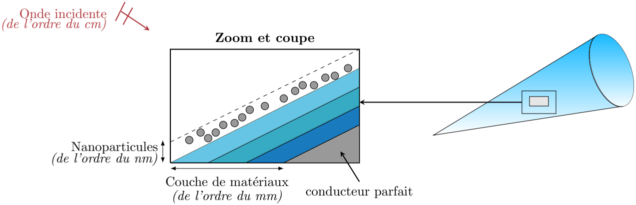
Modélisation multi-échelle de la diffraction par une couche mince de nanoparticules disposées aléatoirement

DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE

Congrès SMAI 2021 - 24 Juin 2021

Amandine BOUCART (POEMS/UMA/ENSTA Paris/IPP et CEA/CESTA)
Sonia FLISS, Laure GIOVANGIGLI (POEMS/UMA/ENSTA Paris/IPP - Palaiseau)
Bruno STUPFEL (CEA/CESTA-Le Barp)

- On s'intéresse à la diffraction électromagnétique par un objet recouvert d'une couche très fine comportant un grand nombre de nanoparticules, parfaitement conductrices, réparties aléatoirement.
- On souhaite déterminer l'impact de cette couche sur la Surface Équivalente Radar(SER).



Difficultés rencontrées :

- La présence de plusieurs échelles très différentes rend très coûteux voire impossible la simulation de tels problèmes (plusieurs angles d'incidence doivent être considérés).
- La distribution des particules n'est pas connue (aléatoire).

Objectif :

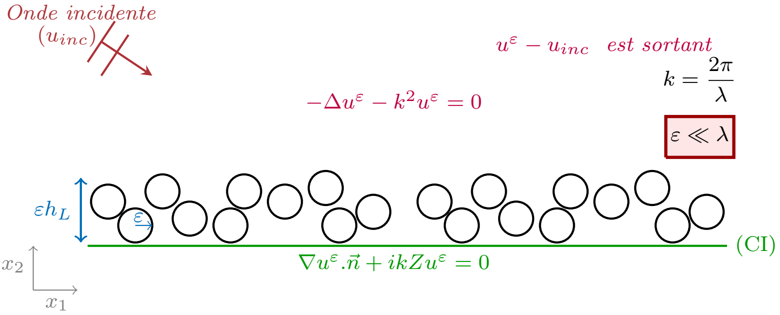
Déterminer une condition effective modélisant les particules réparties aléatoirement sur l'empilement multi-couche.

Hypothèses du modèle bidimensionnel

- Approximation du plan tangent.
- Problème invariant dans la direction x_3 orthogonale au plan.

↪ Les équations de Maxwell pour une polarisation TM se ramènent à l'équation de Helmholtz avec une condition de Neumann sur le bord des particules.

- Condition d'impédance (CI) qui remplace l'empilement multi-couche.
- Onde plane incidente $u_{inc} := e^{ik_1 x_1} e^{ik_2 x_2}$ avec $k_2 > 0$.



Deux configurations pour la répartition des particules dans la couche : périodique et stationnaire ergodique.

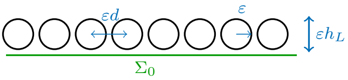
- Les particules sont :
  - ▷ modélisées par des boules de centre $\underline{x}^n = (x_1^n, x_2^n)$ et de rayon ε notées $B(\underline{x}_n, \varepsilon)$.
  - ▷ réparties dans la bande

$$\boxed{L^\varepsilon := \mathbb{R} \times [\varepsilon\delta, \varepsilon h_L + \varepsilon\delta] \ , \ \delta > 0.}$$

  - ▷ au moins à une distance $\varepsilon\delta$ les unes des autres.

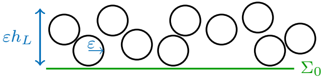
- Soient $\mathcal{I}_\varepsilon := \cup_n B(\underline{x}_n, \varepsilon)$ et $\mathcal{I} := \cup_n B\left(\frac{\underline{x}_n}{\varepsilon}, 1\right)$.

