Stabilité de schémas aux différences finies pour la propagation de la lumière dans les milieux complexes

B. Bidégaray-Fesquet

Laboratoire de Modélisation et de Calcul
CNRS, Grenoble

Congrès National d'Analyse Numérique, 2006

Plan de l'exposé

1. Motivation
   - Matériaux optiques complexes
   - Schémas aux différences finies et stabilité
2. Vers une automatisation de l'étude de stabilité
   - Outils mathématiques
   - Le calcul à la main
   - L'automatisation

Plan de l'exposé

Equations de Maxwell

La propagation de la lumière est décrite par les équations de Maxwell

$$
\begin{aligned}
\operatorname{rot}\mathbf{E} &= -\frac{\partial\mathbf{B}}{\partial t} - \mathbf{M}, & \operatorname{div}\mathbf{D} &= 0,\\
\operatorname{rot}\mathbf{H} &= \frac{\partial\mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{J}, & \operatorname{div}\mathbf{B} &= 0.
\end{aligned}
$$

Les propriétés du matériau sont décrites par les lois constitutives du matériau

$$
\begin{aligned}
\mathbf{D} &= \mathbf{D}(\mathbf{E},\mathbf{H}), & \mathbf{J} &= \mathbf{J}(\mathbf{E},\mathbf{H}),\\
\mathbf{B} &= \mathbf{B}(\mathbf{E},\mathbf{H}), & \mathbf{M} &= \mathbf{M}(\mathbf{E},\mathbf{H}).
\end{aligned}
$$

Description des matériaux

- Matériaux simples : $\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}$, $\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}$, $\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$ et $\mathbf{M} = 0$.
- Exemples de matériaux (linéaires) complexes :
  - matériaux anisotropes : ε, μ et σ sont des tenseurs.
  - plasmas froids, plasmas chauds sans collisions, milieux magnéto-ioniques, ferrites magnétiques.
- Diélectriques de type Debye et Lorentz

$$\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H}, \quad \mathbf{M} = 0, \quad \mathbf{J} = \partial \mathbf{P} / \partial t \quad \text{et} \quad \mathbf{D} = \varepsilon_0 \varepsilon_\infty \mathbf{E} + \mathbf{P}.$$

  - Debye : $\tau \dfrac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} + \mathbf{P} = \varepsilon_0 (\varepsilon_s - \varepsilon_\infty) \mathbf{E}$.
  - Lorentz : $\dfrac{\partial^2 \mathbf{P}}{\partial t^2} + \nu \dfrac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} + \omega_1^2 \mathbf{P} = \varepsilon_0 (\varepsilon_s - \varepsilon_\infty) \omega_1^2 \mathbf{E}$.

Plan de l'exposé

Schémas aux différences finies

Pour avoir des schémas explicites et d'ordre 2, on se base sur le schéma de Yee

$$
\begin{aligned}
\frac{B_{j+1/2}^{n+1/2} - B_{j+1/2}^{n-1/2}}{\delta t} &= -\frac{E_{j+1}^{n} - E_{j}^{n}}{\delta x}, \\
\varepsilon_0 \varepsilon_\infty \frac{E_{j}^{n+1} - E_{j}^{n}}{\delta t} &= -\frac{B_{j+1/2}^{n+1/2} - B_{j-1/2}^{n+1/2}}{\mu_0 \delta x} - J_{j}^{n+1/2},
\end{aligned}
$$

auquel on adjoint un schéma pour les équations du matériau (ici Debye–Young)

$$
\begin{aligned}
\tau \frac{P_{j}^{n+1/2} - P_{j}^{n-1/2}}{\delta t} &= -\frac{P_{j}^{n+1/2} + P_{j}^{n-1/2}}{2} + \varepsilon_0(\varepsilon_s - \varepsilon_\infty) E_{j}^{n}, \\
\tau J_{n}^{n+1/2} &= -P_{j}^{n+1/2} + \varepsilon_0(\varepsilon_s - \varepsilon_\infty) \frac{E_{j}^{n+1} + E_{j}^{n}}{2}.
\end{aligned}
$$

Travaux antérieurs

Définition des schémas DF

Yee (1966) ;
Luebbers, Hunsberger, Kinz, Standler, Schneider (1990) ;
Kashiwa, Yoshida, Fukai (1990) ;
Joseph, Hagness, Taflove (1991) ;
Luebbers, Steich, Kunz (1993) ;
Young (1995) ;
Young, Kittichartphayak, Kwok, Sullivan (1995)

Autres types de schémas

Feise, Schneider, Bevelaqua (2004, pseudo-spectral) ;
Stoykov, Kuiken, Lowery, Tavlove (2003, EF) ;

Analyse des schémas

Petropoulos (1994) ;
Young (2000)

Objectifs de l'étude

Motivations Petropoulos mène une analyse de stabilité

1. Mise sous forme explicite, calcul de la matrice d'amplification
2. Calcul du polynôme caractéristique
3. Choix des paramètres physiques (ε_∞, ...) et numériques (δt, δx)
4. Calcul par une routine numérique des racines du polynôme (localisation dans le cercle unité).

