

Une méthode multipôle rapide pour l'équation de Laplace 3D

Sujet proposé par Éric Darrigrand

Sébastien Giraud et Vincent Pit

4 mai 2004

Ce séminaire concerne un aspect particulier de la résolution numérique de l'équation intégrale associée au problème de Laplace à l'extérieur d'un domaine borné tridimensionnel. On s'intéresse plus précisément à une méthode multipôle rapide à un niveau dont le but est de réduire les coûts en temps de calcul et en place mémoire de la résolution numérique. Ce travail s'appuie sur le rapport de stage de DEA d'Éric Darrigrand [2].

Tout d'abord, nous introduirons une formulation intégrale équivalente au problème et un découpage du domaine pour permettre la discrétisation. Cette première étape permettra de bien définir les motivations de la méthode multipôle. Nous nous intéresserons ensuite à la description théorique de la méthode. Enfin, nous aborderons le choix des paramètres et la complexité du nouvel algorithme.

1 Présentation du problème

1.1 Position du problème et formulation intégrale

Soient Ω un ouvert de \mathbb{R}^3 et Γ la frontière de Ω . On s'intéresse à la résolution du problème suivant :

$$\begin{cases} \Delta u = 0 & \text{dans } \Omega \\ \Delta u = 0 & \text{dans } \Omega^c \\ u|_{\Gamma} = u_0. \end{cases} \quad \Omega^c \quad \begin{array}{c} \Gamma \\ \Omega \\ \vec{n} \end{array} \quad (1)$$

La solution de (1) est donnée par :

$$u(x) = \frac{1}{4\pi} \int_{\Gamma} \frac{q(y)}{|x-y|} d\gamma(y), \quad \forall x \in \mathbb{R}^3 \quad (2)$$

où $q = \frac{\partial u}{\partial n} \Big|_{\text{int}\Omega} - \frac{\partial u}{\partial n} \Big|_{\text{ext}\Omega}$ avec $\frac{\partial u}{\partial n} = \overrightarrow{\text{grad}} u \cdot \vec{n}$.

Ainsi, $u(x)$ apparaît comme une moyenne de $q(y)$ sur Γ pondérée par $\frac{1}{|x-y|}$, l'interaction entre x et $y \in \Gamma$. Il s'agit alors de déterminer q sur Γ , c'est-à-dire de résoudre un problème dans un domaine surfacique et borné.

1.2 Discrétisation du problème

Soit \mathcal{E} l'espace de fonctions associé à la formulation intégrale choisie. On muni cette espace du produit de dualité :

$$\langle f, g \rangle = \int_{\Gamma} \overline{f(x)} g(x) d\gamma(x),$$

pour $f \in \mathcal{E}'$ et $g \in \mathcal{E}$ où \mathcal{E}' est le dual de \mathcal{E} . On considère l'application $\mathcal{L}_0^\gamma : \mathcal{E}' \longrightarrow \mathcal{E}$,
 $q \mapsto \left(\begin{array}{l} \Gamma \rightarrow \mathbb{R} \\ x \mapsto \frac{1}{4\pi} \int_{\Gamma} \frac{q(y)}{|x-y|} d\gamma(y) \end{array} \right)$.

Le problème (1) est alors équivalent à la détermination de q telle que

$$\forall q' \in \mathcal{E}' \quad \langle q', \mathcal{L}_0^\gamma q \rangle = \langle q', u_0 \rangle. \quad (3)$$

Soit V_h un sous espace de dimension finie de \mathcal{E}' . On approche le problème (3) par la recherche de $q_h \in V_h$ telle que $\forall q'_h \in V_h \quad \langle q'_h, \mathcal{L}_0^\gamma q_h \rangle = \langle q'_h, u_0 \rangle$, c'est-à-dire

$$\forall q'_h \in V_h \quad \frac{1}{4\pi} \int_{\Gamma} \int_{\Gamma} \frac{q'_h(x) q_h(y)}{|x-y|} d\gamma(y) d\gamma(x) = \int_{\Gamma} u_0(x) q'_h(x) d\gamma(x).$$

