



HAL
open science

Schémas aux différences finies compacts pour l'équation de Poisson en dimension quelconque

Erwan Deriaz

► **To cite this version:**

Erwan Deriaz. Schémas aux différences finies compacts pour l'équation de Poisson en dimension quelconque. 2017. hal-01620825

HAL Id: hal-01620825

<https://hal.science/hal-01620825v1>

Preprint submitted on 6 Nov 2017

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

SCHÉMAS AUX DIFFÉRENCES FINIES COMPACTES POUR L'ÉQUATION DE POISSON EN DIMENSION QUELCONQUE

ERWAN DERIAZ¹

Résumé. En s'appuyant sur l'algèbre des polynômes symétriques on parvient à calculer les coefficients des schémas aux différences finies compacts pour résoudre l'équation de Poisson en dimension quelconque à un ordre de précision arbitraire sur un maillage cartésien uniforme. On produit ainsi des schémas originaux d'ordre élevé : un schéma d'ordre dix en dimension trois et des schémas d'ordre six en dimension quelconque dont on vérifie la précision par des expériences numériques.

Abstract. Taking advantage of the algebra of the symmetric polynomials we compute the coefficients of compact finite difference schemes which solve the Poisson equation at arbitrary order of accuracy and in arbitrary dimension on a uniform cartesian grid. Therefore we produce original high order schemes: a tenth order scheme in dimension three and sixth order schemes in arbitrary dimension. Then we test the accuracy of these schemes with the help of a numerical experiment.

INTRODUCTION

Dans son livre *Numerische Behandlung von Differentialgleichungen* écrit en 1951 et traduit en anglais sous le titre de *The numerical treatment of differential equations* en 1966 [1], Lothar Collatz introduit l'idée de perturber le membre de droite de l'équation de Poisson :

$$\Delta u = \sum_{i=1}^d \partial_i^2 u = v \quad (1)$$

afin d'augmenter l'ordre de précision d'un schéma aux différences finies sur grille cartésienne de maille h sans accroître la taille du support de l'opérateur linéaire (a_α) associé :

$$\frac{1}{h^2} \sum_{\alpha \in \mathbb{Z}^d} a_\alpha u(\mathbf{x}_h + \alpha h) = \sum_{\beta \in \mathbb{Z}^d} b_\beta v(\mathbf{x}_h + \beta h), \quad \forall \mathbf{x}_h \in \mathring{\Omega}_h. \quad (2)$$

D'où le nom de *schéma aux différences finies compact*.

Comme il l'explique, le calcul des coefficients (a_α) et (b_β) se fait grâce aux formules de Taylor appliquées à $u(\mathbf{x} + \alpha h)$ et $v(\mathbf{x} + \beta h)$ (avec v supposé égal à Δu) en annulant les termes jusqu'à l'ordre le plus élevé possible. Ce principe est étendu à des opérateurs généraux et à des maillages autres que cartésiens. Dans une annexe, il fait une liste des schémas obtenus en dimension deux avec leur erreur de précision.

¹ Institut Jean Lamour, Matériaux-Métallurgie-Nanosciences-Plasmas-Surfaces UMR 7198 - CNRS - Université de Lorraine, Faculté des Sciences et Technologies, Campus Victor Grignard - BP 70239, 54506 VANDOEUVRE-LES-NANCY CEDEX

L’extension à la dimension trois connue en anglais sous le nom de “HOC Stencil” pour “High Order Compact Stencil” (schéma compact d’ordre élevé) est introduite dans [7] puis reprise et testée dans [8]. Elle permet de résoudre l’équation de Poisson à l’ordre six.

Ce type de schémas fait partie des classiques de manuels d’Analyse Numérique. Entre autres, le livre d’A. Iserles [5] propose en exercice un schéma d’ordre quatre en dimension quelconque très intéressant. Cet auteur évoque “de longues manipulations et de l’algèbre pesante” pour généraliser les schémas de type “Mehrstellenverfahren” sans vraiment donner de piste pour aller plus loin. On peut aussi citer l’ouvrage d’analyse numérique d’A. Samarskii [6] où l’auteur traite le cas de maillages cartésiens ayant des tailles de maille différentes selon les directions. Il en donne une généralisation à la dimension quelconque tout en se limitant à l’ordre quatre.

On se propose ici de faire les calculs nécessaires qui, étant donné un ordre de précision et des groupes symétriques de points, donnent les coefficients permettant de former un schéma compact sur grille cartésienne isotrope. Et ce en dimension quelconque et de façon quasi-automatique.

Certaines applications réclamant un haut degré de précision sur des solutions régulières, telles que la chimie *ab initio* [3] justifient la recherche de tels solveurs. Ces schémas compacts associés à des algorithmes multigrilles comptent parmi les meilleurs solveurs d’équations elliptiques [4, 5, 8, 10]. Dans un second article on verra qu’ils ont un grand intérêt dans l’implémentation de solveurs sur grilles adaptatives, intérêt déjà en partie exploité dans [2].

Dans une première partie on introduira les notations et les résultats préliminaires, ceux-ci font essentiellement appel à de l’algèbre des polynômes symétriques et à du dénombrement combinatoire. Dans une deuxième partie on détaillera le calcul des coefficients, les propriétés importantes à obtenir et quelques résultats de calculs dont certains schémas originaux. Enfin, dans une troisième partie on testera la convergence des algorithmes multigrilles associés et la précision attendue.

1. NOTATIONS ET RÉSULTATS PRÉLIMINAIRES

1.1. Notations usuelles

On reprend les mêmes notations que celles présentes dans [1, 5] où les coefficients de l’opérateur linéaire sont représentés dans une grille cartésienne. Par exemple le schéma “Mehrstellenverfahren” de base, d’ordre quatre en dimension deux :

$$\frac{1}{6h^2} \begin{bmatrix} 1 & 4 & 1 \\ 4 & -20 & 4 \\ 1 & 4 & 1 \end{bmatrix} u = \frac{1}{12} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 8 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} v \quad (3)$$

signifie :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{6h^2} (-20 u_{i_1, i_2} + 4 u_{i_1+1, i_2} + 4 u_{i_1-1, i_2} + 4 u_{i_1, i_2+1} + 4 u_{i_1, i_2-1} + u_{i_1+1, i_2+1} + u_{i_1-1, i_2+1} + u_{i_1+1, i_2-1} + u_{i_1-1, i_2-1}) \\ & = \frac{1}{12} (8 v_{i_1, i_2} + v_{i_1+1, i_2} + v_{i_1-1, i_2} + v_{i_1, i_2+1} + v_{i_1, i_2-1}) \end{aligned} \quad (4)$$

pour tout couple (i_1, i_2) d’entiers où les termes $v_{i_1, i_2} = v(i_1 h, i_2 h)$, $v_{i_1 \pm 1, i_2} = v(i_1 h \pm h, i_2 h)$ et $v_{i_1, i_2 \pm 1} = v(i_1 h, i_2 h \pm h)$ sont définis et $u_{i_1, i_2} = u(i_1 h, i_2 h)$ à déterminer.

1.2. Notations et résultats pour aller “encore” plus loin

Dans le cas général, comme dans [8], on considère des groupes de points obtenus par permutations des coordonnées et symétrie par rapport aux axes. C’est-à-dire que par exemple $\pi(1, 0, 0)$ représente les six points $(\pm 1, 0, 0)$, $(0, \pm 1, 0)$ et $(0, 0, \pm 1)$. De façon plus générale, on dénombre les coordonnées égales à 1, 2... et on note $\Sigma_{\mathbf{k}}$ l’ensemble des points avec k_1 coordonnées à 1, k_2 coordonnées à 2 et ainsi de suite. Ainsi le groupe de points obtenu par permutation des coordonnées de $(\pm 1, \pm 2, \pm 1, 0)$ correspond à $\mathbf{k} = (2, 1)$. On note $a_{\mathbf{k}}$ le coefficient associé à l’ensemble $\Sigma_{\mathbf{k}}$ dans le membre de gauche de l’égalité (2) et $b_{\mathbf{k}}$ celui associé à ce même groupe dans le membre de droite.

Lemme 1. *Un calcul simple permet de dénombrer l'ensemble $\Sigma_{\mathbf{k}}$ pour $\mathbf{k} = (k_1, \dots, k_n)$:*

$$\text{Card}(\Sigma_{\mathbf{k}}) = S_{\mathbf{k}}(1) = 2^{\mathbf{k}} C_d^{\mathbf{k}} \quad \text{où} \quad 2^{\mathbf{k}} = 2^{\sum_{i=1}^n k_i} \quad \text{et} \quad C_d^{\mathbf{k}} = \frac{d!}{\prod_{i=1}^n k_i! (d - \sum_{i=1}^n k_i)!}. \quad (5)$$

Preuve : Le terme $2^{\mathbf{k}}$ correspond au changement de signe \pm dans les coordonnées des points, $C_d^{\mathbf{k}}$ correspond au nombre de façons de choisir k_1 termes égaux à 1 parmi d puis k_2 termes égaux à 2 parmi $d - k_1$, et ainsi de suite jusqu'à n .

