Sur les intégrateurs géométriques : des schémas symplectiques au calcul extérieur discret

Dina Razafindralandy[a], Aziz Hamdouni[b]

Laboratoire des Sciences de l'Ingénieur pour l'Environnement (LaSIE) – UMR CNRS 7356

Université de La Rochelle – France
a. dina.razafindralandy@univ-lr.fr
b. aziz.hamdouni@univ-lr.fr

Résumé :

Les intégrateurs géométriques sont des schémas numériques préservant, au niveau discret, la structure géométrique des équations. Dans cette communication, on passe en revue quelques intégrateurs géométriques parmi les plus importants en mécanique qui sont les intégrateurs symplectiques, les intégrateurs invariants, les schémas invariants par groupe de symétrie de Lie et les schémas basés sur le calcul extérieur discret

Abstract :

Geometric integrators are numerical schemes which preserve, at the discrete scale, the geometric structure of the equations. The present communication overviews some of the most important ones, which are symplectic integrators, variational integrators, invariant schemes and discretizations based on exterior calculus

Mots clefs : Geometric integrators, Differential geometry, Hamiltonian system, Lagrangian system, Exterior calculus

1 Introduction

L'évolution des capacités des calculateurs (vitesse, capacité de stockage, parallélisation) pourrait faire penser que, dans un futur proche, il suffirait d'augmenter le degré de rafinnement des maillages (en temps et en espace) pour obtenir des résultats numériques précis. Pourtant, l'expérience montre que, même pour la résolution d'un simple oscillateur harmonique, beaucoup de schémas classiques de discrétisation sont dans l'incapacité de fournir une solution acceptable sur un temps long. En effet, l'énergie obtenue avec ces schémas s'écarte de l'énergie exacte du système de manière non bornée. En fait, les équations d'un système cachent des propriétés fondamentales (symplecticité, intégrales premières, lois de conservations, symétries, . . .) qui sont généralement brisées par les schémas classiques, ce qui conduit aux mauvaises performances de ces schémas sur un temps long ou sur un grand domaine spatial.

Le cadre qui permet de dégager de manière élégante les propriétés fondamentales des équations est la géométrie différentielle. Dans ce cadre, il apparaît que les problèmes de mécanique possèdent une structure géométrique. Et une discrétisation préservant cette structure est appelée intégrateur géométrique.

Selon la structure de l'équation, divers types d'intégrateurs géométriques sont développés. Dans cette communication, on va passer en revue quelques intégrateurs géométriques, en commençant par les plus célèbres qui sont les intégrateurs symplectiques pour les systèmes hamiltoniens. On verra ensuite les intégrateurs variationnels construits pour les sytèmes lagrangiens. On discutera du cas où le système dépend de plusieurs variables. Après cela, on présentera les schémas invariants qui sont construits de manière à préserver le groupe de symétries des équations. On terminera par le calcul extérieur discret. Bien sûr, d'autres structures géométriques importantes (structure de Poisson, de Dirac ou Hamiltonienne à port, ...) existent mais ne seront pas abordées.

2 Intégrateurs symplectiques

Considérons une variété différentielle $\mathcal{S}$ munie d'une forme symplectique ω, c-à-d une 2-forme différentielle fermée et non dégénérée. Considérons, sur cette variété symplectique, un hamiltonien $H \in C^\infty(\mathcal{S} \to \mathbb{R})$. Notons X le champ de vecteurs hamiltonien associé à H. Il est défini par :

$$\mathsf{X} \lrcorner\, \omega = \mathrm{d}H \qquad \text{c-à-d} \qquad \omega(\mathsf{X},\mathsf{Y}) = \langle\, \mathrm{d}H; \mathsf{Y}\rangle \quad \forall \mathsf{Y} \in \mathfrak{X}(\mathcal{S}), \tag{1}$$

l'opérateur $\lrcorner$ étant le produit intérieur, d la différentielle extérieure, $\mathfrak{X}(\mathcal{S})$ l'ensemble des champs de vecteurs sur $\mathcal{S}$ et $\langle\cdot,\cdot\rangle$ la dualité entre l'espace tangent $T\mathcal{S}$ et l'espace cotangent $T^*\mathcal{S}$. Un système hamiltonien $\mathbf{s}(t)$ sur $\mathcal{S}$, décrit par le hamiltonien H, est une courbe intégrale de X, régie par l'équation