Il nous reste maintenant à choisir V_h . Pour cela on considère un découpage de Γ en N triangles $(T_j)_{j=1, \dots, N}$ et on se place dans le cas où V_h est l'espace de dimension N des fonctions constantes sur chaque triangle, et dont une base est $\{\varphi_i\}_{i=1, \dots, N}$ avec $\varphi_i|_{T_j} = \delta_{ij}$. On écrit

alors $q_h = \sum_{j=1}^N \alpha_j \varphi_j$ et on cherche $(\alpha_j)_{j=1, \dots, N}$ tel que $\forall i = 1, \dots, N \quad \langle \varphi_i, \mathcal{L}_0^\gamma q_h \rangle = \langle \varphi_i, u_0 \rangle$, c'est-à-dire

$$\forall i = 1, \dots, N \quad \sum_{j=1}^N \alpha_j \langle \varphi_i, \mathcal{L}_0^\gamma \varphi_j \rangle = \langle \varphi_i, u_0 \rangle.$$

En posant

$$A_h = (\langle \varphi_i, \mathcal{L}_0^\gamma \varphi_j \rangle)_{i,j}, \quad B = (\langle \varphi_i, u_0 \rangle)_{i=1 \dots N} \quad \text{et} \quad X = (\alpha_j)_{j=1 \dots N},$$

le problème se ramène à la résolution du système $A_h X = B$. On résout ce système par une méthode itérative dont le coût de calcul et le coût mémoire proviennent du calcul des produits matrice-vecteur avec la matrice A_h . On s'intéresse alors à la méthode multipôle rapide qui accélère les produits matrice-vecteur et permet d'éviter le stockage de A_h .

1.3 Traitement des intégrales

Le problème consiste à calculer, pour un vecteur Y donné, le vecteur $\Phi = A_h Y$ dont les coordonnées sont

$$\Phi_i = \frac{1}{4\pi} \sum_{j=1}^N Y_j \int_{T_i} \int_{T_j} \frac{d\gamma(x) d\gamma(y)}{|x-y|} \quad \forall i = 1 \dots N. \quad (4)$$

On approche les intégrales par une méthode de Gauss. Soient M le nombre de points de Gauss et $(\omega_\beta)_{\beta=1 \dots M}$ les poids de Gauss tels que $\sum_{\beta=1}^M \omega_\beta = 1$. On note $x_{i,\beta}$ les points de Gauss du triangle T_i .

On a alors

$$\int_{T_i} \int_{T_j} \frac{d\gamma(x) d\gamma(y)}{|x-y|} \approx \text{mes}(T_i) \text{mes}(T_j) \sum_{\beta=1}^M \sum_{\beta'=1}^M \frac{\omega_\beta \omega_{\beta'}}{|x_{i,\beta} - x_{j,\beta'}|},$$

où $mes(T_i)$ désigne l'aire de T_i .

On se ramène donc au calcul, pour un vecteur Y donné, de

$$\Phi_i = \frac{mes(T_i)}{4\pi} \sum_{j=1}^N Y_j mes(T_j) \sum_{\beta=1}^M \sum_{\beta'=1}^M \frac{\omega_\beta \omega_{\beta'}}{|x_{i,\beta} - x_{j,\beta'}|} \quad \forall i = 1 \dots N. \quad (5)$$

2 Une méthode multipôle rapide

2.1 Motivation

Le calcul des produits $A_h Y$ nécessite a priori d'avoir en mémoire la matrice A_h de taille $N \times N$ et un coup de calcul en $\mathcal{O}(N^2)$. Si la précision souhaitée est importante, N peut devenir grand, typiquement de l'ordre de 100 000 soit un coût de calcul de l'ordre de 10^{10} !

L'idée de la méthode multipôle rapide est donc de développer les calculs du produit matrice-vecteur $A_h Y$ et de recalculer ses coefficients après avoir effectué un regroupement judicieux des termes de manière à réduire la complexité. Cette méthode a été initiée par GREENGARD-ROKHLIN [4] dans le cas de l'équation de Laplace. Dans le cadre de notre étude, nous considérons le développement multipolaire tel qu'il est décrit dans l'article EPTON-DEMBART [3].

