Intégrateurs géométriques et persistance topologique

Dina Razafindralandy
Avec: Aziz Hamdouni, Marx Chhay, Vladimir Salnikov, Rama Ayoub

Laboratoire des Sciences de l'Ingénieur pour l'Environnement
Université de La Rochelle

Rencontre du GDR Géométrie différentielle et Mécanique
La Rochelle – Juin 2019

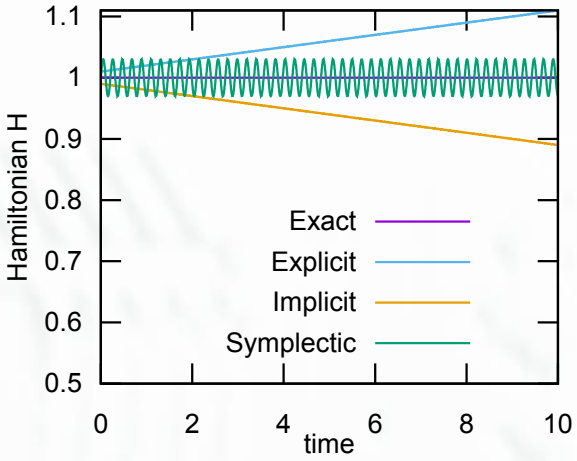
Motivations

Problèmes à grand intervalle de temps

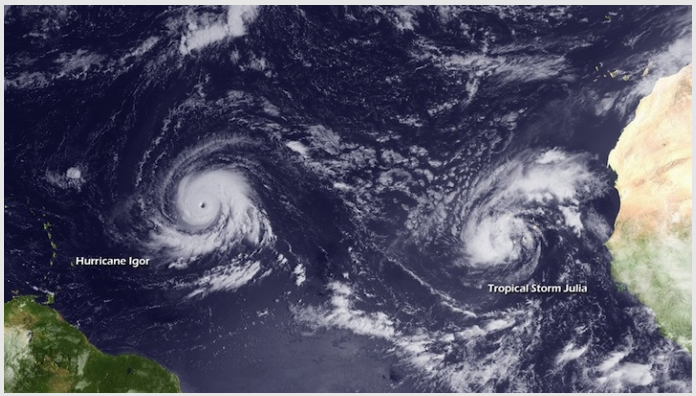


Dynamique moléculaire dans un milieu poreux

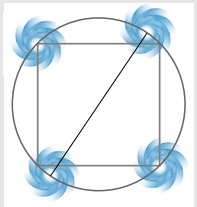
- $\Delta t \sim 10^{-15} s$
- Statistiques sur $\sim 1s$



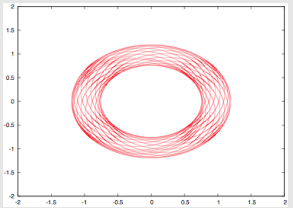
Interaction de tourbillons



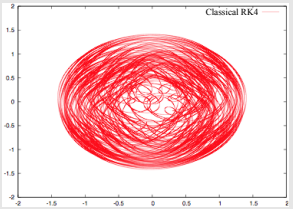
Configuration initial



Trajectoire attendue



Runge-Kutta 4



Structure symplectique

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{p}} = -\nabla_{\mathbf{q}} H \\ \dot{\mathbf{q}} = \nabla_{\mathbf{p}} H \end{cases}$$

Forme symplectique $\omega = \mathrm{d}\mathbf{p} \wedge \mathrm{d}\mathbf{q}$ préservée

Motivations

Partie I: Intégrateurs géométriques pour les EDO et EDP

EDO:

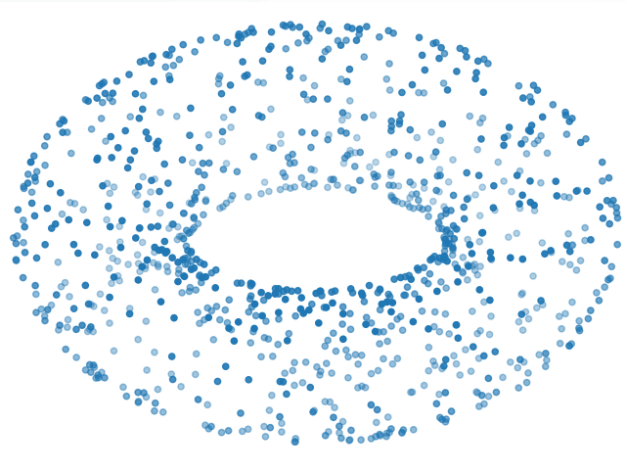
- Structure hamiltonnienne $\longrightarrow$ Intégrateurs symplectiques
- Système lagrangien $\longrightarrow$ Intégrateurs symplectiques
- Structure de Dirac $\longrightarrow$ Intégrateurs de Dirac