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}\mathbf{s}(t)}{\mathrm{d}t} = \mathsf{X}(\mathbf{s}(t)), \\ \mathbf{s}(0) = \mathbf{s}_0 \in \mathcal{S}. \end{cases} \tag{2}$$

Une propriété importante des systèmes hamiltoniens est que la forme symplectique ω est conservée par le flot $\phi_t : \mathcal{S} \to \mathcal{S}$ de l'équation (2). Cette propriété est résumée par :

$$\phi_t^* \omega = \omega \tag{3}$$

où ϕ_t^* est le pull-back ou image réciproque de ω par ϕ_t. Par ailleurs, si H ne dépent pas explicitement du temps alors il est égal à l'énergie du système et est une intégrale première du mouvement.

Un schéma de discrétisation de l'équation de Hamilton (2) s'écrit

$$\begin{cases} \mathbf{s}^{n+1} = \phi_{n,\Delta t}(\mathbf{s}^n), \\ \mathbf{s}(0) = s_0. \end{cases} \tag{4}$$

La fonction $\phi_{n,\Delta t}$ est le flot numérique du schéma. C'est une approximation de ϕ_t à $t = n\Delta t$.

Par exemple, le flot l'un schéma d'Euler explicite est

$$\Phi^{Euler}_{n,\Delta t}(\mathbf{s}^n) = \mathbf{s}^n + \Delta t \; \mathsf{X}(\mathbf{s}^n). \tag{5}$$

Celui d'un schéma de Runge-Kutta d'ordre 4 est

$$\Phi^{RK4}_{n,\Delta t}(\mathbf{s}^n) = \mathbf{s}^n + \Delta t \frac{f_1 + 2f_2 + 2f_3 + f_4}{6} \tag{6}$$

où

$$f_1 = \mathsf{X}(\mathbf{s}^n), \quad f_2 = \mathsf{X}(\mathbf{s}^n + \tfrac{\Delta t}{2} f_1), \quad f_3 = \mathsf{X}(\mathbf{s}^n + \tfrac{\Delta t}{2} f_2), \quad f_4 = \mathsf{X}(\mathbf{s}^n + \Delta t \; f_3).$$

Un schéma est dit symplectique si, comme le flot exact, son flot numérique conserve la forme symplecique ω :

$$\phi^*_{n,\Delta t}\omega = \omega. \tag{7}$$

Dans des coordonnées locales où ω est représenté par une matrice antisymétrique $\mathbb{J}$, cette condition s'écrit

$$[T\phi_{n,\Delta t}]^\top \mathbb{J} [T\phi_{n,\Delta t}] = \mathbb{J} \tag{8}$$

où $[T\phi_{n,\Delta t}]$ est la matrice jacobienne de $\phi_{n,\Delta t}$ et $[T\phi_{n,\Delta t}]^\top$ sa transposée. Par exemple, les schémas d'Euler et de Runge-Kutta ci-dessus ne sont pas symplectiques. L'exemple le plus simple d'intégrateur symplectique de (2) est le schéma d'Euler centré défini par

$$\begin{cases} \dfrac{\mathbf{s}^{n+1} - \mathbf{s}^n}{\Delta t} = X\left(\dfrac{\mathbf{s}^{n+1} + \mathbf{s}^n}{2}\right) \\ \mathbf{s}(0) = s_0. \end{cases} \tag{9}$$

Des méthodes de construction d'intégrateurs symplectiques peuvent être trouvés dans [11, 5, 12, 8, 9] par exemple.

