

GdR GDM La Rochelle, 7 au 9 juillet 2021

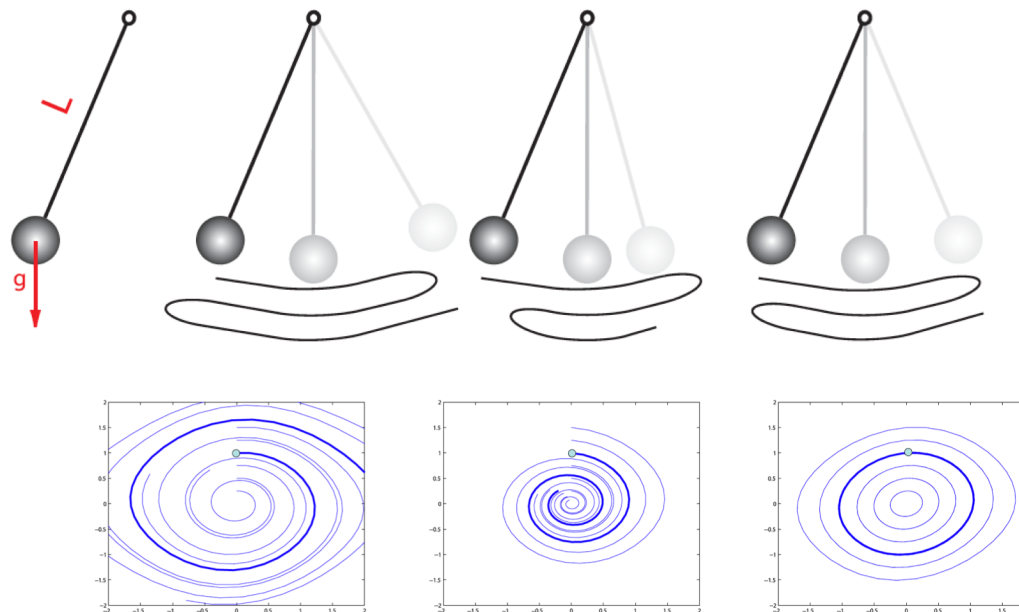
Introduction aux Intégrateurs Géométriques

Anthony Gravouil

- *Les simulations numériques précises des systèmes dynamiques sont essentielles dans pratiquement tous les domaines de la physique.*
 - *Cependant, la plupart des méthodes numériques traditionnelles ne prennent pas en compte la structure géométrique sous-jacente du système physique, conduisant à des résultats de simulation qui peuvent suggérer des comportements non-physiques.*
 - *Le champ de l'intégration géométrique numérique (GNI) concerne les méthodes numériques qui respectent la physique fondamentale d'un problème en préservant les propriétés géométriques des équations différentielles associées.*
 - *Les recherches menées depuis plus de 30 ans ont produit des Intégrateurs Géométriques si précis qu'ils sont maintenant utilisés pour définir des benchmarks pour des simulations en temps longs des systèmes dynamiques conservatifs.*
- ■ ■ ➡ *Cependant, la construction générale des Intégrateurs Géométriques pour les problèmes de mécanique de grande complexité et de grande dimension est toujours une question ouverte.*

Prediction is difficult, especially of the future. — Mark Twain

- *Les Intégrateurs Géométriques séduisent les physiciens, les mathématiciens et les ingénieurs pour de nombreuses raisons:*
 - *Pour les physiciens, la structure géométrique d'un système dynamique révèle des caractéristiques qualitatives essentielles dans l'évolution du système – caractéristiques qui devraient apparaître dans une simulation précise.*
 - *Pour les mathématiciens, les méthodes numériques basées sur des principes variationnels discrets peuvent présenter une stabilité numérique supérieure et capacités de préservation de la structure sous-jacente (structure symplectique, groupe de Lie, structure de Dirac, Géométrie différentielle discrète, calcul extérieur discret).*
 - *Pour les ingénieurs, ces méthodes peuvent faire progresser la conception et l'analyse basées sur des modèles en préservant la fidélité du système physique en temps continu, permettant, par exemple, les prédictions plus précises du transfert d'énergie entre les sous-systèmes.*



- *Depuis l'émergence des méthodes de calcul, des propriétés fondamentales telles que la précision, la stabilité, la convergence et l'efficacité de calcul ont été considérées comme cruciales pour décider de l'utilité d'un algorithme numérique.*
- *Aujourd'hui, les aspects liés à la préservation de la structure sous-jacente sont considérés comme essentielles, en plus de ces propriétés fondamentales.*
- *L'une des idées clés de la préservation de la structure approchée consiste à traiter la méthode numérique comme un système dynamique discret qui se rapproche du flux de l'équation différentielle continue au lieu de se concentrer sur l'approximation numérique d'une seule trajectoire.*
- *Une telle approche permet une meilleure compréhension des invariants et les propriétés qualitatives de la méthode numérique.*
- *Les systèmes mécaniques, en particulier, présentent souvent des invariants physiques essentiels tels que la quantité de mouvement, l'énergie ou la vorticité ; le comportement de ces invariants dans la simulation fournissent une mesure cruciale de la précision.*

A - Géométrie et systèmes dynamiques

A-1 deux conditions de base pour étudier la dynamique de systèmes mécaniques:

- identifier l'ensemble de toutes les configurations possibles du système comme la variété des configurations
- développer une fonctionnelle Lagrangienne qui est une fonction à valeur réelle définie sur l'espace d'état

Considérons un système mécanique évoluant sur une variété de configuration Q .

L'espace tangent à Q pour la configuration $\mathbf{q} \in Q$ est l'ensemble de tous les vecteurs tangents situés en $\mathbf{q}$, notés $T_{\mathbf{q}}Q$.

L'espace dual de $T_{\mathbf{q}}Q$, c'est-à-dire l'ensemble de tous les cartes linéaires de $T_{\mathbf{q}}Q$ dans $\mathbb{R}$, est appelé l'espace cotangent et noté $T_{\mathbf{q}}^*Q$.

Pour la trajectoire $\mathbf{q}(t)$ sur la variété Q , la vitesse $\dot{\mathbf{q}}(t)$ à l'instant t est le vecteur tangent à Q , basé au point $\mathbf{q}(t) \in Q$.

Le fibré tangent de Q , noté TQ , est l'union de tous les espaces tangents à Q .

La configuration et la vitesse $(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t))$ appartiennent à l'espace tangent Q à $\mathbf{q}(t)$ et ainsi l'espace d'état est représenté par le fibré tangent TQ .

D'autre part, la configuration et la quantité de mouvement $(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))$ appartiennent à l'espace cotangent, c'est-à-dire le fibré cotangent T^*Q .

Par conséquent, le Lagrangien $L : TQ \rightarrow \mathbb{R}$ est défini sur le fibré tangent TQ alors que l'Hamiltonien $H : T^*Q \rightarrow \mathbb{R}$ est défini sur le fibré cotangent T^*Q .



Cette formulation géométrique est fondamentale pour décrire et analyser les systèmes dynamiques globalement sans recourir à des cartes de coordonnées locales, mais n'est pas assez utilisée par la communauté de l'ingénierie.

A-2 Mécanique de Lagrange

- Principe de Hamilton pour des systèmes conservatifs de dimension finie [1,2,3] : $L : TQ \rightarrow \mathbb{R}$

$$\delta \int_{t_i}^{t_f} L(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t)) dt = \int_{t_0}^{t_f} \left[\frac{\partial L(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t))}{\partial \mathbf{q}(t)} \cdot \delta \mathbf{q}(t) + \frac{\partial L(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t))}{\partial \dot{\mathbf{q}}(t)} \cdot \delta \dot{\mathbf{q}}(t) \right] dt = 0$$

- Equations d'Euler-Lagrange correspondantes:

$$\frac{\partial L(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t))}{\partial \mathbf{q}} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t))}{\partial \dot{\mathbf{q}}} \right) = 0$$

- Pour les Lagrangiens autonomes, l'énergie se conserve le long des trajectoires
- D'après le théorème de Noether, il existe une équation de conservation correspondant à chaque symétrie qui laisse le Lagrangien invariant [4]
- Les Lagrangiens conservatifs conservent une forme anti-symétrique symplectique le long des trajectoires [5]
- Cependant, pour certaines applications (interaction de vortex ponctuels) le Lagrangien/Hamiltonien est dégénéré [6]
- En présence de forces externes non conservatives $\mathbf{f}_L(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t))$, la structure symplectique n'est pas vérifiée et l'énergie n'est plus conservée [2]

$$\delta \int_{t_i}^{t_f} L(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t)) dt + \int_{t_i}^{t_f} \mathbf{f}_L(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t)) \cdot \delta \mathbf{q} dt = 0$$

[1] Hamilton WR. VII. Second essay on a general method in dynamics. Philosophical Transactions of the Royal Society of London. 1835;125:95–144.

[2] Marsden JE, Pekarsky S, Shkoller S, West M. Variational methods, multisymplectic geometry and continuum mechanics. Journal of Geometry and Physics. 2001;38(3-4):253–284.

[3] Goldstein H. Classical Mechanics. Reading, MA: Addison-Wesley; 1980. 672 pages.

[4] Noether E. Invariante Variations Probleme, Nachr. Ges. Wiss. Göttingen Math-Phys Kl. 1918;p. 235–257.

[5] Marsden JE, Ratiu TS. Introduction to mechanics and symmetry: a basic exposition of classical mechanical systems. vol. 17. Springer Science & Business Media; 2013.

[6] Newton PK. The N-vortex problem: analytical techniques. vol. 145. Springer Science & Business Media; 2013.

