PROBLEMES INVERSES DE VALEURS PROPRES

B. ROUSSELET

Département de Mathématiques - Université de Nice
Parc Valrose - 06034 NICE

On s'intéresse à des problèmes d'optimisation où le contrôle est un domaine Ω de $\mathbb{R}^n$ ("optimal design" cf DERVIEUX - PALMERIO [5] et MURAT - SIMON [15]) et où la fonctionnelle fait intervenir les valeurs propres d'un problème aux limites au lieu de la solution d'un problème bien posé (par exemple elliptique).

L'origine de ce genre de questions remonte à RAYLEIGH (1877) [15] en passant par HADAMARD [10], GARABEDIAN [8], KAC [12] .

On s'attachera surtout à dégager la mise en oeuvre d'un algorithme après avoir précisé le problème inverse et la régularité des fonctionnelles.

I . POSITION DU PROBLEME ; REGULARITE DES FONCTIONNELLES

Dans toute la suite, on désignera par L l'ensemble des ouverts bornés, connexes et "lipschitziens" de $\mathbb{R}^n$ (CHENAIS [4])

① Le problème direct

Soit $V = H^1(\Omega)$ où $\Omega \in L$ et le problème de valeurs propres variationnel :

$$(1_\Omega) \quad \left\{ \begin{array}{l} \forall v \in V \\ a_\Omega(u, v) = \lambda b_\Omega(u, v) \quad (u \neq 0) \end{array} \right.$$

avec par exemple :

$$\left\{ \begin{array}{l} a_\Omega(u, v) = \int_\Omega (A(x) \nabla u(x) | \nabla v(x)) dx + \int_\Omega B(x) u(x) v(x) dx \\ \quad + \int_{\partial\Omega} \ell(x) A(x) u(x) v(x) d\sigma \\ b_\Omega(u, v) = \int_\Omega C(x) u(x) v(x) dx \end{array} \right.$$

et les hypothèses : $(B, L, C) \in (L^\infty(\mathbb{R}^n))^3$ $C > 0$ presque partout

$A \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}^n)$ vérifiant, avec $0 < \alpha \leq M$:

$$\forall x \in \mathbb{R}^n \quad \forall \xi \in \mathbb{R}^n \quad \alpha \|\xi\|^2 \leq (A(x) \xi, \xi) \leq M \|\xi\|^2 .$$

Dans ces conditions, les valeurs propres de $(\mathbf{1}_N)$ forment un ensemble dénombrable discret de nombres positifs, elles sont de plus toutes de multiplicité finie. KATO [13], GOULAQUIC [9] ; (on les désigne par $(\lambda_n(\Omega))_{n \in \mathbb{N}}$).

REMARQUE . - pour un type de problème direct de valeurs propres non autoadjoint avec transmissions cf DERVIEUX - PALMERIO - ROUSSELET [6] .

② Problèmes inverses

Soient $\Lambda_N(\Omega) = (\lambda_k(\Omega))_{k \leq N}$ et $M_N = (\mu_k)_{k \leq N}$ (où pour tout k , $\mu_k \in \mathbb{R}_+$) et :

$$\begin{array}{ccc} L & \xrightarrow{J_N} & \mathbb{R}_+ \\ \Omega & \longrightarrow & J_N(\Lambda_N(\Omega), M_N) \end{array}$$

on s'intéresse à la famille de

Problèmes d'optimisation

Trouver $\Omega_0 \in L$ tel que pour tout $\Omega \in L$ (resp. tout $\Omega \in L$ et "voisin" de Ω_1 donné)

$$J(\Omega_0) \leq J(\Omega)$$

REMARQUE . - pour l'étude de la différentiabilité, on supposera que $(\Lambda_N, M_N) \longrightarrow J_N(\Lambda_N, M_N)$ est $\mathcal{C}^1$.

EXEMPLES . -

$$\textcircled{1} \quad J_N(\Omega) = \sum_{i \leq N} |\lambda_i(\Omega) - \mu_i|^2$$

$$\textcircled{2} \quad J_N(\Omega) = \sum_{i \leq N} \left| \frac{1}{\lambda_i(\Omega)} - \frac{1}{\mu_i} \right|^2$$

$$\textcircled{3} \quad J_N(\Omega) = \sum_{i \leq N} \left| \frac{\lambda_{i+1}(\Omega)}{\lambda_i(\Omega)} - \frac{\mu_{i+1}}{\mu_i} \right|^2$$

③ Propriétés des fonctionnelles

La continuité et la différentiabilité résultent de la remarque ci-dessus et des propriétés analogues des valeurs propres :

Ⓐ Continuité

PROPOSITION . - Si l'on munit l'ensemble L de la topologie définie par le système fondamental de voisinages :

$$V(\Omega^*, \eta) = \left\{ \Omega = (I+F)(\Omega^*) \left| \begin{array}{l} F \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^n) \\ \|F\|_{1,\infty} < \eta \end{array} \right. \right\} \cap L$$

l'application $\Omega \longrightarrow \lambda_n(\Omega)$ de L dans R_+ est continue.