Répartition périodique



▷ $\{(x_1^n, x_2^n\}_n = \{(x_1^n, x_2^n) + (\varepsilon d, 0)\}_n$

Répartition aléatoire



▷ Répartition **stationnaire ergodique** dans L^ε

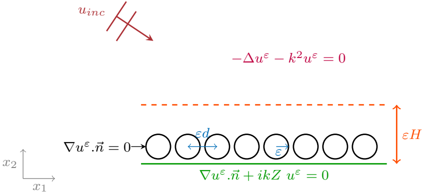
- **Stationnaire :** en deux points de L^ε, on a la même loi de probabilité d'avoir une particule.
- **Ergodique :** la moyenne spatiale sur L^ε converge vers son espérance quand la longueur de la bande tend vers l'infini.

- **Répartition périodique des particules.** De nombreux travaux existent sur la diffraction par des couches minces homogènes ou périodiques.
  - ⋆ **Homogènes :** *Bartoli-Bendali(2002), Haddar-Joly(2002), Vial(2003), Caloz et al(2006).*
  - ⋆ **Périodiques :** *Abboud-Ammari(1996), Delourme(2010), Delourme-Haddar-Joly(2012-2013), Claeys-Delourme(2013), Marigo-Maurel(2016).*
- **Répartition aléatoire des particules :** Beaucoup de travaux sur l'homogénéisation stochastique de volume mais très peu pour le traitement d'une couche mince.
  - ⋆ **Homogénéisation de volume :** *Kozlov(1980), Papanicolaou-Varadhan(1981), Zhikov-Pyatnitskii(2006), Blanc-Le Bris-Lions(2007), Calvo-Juradoa,Casado-Díaz et Luna-Laynez(2015), Heida(2020).*
  - ⋆ **Surface rugueuse en mécanique des fluides :** *Basson et Gérard-Varet(2008), Chechkin(2009), Gérard-Varet et Masmoudi(2010), Amirat-Bodart-Chechkin-Piatnitski (2011),Dalibard et Gérard-Varet(2011), El Jarroudi(2019).*
  - ⋆ Il n'existe rien à notre connaissance pour les problèmes de diffraction.

1. Répartition périodique des particules
   - Démarche pour obtenir un modèle approché
   - Résultats numériques

2. Répartition aléatoire des particules
   - Modèle approché et ses coefficients
   - Résultats numériques

On postule le développement asymptotique suivant



Si $x_2 \geq \varepsilon H$,

$$u_\varepsilon(x_1,x_2) = \sum_{n\in\mathbb{Z}} \varepsilon^n \underbrace{u_n^{FF}(x_1,x_2)}_{\text{Termes de champ lointain}} + \sum_{n\in\mathbb{Z}} \varepsilon^n \underbrace{U_n^{NF}\left(x_1, \frac{x_1}{\varepsilon}, \frac{x_2}{\varepsilon}\right)}_{\text{Termes de champ proche}}$$

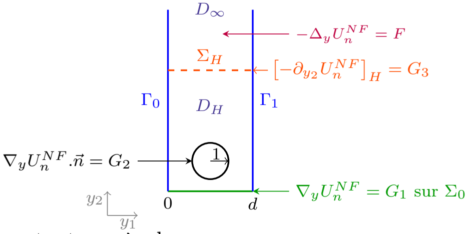
Si $x_2 \leq \varepsilon H$,

$$u_\varepsilon(x_1,x_2) = \sum_{n\in\mathbb{Z}} \varepsilon^n \underbrace{U_n^{NF}\left(x_1, \frac{x_1}{\varepsilon}, \frac{x_2}{\varepsilon}\right)}_{\text{Termes de champ proche}}$$

- Le paramètre H sépare l'espace homogène de l'espace hétérogène.
- Les termes de champ lointain u_n^{FF} dépendent des variables macroscopiques (x_1, x_2).
- Les termes de champ proche U_n^{NF} dépendent de x_1 et des variables miscroscopiques $(y_1, y_2) = \left(\frac{x_1}{\varepsilon}, \frac{x_2}{\varepsilon}\right)$.
- On suppose que :
  - ⋆ $U_n^{NF}(x_1, y_1, y_2)$ est **d-périodique** par rapport à y_1.
  - ⋆ $\lim_{y_2 \to +\infty} U_n^{NF}(x_1, y_1, y_2) = 0$
- On injecte le développement dans les équations satisfaites par u^ε et on obtient que :
  - ⋆ $\boxed{\forall\ n \in \mathbb{N},\ \forall\ x_1 \in \mathbb{R},\ \forall\ x_2 \in [\varepsilon H, +\infty),\ \ -\Delta u_n^{FF} - k^2 u_n^{FF} = 0}$
  - ⋆ Les $U_n^{NF}(\cdot,\cdot,\cdot,\omega)$ sont solutions de **problèmes de type Laplace** (où x_1 joue le rôle d'un paramètre) dans une **demi-bande périodique infinie**.