Supposons par exemple que l'on puisse écrire la matrice A_h sous la forme $(A_h)_{i,j} = \alpha_i \beta_j$ avec $\{\alpha_i\}_{i=1,\dots,N}$ et $\{\beta_j\}_{j=1,\dots,N}$ réels. On peut alors réécrire le produit $A_h Y$:

$$(A_h Y)_i = \sum_{j=1}^N \alpha_i \beta_j Y_j = \alpha_i \left(\sum_{j=1}^N \beta_j Y_j \right).$$

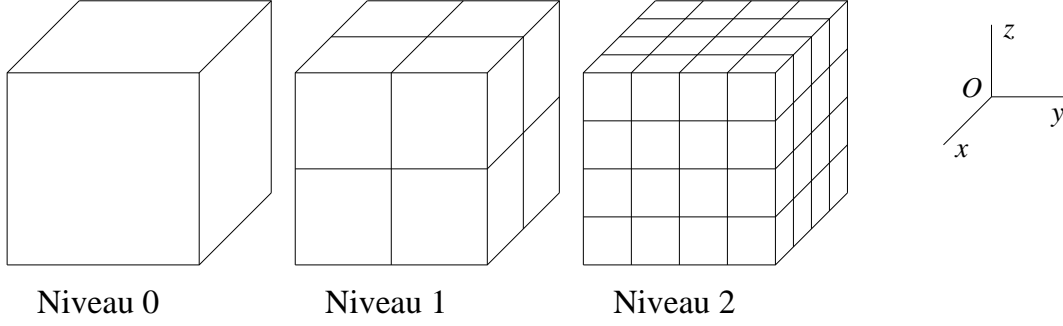
La complexité du produit $A_h Y$ devient alors un $\mathcal{O}(N)$ au lieu de $\mathcal{O}(N^2)$. De manière plus générale, si on écrit $(A_h)_{i,j}$ sous la forme $(A_h)_{i,j} = \sum_{l=1}^L \alpha_{i,l} \beta_{j,l}$, on obtient une complexité en $\mathcal{O}(NL)$, ce qui constitue une amélioration si L est petit devant N , par exemple $L = \mathcal{O}(\ln(N))$. L'algorithme de la méthode multipôle rapide proposé ici permet quant à lui de réduire la complexité à $\mathcal{O}(N^{4/3})$.

2.2 Découpage du domaine

On considère un cube \mathcal{C} contenant Ω et une subdivision de ce cube en K' boîtes $(\mathcal{C}_m)_{m=1\dots K'}$. On dit alors qu'un triangle T_i appartient à la boîte \mathcal{C}_m si son centre de gravité appartient à \mathcal{C}_m . On note \mathcal{B} l'ensemble des boîtes contenant au moins un triangle.

La construction des cubes se fait par récurrence :

- On construit un cube de niveau 0 dont les faces sont parallèles aux plans (Oxy) , (Oxz) et (Oyz) et qui contient le domaine Ω . Tous les triangles sont associés à ce cube.
- Supposons construit le niveau niv . On subdivise chaque cube \mathcal{C} du niveau niv en 8 cubes fils identiques. Les triangles associés à \mathcal{C} sont distribués à ses fils et on élimine les cubes sans élément.



La sélection, la numérotation et l'attribution des éléments s'effectuent au fur et à mesure : on obtient un coût en $\mathcal{O}(N)$ pour chaque niveau, soit au total en $\mathcal{O}(N \times nivmax)$ où $nivmax$ est le niveau final de construction. Sur les $K' = 8^{nivmax}$ cubes subdivisant le cube de niveau 0, le nombre de boîtes contenant au moins un triangle, i.e. $\text{card}(\mathcal{B})$, est donné par la relation :

$$K = \text{card}(\mathcal{B}) = \mathcal{O}(K'^{2/3}).$$

2.3 Développement du potentiel

La méthode multipôle repose sur le développement et le découplage de $\frac{1}{|x_{i,\beta} - x_{j,\beta'}|}$ de manière à permettre un précalcul des coefficients. On utilise pour cela un développement en fonction des harmoniques sphériques.