Le succès des intégrateurs symplectiques s'explique par les propriétés suivantes. D'abord, dans le cas où le hamiltonien ne dépend pas du temps, l'énergie oscille faiblement autour de la valeur exacte. Ceci est un gain important par rapport aux schémas classiques pour lesquels l'énergie s'éloigne généralement de la valeur exacte de manière non bornée. Plus généralement, les schémas symplectiques ont de meilleurs comportements vis-à-vis des intégrales premières de l'équation. Par ailleurs, on peut démontrer que les schémas symplectiques sont stables sur de grands intervalles de temps. Enfin, ils ont le même coût de calcul que les intégrateurs classiques.

3 Intégrateurs variationnels

Considérons une action lagrangienne

$$\mathcal{L}(\mathbf{q}(t)) = \int_{t_0}^{t_1} L(t, \mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t)) \, \mathrm{d}t \tag{10}$$

où $L : J^1Q \simeq \mathbb{R} \times TQ \to \mathbb{R}$ est la fonction lagrangienne sur le jet d'ordre 1 de Q. Un système lagrangien $\mathbf{q}(t)$ est un point critique de l'action (10). Le calcul de variations permet de montrer que $\mathbf{q}(t)$ est solution de l'équation d'Euler-Lagrange

$$EL \equiv \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}}\right) = 0. \tag{11}$$

En fait, en utilisant une approche variation totale, on obtient, en plus de (11), l'équation

$$E^t \equiv \frac{\partial L}{\partial t} + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}}\dot{\mathbf{q}} - L\right) = 0. \tag{12}$$

qui est l'équation d'évolution de l'énergie si L est autonome, ainsi que les lois de conservation issues du théorème de Nœther.

Pour approximer la dynamique $\mathbf{q}(t)$ du système, les schémas classiques consistent à discrétiser l'équation d'Euler-Lagrange (11). L'origine lagrangienne de la solution n'est donc pas prise en compte. Un intégrateur variationnel, en revanche, consiste d'abord à discrétiser la fonction lagrangienne $L(t, \mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t))$, puis l'action (10). En appliquant le calcul variation sur l'action discrète, on déduit enfin une discrétisation

$$EL^n(t^0, \cdots, t^N, \mathbf{q}^0, \cdots, \mathbf{q}^m) = 0, \quad i = 1, \cdots, N \tag{13}$$

de l'équation (11). Si on utilise la variation totale, on obtient également une discrétisation

$$E_t^n(t^0, \cdots, t^N, \mathbf{q}^0, \cdots, \mathbf{q}^m) = 0, \quad i = 1, \cdots, N \tag{14}$$

de l'équation (12). En procédant de la sorte, la solution des équations discrètes (13) et (14) est, comme la solution exacte, un point critique d'une action lagrangienne (discrète).

L'exemple le plus simple d'intégrateur variationnel discrétise le lagrangien de la façon suivante :

$$L(t, \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})_{|t^n} \simeq L\left(t^n, \mathbf{q}^n, \dot{\mathbf{q}}^n\right) \stackrel{def}{=} L(n) \qquad \text{avec} \qquad \dot{\mathbf{q}}^n = \frac{\mathbf{q}^{n+1} - \mathbf{q}^n}{t^{n+1} - t^n}.$$

Puis, l'action discrète est obtenue par quadrature :

$$\mathcal{L}(\mathbf{q}(t)) \simeq \sum_{n=0}^{N-1} (t^{n+1} - t^n) L\left(t^n, \mathbf{q}^n, \dot{\mathbf{q}}^n\right).$$

En considérant la variation de cette action, on déduit les équations discrètes

$$\begin{cases} EL^n \equiv (t^{n+1} - t^n)\dfrac{\partial L}{\partial \mathbf{q}}(n) - \dfrac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}}(n) + \dfrac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}}(n-1) = 0 \\[2ex] E_t^n \equiv (t^{n+1} - t^n)\dfrac{\partial L}{\partial t}(n) + \left(\dfrac{\mathbf{q}^{n+1} - \mathbf{q}^n}{t^{n+1} - t^n}\dfrac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}}(n) - L(n)\right) \\ \qquad\qquad - \left(\dfrac{\mathbf{q}^n - \mathbf{q}^{n-1}}{t^n - t^{n-1}}\dfrac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}}(n-1) - L(n-1)\right) = 0. \end{cases} \tag{15}$$