On note $S_{\mathbf{k}}(1)$ ce terme car c'est le poids de l'ensemble $\Sigma_{\mathbf{k}}$ dans le polynôme 1 lorsqu'on fait un développement de Taylor à l'ordre un :

$$\sum_{\delta x \in \Sigma_{\mathbf{k}} h} u(\mathbf{x} + \delta x) = S_{\mathbf{k}}(1)u(\mathbf{x}) + O(h). \quad (6)$$

1.3. Formule de Taylor en dimension quelconque

Le développement de Taylor en dimension quelconque s'écrit :

$$f(h_1, h_2, \dots, h_d) = \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{N}^d} \frac{\mathbf{h}^{\mathbf{k}}}{\mathbf{k}!} \partial^{\mathbf{k}} f(0) \quad (7)$$

avec

$$\mathbf{h}^{\mathbf{k}} = \prod_{i=1}^d h_i^{k_i}, \quad \mathbf{k}! = \prod_{i=1}^d k_i!, \quad \partial^{\mathbf{k}} = \prod_{i=1}^d \partial_i^{k_i}. \quad (8)$$

Ce résultat classique se prouve par récurrence sur la dimension d avec la formule de Taylor en dimension une. Par la suite comme on se placera toujours en zéro on écrira f à la place de $f(0)$.

1.4. Les polynômes symétriques

Comme les ensembles de points $\Sigma_{\mathbf{k}}$ sont symétriques, le développement de Taylor de $\sum_{\delta x \in \Sigma_{\mathbf{k}} h} u(\delta x)$ ne fait apparaître que des polynômes de dérivées composées $\prod_{i=1}^d \partial_i^{k_i}$ pairs (tous les k_i sont pairs) que l'on peut regrouper en ensembles symétriques :

$$\sum_{i=1}^d \partial_i^2, \quad \sum_{i=1}^d \partial_i^4, \quad \sum_{i < j} \partial_i^2 \partial_j^2, \quad \dots \quad (9)$$

Ce qui nous amène à nous intéresser à l'ensemble des polynômes symétriques noté ici $\Sigma[X]$ dont on connaît la structure algébrique depuis Newton (cf les identités de Newton).

Le théorème fondamental des polynômes symétriques indique que les deux ensembles de polynômes : les sommes des puissances k -ièmes $\{\sum_{i=1}^d x_i^k\}_{0 \leq k \leq d}$ et l'ensemble $\{\sum_{i_1 < i_2 < \dots < i_n} \prod_{\ell=1}^n x_{i_\ell}\}_{0 \leq n \leq d}$ des polynômes symétriques élémentaires forment chacun une base de l'algèbre des polynômes symétriques en dimension d .

On note \mathcal{P} l'ensemble des permutations d'un ensemble à d éléments. Les polynômes symétriques monomiaux sont les polynômes symétriques engendré par les monômes :

$$\sigma_{\mathbf{p}}(x_1, \dots, x_d) = \frac{1}{\mathbf{k}(\mathbf{p})!} \sum_{\pi \in \mathcal{P}} \prod_{i=1}^d x_{\pi(i)}^{p_i}$$

où, un peu comme dans le cas des ensembles symétriques de points, $\mathbf{k}(\mathbf{p}) = (k_0, k_1, k_2, \dots)$ désigne le nombre de termes p_i égaux à 0, 1, 2 ... en commençant par 0 au lieu de 1.

On fera appel à des résultats sur les polynômes symétriques en considérant $x_i = \partial_i^2$.

Leur nombre relativement réduit, indépendamment de la dimensionalité, par rapport à l'ensemble des polynômes apparaissant dans le développement (7) permet de réécrire l'équation (2) dans la base vectorielle des polynômes symétriques monomiaux pairs $\sigma_{2\mathbf{p}}$:

$$\sum_{p_1 \geq \dots \geq p_d \geq 0} c_{\mathbf{p}}(u) \frac{h^{2|\mathbf{p}|}}{(2\mathbf{p})!} \sigma_{2\mathbf{p}}(\partial_i) u = \sum_{p_1 \geq \dots \geq p_d \geq 0} c_{\mathbf{p}}(v) \frac{h^{2|\mathbf{p}|}}{(2\mathbf{p})!} \sigma_{2\mathbf{p}}(\partial_i) v \quad (10)$$

avec $|\mathbf{p}| = \sum_{i=1}^n p_i$, et de résoudre les systèmes d'équations portant sur les coefficients $a_{\mathbf{k}}$ et $b_{\mathbf{k}}$:

$$\sum_{p_1 \geq \dots \geq p_d \geq 0} \left(\sum_{\mathbf{k} \in \{0, \dots, d\}^n} a_{\mathbf{k}} S_{\mathbf{k}}(\sigma_{2\mathbf{p}}) \right) \frac{\sigma_{2\mathbf{p}}(\partial_i) u}{(2\mathbf{p})!} = \sum_{p_1 \geq \dots \geq p_d \geq 0} \left(\sum_{\mathbf{k} \in \{0, \dots, d\}^n} b_{\mathbf{k}} S_{\mathbf{k}}(\sigma_{2\mathbf{p}}) \right) \frac{\sigma_{2\mathbf{p}}(\partial_i) \sigma_2(\partial_i) u}{(2\mathbf{p})!} \quad (11)$$

avec $S_{\mathbf{k}}(\sigma_{2\mathbf{p}})$ des coefficients que l'on explicitera. L'équation (11) est une réécriture de l'équation (10) en faisant apparaître les coefficients $a_{\mathbf{k}}$ et $b_{\mathbf{k}}$, en considérant $v = \Delta u$ et avec $h = 1$.

Dans le tableau 1, on répertorie tous les polynômes symétriques monomiaux selon leur degré. Leur nombre indiqué sur la dernière ligne donne le nombre d'équations portant sur les $a_{\mathbf{k}}$ et $b_{\mathbf{k}}$ pour chaque élévation de degré. Une nouvelle colonne p se construit en considérant le premier terme q , allant de p à 1, puis en le complétant avec les groupes commençant au plus par q dans la colonne $p - q$.

TABLEAU 1. Tableau récapitulatif de tous les polynômes symétriques monomiaux de degré inférieur ou égal à 5 en dimension quelconque. Une dimension finie d limite à d le nombre de termes dans les groupes.

degré	0	1	2	3	4	5
polynômes	\emptyset	1	2	3	4	5
			11	21	31	41
				111	22	32
					211	311
					1111	221
						2111
						11111
cardinalité	1	1	2	3	5	7

1.5. Développement de Taylor des sommes sur $\Sigma_{\mathbf{k}}$ exprimé dans la base des polynômes symétriques

Pour \mathbf{k} donné, on cherche à exprimer le développement de Taylor de $\sum_{\delta x \in \Sigma_{\mathbf{k}} h} u(\delta x)$ à l'aide des polynômes symétriques. Si on note $\sigma_{\mathbf{p}}$ le polynôme symétrique contenant $\partial_1^{p_1} \dots \partial_n^{p_n}$ avec $p_1 \geq p_2 \geq \dots \geq p_n \geq 1$ pour $n \geq 1$ et $\sigma_{\emptyset} = 1$, alors

$$\sum_{\delta x \in \Sigma_{\mathbf{k}} h} u(\delta x) = \sum_{p_1 \geq p_2 \geq \dots \geq p_d \geq 0} S_{\mathbf{k}}(\sigma_{2\mathbf{p}}(\partial_1, \dots, \partial_d)) \frac{h^{2\mathbf{p}}}{(2\mathbf{p})!} \sigma_{2\mathbf{p}}(\partial_1, \dots, \partial_d) u, \quad (12)$$

avec les valeurs de $S_{\mathbf{k}}(\sigma_{2\mathbf{p}})$ données par le lemme ci-dessous.

Lemme 2. Pour $n \geq 1$ le calcul de $S_{\mathbf{k}}(\sigma_{2\mathbf{p}}(\partial_1, \dots, \partial_d))$ peut se faire grâce à la formule :

$$S_{\mathbf{k}}(\sigma_{2\mathbf{p}}(\partial_1, \dots, \partial_d)) = S_{\mathbf{k}}(\partial_1^{2p_1} \dots \partial_n^{2p_n}) = 2^{\mathbf{k}} \sum_{i_1 \geq 1} \dots \sum_{i_n \geq 1} \left(\prod_{r=1}^n i_r^{2p_r} \right) C_{d-n}^{\mathbf{k} - \sum_{r=1}^n \mathbf{e}_{i_r}}, \quad (13)$$

avec $\mathbf{k} = (k_1, k_2, k_3, \dots)$ et (\mathbf{e}_i) la base canonique $\mathbf{e}_1 = (1, 0, \dots)$, $\mathbf{e}_2 = (0, 1, 0, \dots)$..., et avec $C_n^{\mathbf{k}}$ nul si l'un des termes n, k_i ou $n - \sum_i k_i$ est strictement négatif.

