

CONSTRUCTION D'APPROXIMATIONS GROSSIÈRES POUR UN PROBLÈME DE SCHRÖDINGER À COEFFICIENTS HAUTEMENT OSCILLANTS

Simon Ruget^{1,2,3}, Frédéric Legoll^{1,2} & Claude Le Bris^{1,3}

¹ *Inria Paris, équipe MATHERIALS, Paris, France*

² *École des Ponts ParisTech, Laboratoire Navier, Marne-la-Vallée, France.*

³ *École des Ponts ParisTech, CERMICS, Marne-la-Vallée, France.*

Contact : *simon.ruget@enpc.fr, frederic.legoll@enpc.fr, claude.le-bris@enpc.fr*

Résumé. Cet exposé aborde la thématique des problèmes inverses dans un cadre multiéchelle. Pour un problème donné, on se propose de reconstruire certaines grandeurs caractéristiques du point de vue de l'homogénéisation (coefficient homogénéisé, correcteur, etc.) à partir de la connaissance des solutions du-dit problème. Notre méthode s'affranchit des hypothèses classiques de l'homogénéisation qui peuvent être restrictives en pratique (la périodicité par exemple), et est valide dans des cas plus généraux, y compris en dehors du cas limite où les échelles sont très séparées. Dans un premier temps, on justifiera théoriquement cette méthode, puis nous l'illustrerons avec des résultats numériques.

Mots-clés. Problème Inverse, Homogénéisation, Approximations Grossières

1 Positionnement du problème

Cet exposé aborde la thématique des problèmes inverses dans un cadre multiéchelle. Considérons l'équation de Schrödinger suivante :

$$-\Delta u_\varepsilon + \mathcal{V}_\varepsilon u_\varepsilon = f \quad \text{dans } \Omega, \quad u_\varepsilon = 0 \quad \text{sur } \partial\Omega, \quad (1)$$

avec un potentiel hautement oscillant $\mathcal{V}_\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon}V\left(\frac{\cdot}{\varepsilon}\right)$ (dérivant d'un potentiel originel V) c'est à dire un potentiel dont la distance caractéristique d'évolution est petite.

Dans le cas où ce potentiel V est périodique et à moyenne nulle, la théorie de l'homogénéisation (voir Bensoussan-Lions-Papanicolaou (1978)) indique que la limite homogénéisée du problème (1) est encore une équation de Schrödinger :

$$-\Delta u_\star + V_\star u_\star = f \quad \text{dans } \Omega, \quad u_\star = 0 \quad \text{sur } \partial\Omega, \quad (2)$$

avec un potentiel homogénéisé V_\star constant, qui peut se calculer en fonction du potentiel périodique du problème de départ et d'un correcteur (comme il est classique en homogénéisation).

Au cours de cet exposé, notre objectif est de développer une méthode, utilisant des solutions du problème oscillant (1) pour plusieurs seconds membres, afin de définir le potentiel effectif constant permettant d’approcher au mieux le problème oscillant. Cette méthodologie est inspirée du résultat d’homogénéisation ci-dessus, ainsi que de résultats préliminaires (voir Le Bris-Legoll-Li (2013)). Il s’agit de calculer une approximation de V_\star sans utiliser les ingrédients classiques de l’homogénéisation (qui repose souvent sur des hypothèses géométriques sur le potentiel, comme la périodicité) qui peuvent être restrictives en pratique. Du fait que la stratégie ainsi développée ne fasse pas appel aux outils usuels de l’homogénéisation, nous montrerons qu’elle possède un champ d’applications très large.

Notre approche, qui est donc reliée à la problématique des problèmes inverses en présence d’échelles multiples, se traduit sous la forme d’un problème d’optimisation (voir section 2). Les liens entre le meilleur potentiel effectif constant obtenu par notre approche et le potentiel homogénéisé V_\star sont étudiés (voir section 3). Nous présentons également une démarche permettant, une fois une bonne approximation de V_\star calculée, de récupérer une bonne approximation du correcteur. Notre présentation sera illustrée par des résultats numériques (voir section 4).

Des nombreuses extensions de ces travaux (non abordées dans cet exposé) sont envisageables : question de sensibilité aux données, choix des espaces d’approximations pour les grandeurs considérées, reconstruction du potentiel oscillant $\mathcal{V}_\varepsilon, \dots$

2 Un algorithme d’optimisation

Notre approche se traduit sous la forme de problèmes d’optimisation.