Dans le cas où la fonction lagrangienne est hyperrégulière, l'intégrateur variationnel associé est automatiquement un intégrateur symplectique. Il hérite donc des bonnes propriétés d'un intégrateur symplectique. Autrement dit, en plus de l'optimalité variationnelle de la solution, on est assuré de la stabilité sur un grand intervalle de temps. Par ailleurs, l'équation (14) garantit que l'évolution de l'énergie du système est correctement reproduit. Dans les tests numériques, on observe en effet la constance (à la précision machine) de l'énergie pour un lagrangien autonome.

Dans le cas où le système dépend de plusieurs variables, la démarche de discrétisation ci-dessus peut être adaptée pour obtenir un intégrateur variationnel. En revanche, la généralisation des intégrateurs symplectiques au cas de plusieurs variables est encore un problème ouvert. En fait, la généralisation de la mécanique hamiltonienne au cas de plusieurs variables conduit à des formalismes différents de multisymplecticité. On va exposer brièvement celui qui a débouché sur la notion d'intégrateur multisymplectique introduit dans [1].

4 Schémas multisymplectiques

Une structure k-symplectique sur la variété $\mathcal{S}$ est une collection de 2-formes ω^i, $i = 1, \cdots, k$ fermées non-dégénérées [1]. Un $k-$champ de vecteurs $\mathsf{X} = (\mathsf{X}_1, \cdots, X_k)$ associé à un hamiltonien H est défini par

$$\mathsf{X}_1 \lrcorner\, \omega^1 + \cdots + \mathsf{X}_k \lrcorner\, \omega^k = \mathrm{d}H. \tag{16}$$

Dans la pratique $k = n_\mathbf{z}$ est le nombre de variables indépendantes. L'équation d'un système $n_\mathbf{z}$-hamiltonien s'écrit alors

$$\frac{\partial \mathbf{s}}{\partial z^1} \lrcorner\, \omega^1 + \cdots + \frac{\partial \mathbf{s}}{\partial z^k} \lrcorner\, \omega^{n_\mathbf{z}} = \mathrm{d}H. \tag{17}$$

Dans le cas (1-)symplectique, la forme symplectique est conservée par le flot. Dans le cas $n_\mathbf{z}$-symplectique, on a la loi de conservation suivante à la place :

$$\frac{\partial \omega^1}{\partial z^1} + \cdots + \frac{\partial \omega^{n_\mathbf{z}}}{\partial z^{n_\mathbf{z}}} = 0. \tag{18}$$

Dans l'état actual des arts, on appelle intégrateurs multisymplectiques les schémas de discrétisation qui respectent l'équation (18) [1].

Mettons nous dans le cas où $n_\mathbf{z} = 2$, $\mathbf{z} = (t, x)$. Un exemple d'intégrateur 2-symplectique est le schéma de Preissman

$$\mathbb{J}^1 \frac{\mathbf{s}^{n+1}_{i+\frac{1}{2}} - \mathbf{s}^{n}_{i+\frac{1}{2}}}{\Delta t} + \mathbb{J}^2 \frac{\mathbf{s}^{n+\frac{1}{2}}_{i+1} - \mathbf{s}^{n+\frac{1}{2}}_{i}}{\Delta x} = -\nabla_\mathbf{s} H \left(\mathbf{s}^{n+\frac{1}{2}}_{i+\frac{1}{2}} \right) \tag{19}$$

où $\mathbf{s}^{n+\frac{1}{2}}_* = \frac{\mathbf{s}^{n+1}_* + \mathbf{s}^n_*}{2}$ et $\mathbf{s}^*_{i+\frac{1}{2}} = \frac{\mathbf{s}^*_{i+1} + \mathbf{s}^*_i}{2}$. Ce schéma d'ordre 2 vérifie la loi de conservation

$$\frac{(\omega^1)^{n+1}_{i+\frac{1}{2}} - (\omega^1)^{n}_{i+\frac{1}{2}}}{\Delta t} + \frac{(\omega^2)^{n+\frac{1}{2}}_{i+1} - (\omega^2)^{n+\frac{1}{2}}_{i}}{\Delta x} = 0 \tag{20}$$

