

Manuel de Référence
Fascicule R5.01 : Analyse modale
Document : R5.01.02

Algorithmes de résolution pour le problème quadratique aux valeurs propres

Résumé :

Dans ce document, nous fixons le cadre théorique des méthodes de recherche de valeurs propres du problème quadratique qui sont développées dans le code de mécanique *Aster*.

Table des matières

1 Introduction	4
1.1 Position du problème.....	4
1.2 Propriétés des matrices.....	4
1.3 Problème aux valeurs propres associé	4
1.4 Quelques cas particuliers classiques.	5
2 Réductions à une forme linéaire	6
2.1 Réductions à une forme linéaire.....	6
2.1.1 Un choix particulier pour la matrice $Z : \pm M$	7
2.1.2 Cas particulier de la matrice M définie positive	7
2.1.3 Cas de la réduction symétrique pour une matrice M singulière	8
2.2 Propriété d'orthogonalité des vecteurs propres	9
3 Méthode de déterminant	10
3.1 Généralités.	10
3.2 Méthode de Muller.	10
3.2.1 Développement de la méthode	10
3.2.2 Convergence de la méthode	12
3.2.3 Application de la méthode pour la recherche de valeurs propres	12
3.2.3.1 Développement.....	12
3.2.3.2 Coût de la méthode en terme de factorisation	13
4 Méthodes d'itération inverse	14
4.1 Méthode d'itération inverse proposée par Wilkinson.....	14
4.2 Variante développée par Jennings	14
4.3 L'algorithme d'itération inverse d'Aster.....	15
4.3.1 Mise en œuvre	15
4.3.2 Critère d'arrêt	15
5 Méthode Lanczos appliquée au problème quadratique	16
5.1 Choix d'un problème à approcher	16
5.1.1 Forme inverse standard	16
5.1.2 Stratégies de décalage.....	16
5.2 Méthode d'approximation	17
5.2.1 Problème approché et algorithme de Lanczos.....	17
5.2.2 Choix d'un pseudo produit scalaire	19
5.3 Application au Problème quadratique.....	19
5.3.1 Opérateur spectral.....	19
5.3.2 Opérateur de pseudo produit scalaire	20
5.3.3 Coût de la phase Lanczos.....	21
5.4 Mise en œuvre dans Aster	21
5.4.1 Paramètres de la mise en œuvre.....	22

5.4.2 Sous espace d'approximation	22
5.4.3 Stratégie de réorthogonalisation	22
5.4.4 Implémentation de la phase Lanczos	22
5.4.5 Restoration des approximations pour le problème quadratique	23
6 Bibliographie	24
Annexe 1 Interprétation des valeurs propres complexes	25
Annexe 2 Réductions linéaires	26

1 Introduction

1.1 Position du problème

L'analyse dynamique ou l'étude de la stabilité de l'équilibre d'une structure mécanique conduit, dans le cadre de la théorie linéarisée, à résoudre l'équation différentielle matricielle du second ordre

où M est la matrice de masse et d'inertie de la structure,
 G est la matrice induite par l'effet gyroscopique (cas des machines tournantes),
 $\dot{\varphi}$ est un paramètre réel significatif de la vitesse de rotation,
 C est la matrice d'amortissement induite par des forces dissipatives.
 K est la matrice de rigidité de la structure,
 E est la matrice d'amortissement visqueux interne de la structure,
 f est la force extérieure (qui est nulle dans le cas de la recherche d'équilibre).

1.2 Propriétés des matrices

Les matrices considérées sont à coefficients réels.

Classiquement, on considère :

M est symétrique (semi-) définie positive,
 G est anti-symétrique,
 C est symétrique,
 K est symétrique non nécessairement définie positive,
 E est anti-symétrique.

Dés lors, on s'aperçoit que la présence simultanée de la matrice d'amortissement et de la matrice d'effet gyroscopique détruit la symétrie ou l'antisymétrie du terme de vitesse ; pareillement l'amortissement interne produisant une matrice antisymétrique, détruit la propriété de symétrie de la matrice de rigidité.

D'autre part, l'introduction de relations linéaires modifie le caractère de positivité des matrices : la matrice K est indéfinie (à valeurs propres positives ou négatives).

1.3 Problème aux valeurs propres associé

Les solutions cherchées sont de la forme (séparation des variables d'espace et de temps).

$$u(t) = e^{\lambda t} x \quad \text{avec} \quad \lambda \in \text{IC} \quad \text{et} \quad x \in \text{IC}^N$$

Ce qui nous conduit au problème quadratique aux valeurs propres suivant :

la solution $u(t)$ peut se réécrire sous la forme :

que l'on peut mettre sous forme matricielle :

$$u(t) = [X] [e, t] [k]$$

où $[X]$ est la matrice modale $[n \times 2n]$
 $[e, t]$ est une matrice diagonale $[2n \times 2n]$
 $[k]$ est une matrice unicolonne $[2n \times 1]$

Proposition :

La matrice modale $[X]$ ne peut-être utilisée comme matrice de transformation pour découpler les n équations du problème quadratique d'origine, ses $2n$ colonnes ne sont pas linéairement indépendantes.