Preuve : Pour $i_1, i_2, \dots, i_n \geq 1$ fixés, on compte le nombre de points de $\Sigma_{\mathbf{k}}$ de type $(\pm i_1, \pm i_2, \dots, \pm i_n, i_{n+1}, \dots, i_d)$ et faisant donc apparaître un facteur $\prod_{r=1}^n i_r^{2p_r}$ devant le terme $\partial_1^{2p_1} \dots \partial_n^{2p_n}$ de son développement de Taylor. Il y a $2^{\mathbf{k}}$ possibilités produites par des changements de signe, et pour chaque $\ell \geq 1$ il reste $k_\ell - \text{Card}(\{r, i_r = \ell\})$ termes égaux à ℓ à placer dans les $d - n$ coordonnées (i_{n+1}, \dots, i_d) . D'où l'expression ci-dessus.

Cette expression a cela d'utile qu'elle est facile à implémenter et permet l'automatisation du calcul des $S_{\mathbf{k}}(\sigma_{2\mathbf{p}}(\partial_1, \dots, \partial_d))$.

1.6. Identification des termes pour l'équation $\Delta u = v$

Pour identifier les termes des développements de Taylor (en polynômes symétriques) de

$$\sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} \sum_{\delta x \in \Sigma_{\mathbf{k}} h} u(\delta x) \quad \text{et} \quad \sum_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} \sum_{\delta x \in \Sigma_{\mathbf{k}} h} v(\delta x) \quad (14)$$

on remplace v par $\Delta u = \sigma_1(\partial_1^2, \dots, \partial_d^2)u = \sum_{i=1}^d \partial_i^2 u$ dans son développement de Taylor ce qui revient à multiplier chaque polynôme symétrique de ce développement par $\sum_{i=1}^d \partial_i^2$.

Dans le tableau 2 on identifie les égalités entre les termes du développement de u en série de Taylor symétrique et ceux de v . D'abord on multiplie les polynômes symétriques issus de v par σ_1 puis on identifie les termes obtenus avec ceux de u . Enfin on met les polynômes symétriques du développement de Taylor de v en regard des termes correspondant dans le développement de Taylor de u avec, à côté, les différents facteurs.

Chaque ligne correspond donc à une condition sur les coefficients $a_{\mathbf{k}}$ et $b_{\mathbf{k}}$ sachant que si, sur une ligne, un polynôme symétrique a plus de composantes qu'il n'y a de dimensions, celle-ci disparaît. Ainsi en dimension 3, il y a 16 équations pour assurer l'ordre 10.

Par exemple la première ligne correspond à $\mathbf{p}(u) = \emptyset$ ou tout simplement la somme des coefficients devant u et donne :

$$\sum_{\mathbf{k}} S_{\mathbf{k}}(1) a_{\mathbf{k}} = 0, \quad (15)$$

la deuxième ligne, comme $\sigma_1 \times \sigma_{\emptyset} = \sigma_1$:

$$\sum_{\mathbf{k}} S_{\mathbf{k}}(\partial_1^2) a_{\mathbf{k}} = 2 \sum_{\mathbf{k}} S_{\mathbf{k}}(1) b_{\mathbf{k}}, \quad (16)$$

pour les lignes suivantes on remarque que $\sigma_1 \times \sigma_1 = \sigma_2 + 2\sigma_{11}$ et ce quelque soit le nombre de dimensions, aussi le troisième ligne nous donne :

$$\sum_{\mathbf{k}} S_{\mathbf{k}}(\partial_1^4) a_{\mathbf{k}} = 12 \sum_{\mathbf{k}} S_{\mathbf{k}}(\partial_1^2) b_{\mathbf{k}}, \quad (17)$$

et la quatrième ligne :

$$\sum_{\mathbf{k}} S_{\mathbf{k}}(\partial_1^2 \partial_2^2) a_{\mathbf{k}} = 4 \sum_{\mathbf{k}} S_{\mathbf{k}}(\partial_1^2) b_{\mathbf{k}}. \quad (18)$$

On peut enfin énoncer le résultat principal de cet article :

Théorème 1 (Mehrstellenverfahren d'ordre arbitraire en dimension quelconque). *Les coefficients $(a_{\mathbf{k}})$ et $(b_{\mathbf{k}})$ vérifiant les équations induites par le tableau 2 et sa suite et tels que :*

$$\sum_{\mathbf{k}} S_{\mathbf{k}} \left(\sum_{i=1}^d \partial_i^2 \right) a_{\mathbf{k}} \neq 0, \quad (19)$$

TABLEAU 2. Tableau des conditions sur les coefficients $c_{\mathbf{p}}$ des polynômes symétriques $\sigma_{\mathbf{p}}$ des développements de Taylor de u et v .

$(2\mathbf{p})!$	$\mathbf{p}(u)$		$\mathbf{p}(v)$	avec $(2\mathbf{p}(u))!/(2\mathbf{p}(v))!$
	ordre 2		$\sigma_1 \times \sigma_0 = \sigma_1$	
1	u		0	
2	$\mathbf{1}$		v	2
	ordre 4		$\sigma_1 \times \sigma_1 = \sigma_2 + 2\sigma_{11}$	
$4!$	$\mathbf{2}$		$\mathbf{1}$	12
4	$\mathbf{11}$	$\times 2$	$\mathbf{1}$	2
	ordre 6		$\sigma_1 \times \sigma_2 = \sigma_3 + \sigma_{21}$ $\sigma_1 \times \sigma_{11} = \sigma_{21} + 3\sigma_{111}$	
$6!$	$\mathbf{3}$		$\mathbf{2}$	30
$2 \cdot 4!$	$\mathbf{21}$		$\mathbf{2+11}$	$2+12$
8	$\mathbf{111}$	$\times 3$	$\mathbf{11}$	2
	ordre 8		$\sigma_1 \times \sigma_3 = \sigma_4 + \sigma_{31}$ $\sigma_1 \times \sigma_{21} = \sigma_{31} + 2\sigma_{22} + 2\sigma_{211}$ $\sigma_1 \times \sigma_{111} = \sigma_{211} + 4\sigma_{1111}$	
$8!$	$\mathbf{4}$		$\mathbf{3}$	56
$2 \cdot 6!$	$\mathbf{31}$		$\mathbf{3+21}$	$2+30$
$4!^2$	$\mathbf{22}$	$\times 2$	$\mathbf{21}$	12
$4 \cdot 4!$	$\mathbf{211}$		$\underbrace{\mathbf{21} + \mathbf{111}}_{\times 2}$	$2+12$
2^4	$\mathbf{1111}$	$\times 4$	$\mathbf{111}$	2
	ordre 10		$\sigma_1 \times \sigma_4 = \sigma_5 + \sigma_{41}$ $\sigma_1 \times \sigma_{31} = \sigma_{32} + \sigma_{41} + 2\sigma_{311}$ $\sigma_1 \times \sigma_{22} = \sigma_{32} + \sigma_{221}$ $\sigma_1 \times \sigma_{211} = \sigma_{311} + 2\sigma_{221} + 3\sigma_{2111}$ $\sigma_1 \times \sigma_{1111} = \sigma_{2111} + 5\sigma_{11111}$	
$10!$	$\mathbf{5}$		$\mathbf{4}$	90
$2 \cdot 8!$	$\mathbf{41}$		$\mathbf{4+31}$	$2+56$
$6! \cdot 4!$	$\mathbf{32}$		$\mathbf{31+22}$	$12+30$
$6! \cdot 4$	$\mathbf{311}$		$\underbrace{\mathbf{31} + \mathbf{211}}_{\times 2}$	$2+30$
$4!^2 \cdot 2$	$\mathbf{221}$		$\mathbf{22} + \underbrace{\mathbf{211}}_{\times 2}$	$2+12$
$8 \cdot 4!$	$\mathbf{2111}$		$\underbrace{\mathbf{211} + \mathbf{1111}}_{\times 3}$	$2+12$
2^5	$\mathbf{11111}$	$\times 5$	$\mathbf{1111}$	2

avec les $S_{\mathbf{k}}$ définis aux Lemmes 1 et 2, forment, dans Eq.(2), des schémas aux différences finies compacts d'ordre arbitraire et ce en dimension quelconque, pour la résolution de l'équation de Poisson $\Delta u = v$ sur grille cartésienne uniforme.

Preuve : Ce théorème découle de ce qui est exposé précédemment. Les fonctions u et v sont supposées très régulières, aussi les sommes (14) sont développées en séries de Taylor en regroupant les dérivées en polynômes symétriques monomiaux en ∂_i^2 .

L'identification de ces développements est donnée par le tableau 2. Si toutes ces conditions sont vérifiées, alors le reste est de degré au plus 12 ce qui, lorsqu'on divise par h^2 amène un ordre 10. Le tableau peut être continué pour assurer un ordre plus élevé.

