B. ANALYSE NUMÉRIQUE

On note $\mathbb{N}$ l'ensemble des entiers positifs et $\mathbb{R}$ l'ensemble des réels. Soit α un réel, et ϕ_1, ϕ_2 deux fonctions continues de $[0,1]$ dans $\mathbb{R}$. Soit f la fonction de $[0,1]^2$ dans $\mathbb{R}^2$ définie par :

$$\begin{aligned} \forall x, y \in [0,1]^2,\ f(x,y) &= \phi_1(x)\phi_2(y)|x-y|^\alpha \quad \text{si } x \neq y \\ &= 0 \quad \text{si } x = y. \end{aligned}$$

Soit N un entier non nul. On définit I_N par :

$$I_N = \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} f(x_i, x_j)$$

avec $x_i = \frac{i-1/2}{N}$. (Note : En physique, pour $\phi_1 = \phi_2$, I_N représente par exemple une énergie d'interaction de N particules x_i, de charges $\phi_1(x_i)$, sous un champ en $|x-y|^\alpha$.)

L'objet du problème est de réduire le nombre d'opérations nécessaires pour calculer I_N pour des grandes valeurs de N.

On appellera *opération élémentaire* l'une des opérations suivantes sur les nombres réels ou entier : addition, multiplication, soustraction ou division, l'évaluation de x^β (un réel élevé à une certaine puissance réelle ou entière), l'évaluation de $\phi_i(x)$ (une des fonctions ϕ_i évaluée en un point). L'évaluation des x_i est supposée négligeable. On négligera aussi le coût des divers appels mémoire.

Notations. Pour $k \in \mathbb{N}\backslash\{0\}$ et $a \in \mathbb{R}$, on note $\binom{a}{0} = 1$ et

$$\binom{a}{k} = \frac{a(a-1)\cdots(a-k+1)}{k!}.$$

PARTIE I

A) On considère l'intégrale suivante :

$$I = \int_{]0,1[^2} f(x,y)\, dx\, dy. \tag{1}$$

1. Rappeler pour quelles valeurs de α l'intégrale $\int_0^1 x^\alpha dx$ est convergente.

2. On suppose que ϕ_1 et ϕ_2 sont constantes égales à 1 sur $[0,1]$. Déterminer les valeurs de α pour lesquelles l'intégrale (1) est finie. On note α_0 leur borne inférieure.

3. Montrer que, pour tout $\alpha > \alpha_0$, l'intégrale (1) est convergente.

4. Montrer qu'il existe un algorithme de calcul de I_N utilisant moins de $c\,N^2$ opérations élémentaires, où c est une constante qui ne dépend pas de N (ni de f).

Tournez la page S.V.P.

B) Cas particulier : α entier pair. On suppose ici que $\alpha = 2p$ où p est un entier positif ou nul. On introduit les moments d'ordre k ($k \in \mathbb{N}$) définis par :

$$M_\phi(k) = \sum_{i=1}^{N} (x_i)^k \, \phi(x_i).$$

1. Montrer qu'on peut évaluer un moment $M_{\phi_i}(k)$ en moins de $4\,N$ opérations élémentaires.

2. Cas p=0. Montrer qu'on peut évaluer I_N en moins de $4\,N + c$ opérations élémentaires, où c est une constante (qui ne dépend pas de N).

3. Montrer qu'on peut évaluer l'ensemble des valeurs des coefficients binomiaux $\{\binom{p}{k},\ k = 0, \ldots, p\}$ en moins de $c(p+1)$ opérations élémentaires, où c est une constante indépendante de p.

4. Montrer qu'on peut évaluer I_N en moins de $c\,(p+1)\,N$ opérations élémentaires où c est une constante qui ne dépend pas de N ni de p.

PARTIE II - Algorithme multipolaire

On suppose désormais $\alpha \in \mathbb{R}$, $\alpha \notin 2\mathbb{N}$, $\alpha > -1$.
On note n un entier, $n \geq 2$ (le "nombre de niveaux").
On suppose que $N = 2^n$.
On note $C_0 = [0,1]$ et $C_k^i = [\frac{i-1}{2^k}, \frac{i}{2^k}]$ pour $k \in \{0, \ldots, n\}$ et $i \in \{1, \ldots, 2^k\}$. On dira que C_k^i est *un intervalle de niveau k.* On note $x_k^i = \frac{i-1/2}{2^k}$ le centre de C_k^i.

