

Hodge discret robuste en Calcul Extérieur Discret

D. Razafindralandy¹, A. Hamdouni¹, R. Ayoub²

¹ LaSIE, La Rochelle Université {dina.razafindralandy,aziz.hamdouni}@univ-lr.fr

² PSED, King Abdoullah University of Science and Technology

Abstract — Dans cette communication, on propose une extension de l'opérateur de Hodge discret en Calcul Extérieur Discret (DEC). Cette extension permet d'utiliser un maillage dual quelconque. On applique ce nouvel opérateur à la résolution de l'équation de Poisson et des équations de Navier-Stokes anisothermes. On démontre également sa robustesse sur des séries de maillages fortement non structurés et avec des rapports d'aspect très élevés.

Mots clés — Calcul extérieur discret, Opérateur de Hodge, Mécanique des fluides

1 Instructions générales

Le calcul extérieur discret (DEC) est une méthode de discrétisation appartenant à la famille des intégrateurs géométriques. Il est généralement utilisé pour discrétiser des équations différentielles portant, non sur des champs de vecteurs/tenseurs comme habituellement, mais sur des formes différentielles. Une particularité du DEC est qu'il vérifie à la précision machine près la relation $dd = 0$ où d est la différentielle extérieure discrète. Cette relation est fondamentale car elle rassemble les relations du type $\text{rot grad} = 0$ et $\text{div rot} = 0$ du calcul vectoriel. Ainsi, vérifier cette relation au niveau discret évite d'avoir des solutions parasites (portances, masses, ... parasites). Des applications sur l'équation de Darcy et sur les équations de Navier-Stokes ont été menées dans [1, 2, 3].

Une limitation du DEC classique est qu'il nécessite un maillage simpliciel bien centrée, ce qui veut dire que le circoncentre de chaque simplexe doit se trouver dans son intérieur. Cela est dû au fait que la discrétisation classique de l'opérateur de Hodge, qui est essentiel pour l'écriture des lois constitutives en calcul extérieur, nécessite un maillage dual circoncentrique. Or ce dernier peut être dégénéré. L'objectif de cette communication est de proposer une méthode de discrétisation alternative de l'opérateur de Hodge. Cette méthode de discrétisation permet d'utiliser un maillage dual quelconque.

2 La base du DEC

Dans cette section, on définira les versions DEC de quelques outils de base du calcul extérieur qui sont les formes différentielles, la différentielle extérieure et l'opérateur de Hodge. La discrétisation d'autres outils peuvent être trouvée par exemple dans [4].

2.1 Complexe cellulaire et formes discrètes

En DEC, un domaine M d'une variété riemannienne orientée de dimension n est discrétisé en un complexe cellulaire orienté K . Si $n = 3$ alors K est composé de cellules de dimensions 3 (les top-cellules) et de ses faces de dimensions 2, 1 et 0 (les nœuds). Si $n = 2$, les top-cellules sont de dimension 2.

On donne aux top-cellules la même orientation et aux autres cellules de dimension non nulle une orientation arbitraire. On note alors K_k l'ensemble des cellules orientées de K de dimension k , de sorte que $K = K_0 \cup K_1 \cup \dots \cup K_n$. La Figure 1 est un exemple de complexe composé de simplexes (nœuds, segments, triangles et tétraèdres en 3D) orientés.

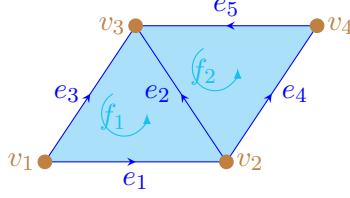


Figure 1: Exemple de complexe simpliciel de dimension 2

On appelle k -chaîne une combinaison linéaire (formelle) de k -cellules et on note $\Lambda_k(K)$ l'ensemble des k -chaînes de K :

$$\Lambda_k(K) = \text{span } K_k = \left\{ \sum_{\sigma \in K_k} c_i \sigma_i \mid c_i \in \mathbb{R} \right\}.$$

Enfin, on appelle k -forme discrète un élément du dual topologique $\Lambda^k(K)$ de $\Lambda_k(K)$. Comme K_k est une base de $\Lambda_k(K)$, une k -forme discrète $\omega \in \Lambda^k(K)$ peut donc être vue comme une application linéaire qui associe un nombre $\langle \omega, \sigma \rangle \in \mathbb{R}$ à chaque k -cellule $\sigma \in K$. Par exemple, une 0-forme (resp. 1-forme, 2-forme) discrète d'un complexe simpliciel est la donnée d'un nombre réel à chaque nœud de K_0 (resp. segment de K_1 , triangle de K_2).