Dans un premier temps, on cherche à obtenir une description du système à l’échelle *macroscopique* via la reconstruction d’un potentiel effectif constant \bar{V} . Le système est ainsi correctement décrit (i.e. au sens L^2) au travers des solutions \bar{u} du problème de Schrödinger associé au potentiel \bar{V} . Pour définir ce potentiel, l’idée consiste à considérer l’erreur maximale liée à l’approximation des solutions u_ε du problème (1) par les solutions \bar{u} du problème de Schrödinger associé au potentiel \bar{V} . On veut **minimiser** ce **scénario du pire des cas** vis à vis du potentiel \bar{V} . On en déduit la formulation suivante :

$$\inf_{\bar{V} \in \mathbb{R}} \sup_{f \in L_n^2(\Omega)} \|u_\varepsilon(f) - \bar{u}(f)\|_{L^2(\Omega)}^2, \quad (3)$$

où $L_n^2(\Omega) = \{f \in L^2(\Omega), \|f\|_{L^2(\Omega)} = 1\}$, et où $\bar{u}(f)$ est la solution de Schrödinger pour un potentiel constant \bar{V} :

$$-\Delta \bar{u} + \bar{V} \bar{u} = f \quad \text{dans } \Omega, \quad \bar{u} = 0 \quad \text{sur } \partial\Omega. \quad (4)$$

Inspiré par Le Bris-Legoll-Lemaire (2018), la fonction de coût est en réalité légèrement modifiée afin d’obtenir **un problème quadratique** en \bar{V} , et ainsi de faciliter

l'implémentation numérique. On applique en effet l'opérateur d'ordre 0 $(-\Delta)^{-1}(-\Delta + \bar{V})$ à la différence $u_\varepsilon(f) - \bar{u}(f)$, et on s'intéresse donc en pratique au problème (6) ci-dessous.

Dans un second temps, on peut chercher à définir un terme d'ordre 1 en ε permettant de *corriger* les solutions \bar{u} , afin de proposer une description plus fine du système, c'est à dire proche de u_ε en norme H^1 . Pour se faire, on s'inspire du résultat d'homogénéisation suivant (dans le cadre périodique) : il existe un correcteur w tel que les solutions $u_\varepsilon(f)$ sont bien approximées en norme H^1 par la solution corrigée :

$$u_{\varepsilon,1}(f) = u_\star(f) (1 + \varepsilon w(\varepsilon^{-1}\cdot)).$$

L'étude du gradient de cette approximation suggère de considérer le problème (5) dans le but de définir notre terme correcteur:

$$\inf_{C \in (L^\infty(\Omega))^2} \sup_{f \in L_n^2(\Omega)} \|\nabla u_\varepsilon(f) - \nabla \bar{u}(f) - \bar{u}(f)C\|_{L^2(\Omega)}^2. \quad (5)$$

Nous noterons \bar{C}_ε le minimiseur de (5).

3 Un résultat de consistance

Le résultat de consistance suivant justifie notre méthode :

Proposition 1 (Consistance asymptotique, cas périodique) *Considérons le problème*

$$I_\varepsilon = \inf_{\bar{V} \in \mathbb{R}} \sup_{f \in L_n^2(\Omega)} \left\| (-\Delta)^{-1}(-\Delta + \bar{V})(u_\varepsilon(f) - \bar{u}(f)) \right\|_{L^2(\Omega)}^2. \quad (6)$$

Sous les hypothèses classiques d'homogénéisation pour (1), on a $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} I_\varepsilon = 0$.