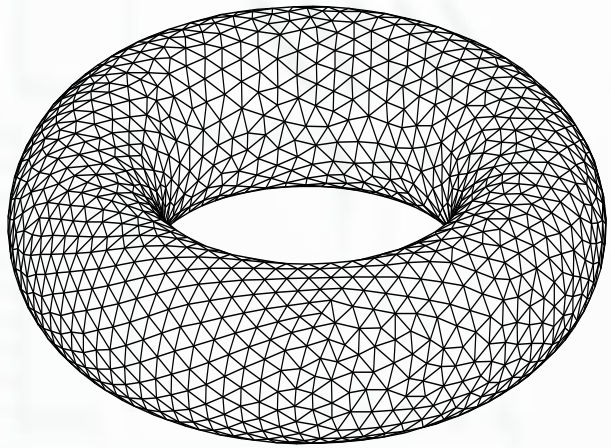
EDP:

- Structure multisymplectique $\longrightarrow$ Intégrateurs multisymplectiques
- Groupe de symétrie $\longrightarrow$ Schémas invariants
- Structure homologique ($\mathrm{d}^2 = 0$) $\longrightarrow$ Calcul extérieur discret

Motivations

Partie II: Persistance topologique





- Nuage de points $\longrightarrow$ triangulation
- Propriétés topologiques ▶ connexité, trou, ...
  Propriétés géométriques ▶ courbure, normale, ...
- Buts:
  - ★ Analyse multi-échelle, bruits ▶ filtration, persistance
  - ★ Interpolation en restant sur la variété

Intégrateurs géométriques

Intégrateurs symplectiques

Structure symplectique

Système hamiltonien en coord locales

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{p}} = -\nabla_{\mathbf{q}} H \\ \dot{\mathbf{q}} = \nabla_{\mathbf{p}} H \end{cases} \qquad \mathbf{s} = (\mathbf{p}, \mathbf{q})$$

$$\omega = \mathrm{d}\mathbf{p} \wedge \mathrm{d}\mathbf{q}$$

Système hamiltonien sur une variété M

$$\dot{\mathbf{s}} = X_H(\mathbf{s})$$

où $\quad i_{X_H}\, \omega = \mathrm{d}H$

ω forme symplectique sur M

Symplecticité du flot φ_t

$\varphi_t : (\mathbf{p}_0, \mathbf{q}_0) \longmapsto (\mathbf{p}(t), \mathbf{q}(t))$

$$\mathrm{d}\mathbf{p}(t) \wedge \mathrm{d}\mathbf{q}(t) = \mathrm{d}\mathbf{p}(0) \wedge \mathrm{d}\mathbf{q}(0) \qquad \text{ou} \qquad \varphi_t^* \omega = \omega$$

Intégrateur symplectique:

$$\mathrm{d}\mathbf{p}^n \wedge \mathrm{d}\mathbf{q}^n = \mathrm{d}\mathbf{p}^0 \wedge \mathrm{d}\mathbf{q}^0 \qquad \overline{\varphi}_{t^n}^*\, \overline{\omega} = \overline{\omega} \qquad \overline{\ } = \text{approximation}$$

Schéma d'Euler symplectique

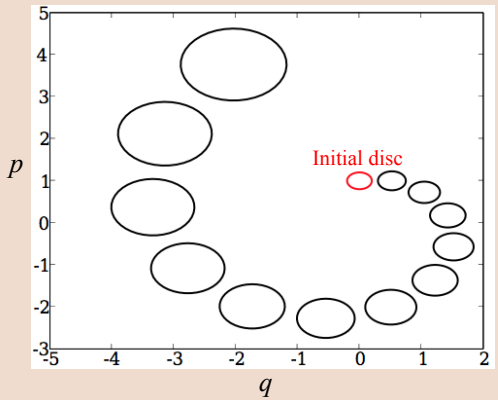
$$\begin{cases} \mathbf{p}^{n+1} = \mathbf{p}^n - \Delta t\ \nabla_{\mathbf{q}} H(\mathbf{p}^{n+1}, \mathbf{q}^n) \\ \mathbf{q}^{n+1} = \mathbf{q}^n + \Delta t\ \nabla_{\mathbf{p}} H(\mathbf{p}^{n+1}, \mathbf{q}^n) \end{cases}$$