Soient x, x' deux points de \mathbb{R}^3 de coordonnées sphériques (r, θ, φ) et (r', θ', φ') . Si on note $r_{<} = \min(r, r')$ et $r_{>} = \max(r, r')$, on a (cf. EPTON-DEMBART [3] et ABRAMOWITZ-STEGUN [1]) :

$$\frac{1}{|x - x'|} = \sum_{l=0}^{+\infty} \sum_{k=-l}^l \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} Y_l^{-k}(\theta, \varphi) Y_l^k(\theta', \varphi'), \quad (6)$$

où Y_l^k est une harmonique sphérique définie par :

$$Y_l^k(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(l - |k|)!}{(l + |k|)!}} P_l^{|k|}(\cos \theta) e^{ik\varphi}.$$

P_l^k sont les fonctions de Legendre qui sont facilement calculables à l'aide des relations de récurrence :

$$\forall l \geq 0 \quad P_l^l(\cos \theta) = \frac{(2l)!}{2^l l!} (-\sin \theta)^l \quad P_{l+1}^l(\cos \theta) = (2l + 1) \cos \theta P_l^l(\cos \theta)$$

$$\forall k = 0, \dots, l - 2 \quad (l - k) P_l^k(\cos \theta) = (2l - 1) \cos \theta P_{l-1}^k(\cos \theta) - (l + k - 1) P_{l-2}^k(\cos \theta).$$

2.4 Approximation multipolaire

Soit X_B le centre de la boîte B . L'idée clef de la méthode multipôle consiste à découpler $\frac{1}{|x_{i,\beta} - x_{j,\beta'}|}$ en passant par les centres X_B et $X_{B'}$ des boîtes auxquelles appartiennent T_i et

T_j lorsque $|X_B - X_{B'}|$ est grand devant $|x_{i,\beta} - X_B|$ et $|x_{j,\beta'} - X_{B'}|$, c'est-à-dire lorsque les boîtes concernées sont assez éloignées.

On définit la notion de voisinage $V(B)$ d'une boîte $B \in \mathcal{B}$ de sorte que si $B' \notin V(B)$, $\forall x \in B \forall x' \in B' \quad |x' - X_{B'}| < |x - X_{B'}|$.

Soit $B \in \mathcal{B}$ telle que $T_i \in B$. Dans ce cas (5) s'écrit :

$$\begin{aligned} \Phi_i = & \frac{mes(T_i)}{4\pi} \sum_{B' \notin V(B)} \sum_{j/T_j \in B'} Y_j mes(T_j) \sum_{\beta=1}^M \sum_{\beta'=1}^M \frac{\omega_\beta \omega_{\beta'}}{|x_{i,\beta} - x_{j,\beta'}|} \\ & + \frac{mes(T_i)}{4\pi} \sum_{B' \in V(B)} \sum_{j/T_j \in B'} Y_j mes(T_j) \sum_{\beta=1}^M \sum_{\beta'=1}^M \frac{\omega_\beta \omega_{\beta'}}{|x_{i,\beta} - x_{j,\beta'}|}. \end{aligned} \quad (7)$$

Le deuxième terme de (7) sera calculé directement, le nombre de termes de la somme étant, de manière générale, très inférieur à celui de la première somme.

Posons alors :

$$\Psi_{i,\beta} = \sum_{B' \notin V(B)} \sum_{j/T_j \in B'} Y_j mes(T_j) \sum_{\beta'=1}^M \frac{\omega_{\beta'}}{|x_{i,\beta} - x_{j,\beta'}|}. \quad (8)$$

Nous pouvons alors utiliser le développement de $\frac{1}{|x - x'|}$ établi en (6) pour découpler partiellement les indices. Pour chaque j , on choisira $X_{B'}$, le centre de la boîte B' , comme origine du repère pour le développement de $\frac{1}{|x_{i,\beta} - x_{j,\beta'}|} = \frac{1}{|(x_{i,\beta} - X_{B'}) - (x_{j,\beta'} - X_{B'})|}$. La somme infinie sera tronquée au rang L choisi en fonction de l'erreur souhaitée.

