Note aux C. R. Acad. Sci. Paris, Analyse numérique

Factorisation sur bases d'ondelettes du noyau de la chaleur et algorithmes matriciels rapides associés

Philippe CHARTON * Valérie PERRIER *

24 mai 1995

Résumé

Nous présentons une méthode numérique pour résoudre l'équation de la chaleur et l'équation de Poisson en deux dimensions, basée sur une factorisation du noyau de la chaleur sur bases d'ondelettes tensorielles. Le schéma proposé est implicite, et il s'appuie sur des produits matrice-matrice rapides associés à une accélération en temps, grâce aux propriétés de la décomposition en ondelettes. Des tests numériques comparatifs sur l'équation de la chaleur et l'équation de Poisson 2D périodiques valident la méthode.

Wavelet bases factorization of the heat kernel and associated fast matrix algorithms.

Abstract

We introduce a numerical method to solve the two-dimensional heat and Poisson equations, based on a factorization of the heat kernel on tensorial wavelet bases. The scheme is implicit and is based on fast matrix-matrix products associated with a time acceleration, thanks to the wavelet decomposition properties. The method is validated by numerical tests.

Abridged English Version – This paper is devoted to a numerical method for solving the two-dimensional heat and Poisson equations. The scheme is divided into four steps:

1. Starting from the bidimensional heat equation:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \nu \Delta u = f(x,y), \tag{1}$$

with periodic boundary conditions on $[0,1]^2$, we propose the following factorization to approximate the discrete heat kernel :

$$\text{For small } \alpha, \qquad (1-\alpha\Delta) \approx (1-\alpha\frac{\partial^2}{\partial x^2})(1-\alpha\frac{\partial^2}{\partial y^2}) \tag{2}$$

from which two time schemes are derived (let δt denote the time step and $u^n(x,y) \approx u(x,y,n\delta t)$):

$$\text{Scheme A : } (1-\nu\delta t\frac{\partial^2}{\partial x^2})(1-\nu\delta t\frac{\partial^2}{\partial y^2})u^{n+1} = u^n + \delta t f \tag{3}$$

Scheme B :

$$(1-\nu\frac{\delta t}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2})(1-\nu\frac{\delta t}{2}\frac{\partial^2}{\partial y^2})u^{n+1} = (1+\nu\frac{\delta t}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2})(1+\nu\frac{\delta t}{2}\frac{\partial^2}{\partial y^2})u^n + \delta t f \tag{4}$$

*. Laboratoire d'Analyse, Géométrie et Applications, UA 742 Institut Galilée, Université Paris Nord, Av J.B. Clément, 93430 Villetaneuse et Laboratoire de Météorologie Dynamique, E.N.S., 24 rue Lhomond, 75231 Paris cedex 05.

2. The space approximation is performed by the projection of (3) and (4) on tensorial bases, constructed by tensor products of one-dimensional basis (for example a classical 1D finite element basis). The linear system obtained from equations (3) or (4) is then equivalent to a set of one-dimensional linear systems, which lead to a matrix formulation of the schemes:

$$U^{n+1} = B\ U^n\ {}^tB + \delta t\ C\ F\ {}^tC \tag{5}$$

where U^n denote the discretized solution $u^n(x,y)$; B, C the discretized operators coming from (3) or (4) and F the discretized right hand side of (1) (see equation (11)).

3. System (5) is transformed through a 2D discrete tensorial wavelet decomposition: Then the matrices in formula (5) become sparse, in the sense that a large number of coefficients are less than a fixed threshold. This comes from the properties of the wavelet bases to "well represent" Calderòn-Zygmund operators, and almost-everywhere regular functions (see [4, 3]).

   The matrix-matrix products can now be fast computed, by neglecting coefficients less than the threshold.

4. Finally the scheme (5) can be sped-up in time by considering iterated powers of matrix B: B^p, which are sparser than B. The computation of U^n is then restricted to $\log(n)$ steps, which takes less and less CPU time for larger n.

   Section 4 is devoted to numerical tests, which show evidence of accuracy and cost of the numerical solution, in terms of time-steps and threshold on matrix coefficients, for schemes A and B.

In conclusion, the scheme B is particularly accurate and efficient (compared to finite different methods); it can be extended for higher dimensions and for Dirichlet boundary conditions. This note is an essential first step for discretized 2D incompressible Navier-Stokes equations on wavelet bases in terms of vorticity-stream function.