1. Pour être plus précis, il faudrait considérer un fibré $\mathcal{M} \to \mathcal{Z}$ de fibre type $\mathcal{Q}$ comme dans la section 5. Les formes ω^i sont alors des formes horizontales sur ce fibré.

avec

$$(\omega^1)_i^n = \frac{1}{2}\mathbb{J}^1 \, \mathrm{d}\mathbf{s}_i^n \wedge \mathrm{d}\mathbf{s}_i^n, \qquad (\omega^2)_i^n = \frac{1}{2}\mathbb{J}^2 \, \mathrm{d}\mathbf{s}_i^n \wedge \mathrm{d}\mathbf{s}_i^n.$$

Les intégrateurs multisymplectiques basés sur (18) ont une meilleure stabilité numérique que les schémas classiques [2, 6].

5 Schémas invariants par symétries de Lie

Les équations de la mécanique, qu'elles peuvent ou non se formuler dans un cadre (multi-)symplectique ou variationnel, possèdent en général des symétries. Les symétries dont il s'agit ici sont les transformations, comme les transformations galiléennes ou les changements d'échelle, qui préservent l'ensemble des solutions. Ces symétries donnent des informations sur des propriétés fondamentales du système modélisé, comme les lois de conservation, les solutions auto-similaires ou encore le comportement à la paroi. Ainsi, préserver ces symétries au niveau discret permet de bien représenter numériquement ces propriétés importantes de la dynamique.

On considère un fibré $\mathcal{M} \to \mathcal{Z}$ où $\mathcal{M}$ et $\mathcal{Z}$ sont des variétés. Localement, en un point $\mathbf{m} = (\mathbf{z}, \mathbf{s})$, $\mathcal{M}$ ressemble (difféomorphe) à un produit $U_z \times \mathcal{S}$ où $U_z \subset \mathcal{Z}$ est un ouvert contenant $\mathbf{z}$ et $\mathcal{S}$, le fibre type, est une variété. Soit une équation aux dérivées partielles (EDP)

$$E(\mathbf{z}, \mathbf{s}(\mathbf{z})) = 0 \tag{21}$$

(la dépendance de E par rapport aux dérivées de $\mathbf{s}$ a été enlevée pour simplifier [2]). Une transformation, dépendant de manière continue d'un paramètre a

$$g_a : \ (\mathbf{z}, \mathbf{s}) \in \mathcal{M} \longmapsto g_a(\mathbf{z}, \mathbf{s}) = \left(\ \hat{\mathbf{z}}(\mathbf{z}, \mathbf{s}, a), \ \hat{\mathbf{s}}(\mathbf{z}, \mathbf{s}, a) \ \right) \in \mathcal{M} \tag{22}$$

est une symétrie de (21) si elle transforme une solution $(\mathbf{z}, \mathbf{s}(\mathbf{z}))$ en une autre solution :

$$E(\mathbf{z}, \mathbf{s}(\mathbf{z})) = 0 \qquad \Longrightarrow \qquad E(g_a(\mathbf{z}, \mathbf{s})) = 0 \quad \forall g_a \in G.$$

On note G l'ensemble des symétries de l'équation qui forment un groupe de Lie.