Définitions. On dit que deux intervalles C_k^i et C_k^j de même niveau k sont :

- *bien séparés* si $|i-j| \geq 2$;
- *voisins* si $|i-j| \leq 1$;

En outre on dira que :

- les *fils* de C_k^i sont C_{k+1}^{2i-1} et C_{k+1}^{2i};
- C_k^i est le *père* de C_{k+1}^{2i-1} et C_{k+1}^{2i}.

On définit enfin *la liste d'interaction de* C_k^i, notée $Int(C_k^i)$, par l'ensemble des intervalles C_k^j de même niveau k qui sont à la fois bien séparés de C_k^i et tels que les pères de C_k^i et C_k^j soient voisins (cette liste peu éventuellement être vide).

Étant donné un intervalle C de $[0,1]$ et ϕ une fonction de $[0,1]$ dans $\mathbb{R}$, on introduit la notation $\displaystyle\oint_C \phi$ définie par :

$$\oint_C \phi(x)\,dx = \frac{1}{N}\sum_{i\in J_C}\phi(x_n^i)$$

où $J_C = \{i = 1,\ldots,2^n\ ;\ x_n^i \in C\}$. On définit de même $\displaystyle\oint_{C^1\times C^2}\Phi$ par :

$$\oint_{C^1\times C^2}\Phi(x,y)\,dx\,dy = \oint_{C^1}\left(\oint_{C^2}\Phi(x,y)\,dy\right)dx$$

pour des fonctions Φ de $[0,1]^2$ dans $\mathbb{R}$ et pour C^1 et C^2 deux intervalles de $[0,1]$.

Soit $q \in \mathbb{N}$. On définit le moment d'ordre q d'une fonction ϕ sur un intervalle C par :

$$M_\phi(q,C) = \oint_C \phi(x)(x-x_0)^q\,dx,$$

où x_0 est le centre de l'intervalle C. (Pour $q = 0$, on prendra dans cette définition $(x - x_0)^q = 1$ pour tout x).

A) Préliminaires.

1. Dans le cas $n = 3$ ($N = 8$), pour $k = 0$, $k = 1$, $k = 2$ et $k = 3$ respectivement, faire un graphe représentant schématiquement les C_k^i (pour tous les i possibles), ainsi que les x_k^i.

2. Donner la valeur de j (en fonction de i) telle que le père de C_{k+1}^i soit C_k^j.

3. Calculer $Card\{j|\ x_n^j \in C_k^i\}$.

4. Exprimer I_N à l'aide du symbole $\oint$.

5. Calculer $M_\phi(q, C_k^i)$ lorsque $k = n$ (distinguer les cas $q = 0$ et $q > 0$).

6. Représenter schématiquement la liste d'interaction de C_1^1, de C_2^1, de C_2^2, de C_3^2 et de C_3^3 (on pourra par exemple hachurer les intervalles faisant partie des listes d'interactions). Quelle est le nombre maximum d'éléments d'une liste d'interaction $Int(C_k^i)$?

B) Évaluation directe des moments.

1. Si C est un intervalle de niveau k (c'est-à-dire du type C_k^i), montrer que l'évaluation d'un moment $M_\phi(j,C)$ peut se faire en moins de $c\,2^{n-k}$ opérations élémentaires où c est une constante.

2. Soit $p \in \mathbb{N}$. Montrer qu'il existe un algorithme utilisant moins de $c((p+1)\ N\log(N))$ opérations élémentaires pour l'évaluation de tous les moments $M_{\phi_\ell}(j,C)$ pour tous les intervalles C_k^i (avec $k \in \{0,\ldots,n\}$, $i \in \{1,\ldots,2^k\}$, $\ell \in \{1,2\}$ et $j \in \{0,\ldots,p\}$).

Tournez la page S.V.P.

C) Développement multipolaire. Remarque importante : chacune des questions de cette partie peut être traitée en admettant les questions précédentes.

1-a. Soit h un réel tel que $|h| < 1$. Pour $p \geq 1$, on définit $R_p(\alpha, h)$ par :

$$R_p(\alpha, h) = \sum_{n=p}^{+\infty} \binom{\alpha}{n} h^n.$$

Montrer que $R_p(\alpha, h)$ est bien défini.