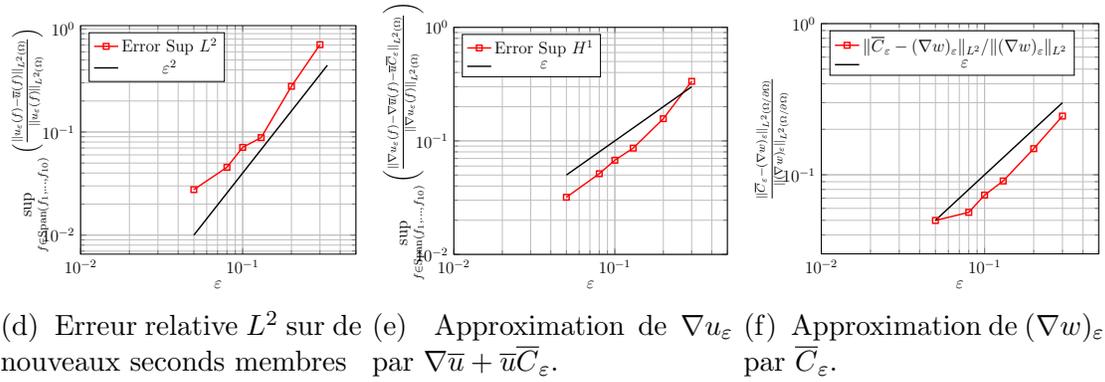
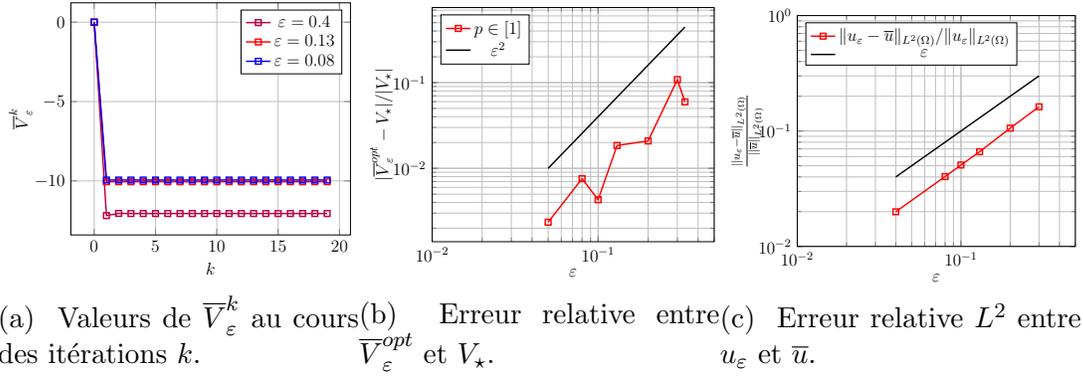
Pour $\varepsilon > 0$ fixé et suffisamment petit, il existe un unique minimiseur $\bar{V}_\varepsilon^{opt} \in \mathbb{R}$. On a de plus la convergence suivante $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \bar{V}_\varepsilon^{opt} = V_\star$.

En pratique, il ne sera pas possible d'optimiser sur tous les seconds membres dans $L_n^2(\Omega)$ dans (6). Dans nos expérimentations numériques, nous réaliserons une approximation de ce supremum par un maximum sur un ensemble de seconds membres bien choisis.

4 Résultats numériques

Notre méthodologie a été mise en oeuvre sur un cas test en dimension 2.

Concernant la reconstruction des grandeurs macroscopiques (i.e. le potentiel homogénéisé, et les solutions associées), l'algorithme s'est avéré avoir des performances très satisfaisantes en terme de coût de calculs (voir figure 1a) et de précision (voir figures 1b



et 1c). De plus, la versatilité de notre stratégie peut se lire dans la figure 1d. On y voit en effet qu'on parvient à définir un potentiel effectif satisfaisant (i.e. générant des taux d'erreur de l'ordre de la dizaine de pourcents pour un critère pertinent) y compris en dehors du régime de l'homogénéisation.

Concernant la reconstruction du terme correcteur, les résultats numériques sont également satisfaisants (voir figures 1e et 1f). L'étude des résultats montre en effet que la correction est optimale puisque les taux d'erreur sont exactement ceux de l'erreur de troncature du développement à deux échelles.

Bibliographie

- Bensoussan, A. et Lions, J.-L. et Papanicolaou, G. (1978), *Asymptotic analysis for periodic structures*, 374, American Mathematical Society.
- Le Bris, C. et Legoll, F. et Li, K. (2013), Approximation grossière d'un problème elliptique à coefficients hautement oscillants, *Comptes Rendus Mathématique*, 351, pp. 265-270.
- Le Bris, C. et Legoll, F. et Lemaire, S (2018), On the best constant matrix approximating an oscillatory matrix-valued coefficient in divergence-form operators, *ESAIM: Control, Optimisation and Calculus of Variations*, 24, pp. 1345-1380.