- Soient $D_H := (0,D)\times(0,H)\setminus\overline{B}$, $D_\infty := (0,D)\times(H,+\infty)$ et $D := D_H \cup D_\infty$.
- Soient $\mathbf{F}$, $\mathbf{G_1}$, $\mathbf{G_2}$, $\mathbf{G_3}$ des **fonctions $d-$périodiques** en y_1 telles que $\mathbf{F}\sqrt{1+y_2^2} \in L^2(D)$, $\mathbf{G_1} \in H^{-1/2}(\Sigma_0)$, $\mathbf{G_2} \in H^{-1/2}(\partial B)$, $\mathbf{G_3} \in H^{-1/2}(\Sigma_H)$.
- Pour tout $n \in \mathbb{N}$, U_n^{NF} est la solution **d−périodique par rapport à $\mathbf{y_1}$** du problème suivant :

$$\left\{\begin{array}{lcl} -\Delta_y U_n^{NF} & = & \mathbf{F} \ \text{ dans } \ D_H \cup D_\infty \\ \nabla_y U_n^{NF}\cdot\vec{n} & = & \mathbf{G_1} \ \text{ sur } \ \Sigma_0 \\ \nabla_y U_n^{NF}.\vec{n} & = & \mathbf{G_2} \ \text{ sur } \ \partial B \\ \left[U_n^{NF}\right]_H & = & - \ u_n^{FF}(x_1)\big|_{\Sigma_{\varepsilon H}} \\ \left[-\,\partial_{y_2} U_n^{NF}\right]_H & = & \mathbf{G_3} \end{array}\right.$$



- Il existe une unique solution U_n^{NF} à une constantes près dans

$$W^1(D) := \left\{ u \in H^1_{loc}(D), \nabla u \in L^2(D), \frac{u}{\sqrt{1+y_2^2}} \in L^2(D), u|_{\Gamma_1} = u|_{\Gamma_0} \right\},$$

ssi

$$\boxed{\int_D \mathbf{F} + \int_{\Sigma_0} \mathbf{G}_1 + \int_{\partial B} \mathbf{G}_2 + \int_{\Sigma_H} \mathbf{G}_3 = 0}$$

- On trouve facilement que $U_0^{NF} = u_0^{FF}|_{\Sigma_{\varepsilon H}} \chi_{D_H}$
- U_1^{NF} vérifie alors :

$$\left\{\begin{array}{rcl} -\Delta_y U_1^{NF} & = & 0 \quad \text{dans} \quad D \\ \nabla_y U_1^{NF} \cdot \vec{n} & = & -\, ikZ \; u_0^{FF}|_{\Sigma_{\varepsilon H}} \text{ sur } \; \Sigma_0 \\ \nabla_y U_1^{NF} . \vec{n} & = & -\, \partial_{x_1} u_0^{FF}|_{\Sigma_{\varepsilon H}} \; n_1 \quad \text{sur} \;\; \partial \mathcal{I} \\ \left[U_1^{NF} \right]_H & = & - \;\; u_1^{FF}(x_1)|_{\Sigma_{\varepsilon H}} \\ \left[-\, \partial_{y_2} U_1^{NF} \right]_H & = & \partial_{x_2} u_0^{FF}(x_1)|_{\Sigma_{\varepsilon H}} \end{array}\right.$$

- **La condition de compatibilité nous donne pour** u_0^{FF} :

$$\boxed{\nabla u_0^{FF} . \, \vec{n} + ikZ u_0^{FF} = 0 \quad \text{sur} \quad \{x_2 = \varepsilon H\}}$$