A-3 Différents types de formulations Variationnelles où la mécanique Lagrangienne est applicable:

- Contraintes holonomes (contraintes sur la variété des configurations) [1,2] :

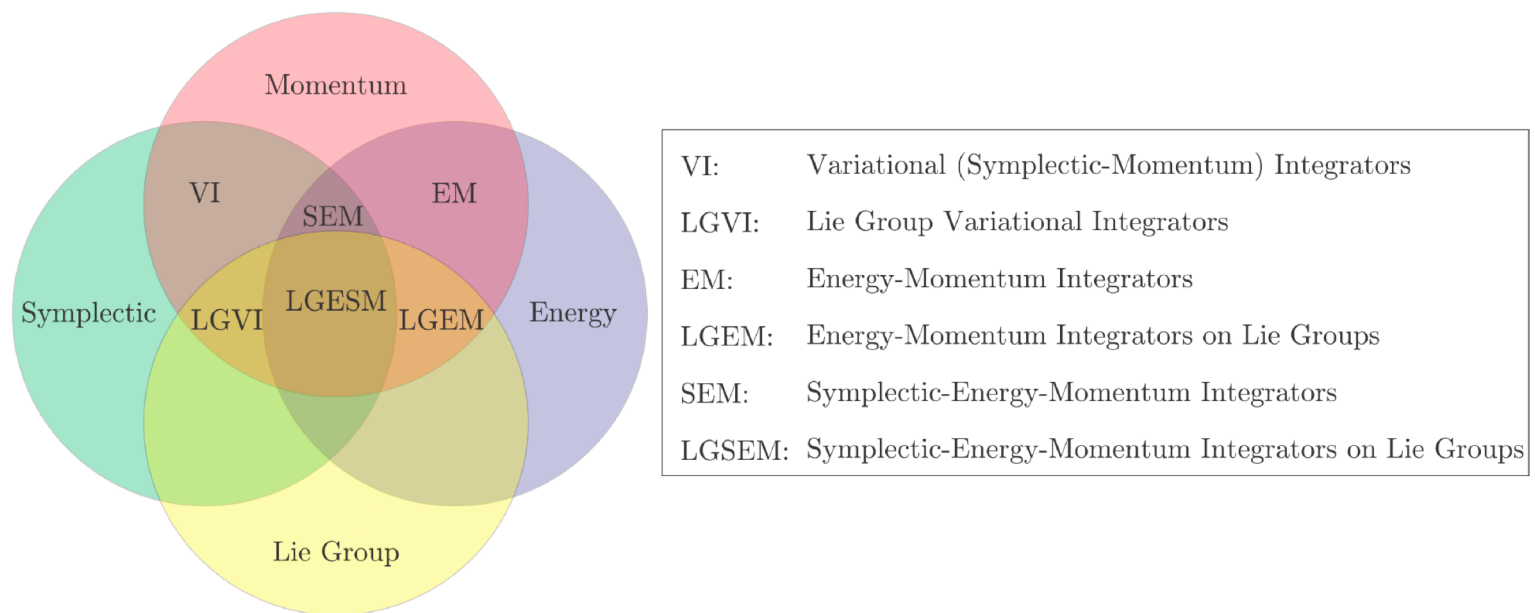
$$\bar{L}(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t), \lambda(t)) = L(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t)) - \langle \lambda(t), \phi(\mathbf{q}(t)) \rangle$$

- Contraintes non-holonomes (contraintes sur la variété des configurations) [3,4] : théorie des connections de Ehresmann (collection de sous-espaces linéaires $\mathcal{D}_{\mathbf{q}} \subset T_{\mathbf{q}}Q$ qui décrivent les problèmes atteignables par les vitesses)
- Problèmes non-réguliers [5] : modèles de collisions, fragmentations. Concepts de l'analyse non-régulière, lemme de viabilité de Moreau [13]
$$\begin{cases} g_N \geq 0 \\ t_N \leq 0 \\ g_N \cdot t_N = 0 \end{cases} \iff \begin{cases} \text{si } g_N > 0 \text{ alors } i_N = 0 \\ \text{si } g_N = 0 \text{ alors } \begin{cases} \dot{g}_N \geq 0 \\ i_N \leq 0 \\ \dot{g}_N \cdot i_N = 0 \end{cases} \end{cases}$$
- Incertitudes [6,7] : définition d'une action stochastique basée sur le flot stochastique de systèmes Hamiltoniens aléatoires perturbés (flot stochastique symplectique, théorème de Noether stochastique)
- Systèmes de dimensions infinies [8,9] : théorie espace-temps covariante des champs. Dans ce cas, l'analogue covariant de la symplecticité est une forme multi-symplectique
- Problèmes non-variationnels [10,11,12] : même si de nombreux problèmes conservatifs ou non-conservatifs utilisent le formalisme de Lagrange, cela exclut de nombreux problèmes de mécanique des fluides, de la thermodynamique et la physique des plasmas: Lagrangiens formels.

- [1] Marsden JE, Pekarsky S, Shkoller S, West M. Variational methods, multisymplectic geometry and continuum mechanics. *Journal of Geometry and Physics*. 2001;38(3-4):253–284.
- [2] Abraham R, Marsden JE. *Foundations of mechanics*. vol. 36. Benjamin/Cummings Publishing Company Reading, Massachusetts; 1978.
- [3] Bloch AM, Krishnaprasad PS, Marsden JE, Murray RM. Nonholonomic mechanical systems with symmetry. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*. 1996;136(1):21–99.
- [4] Marsden JE, Montgomery R, Ratiu TS. Reduction, symmetry, and phases in mechanics. vol. 436. American Mathematical Soc.; 1990.
- [5] Fetecau RC, Marsden JE, Ortiz M, West M. Nonsmooth Lagrangian mechanics and variational collision integrators. *SIAM Journal on Applied Dynamical Systems*. 2003;2(3):381–416.
- [6] Bismut JM. *M canique alatoire*. In: *Ecole d'Et de Probabilités de Saint-Flour X-1980*. Springer; 1982. p. 1–100.
- [7] Bou-Rabee N, Owahdi H. Stochastic variational integrators. *IMA Journal of Numerical Analysis*. 2009;29(2):421–443.
- [8] Gotay M, Isenberg J, Marsden J, Montgomery R. Momentum maps and classical fields, part I, covariant field theory (2004). arXiv preprint physics/9801019;.
- [9] Marsden JE, Patrick GW, Shkoller S. Multisymplectic geometry, variational integrators, and nonlinear PDEs. *Communications in Mathematical Physics*. 1998;199(2):351–395.
- [10] Ibragimov NH. Integrating factors, adjoint equations and Lagrangians. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*. 2006;318(2):742–757.
- [11] Ibragimov NH. A new conservation theorem. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*. 2007;333(1):311–328.
- [12] Kraus M, Maj O. Variational integrators for nonvariational partial differential equations. *Physica D: Nonlinear Phenomena*. 2015;310:37–71.
- [13] Moreau J. J. Numerical aspects of the sweeping process. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 177, no 3, 1999, p. 329–349, Elsevier.

B - Méthodes de préservation de la structure du système dynamique

Nous nous concentrons sur les intégrateurs numériques qui préservent certains des invariants du système mécanique, comme l'énergie, la quantité de mouvement ou la forme symplectique. D'autres propriétés qui peuvent être importantes à préserver sont le volume de l'espace des phases, les symétries continues ou discrètes, la réversibilité temporelle, la forme physique correcte de la dissipation, etc.



Exemples de méthodes de préservation de la structure d'un système mécanique à partir des caractéristiques qualitatives qu'elles préservent [1]

B - I Méthodes symplectiques

$$\mathbb{J} \frac{ds}{dt} = \nabla H \quad \mathbb{J} = \begin{pmatrix} 0 & -I_{n_q} \\ I_{n_q} & 0 \end{pmatrix} \quad s = (\mathbf{q}, \mathbf{p})^\top \quad \nabla H = (\nabla_{\mathbf{q}} H, \nabla_{\mathbf{p}} H)^\top \quad \Phi_t : \begin{matrix} S \longrightarrow S \\ s_0 \longmapsto s(t) \end{matrix}$$

$$\omega = \sum_{i=1}^{n_q} dp_i \wedge dq_i \equiv d\mathbf{p} \wedge d\mathbf{q}. \quad \Phi_t^* \omega = \omega$$

$$(\nabla \Phi_t)^\top \mathbb{J} (\nabla \Phi_t) = \mathbb{J}$$

$$d\mathbf{p}(t) \wedge d\mathbf{q}(t) = d\mathbf{p}(0) \wedge d\mathbf{q}(0)$$

- Ces méthodes préservent la nature symplectique des systèmes Hamiltoniens, conservent les différents invariants et reproduisent le comportement dynamique sur des temps longs. *On remplace la question de « l'erreur numérique du problème discret » par la question du « problème approché qui est résolu exactement ».*
- Un premier intégrateur numérique symplectique des équations de Hamilton [1]
- Méthodes de Runge-Kutta symplectiques [2,3,], classes d'intégrateurs symplectiques explicites ou implicites [4,5], différence centrée (mécanique des structures, 1959), Verlet (dynamique moléculaire, 1962)
- *Ge et Marsden ont montré qu'à pas de temps de taille finie et fixée, il n'est pas possible de préserver à la fois la forme symplectique, le moment, et l'énergie [6]*
- Par conséquent, on considère les deux sous catégories d'intégrateurs: (i) intégrateurs conservant l'énergie et les équations de conservations (energy momentum integrators) et (ii) intégrateurs conservant la forme symplectique et les équations de conservation (symplectic-momentum integrators)

[1] De Vogelaere R. Methods of integration which preserve the contact transformation property of the Hamilton equations. Technical report (University of Notre Dame Dept of Mathematics). 1956;.

[2] Lasagni F. Canonical Runge-Kutta methods. Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik (ZAMP). 1988;39(6):952–953.

[3] Sanz-Serna J. Runge-Kutta schemes for Hamiltonian systems. BIT Numerical Mathematics. 1988;28(4):877–883.