Remarque :

On détermine $[X]$, à l'aide des deux identités suivantes :

$$u(0) = [X] [k]$$

1.4 Quelques cas particuliers classiques.

Ces cas particuliers ont été longuement étudiés (cf par exemple [MEI.67],[ROS.84])

	M	G	C	K	E	valeurs propres	vecteurs droits	propres gauches	
conservatif		0	0		0	IR			IR
conservatif gyroscopique		\equiv	$\equiv 0$		$\equiv 0$	$\in i \text{ IR}$	$=$	$=$	$\in \text{ IC}$
dissipatif		0			0	IC	$=$	$=$	IC
	\equiv				\equiv	\in			\in

2 Réductions à une forme linéaire

On s'intéresse aux possibilités de réduction du problème quadratique en un problème généralisé équivalent.

Les principes de réduction sont applicables à des matrices quelconques, et si nous considérons le problème en (M, C, K) ce n'est que pour simplifier l'exposé.

2.1 Réductions à une forme linéaire

Il existe plusieurs méthodes classiques pour transformer le problème quadratique en un problème généralisé aux valeurs propres.

Nous développerons la méthode qui consiste à introduire la vitesse comme variable auxiliaire :

Pour cela nous introduisons une égalité supplémentaire :

$$\dot{Z}(t) - Z(t) = 0$$

où Z est une matrice non identiquement nulle.

Notre système initial peut alors se réécrire sous la forme matricielle dans un espace de dimension double de l'espace initial

Et le problème aux valeurs propres associé est sous sa forme inverse

En supposant K et Z régulières, le problème aux valeurs propres généralisé ainsi obtenu peut formellement se mettre sous la forme standard:

Notation : on pose $y = \frac{x}{\lambda}$

La forme standard associée au problème quadratique est indépendante de la matrice régulière Z choisie.

Définition

On appellera réduction linéaire du problème quadratique, tout problème généralisé dont tous les éléments propres (λ, y) vérifient :

- (λ, x) est solution propre du problème quadratique,
- $\lambda \cdot My = Mx$ (condition de couplage)
- λ

Proposition :

Si $(\begin{smallmatrix} x \\ y \end{smallmatrix})^T$ est une solution de l'équation linéarisée et si Z est régulière alors $(\begin{smallmatrix} \lambda \\ x \end{smallmatrix})$ est solution du problème quadratique.

Ce résultat est immédiat.

2.1.1 Un choix particulier pour la matrice Z : $\pm M$

- on prend pour matrice Z la matrice -M du système initial, dès lors le système linéarisé ($A.z = B.z$) s'écrit : μ

Si les matrices M, C et K sont symétriques et si la matrice M est régulière, cette réduction linéaire permet de construire un problème généralisé symétrique.

- on prend pour matrice Z la matrice M du système initial, dès lors le système linéarisé ($A.z = B.z$) s'écrit : μ

Si M et K sont définies positives alors B l'est aussi, mais la matrice A n'est pas symétrique.

Proposition :

Si on choisit $Z = \pm M$ (matrice non identiquement nulle) et si $(\begin{smallmatrix} \lambda \\ x, y \end{smallmatrix})^T$, avec x non nul, est solution propre de l'équation généralisée alors $(\begin{smallmatrix} \lambda \\ x \end{smallmatrix})$ est solution propre du problème quadratique.

2.1.2 Cas particulier de la matrice M définie positive

Si la matrice de masse est définie positive alors elle admet une décomposition de Choleski

$$M = Q^T \cdot Q$$

Si l'on introduit la transformation linéaire $u(t) = Q^{-1} \cdot q$ dans l'équation de base du problème quadratique après l'avoir pré-multipliée par $Q^{-T} = (Q^{-1})^T$, on obtient :

et en définissant $v = \begin{smallmatrix} \lambda \\ x \end{smallmatrix}$ l'équation précédente, nous conduit au problème standard aux valeurs propres $A.v = \lambda.v$ avec λ

2.1.3 Cas de la réduction symétrique pour une matrice M singulière

Dans ce paragraphe nous supposons les matrices M , C et K symétriques.

Si M est singulière et si la valeur propre λ_0 est semi simple alors il existe une matrice orthonormale Q telle que.

En effet, la valeur propre λ_0 étant semi-simple, le noyau de M admet une base constituée de vecteurs propres. Cette base est complétée et orthonormalisée. La matrice Q admet pour vecteurs colonnes les vecteurs de cette base.

Notons que M_{11} est symétrique (car M l'est) et régulière.

On introduit alors une régularisation de la matrice M représentée par la matrice M_R et définie par :

où M_{22} est une matrice symétrique régulière (par exemple la matrice identité).

Propriété :

Le problème généralisé associé aux matrices

est une réduction linéaire symétrique du problème quadratique.

Démonstration :

- la symétrie est assurée par construction.
- les matrices "tildées" vérifient
- donc $\tilde{M} = M$, soit encore

Or si x est un vecteur propre associé à la valeur propre λ du problème généralisé on a $M_R y = \lambda M x$, donc $M y = \lambda M x$. La condition de couplage est établie.

- Supposons que le sous-vecteur x du vecteur propre λ soit nul. Alors l'équation $M_R y = \lambda M x$ conduit à $y = 0$ car M_R est régulière, ce qui est absurde. La condition $x \neq 0$ est donc établie.

Remarque : Interprétation de la matrice régularisée M_R :

Cette réduction linéaire symétrique se distingue de celle présentée précédemment par la substitution de M par M_R dans la matrice A .

Dans le cas où M est singulière, cette substitution impose au vecteur y d'avoir une composante nulle dans le noyau M . Ainsi la réduction linéaire symétrique conduit à un problème généralisé

posé dans le sous espace des \mathbb{R}^{2n} tels que $y \in \ker M - \{0\}$.