1-b. On note q le plus petit entier k tel que $k \geq \alpha$. On pose

$$A_\alpha = (1 - \frac{1}{\alpha+1})(1 - \frac{2}{\alpha+1}) \dots (1 - \frac{q}{\alpha+1})$$

et pour n un entier, $n \geq q$:

$$B_\alpha(n) = (1 - \frac{\alpha+1}{q+1})(1 - \frac{\alpha+1}{q+2}) \dots (1 - \frac{\alpha+1}{n}).$$

(Dans le cas $q = 0$, on prend $A_\alpha = 1$, et dans le cas $n = q$ on prend $B_\alpha(n) = 1$.)
Montrer que l'on a :

$$\left| \binom{\alpha}{n} \right| = \frac{(\alpha+1)^q}{q!} A_\alpha B_\alpha(n).$$

1-c. Montrer que $0 \leq A_\alpha \leq e^{-q/2}$.

1-d. Montrer que, pour $n \geq q$, on a : $0 \leq B_\alpha(n) \leq \left(\frac{q+1}{n+1}\right)^{(\alpha+1)}$.

1-e. Soit $p \in \mathbb{N} \backslash \{0\}$. On pose $I_p(\alpha, h) = \sum_{n=p}^{+\infty} \frac{|h|^n}{(n+1)^{\alpha+1}}$. Montrer

$$I_p(\alpha, h) \leq \frac{1}{\text{Log}(1/|h|)} \frac{|h|^{p-1}}{p^{\alpha+1}}.$$

(On pourra comparer $I_p(\alpha, h)$ avec une intégrale.)

1-f. En déduire, pour $p \in \mathbb{N} \backslash \{0\}$, $p \geq \alpha$, et $|h| \leq \frac{1}{2}$:

$$|R_p(\alpha, h)| \leq c(\alpha) \frac{2^{-p+1}}{p^{\alpha+1}} \tag{2}$$

où $c(\alpha)$ est une constante qui ne dépend que de α et qu'on précisera à l'aide des majorations précédentes.

Dans le cas particulier où $\alpha \in]-1, 0[$, avec $|h| \leq \frac{1}{2}$ et $p \in \mathbb{N}$, montrer qu'on a la majoration (2) avec $c(\alpha) = \frac{1}{\log(2)}$.

2. On considère deux intervalles $C^1 = C_k^{i_1}$ et $C^2 = C_k^{i_2}$ de même niveau k. On note $x_{0,1}$ le centre de C^1 et $x_{0,2}$ le centre de C^2 et on prend $x_1 \in C^1$ et $x_2 \in C^2$.
On suppose enfin que C^1 et C^2 sont *bien séparés.*

2-a. Montrer que $|x_1 - x_2| = |x_{0,1} - x_{0,2}|(1 + u(h_1 - h_2))$ où

$$u = \frac{x_{0,1} - x_{0,2}}{|x_{0,1} - x_{0,2}|},$$

et

$$h_i = \frac{x_i - x_{0,i}}{|x_{0,1} - x_{0,2}|}$$

et avec $|h_i| \leq \frac{1}{4}$ pour $i = 1, 2$.

2-b. En déduire, pour $p + 1 \geq \alpha$ (et $p \in \mathbb{N}$) :

$$|x_1 - x_2|^\alpha = |x_{0,1} - x_{0,2}|^\alpha \left(\sum_{i=0}^{p} \sum_{j=0}^{p-i} c_{i,j}(\alpha, u) h_1^i h_2^j \;\; + \delta \right) \tag{3}$$

avec

$$|\delta| \leq c(\alpha) \frac{2^{-p}}{(p+1)^{\alpha+1}}$$

où les $c_{i,j}(\alpha, u)$ sont des coefficients qu'on calculera en fonction de i, j, α et u. (Note : la formule (3) s'appelle un *développement multipolaire.*)