La démonstration repose sur la classique caractérisation variationnelle des valeurs propres de problèmes autoadjoints ("quotient de Rayleigh") après transport sur un ouvert fixe.

(b) Gateaux - différentiabilité

PROPOSITION . - Soit $F \in W^{1,\infty}(R_n, R^n)$, $\phi_\epsilon = I + \epsilon F$ ($\epsilon \in R$), $\Omega_\epsilon = \phi_\epsilon(\Omega)$, $\lambda_n(\Omega)$ une valeur propre simple de (1_Ω) , la limite suivante existe :

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\lambda_n(\Omega_\epsilon) - \lambda_n(\Omega)}{\epsilon} \quad \text{et on la note } \lambda'_n(\Omega, F) .$$

La démonstration se fait par changement de variable : ce qui ramène à un domaine fixe avec un opérateur dépendant de ϵ et on utilise alors KATO [13] Ch VII où l'hypothèse analytique n'est pas essentielle.

REMARQUE . - Calcul explicite donne d'abord une expression assez peu maniable faisant intervenir des intégrales portant sur Ω . Si les fonctions sont assez régulières, on peut exprimer cette dérivée à l'aide d'intégrales de bord (par application de formules de Green) :

$$\lambda'_n(\Omega, F) = A_1 + A_2 \quad \text{où}$$

$$A_1 = \int_{\partial\Omega} (+A |\nabla u|^2 + Bu^2 - \lambda u^2)(F|v) \, d\sigma$$

$$A_2 = \int_{\partial\Omega} \left[(\nabla(LAu^2)|F) + \lambda Au^2(\nabla^* F - (DFv|v)) \right] d\sigma$$

REMARQUE . - dans le cas de l'équation de Helmholtz (en remarquant que dans ce cas $\nabla u = \frac{\partial u}{\partial \nu}$ sur le bord : ici $V = H^1_0(\Omega)$)

$$\lambda'_n(\Omega, F) = - \int_{\partial\Omega} \left| \frac{\partial u}{\partial \nu} \right|^2 (F|v) \, d\sigma \quad (\text{" formule de Hadamard "}) .$$

Dans le cas d'une valeur propre multiple, l'expression est plus compliquée ; indiquons que pour l'équation de Helmholtz on trouve que si $(\lambda_{n+j}(\Omega))_{j=1, \dots, p}$ est une valeur propre d'ordre p , $(\lambda'_{n+j}(\Omega, F))_{j=1, \dots, p}$ sont les valeurs propres de la matrice B de terme général

$$B_{ij} = - \int_{\partial\Omega} \frac{\partial u_{n+i}}{\partial \nu} \frac{\partial u_{n+j}}{\partial \nu} (F.v) \, d\sigma$$

où $(u_{n+i})_{i=1, \dots, p}$ sont les fonctions propres associées aux $(\lambda_{n+i})_{i=1, \dots, p}$.

REMARQUE . - Dans la pratique numérique, il est impossible de distinguer une valeur propre multiple de valeurs propres très rapprochées. Cependant (cf MICHELETTI [14]) : pour tout $\epsilon > 0$, il existe $\Omega^* \in V_\epsilon^{(3)}(\Omega)$ pour lesquels toutes les valeurs propres de (I_Ω) sont simples.

Ceci rend légitime l'utilisation de la formule concernant les valeurs propres simples dans les applications numériques.

II . TECHNIQUES DE MISE EN OEUVRE

REMARQUE . - Un algorithme de recherche de domaine optimal devra générer successivement plusieurs domaines approchés dans lesquels on devra résoudre un problème du type (I_Ω) ; les problèmes et les techniques de mise en oeuvre en résultent ; on se limite naturellement à la dimension 2 .

① Eléments finis et domaines variables

Problème : trianguler automatiquement et économiquement les domaines générés par l'algorithme sans intervention du programme (travail en batch-processing).

Deux solutions :

. on se restreint à des domaines Ω image d'un domaine de référence $\hat{\Omega}$ que l'on triangule au départ $(\hat{\mathcal{T}}_h)$; la triangulation de $\Omega = \mathcal{T}_h = \phi(\hat{\mathcal{T}}_h)$.