Si K est régulière, le problème généralisé précédent admet une forme inverse standard équivalente.

2.2 Propriété d'orthogonalité des vecteurs propres

Il est immédiat de montrer que les modes propres complexes vérifient les propriétés d'orthogonalité issues du problème généralisé suivant si les matrices A et B sont symétriques :

Si l'on développe les expressions précédentes, en tenant compte des réductions linéaires utilisées on obtient les expressions :

Remarque :

- La première égalité est indépendante de la régularité de M ,*
- la seconde égalité s'obtient directement dans le cas où M est régulière et s'établit sinon en utilisant le changement de base de la régularisation de M .*

Les modes du problème quadratique ne sont donc pas M , C ou K orthogonaux.

3 Méthode de déterminant

3.1 Généralités.

La recherche de zéro du polynôme caractéristique, d'un problème quadratique aux valeurs propres, pose les problèmes inhérent aux polynômes de la variable complexe à valeurs complexes.

Ne disposant pas de relation d'ordre dans IC, les méthodes usuelles, à deux points, de type dichotomie ou sécante sont inapplicables.

Nous présentons ici la méthode la plus "populaire" pour la recherche de zéro de polynômes de la variable complexe à valeurs complexes, la méthode de Muller.

3.2 Méthode de Muller.

La méthode proposée par Muller [MUL.56] est une méthode itérative utilisant comme courbe d'interpolation une parabole à axe horizontal.

Cette méthode est relativement aisée à mettre en oeuvre mais elle se prête mal aux recherches de zéros de fonctions réelles à racines réelles, car elle plonge l'interpolation dans le plan complexe et ceci même en partant de valeurs réelles.

Son intérêt est lié à la classe de cette méthode "les méthodes par courbes d'interpolation", à savoir :

- la sûreté de la méthode par dichotomie, puisque la recherche s'effectue dans une boule "se réduisant" progressivement,
- que seul le calcul de la fonction est nécessaire (pas de calcul de dérivée comme dans la méthode de Newton),
- la convergence s'apparente à une convergence quadratique.

La méthode la plus répandue des méthodes par courbes d'interpolation est la méthode à deux points dit de la sécante.

3.2.1 Développement de la méthode

Notons $f(z) = a_0 z^n + a_1 z^{n-1} + \dots + a_n$ l'équation algébrique dont on recherche les zéros, les a_i sont complexes et nous supposons a_0 non nul.

La formule d'interpolation quadratique de Lagrange nous donne :

$$L_i(f(z)) = b_0 z^2 + b_1 z + b_2$$

et nous considérons la courbe qui passe par les trois derniers points (itérés) :

$$(z_i, f(z_i)), (z_{i-1}, f(z_{i-1})), (z_{i-2}, f(z_{i-2}))$$

et donc les coefficients b_0, b_1 et b_2 vérifient :

et en posant

et

et

on peut réécrire la formule d'interpolation de Lagrange

le nouveau point est : $z_{i+1} = z$

On peut résoudre l'équation du second degré en λ , nous obtenons alors :

en prenant l'inverse de la solution classique d'une équation du second degré :

avec

A partir de λ_{i+1} , on obtient :

$$\begin{aligned} h_{i+1} &= \lambda_{i+1} h_i, \\ z_{i+1} &= z_i + h_{i+1} \quad \text{qui est un zéro de l'équation.} \end{aligned}$$

Le signe du dénominateur est alors pris de tel sorte qu'il soit de plus grand module possible et donc de tel sorte que λ_{i+1} soit de plus grand module possible, et finalement z_{i+1} sera la racine la plus proche de z_i .

Remarque :

Muller [MUL.56] propose un processus d'initialisation en utilisant :

les valeurs "arbitraires" $z_0 = -1.$, $z_1 = 1.$, $z_2 = 0.$

et les valeurs	$a_n + a_{n-1} + a_{n-2}$	pour $f(z_0)$
	$a_n - a_{n-1} + a_{n-2}$	pour $f(z_1)$
	a_n	pour $f(z_2)$

Ce choix de valeurs conduit alors à considérer :

$$L_2(f(z)) = a_n + a_{n-1}z + a_{n-2}z^2$$

qui est une approximation de $f(x)$ au voisinage de l'origine.

L'avantage de ce processus de démarrage est qu'il ne requière aucune évaluation du polynôme $f(x)$ et qu'il est donc rapide.

3.2.2 Convergence de la méthode

Proposition : Considérer que la convergence est assurée dès que pour ε donné est un critère acceptable.

Montrons d'abord que lors du déroulement de l'algorithme les trois itérés successifs sont distincts.

Si ce n'était pas le cas, en supposant que $z_i = z_{i-1}$ et que x_i soit le 1^{er} itéré pour lequel on ait

convergence et donc

Si l'on suppose que $z_i = z_{i-2}$, on aurait alors δ_i et λ_{i+1} identiquement nuls et donc on aurait $z_{i+1} = z_i$ d'où contradiction.

Puis en constatant que la différence entre deux itérés ne peut que décroître, on obtient le résultat annoncé.

3.2.3 Application de la méthode pour la recherche de valeurs propres

3.2.3.1 Développement

Soit à déterminer les valeurs propres du système $(z^M + K + C)x = 0$,

Nous recherchons donc les zéros du polynôme caractéristique que nous notons

$$f(z) = \det(z^M + zK + C)$$

Pour calculer en séquence les zéros du polynôme, nous utilisons une technique de déflation.
Dès lors le polynôme considéré est :

où $\lambda_1, \dots, \lambda_k$ sont les k zéros déjà calculés.