Une k -forme différentielle $\omega_M \in \Lambda^k(M)$ peut être discrétisée en une k -forme discrète $\omega \in \Lambda^k(K)$ prenant sur une cellule $\sigma \in K_k$ la valeur

$$\langle \omega, \sigma \rangle = \begin{cases} \omega_M(\sigma) & \text{si } k = 0 \text{ c-à-d } \sigma \text{ est un nœud} \\ \int_{\sigma} \omega_M & \text{si } k \geq 1. \end{cases} \quad (1)$$

On notera respectivement $\Lambda_{\bullet}(K) = \bigoplus_{k \in \mathbb{Z}} \Lambda_k(K)$ et $\Lambda^{\bullet}(K) = \bigoplus_{k \in \mathbb{Z}} \Lambda^k(K)$ l'ensemble des (combinaisons linéaires de) chaînes et l'ensemble des formes discrètes, en définissant $\Lambda_k(K) = \{0\}$ et $\Lambda^k(K) = \{0\}$ si $k \notin \{0, \dots, n\}$.

2.2 Opérateur de bord et différentielle extérieure discrète

Le bord d'une k -cellule orientée σ est la somme de ses $(k-1)$ -faces. Dans cette somme, à chaque face est attribué un signe suivant si son orientation est compatible avec celle de σ . Par exemple, le bord du triangle orienté $f_1 \in K_2$ de la Figure 1 est la 1-chaîne $\partial f_1 = e_1 + e_2 - e_3 \in \Lambda_1(K)$. Le bord du segment e_1 est $\partial e_1 = v_2 - v_1$. L'opérateur de bord ∂ sur les k -cellules s'étend par linéarité en une application $\partial : \Lambda_{\bullet}(K) \rightarrow \Lambda_{\bullet}(K)$.

Pour le complexe simpliciel de la Figure 1, les restrictions $\partial_k : \Lambda_k(K) \rightarrow \Lambda_{k-1}(K)$ de ∂ à $\Lambda_k(K)$, pour $k = 2, 1, 0$, peuvent être représentées par les matrices

$$\partial_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & -1 \\ -1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \partial_1 = \begin{bmatrix} -1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \end{bmatrix}, \quad \partial_0 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

La différentielle extérieure discrète d est définie comme le dual de l'opérateur de bord ∂ :

$$\langle d\omega, \sigma \rangle = \langle \omega, \partial\sigma \rangle, \quad \text{pour tout } \omega \in \Lambda_k(K) \text{ et tout } \sigma \in K_{k-1} \quad (2)$$

Elle s'étend linéairement en une application $d : \Lambda^{\bullet}(K) \rightarrow \Lambda^{\bullet}(K)$ dont la restriction d_k à $\Lambda^k(K)$ est la transposée de ∂_{k+1} , c-à-d $d_k = \partial_{k+1}^T : \Lambda^k(K) \rightarrow \Lambda^{k+1}(K)$. La définition (2) n'est autre que l'expression du théorème de Stokes si le crochet $\langle \cdot, \cdot \rangle$ est une intégration comme dans la discrétisation (1).

Avec le maillage de la Figure 1, on a par exemple, pour $\omega \in \Lambda^0(K)$ et $\theta \in \Lambda^1(K)$,

$$\langle d\omega, e_1 \rangle = \langle \omega, v_2 \rangle - \langle \omega, v_1 \rangle, \quad \langle d\theta, f_1 \rangle = \langle \theta, e_1 \rangle + \langle \theta, e_2 \rangle - \langle \theta, e_3 \rangle, \quad \langle dd\omega, f_1 \rangle = 0.$$

En fait, comme dans le cas continu, on a toujours $dd = 0$ automatiquement. Cela est dû au fait que le bord du bord d'une cellule est vide et que par conséquent $\partial\partial = 0$.