Afin de résoudre $\Delta u = v$ et ne pas avoir $1/h^2 Au = O(h^2) = Bv$ pour tous u et v , on ajoute la condition Eq.(19) qui garantit que $1/h^2 Au = K \Delta u + O(h^2) = K v + O(h^2) = Bv$ avec $K \neq 0$. Par la suite on normera à $K = 1$.

2. CALCUL DES COEFFICIENTS DANS LE CAS GÉNÉRAL

Avant de faire le calcul de nouveaux schémas d'ordre élevé, on passe en revue différents schémas aux différences finies compacts sur grille uniforme cartésienne publiés antérieurement [1,5–9]. Le théorème 1 permet de retrouver ces schémas.

2.1. Schémas existants

2.1.1. Schéma d'ordre 6 en dimension 2

Pour $d = 2$, si on active les coefficients $a_0, a_1, a_2, b_0, b_1, b_2$ et b_{01} , les sept premières lignes du tableau 2 nous donne les six équations à vérifier :

$$a_0 + 4 * a_1 + 4 * a_2 = 0 \quad (20)$$

$$a_1 + 2 * a_2 = b_0 + 4 * b_1 + 4 * b_2 + 4 * b_{01} \quad (21)$$

$$a_1 + 2 * a_2 = 12 * b_1 + 24 * b_2 + 48 * b_{01} \quad (22)$$

$$a_2 = 2 * b_1 + 4 * b_2 + 8 * b_{01} \quad (23)$$

$$a_1 + 2 * a_2 = 30 * b_1 + 60 * b_2 + 480 * b_{01} \quad (24)$$

$$a_2 = b_1 + 14 * b_2 + 16 * b_{01} \quad (25)$$

auxquelles on ajoute, correspondant à $1/h^2 Au = \Delta u + O(h^2)$, pour être sûr de résoudre l'équation de Poisson et pour normaliser les coefficients :

$$2 * a_1 + 4 * a_2 = 2. \quad (26)$$

Les équations (20), (22)–6×(23) et (26) nous imposent :

$$a_0 = -\frac{10}{3}, \quad a_1 = \frac{2}{3}, \quad a_2 = \frac{1}{6}. \quad (27)$$

Par la suite il vient :

$$b_0 = \frac{119}{180}, \quad b_1 = \frac{7}{90}, \quad b_2 = \frac{1}{90}, \quad b_{01} = -\frac{1}{240}. \quad (28)$$

On remarque que si $v = 0$ on résoud l'équation de Laplace $\Delta u = 0$ à l'ordre 6 alors que pour une fonction régulière quelconque f , les coefficients (a_k) ne donnent qu'une approximation à l'ordre 2 de Δf .

Si au lieu d'activer b_{01} on avait activé a_{01} , on aurait obtenu le schéma présenté dans le livre de L. Collatz en annexe p 543 :

$$a_0 = -\frac{7}{3}, \quad a_1 = \frac{4}{15}, \quad a_2 = \frac{4}{15}, \quad a_{01} = \frac{1}{20} \quad (29)$$

et

$$b_0 = \frac{23}{45}, \quad b_1 = \frac{1}{9}, \quad b_2 = \frac{1}{90}. \quad (30)$$

2.1.2. Schéma d'ordre 6 en dimension 3 : le "HOC Stencil"

Pour $d = 3$, en activant les coefficients $a_0, a_1, a_2, a_3, b_0, b_1, b_2, b_3$ et b_{01} , les sept premières lignes du tableau 2 donnent les équations :

$$a_0 + 6 * a_1 + 12 * a_2 + 8 * a_3 = 0 \quad (31)$$

$$a_1 + 4 * a_2 + 4 * a_3 = b_0 + 6 * b_1 + 12 * b_2 + 8 * b_3 + 6 * b_{01} \quad (32)$$

$$a_1 + 4 * a_2 + 4 * a_3 = 12 * b_1 + 48 * b_2 + 48 * b_3 + 48 * b_{01} \quad (33)$$

$$a_2 + 2 * a_3 = 2 * b_1 + 8 * b_2 + 8 * b_3 + 8 * b_{01} \quad (34)$$

$$a_1 + 4 * a_2 + 4 * a_3 = 30 * b_1 + 120 * b_2 + 120 * b_3 + 480 * b_{01} \quad (35)$$

$$a_2 + 2 * a_3 = b_1 + 16 * b_2 + 28 * b_3 + 16 * b_{01} \quad (36)$$

$$a_3 = 3 * b_2 + 6 * b_3 \quad (37)$$

auxquelles on ajoute

$$2 * a_1 + 8 * a_2 + 8 * a_3 = 2 \quad (38)$$

La solution générale de ce système s'écrit :

$$a_0 = -\frac{64}{15}, \quad a_1 = \frac{7}{15}, \quad a_2 = \frac{1}{10}, \quad a_3 = \frac{1}{30}, \quad (39)$$

et pour $\beta \in \mathbb{R}$

$$b_0 = -8 * \beta + \frac{67}{120}, \quad b_1 = 4 * \beta + \frac{1}{18}, \quad b_2 = -2 * \beta + \frac{1}{90}, \quad b_3 = \beta, \quad b_{01} = -\frac{1}{240}. \quad (40)$$

Ce schéma, du moins pour les $(a_{\mathbf{k}})$ a été introduit dans [7] puis repris et agrémenté des $(b_{\mathbf{k}})$ dans [8].

2.1.3. Schémas d'ordre quatre en dimension quelconque

En dimension quelconque, l'ordre quatre est assuré par les quatre première lignes du tableau 2, c'est-à-dire pour $\mathbf{p}(u) = \emptyset, \mathbf{1}, \mathbf{2}$ et $\mathbf{11}$. Si seul le premier rang est activée $\mathbf{k} = (k_1) = (k)$ alors pour $\sigma_{2\mathbf{p}}$ le monôme symétrique contenant $\partial_1^{2p_1} \dots \partial_n^{2p_n}$

$$S_k(\sigma_{2\mathbf{p}}) = S_k^n = 2^k C_{d-n}^{k-n}. \quad (41)$$

Le tableau 2 nous donne alors les équations

$$\sum_{k=0}^d S_k^0 a_k = 0, \quad (42)$$

$$\sum_{k=1}^d S_k^1 a_k = 2 \sum_{k=0}^d S_k^0 b_k = 2, \quad (43)$$

$$\sum_{k=1}^d S_k^1 a_k = 12 \sum_{k=1}^d S_k^1 b_k, \quad (44)$$

$$\sum_{k=2}^d S_k^2 a_k = 4 \sum_{k=1}^d S_k^1 b_k. \quad (45)$$

Si on active les coefficients a_0, a_1, a_2, b_0 et b_1 on retrouve le schéma présenté dans l'ouvrage de Samarskii [6] p297 pour des tailles de maille différentes selon la direction et ramené dans le cas isotrope ici :

$$a_0 = \frac{d(d-7)}{3}, \quad a_1 = \frac{4-d}{3}, \quad a_2 = \frac{1}{6}, \quad (46)$$

et

$$b_0 = \frac{6-d}{6}, \quad b_1 = \frac{1}{12}. \quad (47)$$

Le souci avec ce schéma est que pour $d \geq 4$, $a_1 \leq 0$ ce qui gêne l'utilisation d'un solveur itératif de type Gauss-Seidel.

Le schéma suivant, tiré de l'ouvrage d'Iserles [6] (exercice 7.11 p134) évite ce problème en recourant au coefficient a_d à la place du coefficient a_2 :

$$a_0 = -\frac{2(2d+1)}{3}, \quad a_1 = \frac{2}{3}, \quad a_d = \frac{1}{3 \cdot 2^{d-1}}, \quad (48)$$

et toujours avec les mêmes b_k :

$$b_0 = \frac{6-d}{6}, \quad b_1 = \frac{1}{12}. \quad (49)$$

2.2. Conditions minimales sur les coefficients (a_k) de l'opérateur A

En considérant que dans l'équation (11) le membre de droite décrit $\sigma_{\mathbf{1}}(X_1, \dots, X_d)\Sigma[X]$ (avec $X_i = \partial_i^2$) et le membre de gauche $\Sigma[X]$, on en déduit les monômes qui imposeront des conditions sur les $a_{\mathbf{k}}$ uniquement : $\sigma_{\emptyset} = \mathbf{1}$, $\sigma_{\mathbf{11}}$, $\sigma_{\mathbf{111}}$ jusqu'à $\sigma_{\mathbf{1}\dots\mathbf{1}}$ avec autant de $\mathbf{1}$ que de dimensions et l'algèbre qu'ils engendrent, c'est-à-dire en ajoutant encore $\sigma_{\mathbf{11}}^2$, $\sigma_{\mathbf{11}}\sigma_{\mathbf{111}}$ etc.