On notera par la suite :

- $(r_{B \leftrightarrow B'}, \theta_{B \leftrightarrow B'}, \phi_{B \leftrightarrow B'})$ les coordonnées sphériques de $X_B - X_{B'}$;
- $(r_{i,\beta \leftrightarrow B'}, \theta_{i,\beta \leftrightarrow B'}, \phi_{i,\beta \leftrightarrow B'})$ les coordonnées sphériques de $x_{i,\beta} - X_{B'}$;
- $(r_{j,\beta'} \leftrightarrow B'}, \theta_{j,\beta'} \leftrightarrow B'}, \phi_{j,\beta'} \leftrightarrow B'})$ les coordonnées sphériques de $x_{j,\beta'} - X_{B'}$.

$\Psi_{i,\beta}$ s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \Psi_{i,\beta} \approx & \sum_{B' \notin V(B)} \sum_{j/T_j \in B'} Y_j mes(T_j) \sum_{\beta'=1}^M \omega_{\beta'} \\ & \cdot \sum_{l=0}^L \sum_{k=-l}^l \frac{r_{j,\beta'}^l}{r_{i,\beta \leftrightarrow B'}^{l+1}} Y_l^{-k}(\theta_{i,\beta \leftrightarrow B'}, \phi_{i,\beta \leftrightarrow B'}) Y_l^k(\theta_{j,\beta'} \leftrightarrow B'}, \phi_{j,\beta'} \leftrightarrow B'}). \end{aligned} \quad (9)$$

On remarquera qu'il n'y a pas de relation a priori entre L et N . Cependant, le choix de L et N pour obtenir une erreur multipolaire du même ordre que l'erreur de discrétisation lie ces deux paramètres. On verra plus loin que pour avoir une erreur ϵ , il faut prendre $L = \mathcal{O}(\ln(\frac{1}{\epsilon}))$, et qu'on a alors dans le pire des cas $L = \mathcal{O}(\ln(N^{1/2}))$, c'est-à-dire L négligeable devant N .

On note $C_l^k(B')$ le coefficient multipolaire pour la boîte B' :

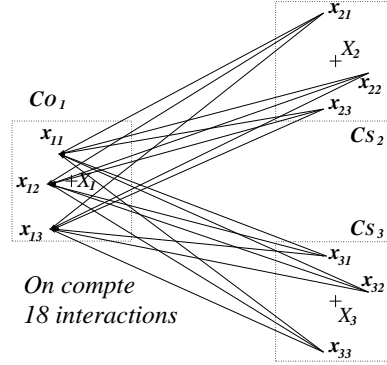
$$C_l^k(B') = \sum_{j/T_j \in B'} Y_j mes(T_j) \sum_{\beta'=1}^M \omega_{\beta'} r_{j,\beta'}^l Y_l^k(\theta_{j,\beta'} \leftrightarrow B'}, \phi_{j,\beta'} \leftrightarrow B'}).$$

Les coefficients multiplicaires ne dépendent que de la boîte B' (et des paramètres k et l). Chacun de ces $\mathcal{O}(K.L^2)$ coefficients nécessite $\mathcal{O}(A.M.L)$ opérations pour être calculé, où

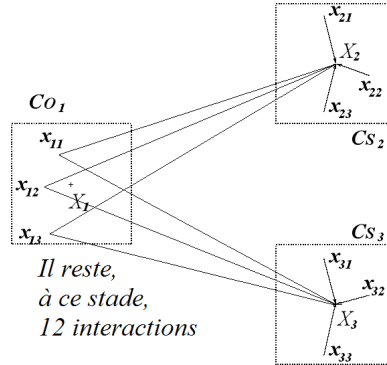
$A = \frac{N}{K}$ est le nombre moyen de triangles par boîte. Ces coefficients peuvent alors être stockés en mémoire, avec un coût en $\mathcal{O}(K.L^2)$, pour accélérer les calculs ultérieurs. La complexité globale est donc en $\mathcal{O}(A.K.M.L^3) = \mathcal{O}(N.L^3)$, ce qui fait l'intérêt de cette méthode multipôle.