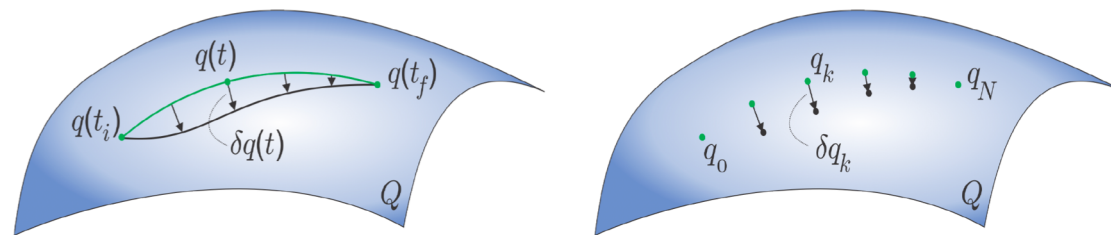
[4] Suris YB. On the conservation of the symplectic structure in the numerical solution of Hamiltonian systems. Numerical Solution of Ordinary Differential Equations. 1988;p. 148– 160.

[5] Reich S. Momentum conserving symplectic integrators. Physica D: Nonlinear Phenomena. 1994;76(4):375–383.

[6] Ge Z, Marsden JE. Lie–Poisson integrators and Lie–Poisson Hamilton–Jacobi theory. Phys Lett A. 1988;133:134–139.

B - II Intégrateurs variationnels

- Ces méthodes – plus récentes que les intégrateurs symplectiques - utilisent les concepts de la mécanique discrète, c'est-à-dire un analogue discret de la mécanique Lagrangienne/Hamiltonienne continue en temps.
- Du fait de leur nature variationnelle, ces méthodes peuvent être aisément étendues à la mécanique non-conservative par discrétisation du principe de Lagrange-d'Alembert (action discrète). Les points stationnaires de cette action discrète donnent les trajectoires discrètes en temps du système dynamique.
- Equations d'Euler-Lagrange discrètes à partir d'un Lagrangien discret [1,2]
- Application aux systèmes intégrables [3,4], cas des systèmes libres de corps rigides [5]
- Théorie de la mécanique discrète [6]: analogue discret des principes variationnels [7]



Mécanique variationnelle continue en temps versus mécanique variationnelle discrète en temps

- [1] Maeda S. Lagrangian formulation of discrete systems and concept of difference space. Math Japonica. 1982;27:345–356.
- [2] Maeda S. Extension of discrete Noether theorem. Math Japonica. 1981;26(1):85–90.
- [3] Veselov AP. Integrable discrete-time systems and difference operators. Functional Analysis and its Applications. 1988;22(2):83–93.
- [4] Veselov AP. Integrable Lagrangian correspondences and the factorization of matrix polynomials. Functional Analysis and Its Applications. 1991;25(2):112–122.
- [5] Moser J, Veselov AP. Discrete versions of some classical integrable systems and factorization of matrix polynomials. Communications in Mathematical Physics. 1991;139(2):217–243.
- [6] Marsden JE, West M. Discrete mechanics and variational integrators. Acta Numerica. 2001;10:357–514.
- [7] Wendlandt JM, Marsden JE. Mechanical integrators derived from a discrete variational principle. Physica D: Nonlinear Phenomena. 1997;106(3-4):223–246.

- *Lagrangien discret:*

$$L_d(\mathbf{q}_k, \mathbf{q}_{k+1}) \approx \int_{t_k}^{t_{k+1}} L(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t)) dt$$

- *Analogue du principe d'Hamilton discret:*

$$\delta \sum_{k=0}^{N-1} L_d(\mathbf{q}_k, \mathbf{q}_{k+1}) = \sum_{k=0}^{N-1} \left[\frac{\partial L_d(\mathbf{q}_k, \mathbf{q}_{k+1})}{\partial \mathbf{q}_k} \cdot \delta \mathbf{q}_k + \frac{\partial L_d(\mathbf{q}_k, \mathbf{q}_{k+1})}{\partial \mathbf{q}_{k+1}} \cdot \delta \mathbf{q}_{k+1} \right] = 0$$

- *Equations d'Euler-Lagrange discrètes:*

$$D_2 L_d(\mathbf{q}_{k-1}, \mathbf{q}_k) + D_1 L_d(\mathbf{q}_k, \mathbf{q}_{k+1}) = \mathbf{0} \quad k = 1, \dots, N-1$$

- *Transformée de Legendre discrète:*

$$\begin{aligned} -D_1 L_d(\mathbf{q}_k, \mathbf{q}_{k+1}) &= \mathbf{p}_k \\ \mathbf{p}_{k+1} &= D_2 L_d(\mathbf{q}_k, \mathbf{q}_{k+1}) \end{aligned}$$

- *Marsden et West ont montré qu'un Lagrangien discret d'ordre $r+1$ conduit à des intégrateurs variationnels d'ordre r [1].*
- *Préservation d'une forme symplectique discrète et moment discret [1], erreur exponentielle décroissante sur l'énergie [2,3,4,5,6]. Idéal pour les simulations en temps longs des systèmes dynamiques conservatifs*

[1] Marsden JE, West M. Discrete mechanics and variational integrators. Acta Numerica. 2001;10:357–514.

[2] Wendlandt JM, Marsden JE. Mechanical integrators derived from a discrete variational principle. Physica D: Nonlinear Phenomena. 1997;106(3-4):223–246.

[3] Hairer E, Lubich C, Wanner G. Geometric numerical integration: structure-preserving algorithms for ordinary differential equations. vol. 31. Springer Science & Business Media; 2006.

[4] Lew AJ, Marsden JE, Ortiz M, West M. Variational time integrators. International Journal for Numerical Methods in Engineering. 2004;60(1):153–212.

[5] Hairer E, Lubich C. The life-span of backward error analysis for numerical integrators. Numerische Mathematik. 1997;76(4):441–462.

[6] Leimkuhler B, Reich S. Simulating Hamiltonian dynamics. vol. 14. Cambridge university press; 2004.

- *Contrairement aux méthodes symplectiques, l'approche variationnelle s'étend facilement aux systèmes non conservatifs et a un attrait plus théorique : la propriété symplectique ainsi que les quantités conservées discrètes peuvent être dérivées directement de la nature variationnelle de l'algorithme.*
- *L'approche variationnelle a été utile par exemple pour expliquer l'excellente performance numérique des intégrateurs de Newmark [1]*
- *Cas des forces externes non-conservatives: $\mathbf{f}_d^\pm : Q \times Q \rightarrow T^*Q$*

$$\mathbf{f}_d^+(\mathbf{q}_k, \mathbf{q}_{k+1}) \cdot \delta \mathbf{q}_{k+1} + \mathbf{f}_d^-(\mathbf{q}_k, \mathbf{q}_{k+1}) \cdot \delta \mathbf{q}_k \approx \int_{t_k}^{t_{k+1}} \mathbf{f}_L(\mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t)) \cdot \delta \mathbf{q} dt$$

$$\delta \sum_{k=0}^{N-1} L_d(\mathbf{q}_k, \mathbf{q}_{k+1}) + \sum_{k=0}^{N-1} [\mathbf{f}_d^+(\mathbf{q}_k, \mathbf{q}_{k+1}) \cdot \delta \mathbf{q}_{k+1} + \mathbf{f}_d^-(\mathbf{q}_k, \mathbf{q}_{k+1}) \cdot \delta \mathbf{q}_k] = 0$$

$$- D_1 L_d(\mathbf{q}_k, \mathbf{q}_{k+1}) - \mathbf{f}_d^-(\mathbf{q}_k, \mathbf{q}_{k+1}) = \mathbf{p}_k$$

$$\mathbf{p}_{k+1} = D_2 L_d(\mathbf{q}_k, \mathbf{q}_{k+1}) + \mathbf{f}_d^+(\mathbf{q}_k, \mathbf{q}_{k+1})$$

- *En présence de forces externes non-conservatives, il n'y a pas de résultats théoriques sur le comportement stable à long terme. Malgré le manque de garanties théoriques, les résultats numériques pour une large classe de modèles dissipatifs ont démontré un excellent comportement sur l'énergie discrète vis-à-vis intégrateurs traditionnels.*

[1] Kane C, Marsden JE, Ortiz M, West M. Variational integrators and the Newmark algorithm for conservative and dissipative mechanical systems. International Journal for Numerical Methods in Engineering. 2000;49(10):1295–1325.

- *L'approche variationnelle pour dériver des intégrateurs mécaniques a été étendue avec succès à un large classe de problèmes tels que :*

➡ *Intégrateurs variationnels à pas de temps adaptatifs préservant l'énergie [1,2,3,4,5]*

Cela résout le paradoxe de Ge et Marsden et permet d'avoir des intégrateurs numériques symplectiques, qui conservent le moment et l'énergie!

➡ *Intégrateurs variationnels pour systèmes mécaniques contraints : liaisons holonomes [6], non-holonomes et pas de temps variables [7,8], robotique [9], dynamique moléculaire, mouvements planétaires.*

➡ *Intégrateurs variationnels stochastiques [10,11,12,13]: intégrateurs symplectiques et théorème de Noether discret stochastique.*

- [1] Kane C, Marsden JE, Ortiz M. Symplectic-energy-momentum preserving variational integrators. Journal of mathematical physics. 1999;40(7):3353–3371.
- [2] Lee TD. Can time be a discrete dynamical variable? Physics Letters B. 1983;122(3-4):217– 220.
- [3] Shibberu Y. Is symplectic-energy-momentum integration well-posed?; 2006. arXiv:mathph/ 0608016.
- [4] Shibberu Y. How to regularize a symplectic-energy-momentum integrator; 2005. arXiv:math/0507483 [math.NA].
- [5] Sharma H, Patil M, Woolsey C. Energy-preserving variational integrators for forced Lagrangian systems. Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. 2018;64:159–177.
- [6] Marsden JE, West M. Discrete mechanics and variational integrators. Acta Numerica. 2001;10:357–514.
- [7] Bloch AM, Baillieul J, Crouch PE, Marsden JE, Zenkov D, Krishnaprasad PS, et al. Nonholonomic mechanics and control. vol. 24. Springer; 2003.
- [8] Cort s J. Energy conserving nonholonomic integrators. arXiv preprint math/0209314. 2002;.
- [9] Kobilarov M, Marsden JE, Sukhatme GS. Geometric discretization of nonholonomic systems with symmetries. Discrete and Continuous Dynamical Systems Series S. 2010;3(1):61–84.
- [10] Milstein GN, Repin YM, Tretyakov MV. Numerical methods for stochastic systems preserving symplectic structure. SIAM Journal on Numerical Analysis. 2002;40(4):1583–1604.
- [11] Milstein GN, Repin YM, Tretyakov MV. Symplectic integration of Hamiltonian systems with additive noise. SIAM Journal on Numerical Analysis. 2002;39(6):2066–2088.
- [12] Bou-Rabee N, Owhadi H. Stochastic variational partitioned Runge-Kutta integrators for constrained systems. arXiv preprint arXiv:07092222. 2007;.
- [13] Holm DD, Tyrannowski TM. Stochastic discrete Hamiltonian variational integrators. BIT Numerical Mathematics. 2018;58(4):1009–1048.