1 Introduction

La résolution numérique de l'équation de la chaleur et de l'équation de Poisson en dimension deux est une première étape essentielle pour définir un schéma, utilisant les bases d'ondelettes, associé aux équations de Navier-Stokes bidimensionnelles incompressibles. La méthode proposée dans cette note est une méthode matricielle qui s'appuie sur la propriété de la transformée en ondelettes de rendre certaines matrices creuses. Elle comporte quatre étapes : la première est une factorisation de l'opérateur de la chaleur en opérateurs monodimensionnels. Cette factorisation associée à l'emploi de bases tensorielles pour la discrétisation en espace (deuxième étape), permet une écriture du schéma de résolution sous forme de produits de matrices. La troisième étape consiste à rendre ces matrices creuses par décomposition en ondelettes, permettant des produits rapides. La dernière étape est une accélération en temps du schéma, utilisant la lacunarité des opérateurs discrets itérés.

Les deux premières étapes sont inspirées des méthodes de directions alternées implicites (ADI) (voir par exemple [5]). Associées à la transformée en ondelettes, elles conduisent à un algorithme performant et parallélisable, pour l'équation de la chaleur. La solution de l'équation de Poisson est donnée par la solution stationnaire de l'équation de la chaleur, en quelques itérations du schéma accéléré.

Les tests numériques ont été effectués pour des conditions aux limites périodiques, mais la méthode s'applique également pour des conditions aux limites de type Dirichlet en utilisant des ondelettes adaptées.

2 Factorisation de l'opérateur de la chaleur et discrétisations

Partant de l'équation de la chaleur bidimensionnelle :

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \nu \Delta u = f(x,y), \tag{6}$$

avec conditions aux limites périodiques sur $[0,1]^2$, nous proposons une approximation par factorisation de l'opérateur de la chaleur 2D discret en deux opérateurs monodimensionnels :

$$\text{Pour } \alpha \text{ petit,} \qquad (1-\alpha\Delta) \approx (1-\alpha\frac{\partial^2}{\partial x^2})(1-\alpha\frac{\partial^2}{\partial y^2}) \tag{7}$$

2.1 Schémas en temps

Soit δt un pas de discrétisation temporelle et $u^n(x,y) \approx u(x,y,n\delta t)$ une solution approchée de (6) au temps $n\delta t$. Deux schémas implicites en temps inspirés respectivement des schémas d'Euler et Crank-Nicolson sont appliqués à l'équation (6) qui devient en utilisant la factorisation (7) :

$$\text{Schéma A : } (1-\nu\delta t\frac{\partial^2}{\partial x^2})(1-\nu\delta t\frac{\partial^2}{\partial y^2})u^{n+1} = u^n + \delta t f \tag{8}$$

Schéma B :

$$(1-\nu\frac{\delta t}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2})(1-\nu\frac{\delta t}{2}\frac{\partial^2}{\partial y^2})u^{n+1} = (1+\nu\frac{\delta t}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2})(1+\nu\frac{\delta t}{2}\frac{\partial^2}{\partial y^2})u^n + \delta t f \tag{9}$$

On démontre facilement par une analyse de Von Neumann le théorème :

Théorème. *Les schémas A et B sont inconditionnellement stables, de précision respective $O(\nu\delta t)$ et $O(\nu\delta t)^2$.*

2.2 Approximation en espace sur bases tensorielles : écriture matricielle

Soit $(\psi_r)_{1\leq r\leq N}$, une base de fonctions périodiques engendrant un sous espace V_N de dimension finie N de $L^2(0,1)$, et soit P_1 la projection orthogonale de $L^2(0,1)$ sur V_N. L'approximation en espace des schémas A et B est effectuée par projection des équations (8) et (9) sur l'espace $V_N \otimes V_N$. Soit P_2 la projection orthogonale de $L^2(0,1)^2$ sur $V_N \otimes V_N$, nous introduisons les notations suivantes :

- Soit U^n et F les matrices de coefficients des fonctions $P_2 u^n(x,y)$ et $P_2 f(x,y)$ dans la base $(\psi_r(x)\psi_s(y))_{1\leq r,s\leq N}$.
- Soit $A_{\delta t}$ la matrice de l'opérateur **monodimensionnel** $P_1(1-\nu\delta t\Delta)P_1$ dans la base $(\psi_r)_{1\leq r\leq N}$.