On souhaite que, si g_a est une symétrie de l'équation continue, g_a soit aussi une symétrie de l'équation discrète. Autrement dit, on souhaite que le schéma de discrétisation préserve le groupe de symétrie G. Un schéma de discrétisation de (21) est une paire de fonction (Φ, E_h) définissant une équation de maillage

$$\Phi(\, \underline{\mathbf{z}}, \underline{\mathbf{s}} \,) = 0 \tag{23}$$

et une équation discrète

$$E_h(\, \underline{\mathbf{z}}, \underline{\mathbf{s}} \,) = 0 \tag{24}$$

sur un réseau de points $\underline{\mathbf{z}} = (\mathbf{z}_1, ..., \mathbf{z}_J)$ de $\mathcal{Z}$ et une discrétisation $\underline{\mathbf{s}} = (\mathbf{s}_1, ..., \mathbf{s}_J)$ de l'inconnu. Notons que l'équation du maillage (23) dépend de l'inconnu. Cela permet d'adapter le maillage en fonction de la solution si besoin.

2. Pour être plus rigoureux, il faudrait introduire l'espace des jets $J^k\mathcal{M}$ dont les coordonnées locales sont $(\mathbf{z}, \mathbf{s}, \mathbf{s}_{\mathbf{z}}, \cdots, \mathbf{s}_{\mathbf{z}^k})$ où les coordonnées $\mathbf{s}_{\mathbf{z}^i}$ correspondent formellement aux dérivées partielles i-èmes de $\mathbf{s}$. Une EDP d'ordre k sur M est alors une équation algébrique $E(\mathbf{z}, \mathbf{s}, \mathbf{s}_{\mathbf{z}}, \cdots, \mathbf{s}_{\mathbf{z}^k}) = 0$ sur $J^k\mathcal{M}$.

En général, le schéma (Φ, E_h) brise les symétries $g_a \in G$ de l'équation continue. En revanche, on peut le modifier en un autre schéma (Φ^{inv}, E_h^{inv}), dit invariant, qui préserve les symétries, c-à-d tel que

$$(\Phi^{inv}, E_h^{inv})(\,\underline{\mathbf{z}}, \underline{\mathbf{s}}\,) = 0, \qquad \Longrightarrow \qquad (\Phi^{inv}, E_h^{inv})(g_a(\underline{\mathbf{z}}, \underline{\mathbf{s}})) = 0 \quad \forall g_a \in G. \tag{25}$$

Une approche permettant d'effectuer cette "invariantisation" est celle utilisée dans [3, 4] se basant sur un repère mobile du groupe de symétrie G. Un repère mobile de G est une application $\rho :\ \mathcal{M} \to G$ qui, à chaque point $\mathbf{m}$ de $\mathcal{M}$ associe un repère (un élément de G) $\rho(\mathbf{m})$ vérifiant une condition d'équivariance [10] :

$$\rho[g \cdot \mathbf{m}] = \rho[\mathbf{m}]g^{-1} \qquad \forall(\mathbf{m}, g) \in \mathcal{M} \times G. \tag{26}$$

Après avoir construit un repère mobile du groupe de symétrie G de l'équation, il suffit alors de prendre

$$\Phi^{inv} = \Phi \circ \rho, \qquad E_h^{inv} = E_h \circ \rho. \tag{27}$$

En effet, Φ^{inv} et E_h^{inv} définis par (27) sont tels que

$$(\Phi^{inv}, E_h^{inv})(g_a(\,\underline{\mathbf{z}}, \underline{\mathbf{s}}\,)) = (\Phi^{inv}, E_h^{inv})(\,\underline{\mathbf{z}}, \underline{\mathbf{s}}\,), \qquad \forall g_a \in G \tag{28}$$

et vérifient donc la condition d'invariance (25).

Par construction, les schémas invariantisés ont de meilleurs comportements numériques pour la simulation des solutions auto-similaires. Par exemple, une solution sous forme d'un pseudo-choc (qui est une solution auto-similaire) de l'équation de Burgers est capturée sans aucune oscillation, contrairement aux schémas non invariantisés. De même, les schémas invariants respectent mieux les propriétés fondamentales des équations (invariance galiléenne, ...). Notons aussi qu'ils supportent mieux les maillages grossiers.