- On a alors $U_1^{NF} = u_1^{FF}|_{\Sigma_{\varepsilon H}} \chi_{D_H} + u_0^{FF}|_{\Sigma_{\varepsilon H}} \mathcal{U}_0^{(1)} + \partial_{x_1} u_0^{FF}|_{\Sigma_{\varepsilon H}} \mathcal{U}_1^{(1)}$ où $\mathcal{U}_0^{(1)}$ et $\mathcal{U}_1^{(1)}$ sont les uniques solutions dans $W^1(D)$ tendant vers 0 quand $y_2 \to +\infty$

$$\left\{\begin{array}{rcl} -\Delta_y \mathcal{U}_0^{(1)} & = & 0 \quad \text{dans} \quad D \\ \nabla_y \mathcal{U}_0^{(1)} \cdot \vec{n} & = & -ikZ \text{ sur } \; \Sigma_0 \\ \nabla_y \mathcal{U}_0^{(1)} . \vec{n} & = & 0 \quad \text{sur} \;\; \partial B \\ \left[-\, \partial_{y_2} \mathcal{U}_0^{(1)} \right]_H & = & ikZ \end{array}\right.$$

$$\left\{\begin{array}{rcl} -\Delta_y \mathcal{U}_1^{(1)} & = & 0 \quad \text{dans} \quad D \\ \nabla_y \mathcal{U}_1^{(1)} \cdot \vec{n} & = & 0 \text{ sur } \; \Sigma_0 \\ \nabla_y \mathcal{U}_1^{(1)} . \vec{n} & = & -n_1 \quad \text{sur} \;\; \partial B \\ \left[-\, \partial_{y_2} \mathcal{U}_1^{(1)} \right]_H & = & 0 \end{array}\right.$$

- U_2^{NF} vérifie

$$\left\{\begin{array}{ll} -\Delta_y U_2^{NF} & = 2\,\partial_{x_1}\partial_{y_1} U_1^{NF} + \partial_{x_1}^2 U_0^{NF} + k^2\, U_0^{NF} \text{ dans } \quad D \\ \nabla_y U_2^{NF}\cdot\vec{n} & = -\, ikZ\; U_1^{NF} \text{ sur } \;\Sigma_0 \\ \nabla_y U_2^{NF}.\vec{n} & = -\,\partial_{x_1} U_1^{NF}\; n_1 \quad \text{sur } \;\partial B \\ \left[U_2^{NF}\right]_H & = -\; u_2^{FF}(x_1)\big|_{\Sigma_{\varepsilon H}} \\ \left[-\,\partial_{y_2} U_2^{NF}\right]_H & = \;\partial_{x_2} u_1^{FF}(x_1)\big|_{\Sigma_{\varepsilon H}} \end{array}\right.$$

- La condition de compatibilité de U_2^{NF} nous donne la condition pour u_1^{FF} :

$$\boxed{\nabla u_1^{FF}.\vec{n} + ikZu_1^{FF} = a_0^{(2)} u_0^{FF} + a_1^{(2)}\partial_{x_1} u_0^{FF} + a_2^{(2)}\partial_{x_1}^2 u_0^{FF} \quad \text{sur} \quad \{x_2 = \varepsilon H\}}$$

où les coefficients $a_0^{(2)}$, $a_1^{(2)}$ et $a_2^{(2)}$ sont calculés à partir des profils $\mathcal{U}_0^{(1)}$ et $\mathcal{U}_1^{(1)}$.

- ⋆ $a_0^{(2)} = \dfrac{1}{d}\left[k^2\left|D_H \setminus \overline{B}\right| - ikZ\displaystyle\int_{\Sigma_0}\mathcal{U}_0^{(1)}\right]$
- ⋆ $a_1^{(2)} = \dfrac{1}{d}\left[2\displaystyle\int_D \partial_{y_1}\mathcal{U}_0^{(1)} - ikZ\displaystyle\int_{\Sigma_0}\mathcal{U}_1^{(1)} - \displaystyle\int_{\partial B}\mathcal{U}_0^{(1)} n_1\right]$
- ⋆ $a_2^{(2)} = \dfrac{1}{d}\left[2\displaystyle\int_D \partial_{y_1}\mathcal{U}_1^{(1)} + |D_H \setminus \overline{B}| - \displaystyle\int_{\partial B}\mathcal{U}_1^{(1)} n_1\right]$

↪ L'approximation $v_1^\varepsilon \approx u_0^{FF}$ ne prend pas en compte les particules.