Mid-point scheme

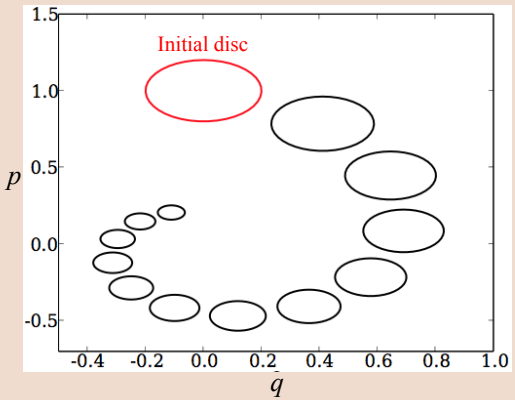
$$\begin{cases} \mathbf{p}^{n+1} = \mathbf{p}^n - \Delta t\ \nabla_{\mathbf{q}} H(\mathbf{p}^{n+1/2}, \mathbf{q}^{n+1/2}) \\ \mathbf{q}^{n+1} = \mathbf{q}^n + \Delta t\ \nabla_{\mathbf{p}} H(\mathbf{p}^{n+1/2}, \mathbf{q}^{n+1/2}) \end{cases}$$

Oscillateur harmonique

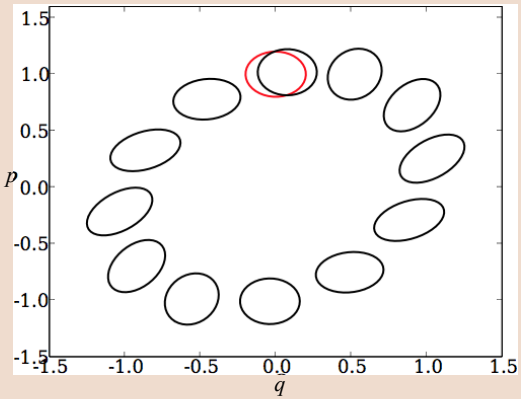
Préservation de la structure géométrique (aire)



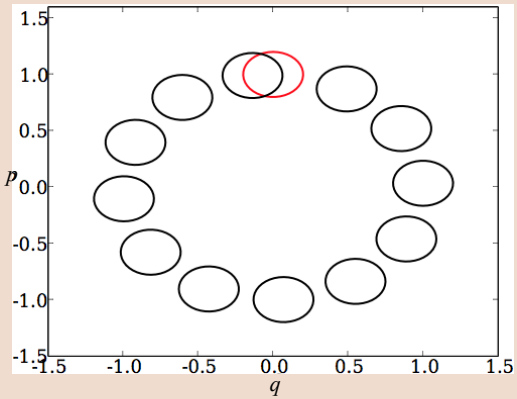
Euler Explicite



Euler Implicite

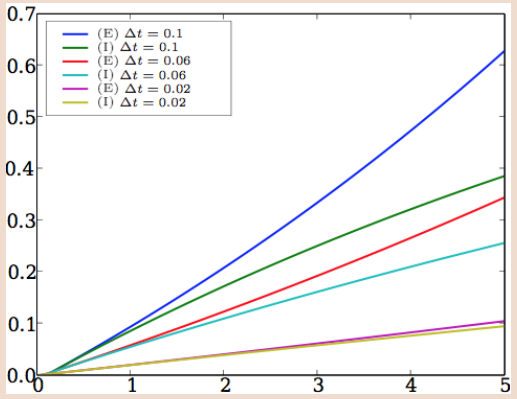


Euler Symplectique

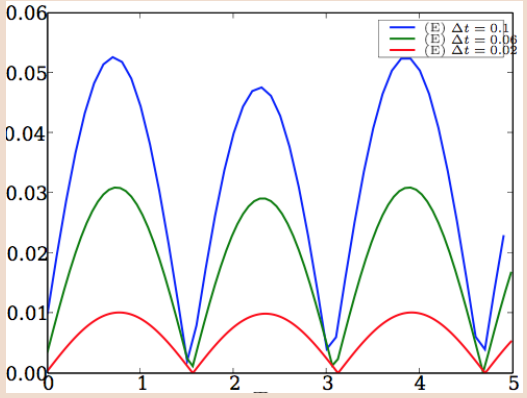


Mid-point

Erreur sur H en fonction du temps



Euler Explicite et Implicite



Euler Symplectique

- Erreur sur H bornée: $H^n = H^0 + O(\Delta t^r), \qquad \forall n \leq e^{\frac{\gamma}{2\Delta t}} / \Delta t$ r: ordre schéma, $\gamma > 0$ constante
- L'erreur sur les intégrales premières (énergie, moment angulaire, ...) est bornée