Comme on l'a vu, la structure géométrique d'une équation se formule généralement dans le cadre de la géométrie différentielle. Certaines de ces structures se formulent plus précisément dans le cadre du calcul extérieur, dont l'outil de base sont les formes différentielles extérieures. Tel est le cas de la structure symplectique. En fait, beaucoup d'outils utilisés en mécanique (forme de Liouville, théorème de Nœther, les opérateurs de dérivation tensorielle, les flux, les circulations, ...) se formalisent de manière élégante en calcul extérieur. Dans la section suivante, on donne une très brève apperçu de la version discrète du calcul extérieur développée dans [7]. Le calcul extérieur discret débouche sur une discrétisation efficace des équations de la mécanique, qui préserve la structure de de Rham.

6 Calcul extérieur discret

On considère une variété $\mathcal{S}$ de dimension $n_{\mathbf{s}}$=2 ou 3 qu'on discrétise en un maillage S. Pour simplifier, supposons que le maillage est simpliciel, c'est-à-dire que K est composé de tétraèdres (les 3-simplexe), de tous les triangles (2-simplexes) qui en sont les faces, de tous leurs arêtes (1-simplexes) et de tous leurs sommets (0-simplexes). Si le maillage est bidimensionnel alors les top-simplexes (les simplexes de dimension la plus élevée) sont les triangles. À chaque élément de K est assigné une orientation. Celle-ci est arbitraire (et trivial pour les 0-simplexes) sauf pour les top-simplexes qui doivent avoir la même orientation. On note S_k l'ensemble des k-simplexes orientés ; le maillage se décompose donc en

$$S_{n_\mathbf{s}} \cup S_{n_\mathbf{s}-1} \cup \cdots \cup S_1 \cup S_0. \tag{29}$$

Comme on l'a dit précédemment, l'outil de base du calcul extérieur sont les formes extérieures. Ces dernières permettent, entre autres, de définir des intégrales. Ansi, une k-forme ω peut être vue comme une application qui, à un domaine D de dimension k, associe un réel $\int_D \omega$. En calcul extérieur discret (DEC), on définit une forme discrète à partir de cette observation. Une k-forme discrète ou k-cochaine est une application

$$\omega : \sigma \in S_k \mapsto \langle\!\langle \omega, \sigma \rangle\!\rangle \in \mathbb{R}.$$

Elle est donc définie par la donnée d'une valeur sur chaque k-simplexe. Moralement, cette valeur est l'intégrale de la forme sur ce simplexe.

Ensuite, la version discrète $\underline{\mathrm{d}}$ de l'opérateur différentiel extérieur d sur une k-forme est construite comme suit :

$$\langle\!\langle \underline{\mathrm{d}}\omega, \sigma \rangle\!\rangle = \langle\!\langle \omega, \partial\sigma \rangle\!\rangle, \quad \forall \sigma \in S_{k+1}. \tag{30}$$

Autrement dit, la valeur de $\mathrm{d}\omega$ sur un $(k+1)-$simplexe est la somme (affectée d'un signe $+$ ou $-$ selon si les orientations sont compatibles) des valeurs de ω sur les toutes les faces qui composent le bord $\partial\sigma$ de σ. La relation (30) n'est autre que la transcription du théorème de Stokes.

Cette construction de l'opérateur $\underline{\mathrm{d}}$ est cruciale et très avantageuse. En effet, la relation (30) permet d'assurer que, comme dans le cas continu,

$$\underline{\mathrm{d}}^2 = 0 \tag{31}$$

puisque le bord d'un bord est l'ensemble vide. Or dans le cas continu, la relation

$$\mathrm{d}^2 = 0 \tag{32}$$

rassemble les relations du type $\operatorname{div}\operatorname{curl} = 0$ et $\operatorname{curl}\operatorname{grad} = 0$. La relation (30) garantie donc automatiquement la compatibilité de la discrétisation des opérateurs de dérivation div, grad et curl, ce qui n'est pas le cas de la plupart des codes de calcul existant où ces opérateurs de dérivation sont discrétisés de manière séparée. La relation (32) traduit aussi le fait que la suite

$$0 \hookrightarrow \Omega^0(\mathcal{S}) \xrightarrow{\mathrm{d}} \Omega^1(\mathcal{S}) \xrightarrow{\mathrm{d}} \Omega^1(\mathcal{S}) \xrightarrow{\mathrm{d}} \cdots \xrightarrow{\mathrm{d}} \Omega^{n_\mathbf{s}} \longrightarrow 0 \tag{33}$$

est un complex de de Rham. La relation (31) signifie donc que la cohomologie de de Rham est préservé au niveau discret.