L'utilisation de l'algorithme est immédiate, et nous profitons de cette adaptation pour le formuler de façon légèrement différente.

Notons f_i la valeur de la fonction à interpoler au point z_i lors de la recherche du $i^{\text{ème}}$ zéros.

Il est alors pratique, pour l'implémentation, de faire apparaître quelques quantités intermédiaires :

l'itéré l_{i+1} cherché étant solution de :

avec

On en déduit :

le signe du dénominateur étant pris de telle sorte que l_{i+1} (et donc h_{i+1}) soit de plus petit module possible
par suite

Pour converger vers les valeurs propres à partie imaginaire positive (et donc à fréquence positive), on prend

Remarque sur la déflation :

Lorsque les valeurs propres apparaissent par paires conjuguées, il faut également éliminer la conjuguée des valeurs propres trouvées et qui physiquement correspond à une fréquence négative

3.2.3.2 Coût de la méthode en terme de factorisation

A chaque itération de la méthode on fait :

Partie algèbre matricielle (évaluation du polynôme caractéristique)

- une combinaison linéaire de trois matrices $O(n^2)$
- une factorisation LDL^t de la matrice combinée $O(nb^2)$, b largeur de bande
- le produit des termes diagonaux divisé par la déflation $O(n)$

Partie méthode :

- les opérations de la méthode à proprement parlé $O(1)$

De plus il convient d'ajouter, en guise de prise en charge (puisque c'est une méthode à trois points) deux fois la partie évaluation du polynôme caractéristique.

Globalement cette méthode coûte $(i+2)$ factorisations, pour une solution calculée en i itérations.

Le coût de cette méthode est tel, qu'elle doit être réservée à des petits systèmes (cas de mise au point) ou lorsqu'il est important d'avoir une très grande précision sur la fréquence cherchée.

4 Méthodes d'itération inverse

La méthode d'itération inverse s'étend immédiatement au problème quadratique en utilisant sa forme "linéarisée".

La linéarisation du problème quadratique n'étant pas unique, il existe plusieurs variantes.

4.1 Méthode d'itération inverse proposée par Wilkinson

Wilkinson [WIL.65] propose de ramener le problème quadratique au problème standard suivant

En supposant M inversible, et en posant $y = \frac{x}{\lambda}$

Etant donné λ une approximation de la valeur propre cherchée, on peut définir le processus itératif suivant :

De l'équation matricielle, nous déduisons un système d'équations à deux inconnus (y_{s+1}, x_{s+1}) et par combinaison de ce système nous déduisons l'expression de y_{s+1} et de x_{s+1} .

4.2 Variante développée par Jennings

Lorsque M et/ou K sont singulières, on obtient une équation quadratique stable et équivalente en introduisant un paramètre auxiliaire θ pour un décalage spectral de $\theta \neq \lambda$.

En remplaçant λ par μ dans l'équation quadratique, on obtient le problème quadratique en μ :

En notant $D(\theta)$ la matrice dynamique qui est régulière par construction, on se ramène au problème standard tel qu'il est proposé par Wilkinson tout en posant $y = \frac{x}{\mu}$

Cette équation est stable dans le sens où θ pour θ strictement positif.

Ce procédé permet donc de "régulariser" les ordres de grandeurs des matrices M, C , et K à travers la matrice dynamique $D(\theta)$.

4.3 L'algorithme d'itération inverse d'Aster

4.3.1 Mise en œuvre

Cet algorithme est disponible dans Aster par l'opérateur `MODE_ITER_INV`.

Soit λ_0 une valeur approchée de la valeur propre cherchée, on construit la matrice dynamique $D(\lambda)$ que l'on factorise sous forme LDL^t .

On initialise le processus itératif par les vecteurs suivant :

$$x_0 = \{(1, 0)\}$$

$$y_0 = \lambda_0 x_0$$

le processus itératif pour obtenir le n-ième itéré :

- Normalisation de x_{n-1} et y_{n-1} pour éviter les débordements de capacité :

- Résolution de :

- Calcul de y_n à partir de x_n :

- Evaluation de λ_n :

Ce schéma peut se mettre sous la forme matricielle :

4.3.2 Critère d'arrêt

Nous utilisons un résultat simple [GOH.&al.86] relatif aux polynômes de matrices de la forme :

$$D(\lambda) = M \lambda^2 + C \lambda + K$$

Soit λ_0 une valeur propre de l'opérateur $D(\lambda)$ et x_0 un vecteur propre associé non nul vérifiant $D(\lambda_0)x_0 = 0$ alors nous avons l'égalité :

Le critère d'arrêt se fait sur la variation relative de λ_0

5 Méthode Lanczos appliquée au problème quadratique

Dans ce chapitre nous supposons les matrices M , C et K réelles symétriques, de sorte que le problème quadratique associé peut être réduit à une forme linéaire symétrique $Az = \lambda Bz$

où

M_R est une matrice régulière déduite de M qui coïncide avec M si cette dernière est régulière.

On cherche à développer une méthode préservant globalement l'arithmétique réelle de façon à obtenir un problème réduit réel.

5.1 Choix d'un problème à approcher

5.1.1 Forme inverse standard

On cherche une approximation des couples (λ, x) d'éléments propres du problème quadratique qui correspondent aux valeurs propres proches d'un décalage complexe $\lambda = \alpha + i\beta$ donné.