Les équations (8) et (9) sont alors découplées en plusieurs systèmes monodimensionnels qui s'écrivent sous forme matricielle, par exemple pour le schéma A :

$$A_{\delta t}\ U^{n+1}\ {}^t A_{\delta t} = U^n + \delta t F \tag{10}$$

Le schéma (10) est équivalent à la résolution de N systèmes linéaires d'ordre N sur les lignes, puis N systèmes sur les colonnes de la matrice U^n.

A cette étape, le choix de la base (ψ_r) est déterminant : si (ψ_r) est une base tensorielle d'éléments finis standard 1D (ce qui inclut les schémas aux différences finies), $A_{\delta t}$ étant une matrice diagonale-bande, ces résolutions s'effectuent efficacement par factorisation LU. Si (ψ_r) est une base d'ondelettes, il sera plus astucieux de calculer directement $A_{\delta t}^{-1}$ (voir sections 3 et 4). D'où l'écriture des schémas A et B projetés dans $V_N \otimes V_N$:

$$U^{n+1} = B\ U^n\ {}^t B + \delta t\ C\ F\ {}^t C \tag{11}$$

où $B = C = A_{\delta t}^{-1}$ pour le schéma A, $B = A_{\frac{\delta t}{2}}^{-1} A_{-\frac{\delta t}{2}}$, $C = A_{\frac{\delta t}{2}}^{-1}$ pour le schéma B.

3 Accélération de la résolution par utilisation des bases d'ondelettes

La propriété de double localisation (en temps et en fréquence) des bases d'ondelettes va permettre la compression des matrices intervenant dans le schéma (11). Afin de réduire la complexité d'une itération, nous appliquons à (11) une transformée en ondelettes discrète, soit Q la matrice de changement de base orthonormée (de R^N) associée, U^n est transformé en $\tilde{U}^n = Q\ U^n\ {}^tQ$, de même pour $B,\ C$ et F.

3.1 Compression des opérateurs et de la solution, complexité théorique

Le produit matriciel $\tilde{B}\tilde{U}^n$ pourra s'effectuer de façon rapide si les matrices $\tilde{B}$ et $\tilde{U}^n$ sont creuses, c'est à dire si beaucoup de coefficients de ces matrices sont inférieurs à un seuil ϵ fixé.

La matrice $\tilde{U}^n$ représente les coefficients d'ondelettes (en dimension deux) de la solution u^n. L'amplitude de ces coefficients est directement liée à la régularité locale et globale de u^n [3, 4]. Plus la fonction u^n présente de singularités, plus le nombre de coefficients significatifs est important. Dans le cas de l'équation de la chaleur dont la solution est $\mathcal{C}^\infty$, ce nombre est très petit (voir section 4).

La matrice $\tilde{A}_{\delta t}^{-1}$ représente l'opérateur $(1-\nu\delta t\Delta)^{-1}$ (en dimension un) projeté sur une base d'ondelette discrète. C'est un opérateur de Calderón-Zygmund (ainsi que celui utilisé dans le schéma B), pour lequel les bases d'ondelettes sont particulièrement bien adaptées, dans le sens où la matrice $\tilde{A}_{\delta t}^{-1}$ est « presque diagonale » (voir [4]).

Une étude numérique précise de la lacunarité de $\tilde{B}$ en fonction de l'ordre de la matrice et du choix de la base d'ondelettes a été effectuée dans [1] pour permettre un choix optimal du seuil ϵ.

La complexité théorique d'une itération en temps est alors de $O(c\ P)$ opérations où c est le nombre moyen d'éléments considérés comme non nuls d'une ligne de la matrice $\tilde{B}$, et P le nombre de coefficients considérés comme non nuls de $\tilde{U}^n$. Ce chiffre est à comparer avec celui obtenu dans le cas des différences finies, à savoir $O(l\ N^2)$ (factorisation LU), où l est la largeur de bande de $A_{\delta t}$ et N l'ordre de la matrice U^n (voir section 4).

3.2 Accélération en temps par compression des opérateurs itérés

La matrice itérée $(\tilde{A}_{\delta t}^{-1})^n$ pour n assez grand, est beaucoup plus creuse que $\tilde{A}_{\delta t}^{-1}$; cette propriété est vraie pour une décomposition sur base d'ondelettes (figure 1b), l'effet contraire se produit en différences finies.