- 
Intégrateurs variationnels pour la dynamique des impacts [1,2]: le temps de collision est résolu variationnellement. Préservation de la structure symplectique et excellent comportement énergétique dans le cas non-régulier, intégrateurs variationnels discontinus.
- 
Intégrateurs variationnels Hamiltoniens [3,4,5]: Les formalismes Lagrangiens et Hamiltoniens ne sont pas équivalents pour les systèmes non hyperréguliers. Méthodes de construction directe d'Hamiltoniens discrets (très efficace pour les Hamiltoniens dégénérés, cas des tourbillons ponctuels en interaction).
- 
Intégrateurs variationnels multisymplectiques [6,7,8]: intégrateurs variationnels pour les équations aux dérivées partielles variationnelles, géométrie multisymplectique [6], intégrateurs variationnels asynchrones élément par élément [7].

- [1] Fetecau RC, Marsden JE, West M. Variational multisymplectic formulations of nonsmooth continuum mechanics. In: Perspectives and problems in nonlinear science. Springer; 2003. p. 229–261.
- [2] Johnson G, Leyendecker S, Ortiz M. Discontinuous variational time integrators for complex multibody collisions. International Journal for Numerical Methods in Engineering. 2014;100(12):871–913.
- [3] Lall S, West M. Discrete variational Hamiltonian mechanics. Journal of Physics A: Mathematical and general. 2006;39(19):5509.
- [4] Leok M, Zhang J. Discrete Hamiltonian variational integrators. IMA Journal of Numerical Analysis. 2010;31(4):1497–1532.
- [5] Schmitt JM, Leok M. Properties of Hamiltonian variational integrators. IMA Journal of Numerical Analysis. 2017;38(1):377–398.
- [6] Gotay MJ, Isenberg J, Marsden JE, Montgomery R. Momentum maps and classical relativistic fields. Part I: Covariant field theory. arXiv preprint physics/9801019. 1998;.
- [7] Lew AJ, Marsden JE, Ortiz M, West M. Asynchronous variational integrators. Archive for Rational Mechanics and Analysis. 2003;167(2):85–146.
- [8] Marsden JE, Patrick GW, Shkoller S. Multisymplectic geometry, variational integrators, and nonlinear PDEs. Communications in Mathematical Physics. 1998;199(2):351–395.

B - III Intégrateurs conservant l'énergie et les équations de conservations (energy momentum integrators, EMI)

- *Historiquement, la majorité de ces développements sont dus à la découverte que les méthodes numériques conventionnelles inconditionnellement stables en dynamique linéaire (analyse spectrale, A-stabilité) peuvent perdre leur stabilité dans le régime non-linéaire [1].*
- *Ainsi, la conservation de l'énergie permet d'assurer la stabilité dans le régime non-linéaire [2].*
- *Ceci a conduit à un fort développement des intégrateurs EMI, indépendamment des intégrateurs symplectiques [2].*
- *Labudde et Greenspan: Application à la mécanique particulaire [3,4,5].*
- *Simo et Tarnow: méthode générale de construction des EMI pour une large classe de systèmes mécaniques [6,7].*

[1] Belytschko T, Schoeberle D. On the unconditional stability of an implicit algorithm for nonlinear structural dynamics. *Journal of Applied Mechanics*. 1975;42(4):865–869.

[2] Gonzalez O, Simo JC. On the stability of symplectic and energy-momentum algorithms for non-linear Hamiltonian systems with symmetry. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 1996;134(3-4):197–222.

[3] LaBudde RA, Greenspan D. Discrete mechanics—a general treatment. *Journal of Computational Physics*. 1974;15(2):134–167.

[4] LaBudde RA, Greenspan D. Energy and momentum conserving methods of arbitrary order for the numerical integration of equations of motion. *Numerische Mathematik*. 1975;25(4):323–346.

[5] LaBudde RA, Greenspan D. Energy and momentum conserving methods of arbitrary order for the numerical integration of equations of motion. *Numerische Mathematik*. 1976;26(1):1–16.

[6] Simo JC, Tarnow N. The discrete energy-momentum method. Conserving algorithms for nonlinear elastodynamics. *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik (ZAMP)*. 1992;43(5):757–792.

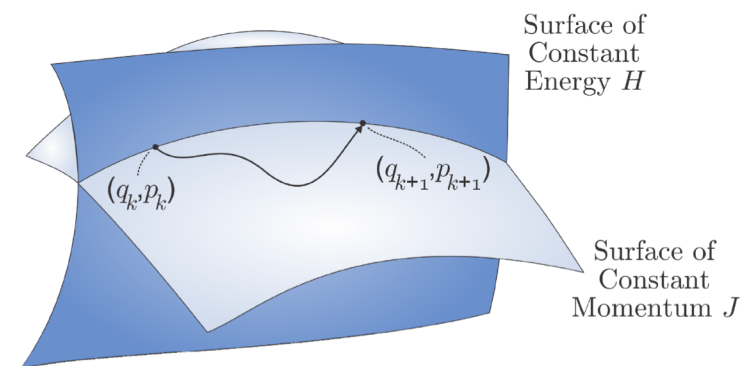
[7] Simo JC, Tarnow N, Wong KK. Exact energy-momentum conserving algorithms and symplectic schemes for nonlinear dynamics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 1992;100(1):63–116.

➡ Idée générale des EMI:

- On considère un système mécanique en dimension finie avec une variété des configurations Q et l'espace des phases canonique T^*Q .
- Dans le cas simple de systèmes Hamiltoniens/Lagrangiens avec matrice de masse constante et énergie potentielle réversible, les équations du mouvement sont: $\dot{\mathbf{q}} = M^{-1}\mathbf{p}$ $\dot{\mathbf{p}} = -\nabla V(\mathbf{q})$
- Il est bien connu que l'énergie du système (i.e. l'Hamiltonien $H = K + V$) et les moments $J(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ (associés aux symétries) sont conservés le long des trajectoires. Connaissant $(\mathbf{q}_k, \mathbf{p}_k)$, les EMI définissent une approximation $(\mathbf{q}_{k+1}, \mathbf{p}_{k+1})$ telle que l'énergie $H_{k+1} = H_k$ et les moments $J_{k+1} = J_k$ sont conservés.
- Par exemple, la famille suivante conserve exactement l'énergie et les moments avec les fonctions à valeurs réelles κ_1 et κ_2 et $\alpha \in [0, 1]$ (méthode de collocation et résolution d'une équation implicite):

$$\mathbf{q}_{k+1} = \mathbf{q}_k + h\kappa_1 M^{-1} [\alpha \mathbf{p}_k + (1 - \alpha) \mathbf{p}_{k+1}]$$

$$\mathbf{p}_{k+1} = \mathbf{p}_k - h\kappa_2 \nabla V (\alpha \mathbf{q}_{k+1} + (1 - \alpha) \mathbf{q}_k)$$



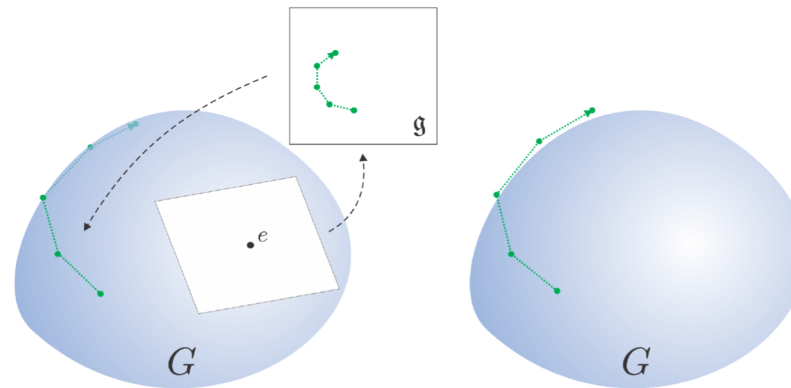
[1] Simo JC, Tarnow N. The discrete energy-momentum method. Conserving algorithms for nonlinear elastodynamics. Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik (ZAMP). 1992;43(5):757–792.