3. Sous les hypothèses de la question 2., montrer :

$$\frac{2}{3}|x_1 - x_2| \leq |x_{0,1} - x_{0,2}| \leq 2|x_1 - x_2|.$$

En déduire, pour $p \in \mathbb{N}$ tel que $p + 1 \geq \alpha$:

$$\oint_{C^1 \times C^2} f = |x_{0,1} - x_{0,2}|^\alpha \left(\sum_{i=0}^{p} \sum_{j=0}^{p-i} \frac{c_{i,j}(\alpha, u)}{|x_{0,1} - x_{0,2}|^{i+j}} M_{\phi_1}(i, C^1)\, M_{\phi_2}(j, C^2) \right) + \eta$$

avec

$$|\eta| \leq d(\alpha) \frac{2^{-p}}{(p+1)^{\alpha+1}} \oint_{C^1 \times C^2} |f|$$

où $d(\alpha)$ est une constante qui ne dépend que de α et qui vérifie la majoration suivante :

$$|d(\alpha)| \leq c(\alpha)\, \max\left((\frac{2}{3})^\alpha, 2^\alpha \right).$$

D) Décomposition de la somme I_N.

1. Montrer que, avec $N = 2^n$:

$$I_N = \left(\sum_{k=2}^{n} \sum_{\substack{i,j=1,\dots,2^k \\ C_k^j \in Int(C_k^i)}} \oint\!\!\!\!\square_{C_k^i \times C_k^j} f \right) + \left(\sum_{\substack{i,j=1,\dots,2^n \\ C_n^i, C_n^j \text{ voisins}}} \oint\!\!\!\!\square_{C_n^i \times C_n^j} f \right).$$

2. On définit les entiers i_1, i_2 par :

$$i_1 = Card\{(i,j)\ ;\ C_k^j \in Int(C_k^i),\ 0 \leq k \leq n,\ 1 \leq i,j \leq 2^k\}$$

et

$$i_2 = Card\{(i,j)\ ;\ C_n^i, C_n^j \text{ voisins},\ 1 \leq i,j \leq 2^n\}$$

(où $Card$ désigne le cardinal d'un ensemble). Donner un équivalent de i_1 et de i_2 en fonction de $N = 2^n$. En déduire que $i_1 + i_2 \sim c\, N$ quand $N \to \infty$, où c est une constante.

E) Évaluation de la somme I_N.

Soit p un entier tel que $p \geq \alpha$. On suppose dans cette partie que tous les moments $M_{\phi_\ell}(j, C)$ ont déjà été évalués, pour tous les intervalles $C = C_k^i$ ($k \in \{0, \dots, n\}$, $i \in \{1, \dots, 2^k\}$, $\ell \in \{1, 2\}$ et $j \in \{0, \dots, p\}$).

1. On suppose que C_k^i est bien séparé de C_k^j. Montrer qu'on peut calculer, en moins de $c((p+1)^2)$ opérations (c une constante), un réel $I_{k,i,j}$ de sorte que :

$$|\eta_{k,i,j}| \leq d(\alpha) \frac{2^{-p}}{(p+1)^{\alpha+1}} \oint\!\!\!\!\square_{C_k^i \times C_k^j} |f|$$

où l'on a noté :

$$\eta_{k,i,j} = I_{k,i,j} - \oint\!\!\!\!\square_{C_k^i \times C_k^j} f.$$

2. En déduire un algorithme de calcul d'un réel noté J_N, en moins de $c((p+1)^2\ N)$ opérations (c une constante), de sorte que $\eta = J_N - I_N$ vérifie:

$$|\eta| \leq d(\alpha) \frac{2^{-p}}{p^{\alpha+1}} \oint_{C_0 \times C_0} |f|.$$

F) Coût total.

On se donne un réel $\epsilon > 0$. Montrer qu'il existe un entier p (qu'on estimera en fonction de ϵ) et un algorithme calculant une quantité notée J_N en moins de $c\,(p+1)\,N \log(N)$ opérations élémentaires (c une constante ne dépendant ni de N ni de p) et qui vérifie

$$|J_N - I_N| \leq \epsilon \oint_{C_0 \times C_0} |f|.$$

Dans le cas $\alpha \in]-1,0[$, discuter l'intérêt de cet algorithme par rapport à l'algorithme direct de la question A.4 (partie I).

G) Evaluation rapide des moments.

On reprend la question B-2 (partie II). Proposer un algorithme en moins de $c\,(p+1)^2\,N$ opérations pour le calcul de tous les moments.