2.3 Discrétisation diagonale de l'opérateur de Hodge

Rappelons que, étant données une métrique $\cdot$ et une forme volume vol sur M , l'opérateur de Hodge $\star : \Lambda^\bullet(M) \longrightarrow \Lambda^\bullet(M)$ est défini par [5]

$$\omega \wedge \star \theta = (\omega \cdot \theta) \text{vol}$$

pour tout $\omega, \theta \in \Lambda^k(M)$. Dans cette relation, $\wedge$ est le produit extérieur. Dans $\mathbb{R}^2$ avec la métrique et le volume euclidiens, on a par exemple $\star 1 = dx \wedge dy$, $\star dx = dy$ et $\star dy = -dx$. Dans $\mathbb{R}^3$, $\star 1 = dx \wedge dy \wedge dz$ et $\star dx = dy \wedge dz$. La restriction $\star_k : \Lambda^k(M) \longrightarrow \Lambda^{n-k}(M)$ est un isomorphisme.

Dans le cas discret, $\text{card } K_k \neq \text{card } K_{n-k}$ (par exemple, le nombre de nœuds d'un maillage 2D est différent du nombre de triangles) en général. Cela empêche de définir un isomorphisme entre $\Lambda^k(K)$ et $\Lambda^{n-k}(K)$ car ils n'ont pas la même dimension. Pour contourner ce problème, on construit un autre complexe cellulaire orienté $\star K$ tel que pour tout $k \in \{1, \dots, n\}$, il existe une bijection, encore notée $\star$, entre les k -cellules de K et les $(n-k)$ -cellules appartenant à $\star K$. De cette manière, il est possible de définir un opérateur de Hodge discret $\star : \Lambda^\bullet(K) \longrightarrow \Lambda^\bullet(\star K)$, dont les restrictions

$$\star_k : \Lambda^k(K) \longrightarrow \Lambda^{n-k}(\star K)$$

sont des isomorphismes. La Figure 2 représente un maillage simpliciel et son dual circoncentrique. Ce dernier est construit en joignant les circoncentres des simplexes primaux. Sur cette figure, les circoncentres des segments et des triangles sont en vert.

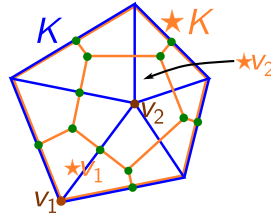


Figure 2: Exemple de maillage primal (en bleu) et de maillage dual (en orange)

Dans toute la suite, on supposera que K est un complexe simpliciel et que le dual est circoncentrique. L'opérateur de Hodge discret peut alors être défini par [6]

$$\frac{1}{|\sigma|} \langle \omega, \sigma \rangle = \frac{1}{|\star \sigma|} \langle \star \omega, \star \sigma \rangle \quad \text{pour tout } \omega \in \Lambda^k(K) \text{ et tout } \sigma \in K_k. \quad (3)$$

Dans cette relation, $|\sigma|$ est la k -mesure de σ . Si ω est constant et que le crochet $\langle \cdot, \cdot \rangle$ est une intégration alors cette relation est en fait exacte si σ et $\star \sigma$ sont orthogonaux, comme c'est le cas si le dual est circoncentrique.

La définition (3) a l'avantage que chaque $\star_k$ est représenté par une matrice diagonale. En revanche elle nécessite que le maillage primal soit bien centré un maillage bien centré. Par exemple, sur le maillage de gauche de la Figure 3 qui contient un angle droit, $\star_1$ est mal définie. Ainsi, dans la section suivante on propose une autre définition de l'opérateur de Hodge discret $\star_1$ qu'on appellera analytique et qui n'impose pas que le maillage dual soit circoncentrique. Le centre des simplexes de dimension $k > 0$ peuvent être le circoncentre, le barycentre (comme sur la Figure 3, à droite), l'incentre ou d'autres points choisis pour minimiser une erreur.

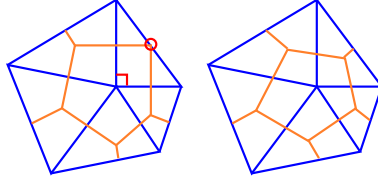


Figure 3: Maillage dual circoncentrique (à gauche) et barycentrique (à droite)

3 Hodge analytique

On se restreint au cas d'un maillage bidimensionnel. On construira le Hodge analytique $\star_1$ dans un seul triangle comme montré sur la Figure 4 où les centres c_1, c_2, c_3 des côtés et le centre c_t du triangle sont arbitraires. Une opération d'assemblage classique permettra de l'étendre à un maillage tout entier.