Dynamique de tourbillons

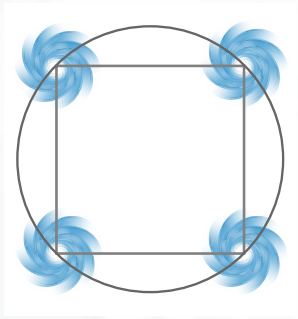
Runge-Kutta à s étapes

$$\mathbf{p}^{n+1} = \mathbf{p}^n - \Delta t \sum_{i=1}^{s} \beta_i \nabla_{\mathbf{q}}(\mathbf{P}_i, \mathbf{Q}_i) \qquad \mathbf{q}^{n+1} = \mathbf{q}^n + \Delta t \sum_{i=1}^{s} \beta_i \nabla_{\mathbf{q}}(\mathbf{P}_i, \mathbf{Q}_i)$$

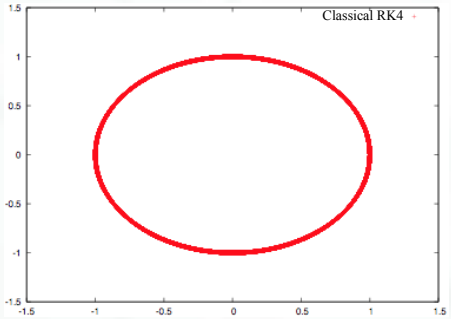
où $\quad \mathbf{P}_i = \mathbf{p}^n - \Delta t \sum_{j=1}^{s} \alpha_{ij} \nabla_{\mathbf{q}}(\mathbf{P}_j, \mathbf{Q}_j), \qquad \mathbf{Q}_i = \mathbf{q}^n + \Delta t \sum_{j=1}^{s} \alpha_{ij} \nabla_{\mathbf{p}}(\mathbf{P}_j, \mathbf{Q}_j),$

Symplectique $\iff$ $\beta_i\beta_j = \beta_i\alpha_{ij} + \beta_j\alpha_{ji}$

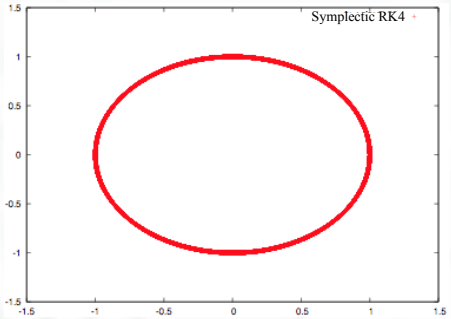
$$H = -\frac{1}{2\pi} \sum_{j \neq i} \gamma_i \gamma_j \ln \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\| \qquad (p_i, q_i) = \gamma_i \mathbf{x}_i$$



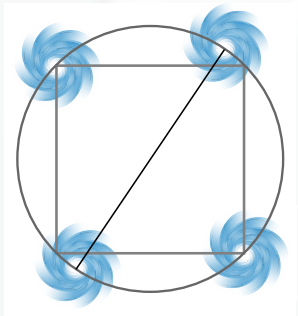
Configuration initial

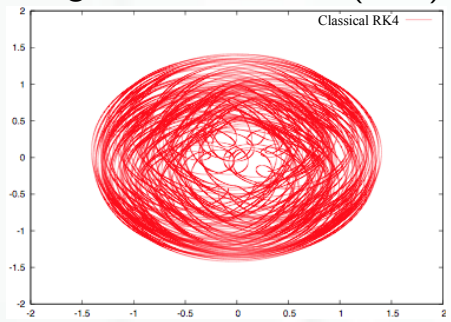


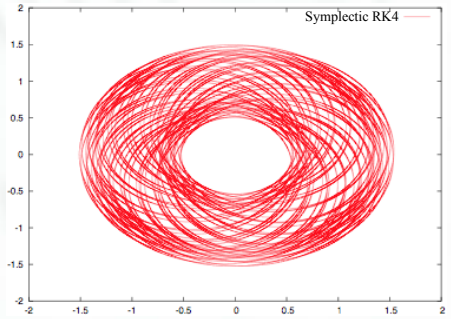
Runge-Kutta d'ordre 4 (RK4)



