à  $K_{i+1,i}$ 
7:   Ajouter  $\alpha_i \hat{K}_{1,1}$  à  $K_{i+1,i+1}$ 
8: end for

```

---

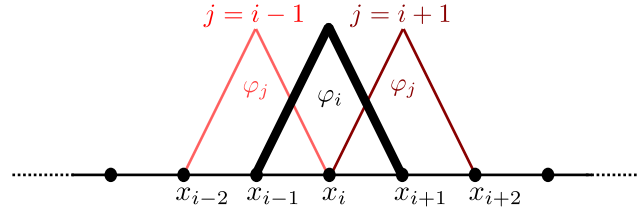
**2.6** Coefficients de la matrice de masse

- Cas  $i = j$  (diagonale)



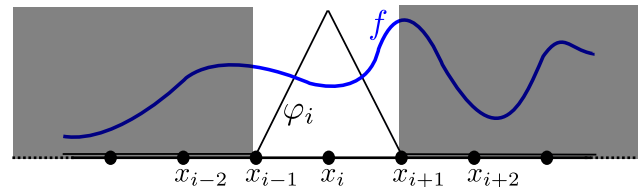
$$\begin{aligned}
M_{i,i} &= \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \beta_i |\varphi_i(x)|^2 dx \\
&= \int_{x_{i-1}}^{x_i} \beta_i |\varphi_i(x)|^2 dx + \int_{x_i}^{x_{i+1}} \beta_i |\varphi_i(x)|^2 dx \\
&= (x_{i+1} - x_i) \beta_i / 3 + (x_i - x_{i-1}) \beta_i / 3
\end{aligned}$$

- cas  $j = i + 1$  et  $j = i - 1$  (premières diagonales)



$$\begin{aligned}
M_{i,i-1} &= \int_{x_{i-1}}^{x_i} \beta_{i-1} \varphi_{i-1}(x) \overline{\varphi_i(x)} dx \\
M_{i+1,i} &= \int_{x_i}^{x_{i+1}} \beta_i \varphi_i(x) \overline{\varphi_{i+1}(x)} dx = (x_{i+1} - x_i) \beta_i / 6
\end{aligned}$$

Le processus d'assemblage est décrit dans Algo. 2.

**2.7** Assemblage du membre de droite

**Algorithm 2** Assemblage de la matrice de masse

---

```

1: Déclarer  $M$ , une matrice  $(N + 1) \times (N + 1)$ 
2: for  $iteration = 0, 1, \dots, N - 1$  do
3:   Calculer la matrice locale  $2 \times 2$   $\hat{M} = h_i \begin{bmatrix} 1/3 & 1/6 \\ 1/6 & 1/3 \end{bmatrix}$  with  $h_i = x_{i+1} - x_i$ 
4:   Ajouter  $\beta_i \hat{M}_{0,0}$  à  $M_{i,i}$ 
5:   Ajouter  $\beta_i \hat{M}_{0,1}$  à  $M_{i,i+1}$ 
6:   Ajouter  $\beta_i \hat{M}_{1,0}$  à  $M_{i+1,i}$ 
7:   Ajouter  $\beta_i \hat{M}_{1,1}$  à  $M_{i+1,i+1}$ 
8: end for

```

---

$$B_i = \int_a^b S(x) \overline{\varphi_i(x)} dx = \sum_{n=1}^{N-1} \int_{x_n}^{x_{n+1}} S(x) \overline{\varphi_i(x)} dx = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} S(x) \overline{\varphi_i(x)} dx$$

À moins que  $S$  ne soit un polynôme (ce qui n'est généralement pas le cas dans les équations d'ondes), nous avons choisi par simplicité la règle de quadrature trapézoïdale :  $f$  est donc approximée par une fonction affine sur chaque segment  $[x_i, x_{i+1}]$ .

$$\begin{aligned} \int_{x_{i-1}}^{x_i} S(x) \overline{\varphi_i(x)} dx &\approx \frac{x_i - x_{i-1}}{2} \left[ S(x_{i-1}) \overline{\varphi_i(x_{i-1})} + S(x_i) \overline{\varphi_i(x_i)} \right] \\ &= \frac{x_i - x_{i-1}}{2} S(x_i) \overline{\varphi_i(x_i)} \\ \int_{x_i}^{x_{i+1}} S(x) \overline{\varphi_i(x)} dx &\approx \frac{x_{i+1} - x_i}{2} \left[ S(x_i) \overline{\varphi_i(x_i)} + S(x_{i+1}) \overline{\varphi_i(x_{i+1})} \right] \end{aligned}$$

La procédure d'assemblage est donné en Algo. 3.

**Algorithm 3** Assemblage du vecteur de charge

---