. on triangule d'abord un domaine de référence $\hat{\Omega}$, d'où un domaine de référence approché $\hat{\Omega}_h$; on travaille directement sur des domaines " discrets " Ω_h et à chaque étape on construit un difféomorphisme ϕ_h transportant la triangulation.

Exemple de triangulation de référence :

Si l'on prend pour $\hat{\Omega}$ le disque unité et des éléments finis de type $\mathcal{P}_1$, la triangulation suivante est très satisfaisante : les noeuds sont définis par

$$z_{pq} = \rho_p e^{i\theta_q} \quad \text{où} \quad :$$

$$\left\{ \begin{array}{l} p = 0, \dots, n \\ q = 1, \dots, q_m(p) \quad \text{avec} \quad q_m = 6p \\ \rho_p = p h \quad \theta_q = q \frac{2\pi}{q_m} \end{array} \right.$$

h est le " pas de la triangulation " .

REMARQUE . - Pour certains problèmes où l'on prévoit d'obtenir des ouverts " à coins " il sera commode de prendre pour $\hat{\Omega}$ un triangle, un carré etc ...

. Transport de la triangulation

- Pour éviter d'aplatir les angles dans le transport, on choisit ϕ conforme dans $\hat{\Omega}$.
- si l'on travaille directement sur les domaines " discrets " on pourra prendre ϕ_h holomorphe dans un voisinage de $\hat{\Omega}$ et telle que : $|\phi_h'(z_k)| > \epsilon_c$ pour tout $z_k \in \mathcal{C}_h$.

REMARQUE . - Si $\hat{\theta}_m$ est le plus petit angle de $\mathcal{C}_h$ et si $\alpha < \hat{\theta}_m$ et $c_m = \inf \left(\frac{1}{R(\Gamma_{2h}, A_{1,h})} + \frac{1}{R(\Gamma_{3h}, A_{1,h})} \right)$ où l'inf est pris sur tous les noeuds $A_{i,h} \in \mathcal{C}_h$

$R(\Gamma_{j,h}, A_{i,h})$ désignant le rayon de courbure (arithmétique) de l'arc Γ_j en $A_{i,h}$ (cf figure [1]) alors si $h \leq 2c_m(\hat{\theta}_m - \alpha)$, on a : $\theta_{h,m} \geq \alpha$.

(2) Le Problème discret

. pour la formation des matrices on a utilisé la méthode de formation progressive des coefficients (J. CEA) [3,2]

. le problème de valeurs propres discret : $Ax = \lambda Bx$ A et B sont de g grandes matrices creuses définies positives : il suffit de calculer les plus petites valeurs propres ; les méthodes directes (Jacobi, QR) sont à éviter pour des raisons de mémoire ; on utilise une méthode d'itération simultanée généralisant la méthode de la puissance cf JENNINGS [11] BATHE [1], ce dernier aimablement indiqué par GLOWINSKI.

③ Choix de la famille de domaines (dans les applications numériques) .

notations : $\mathcal{H}(\bar{\Omega})$: fonctions holomorphes au voisinage de Ω .

$\text{Conf}(\bar{\Omega})$: transformation conformes dans un voisinage de Ω .

$$\text{Conf}_{\mathcal{C}_h, \epsilon}(\bar{\Omega}) = \{ \phi \in \mathcal{H}(\bar{\Omega}) \mid \forall z_k \in \mathcal{C}_h, |\phi'(z_k)| > \epsilon \}$$

conformément à l'esprit des éléments finis on considèrera des familles de l'un des types suivants :

Ⓐ $L_N = L_{\Omega} \{ \phi(\hat{\Omega}) \mid \phi \in \text{Conf}(\bar{\hat{\Omega}}) \cap \mathbb{P}_N \}$ avec $\mathcal{C}_{N-1}[z] \not\subset \mathbb{P}_N \subset \mathcal{C}_N[z]$

désigne les polynômes de degré au plus N ; les " vraies inconnues " sont ici les coefficients (ou bien les racines) des polynômes,

Ⓑ $L_{N, \mathcal{C}_h, \epsilon} = \{ \phi(\hat{\Omega}_h) \mid \phi \in \text{Conf}_{\mathcal{C}_h, \epsilon}(\bar{\hat{\Omega}}_h) \cap \mathbb{P}_N \}$; dans ce cas, on choisit

$\mathbb{P}_N$ tel que les noeuds de $\partial\hat{\Omega}_h$ forment un ensemble $\mathbb{P}_N$ - unisolvant, les " vraies inconnues " sont ici les coordonnées des noeuds de $\partial\hat{\Omega}_h$.