L'approximation de Galerkin du problème spectral d'un opérateur S dans un sous-espace de Krylov $K_m = \text{span}(r_0, Sr_0, \dots, S^{m-1}r_0)$ permet d'approcher les couples d'éléments propres de l'opérateur S correspondant aux valeurs propres de plus grands modules.

Le passage à la forme standard inverse après décalage spectral de σ du problème généralisé précédant, fournit le problème spectral :

$$(A - \sigma B)^{-1} B z = \lambda z$$

Ce problème admet les mêmes vecteurs propres que le problème généralisé et des valeurs propres liées à celles du problème généralisé par la relation :

Ainsi, une approximation de Galerkin du problème spectral de l'opérateur :

$$S = (A - \sigma B)^{-1} B$$

dans le sous espace de Krylov $K_m = \text{span}(r_0, Sr_0, \dots, S^{m-1}r_0)$ fournit l'approximation des couples d'éléments propres du problème quadratique cherchée.

5.1.2 Stratégies de décalage

L'opérateur S précédent étant complexe, il appelle de façon naturelle l'utilisation de l'arithmétique complexe. Il est néanmoins possible d'utiliser l'arithmétique réelle pour approcher les couples d'éléments propres auxquels on s'intéresse. Il suffit d'utiliser un opérateur réel de même vecteurs propres et dont les valeurs propres de plus grand module correspondent à celles du problème quadratique les plus proches de λ .

La technique de double décalage spectral par σ et ρ proposée par Francis dans le cadre de la méthode QR permet de construire un tel opérateur noté aussi S :

$$S = [(A - \sigma B)(A - \rho B)]^{-1} B = [AB^{-1}A - 2\rho A + (\rho^2 + \sigma^2)B]^{-1} B$$

L'inconvénient majeur de cette technique est le remplissage de la matrice $AB^{-1}A - 2A + I$ dans le cas où B n'est pas diagonale.

Parlett et Saad [PAR.SAA.87] proposent une alternative qui utilise la partie réelle ou la partie imaginaire de l'opérateur $(A - B)^{-1}B$:

$$\begin{aligned} S_+ &= \text{Re} [(A - B)^{-1}B] \\ S_- &= \text{Im} [(A - B)^{-1}B] \end{aligned}$$

dont les valeurs propres notées respectivement μ_+ et μ_- sont liées aux valeurs propres λ du problème quadratique par les relations :

μ_+ et μ_- réalisent le maximum de leur module au voisinage de μ et σ .

Cette approche préserve globalement l'arithmétique réelle et évite l'inconvénient de la technique de Francis, si le calcul d'un vecteur $S_{\pm} v$, où v est réel, est effectué en arithmétique complexe.

En notant que :

$$\begin{aligned} \text{Re} [(A - B)^{-1}B] &= [(A - B)^{-1} + (A - B)^{-1}] B \\ \text{Im} [(A - B)^{-1}B] &= [(A - B)^{-1} - (A - B)^{-1}] B \end{aligned}$$

Cette approche peut être interprétée comme une technique de double décalage somme, par opposition à l'approche du double décalage produit proposé par J-C.F. Francis.

5.2 Méthode d'approximation

Désormais S désignera l'un des opérateurs réels S_+ ou S_- , une de ses valeurs propres et P la matrice d'un pseudo-produit scalaire (c'est à dire une forme bilinéaire symétrique non nécessairement définie positive).

5.2.1 Problème approché et algorithme de Lanczos

Lorsque S est auto-adjoint pour le pseudo produit scalaire induit par P, c'est à dire

$$(u, Av)_P = (Au, v)_P \quad \forall u, v \in \mathbb{R}^{2n},$$

la méthode de Lanczos est utilisée pour générer une base du sous espace de Krylov K_m .

Le problème spectral est alors approché par projection P-orthogonal sur K_m et le problème réduit ainsi obtenu est représenté dans la base des vecteurs de Lanczos par une matrice tridiagonale réelle d'ordre m.

La méthode de Lanczos étendue aux pseudo-produits scalaires est définie par les formules de récurrence suivantes Cf [R5.01.01] :

- $r_0 = \text{arbitraire}$
- $\delta^0 = 0, \quad q_0 = 0$
- $\delta^1 = \text{Signe}((r_0, r_0)_P) \quad \beta^1 = 0$
- pour $j = 1, 2, \dots, m$
 - $\alpha_j = (q_j, S q_j)_P$
 - $\beta_j = S q_j - \alpha_j q_{j-1} - \beta_{j-1} q_{j-2}$
 - $\delta_{j+1} = \text{signe}((\beta_j, r_j)_P) \delta^j \beta_j$
 - $\alpha_{j+1} =$
 - $\beta_{j+1} =$

Si on note Q_m la matrice $2n \times m$ des vecteurs de Lanczos q_j ces formules s'écrivent sous la forme matricielle réelle suivante :

$$Q_m^T P Q_m = J_m = \text{diag}(\delta^1, \dots, \delta^m)$$

$$S Q_m - Q_m J_m T_m = \delta^{m+1} \beta^{m+1} r_m e_m^T \quad \text{avec } e_m^T = (0, \dots, 0, 1)$$

T_m la matrice tridiagonale réelle symétrique $m \times m$:

Le produit $J_m T_m$ est une matrice tridiagonale nonsymétrique dès que J_m n'est pas proportionnelle à l'identité.

