ch (11) Introduction au calcul numérique des valeurs propres et des vecteurs propres

(1) Problème modèle : corde vibrante.

- Dans la suite de ce paragraphe, $y(x,t)$ désigne l'élongation d'une corde vibrante qui suppose $0 \leq x \leq L$, ou la vitesse d'un tube acoustique fermé aux deux bouts, ou la pression du même tuyau ouvert aux deux bouts. On note c_0 la célérité des ondes. On sait qu'alors $y(x,t)$ satisfait à l'équation (dite "équation des ondes") :

(1.1) $$\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} - c_0^2 \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = 0, \quad 0 < x < L, \quad t > 0.$$

Les conditions aux limites sont de type "Dirichlet homogène" :

(1.2) $$y(0,t) = y(L,t) = 0, \quad t \geqslant 0.$$

- On cherche une solution $y(x,t)$ "modale", c'est à dire de la forme

(1.3) $$y(x,t) = u(x,\omega)\, e^{i\omega t}.$$

pour $\omega \in \mathbb{C}$ à déterminer. On tire alors de (1.1) et (1.2) :

$$(1.4) \qquad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + K^2 u = 0, \quad 0 < x < L$$

$$(1.5) \qquad u(0) = u(L) = 0$$

où

$$(1.6) \qquad K = \frac{\omega}{c_0}$$

est le nombre d'onde associé à la pulsation ω.

- Le calcul d'une solution non identiquement nulle (un "mode") de (1.4)(1.5) est simple puisque les solutions de l'équation différentielle (1.4) s'explicitent en fonction des lignes trigonométriques :

$$(1.7) \qquad u(x) = \alpha (\sin Kx) + \beta (\cos Kx) .$$

Pour $x = 0$, la condition (1.5) entraîne $\beta = 0$.
Si $\alpha = 0$, la fonction $u(\cdot)$ est identiquement nulle, ce qui ne présente pas d'intérêt. On a donc, en vertu de (1.5) avec $x = L$:

$$(1.8) \qquad \sin(KL) = 0 .$$

Cette relation (1.8) permet de quantifier le nombre d'onde K : il existe ℓ entier (≥ 1) de sorte que

$$(1.9) \qquad KL = \ell \pi, \quad \ell \text{ entier} \geq 1 .$$

- Le $\ell^{\text{ième}}$ mode $u_\ell(\bullet)$ s'écrit donc :

(1.10) $$u_\ell(x) = \sin\left(\ell\pi \frac{x}{L}\right), \quad 0<x<L$$

Il est représenté graphiquement pour quelques valeurs de ℓ ci-dessous :

② Problème discret.

- On discrétise l'équation (1-4) avec une grille comportant J intervalles (J est un entier ≥ 1). On note Δx le pas d'espace associé :

(2.1) $$J\,\Delta x = L, \quad J \text{ entier} \geq 1.$$

On cherche donc $u_j \simeq u(j\Delta x)$, valeur approchée de $u(\bullet)$ au point de grille numéro j, $0 \leq j \leq J$. Les conditions limites (1.5) s'écrivent maintenant

(2.2) $$u_0 = 0, \quad u_J = 0$$

pour $j=0$ et $j=J$. Il reste à déterminer $(u_j)_{1\leq j\leq J-1}$.

- On remplace $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ par son approximation par différences finies :

$$(2\text{-}3) \qquad -\left(\frac{d^2u}{dx^2}\right)_j \simeq \left(\frac{1}{\Delta x}\right)^2 \left(-u_{j-1} + 2u_j - u_{j+1}\right), \quad 1 \leq j \leq J-1 .$$

On peut donc introduire la matrice A d'ordre $J-1$ associée au schéma (2-3) aux différences finies :

$$A = \left(\frac{1}{\Delta x}\right)^2 \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & & 0 \\ -1 & 2 & \ddots & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & -1 & 2 & -1 & \\ & & & \ddots & \ddots & -1 \\ 0 & & & & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

- La version discrétisée de (1-4) s'écrit donc

$$(2\text{-}4) \qquad (Au)_j = k^2 u_j , \quad 1 \leq j \leq J$$

c'est à dire

$$(2\text{-}5) \qquad AU = k^2 U , \quad U \neq 0$$

où

$$(2\text{-}6) \qquad U = (u_1, \ldots, u_{J-1})^t \in \mathbb{R}^{J-1}$$

désigne la colonne formée des inconnues u_1 à u_{J-1}.