- *Simo et Gonzalez ont montré que l'on peut contrôler les hautes fréquences parasites par une conservation exacte de l'énergie, ce qui n'est pas le cas des intégrateurs symplectiques qui peuvent entraîner des instabilités dans de tels cas [1].*
- *Betsch et Steinman [2,3] ont proposé une approche unifiée des EMI par une approche de résidus pondérés des équations de Hamilton (Galerkin continu, éléments finis en temps), contrairement à l'approche de Simo qui a utilisé une approche de type différence finie. Éléments finis mixtes en temps pour le traitement des liaisons holonomes [4], EMI d'ordre élevés [5].*
- *Extension aux problèmes dynamiques contraints (à fort contenu haute fréquence), flexibles, multi-corps: EMI avec dissipation numérique contrôlée (Armero et Petocz) [6], inégalité énergétique (Hughes) [7], EMI généralisés (Kuhl et Crisfield) [8]. Facilité d'application aux pas de temps variables.*

- [1] Simo JC, Gonzalez O. Assessment of energy-momentum and symplectic schemes for stiff dynamical systems. In: American Society of Mechanical Engineers, ASME Winter Annual Meeting, New Orleans, Louisiana; 1993. .
- [2] Betsch P, Steinmann P. Conservation properties of a time FE method. Part I: time-stepping schemes for N-body problems. International Journal for Numerical Methods in Engineering. 2000;49(5):599–638.
- [3] Betsch P, Steinmann P. Conservation properties of a time FE method—part II: Timestepping schemes for non-linear elastodynamics. International Journal for Numerical Methods in Engineering. 2001;50(8):1931–1955.
- [4] Betsch P, Steinmann P. Conservation properties of a time FE method—Part III: mechanical systems with holonomic constraints. International Journal for Numerical Methods in Engineering. 2002;53(10):2271–2304.
- [5] Gro M, Betsch P, Steinmann P. Conservation properties of a time FE method. Part IV: Higher order energy and momentum conserving schemes. International Journal for Numerical Methods in Engineering. 2005;63(13):1849–1897.
- [6] Armero F, Petocz E. A new dissipative time-stepping algorithm for frictional contact problems: formulation and analysis. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 1999;179(1-2):151–178.
- [7] Hughes TJ. Analysis of transient algorithms with particular reference to stability behavior. In: Comput Methods for Transient Anal. North-Holland Comput Methods in Mech. v 1 Amsterdam, Neth and; 1983. p. 67–155.
- [8] Kuhl D, Ramm E. Generalized energy–momentum method for non-linear adaptive shell dynamics. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 1999;178(3-4):343–366.

B - IV – Méthodes associées au groupes de Lie (LGM)

- L'idée est de développer des méthodes numériques intrinsèques à la variété considérée à partir d'opérateurs intrinsèques afin de s'assurer que les trajectoires calculées restent sur la variété [1].
- D'un point de vue mathématique, un groupe de Lie G est un groupe qui est une variété différentiable, et pour laquelle l'opération de groupe $G \times G \rightarrow G$ et l'opération inverse sont des cartes régulières. L'espace tangent $\mathfrak{g} = T_I G$ à l'identité d'un groupe de Lie G est fermé sous la commutation de ses éléments qui en font une algèbre, l'algèbre de Lie $\mathfrak{g}$ du groupe de Lie G .



- Pour les systèmes dynamiques évoluant sur des variétés non-Euclidiennes, les équations de conservation sont intimement connectée aux groupes de Lie. Bien que ces concepts soient anciens, les méthodes numériques associées utilisant ces aspects ont été développées bien plus tard [2,5,6]. Méthodes de Runge-Kutta généralisées sur des groupes de Lie (méthodes Runge-Kutta-Munthe-Kaas, RKMK) [3,4].

[1] Iserles A, Quispel G. Why geometric numerical integration? arXiv preprint arXiv:160207755. 2015;.

[2] Crouch PE, Grossman R. Numerical integration of ordinary differential equations on manifolds. Journal of Nonlinear Science. 1993;3(1):1–33.

[3] Munthe-Kaas HZ. Runge-Kutta methods on Lie groups. BIT Numerical Mathematics. 1998;38(1):92–111.

[4] Munthe-Kaas HZ. High order Runge-Kutta methods on manifolds. Applied Numerical Mathematics. 1999;29(1):115–127.

[5] Iserles A, Munthe-Kaas HZ, N rsett SP, Zanna A. Lie-group methods. Acta numerica. 2000;9:215–365.

[6] Celledoni E, Marthinsen H, Owren B. An introduction to Lie group integrators—basics, new developments and applications. Journal of Computational Physics. 2014;257:1040–1061.

- Ici, nous nous restreignons aux Méthodes du Groupe de Lie dans le contexte des systèmes mécaniques. Pour les applications d'ingénierie, il y a deux classes importantes d'intégrateurs conservatifs sur des variétés non-Euclidiennes: les intégrateurs variationnels (symplectiques-momentum) et les intégrateurs conservant l'énergie (energy-momentum).
- Application des intégrateurs symplectiques et energy-momentum aux systèmes Hamiltoniens évoluant sur des Groupes de Lie, i.e. des espaces de configuration non-linéaires avec une structure de groupe [1], cas particulier du groupe de rotation $SO(3)$ (dynamique des corps rigides)
- Application des Groupes de Lie à la mécanique discrète [2], intégrateurs variationnels [3]
- Application des Groupes de Lie aux intégrateurs variationnels dans le cadre de la dynamique des solides rigides [4,5,6], en dimension infinie (poutres et plaques) [7,8,9]
- Les Méthodes du Groupe de Lie préservent l'espace des configurations non-linéaires et les moments, ainsi que l'énergie OU la forme symplectique, mais pas les 3 simultanément. Cas général des systèmes non-intégrables?
- Méthodes du Groupe de Lie pour le développement d'intégrateurs utilisant le repère mobile [10,11]

[1] Lewis D, Simo JC. Conserving algorithms for the dynamics of Hamiltonian systems on Lie groups. *Journal of Nonlinear Science*. 1994;4(1):253–299.

[2] Bobenko AI, Suris YB. Discrete time Lagrangian mechanics on Lie Groups, with an application to the Lagrange top. *Communications in mathematical physics*. 1999;204(1):147–188.

[3] Marsden JE, Pekarsky S, Shkoller S. Discrete Euler-Poincaré and Lie-Poisson equations. *Nonlinearity*. 1999;12(6):1647.

[4] Lee T, McClamroch NH, Leok M. A Lie group variational integrator for the attitude dynamics of a rigid body with applications to the 3D pendulum. In: *Control Applications, 2005. CCA 2005. Proceedings of 2005 IEEE Conference on*. IEEE; 2005. p. 962–967.

[5] Lee T, Leok M, McClamroch NH. Lie group variational integrators for the full body problem. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 2007;196(29):2907–2924.

[6] Lee T, Leok M, McClamroch NH. Lagrangian mechanics and variational integrators on twospheres. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. 2009;79(9):1147–1174.

[7] Demoures F. Lie group and Lie algebra variational integrators for flexible beam and plate in R3 [Ph.D.thesis]. *cole Polytechnique F d ralge de Lausanne*; 2012.

[8] Demoures F, Gay-Balmaz F, Kobilarov M, Ratiu TS. Multisymplectic Lie group variational integrator for a geometrically exact beam in R3. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*. 2014;19(10):3492–3512.

[9] Demoures F, Gay-Balmaz F, Leyendecker S, Ober-BI baum S, Ratiu TS, Weinand Y. Discrete variational Lie group formulation of geometrically exact beam dynamics. *Numerische Mathematik*. 2015;130(1):73–123.

10. Chhay M, Hamdouni A. A new construction for invariant numerical schemes using moving frames. *Comptes Rendus M canique*. 2010;338(2):97–101.

11. Chhay M, Hoarau E, Hamdouni A, Sagaut P. Comparison of some Lie-symmetry-based integrators. *J Comput Phys*. 2011;230(5):2174–88.

B - V Méthodes de Gradient Discret (DGM)

- *La méthode du Gradient Discret est une technique générale de construction d'Hamiltoniens discrets basés sur le concept de dérivée directionnelle discrète [1,2].*
- *Les méthodes de gradient discret sont applicables aux équations différentielles $\dot{y} = A(y)\nabla H(y)$ où $A(y)$ est une matrice antisymétrique. Pour les systèmes Lagrangiens/Hamiltoniens, le vecteur $y = (\mathbf{q}, \mathbf{p})$ appartient à l'espace des phases avec J étant la matrice symplectique $A(y)$ et la fonction énergie $H(y)$ étant l'Hamiltonien du système. Elles sont de la forme:*

$$y_{k+1} = y_k + h\bar{A}(y_{k+1}, y_k)\bar{\nabla}H(y_{k+1}, y_k)$$

Où $\bar{A}(\hat{y}, y)$ est une matrice antisymétrique et $\bar{\nabla}H(\hat{y}, y)$ le gradient discret satisfaisant:

$$\bar{\nabla}H(\hat{y}, y)^T(\hat{y} - y) = H(\hat{y}) - H(y) \quad \bar{\nabla}H(y, y) = \nabla H(y)$$

- *Ces méthodes conservent l'énergie et les moments. Il a été montré que la méthode de projection qui permet de construire les EMI est un cas particulier des méthodes de Gradient Discret. En fait, la nature symétrique de ces méthodes explique l'excellent comportement numérique des EMI sur des temps longs. Applications aux liaisons holonomes et non-holonomes [3,4,5,6].*

[1] Gonzalez O. Time integration and discrete Hamiltonian systems. Journal of Nonlinear Science. 1996;6(5):449.

[2] McLachlan RI, Quispel G, Robidoux N. Geometric integration using discrete gradients. Philosophical Transactions of the Royal Society of London Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. 1999;357(1754):1021–1045.

[3] Gonzalez O. Mechanical systems subject to holonomic constraints: Differential–algebraic formulations and conservative integration. Physica D: Nonlinear Phenomena. 1999;132(1- 2):165–174.

[4] Celledoni E, Puiggall MF, H iseth EH, de Diego DM. Energy-preserving integrators applied to nonholonomic systems. Journal of Nonlinear Science. 2016;p. 1–40.

[5] McLachlan RI, Quispel G. Discrete gradient methods have an energy conservation law. arXiv preprint arXiv:13024513. 2013;.

[6] Celledoni E, Grimm V, McLachlan RI, McLaren D, O'Neale D, Owren B, et al. Preserving energy resp. dissipation in numerical PDEs using the “Average Vector Field” method. Journal of Computational Physics. 2012;231(20):6770–6789.