Les deux relations matricielles précédentes permettent d'écrire :

$$Q_m^T P [S Q_m - Q_m J_m T_m] = 0$$

L'application de cette relation à un couple $(\mu^{(m)}, s^{(m)}) \in IC \times IC^m$ d'éléments propres de l'opérateur représenté par la matrice $J_m T_m$ donne :

$$Q_m^T P [S Q_m s^{(m)} - \mu^{(m)} Q_m s^{(m)}] = 0$$

qui caractérise le couple $(\mu^{(m)}, z^{(m)} = Q_m s^{(m)}) \in IC \times IC^{2n}$ comme approximation de Galerkin par projection P-orthogonale sur K_m d'un couple d'élément propre de l'opérateur S .

5.2.2 Choix d'un pseudo produit scalaire

La symétrie des matrices A et B assure

que les formes bilinéaires associées aux matrices $\text{Re}[(A - B)^{-1}]^{-1}$, $\text{Im}[(A - B)^{-1}]^{-1}$ et B sont des pseudo-produit scalaire, que l'opérateur partie réelle S_+ (respectivement partie imaginaire S_-) est autoadjoint pour le pseudo-produit scalaire induit par $\text{Re}[(A - B)^{-1}]^{-1}$ ou par B (respectivement par $\text{Im}[(A - B)^{-1}]^{-1}$ ou par B).

Les pseudo-produits scalaire induits par $\text{Re}[(A - B)^{-1}]^{-1}$ et $\text{Im}[(A - B)^{-1}]^{-1}$ sont des extensions du produit scalaire utilisé dans la variante de Pipano-Neuman de l'algorithme de Lanczos.

Dans le cas où la matrice M est singulière, le pseudo produit scalaire induit par B fait des vecteurs

où $y \in \text{Ker } M$, des vecteurs quasi-nuls. Cet inconvénient existe aussi dans le cas des pseudo-produits scalaires de type Pipano-Neuman (notamment si la matrice du pseudo-produit scalaire admet des valeurs propres de somme nulle), mais l'occurrence d'un tel événement est rare dans la pratique.

5.3 Application au Problème quadratique

L'utilisation de cette approche demande, à la méthode de Lanczos, le calcul des vecteurs réels Sz et Pz pour $z \in \mathbb{R}^{2n}$.

5.3.1 Opérateur spectral

Soit la matrice dynamique $D(\sigma)$ associée au décalage spectral $\sigma = \rho + i\theta$ définie par:

$$D(\sigma) = \frac{1}{\sigma} M + \frac{1}{\sigma} C + K$$

Si $D(\sigma)$ est régulière alors l'opérateur complexe $(A - B)^{-1}B$ peut s'écrire sous la forme

Le calcul de Sz pour $S = \text{Re}[(A - B)^{-1}B]$ et $S = \text{Im}[(A - B)^{-1}B]$ peut être effectué sans détruire la structure creuse des matrices si l'arithmétique complexe est partiellement utilisée dans l'algorithme :

- Préparation en arithmétique complexe
 - former $D(\sigma) = \frac{1}{\sigma} M + \frac{1}{\sigma} C + K$
 - factoriser $D(\sigma)$ sous la forme LDL^T
- Calcul de Sz
 - $u_1 = Cx$ $u_2 = Mx$ $u_3 = My$ dans IR
 - $u_4 = D(\sigma)^{-1} u_1 + u_2 + u_3$ dans IC
 - suivant le choix de l'opérateur on obtient :

$$S_+ z = \text{Re}[(A - B)^{-1}B] z =$$

$$S_- z = \text{Im}[(A - B)^{-1}B] z =$$

5.3.2 Opérateur de pseudo produit scalaire

Choix $P = B$

- Ce choix est valable pour les opérateurs obtenus en approche partie réelle ou partie imaginaire.
Les calculs peuvent être menés sans assemblage de B et en arithmétique réelle.

Choix $P = \operatorname{Re} [(A - B)^{-1}]^{-1}$
 σ

- Ce choix correspond à l'approche en partie réelle de l'opérateur S .
Si la matrice dynamique $D(\cdot)$, où \cdot est la partie réelle de \cdot est régulière alors l'opérateur réel $(A - B)^{-1}B$ est défini par : $\rho \quad \rho \quad \sigma$,
 ρ

et le pseudo-produit scalaire s'écrit:

$$\operatorname{Re} [(A - B)^{-1}]^{-1} = (A - B) + \frac{2}{\theta} B (A - B)^{-1} B$$

Dès lors le calcul de Pz peut s'effectuer comme celui de Sz en utilisant exclusivement l'arithmétique réelle.

Cette approche nécessite l'emploi d'une matrice réelle auxiliaire pour stocker la factorisée de la matrice dynamique $D(\cdot)$.

Choix $P = \operatorname{Im} [(A - B)^{-1}]^{-1}$
 σ

- Ce choix correspond à l'approche en partie imaginaire de l'opérateur S .
Formellement nous avons:

$$\operatorname{Im} [(A - B)^{-1}]^{-1} = [(A - B)B^{-1} (A - B) + \frac{2}{\theta} B B^{-1} B]$$

La matrice B est régulière sous la condition nécessaire et suffisante que M le soit et

On obtient alors :

$$\operatorname{Im} [(A - B)^{-1}]^{-1}$$

Si M est singulière, on peut établir cette égalité en définissant une pseudo-inverse de B par

Le calcul de Pz peut alors s'effectuer sans assembler explicitement la matrice P et en utilisant exclusivement l'arithmétique réelle.