④ Expressions du gradient

Au niveau de la mise en oeuvre, on considère la fonctionnelle comme ne dépendant que de $2N$ paramètres réels (les parties réelles et imaginaires des " vraies inconnues ") ; on note $J'(a, b) = (G(a) | b)$. Pour des raisons de simplicité, on se limite à l'équation de Helmholtz et à une valeur propre simple : le calcul se fait alors à partir de (2) .

Ⓐ J exprimé à partir des coefficients

$$a = ((\alpha_p, \beta_p))_{p \leq P} \text{ où } (\alpha_p + i\beta_p) \text{ sont les coefficients du polynôme } \phi .$$

Les composantes du gradient au point a sont :

$$G(a) = (\gamma_1, \delta_1, \dots, \gamma_q, \delta_q, \dots, \gamma_P, \delta_P) \text{ où } \left\{ \begin{array}{l} \gamma_q = \sum_{p \leq Q} \gamma_{qp}^{(1)} \alpha_p + \gamma_{qp}^{(2)} \beta_p \\ \delta_p = \sum_{q \leq P} \delta_{qp}^{(1)} \alpha_p + \delta_{qp}^{(2)} \beta_p \end{array} \right.$$

avec

$$\left\{ \begin{array}{l} \gamma_{qp}^{(1)} = \int_0^{2\pi} K_p(\theta) \cos((p-q)\theta) d\theta ; \quad \gamma_{qp}^{(2)} = - \int_0^{2\pi} K_p(\theta) \sin((p-q)\theta) d\theta \\ \delta_{qp}^{(1)} = \int_0^{2\pi} K_p(\theta) \sin((p-q)\theta) d\theta ; \quad \delta_{qp}^{(2)} = \int_0^{2\pi} K_p(\theta) \cos((p-q)\theta) d\theta \end{array} \right.$$

où

$$K_p(\theta) = \sum_{n \leq N} 2p \frac{\partial J}{\partial \lambda_n} \left(\frac{\partial u_n}{\partial v} (\phi(e^{i\theta})) \right)^2$$

(b) J exprimé à partir des zéros :

$a = ((\xi_p, \eta_p))_{1 \leq p \leq P}$ où $\zeta_p = \xi_p + i\eta_p$ sont les zéros du polynôme ϕ .

Les composantes du gradient au point a sont :

$G(a) = (\gamma_1, \delta_1, \dots, \gamma_q, \delta_q, \dots, \gamma_p, \delta_p)$ où :

$$\begin{cases} \gamma_q = \int_0^{2\pi} K(\theta) \operatorname{Re}(L_{aq}(\theta)) d\theta \\ \delta_q = \int_0^{2\pi} K(\theta) \operatorname{Im}(L_{aq}(\theta)) d\theta \end{cases}$$

avec

$$K(\theta) = \sum_{n \leq N} \frac{\partial J}{\partial \lambda_n} \left(\frac{\partial u_n}{\partial v} (\phi(e^{i\theta})) \right)^2$$

$$L_{aq}(\theta) = \frac{P_a(re^{i\theta})}{re^{-i\theta} - \bar{\zeta}_q} P'_a(re^{i\theta}) e^{i\theta}$$

P_a désignant le polynôme unitaire dont les zéros sont $(\zeta_p)_{1 \leq p \leq P}$.

(c) J exprimé à partir des coordonnées des noeuds

$a = (z_k)_{1 \leq k \leq K}$ où les z_k sont les coordonnées (complexes) des noeuds de $\partial\Omega_h$; l'utilisation d'une formule de quadrature :

$$- \int_{\partial\Omega} \left(\frac{\partial u}{\partial v} \right)^2 (F|v) d\sigma = - \sum \omega_k \left(\frac{\partial u}{\partial v} (z_k) \right)^2 (c_k v_{kx} + d_k v_{ky})$$

avec $F_k = (c_k, d_k)$, donne directement pour la gradient :

$G(a) = (\gamma_1, \delta_1, \dots, \gamma_q, \delta_q, \dots, \gamma_p, \delta_p)$ avec :

$$\begin{cases} \gamma_q = - \sum_{n,k} \frac{\partial J}{\partial \lambda_n} \omega_k \left(\frac{\partial u_n}{\partial v} (z_k) \right)^2 v_{kx} \\ \delta_q = - \sum_{n,k} \frac{\partial J}{\partial \lambda_n} \omega_k \left(\frac{\partial u_n}{\partial v} (z_k) \right)^2 v_{ky} \end{cases}$$

III . MISE EN OEUVRE

(1) Algorithme

Il s'agit de minimiser sur une partie non convexe de $\mathbb{R}^{2N}$ une fonctionnelle continue et différentiable avec les difficultés suivantes :

. très gros coût pour évaluer la fonctionnelle : résolution d'un problème de valeurs propres discret avec de grandes matrices creuses ($Ax = \lambda Bx$) via un programme d'éléments finis qui forme ces matrices.