Un sujet clos ? Young «analyse» la stabilité de tous les modèles cités ci-dessus en utilisant deux types de méthodes

- "the entries for [...] have not been rigorously established"
- "the entry for [...] follows directly from the semi-implicit nature of the scheme"

Objectifs de l'étude

Motivations Petropoulos mène une analyse de stabilité

1. Mise sous forme explicite, calcul de la matrice d'amplification
2. Calcul du polynôme caractéristique
3. Choix des paramètres physiques (ε_∞, ...) et numériques (δt, δx)
4. Calcul par une routine numérique des racines du polynôme (localisation dans le cercle unité).

Un sujet clos ? Young «analyse» la stabilité de tous les modèles cités ci-dessus en utilisant deux types de méthodes

- "the entries for [...] have not been rigorously established"
- "the entry for [...] follows directly from the semi-implicit nature of the scheme"

Objectifs de l'étude

Motivations Petropoulos mène une analyse de stabilité

1. Mise sous forme explicite, calcul de la matrice d'amplification
2. Calcul du polynôme caractéristique
3. Choix des paramètres physiques (ε_∞, ...) et numériques (δt, δx)
4. Calcul par une routine numérique des racines du polynôme (localisation dans le cercle unité).

Un sujet clos ? Young «analyse» la stabilité de tous les modèles cités ci-dessus en utilisant deux types de méthodes

- "the entries for [...] have not been rigorously established"
- "the entry for [...] follows directly from the semi-implicit nature of the scheme"

Plan de l'exposé

Polynômes de Schur et de von Neumann

Définition

Un polynôme est un polynôme de Schur si toutes ses racines r vérifient $|r| < 1$.

Définition

Un polynôme est un polynôme de von Neumann si toutes ses racines r vérifient $|r| \leq 1$.

Définition

Un polynôme est un polynôme de von Neumann simple s'il est de von Neumann et toutes ses racines de module 1 sont simples.

Analyse de von Neumann

Théorème

Une condition nécessaire de stabilité est que le polynôme caractéristique soit de von Neumann.

Théorème

Une condition suffisante de stabilité est que le polynôme caractéristique soit de von Neumann simple.

Les cas intermédiaires doivent être traités au cas par cas en revenant à la structure de la matrice d'amplification.

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}^n = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}}_{\text{stable}} \qquad \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}^n = \begin{pmatrix} 1 & n \\ 0 & 1 \end{pmatrix}}_{\text{instable}}$$

Suites de polynômes, I

Définition

Soit $\phi(z) = c_0 + c_1 z + \cdots + c_p z^p$ *un polynôme de degré p à coefficients complexes. On appelle* *polynôme conjugué* *le polynôme* $\phi(z) = c_p^* + c_{p-1}^* z + \cdots + c_0^* z^p$.

A partir d'un polynôme ϕ_0, on construit une suite (finie) de degré strictement décroissant par la relation de récurrence

$$\phi_{m+1}(z) = \frac{\phi_m(0)^* \phi_m(z) - \phi_m(0)\phi_m^*(z)}{z}.$$

Théorème

Un polynôme ϕ_m *est un polynôme de Schur de degré exact d* *ssi* ϕ_{m+1} *est un polynôme de Schur de degré exact* $d - 1$ *et* $|\phi_m(0)| < |\phi_m^*(0)|$.

Suites de polynômes, II

Théorème

Un polynôme ϕ_m est un polynôme de von Neumann simple ssi

- *soit ϕ_{m+1} est un polynôme de von Neumann simple et* $|\phi_m(0)| < |\phi_m^*(0)|$,
- *soit ϕ_{m+1} est identiquement nul et ϕ'_m est un polynôme de Schur.*

Problème compliqué localiser les racines d'un polynôme de degré 3 à 20 (suivant les applications) avec des coefficients dépendant de 5 à 10 paramètres.

Plusieurs problèmes «simples »

- trouver les conditions de nullité du coefficient dominant,
- vérification de $|\phi_m(0)| < |\phi_m^*(0)|$.