```

1: Déclarer  $B$ , une matrice  $(N + 1) \times 1$ 
2: for  $iteration = 0, 1, \dots, N - 1$  do
3:   Calculer le vecteur local  $2 \times 2$   $\hat{B} = h_i/2 \begin{bmatrix} S(x_i) \\ S(x_{i+1}) \end{bmatrix}$  with  $h_i = x_{i+1} - x_i$ 
4:   Ajouter  $\hat{B}_0$  à  $B_i$ 
5:   Ajouter  $\hat{B}_1$  à  $B_{i+1}$ 
6: end for

```

---

## 2.8 Condition de Robin $R$

La condition aux limites Robin peut être utilisée pour imposer une condition aux limites absorbante (ABC dans la littérature). Cette condition est exacte en 1D puisque le fait que le champ diffusé échappe à une onde plane dans le substrat et le superstrat est intégré. Nous devons imposer la condition de Robin  $u' - ik_0 u = 0$  aux deux extrémités de notre segment de calcul. Ceci peut être fait facilement en remplaçant le terme limite issu de l'intégration par partie par  $ik_0$  :

$$\begin{aligned} & - \int_a^b \alpha u'(x) \overline{v'(x)} dx + \left[ \alpha u'(x) \overline{v(x)} \right]_a^b + \int_a^b \beta u(x) \overline{v(x)} dx = \int_a^b S(x) \overline{v(x)} dx \\ \Rightarrow & - \int_a^b \alpha u'(x) \overline{v'(x)} dx + \left[ ik_0 u(x) \overline{v(x)} \right]_a^b + \int_a^b \beta u(x) \overline{v(x)} dx = \int_a^b S(x) \overline{v(x)} dx \end{aligned} \quad (7)$$

où  $[ik_0 u(x) \overline{v(x)}]_a^b = ik_0 u(b) \overline{v(b)} - ik_0 u(a) \overline{v(a)}$  puisque  $v(a) = v(b) = 1$  par définition des fonctions tests. Au final, le processus d'assemblage de la matrice de Robin  $R$  est simplement donné par l'Algo. 4 :

**Algorithm 4** Assemblage de la matrice de Robin

- 
- 1: Allouer  $R$ , une matrice  $(N + 1) \times (N + 1)$
  - 2:  $R_{0,0} = ik_0$
  - 3:  $R_{N,N} = ik_0$
- 

### 3 Questions

Nous voulons appliquer ce formalisme dans le cadre d'un problème de diffusion 1D (le diffuseur est une simple couche dans ce cas). L'inconnue est le champ électrique. La plaque est éclairée par une onde plane incidente  $e_{inc}$  en incidence normale :  $e_{inc}(x) = \exp[ik_0x]$ , avec la longueur d'onde dans le vide  $\lambda_0 = 2\pi/k_0$  donnée.

- Q1)** Définir le problème de diffraction 1D, par exemple pour le champ électrique.
- Q2)** Faire le lien entre les paramètres du problème physique ( $\varepsilon_r$ ,  $\mu_r$ ,  $\lambda_0$  ...) avec  $\alpha$ ,  $\beta$ , et  $S$  en Eq. (1).
- Q3)** Définir la longueur d'onde  $\lambda_0$ .
- Q4)** Définir les largeurs (théoriquement semi-infinies) du superstrat, du substrat et la largeur du diffuseur en fonction de  $\lambda_0$ .
- Q5)** Générer un maillage 1D conforme du domaine de calcul composé de 3 domaines (superstrat, couche, substrat). Si le nombre total de points dans le maillage est  $N + 1$ ,  $N$  est le nombre d'intervalles ou *éléments* du maillage.
- Q6)** Définir trois tableaux contenant la perméabilité et la permittivité relative du problème annexe issu de **Q1)**. Ces tableaux doivent être de taille  $N$ , le nombre d'éléments !
- Q7)** Assembler la matrice de rigidité  $K$  comme détaillé dans Algo (1).
- Q8)** Assembler la matrice de masse  $M$  comme indiqué dans Algo (2).
- Q9)** Assemble le vecteur de charge  $B$  comme indiqué dans Algo (3).
- Q10)** Assembler la matrice correspondant à la condition limite de Robin  $R$  (représentant notre condition limite à l'infini) comme détaillé dans Algo (4).
- Q11)** Former la matrice finale :  $-K+R+M$ .
- Q12)** Résoudre le système linéaire en utilisant `scipy.linalg.solve`.
- Q13)** Même question en utilisant des matrices creuses (cf. documentation de `scipy.sparse.linalg.spsolve`). Comparer les temps de calcul obtenus.
- Q14)** Tracer les champs diffracté et total (parties réelles et imaginaires).
- Q15)** Choisir une permittivité (complexe) de la couche telle que toute l'onde incidente soit absorbée par la couche.
- Q16)** Nous sommes maintenant en mesure de comparer le coefficient de réflexion d'amplitude numérique obtenu par la MEF  $\underline{r}_{num}$  à la valeur théorique donnée par le coefficient de Fresnel  $\underline{r}_{th}$  en incidence normale. Calculer à la fois  $\underline{r}_{num}$  et  $\underline{r}_{th}$ .
- Q17)** Tracer la convergence du module de  $\underline{r}_{num}$  en fonction du raffinement du maillage (en augmentant le nombre de points de discrétisation).
- Q18)** Bonus 1 : Générer un maillage 1D conforme du domaine de calcul composé de 5 domaines (PML adapté au superstrat, superstrat, couche, substrat, PML adapté au substrat).
- Q19)** Bonus 2 : Résoudre le même problème en utilisant des PML (et donc 5 domaines) au lieu d'une condition limite de Robin.

### References

- [1] Larson, Mats G., and Fredrik Bengzon. "The finite element method : theory, implementation, and practice." Texts in Computational Science and Engineering 10 (2010).
- [2] Jin, Jian-Ming. *Theory and computation of electromagnetic fields*. John Wiley & Sons, 2011.