Les autres opérateurs du calcul extérieur (le produit intérieur $\lrcorner$ et extérieur $\wedge$, l'opérateur $*$ de Hodge, la codifférentielle δ, ...) peuvent aussi être discrétisés (voir [7]).

Pour pouvoir être discrétisées en DEC, les équations de la mécanique doivent être formulées en calcul extérieur. Par exemple, les équations de Navier-Stokes anisothermes s'écrivent

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \omega}{\partial t} + u \lrcorner \, \mathrm{d}\omega + \dfrac{1}{\rho} \, \mathrm{d}\left(p + \frac{1}{2}||\mathbf{u}||^2\right) - \nu \delta \, \mathrm{d}\omega = 0, \\ \delta \omega = 0, \\ \dfrac{\partial \theta}{\partial t} + \delta(\omega \wedge \theta) - \kappa \delta \, \mathrm{d}\theta = 0 \end{cases} \tag{34}$$

dans ce cadre. Dans ces équations, la forme extérieure ω est le dual de la vitesse u (c-à-d $\omega(v) = u \cdot v$ pour tout champ de vecteur v) et θ est la température.

Le respect exact du théorème de Stokes et la relation $\underline{\mathrm{d}}^2 = 0$ confère au DEC de propriétés numériques intéressantes. Par exemple, pour un fluide idéal, on vérifie exactement le théorème de Kelvin sur la circulation. Par ailleurs, il n'y a pas de production artificielle de masse ou de portance.

Références

[1] T. Bridges and S. Reich. Multi-symplectic integrators : numerical schemes for Hamiltonian PDEs that conserve symplecticity. *Physics Letters A*, 284(4–5) :184 – 193, 2001.

[2] M. Chhay. *Intégrateurs géométriques : Application à la mécanique des fluides.* Phd thesis, Université de La Rochelle, 2008.

[3] M. Chhay and A. Hamdouni. A new construction for invariant numerical schemes using moving frames. *Comptes Rendus Mécanique*, 338 :97–101, 2010.

[4] M. Chhay, E. Hoarau, A. Hamdouni, and P. Sagaut. Comparison of some Lie-symmetry-based integrators. *Journal of Computational Physics*, 230 :2174–2188, 2011.

[5] K. Feng and M. Qin. *Symplectic Geometric Algorithms for Hamiltonian Systems.* Springer Berlin Heidelberg, 2010.

[6] A. Hamdouni, D. Razafindralandy, M. Chhay, and E. Liberge. Intégrateurs géométriques : bilan et perspectives. In *12e Colloque National en Calcul des Structures (CSMA)*, 2015.

[7] A. Hirani. *Discrete Exterior Calculus.* PhD thesis, California Institute of Technology, Pasadena, CA, USA, 2003.

[8] F. Kang, W. Hua-mo, M Qin, and D. Wang. Construction of canonical difference schemes for Hamiltonian formalism via generating functions. *Journal of Computational Mathematics*, 7(1) :71–96, 1989.

[9] B. Leimkuhler and S. Reich. *Simulating Hamiltonian dynamics.* Cambridge monographs on applied and computational mathematics. Cambridge, 2004.

[10] P. Olver. Geometric foundations of numerical algorithms and symmetry. *Applicable Algebra in Engineering, Communication and Computing*, 11(5) :417–436, 2001.

[11] J.M. Sanz-Serna. Symplectic integrators for Hamiltonian problems : An overview. *Acta Numerica*, 1 :243–286, 1992.

[12] G. Sun. A simple way constructing symplectic Runge-Kutta methods. *Journal of Computational Mathematics*, 18(1) :61–68, 2000.