Nous en déduisons qu'en dimension deux, il y a une condition sur les $a_{\mathbf{k}}$ pour avoir l'ordre 2 (portée par $\mathbf{1}$), deux pour les ordres 4 et 6 (portée par $\mathbf{1}$ et $\sigma_{\mathbf{11}}$) et trois pour les ordres 8 et 10 (ajout de $\sigma_{\mathbf{11}}^2$) alors qu'en dimension trois, il y en a une pour l'ordre 2 (portée par $\mathbf{1}$), deux pour l'ordre 4 (ajout de $\sigma_{\mathbf{11}}$), trois pour l'ordre 6 (ajout de $\sigma_{\mathbf{111}}$), quatre pour l'ordre 8 (ajout de $\sigma_{\mathbf{11}}^2$) et cinq pour l'ordre 10 (ajout de $\sigma_{\mathbf{11}}\sigma_{\mathbf{111}}$).

Selon les points $a_{\mathbf{k}}$ que nous choisissons d'activer ces conditions varient. En dimensions deux, l'activation du premier rang (\mathbf{k} n'a qu'un seul élément non nul, k_1) permet d'atteindre l'ordre 6. Les conditions associées sont données ci-dessous pour l'ordre deux :

$$a_0 + 4a_1 + 4a_2 = 0 \quad (50)$$

et pour les ordres quatre et six :

$$a_1 - 4a_2 = 0. \quad (51)$$

L'activation du deuxième rang permet d'atteindre l'ordre 10. La condition pour l'ordre deux devient :

$$a_0 + 4a_1 + 4a_2 + 4a_{01} + 8a_{11} + 4a_{02} = 0 \quad (52)$$

à quoi il faut ajouter pour les ordres quatre et six :

$$a_1 - 4a_2 + 16a_{01} - 14a_{11} - 64a_{02} = 0. \quad (53)$$

Pour atteindre les ordres huit et dix, il faut encore ajouter :

$$a_1 + 16a_2 + 256a_{01} - 1054a_{11} + 4096a_{02} = 0. \quad (54)$$

Ces équations conduisent à plusieurs schémas d'ordre dix présentés et testés dans [9].

En dimension trois, si seuls les points du premier rang ($\mathbf{k} = (k_1)$) sont activés, on atteint l'ordre deux pour :

$$a_0 + 6a_1 + 12a_2 + 8a_3 = 0 \quad (55)$$

l'ordre quatre en ajoutant :

$$a_1 - 2a_2 - 8a_3 = 0 \quad (56)$$

et l'ordre six grâce à l'adjonction de :

$$a_1 - 26a_2 + 64a_3 = 0. \quad (57)$$

Si ces trois conditions sont remplies on retrouve le ‘‘HOC Stencil’’ de la partie 2.1.2.

Si maintenant on active tous les points du premier et deuxièmes rangs ($\mathbf{k} = (k_1, k_2)$), on a les conditions :

$$a_0 + 6a_1 + 12a_2 + 8a_3 + 6a_{01} + 24a_{11} + 24a_{21} + 12a_{02} + 24a_{12} + 8a_{03} = 0, \quad (58)$$

$$a_1 - 2a_2 - 8a_3 + 16a_{01} + 20a_{11} - 36a_{21} - 32a_{02} - 156a_{12} - 128a_{03} = 0, \quad (59)$$

$$a_1 - 26a_2 + 64a_3 + 64a_{01} - 340a_{11} + 444a_{21} - 1664a_{02} + 1236a_{12} + 4096a_{03} = 0. \quad (60)$$

À ces conditions il faut ajouter pour atteindre l’ordre huit :

$$a_1 + 18a_2 + 32a_3 + 256a_{01} - 540a_{11} - 2076a_{21} + 4608a_{02} + 6084a_{12} + 8192a_{03} = 0 \quad (61)$$

et pour atteindre l’ordre dix :

$$a_1 - 2a_2 - 512a_3 + 1024a_{01} - 12580a_{11} + 25164a_{21} - 2048a_{02} + 59316a_{12} - 524288a_{03} = 0. \quad (62)$$

Bien sûr, il reste à déterminer les $b_{\mathbf{k}}$ qui se répartiront sur une aire bien plus grande que celle des $a_{\mathbf{k}}$.

On remarquera aussi qu’en dimension une, seule une condition demeure : celle issue du polynôme constant $\sigma_{\emptyset} = \mathbf{1}$.

Le théorème suivant indique que même si en augmentant le nombre de dimensions d on augmente le nombre de coefficients $a_{(k_1)}$ pour $0 \leq k_1 \leq d$ et pas le nombre d’équations à vérifier, l’ordre du solveur $Au = Bv$ est limité à six tant qu’on n’active que des coefficients du premier rang dans A ($\mathbf{k} = (k_1)$).

Théorème 2 (ordre inférieur ou égal à six pour les schémas aux différences finies strictement compacts). *Tout solveur de l’équation de Poisson reposant sur un schéma symétrique aux différences finies strictement compact, c’est-à-dire dont le stencil $a_{\mathbf{k}}$ n’utilise que des points du premier rang ($\mathbf{k} = (k_1)$) est au plus d’ordre six.*

Preuve : Pour calculer les coefficients $a_{\mathbf{k}}$ à partir de l’équation linéaire (11) on doit considérer le système linéaire engendré par la matrice des $(S_{\mathbf{k}}(\sigma_{\mathbf{p}}))_{\mathbf{p}, \mathbf{k}}$. Entre autre il faut annuler tous les coefficients devant les éléments de l’algèbre engendrée par les monômes $\sigma_{\emptyset} = \mathbf{1}$, σ_{11} , σ_{111} jusqu’à $\sigma_{1\dots 1}$ avec d $\mathbf{1}$.

Or le rang de la matrice $(S_{\mathbf{k}}(\sigma_{\mathbf{p}}))_{\mathbf{p}, \mathbf{k}} = (2^{k_1} C_{d-n}^{k_1-n})_{n, k_1}$ pour $\mathbf{k} = (k_1)$ est $n \leq d$. En dimension deux, $n = 2$ et on a donc une matrice de rang trois qui peut au maximum réaliser deux conditions de nullité : celle sur σ_{\emptyset} , celle sur σ_{11} mais pas celle sur σ_{11}^2 nécessaire pour passer à l’ordre huit. D’où la limite à l’ordre six.

De façon plus rigoureuse, le tableau 2 nous donne pour l’ordre huit les douze conditions :

$$c_{\emptyset}(u) = 0 \quad (63)$$

$$c_1(u) = 2c_{\emptyset}(v) \neq 0 \quad (64)$$

$$c_2(u) = 12c_1(v) \quad (65)$$

$$c_{11}(u) = 4c_1(v) \quad (66)$$

$$c_3(u) = 30c_2(v) \quad (67)$$

$$c_{21}(u) = 2c_2(v) + 12c_{11}(v) \quad (68)$$

$$c_{111}(u) = 6c_{11}(v) \quad (69)$$

$$c_4(u) = 56c_3(v) \quad (70)$$

$$c_{31}(u) = 2c_3(v) + 30c_{21}(v) \quad (71)$$

$$c_{22}(u) = 24c_{21}(v) \quad (72)$$

$$c_{211}(u) = 4c_{21}(v) + 12c_{111}(v) \quad (73)$$

$$c_{1111}(u) = 8c_{111}(v). \quad (74)$$

Pour $\mathbf{k} = (k_1)$ dans A , on a $c_1(u) = c_2(u) = c_3(u) = c_4(u) \neq 0$, $c_{11}(u) = c_{21}(u) = c_{31}(u) = c_{22}(u)$ et $c_{111}(u) = c_{211}(u)$.

En dimension quelconque supérieure ou égale à deux, les équations (65) et (66) donnent $c_2(u) = 3c_{11}(u)$ et les équations (70), (71) et (72), $c_{31}(u) = \frac{1}{28}c_4(u) + \frac{5}{4}c_{22}(u)$. Cela implique $c_1(u) = 0$ ce qui est exclu. D'où la limitation à l'ordre six.

En dimension deux, ces conditions sont les deux seules conditions portant sur les $a_{\mathbf{k}}$ avec $c_0(u) = 0$.

En dimension trois, $n = 3$, la matrice de rang quatre peut réaliser les conditions sur : σ_0 , σ_{11} et σ_{111} mais pas sur σ_{11}^2 . Comme montré précédemment les $a_{\mathbf{k}}$ ne peuvent réaliser l'ordre huit mais ils peuvent vérifier la nouvelle condition émergeant à l'ordre six : $c_{21}(u) = \frac{1}{15}c_3(u) + 2c_{111}(u)$.

En dimension quatre et plus, le nombre de conditions à vérifier rattrape le nombre de degrés de liberté pour passer de l'ordre six à huit. Pour vérifier les conditions de nullité sur σ_0 , σ_{11} , σ_{111} , σ_{1111} et σ_{11}^2 , on a $n = 4$ donc la matrice $(2^{k_1}C_{d-n}^{k_1-n})_{n,k_1}$ de rang cinq ne peut vérifier ces cinq conditions qu'en mettant toutes les lignes à zéro. Ce qui est exclu car on veut que la deuxième ligne qui correspond à σ_1 soit différente de zéro. D'où la limitation à l'ordre six.