(9) peut alors se mettre sous la forme :

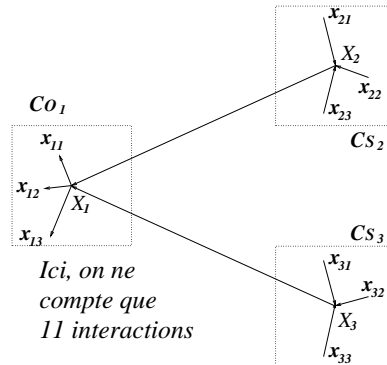
$$\Psi_{i,\beta} \approx \Psi_{i,\beta}^{(1)} = \sum_{B' \notin V(B)} \sum_{l=0}^L \sum_{k=-l}^l \frac{C_l^k(B')}{r_{i,\beta \leftrightarrow B'}^{l+1}} Y_l^{-k}(\theta_{i,\beta \leftrightarrow B'}, \phi_{i,\beta \leftrightarrow B'}) . \quad (10)$$



Nous n'avons pour l'instant effectué de simplifications qu'à l'intérieur de la boîte B' . Au lieu de calculer toutes les interactions entre les points $x_{i,\beta}$ et $x_{j,\beta'}$, nous précalculons les interactions entre $x_{j,\beta'}$ et $X_{B'}$.



Mais il reste toujours à calculer toutes les interactions entre $x_{i,\beta}$ et $X_{B'}$. Cependant, il est encore possible de les exprimer en fonction de celles entre $x_{i,\beta}$ et X_B , et entre X_B et $X_{B'}$, qui pourront elles aussi être précalculées.



Pour cela, on introduit les fonctions suivantes :

$$A_l^k = A_l^{-k} = \frac{(-1)^l}{\sqrt{(l-k)!(l+k)!}} \quad \Gamma_l^k(B') = \frac{(-1)^l A_l^k}{l^{|k|}} C_l^k(B')$$

$$O_l^k(x) = O_l^k(r, \theta, \phi) = \frac{(-1)^l l^{|k|}}{A_l^k} \frac{Y_l^k(\theta, \phi)}{r^{l+1}} \quad I_l^k(x) = I_l^k(r, \theta, \phi) = l^{-|k|} A_l^k r^l Y_l^k(\theta, \phi)$$

Ces fonctions vérifient (on renvoie à EPTON-DEMBART [3]) :

$$\forall x, x', \quad |x| > |x'| \Rightarrow O_l^k(x - x') = \sum_{l'=0}^{+\infty} \sum_{k'=-l'}^{l'} (-1)^{l'} I_{l'}^{k'}(x') O_{l+l'}^{k-k'}(x). \quad (11)$$

Or, on constate que $\Psi_{i,\beta}^{(1)}$ peut s'écrire en fonction de $\Gamma_l^k(B')$ et $O_l^k(x)$:

$$\Psi_{i,\beta}^{(1)} = \sum_{B' \notin V(B)} \sum_{l=0}^L \sum_{k=-l}^l \Gamma_l^k(B') O_l^{-k}(x_{i,\beta} - X_{B'}).$$

Il suffit alors de remplacer $O_l^{-k}(x_{i,\beta} - X_{B'})$ en utilisant la formule (11) pour $x = X_B - X_{B'}$ et $x' = X_B - x_{i,\beta}$, tronquée comme en (9) :

$$\Psi_{i,\beta}^{(1)} \approx \Psi_{i,\beta}^{(2)} = \sum_{B' \notin V(B)} \sum_{l=0}^L \sum_{k=-l}^l \Gamma_l^k(B') \sum_{l'=0}^L \sum_{k'=-l'}^{l'} (-1)^{l'} I_{l'}^{k'}(X_B - x_{i,\beta}) O_{l+l'}^{-k-k'}(X_B - X_{B'}).$$

C'est-à-dire en réorganisant les sommes :

$$\Psi_{i,\beta}^{(2)} = \sum_{l=0}^L \sum_{k=-l}^l (-1)^l I_l^k(X_B - x_{i,\beta}) \sum_{B' \notin V(B)} \sum_{l'=0}^L \sum_{k'=-l'}^{l'} O_{l+l'}^{-k-k'}(X_B - X_{B'}) \Gamma_{l'}^{k'}(B').$$