On a transformé le problème continu (1.4)(1.5) en le problème de calcul de valeurs propres (2.5).

- On remarque que la matrice A est symétrique. On admet qu'elle est définie positive :

$$(2.7) \quad (AU, U) \geq 0 \quad , \quad \forall U \in \mathbb{R}^{J-1}$$

où

$$(2.8) \quad (AU, V) = \sum_{j=1}^{J-1} (AU)_j \, V_j \, .$$

De plus,

$$(2.9) \quad (AU, U) = 0 \quad \Rightarrow \quad U = 0 \, .$$

Donc A admet un ensemble $(r_j)_{1 \leq j \leq J-1}$ de vecteurs propres dans $\mathbb{R}^{J-1}$, orthonormé :

$$(2.10) \quad (r_i, r_j) = \begin{cases} 0 & \text{si } i \neq j \\ 1 & \text{si } i = j \, . \end{cases}$$

- On admet que les valeurs propres λ_j telles que

$$(2.11) \quad A \cdot r_j = \lambda_j \, r_j \, , \quad 1 \leq j \leq J-1$$

peuvent être rangées par ordre strictement croissant :

(2.12) $\quad 0 < \lambda_1 < \lambda_2 < \cdots < \lambda_{J-1} < \lambda_J < 1$.

Dans la suite, on posera

(2.13) $\quad n = J-1$

pour alléger l'écriture.

(3) Méthode de la puissance.

- On se donne une matrice A symétrique, définie positive (elle satisfait (2.7) et (2.9)), de valeurs propres λ_j et vecteurs propres r_j (relation (2.11)). On se donne un vecteur u_0 que l'on décompose dans cette base :

(3.1) $$u_0 = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \, r_j \,, \quad \alpha_j \in \mathbb{R} .$$

- Appliquons A à u_0. Compte tenu de (2.11), il vient

(3.2) $$A \cdot u_0 = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \, \lambda_j \cdot r_j .$$

On recommence k fois (k entier ≥ 1). On a par récurrence sans difficulté :

(3.3) $$A^k u_0 = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \, \lambda_j^k \, r_j .$$

on isole le terme correspondant à la plus grande valeur propre :

(3.4) $$A^k u_0 = \alpha_n \lambda_n^k \left(r_n + \sum_{j=1}^{n-1} \alpha_j \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_n}\right)^k \frac{r_j}{\alpha_n} \right)$$

ce qui est licite si $\alpha_n \neq 0$. De la relation (2.12), on tire

(3-5) $$0 < \frac{\lambda_1}{\lambda_n} < \dots < \frac{\lambda_{n-1}}{\lambda_n} < 1 .$$

Donc $\left(\frac{\lambda_j}{\lambda_n}\right)^k \to 0$ si $k \nearrow \infty$. Par suite le vecteur

(3-6) $$\varepsilon_k \equiv \sum_{j=1}^{n-1} \frac{\alpha_j}{\alpha_n} \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_n}\right)^k r_j$$

tend vers zéro si k tend vers $+\infty$.

On déduit de (3.4) et (3.6)

(3.7) $$\|A^k u_0\| \sim |\alpha_n| \, \lambda_n^k , \quad k \nearrow +\infty .$$

si r_n a été choisi normé.

On norme le vecteur $A^k u_0$. On pose

(3-8) $$v_k = \frac{1}{\|A^k u_0\|} A^k u_0 .$$

Alors, quitte à changer le signe de r_n pour se ramener au cas $\alpha_n > 0$, on a :

$$(3.9) \qquad v_k = r_n + \tilde{\varepsilon}_k$$

où

$$(3.10) \qquad \tilde{\varepsilon}_k \to 0 \text{ si } k \nearrow \infty .$$

- Le résultat est le suivant : quand on applique la matrice A un grand nombre de fois à un vecteur u_0 arbitraire (on suppose seulement $\alpha_n \neq 0$), alors le vecteur normé v_k defini en (3.8) s'aligne progressivement sur le vecteur propre r_n qui correspond à la plus grande valeur propre (relations (3.9) et (3.10). On a de plus,

$$(3.11) \qquad (Av_k, v_k) \longrightarrow \lambda_n \quad , \ k \nearrow \infty$$

compte tenu de (3.9)(3.10) et (2.11) avec $j=n$. On peut donc calculer de cette façon une approximation de λ_n ainsi que du vecteur propre associé.