B - VI Méthodes basées sur le calcul extérieur discret (DEC)

- *Les intégrateurs géométriques basés sur le calcul extérieur discret sont issus historiquement de l'électromagnétisme, où les modèles sont mieux écrits à l'aide des formes différentielles que les champs de vecteurs [1,2].*

1. Deschamps G, Forms Differential. Electromagnetics and differential forms. Proc IEEE. 1981;69(6):676–96.
2. Bossavit A. Computational electromagnetism. Variational formulations, complementarity, edge elements. In: Mayergoyz I, editor. Electromagnetism. New York: Academic Press; 1998.

- *Les intégrateurs géométriques DEC sont basés sur la version discrète de la théorie du calcul extérieur et plus généralement de la géométrie différentielle. Discrétisation cohérente des opérateurs de dérivation (divergence, gradient, rotationnel) [3,4,5,6,7,8].*

3. Tonti E. The reason for analogies between physical theories. Appl Math Model. 1976;1(1):37–50.
4. Tonti E. The mathematical structure of classical and relativistic physics: a general classification diagram. Basel:Birkh user; 2013.
5. Hymann J, Scovel J. Deriving mimetic difference approximations to differential operators using algebraic topology, technical report. Los Alamos National Laboratory; 1990.
6. Mattiussi C. An analysis of finite volume, finite element, and finite difference methods using some concepts from algebraic topology. J Comput Phys. 1997;133(2):289–309.
7. Adams D. R-torsion and linking numbers from simplicial Abelian gauge theories, arXiv:hep-th/9612009 1996.
8. Sen S, Sen S, Sexton J, Adams D. Geometric discretization scheme applied to the Abelian Chern–Simons theory. Phys Rev E. 2000;61(3):3174–85.

- *Dans le domaine de la mécanique, les intégrateurs DEC ont été utilisés pour résoudre les équations de Darcy, Euler et Navier-Stokes dans certaines configurations de base [9,10], pour géométriser des problèmes d'élasticité [11,12] ou pour résoudre des systèmes d'Hamiltoniens à port [13].*

9. Hirani A, Nakshatrala K, Chaudhry J. Numerical method for Darcy flow derived using discrete exterior calculus. Int J Comput Methods Eng Sci Mech. 2015;16:151–69.
10. Mohamed M, Hirani A, Samtaney R. Discrete exterior calculus discretization of incompressible Navier–Stokes equations over surface simplicial meshes. J Comput Phys. 2016;312:175–91.
11. Yavari A. On geometric discretization of elasticity. J Math Phys. 2008;49(2):022901.
12. Angoshtari A, Yavari A. A geometric structure-preserving discretization scheme for incompressible linearized elasticity. Comput Methods Appl Mech Eng. 2013;259(Supplement C):130–53.
13. Seslija M, van der Schaft A, Scherpen J. Discrete exterior geometry approach to structure-preserving discretization of distributed-parameter port-Hamiltonian systems. J Geom Phys. 2012;62(6):1509–31.

- *Excellente synthèse des intégrateurs géométriques basés sur le calcul extérieur discret, application aux écoulements de fluides avec advection scalaire passive [14].*

14, Razafindralandy D., Hamdouni A., Chhay M., A review of some geometric integrators, Adv.Model. and Simul. in Eng. Sci.(2018) 5:16

- *Calcul Extérieur Discret: Application à la mécanique des fluides Et une alternative pour un Hodge discret*
R. AYOUB, D. Razandralandy, et A. Hamdouni, GdR-GDM 7 juin 2019].

Intérêt en mécanique

- Formulation Hamiltonienne $\iota_X \omega = dH \quad \omega \in \Lambda^2$
- En électromagnétisme
$$\begin{cases} \text{rot } \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} & dE^b = -\partial_t B^b \\ \text{rot } \mathbf{H} = -\frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{J}_I & dH^b = -\partial_t D^b + J_I^b \\ \text{div } \mathbf{B} = 0 & dB^b = 0 \\ \text{div } \mathbf{D} = \rho_I & dD^b = \rho_I^b \end{cases}$$
- Étude des géométries complexes

- *Problème de Navier-Stokes anisotherme:*

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

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} d \star d\psi + d(i_{v^\sharp} d \star d\psi) - \nu d \delta d \star d\psi - \beta g d(\theta dy) = 0, \\ v = -\star d\psi, \\ \frac{\partial \theta}{\partial t} - \delta(\theta v) + k \delta d\theta = 0. \end{cases}$$

C-I APPLICATIONS

- *Mécanique céleste et astronomie dynamique: méthodes symplectiques idéales pour la simulation de tels problèmes [1,2,3].*

[1] Ruth RD. A canonical integration technique. IEEE Trans Nucl Sci. 1983;30(CERN-LEPT- 83-14):2669–2671.

[2] Forest E, Ruth RD. Fourth-order symplectic integration. Physica D: Nonlinear Phenomena. 1990;43(1):105–117.

[3] Wisdom J, Holman M. Symplectic maps for the N-body problem. The Astronomical Journal. 1991;102:1528–1538.

- *Elastodynamique: energy-momentum integrators; excellentes propriétés dans le régime non-linéaire, en particulier pour les problèmes raides, intérêt également pour les intégrateurs variationnels asynchrones [4,5,6].*

[4] Simo JC, Tarnow N. The discrete energy-momentum method. Conserving algorithms for nonlinear elastodynamics. Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik (ZAMP). 1992;43(5):757–792.

[5] Gonzalez O, Simo JC. On the stability of symplectic and energy-momentum algorithms for non-linear Hamiltonian systems with symmetry. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. 1996;134(3-4):197–222.

[6] Lew AJ, Marsden JE, Ortiz M, West M. Asynchronous variational integrators. Archive for Rational Mechanics and Analysis. 2003;167(2):85–146.

- *Dynamique multi-corps: système de corps rigides ou/et élastiques: grands déplacements et grandes rotations: équations raides, non-linéaires et DAE, energy-momentum integrators, schémas bien adaptés pour leurs bonnes propriétés de stabilité numérique; utilisations récentes d'intégrateurs variationnels et méthodes de Groupe de Lie [7,8,9,10].*

[7] Orden JCG, Goicolea JM. Conserving properties in constrained dynamics of flexible multibody systems. Multibody System Dynamics. 2000;4(2-3):225–244.

[8] Betsch P, Leyendecker S. The discrete null space method for the energy consistent integration of constrained mechanical systems. Part II: Multibody dynamics. International journal for numerical methods in engineering. 2006;67(4):499–552.

[9] Leyendecker S, Marsden JE, Ortiz M. Variational integrators for constrained dynamical systems. ZAMM-Journal of Applied Mathematics and Mechanics. 2008;88(9):677–708.

[10] Brüls O, Cardona A, Arnold M. Lie group generalized- time integration of constrained flexible multibody systems. Mechanism and Machine Theory. 2012;48:121–137.

C – II APPLICATIONS

- *Mécanique des fluides: à partir des travaux de pionnier de Arnold sur les fluides d'Euler, très vaste littérature sur les intégrateurs géométriques; intégrateurs multi-symplectiques, intégrateurs variationnels, intégrateurs variationnels et Groupe de Lie pour les fluides d'Euler incompressibles, réversibilité temporelle, magnétohydrodynamique, dynamique des fluides complexes, modélisations à grande échelle des flots océaniques et atmosphériques, calcul extérieur discret [1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11].*

- [1] Perot B. Conservation properties of unstructured staggered mesh schemes. *Journal of Computational Physics*. 2000;159(1):58–89.
- [2] Elcott S, Tong Y, Kanso E, Schröder P, Desbrun M. Stable, circulation-preserving, simplicial fluids. *ACM Transactions on Graphics (TOG)*. 2007;26(1):4.
- [3] Arnold V. Sur la géométrie différentielle des groupes de Lie de dimension infinie et ses applications l'hydrodynamique des fluides parfaits. In: *Annales de l'institut Fourier*. vol. 16; 1966. p. 319–361.
- [4] Cotter CJ, Holm DD, Hydon PE. Multisymplectic formulation of fluid dynamics using the inverse map. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. 2007;463(2086):2671–2687.
- [5] Marsden JE, Ebin DG, Fischer AE. Diffeomorphism groups, hydrodynamics and relativity. *Canadian Mathematical Congress*; 1972. .
- [6] Mullen P, Crane K, Pavlov D, Tong Y, Desbrun M. Energy-preserving integrators for fluid animation. *ACM Transactions on Graphics (TOG)*. 2009;28(3):38.
- [7] Pavlov D, Mullen P, Tong Y, Kanso E, Marsden JE, Desbrun M. Structure-preserving discretization of incompressible fluids. *Physica D: Nonlinear Phenomena*. 2011;240(6):443–458.
- [8] Gawlik ES, Mullen P, Pavlov D, Marsden JE, Desbrun M. Geometric, variational discretization of continuum theories. *Physica D: Nonlinear Phenomena*. 2011;240(21):1724–1760.
- [9] Desbrun M, Gawlik ES, Gay-Balmaz F, Zeitlin V. Variational discretization for rotating stratified fluids. *Discrete and Continuous Dynamical Systems*. 2013;34(2):477–509.
- [10] Bauer W, Gay-Balmaz F. Towards a geometric variational discretization of compressible fluids: the rotating shallow water equations. *arXiv preprint arXiv:1711.10617*. 2017;.
- [11] Ayoub R., Hamdouni A., Razafindralandy D., A new Hodge operator in Discrete Exterior Calculus. Application to fluid mechanics, *arXiv:2006.16930v1 [cs.GE]* 29 Jun 2020

- *Contrôle optimal: missions spatiales, robotique, biomécanique: mécanique discrète et contrôle optimal (DMOC), approches symplectiques, energy-momentum integrators [12,13,14,15,16].*

- [12] Junge O, Marsden JE, Ober-Blobaum S. Discrete mechanics and optimal control. *IFAC Proceedings Volumes*. 2005;38(1):538–543.
- [13] Kobilarov M, Sukhatme G. Optimal control using nonholonomic integrators. In: *Proceedings 2007 IEEE International Conference on Robotics and Automation*. IEEE; 2007. p. 1832–1837.
- [14] Betsch P, Becker C. Conservation of generalized momentum maps in mechanical optimal control problems with symmetry. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. 2017;111(2):144–175.
- [15] Shareef Z, Trachtler A. Simultaneous path planning and trajectory optimization for robotic manipulators using discrete mechanics and optimal control. *Robotica*. 2016;34(6):1322–1334.
- [16] Pekarek D, Ames AD, Marsden JE. Discrete mechanics and optimal control applied to the compass gait biped. In: *2007 46th IEEE Conference on Decision and Control*. IEEE; 2007. p. 5376–5382.