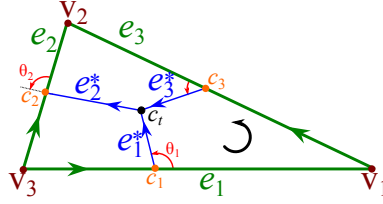


Figure 4: Maillage dual circoncentrique (à gauche) et barycentrique (à droite)

Soit $\omega = a dx + b dy$ une 1-forme différentielle, qu'on suppose constante dans le triangle. Son image par l'opérateur de Hodge est $\star\omega = -b dx + a dy$. En prenant

$$\langle \omega, e_i \rangle = \int_{e_i} (a dx + b dy) \quad \text{et} \quad \langle \star\omega, \star e_i \rangle = \int_{\star e_i} (-b dx + a dy),$$

on montre la relation suivante qui permet de définir le nouvel opérateur de Hodge discret H_1 :

$$\begin{bmatrix} \langle \star\omega, \star e_1 \rangle \\ \langle \star\omega, \star e_2 \rangle \\ \langle \star\omega, \star e_3 \rangle \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} \frac{|e_1^*|}{|e_1|} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{|e_2^*|}{|e_2|} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{|e_3^*|}{|e_3|} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sin \theta_1 & a_1^2 \cos \theta_1 & a_1^3 \cos \theta_1 \\ a_2^1 \cos \theta_2 & \sin \theta_2 & a_2^3 \cos \theta_2 \\ a_3^1 \cos \theta_3 & a_3^2 \cos \theta_3 & \sin \theta_3 \end{bmatrix}}_{H_1} \begin{bmatrix} \langle \omega, e_1 \rangle \\ \langle \omega, e_2 \rangle \\ \langle \omega, e_3 \rangle \end{bmatrix} \quad (4)$$

Dans cette relation, $\theta_i = \text{angle}(e_i, \star e_i)$ et les a_i^j sont définis par

$$-\mathbb{J}\vec{e}_i = \sum_{j \neq i} a_i^j \vec{e}_j, \quad i = 1, 2, 3, \quad \text{avec} \quad \mathbb{J} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$\vec{e}_i$ étant le vecteur porté par le segment orienté e_i . Dans le cas où le maillage est circoncentrique, H_1 n'est autre que le Hodge diagonal classique (3).

A titre d'exemple, l'opérateur H_1 défini par l'équation (4) dans un triangle droit unité est représenté par les matrices suivantes si le maillage dual est barycentrique ou incentrique:

$$H_1^{\text{barycenter}} = \frac{1}{6} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad H_1^{\text{incenter}} = \frac{1}{4 + 2\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 2 & \sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}.$$

Ces matrices sont bien inversibles.

4 Quelques tests numériques

Lors de la présentation orale, des tests sur l'équation de Poisson avec condition aux limites de Dirichlet seront présentés. Mais dans le présent résumé, on considèrera les équations de Navier-Stokes anisothermes

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + \operatorname{div}(u \otimes u) + \frac{1}{\rho} \operatorname{grad} p - \nu \Delta u + \beta g \theta e_y = 0, \\ \operatorname{div} u = 0, \\ \frac{\partial \theta}{\partial t} + \operatorname{div}(u \theta) - \kappa \Delta \theta = 0. \end{cases}$$