Pour ne pas alourdir le texte, nous conservons les notations $U^n = \tilde{U}^n$, de même pour $B,\ C$ et F. Le schéma (11) écrit en base d'ondelettes peut être accéléré en temps, en posant :

$$F^1 = \delta t\ C\ F\ {}^tC \quad , \quad U^1 = B\ U^0\ {}^tB + F^1$$

$$\text{Pour } p \geq 1, \begin{cases} U^{2p} = B^p\ U^p\ {}^tB^p + F^p \\ F^{2p} = B^p\ F^p\ {}^tB^p + F^p \\ B^{2p} = B^p\ B^p \end{cases} \tag{12}$$

<u>Remarque</u>: Si $U^0 = 0, F^p = U^p$.
Le coût du calcul de U^n se réduit alors à $O(\log(n)\ c\ P)$ opérations. Cette écriture du schéma permet la résolution de l'équation de Poisson par une méthode itérative en calculant la solution stationnaire de (12).

Figure 1a

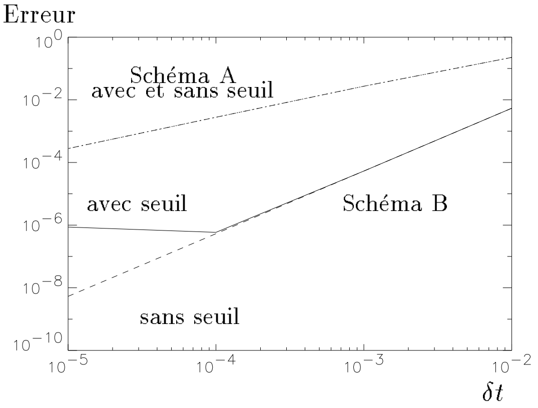

Figure 1b

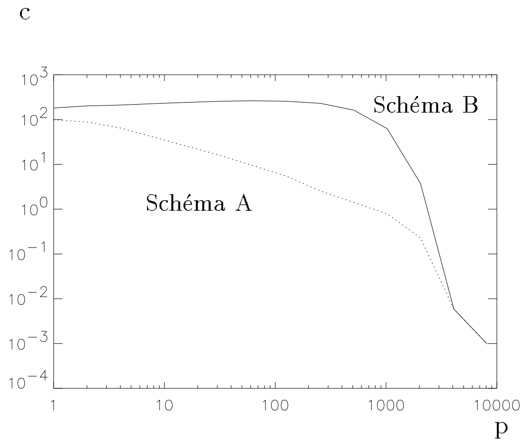

FIG. 1 - *a) Erreur l^2 relative entre la solution exacte de (13) et la solution calculée par les schémas A ou B, en fonction du pas de temps δt (avec et sans seuil sur les matrices). b) Nombre moyen par ligne de coefficients supérieurs à 10^{-8} dans les matrices $(A_{\delta t}^{-1})^p$ (trait pointillé) et $(A_{\frac{\delta t}{2}}^{-1}\ A_{\frac{-\delta t}{2}})^p$ (trait plein) en fonction de p, en prenant $\delta t = 10^{-4}$.*

FIG. 1 - *a) Relative l^2 error between exact solution of (13) and the computed solution by A or B scheme, as a function of the time step δt (with or without matrix threshold). b)Average number per line of coefficients greater than 10^{-8} in matrix $(A_{\delta t}^{-1})^p$ (dotted line) and $(A_{\frac{\delta t}{2}}^{-1}\ A_{\frac{-\delta t}{2}})^p$ (continuous line) as a function of p, taking $\delta t = 10^{-4}$.*

4 Résultats numériques

4.1 Équation de la chaleur bidimensionnelle

les schémas (11) et (12) sont appliqués à l'équation :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t} - \nu \Delta u = \sin(2\pi x)\cos(2\pi y), \\ u(x,y,0) = 0 \\ \text{avec conditions aux limites périodiques : } u(0,t) = u(1,t) \end{array} \right. \qquad (13)$$

dont la solution exacte est $u(x,y,t) = \frac{1}{8\pi^2\nu}\left(1 - e^{-8\pi^2\nu t}\right) sin(2\pi x) cos(2\pi y)$.

Les tests numériques ont été effectués avec des ondelettes à support compact d'ordre quatre en espace construites dans (Daubechies [2]), et un nombre de points $N = 1024$ dans chaque direction. Dans les schémas (11) et (12), les coefficients de la matrice B inférieurs au seuil $\epsilon_B = 10^{-8}$, ainsi que ceux de U^n inférieurs au seuil $\epsilon_U = 10^{-5}\|U\|$ sont mis à 0.