2.3. Propriétés favorables pour appliquer la méthode de Gauss-Seidel

La méthode présentée en première partie et le théorème 1 permettent la conception d'un grand nombre de solveurs de type différences finies compact pour l'équation de Poisson. Selon le contexte, certaines propriétés de ces solveurs seront requises ou non : nombres n de rangs activés ($\mathbf{k} = (k_1, k_2, \dots, k_n)$), nombre de coefficients non nuls dans A ou dans B , signe et répartition des coefficients $a_{\mathbf{k}}$ ou encore possibilité de tensoriser le calcul de Au .

2.3.1. Nombre de points actifs dans A

Limiter le nombre de rangs activés à un ou deux a un impact sur les conditions aux bords, que ce soient les conditions aux bords non périodiques ou aux bords d'un domaine de raffinement. En dimension au moins deux, limiter \mathbf{k} à (k_1) pour A implique de limiter l'ordre du solveur à six quelque soit la dimension comme prouvé dans la section 2.2, et limiter aussi les coefficients de B au premier rang, restreint à quatre l'ordre maximal.

Afin de limiter la complexité des calculs, il peut être intéressant de minimiser le nombre de points actifs dans A . Pour chaque paramètre \mathbf{k} , le nombre d'éléments du groupe symétrique $\Sigma_{\mathbf{k}}$ est donné par le lemme 1 : $S_{\mathbf{k}}(1) = 2^{\mathbf{k}}C_d^{\mathbf{k}}$.

2.3.2. Signe des coefficients $a_{\mathbf{k}}$

Idéalement pour recourir à la méthode itérative de Gauss-Seidel dans la résolution du système (2), il faut $a_0 < 0$ le plus petit possible (grand possible en valeur absolue) et tous les autres coefficients $a_{\mathbf{k}} \geq 0$ pour $\mathbf{k} \neq 0$. Cela permet de bien conditionner la matrice A pour résoudre le système $Au = f = Bv$.

2.3.3. Répartition des coefficients

Afin de multiplier par deux la vitesse de convergence, on peut ne mettre à jour qu'une partie des valeurs à calculer dans u . On ne calculera que les nouvelles valeurs de u_{ij} pour $i + j$ pair puis pour $i + j$ impair. Cet ordre de calcul s'appelle rouge-noir ("red-black" en anglais) [4] par référence à la structure en damier des coefficients à parcourir. Pour que cette technique s'applique efficacement on pourra exiger des conditions du type $0 \leq a_2 \ll a_1$, voire $a_2 = 0$ pour conserver strictement les symétries du problème.

2.3.4. Possibilité de calculer Au en séparant les directions

Lorsque le nombre d de dimensions augmente, le nombre de points $S_{\mathbf{k}}(1) = 2^{\mathbf{k}}C_d^{\mathbf{k}}$ de $\Sigma_{\mathbf{k}}$ augmente de façon polynomiale de degré $\sum_i k_i$. Sommer une telle quantité de points peut se révéler assez pénible à implémenter. Une manière de faire est alors de tensoriser partiellement l'opérateur A direction par direction. Cela permet de réduire la complexité d'implémentation et éventuellement les temps de calcul.

2.4. Nouveau schéma en dimension deux

Un solveur de l'équation de Laplace d'ordre 18 est obtenu en activant deux rangs pour construire la matrice A : $a_0, a_1, a_2, a_{01}, a_{11}$ et a_{02} .

En plus des trois conditions (52), (53) et (54) de la section 2.2, pour obtenir un schéma d'ordre 14 il faut ajouter la combinaison linéaire suivante des lignes **6**, **51**, **42** et **33** de la suite du tableau 2 :

$$c_6(u) - 66 c_{51}(u) + 495 c_{42}(u) - 462 c_{33}(u) = 0 \quad (75)$$

ce qui donne :

$$a_1 - 64 * a_2 + 4096 * a_{01} + 23506 * a_{11} - 262144 * a_{02} = 0 \quad (76)$$

La dernière condition permettant de passer à l'ordre 18 est donnée par la combinaison des lignes **8**, **71**, **62**, **53** et **44** :

$$c_8(u) - 120 c_{71}(u) + 10920 c_{62}(u) - 48048 c_{53}(u) - 38610 c_{44}(u) = 0 \quad (77)$$

ce qui donne :

$$a_1 + 2726 * a_2 + 65536 * a_{01} + 20988226 * a_{11} + 178651136 * a_{02} = 0. \quad (78)$$

Si on ajoute la normalisation des coefficients par $\frac{1}{h^2} Au = \Delta u + o(h)$ qui se traduit par :

$$2 * a_1 + 4 * a_2 + 8 * a_{01} + 20 * a_{11} + 16 * a_{02} = 2, \quad (79)$$

on obtient les coefficients :

$$a_0 = -\frac{2838953}{817278}, \quad a_1 = \frac{889264}{1225917}, \quad a_2 = \frac{549184}{3677751}, \quad (80)$$

$$a_{01} = -\frac{18881}{2451834}, \quad a_{11} = \frac{392}{525393}, \quad a_{02} = -\frac{233}{2674728}. \quad (81)$$

2.5. Nouveau schéma en dimension trois

En dimension trois on atteint l'ordre dix lorsqu'on active les 59 coefficients correspondant à $a_0, a_1, a_2, a_3, a_{21}$ et a_{03} . En résolvant les cinq équations (58)–(62) on trouve alors pour A :

$$a_0 = -\frac{11755}{2814}, \quad a_1 = \frac{3152}{7035}, \quad a_2 = \frac{752}{7035}, \quad a_3 = \frac{29}{1407}, \quad (82)$$

$$a_{21} = \frac{4}{2345}, \quad a_{03} = \frac{1}{16080}. \quad (83)$$

Ces coefficients donnent une matrice A bien conditionnée pour appliquer la méthode de Gauss-Seidel : a_0 est le seul coefficient négatif.

Par ailleurs on active les 113 coefficients correspondant à $b_0, b_1, b_2, b_3, b_{01}, b_{11}, b_{02}, b_{03}, b_{001}, b_{101}, b_{0001}$. On trouve alors pour B :

$$b_0 = \frac{10666253}{20260800}, \quad b_1 = \frac{130433}{2170800}, \quad b_2 = \frac{160117}{15195600}, \quad b_3 = \frac{182}{45225}, \quad (84)$$

$$b_{01} = -\frac{17021}{2701440}, \quad b_{11} = -\frac{22}{37989}, \quad b_{02} = -\frac{743}{243129600}, \quad b_{03} = \frac{1013}{162086400}, \quad (85)$$

et

$$b_{001} = \frac{18883}{21273840}, \quad b_{101} = \frac{221}{4341600}, \quad b_{0001} = -\frac{10781}{141825600}. \quad (86)$$

2.6. Nouveaux schémas en dimension quatre et plus

Dans ce paragraphe, on va calculer explicitement les coefficients des opérateurs A et B formant un schéma aux différences finies compact d'ordre six dans l'expression (2) en dimension d quelconque. On va en quelque sorte généraliser à la dimension quelconque le *HOC stencil* de la dimension trois. Ce faisant on montrera la nécessité d'activer le deuxième rang des coefficients dans B (ou dans A mais c'est moins intéressant) pour passer de l'ordre quatre à l'ordre six. On donnera aussi une solution partiellement tensorisée pour A qui présente de nombreux intérêts pratiques.

On cherche des solutions A et B du problème (2) avec des coefficients $a_{\mathbf{k}}$ et $b_{\mathbf{k}}$ répartis de façon symétrique. On n'active que les coefficients du premier rang pour $a_{\mathbf{k}}$ c'est-à-dire a_k avec $0 \leq k \leq d$ et on active aussi b_k pour $0 \leq k \leq d$ et b_{01} .

Les lemmes 1 et 2 permettent de calculer explicitement les coefficients $S_k(\sigma_{\mathbf{p}})$ pour $0 \leq k \leq d$, $0 \leq n \leq d$ et $\mathbf{p} = (p_1, p_2, \dots, p_n) \in \mathbb{N}^{*n}$:

$$S_k(\sigma_{\mathbf{p}}) = S_k^n = 2^k C_{d-n}^{k-n}, \quad (87)$$

de même que $S_{01}(1) = 2d$, $S_{01}(\partial_1^2) = 8$, $S_{01}(\partial_1^4) = 32$ et $S_{01}(\partial_1^2 \partial_2^2) = 0$ pour $\mathbf{k} = (k_1, k_2) = (0, 1)$.