C – III APPLICATIONS

- *Modélisation de systèmes complexes, multi-physiques et ouverts (échanges d'énergie, matière, information via leur frontière)*
- *Les systèmes Hamiltoniens à Ports (SHP) sont des systèmes ouverts passifs, linéaires ou non, d'entrée u , de sortie y et d'état x [1]. Leurs représentations d'état rencontrées le plus souvent dans la littérature est de la forme (structure de Dirac [2]):*

$$dx/dt = [J - R] \nabla H(x) + G u, \quad y = G^T \nabla H(x) + D u$$

où H désigne une fonction (ou fonctionnelle) définie positive qui donne l'énergie $E = H(x)$ stockée par le système. Les matrices J et D sont antisymétriques : ceci assure qu'elles "encodent" des échanges d'énergie (conservation). La matrice R est positive : ceci assure qu'elle est responsable d'une dissipation. Ces matrices peuvent toutes dépendre de l'état.

- *L'intérêt est qu'en connectant de tels systèmes via les ports d'entrée-sortie, cette structure est préservée et assure la passivité du système global. Bien qu'elle entretienne des liens étroits avec les systèmes Hamiltoniens "standards" [2], cette structure permet une représentation des systèmes physiques qui est plus large et prend naturellement en charge la dissipation [3,4,5,6].*

[1] V. Duindam, A. Macchelli, S. Stramigioli, and H. Bruyninckx, editors. Modeling and Control of Complex Physical Systems - The Port-Hamiltonian approach. Springer, 2009.

[2] J. E. Marsden and P. R. Chernoff. Properties of Infinite Dimensional Hamiltonian Systems. Springer, 1974.

[3] Falaize A., Hélie T., Roze D., Le formalisme des Systèmes Hamiltoniens à Ports pour la simulation passive de systèmes couplés, GdR-GDM, Paris Jussieu, novembre 2020

[4] P.A.M. Dirac. Generalized hamiltonian dynamics. Canad. J. Math., 2:129– 148, 1950.

[5] J. Cervera, A. J. van der Schaft, and A. Banos. On composition of dirac structures and its implications for control by interconnection. 281:55–63, 2003.

[6] A. van der Schaft and B. Maschke. The hamiltonian-formulation of energy conserving physical systems with external ports. Aeu- Arch. Elektron. Ubertrag.tech.-Int. J. Electron. Commun., 49(5-6):362–371, 1995.

C – IV APPLICATIONS

- *Thermodynamique des Processus Irréversibles Hors Equilibre*
- *La classe des solides qui présente un comportement dissipatif est beaucoup plus grande que celle des solides élastiques, et une structure mathématique commune pour le premier n'est pas aussi apparente que dans le cas Hamiltonien. Ce manque de formalisme unificateur a entravé la formulation de méthodes de préservation de la structure aux phénomènes dissipatifs non linéaires dans les solides.*
- *Quelques méthodes remarquables ont été proposées dans le passé pour des problèmes spécifiques (par exemple, [1,2,3]) mais ne peuvent pas être employées au-delà des limites du problème pour lesquelles elles ont été conçues.*

1. Armero F, Zambrana-Rojas C. Volume-preserving energy–momentum schemes for isochoric multiplicative plasticity. *cmame* 2007; 196(41-44):4130–4159.
2. Gross M, Betsch P. Energy–momentum consistent finite element discretization of dynamic finite viscoelasticity. *ijnme* 2010; 81(11):1341–1386.
3. Hesch C, Weinberg K. Thermodynamically consistent algorithms for a finite-deformation phase-field approach to fracture. *ijnme* 2014; 99(12):906–924.

- *Une classe de méthodes avec préservation de la structure pour les solides dissipatifs dans le cas général est la méthode d'intégration énergie-entropie-impulsion (EEM). Ces intégrateurs initialement proposés dans [4] pour les problèmes thermomécaniques de dimension finie et plus tard étendus au cas de dimension infinie [5]. En plus des problèmes thermoélastiques, l'EEM a été appliquée à la modélisation du champ de phase [6], à la thermo-visco-plasticité discrète [7], et thermo-visco-élasticité [8].*

4. Romero I. Thermodynamically consistent time stepping algorithms for nonlinear thermomechanical systems. *ijnme* 2009; 79(6):706–732.
5. Romero I. Algorithms for coupled problems that preserve symmetries and the laws of thermodynamics. Part I: monolithic integrators and their application to finite strain thermoelasticity. *Cmame* 2010; 199(25-28):1841–1858.
6. González-Ferreiro B, Gómez H, Romero I. A thermodynamically consistent numerical method for a phase field model of solidification. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation* 2014; 19(20):2309–2323.
7. García Orden JC, Romero I. Energy–entropy–momentum integration of discrete thermo-visco-elastic dynamics. *European Journal of Mechanics - A/Solids* 2012; 32:76–87.
8. Conde Martín S, García Orden JC. On Energy–entropy–momentum integration methods for discrete thermo-viscoelastodynamics. *Computers & Structures* 2016:1–18.

Structure de Dirac généralisée en dimension infinie:

- Crochet de Poisson (antisymétrique) et crochet de Dissipation (symétrique, semi-défini positif):

$$\{\mathcal{F}, \mathcal{G}\} = \left\langle \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mathbf{z}}, \mathbf{L} \left[\frac{\delta \mathcal{G}}{\delta \mathbf{z}} \right] \right\rangle, [\mathcal{F}, \mathcal{G}] = \left\langle \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \mathbf{z}}, \mathbf{M} \left[\frac{\delta \mathcal{G}}{\delta \mathbf{z}} \right] \right\rangle$$

- Lois d'évolutions:

$$\dot{\mathcal{F}}(z_t) = \{\mathcal{F}(z_t), E(z_t)\} + [\mathcal{F}(z_t), S(z_t)]$$

- Deux conditions de dégénérescence: $\{S, \mathcal{F}\} = [E, \mathcal{F}] = 0$

- Premier et Second principe de la Thermodynamique: $\mathcal{F} = E, \quad \mathcal{F} = S,$

$$\dot{E}(z_t) = 0, \quad \dot{S}(z_t) \geq 0.$$

- Formulation faible:

$$\langle \mathbf{w}, \dot{z}_t \rangle = \left\langle \mathbf{w}, \mathbf{L} \left[\frac{\delta E}{\delta \mathbf{z}} \right] \right\rangle + \left\langle \mathbf{w}, \mathbf{M} \left[\frac{\delta S}{\delta \mathbf{z}} \right] \right\rangle \quad \left\langle \mathbf{w}, \mathbf{L} \left[\frac{\delta S}{\delta \mathbf{z}} \right] \right\rangle = \left\langle \mathbf{w}, \mathbf{M} \left[\frac{\delta E}{\delta \mathbf{z}} \right] \right\rangle = 0$$

for all $\mathbf{w} \in \mathcal{V}$

[1] Onsager L. Phys Rev 1931;37:405.

[2] P.A.M. Dirac. Generalized hamiltonian dynamics. Canad. J. Math., 2:129–148, 1950.

[3] Ziegler H. Some extremum principles in irreversible thermodynamics with applications to continuum mechanics. In: Sneddon IN, Hill R, editors. Progress in solid mechanics. Amsterdam: North-Holland; 1963 [chapter 2].

[4] Prigogine I. Introduction to thermodynamics of irreversible processes. 3rd ed. New York: Interscience Publishers; 1967 [chapter VII].

[5] R.T. Rockafellar, Generalized Hamiltonian equations for convex problems of Lagrange, Pacific J. of Math., 33, no. 2, 411-427, 1970.

[6] Hill R, Rice JR. SIAM J Appl Math 1973;25:448.

[7] B. M. Maschke, A.J. van der Schaft, and P. C. Breedveld. An intrinsic hamiltonian-formulation of network dynamics - nonstandard poisson structures and gyrators. J. Frankl. Inst.-Eng. Appl. Math., 329(5):923–966, 1992.

[8] Petryk H. J Non-Equilib Thermodynam 1995;20:132.

[9] B. J. Edwards, H. C. Ottinger, and R. J. J. Jongschaap. On the relationships between thermodynamic formalisms for complex fluids. J. Non- Equilib. Thermodyn., 22(4):356–373, 1997.

[10] Svoboda J, Fischer FD, Fratzl P, Kozeschnik E. Mat Sci Eng A 2004;385:166.

[11] M. Grmela, H.C. Ottinger, Dynamics and thermodynamics of complex fluids I. Development of a general formalism, Phys. Rev. E 56 (6) (1997) 6620–6632.

[12] H.C. Ottinger, Relativistic and nonrelativistic description of fluids with anisotropic heat conduction, Phys. A 254 (1998) 433–450.

[13] R. Jongschaap, H.C. Ottinger, The mathematical representation of driven thermodynamic systems, J. Non-Newton. Fluid Mech. 120 (2004) 3–9.

[14] H.C. Ottinger, Nonequilibrium thermodynamics for open systems, Phys. Rev. E 73 (2006) 036126.