↪ **Modèle effectif** : $v_2^\varepsilon \ \approx \ u_0^{FF} \ + \ \varepsilon \ u_1^{FF}$

$$\begin{cases} -\,\Delta v_2^\varepsilon - k^2 \ v_2^\varepsilon \ = \ 0 \quad \text{dans} \quad \mathbb{R} \times (\varepsilon H, +\infty) \\ \nabla v_2^\varepsilon . \vec{n} + \left(ikZ - \varepsilon a_0^{(2)} \right) v_2^\varepsilon - \varepsilon a_1^{(2)} \partial_{x_1} v_2^\varepsilon - \varepsilon a_2^{(2)} \partial_{x_1}^2 v_2^\varepsilon = 0 \quad \text{sur} \quad \{x_2 = \varepsilon H\} \\ v_2^\varepsilon - u_{inc} \text{ est sortant} \end{cases}$$

Les constantes $a_0^{(2)}$, $a_1^{(2)}$ et $a_2^{(2)}$ dépendent de H : on peut jouer sur la valeur de H pour que le problème effectif soit bien posé $\left(a_2^{(2)} > 0 \right)$.

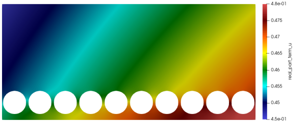
↪ En itérant, on peut construire des approximations à tout ordre n de la solution u^ε sous la forme $v_n^\varepsilon \approx u_0^{FF} + \varepsilon u_1^{FF} + \ldots + \varepsilon^{n-1} u_{n-1}^{FF}$.

↪ **Estimations d'erreur :**
On note pour tout $M > H$, $D_M^\varepsilon := \{x_1 \in [0, \varepsilon d], \ x_2 \in [\varepsilon H, \varepsilon M]\}$

$$\exists \ C > 0 \text{ telle que } \|u^\varepsilon - v_n^\varepsilon\|_{H^1(D_M^\varepsilon)} \leq C \ \varepsilon^n$$

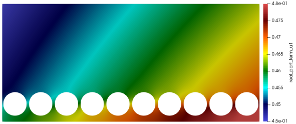
Paramètres : fréquence= 2GHz, $k = 41.82$, $k_1 = k \sin\theta$, $k_2 = k\cos\theta$ avec θ l'angle d'incidence.

- **Partie réelle du champ total** pour $\varepsilon = 10^{-4}$m, $Z = 1 + i$ et $\theta = \pi/3$.



Solution de référence u^ε

$v_2^\varepsilon \approx u_0^{FF} + \varepsilon u_1^{FF}$



Solution approchée $v_2^\varepsilon + U_0^{NF} + \varepsilon U_1^{NF}$

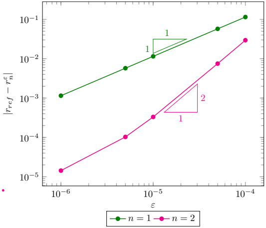
- **Erreur sur le coefficient de réflexion** pour $Z = 1$ et $\theta = \pi/3$.

⋆ Coefficient de réflexion pour v_1^ε :

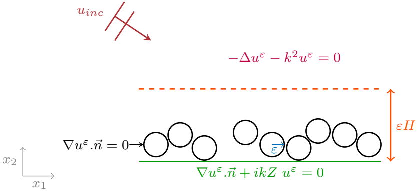
$$r_1^\varepsilon(k_1, k_2) = \frac{ik_2 - ikZ}{ik_2 + ikZ} .$$

⋆ Coefficient de réflexion pour v_2^ε :

$$r_2^\varepsilon(k_1, k_2) = \frac{ik_2 - \left(ikZ - \varepsilon a_0^{(2)}\right) + \varepsilon k_1 \left(i a_1^{(2)} - a_2^{(2)} k_1\right)}{ik_2 + \left(ikZ - \varepsilon a_0^{(2)}\right) + \varepsilon k_1 \left(a_2^{(2)} k_1 - i a_1^{(2)}\right)} .$$



On postule un développement asymptotique similaire au cas périodique qui dépend de l'aléatoire $\omega \in \Omega$, avec Ω l'ensemble des réalisations :