Les sept premières lignes du tableau 2 nous donnent les équations (20), (21), (22) et (23) auxquelles il faut ajouter, pour les trois dernières, le terme en b_{01} :

$$\sum_{k=1}^d S_k^1 a_k = 2 \sum_{k=0}^d S_k^0 b_k + 2S_{01}^0 b_{01} = 2, \quad (88)$$

$$\sum_{k=1}^d S_k^1 a_k = 12 \sum_{k=1}^d S_k^1 b_k + 12S_{01}(\partial_1^2) b_{01}, \quad (89)$$

$$\sum_{k=2}^d S_k^2 a_k = 4 \sum_{k=1}^d S_k^1 b_k + 4S_{01}(\partial_1^2) b_{01} \quad (90)$$

pour l'ordre quatre, plus

$$\sum_{k=1}^d S_k^1 a_k = 30 \sum_{k=1}^d S_k^1 b_k + 30S_{01}(\partial_1^4) b_{01}, \quad (91)$$

$$\sum_{k=2}^d S_k^2 a_k = 2 \sum_{k=1}^d S_k^1 b_k + 2S_{01}(\partial_1^4) b_{01} + 12 \sum_{k=2}^d S_k^2 b_k + 12S_{01}(\partial_1^2 \partial_2^2) b_{01}, \quad (92)$$

$$\sum_{k=3}^d S_k^3 a_k = 6 \sum_{k=2}^d S_k^2 b_k + 6S_{01}(\partial_1^2 \partial_2^2) b_{01}, \quad (93)$$

pour passer à l'ordre six.

Si on fait l'opération $5 \times (89) - 2 \times (91)$, on obtient directement le coefficient b_{01} :

$$b_{01} = -\frac{1}{240}. \quad (94)$$

Celui-ci est forcément différent de zéro, ce qui montre qu'il n'y a pas de schéma symétrique strictement compact pour A et pour B d'ordre six.

En considérant (15), (88) et en faisant (89)–3×(90) et 15×(92)–30×(93)–(91), on obtient les équations sur les a_k :

$$\sum_{k=0}^d S_k^0 a_k = 0, \quad (95)$$

$$\sum_{k=1}^d S_k^1 a_k = 2, \quad (96)$$

$$\sum_{k=1}^d S_k^1 a_k = 3 \sum_{k=2}^d S_k^2 a_k, \quad (97)$$

$$15 \sum_{k=2}^d S_k^2 a_k = 30 \sum_{k=3}^d S_k^3 a_k + \sum_{k=1}^d S_k^1 a_k. \quad (98)$$

On obtient alors, en résolvant ce système puis en remplaçant les S_k^n par leur expression :

$$\sum_{k=0}^d 2^k C_d^k a_k = 0, \quad \sum_{k=1}^d 2^k C_{d-1}^{k-1} a_k = 2, \quad \sum_{k=2}^d 2^k C_{d-2}^{k-2} a_k = \frac{2}{3}, \quad \sum_{k=3}^d 2^k C_{d-3}^{k-3} a_k = \frac{4}{15}. \quad (99)$$

Pour $d \leq 9$ on minimise le nombre de points du stencil de A en activant a_0 , a_1 , a_2 et a_d . Ce choix nous donne alors :

$$a_0 = \frac{3d^2 - 29d - 4}{15}, \quad a_1 = \frac{16 - 3d}{15}, \quad a_2 = \frac{1}{10}, \quad a_d = \frac{2^{2-d}}{15}. \quad (100)$$

On remarque que pour $d \geq 6$, a_1 devient négatif ce qui est gênant pour la méthode de Gauss-Seidel. De même pour $d \geq 10$, a_0 devient positif, ce qui est encore plus gênant.

Pour le choix des b_k , on active b_0 , b_1 et b_2 en plus de b_{01} . Les équations (93) puis (90) et enfin (88) amènent alors :

$$b_0 = \frac{8d^2 - 77d + 360}{360}, \quad b_1 = \frac{11 - 2d}{90}, \quad b_2 = \frac{1}{90}, \quad b_{01} = -\frac{1}{240}. \quad (101)$$

Comme le nombre de points du stencil augmente considérablement avec la dimension, on considère ci-dessous un opérateur A ayant un stencil du type :

$$A = \alpha [p \ 1 \ p]^d + \begin{array}{c} \gamma \\ | \\ \gamma - \beta - \gamma \\ | \\ \gamma \end{array} \quad (102)$$

c'est-à-dire

$$a_0 = \alpha + \beta, \quad a_1 = \alpha p + \gamma, \quad \text{et} \quad a_k = \alpha p^k \quad \text{pour} \quad k \geq 2. \quad (103)$$

Les équations (99) nous donnent alors

$$\sum_{k=0}^d 2^k C_d^k a_k = \alpha \sum_{k=0}^d C_d^k (2p)^k + 2d\gamma + \beta = \alpha(1 + 2p)^d + 2d\gamma + \beta = 0, \quad (104)$$

$$\sum_{k=1}^d 2^k C_{d-1}^{k-1} a_k = 2\alpha p \sum_{k=1}^d C_{d-1}^{k-1} (2p)^{k-1} + 2\gamma = 2\alpha p(1 + 2p)^{d-1} + 2\gamma = 2, \quad (105)$$

$$\sum_{k=2}^d 2^k C_{d-2}^{k-2} a_k = 4\alpha p^2 \sum_{k=2}^d C_{d-2}^{k-2} (2p)^{k-2} = 4\alpha p^2 (1+2p)^{d-2} = \frac{2}{3} \quad (106)$$

et

$$\sum_{k=3}^d 2^k C_{d-3}^{k-3} a_k = 8\alpha p^3 \sum_{k=3}^d C_{d-3}^{k-3} (2p)^{k-3} = 8\alpha p^3 (1+2p)^{d-3} = \frac{4}{15}. \quad (107)$$

En divisant (107) par (106), on obtient $\frac{2p}{1+2p} = \frac{2}{5}$ et ainsi

$$p = \frac{1}{3}. \quad (108)$$

En réintroduisant cette quantité dans (106) on obtient $\frac{4}{9}\alpha \left(1 + \frac{2}{3}\right)^{d-2} = \frac{2}{3}$ et ainsi

$$\alpha = \frac{3}{2} \left(\frac{3}{5}\right)^{d-2}, \quad a_k = \frac{3^{d-k-1}}{2 \cdot 5^{d-2}} \quad \text{pour } 2 \leq k \leq d. \quad (109)$$

En remplaçant p et α par ces valeurs dans (105) on obtient γ :

$$\gamma = \frac{1}{6}. \quad (110)$$

Ce qui donne :

$$a_1 = \frac{1}{6} + \frac{1}{2} \left(\frac{3}{5}\right)^{d-2}. \quad (111)$$

Enfin, l'équation (104) permet de calculer β :

$$\beta = -\frac{25+2d}{6}. \quad (112)$$

Ce qui donne :

$$a_0 = \frac{3}{2} \left(\frac{3}{5}\right)^{d-2} - \frac{25+2d}{6}. \quad (113)$$

On vérifie qu'on obtient bien le *HOC stencil* pour $d = 3$.

Le nombre d'opérations dans le cas minimisant le nombre de points du stencil (100) est $1 + 2d^2 + 2^d$ par point pour chaque itération de la méthode de Gauss-Seidel contre $1 + 5d$ opérations dans le cas tensorisé (102). Même en prenant en compte le fait qu'on ne peut utiliser le parcours en damier dans le dernier cas (ce qui ajoute un facteur 2), le cas tensorisé (102) reste plus intéressant que le cas (100) dès que $d \geq 4$. De plus il est beaucoup plus facile à implémenter et mieux conditionné.

À ces (a_k) on peut associer les $(b_{\mathbf{k}})$ du cas non tensoriel des expressions (101) ou bien une version tensorisée par exemple de la forme :

$$B = \omega [q \ 1 \ q]^d + \begin{array}{c} b_{01} \\ | \\ 0 \\ | \\ b_{01} - 0 - \lambda - 0 - b_{01} \\ | \\ 0 \\ | \\ b_{01} \end{array} \quad (114)$$

qui correspond à $b_0 = \lambda + \omega$ et $b_k = \omega q^k$ pour $k \geq 1$.

En réinjectant tout ce qui a déjà été calculé, et entre autres $b_{01} = -\frac{1}{240}$, on obtient les conditions :

$$\sum_{k=0}^d 2^k C_d^k b_k = 1 + \frac{d}{120}, \quad (115)$$

$$\sum_{k=1}^d 2^k C_{d-1}^{k-1} b_k = \frac{1}{5}, \quad (116)$$

$$\sum_{k=2}^d 2^k C_{d-2}^{k-2} b_k = \frac{2}{45}. \quad (117)$$

On résoud ces équations comme on l'a fait précédemment pour les (a_k) et on trouve :

$$q = \frac{1}{7}, \quad \omega = \frac{9}{10} \left(\frac{7}{9}\right)^d \quad \text{et} \quad \lambda = \frac{1}{10} + \frac{d}{120}. \quad (118)$$

Cela correspond à

$$b_0 = \frac{1}{10} + \frac{d}{120} + \frac{9}{10} \left(\frac{7}{9}\right)^d \quad \text{et} \quad b_k = \frac{9}{10} \left(\frac{7}{9}\right)^d \frac{1}{7^k} \quad \text{pour } k \geq 1. \quad (119)$$

3. EXPÉRIENCES NUMÉRIQUES

On teste les schémas obtenus dans les parties 2.5 et 2.6 : d'abord le schéma d'ordre dix en dimension trois puis le schéma tensorisé d'ordre six en dimensions deux, trois, quatre, cinq et six. À l'aide de ces schémas aux différences finies compacts on résoud l'équation : $\Delta u = v$ sur $[0, 1]^d$ avec conditions de bord périodiques pour :

$$v(\mathbf{x}) = \prod_{i=1}^d \sin(2\pi x_i + 1). \quad (120)$$

On compare le résultat avec la solution exacte :

$$u(\mathbf{x}) = -\frac{1}{4\pi^2 d} \prod_{i=1}^d \sin(2\pi x_i + 1). \quad (121)$$

Et on trace l'erreur obtenue.