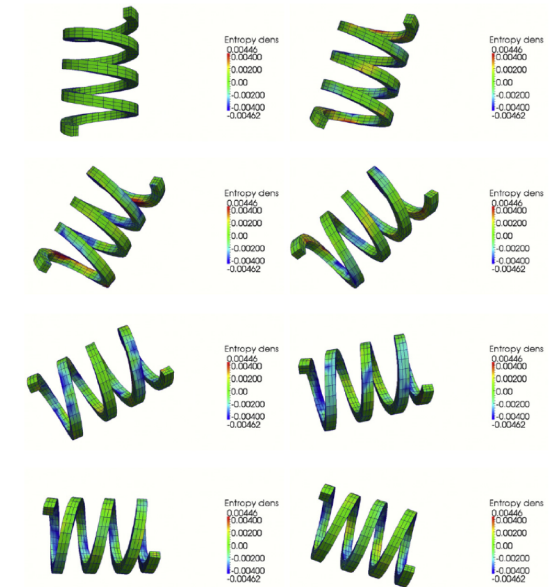
[15] H.C. Ottinger, Role of nonequilibrium entropy in Einstein's theory of gravitation, Phys. A 387 (18) (2008) 4560–4564.

[16] M. Buliga and G. de Saxcé, A symplectic Brezis–Ekeland–Nayroles principle, Journal of Mathematics and Mechanics of Solids 22, 1288-1302 (2017).

[17] J.F. Ganghoffer, Formulation Lagrangienne de l'irréversibilité et articulation avec les symétries de Lie pour la mise en évidence de relations d'invariance en rhéologie, GdR GDM, 2019

● *Thermo-élasticité en grandes transformations:*

- $\mathcal{V} = \{w = (w_\varphi, w_p, w_\eta) : \mathcal{B}_0 \rightarrow \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}\}.$
 $\mathcal{S} = \{z = (\varphi, p, \eta) : \mathcal{B}_0 \rightarrow \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^+, \det(T\varphi) > 0\},$
- $E(z) = \int_{\mathcal{B}_0} \left(\tilde{u}(C, \eta) + \frac{1}{2\rho_0} |p|^2 \right) dV,$
 $S(z) = \int_{\mathcal{B}_0} \eta dV, \quad U(z) = \int_{\mathcal{B}_0} \tilde{u}(C, \eta) dV, \quad K(z) = \int_{\mathcal{B}_0} \frac{1}{2\rho_0} |p|^2 dV.$
- $\{\mathcal{F}, \mathcal{G}\} = \left\langle \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \varphi}, \frac{\delta \mathcal{G}}{\delta p} \right\rangle - \left\langle \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta p}, \frac{\delta \mathcal{G}}{\delta \varphi} \right\rangle,$
 $[\mathcal{F}, \mathcal{G}] = \left\langle \text{GRAD} \left[\frac{1}{\Theta} \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \eta} \right], \mathbf{K} \Theta^2 \text{GRAD} \left[\frac{1}{\Theta} \frac{\delta \mathcal{G}}{\delta \eta} \right] \right\rangle,$
- $\Theta = \Theta(z) = \frac{\delta \tilde{u}}{\delta \eta}(z).$
- $\langle \mathbf{w}, \dot{z}_t \rangle = \left\langle \mathbf{w}_\varphi, \frac{\delta E}{\delta p} \right\rangle - \left\langle \mathbf{w}_p, \frac{\delta E}{\delta \varphi} \right\rangle + \left\langle \text{GRAD} \left[\frac{1}{\Theta} w_\eta \right], \mathbf{K} \Theta^2 \text{GRAD} \left[\frac{1}{\Theta} \frac{\delta S}{\delta \eta} \right] \right\rangle.$
- $\dot{\varphi} = \frac{p}{\rho_0} \quad \text{in } \mathcal{B},$
 $\dot{p} = \text{DIV}[\mathbf{FS}] \quad \text{in } \mathcal{B},$
 $\dot{\eta} = \frac{\text{DIV}[\mathbf{Q}]}{\Theta} \quad \text{in } \mathcal{B},$
 $0 = (\mathbf{FS})\mathbf{N} \quad \text{on } \partial \mathcal{B},$
 $0 = \mathbf{Q}\mathbf{N} \quad \text{on } \partial \mathcal{B},$



Structure de Dirac discrète, Dérivée directionnelle discrète, stricte structure préservation dans une formulation de type Galerkin

1. Romero I. Algorithms for coupled problems that preserve symmetries and the laws of thermodynamics. Part I: monolithic integrators and their application to finite strain thermoelasticity. Cname 2010; 199(25-28):1841–1858.

PERSPECTIVES – QUESTIONS OUVERTES

Philosophy:

Geometry encodes the physics of the system

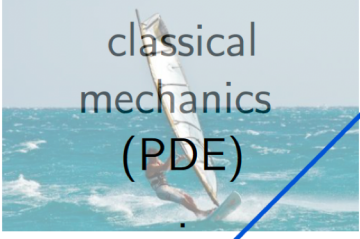
Razafindralandy
de Saxcé, Carré

Falaise
Hilic, Roze

Hubert

Lozienco

Ryvkin, Laurent-G.

 classical classical mechanics (ODE)	Mechanical property	Geometric description
	conservation of energy	Poisson / symplectic
	symmetries	Lie groups/algebras, Cartan moving frames
	dissipation / interaction power balance, constraints	1 (almost) Dirac
	control	(singular) foliations
 modern classical mechanics (PDE)	conservation of energy	multisymplectic
	symmetries	Cartan moving frames
	dissipation / interaction	Stokes–Dirac
	$\text{rot}(\text{grad}) = 0, \text{div}(\text{rot}) = 0$	$d^2 = 0$ – DEC
	control	foliations

Ryvkin

Ayoub

2) DG/Q varieties

ANNEXES

Geometric integrator for non-smooth dynamics

- Four fields time action integral with impact with velocity HSM conditions at time t_c [Cirak and West 2005]

$$\tilde{A}(\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \mathbf{v}, t_c, \lambda) = \int_{t_0}^{t_c} L(\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \mathbf{v}) dt + \int_{t_c}^{t_f} L(\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \mathbf{v}) dt + \lambda^T(t_c) \mathbf{g}_N(t_c)$$

- Stationarity of action integral: $\delta \tilde{A} = 0 \Rightarrow$

Smooth dynamics
equation:

$$\begin{aligned} \delta \mathbf{u} &: \mathbf{M} \dot{\mathbf{v}} + \mathbf{F}_{int} = \mathbf{F}_{ext}, \quad \forall t \in [t_0, t_c^-] \cup [t_c^+, t_f] \\ \delta \mathbf{v} &: \dot{\mathbf{u}} = \mathbf{v} \end{aligned}$$

Impact equation:

$$\delta t_c : \left[\mathbf{M} \mathbf{v}(t) \right]_{t_c^-}^{t_c^+} = \nabla \mathbf{g}_N^T(t_c) \lambda(t_c)$$

Kinetic energy balance:

$$\delta \mathbf{u}(t_c) : \left[(\mathbf{M} \mathbf{v})^T \mathbf{M}^{-1} (\mathbf{M} \mathbf{v}) \right]_{t_c^-}^{t_c^+} = 0$$

- Unified HSM non-smooth dynamics equation [Moreau 1999, Chen 2013, Acary 2014]

$$d\mathbf{v} = d\mathbf{v}_s + d\mathbf{v}_{ns}$$

$$\mathbf{M} d\mathbf{v} + \mathbf{F}_{int} dt = \mathbf{F}_{ext} dt + d\mathbf{l}$$

$$d\mathbf{v}_s = \dot{\mathbf{v}} dt$$

$$d\mathbf{v}_{ns} = \mathbf{v}(t_c^+) - \mathbf{v}(t_c^-)$$

$$d\mathbf{l}(t) = \begin{cases} 0 & \forall t \in [t_0, t_c^-] \cup [t_c^+, t_f] \\ \mathbf{L}^T(t_c) \lambda(t_c) & \end{cases}$$

$$\mathbf{L} = \nabla \mathbf{g}_N$$

Explicit Geometric integrator for non-smooth dynamics

- A new central difference method with Lagrange multipliers for non-smooth dynamics [Belytschko 2000, Casadei 2009, Heinstein 2010, Geradin and Rixen 2014, Fekak Brun Gravouil 2017] (compatible with the previous general formalism):

$$\mathbf{M}_{lump} \mathbf{v}_{n+\frac{3}{2}} = \mathbf{M}_{lump} \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} + \Delta t (\mathbf{F}_{ext,n+1} - \mathbf{F}_{int,n+1} - \mathbf{C} \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}) + \mathbf{I}_{n+1}$$

$$\mathbf{u}_{n+1} = \mathbf{u}_n + \Delta t \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}$$

$$\mathbf{I}_{n+1} = \mathbf{L}_{n+1}^T \boldsymbol{\lambda}_{n+\frac{3}{2}}$$

$$\mathbf{v}_{n+\frac{3}{2}} = \mathbf{L}_{n+1} \mathbf{v}_{n+\frac{3}{2}}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{if } g_N^I(t_{n+1}) > 0 \text{ then } \lambda_{n+\frac{3}{2}}^I = 0 \\ \text{if } g_N^I(t_{n+1}) \leq 0 \text{ then } \left\{ \begin{array}{l} v_{n+\frac{3}{2}}^I \geq 0 \\ \lambda_{n+\frac{3}{2}}^I \geq 0 \\ v_{n+\frac{3}{2}}^I \lambda_{n+\frac{3}{2}}^I = 0 \end{array} \right. \end{array} \right. \quad \forall I \in \{1, \dots, p\}$$

- Corresponding Delassus or Steklov-Poincaré operator at time $t_{n+3/2}$:

$$\left(\mathbf{L}_{n+1} \mathbf{M}_{lump}^{-1} \mathbf{L}_{n+1}^T \right) \boldsymbol{\lambda}_{n+\frac{3}{2}} = \mathbf{b}$$

$$\mathbf{b} = \mathbf{v}_{n+\frac{3}{2}} - \mathbf{L}_{n+1} \left(\mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}} + \Delta t \mathbf{M}_{lump}^{-1} (\mathbf{F}_{ext,n+1} - \mathbf{F}_{int,n+1} - \mathbf{C} \mathbf{v}_{n+\frac{1}{2}}) \right)$$

➡ Comments: acceleration not required, time of impact detection not required