Comme on l'a vu précédemment avec les $C_l^k(B')$, le calcul des $\Gamma_{l'}^{k'}(B')$ se fait en $\mathcal{O}(N.L^3)$ opérations. Les $O_l^k(X_B - X_{B'})$ nécessitent chacun une complexité en $\mathcal{O}(L^3)$, leur nombre est en $\mathcal{O}(K^2)$, ils peuvent donc être précalculés et stockés en $\mathcal{O}(K^2.L^3)$. Les $I_l^k(X_B - x_{i,\beta})$ peuvent quant à eux être précalculés en $\mathcal{O}(N.L^3)$. En outre, il est important de remarquer que les O_l^k et les I_l^k sont indépendants de Y , et il ne sera donc pas nécessaire de les recalculer à chaque itération.

L'algorithme calcule donc les interactions éloignées en $\mathcal{O}(N.L^3 + K^2.L^4)$. De plus, les interactions proches, calculées par la formule explicite, se déterminent en $\mathcal{O}\left(\frac{N^2}{K}\right)$.

L'algorithme complet est donc en $\mathcal{O}\left(N.L^3 + \frac{N^2}{K} + K^2.L^4\right)$.

3 Choix des paramètres et complexité

3.1 Choix du niveau de la construction *nivmax*

Le choix de *nivmax* n'est pas aléatoire, il est lié à $K = \text{card}(\mathcal{B})$, ainsi qu'à la précision souhaitée. Comme $K = \mathcal{O}((8^{\text{nivmax}})^{2/3})$, on a

$$\text{nivmax} = \mathcal{O}\left(\frac{\ln(K^{3/2})}{\ln 8}\right).$$

De plus, *nivmax* doit éventuellement être diminué pour éviter les singularités dans le développement multipolaire : deux triangles d'intersection non vide doivent être dans des cubes voisins pour ne pas être traitées par la méthode multipôle (cf. (7)).

3.2 Estimation d'erreurs

Si on note E_i^Φ et $E_{i,\beta}^\Psi$ les erreurs commises lors des calculs de Φ_i et $\Psi_{i,\beta}$, on a la relation

$$E_i^\Phi \leq \frac{\text{mes}(T_i)}{4\pi} \sum_{\beta=1}^M \omega_\beta E_{i,\beta}^\Psi.$$

L'erreur commise sur $\Psi_{i,\beta}$ provient des deux erreurs successives $E_{i,\beta}^{(1)} = |\Psi_{i,\beta} - \Psi_{i,\beta}^{(1)}|$ et $E_{i,\beta}^{(2)} = |\Psi_{i,\beta}^{(1)} - \Psi_{i,\beta}^{(2)}|$. Nous étudierons ici brièvement la première.

D'après (8), on a :

$$E_{i,\beta}^{(1)} \leq \sum_{B' \notin V(B)} \sum_{j/T_j \in B'} |Y_j| \text{mes}(T_j) \sum_{\beta'=1}^M |\omega_{\beta'}| E_{(i,\beta) \leftrightarrow (j,\beta')}^{(1)},$$

$$\text{avec } E_{(i,\beta) \leftrightarrow (j,\beta')}^{(1)} = \left| \frac{1}{|x_{i,\beta} - x_{j,\beta'}|} - \sum_{l=0}^L \sum_{k=-l}^l \frac{r_{j,\beta'}^l}{r_{i,\beta \leftrightarrow B'}^{l+1}} Y_l^{-k}(\theta_{i,\beta \leftrightarrow B'}, \phi_{i,\beta \leftrightarrow B'}) Y_l^k(\theta_{j,\beta'}, \phi_{j,\beta'}) \right|.$$