Plan de l'exposé

Phase de calcul : Maxwell–Debye–Young 1D

1. Explicitation et adimensionnement

$$U_j^n = (c_\infty B_{j+1/2}^{n-1/2}, E_j^n, P_j^n/\varepsilon_0\varepsilon_\infty) = \exp(i\xi j)U^n.$$

$$\lambda = c_\infty \delta t/\delta x,\ \ \delta = \delta t/2\tau,\ \ \eta_s = \varepsilon_s/\varepsilon_\infty,\ \ \sigma = \lambda(e^{i\xi}-1),\ \ q = |\sigma|^2.$$

2. Matrice d'amplification : $U^{n+1} = GU^n$

$$G = \begin{pmatrix} 1 & -\sigma & 0 \\ \frac{(1+\delta)\sigma^*}{1+\delta\eta_s} & \frac{(1-\delta\eta_s)-(1+\delta)q}{1+\delta\eta_s} & \frac{2\delta}{1+\delta\eta_s} \\ \sigma^* & -q & 1 \end{pmatrix}.$$

3. Polynôme caractéristique

$$\begin{aligned} P \propto \phi_0 \quad &= \quad [1+\delta\eta_s]Z^3 - [3+\delta\eta_s-(1+\delta)q]Z^2 \\ &\quad +[3-\delta\eta_s-(1-\delta)q]Z - [1-\delta\eta_s]. \end{aligned}$$

Phase d'analyse : Maxwell–Debye–Young 1D

4. Suite de polynômes

$$\begin{aligned}\phi_1 &= 2\delta\{2\eta_s Z^2 - [4\eta_s - (\eta_s+1)q]Z + [2\eta_s - (\eta_s-1)q]\},\\ \phi_2 &= 24\delta^2(\eta_s-1)q\{[4\eta_s - (\eta_s+1)q]Z - [4\eta_s - (\eta_s+1)q]\}.\end{aligned}$$

5. Vérification de $|\phi_m(0)| < |\phi_m^*(0)|$ et degré du polynôme.
   - $m = 0$: OK,
   - $m = 1$: il faut $q \in [0, 4]$ (condition CFL $\lambda \leq 1$ pour le schéma de Yee seul en 1D). Égalité si $q = 0$ ou $\eta_s = 1$.
   - $m = 2$: Égalité si $q = 4$.
6. Cas particuliers
   - $q = 0$: 1 est vp. double de G dans 2 deux sev. stables.
   - $\eta_s = 1$: ϕ_1 a deux racines complexes distinctes si $q \in]0, 4[$.
   - $q = 4$ et $\eta_s \neq 1$: ϕ_2 a -1 comme unique racine.
   - $q = 4$ et $\eta_s = 1$: G a une seule direction propre pour la vp. double -1 $\Rightarrow$ instabilité !

Conclusion sur ce calcul à la main

Résultats

- Résultats en accord avec ceux partiels de Petropoulos, mais pas avec tous ceux intuités de Young.
- Le 1D est faisable à la main.
- Le 2D est faisable à la main, grâce à l'expérience du 1D : le 1D s'y factorise.
- Le 3D n'est pas raisonnablement faisable à la main.

Nouveaux objectifs

- Automatiser les calculs pour attaquer le 3D.
- Expliquer les factorisations de polynômes.

Plan de l'exposé

Ce qui est automatisé

Une librairie MAPLE a été réalisée. Elle automatise :

- L'écriture des équations de Maxwell.
- La généralisation des équations du matériau en dimension 1, 2 et 3.
- Suppression des équations redondantes.
- Adimensionnement.
- Mise sous forme explicite.
- Calcul de la matrice d'amplification.
- Calcul du polynôme caractéristique.
- Calcul de la suite de polynômes.
- Tests $|\phi_m(0)| < |\phi_m^*(0)|$.

Ce qui n'est pas (encore) automatisé

Couplages de Maxwell–Debye et Maxwell–Lorentz

- Annulation des coefficients dominants.
- et donc : Choix des traitements des cas particuliers.

Autres couplages

- Adimensionnement.

Automatisation imparfaite

- Tests $|\phi_m(0)| < |\phi_m^*(0)|$.
  Trouver le signe d'un polynôme de "haut" degré en un grand nombre de variables, dont certaines sont positives (η_s, δ) et d'autres dans un intervalle (q).
  Suivant l'exécution, le résultat est toujours juste mais pas forcément optimal.