5.3.3 Coût de la phase Lanczos

Le coût mémoire correspond à l'allocation de vecteurs supplémentaires (3 réels et 1 complexe ou réel) et à l'allocation des matrices dynamiques utilisées pour le calcul des opérateurs S et P.
Le tableau suivant résume ces allocations

		= 0	= IR*	= i i IR	= i IC
Approche partie réelle	S	$\tilde{K} \in \mathbb{R}^{n \times n}$	$\tilde{D}(\rho) \in \mathbb{R}^{n \times n}$	$\tilde{D}(\rho)^0 \in \mathbb{C}^{n \times n}$	$\tilde{D}(\rho)^+ \in \mathbb{C}^{n \times n}$
	P = B	$\in -$	$\rho \in -$	$\sigma \in -$	$\sigma \in -$
	P = Re (A ⁻¹) ⁻¹	-	-	K $\in \mathbb{R}^{n \times n}$	D() $\in \mathbb{R}^{n \times n}$
Approche partie Imaginaire	S _{σ}			D(ϵ) $\in \mathbb{C}^{n \times n}$	D(ρ) $\in \mathbb{C}^{n \times n}$
	P = B			$\sigma \in -$	$\sigma \in -$
	P = Im(A ⁻¹) ⁻¹ _{σ}			-	-

Le coût en opération se divise en un coup fixe et un coup dépendant du nombre de vecteur de Lanczos à calculer.

Le coût fixe correspond à la factorisation LDL^T des matrices supplémentaires (effectuée dans l'arithmétique associée) et vaut O(b²n) si b est la largeur de bande commune aux matrices M, C et K.

Le calcul d'un vecteur de Lanczos demande :

- 2 produits scalaires de vecteur de IR²ⁿ : 2 O(2n)
- 1 combinaison linéaire de 3 vecteurs de IR²ⁿ : 3 O(2n)
- le calcul de Sz :
- 3 produits matrice-vecteur dans IRⁿ : 3 O(2bn)
- 1 combinaison linéaire de 3 vecteurs dans ICⁿ : 3 O(2n)
- 1 descente-remontée dans ICⁿ : O(2bn)
- 1 produit scalaire -vecteur dans ICⁿ : O(n).

Le calcul de Pz

- Pour P = B :
 - 3 produits matrice-vecteur dans IRⁿ : O(2bn)
- Pour P = Re (A⁻¹)⁻¹:
 - 5 produits matrice-vecteur dans IRⁿ : 5 O(2bn)
 - 2 combinaisons linéaire de 3 vecteurs de IRⁿ : 6 O(n)
 - 1 descente remontée dans IRⁿ : O(2bn)
 - 1 combinaisons linéaires de 5 vecteurs de IRⁿ : 5 O(n)
- Pour P = Im (A⁻¹)⁻¹:
 - 6 produits matrice-vecteur dans IRⁿ : 6 O(2bn)
 - 2 combinaisons linéaires de 4 vecteurs de IRⁿ : 8 O(n)

Globalement le cout de la phase Lanczos est en O(b²n) + 10 m O(2bn).

5.4 Mise en œuvre dans Aster

Les matrices M et C sont symétriques semi-définies positives et la matrice K est symétrique régulière indéfinie. Le pseudo produit scalaire retenue correspond à l'extension de celui proposé par Neuman et Pipano [R5.01.01].

Cet algorithme est disponible dans Aster par l'opérateur MODE_ITER_SIMULT.

5.4.1 Paramètres de la mise en œuvre

Le problème spectral à opérateur réel est paramétré par :

- valeur du décalage spectral IC ,
- le choix de $\text{Re}(A^{-1}B)$ ou de $\text{Im}(A^{-1}B)$
- σ

Le pseudo produit scalaire est alors $\text{Re}(A^{-1})^{-1}$ ou $\text{Im}(A^{-1})^{-1}$ et les allocations et factorisations des matrices supplémentaires sont effectuées à minima en type et nombre, ceci en accord avec le tableau du paragraphe [§5.3.3].

5.4.2 Sous espace d'approximation

Le vecteur $r_0 \in \mathbb{R}^{2n}$ engendrant le sous espace d'approximation se décompose en $r_0 = r_0^R + i r_0^I$ où $r_0^R, r_0^I \in \mathbb{R}^n$; le choix retenu consiste à poser $r_0^I = 0$ et à tirer aléatoirement les composantes de r_0^R , tout en lui imposant des composantes nulles dans $\ker M$.

Si la dimension du sous espace n'est pas précisée, elle est calculée par la formule empirique :

$$m = 2 \text{ Min} (\text{Max} (p+7), 2p, n)$$

où p est le nombre de couples d'éléments propres à approcher.
la dimension du sous-espace d'approximation sont doublées car les couples d'éléments propres complexes se présentent par paires conjuguées.

5.4.3 Stratégie de réorthogonalisation

L'utilisation de l'arithmétique à précision finie, détériore les propriétés d'orthogonalité des vecteurs de Lanczos et avec elles le taux de convergence des couples approchés.

La stratégie de réorthogonalisation complète assure l'orthogonalité de tous les vecteurs de Lanczos, et l'algorithme a alors un comportement proche de celui en arithmétique exacte.

Cette stratégie de réorthogonalisation impose de conserver les vecteurs P_j $j = 1, \dots, m$.