Il s'agit donc d'estimer pour $r' < r$:

$$\left| \frac{1}{|x - x'|} - \sum_{l=0}^L \sum_{k=-l}^l \frac{r'^l}{r^{l+1}} Y_l^{-k}(\theta, \varphi) Y_l^k(\theta', \varphi') \right| = \left| \sum_{l=L+1}^{+\infty} \frac{r'^l}{r^{l+1}} \sum_{k=-l}^l Y_l^{-k}(\theta, \varphi) Y_l^k(\theta', \varphi') \right|.$$

En remarquant que $\forall l \geq 0$, $\left| \sum_{k=-l}^l Y_l^{-k}(\theta, \varphi) Y_l^k(\theta', \varphi') \right| \leq 1$, on en déduit :

$$\left| \frac{1}{|x - x'|} - \sum_{l=0}^L \sum_{k=-l}^l \frac{r'^l}{r^{l+1}} Y_l^{-k}(\theta, \varphi) Y_l^k(\theta', \varphi') \right| \leq \frac{1}{r - r'} \left(\frac{r'}{r} \right)^{L+1},$$

$$\text{puis } E_{(i,\beta) \leftrightarrow (j,\beta')}^{(1)} \leq \frac{1}{r_{i,\beta \leftrightarrow B'} - r_{j,\beta'}} \left(\frac{r_{j,\beta'}}{r_{i,\beta \leftrightarrow B'}} \right)^{L+1}.$$

En notant ρ un majorant de $|x_{j,\beta'} - X_{B'}|$ et R un minorant de $|x_{i,\beta} - X_{B'}|$, il vient $E_{i,\beta}^{(1)} \leq \lambda \left(\frac{\rho}{R} \right)^{L+1}$. Donc si ϵ est l'erreur souhaitée, on doit choisir :

$$L = \mathcal{O} \left(\ln \left(\frac{1}{\epsilon} \right) \right).$$

On peut montrer que l'erreur liée à la discrétisation du problème est, dans le pire des cas, en $\mathcal{O} \left(\frac{1}{N^{1/2}} \right)$. On en déduit la relation entre N et L : $L = \mathcal{O}(\ln(N^{1/2}))$. Pour $N = 100\,000$, on obtient $L \sim 6$ et pour $N = 1\,000\,000$, $L \sim 7$.

3.3 Choix de K - Complexité

On a vu que la complexité de l'algorithme est en $\mathcal{O}\left(N.L^3 + \frac{N^2}{K} + K^2.L^4\right)$. Si on considère L en $\mathcal{O}(1)$ par rapport à N , le meilleur choix de K correspond à la valeur qui minimise la fonction $K \mapsto \frac{N^2}{K} + K^2$.

La complexité minimale est obtenue pour $K = \mathcal{O}(N^{2/3})$. Ainsi, on obtient un méthode de calcul des produits matrice-vecteur ayant un coût de calcul en $\mathcal{O}(N^{4/3}.L^4)$ et un coût en mémoire en $\mathcal{O}(N^{4/3}.L^2)$.

Conclusion

La méthode multipôle étudiée ici permet une résolution numérique de l'équation de Laplace en minimisant le coût mémoire et le temps de calcul tout en étant arbitrairement précise. Apparue pour résoudre le problème à N corps de l'astronomie, elle possède aujourd'hui de nombreux domaines d'application, comme la résolution des équations de l'acoustique et de l'électromagnétisme. Son utilisation est envisagée pour l'étude de la dynamique moléculaire.

Nous tenions à remercier encore une fois Éric Darrigrand pour sa collaboration et ses nombreux conseils.

Références

- [1] ABRAMOWITZ (M.) et STEGUN (I.A.). - *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. - John Willey, New York, 1972.
- [2] DARRIGRAND (E.). - *Une Méthode multipôle pour l'équation de Laplace 3D*. - Rapport de stage de DEA, Université de Bordeaux I, Juillet 1999.
- [3] EPTON (M.A.) et DEMBART (B.). - Multipole Translation Theory for the Three-Dimensional Laplace and Helmholtz Equations. *SIAM J. Sci. Comput.*, vol. 16, July 1995, pp. 865-897.
- [4] GREENGARD (L.) et ROKHLIN (V.). - A Fast Algorithm for Particle Simulations. *J. Comput. Phys.*, vol. 73, 1987, pp. 325-348.