RK4 symplectique



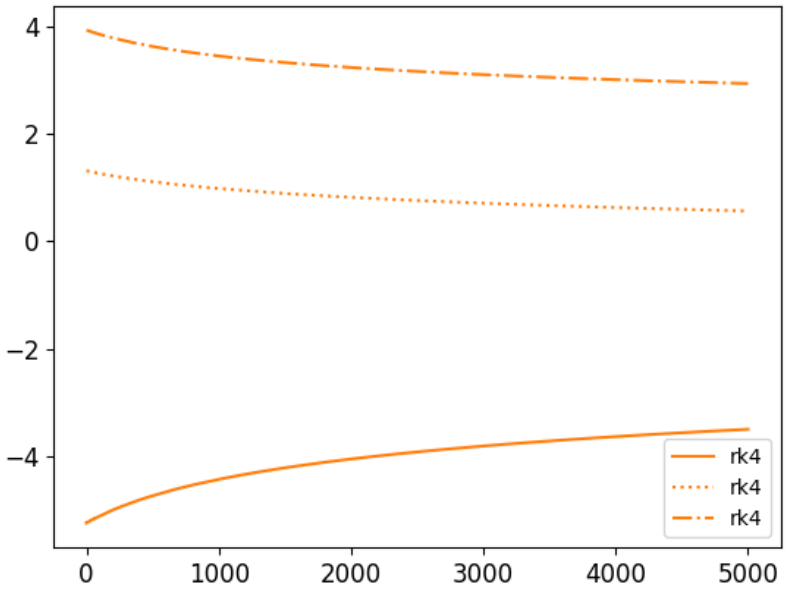


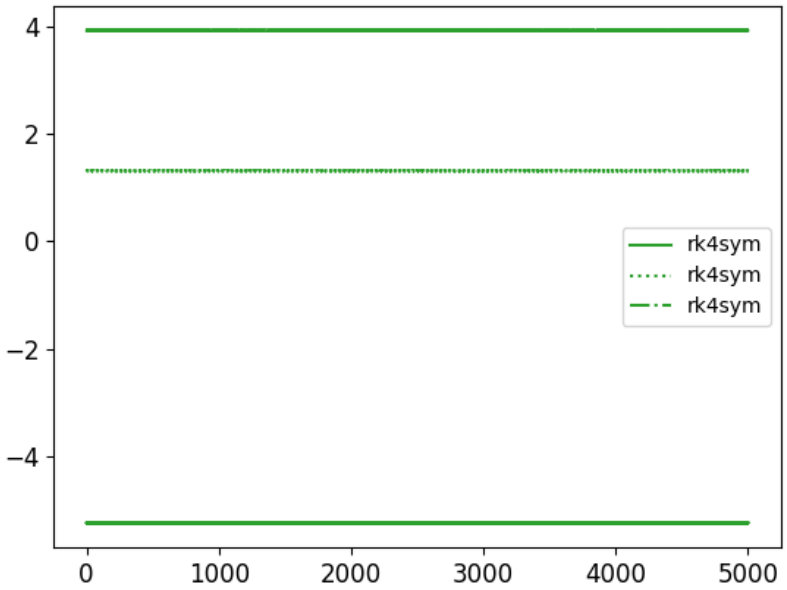


Toda lattice périodique

$$H = \sum_{k=1}^{d} \left(\frac{1}{2} p_k^2 + \mathrm{e}^{q_k - q_{k+1}} \right) \qquad \longrightarrow \qquad \text{Paire de Lax } \dot{L} = [L, M]$$

- Δt très faible: résultats similaires avec RK4 et RK4sym
- Δt plus grossier: RK4 non iso-spectral