La réorthogonalisation des vecteurs est effectuée par le procédé de Gram-Schmid modifié cf. [R5.01.01].

5.4.4 Implémentation de la phase Lanczos

L'implémentation choisie est celle décrite dans [R5.01.01] dans le cadre du problème généralisé.

Elle se résume par :

Entrées :

- les matrices P et S : c'est à dire les matrices M , C et K et la factorisée LDL^T des matrices dynamiques supplémentaires.
- m le nombre de vecteurs à générer,
- r_0 le vecteur engendrant le sous espace de Krylov,
- la précision d'orthogonalisation et le nombre maximale de réorthogonalisation autorisée.
-

Sorties :

- les vecteurs de Lanczos (q_1, q_2, \dots, q_m),
- la diagonale ($\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m$) et la sur-diagonale ($\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m$) de la matrice tridiagonale T_m
- le vecteur ($\delta_1, \delta_2, \dots, \delta_m$) des pseudo produits scalaires des vecteurs de Lanczos.

Algorithme :

- Génération du premier vecteur q_1 et des coefficients α_1, β_1 et δ_1
- Boucle de génération de q_j, α_j, β_j et δ_j pour $J = 2, \dots, m$
- Pour $j = 2, 3, \dots, m$ faire
 - Calcul de la direction de q_j
 - Normalisation de q_j , calcul de α_j et stockage de Pq_j
 - Réorthogonalisation si nécessaire par rapport à q_i pour $i = 1, \dots, j-1$
 - Réactualisation de q_j, α_j, β_j et δ_j en cas de réorthogonalisation,
 - Calcul de α_j et β_j

5.4.5 Restoration des approximations pour le problème quadratique

Les approximations des couples propres du problème quadratique se déduisent des couples propres de la matrice $J_m T_m$ par :

- extraction de la partie "haute" du vecteur.
- choix de , racine de l'équation du second degré liant à qui vérifie la condition de
- couplage $M [O_n] Q_m = M$

6 Bibliographie

- [1] [CUL.WIL.85] J.K.CULLUM & R.A.WILLOUGHBY, Lanczos algorithms for large symmetric eigenvalue computations - VOL1 Theory, Birkhäuser, 1985.
- [2] [GOH.al.86.] I. GOHBERG, P. LANCASTER & L. RODMAN, Quadratic matrix polynomials with a parameter, Advances in applied mathematics 7, pp253-281, 1986.
- [3] [JEN.77] A.JENNINGS, Matrix computation for engineers and scientists, John Wiley & Sons, 1977.
- [4] [MEI.67] L. MEIROVITCH, Analytical methods in vibrations, The MacMillan Co. N.Y., 1967.
- [5] [MUL.56] D.E. MULLER, A method for solving algebraic equations using an automatic computer, Math. Tab. Wash. Vol 10, pp 208-215, 1956.
- [6] [PAR. SAA.87] B.N. PARLETT & Y. SAAD, Complex shift and invert strategies for real matrices, Linear algebra and its applications N°88/89, pp575-595, 1987.
- [7] [ROS. 84] M. ROSEAU, Vibrations des systèmes mécaniques, méthodes analytiques et applications, Masson, 1984.
- [8] [WIL.65] J.H.WILKINSON, The algebraic eigenvalue problem, Oxford University Press, London 1965.
- [9] [R5.01.01] D. SELIGMANN - Algorithmes de résolution pour le problème généralisé aux valeurs propres. Note EDF- HI-75/7815 - Documentation Aster [R5.01.01].

Annexe 1 Interprétation des valeurs propres complexes

Dans le cas d'un amortissement symétrique et en absence d'amortissement interne, des relations d'orthogonalités et du fait que les éléments propres apparaissent par paires conjuguées, on a les relations suivantes:

Si l'on note λ_i , on peut alors définir :

et l'on peut écrire la valeur propre complexe sous la forme suivante :

pour laquelle on peut donner une interprétation physique de la valeur propre

La partie imaginaire représente la partie oscillatoire de la solution
est la pulsation du i -ème mode
le terme réel représente le caractère dissipatif du système
est l'amortissement du i -ème mode,
est l'amortissement réduit du i -ème mode.

Interprétation physique des vecteurs propres :

- La signification physique de l'existence d'un vecteur propre complexe, réside dans le fait que si la structure vibre sur un mode propre, ses différents degrés de liberté ne vibrent pas avec la même phase les uns par rapport aux autres.
- Les ventres et les noeuds modaux ne correspondent pas des points stationnaires, mais se déplacent au cours du mouvement.

Remarques :

- on retrouve la formulation classique des systèmes amortis à 1 degré de liberté
- sont réels et sont bien des quantités intrinsèque à un mode (quantités modales) et dépendante de la normalisation du mode.
Nous rappelons que les modes du problème quadratique ne diagonalisent pas les matrices M, K et C.

Remarque sur le terme réel de la valeur propre :

- Si la partie réelle de la valeur propre est négative, alors le mode propre est un mouvement périodique amorti de pulsation
- Si la partie réelle de la valeur propre est positive, alors le mode propre est un mouvement périodique d'amplitude croissante et donc instable.

Annexe 2 Réductions linéaires

forme	problème
quadratique	
généralisé (1)	
généralisé (2)	
standard (1)	
standard (2)	

Remarque : pour obtenir les formes standards il faut supposer :

- M et K régulières pour la forme (1)
- M régulière pour la forme (2)
-