En calcul extérieur, les équations précédentes s'écrivent [5]

$$\begin{cases} \frac{\partial \omega}{\partial t} + \iota_u d\omega + \frac{1}{\rho} d\bar{p} + \nu \star d \star d\omega + \beta g \theta dy = 0, \\ \star d \star \omega = 0, \\ \frac{\partial \theta}{\partial t} + \star d \star (\theta \omega) - \kappa \star d \star d\theta = 0 \end{cases} \quad (5)$$

où $\omega = u^\flat$ et $\bar{p}$ est une pression modifiée. Pour la résolution, on prend comme inconnue la fonction de courant ψ telle que $\omega = \star d\psi$. De plus, on applique l'opérateur d à la première équation de (5) pour enlever la pression. On résout les équations sur le maillage primal droit représenté sur la Figure 5 sur lequel le Hodge discret diagonal est singulier. Avec le Hodge analytique, on considère un maillage dual barycentrique et un maillage dual incentrique. Pour une solution exacte sous forme d'onde traversante (traveling wave) [7]

$$\begin{cases} u_x = u_1 e^{\lambda \xi / \nu} + \frac{\kappa^2 \beta a b g}{(c + w)^2 (\kappa - \nu)} \theta_1 e^{\lambda \xi / \kappa} \\ u_y = \frac{w - a u_x}{b}, \\ p = -\frac{\rho \beta b g \kappa \theta_1}{c + w} e^{\lambda \xi / \kappa}, \\ \theta = \theta_1 e^{\lambda \xi / \kappa} \end{cases}$$

où

$$\xi = ax + by + ct$$

et des conditions aux limites de Dirichlet, on obtient les erreurs relatives représentées sur la Figure 5. On peut constater que la précision est assez bonne.

Pour étudier sa convergence et sa robustesse, le Hodge analytique a été testé sur 3 séries de quatre maillages primaux fortement non structurés. Dans la première série, il y a environ 15% de triangles non-Delaunay. Ils sont grisés sur la Figure 6. Dans la deuxième série (Figure 7), il y a environ 25% de triangles non-Delaunay, tandis que dans la troisième série (Figure 8), il y en a environ 50%. Dans tous les cas, un maillage dual barycentrique a été utilisé.

Sur tous ces maillages, le Hodge discret analytique converge bien, ce qui montre sa robustesse. L'évolution de l'erreur globale en fonction de la longueurs moyennes des arêtes est montrée dans la Figure 9. Le taux de convergence de la fonction de courant est proche de 2 pour la première série de maillage et descend à 1.65 pour les maillages à 50% non-Delaunay (voir Table 1). Pour la température, le taux de convergence est moins élevé.

Beaucoup d'autres expériences numériques (écoulement de Poiseuille, application sur un maillage non plat, ...) seront présentées oralement.

5 Conclusion

On a proposé une alternative robuste à l'opérateur de Hodge discret diagonal en DEC. Ce nouvel opérateur de Hodge ne requiert pas un maillage primal bien centré et laisse la possibilité