. la fonctionnelle est non convexe : le choix de ρ est délicat (cf BENSASSON [2])

. il est délicat de s'assurer la conformité de la transformation ; on a utilisé la Théorème de Rouché (DIEUDONNE [7])

Ceci nous a amené à choisir une méthode de descente très simple (gradient) (CEA [3,1]) avec un algorithme sophistiqué pour le choix du ρ .

REMARQUE . - On divise le temps d'exécution par 2 à 4 en ajustant les valeurs propres les unes après les autres et ceci améliore aussi un peu la précision.

② Les essais numériques

Ils ont été réalisés sur l'IBM 370-168 du C.I.R.C.E. et demandent selon les cas de 1 à 10 mn de temps C.P.U. pour l'exécution en F.T.X.

Des raisons de coût et de temps nous ont ainsi obligé à nous limiter à des éléments finis de type P_1 comprenant seulement une centaine de noeuds et à n'ajuster que cinq valeurs propres. Cela a entraîné une imprécision dans l'évaluation de la fonctionnelle et du gradient qui explique les difficultés d'un certain nombre d'essais.

Les résultats numériques exécutés en prenant comme " vrais paramètres " les coefficients de ϕ révèlent que l'algorithme se " bloque " parfois pour deux raisons :

- soit parcequ'on n'arrive plus à déformer le domaine en conservant la conformité de ϕ

- soit parceque avec un gradient non négligeable, on n'arrive pas à trouver de ρ qui fasse sensiblement décroître la fonctionnelle

- . la première est d'ôe au choix de la famille de domaines très liés aux difféomorphismes : ce blocage devrait disparaître avec les coordonnées des noeuds frontières comme " vraies inconnues " .

- . la première est d'ôe d'une part à la nature non convexe de la fonctionnelle et par ailleurs au manque de précision des calculs.

Cependant

- dans des situations à valeurs propres simples, on a fréquemment une division de la fonctionnelle par 100 à 200.

- dans le cas de valeurs propres " multiples " on a en général une division par 30 à 40 même en " partant loin du domaine souhaité ", ce qui est d'autant plus intéressant si l'on remarque que les problèmes directs sont alors essentiellement mal conditionnés.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] BATHE Solution methods for large generalized eigenvalue problems in structural engineering, University of California (1971)
- [2] BENSASSON Optim, une subroutine en Fortran IV à allocation dynamique de mémoire, pour résoudre les problèmes d'optimisation non linéaires (1974) (preprint)
- [3] [, 1] CEA Optimisation, théorie et algorithme (Dunod)
- [, 2] CEA Approximation variationnelle des problèmes aux limites. Ann. Inst. Fourier, 14, 2 (1964)
- [4] CHENAIS On the existence of a solution in a domain identification problem (J. Math. Anal. Appl. (1975))
- [5] DERVIEUX - PALMERIO Hadamard's variational formulas in optimum design problems (Communication à ce même Congrès)
- [6] DERVIEUX - PALMERIO - ROUSSELET Dessin optimal d'une cellule de réacteur nucléaire (à paraître)
- [7] DIEUDONNE Calcul infinitésimal (Hermann)
- [8] GARABEDIAN and SCHIFFER Variational problems in the theory of elliptic partial differential equations. J. of Rat. Mechanics and Anal. 2, 137 - 171 (1953)
- [9] GOULAQUIC G.I.M.E. (1973, Third Session); Théorie spectrale de problèmes aux limites irréguliers ; applications
- [10] HADAMARD Mémoire sur le problème d'analyse relatif à l'équilibre des plaques élastiques encastrées. Oeuvres de Jacques Hadamard, C.N.R.S. Paris (1968)
- [11] JENNINGS and ORR Application of the simultaneous iteration method to undamped vibration problems. Internat. J. for Num. Methods in Engineering 3, 13 - 24 (1971)
- [12] KAC Can one hear the shape of a drum, A. Math. Monthly (1964)
- [13] KATO Perturbation theory for linear operators (Springer : Die Grundlehren der mathematischen Wissenschaften)
- [14] MICHELETTI Perturbazione dello spretto di un operatore di tipo variazionale in relazione ad una variazione del campo. Annali di Matematica pura ed applicate. Vol XCVII (1973)
- [15] MURAT - SIMON Etude de quelques problèmes d'optimal design (communication à ce même Congrès)
- [16] RAYLEIGH The theory of sound (New York Dover Publications)