Exemple : Maxwell–Debye–Young 1D, I

```
# Chargement des librairies
restart; with(linalg);
read Maxwell; read ChVar1D; read vonNeumann;
# Définition du modèle
Dim := 1; Polar := ""; Formule := "BEP"; Modele := "MD";
Eq[1] := Faraday1D;
Eq[2] := Ampere1D_EBP;
Eq[3] := tau*(P[n+1]-P[n])/dt+1/2*P[n+1]
       -1/2*eps0*(epss-epsinfini)*(E[n+1]+E[n]);
nbeq := 3;
# Mise sous forme adimensionnée
Var := CalcVar(Dim, Polar, Formule, Modele);
# Calcul du polynôme caractéristique
G := Amplif(Eq, nbeq, Var);
phi[0] := Ampli2Poly(G, Z);
save phi, "MD_1D_BEP.m";
```

Exemple : Maxwell–Debye–Young 1D, I

```
# Chargement des librairies
restart; with(linalg);
read Maxwell; read ChVar1D; read vonNeumann;
# Définition du modèle
Dim := 1; Polar := ""; Formule := "BEP"; Modele := "MD";
Eq[1] := Faraday1D;
Eq[2] := Ampere1D_EBP;
Eq[3] := tau*(P[n+1]-P[n])/dt+1/2*P[n+1]
       -1/2*eps0*(epss-epsinfini)*(E[n+1]+E[n]);
nbeq := 3;
# Mise sous forme adimensionnée
Var := CalcVar(Dim, Polar, Formule, Modele);
# Calcul du polynôme caractéristique
G := Amplif(Eq, nbeq, Var);
phi[0] := Ampli2Poly(G, Z);
save phi, "MD_1D_BEP.m";
```

Exemple : Maxwell–Debye–Young 1D, I

```
# Chargement des librairies
restart; with(linalg);
read Maxwell; read ChVar1D; read vonNeumann;
# Définition du modèle
Dim := 1; Polar := ""; Formule := "BEP"; Modele := "MD";
Eq[1] := Faraday1D;
Eq[2] := Ampere1D_EBP;
Eq[3] := tau*(P[n+1]-P[n])/dt+1/2*P[n+1]
       -1/2*eps0*(epss-epsinfini)*(E[n+1]+E[n]);
nbeq := 3;
# Mise sous forme adimensionnée
Var := CalcVar(Dim, Polar, Formule, Modele);
# Calcul du polynôme caractéristique
G := Amplif(Eq, nbeq, Var);
phi[0] := Ampli2Poly(G, Z);
save phi, "MD_1D_BEP.m";
```

Exemple : Maxwell–Debye–Young 1D, I

```
# Chargement des librairies
restart; with(linalg);
read Maxwell; read ChVar1D; read vonNeumann;
# Définition du modèle
Dim := 1; Polar := ""; Formule := "BEP"; Modele := "MD";
Eq[1] := Faraday1D;
Eq[2] := Ampere1D_EBP;
Eq[3] := tau*(P[n+1]-P[n])/dt+1/2*P[n+1]
       -1/2*eps0*(epss-epsinfini)*(E[n+1]+E[n]);
nbeq := 3;
# Mise sous forme adimensionnée
Var := CalcVar(Dim, Polar, Formule, Modele);
# Calcul du polynôme caractéristique
G := Amplif(Eq, nbeq, Var);
phi[0] := Ampli2Poly(G, Z);
save phi, "MD_1D_BEP.m";
```

Exemple : Maxwell–Debye–Young 1D, II

```
# Suite de von Neumann
vonNeumann(phi, Z, nbeq);
fact := facteurs(phi, Z, nbeq);
rest := restes(phi, facts, Z, nbeq);
# Etude des signes dans le cas general
# Annulation quand delta=0, q=0 et etas=1
verif(phi, Z, nbeq, [0 < delta, 1 < etas, 0 < q, q < 4]);
# Etude du cas delta = 0
phidelta0[0] := eval(phi[0], delta = 0);
psidelta0[0] := diff(phidelta0[0], Z);
vonNeumann(psidelta0, Z, nbeq-1);
verif(psidelta0, Z, nbeq-1, [1 < etas, 0 < q, q < 4]);
# Etude de cas q=0
phiq0[0] := eval(phi[0], q = 0);
vonNeumann(phiq0, Z, nbeq);
psiq0[0] := diff(phiq0[1], Z);
verif(psiq0, Z, 1, [0 < delta, 1 < etas]);
Gq0 := eval(G, q = 0);
```