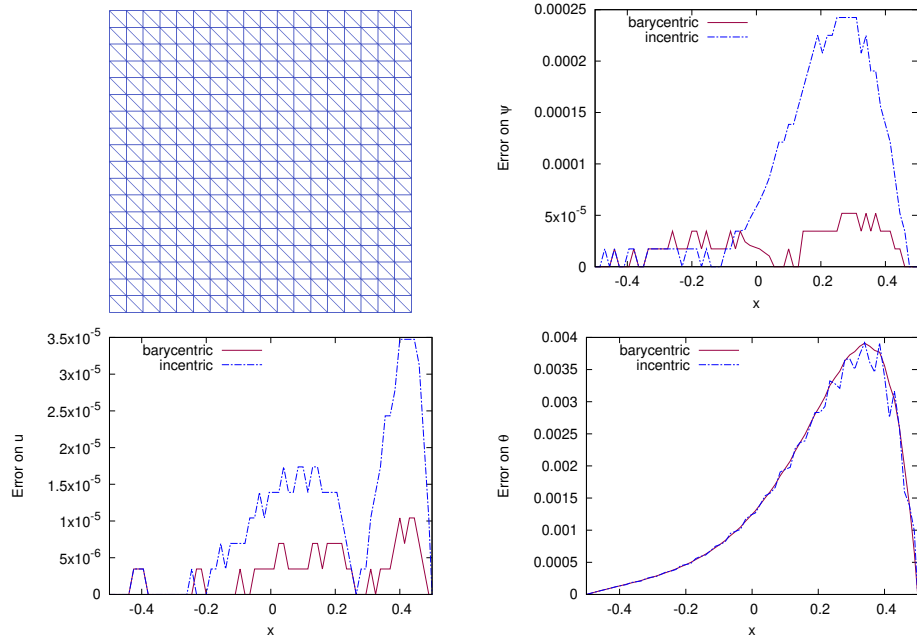


Figure 5: Maillage droit et erreurs relatives

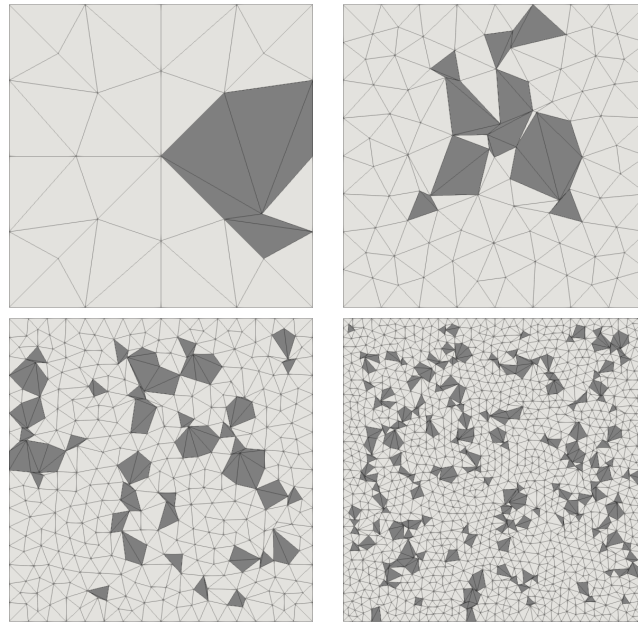


Figure 6: Série de maillages fortement non structurés à 15% non Delaunay

	Stream function	Temperature
15% non-Delaunay meshes	1.9005	1.5159
25% non-Delaunay meshes	1.6729	1.2154
50% non-Delaunay meshes	1.6591	0.8660