La convergence vers la solution numérique des schémas compacts se fait par une méthode de Gauss-Seidel avec des algorithmes multigrilles tels qu'exposés dans [4] et [2]. Le taux de convergence par itération de la méthode de Gauss-Seidel reste proche de 0.2 : à chaque itération de la méthode de Gauss-Seidel le résidu est divisé par cinq environ. Il faut donc une vingtaines d'itérations pour converger à la précision machine.

3.1. Test du schéma d'ordre dix en dimension trois

Pour faire ce test on utilise le code et les algorithmes développés pour [2]. Ce code inclut l'implémentation d'une octree très pratique pour le test d'un schéma nécessitant une méthode multigrille. Aller chercher les 113 points voisins pour le stencil B et les 59 points voisins pour le stencil A demande un certain soin mais s'implémente sans grosse difficulté finalement. Afin de ne pas compliquer la tâche, on se contente d'un cas test simple, sans condition aux bords ni raffinement de maillage. On décrira et testera ces extensions qui justifient la montée en ordre et en dimension des schémas aux différences finies compacts, dans un second article. Ces extensions reprendront pour l'essentiel le cas de la dimension deux et de l'ordre quatre présenté dans [2].

La convergence à l'ordre dix est parfaitement vérifiée, voir Figure 1.

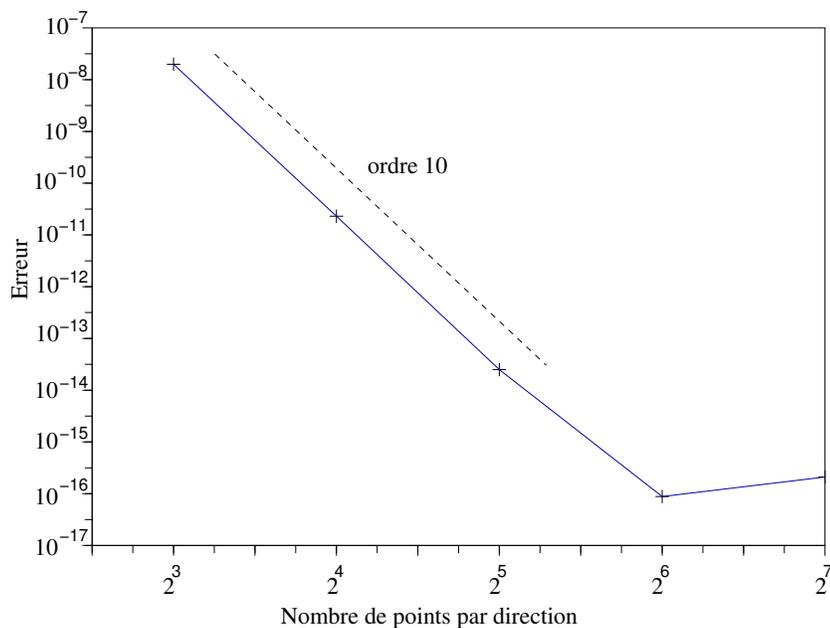


FIGURE 1. Test de l'ordre du schéma d'ordre dix en dimension trois présenté en partie 2.5. Chaque fois que h est divisé par deux, l'écart à la solution exacte est divisé par mille en norme infinie. Et ce jusqu'à la précision machine.

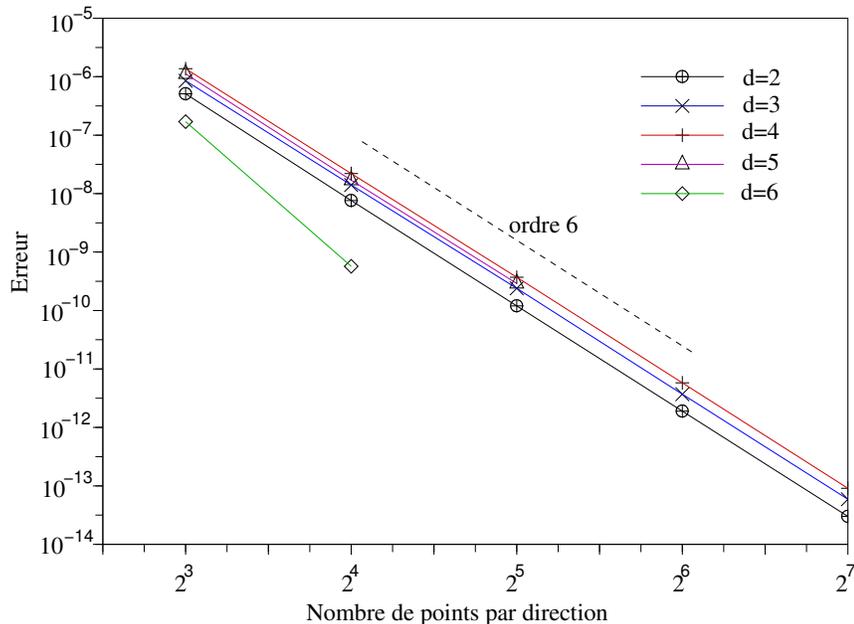


FIGURE 2. Test de l'ordre des schémas d'ordre six en dimensions quelconques présentés en partie 2.6.

3.2. Test du schéma tensorisé d'ordre six en dimension quelconque

Le code de [2] permet de se placer en dimension quelconque entre une et six. On en profite pour tester l'ordre de convergence du schéma tensorisé de la partie 2.6 théoriquement d'ordre six.

Sur la Figure 2 on observe bien l'ordre de convergence attendu c'est-à-dire l'ordre six sauf en dimension six pour laquelle il y a une sorte d'hyperconvergence. Cependant dans ce dernier cas le faible nombre d'échantillons ne nous permet pas de nous prononcer.

CONCLUSION

Dans cet article on a présenté une méthode originale recourant à l'algèbre des polynômes symétriques plutôt qu'aux approximants de Padé [8]. Ce faisant on a découvert des schémas d'ordre élevé avec une relative facilité. Puis on les a testés de façon concluante dans la partie 3 consacrée aux expériences numériques.

La montée en ordre pour une équation aussi fondamentale que l'équation de Poisson est intéressante dans de nombreux domaines de la physique tels la reconnexion magnétique [2] ou la chimie *ab initio* [3] où la qualité des solutions dépend de façon cruciale de la grande précision des calculs.

L'utilisation de ces solveurs d'ordre élevé conjointement à des schémas de raffinement de maillage adaptatif et des algorithmes multigrilles [2,10] ouvrent des perspectives pour traiter des problèmes de la physique nécessitant du calcul intensif. Il est aussi possible d'appliquer la même méthode à d'autres opérateurs que le Laplacien comme le Bilaplacien pour obtenir des schémas originaux [1].

RÉFÉRENCES

- [1] L. COLLATZ, *The numerical treatment of differential equations*, book, Springer-Verlag Berlin 1966.
- [2] D. DEL SARTO, E. DERIAZ, *A multigrid AMR algorithm for the study of magnetic reconnection*, à paraître dans Journal of Computational Physics, 2017.
- [3] L. GENOVESE, T. DEUTSCH, S. GOEDECKER, *Efficient and accurate three-dimensional Poisson solver for surface problems*, Journal of Chemical Physics **127**, 054704, 2007.
- [4] W. HACKBUSCH, *Multi-grid methods and applications*, book, Springer-Verlag, 1985.
- [5] A. ISERLES, *A First Course in the Numerical Analysis of Differential Equations*, in book, Cambridge University Press, 1996.
- [6] A. A. SAMARSKII, *The Theory of Difference Schemes*, book, CRC Press, 2001.
- [7] W. F. SPOTZ AND G. F. CAREY, *High-order compact finite difference methods*, book, Proceedings of ICOSAM'95, 397-408, 1995.
- [8] G. SUTMANN, *Compact finite difference schemes of sixth order for the Helmholtz equation*, Journal of Computational and Applied Mathematics **203**(1) 15-31, 2007.
- [9] H. YSERENTANT, *Die Mehrstellenformeln für den Laplaceoperator*, Numer. Math. **34**(2) 171-187, 1980.
- [10] JUN ZHANG, *Multigrid Method and Fourth-Order Compact Scheme for 2D Poisson Equation with Unequal Mesh-Size Discretization*, Journal of Computational Physics **179** 170-179, 2002.