La figure 1a représente l'erreur à $t = 0.02$, $\nu = 1$, entre la solution exacte et les solutions approchées du schéma (11) suivant le pas de temps choisi, d'une part avec les seuils précédents sur les matrices, d'autre part sans seuil. Elle confirme les comportements des schémas A et B d'ordre 1 et 2 en temps, le seuil limitant la précision dans le cas du schéma B à partir de $\delta t = 10^{-4}$.

La complexité d'une itération pour le schéma B, en prenant $\delta t = 10^{-5}$ et les seuils précédents, est de $2cP$ opérations avec $c = 128$ et $P \approx 2500$ pour le calcul de U^1, à comparer avec 8×1024^2 pour la même méthode en différences finies. Cette complexité est réduite pour le calcul des U^p suivants : la lacunarité de l'opérateur itéré B^p du schéma (12) en fonction de p est illustrée à la figure 1b.

4.2 Équation de Poisson bidimensionnelle

La solution de l'équation de Poisson $-\Delta u = f$, avec conditions aux limites périodiques et $\iint u\ dxdy = 0$, est calculée par le schéma (12) d'ordre 2 : celui-ci fournit, quand $p \to +\infty$ et $\nu = 1$, une approximation de la solution stationnaire de (6).

Nous présentons une comparaison des temps de calculs (sur IBM RS 6000) pour différents paramètres (pas de temps δt, seuil ϵ_B sur la matrice B , seuil ϵ_U sur la solution U^n) permettant d'atteindre une erreur l^2 de l'ordre de 10^{-7} (dimension d'espace $N^2 = 1024^2$) :

δt	ϵ_B	ϵ_U	Niter.[1]	Erreur l^2	temps de calcul
10^{-2}	10^{-8}	10^{-5}	6	$2.5\ 10^{-7}$	83.5 s
10^{-4}	10^{-9}	10^{-5}	12	10^{-7}	65.3 s
10^{-5}	10^{-8}	10^{-5}	16	$3\ 10^{-7}$	26.1 s

Il faut noter que plus δt est petit, plus le nombre d'itérations augmente (Niter.$= -\log_2(\delta t)$), mais plus le temps de calcul diminue (la matrice B étant plus creuse). L'erreur l^2 dépend essentiellement des seuils ϵ_B et ϵ_U.

Dans un cadre plus général consistant à calculer la fonction de courant d'un champ de vorticité 2D, la méthode a convergé en 16 itérations, 99 s, avec un écart de 10^{-8} avec une solution numérique calculée par la méthode de Fourier (paramètres δt, ϵ_B et ϵ_U de la dernière ligne du tableau).

5 conclusion

Nous avons proposé dans cette note une méthode numérique sur bases d'ondelettes pour l'équation de la chaleur et l'équation de Poisson bidimensionnelles. Formulé sous la forme du schéma B d'ordre deux en temps (11), ou du schéma accéléré (12), l'algorithme de résolution est plus compétitif que celui des méthodes de directions alternées (ADI) qui ont déjà permis le développement de codes parallèles pour les équations de Navier-Stokes.

Notre méthode s'applique aux dimensions supérieures à deux, ainsi qu'à des conditions aux limites de type Dirichlet. Elle permet désormais d'envisager la résolution des équations de Navier-Stokes (en formulation vorticité-fonction de courant) par un schéma « ondelettes » efficace et parallélisable.

Références bibliographiques

[1] Ph. Charton et V. Perrier. – Produits rapides matrice-vecteur en bases d'ondelettes : application à la résolution numérique des EDP de la mécanique des fluides. *Prépublications Mathématiques de l'Université Paris-Nord*, vol. 94-08, 1994.

[2] I. Daubechies. – *Ten Lectures on Wavelets.* – SIAM, 1992, *CBMS-NSF Series in Applied Mathematics.*

[3] R.A. De Vore, B. Jawerth et V. Popov. – Compression of wavelet decompositions. *American Journal of Mathematics*, vol. 114, 1992, pp. 737–785.

[4] Y. Meyer. – *Ondelettes et Opérateurs I et II.* – Hermann, 1990.

[5] D.W. Peaceman et H.H. Rachford. – The numerical solution of parabolic and elliptic differential equations. *J.Soc.Ind.Appl.Math.*, vol. 3, 1955, pp. 28–42.

1. Niter. est le nombre d'itérations pour atteindre la solution stationnaire « numérique »