Exemple : Maxwell–Debye–Young 1D, II

```
# Suite de von Neumann
vonNeumann(phi, Z, nbeq);
fact := facteurs(phi, Z, nbeq);
rest := restes(phi, facts, Z, nbeq);
# Etude des signes dans le cas general
# Annulation quand delta=0, q=0 et etas=1
verif(phi, Z, nbeq, [0 < delta, 1 < etas, 0 < q, q < 4]);
# Etude du cas delta = 0
phidelta0[0] := eval(phi[0], delta = 0);
psidelta0[0] := diff(phidelta0[0], Z);
vonNeumann(psidelta0, Z, nbeq-1);
verif(psidelta0, Z, nbeq-1, [1 < etas, 0 < q, q < 4]);
# Etude de cas q=0
phiq0[0] := eval(phi[0], q = 0);
vonNeumann(phiq0, Z, nbeq);
psiq0[0] := diff(phiq0[1], Z);
verif(psiq0, Z, 1, [0 < delta, 1 < etas]);
Gq0 := eval(G, q = 0);
```

Exemple : Maxwell–Debye–Young 1D, II

```
# Suite de von Neumann
vonNeumann(phi, Z, nbeq);
fact := facteurs(phi, Z, nbeq);
rest := restes(phi, facts, Z, nbeq);
# Etude des signes dans le cas general
# Annulation quand delta=0, q=0 et etas=1
verif(phi, Z, nbeq, [0 < delta, 1 < etas, 0 < q, q < 4]);
# Etude du cas delta = 0
phidelta0[0] := eval(phi[0], delta = 0);
psidelta0[0] := diff(phidelta0[0], Z);
vonNeumann(psidelta0, Z, nbeq-1);
verif(psidelta0, Z, nbeq-1, [1 < etas, 0 < q, q < 4]);
# Etude de cas q=0
phiq0[0] := eval(phi[0], q = 0);
vonNeumann(phiq0, Z, nbeq);
psiq0[0] := diff(phiq0[1], Z);
verif(psiq0, Z, 1, [0 < delta, 1 < etas]);
Gq0 := eval(G, q = 0);
```

Exemple : Maxwell–Debye–Young 1D, II

```
# Suite de von Neumann
vonNeumann(phi, Z, nbeq);
fact := facteurs(phi, Z, nbeq);
rest := restes(phi, facts, Z, nbeq);
# Etude des signes dans le cas general
# Annulation quand delta=0, q=0 et etas=1
verif(phi, Z, nbeq, [0 < delta, 1 < etas, 0 < q, q < 4]);
# Etude du cas delta = 0
phidelta0[0] := eval(phi[0], delta = 0);
psidelta0[0] := diff(phidelta0[0], Z);
vonNeumann(psidelta0, Z, nbeq-1);
verif(psidelta0, Z, nbeq-1, [1 < etas, 0 < q, q < 4]);
# Etude de cas q=0
phiq0[0] := eval(phi[0], q = 0);
vonNeumann(phiq0, Z, nbeq);
psiq0[0] := diff(phiq0[1], Z);
verif(psiq0, Z, 1, [0 < delta, 1 < etas]);
Gq0 := eval(G, q = 0);
```

Conclusion

- Obtention de conditions de stabilité pour des schémas DF pour des couplages Maxwell–Debye et Maxwell–Lorentz.
- Définition d'une stratégie générale pour l'analyse de stabilité de schémas aux différences finies.

- Perspectives
  - Expliquer les factorisations de polynômes.
  - Application aux autres modèles complexes, à d'autres champs d'application.
  - Mise en ligne de la bibliothèque.

Conclusion

- Obtention de conditions de stabilité pour des schémas DF pour des couplages Maxwell–Debye et Maxwell–Lorentz.
- Définition d'une stratégie générale pour l'analyse de stabilité de schémas aux différences finies.

- Perspectives
  - Expliquer les factorisations de polynômes.
  - Application aux autres modèles complexes, à d'autres champs d'application.
  - Mise en ligne de la bibliothèque.

Merci de votre attention !

Résultats

Modèle	Schéma	CFL (1D)
Debye	BED	$\delta t \leq \delta x / c_\infty$
	BEP	$\delta t \leq \min(\delta x / c_\infty, 2\tau)$
	BPE	$\delta t \leq \min(\delta x / c_\infty, 2\tau)$
Lorentz	BED	$\delta t \leq \delta x / \sqrt{2} c_\infty$
	BEPJ	$\delta t < \delta x / c_\infty$
	BJEP	$\delta t \leq \min(\delta x / \sqrt{2} c_\infty, 2/\omega_1 \sqrt{2\eta_s - 1})$