Si $x_2 \geq \varepsilon H$,
$$u_\varepsilon(x_1, x_2, \omega) = \sum_{n\in\mathbb{Z}} \varepsilon^n \underbrace{u_n^{FF}(x_1, x_2, \omega)}_{\text{Termes de champ lointain}} + \sum_{n\in\mathbb{Z}} \varepsilon^n \underbrace{U_n^{NF}\left(x_1, \frac{x_1}{\varepsilon}, \frac{x_2}{\varepsilon}, \omega\right)}_{\text{Termes de champ proche}}$$

Si $x_2 \leq \varepsilon H$,
$$u_\varepsilon(x_1, x_2, \omega) = \sum_{n\in\mathbb{Z}} \varepsilon^n \underbrace{U_n^{NF}\left(x_1, \frac{x_1}{\varepsilon}, \frac{x_2}{\varepsilon}, \omega\right)}_{\text{Termes de champ proche}}$$

- Les $U_n^{NF}(\cdot,\cdot,\cdot,\omega)$ sont solutions de problèmes de type Laplace (où x_1 joue le rôle d'un paramètre) dans un **demi-espace infini** $\mathbb{R} \times \mathbb{R}_+ \setminus \mathcal{I}^\omega$.
- On suppose que :
  - ⋆ U_n^{NF} est **stationnaire** par rapport à y_1, pour tout $y_2 \in (\delta, \delta + h_L)$.
  - ⋆ p.s. $\lim\limits_{y_2 \to +\infty} U_n^{NF}(x_1, y_1, y_2, \omega) = 0$
- La preuve de l'existence et l'unicité des problèmes de champ proche est délicate *(en cours)*.

Formellement, on obtient des conditions effectives du même type qu'en périodique, où les coefficients $a_0^{(2)}$, $a_1^{(2)}$ et $a_2^{(2)}$ de la condition effective à l'ordre 2 sont **déterministes** .

En pratique : on tronque le domaine dans la direction x_1 sur $\left(-\frac{R}{2}, \frac{R}{2}\right)$ et nous imposons des conditions périodiques sur les bords. On note $U_{n,R}^{NF}$ la solution du problème tronqué.

On introduit $D_R^\omega = (-R/2, R/2) \times \mathbb{R}_+ \setminus \mathcal{I}^\omega$ et $D_{R,H}^\omega = (-R/2, R/2) \times (0, H) \setminus \mathcal{I}^\omega$.

Prenons par exemple $a_2^{(2)}$.

$$
\begin{aligned}
a_2^{(2)} &= \lim_{R \to +\infty} \frac{1}{R} \left[2 \int_{D_R^\omega} \partial_{y_1} \mathcal{U}_1^{(1)}(y_1, y_2, \omega) + \left| D_{R,H}^\omega \right| - \int_{\partial \mathcal{I}^\omega} \mathcal{U}_1^{(1)}(y_1, y_2, \omega) n_1 \right] \\
&= \lim_{R \to +\infty} \mathbb{E} \left[\frac{1}{R} \left(2 \int_{D_R^\omega} \partial_{y_1} \mathcal{U}_1^{(1)}(y_1, y_2, \omega) + \left| D_{R,H}^\omega \right| - \int_{\partial \mathcal{I}^\omega} \mathcal{U}_1^{(1)}(y_1, y_2, \omega) n_1 \right) \right] \\
&\qquad \text{par ergodicité} \\
&= \lim_{R, M \to +\infty} \frac{1}{M} \sum_{m=1}^{M} \left[\left(2 \int_{D_R^\omega} \partial_{y_1} \mathcal{U}_1^{(1)}(y_1, y_2, \omega) + \left| D_{R,H}^\omega \right| - \int_{\partial \mathcal{I}^\omega} \mathcal{U}_1^{(1)}(y_1, y_2, \omega) n_1 \right) \right] \\
&\qquad \text{par la Loi des grands nombres}
\end{aligned}
$$

On peut jouer sur la **taille du domaine** R et sur le **nombre de réalisations** M que l'on considère pour accélérer les convergences.