Table 1: Taux de convergence

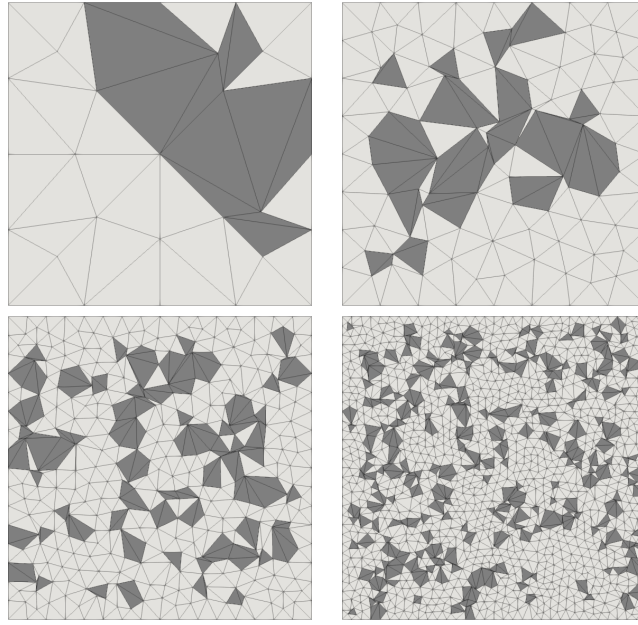


Figure 7: Série de maillages fortement non structurés à 25% non Delaunay

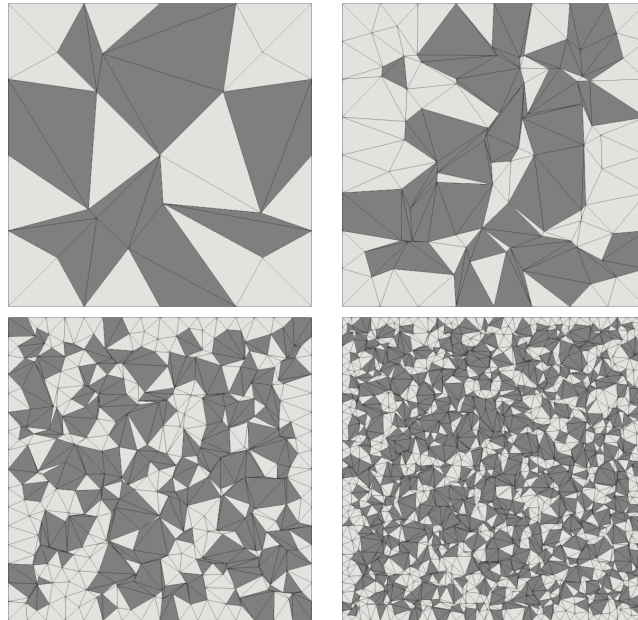


Figure 8: Série de maillages fortement non structurés à 50% non Delaunay

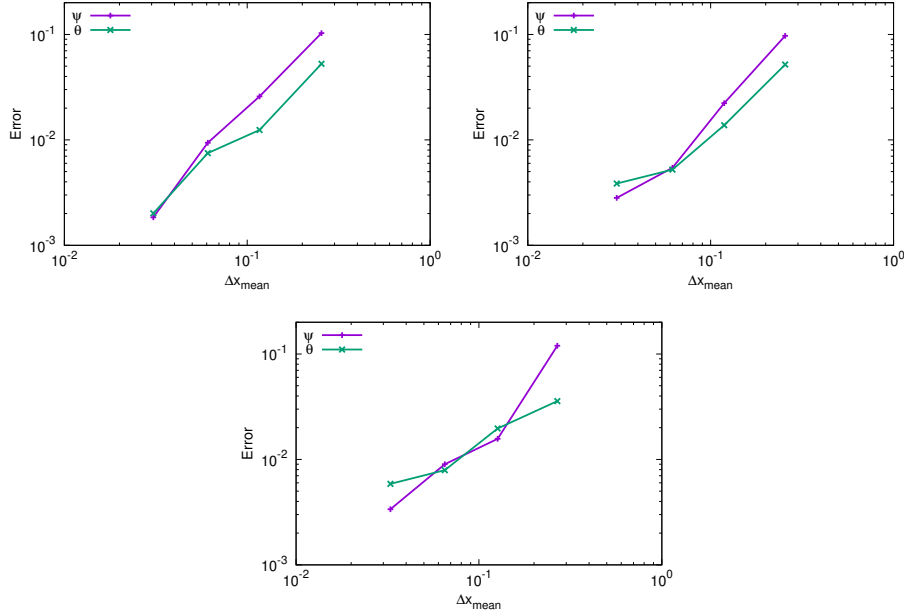


Figure 9: Convergence sur la série de maillages à 15% (en haut à gauche), 25% (en haut à droite) et 50% (en bas) non-Delaunay

de choisir le maillage dual. On a montré son efficacité à résoudre les équations de Navier-Stokes anisothermes. On a montré sa robustesse sur des maillages simpliciaux fortement non structurés où certains triangles sont très hétérogènes, aussi bien en taille qu'en aspect.

La construction du Hodge analytique a été présentée sur un maillage de dimension 2. Son extension à la dimension supérieure est à l'étude. Cette extension est particulièrement utile car construire un maillage bien centré s'avère compliqué en dimension supérieure à 2.

References

- [1] A. Hirani, K. Nakshatrala, and J. Chaudhry. Numerical method for darcy flow derived using discrete exterior calculus. *International Journal for Computational Methods in Engineering Science and Mechanics*, 16:151–169, 2015.
- [2] M. Mohamed, A. Hirani, and R. Samtaney. Discrete exterior calculus discretization of incompressible navier–stokes equations over surface simplicial meshes. *Journal of Computational Physics*, 312:175 – 191, 2016.
- [3] D. Razafindralandy, A. Hamdouni, and M. Chhay. A review of some geometric integrators. *Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences*, 5(1):16, 2018.
- [4] A. Hirani. *Discrete Exterior Calculus*. Phd thesis, California Institute of Technology, Pasadena, CA, USA, 2003.
- [5] R. Abraham, J. E. Marsden, and R. Ratiu. *Manifolds, Tensor Analysis, and Applications*. Springer-Verlag New York, Inc., 1988.
- [6] A. Bossavit. Computational electromagnetism and geometry: (2) Network constitutive laws. *Journal of the Japan Society of Applied Electromagnetics and Mechanics*, 7(3):204–301, 1999.
- [7] R. Ayoub, A. Hamdouni, and D. Razafindralandy. A new hodge operator in discrete exterior calculus. application to fluid mechanics. *Communications on Pure & Applied Analysis*, 20(6):2155–2185, 2021.