4) Méthode de la puissance inverse.

- Si on a pu calculer, par un algorithme simple et itératif les éléments spectraux concernant la plus grande valeur propre, est-il possible de faire la même chose pour la plus petite?

On suppose toujours la matrice A symétrique définie positive, avec des valeurs propres λ_j et des vecteurs propres r_j qui vérifient (2.11) et (2.12).

- La méthode de la puissance inverse consiste à remarquer que ces deux relations peuvent s'écrire sous la forme

$$(4.1) \qquad A^{-1} r_j = \frac{1}{\lambda_j} r_j \quad , \quad 1 \leq j \leq n$$

$$(4.2) \qquad 0 < \frac{1}{\lambda_n} < \dots < \frac{1}{\lambda_2} < \frac{1}{\lambda_1} .$$

Il suffit d'appliquer la méthode de la puissance à A^{-1} pour calculer r_1 et $\frac{1}{\lambda_1}$, donc λ_1.

- L'algorithme s'écrit donc

$$(4.3) \qquad u_0 = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j r_j \quad , \quad \alpha_1 \neq 0 .$$

u_k étant donné, on résout le système linéaire

$$(4.4) \qquad A v_{k+1} = u_k .$$

Puis on norme le vecteur v_k

$$(4.5) \qquad u_{k+1} = \frac{v_k}{\| v_k \|} .$$

alors

(4.6) $\quad u_k \to r_1$ si $k \to \infty$

(4.7) $\quad (u_k, v_{k+1}) \to \frac{1}{\lambda_1}$ si $k \to \infty$.

On détermine de cette façon le premier vecteur propre r_1 et la première valeur propre λ_1.

5) Calcul des autres valeurs propres.

- Le calcul de l'ensemble des valeurs propres est un problème délicat si A est une "grande" matrice, ce qui est le cas dans les applications. En général, on n'a besoin que des premiers modes, de basse fréquence et on procède de proche en proche

Pour fixer les idées, nous supposons la matrice A symétrique définie positive. Nous supposons le vecteur r_1 calculé, ainsi que la ~~matri~~ valeur propre λ_1. On adapte l'algorithme de la puissance inverse en tenant compte de cette information.

(5.1) $\quad u_0 = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j r_j \quad , \quad \alpha_j = (u_0, r_j)$

Alors $\quad A^{-1} u_0 = \frac{1}{\lambda_1} \alpha_1 r_1 + \frac{1}{\lambda_2} \alpha_2 r_2 + \sum_{j \geq 3} \frac{1}{\lambda_j} \alpha_j r_j$.

Comme u_0 et r_1 sont connus,

le premier coefficient α_1 est connu et quitte à supposer $\alpha_2 \neq 0$, on a

$$(5.2) \quad A^{-1} u_0 - \frac{1}{\lambda_1} \alpha_1 r_1 = \frac{\alpha_2}{\lambda_2} \left[r_2 + \sum_{j \geq 3} \frac{\lambda_2}{\lambda_j} \frac{\alpha_j}{\alpha_2} r_j \right]$$

on pose comme plus haut :

$$(5.3) \quad v_1 = A^{-1} u_0 - \frac{\alpha_1}{\lambda_1} r_0 = A^{-1} (u_0 - \alpha_1 r_0)$$

$$(5.4) \quad u_1 = \frac{v_1}{\| v_1 \|}$$

et on poursuit le processus :

$$(5.5) \quad \alpha_k^1 = (u_k, r_1)$$

$$(5.6) \quad A v_{k+1} = u_k - \alpha_k^1 r_1$$

$$(5.7) \quad u_{k+1} = \frac{1}{\| v_{k+1} \|} v_k$$

Alors u_k converge vers r_2 si $k \to \infty$ et le produit scalaire (u_k, v_{k+1}) converge vers $\frac{1}{\lambda_2}$. On généralise sans difficulté cet algorithme par récurrence pour calculer les m premières valeurs propres de la matrice A.

Dubois juin 08.