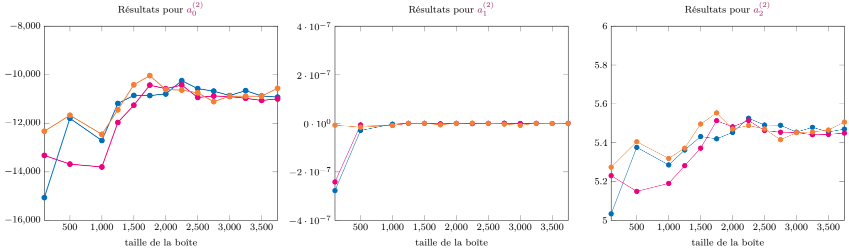
On tire le centre des inclusions suivant un **processus point de Poisson homogène.**

- On se donne une **bande** L_T^ε de taille $T \times \varepsilon h_L$ et un **taux de remplissage** $\rho \in \,]0,1[$.
- On calcule **la densité moyenne de particules** $\boxed{\nu = \rho \dfrac{Aire(L_T^\varepsilon)}{Aire(\text{particule})} \quad .}$
- Le **nombre de particules** N_{part} contenu dans L_T^ε suit une **loi de Poisson de paramètre** ν

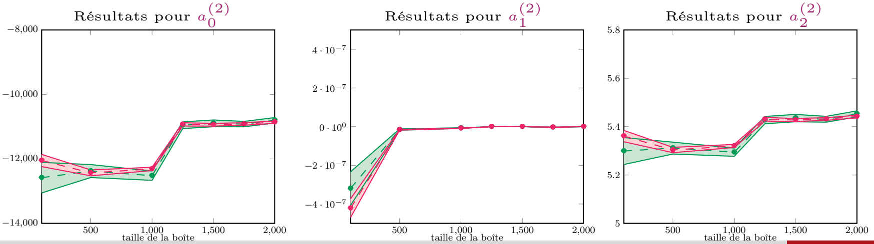
$$\mathbb{P}(N_{part} = m) = e^{-\nu} \frac{\nu^m}{m!} \quad .$$

- On **tire les centres aléatoirement dans la bande** (suivant deux lois Uniformes) en vérifiant qu'une distance minimale avec les autres centres et les différents bords est vérifiée.

- Calcul des coefficients du modèle effectif pour **une réalisation sur une boîte de plus en plus grande.**



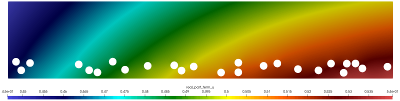
- Calcul des coefficients du modèle effectif : **convergence de la méthode**.
  - ⋆ Espérance et intervalle de confiance pour 100 réalisations.
  - ⋆ Espérance et intervalle de confiance pour 500 réalisations.



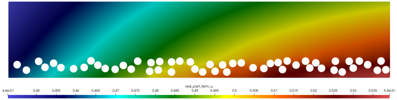
Résultats numériques

Paramètres : fréquence$=$ 2GHz, $\theta = \pi/3$, $\varepsilon = 10^{-4}$m, $Z = 1 + i$.

- Champ total en partie réelle pour **différents taux de remplissage** ρ avec $T = 100$:



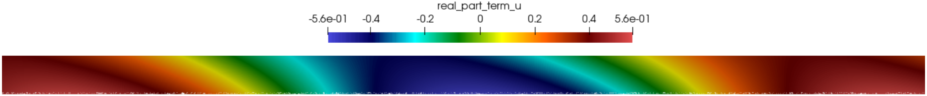
$\rho = 0.2$



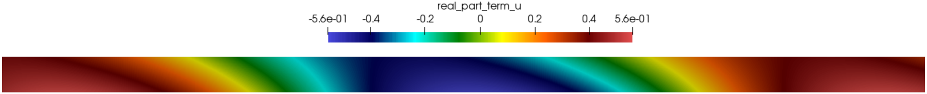
$\rho = 0.5$

- **Validation qualitative :** avec $T = 2000$ et $\rho = 0.4$.

Solution de référence :



Solution approchée :



- **Justification théorique** pour une répartition aléatoire et **estimations d'erreur**.
- Comparer **l'évolution du coefficient de réflexion** obtenue pour une répartition périodique des particules vs une répartition aléatoire des particules.
- Extension aux **équations de Maxwell**.

- **Justification théorique** pour une répartition aléatoire et **estimations d'erreur**.
- Comparer **l'évolution du coefficient de réflexion** obtenue pour une répartition périodique des particules vs une répartition aléatoire des particules.
- Extension aux **équations de Maxwell**.

Merci de votre attention !