Intégrateurs variationnels

Système lagrangien

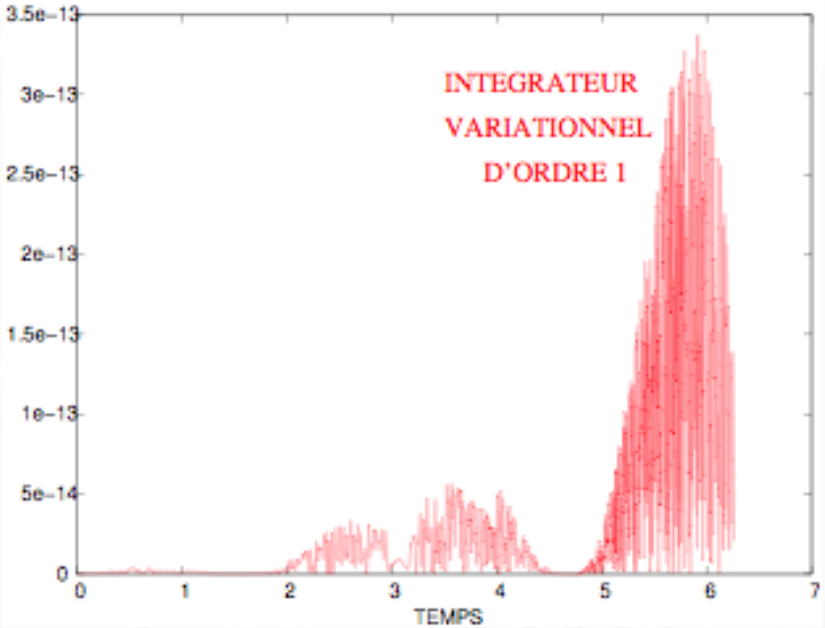
$$\mathcal{L} = \int_{t_0}^{t_1} L\Big(t, \mathbf{q}(t), \dot{\mathbf{q}}(t)\Big)\,\mathrm{d}t$$

$$\delta\mathcal{L} = 0 \longrightarrow \text{Eq d'Euler-Lagrange:} \quad EL \equiv \frac{\partial L}{\partial \mathbf{q}} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathbf{q}}}\right) = 0$$

- Schéma classique: Discrétisation directe $EL \simeq EL_n(t^{n-1}, t^n, \mathbf{q}^{n-1}, \mathbf{q}^n)$
- Intégrateur variationnel: On discrétise
  - $L(t, \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) \simeq L^n(t^{n-1}, t^n, \mathbf{q}^{n-1}, \mathbf{q}^n)$ par exemple
  - $\mathcal{L} \simeq \overline{\mathcal{L}} = \sum_n (t^n - t^{n-1}) L^n(t^{n-1}, t^n, \mathbf{q}^{n-1}, \mathbf{q}^n)$ par exemple
  - $\delta\overline{\mathcal{L}} = 0 \longrightarrow EL_{n,var}$
  - Variation sur t $\longrightarrow$ Conservation de l'énergie (Th. Nœther)

Résultats numériques

- $EL_{h,var}$ est automatiquement un intégrateur symplectique
- Erreur sur l'énergie



- Généralisation aux EDP variationnels
  - ★ Variations spatio-temporelles
  - ★ Préservation des lois de conservation (quantité de mouvement, ...)

Structure de Dirac

$\mathbb{T}M = TM \oplus T^*M$

Structure de Dirac sur M

Sous-fibré vectoriel $D \subset \mathbb{T}M$ tq

- $D = D^\perp$ par rapport à $\langle\langle \cdot, \cdot \rangle\rangle$ — Isotrope
- $[\![\Gamma(D), \Gamma(D)]\!] \subset \Gamma(D)$ — Intégrabilité

Crochet sur $\mathbb{T}M$

$$\langle\langle (v, \omega), (v', \omega') \rangle\rangle = \omega(v') + \omega'(v)$$

symétrique non-dégénéré mais pas défini positif

Orthogonal d'un sev D de $\mathbb{T}M$

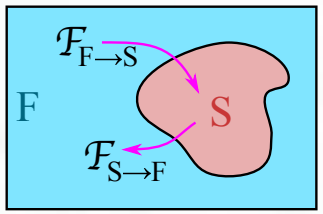
$$D^\perp = \{(v, \omega) \in \mathbb{T}M \quad | \quad \langle\langle (v, \omega), (v', \omega') \rangle\rangle = 0, \quad \forall (v', \omega') \in D\}$$

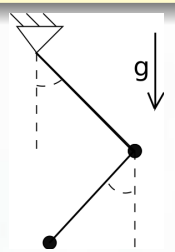
Crochet de Courant sur $\Gamma(\mathbb{T}M)$

$$[\![(X, \xi), (Y, \eta)]\!] = \left([X, Y] \ , \ \mathcal{L}_X \eta - \mathcal{L}_Y \xi - \tfrac{1}{2}(\, \mathrm{d}(\iota_X \eta - \iota_Y \xi)\right)$$

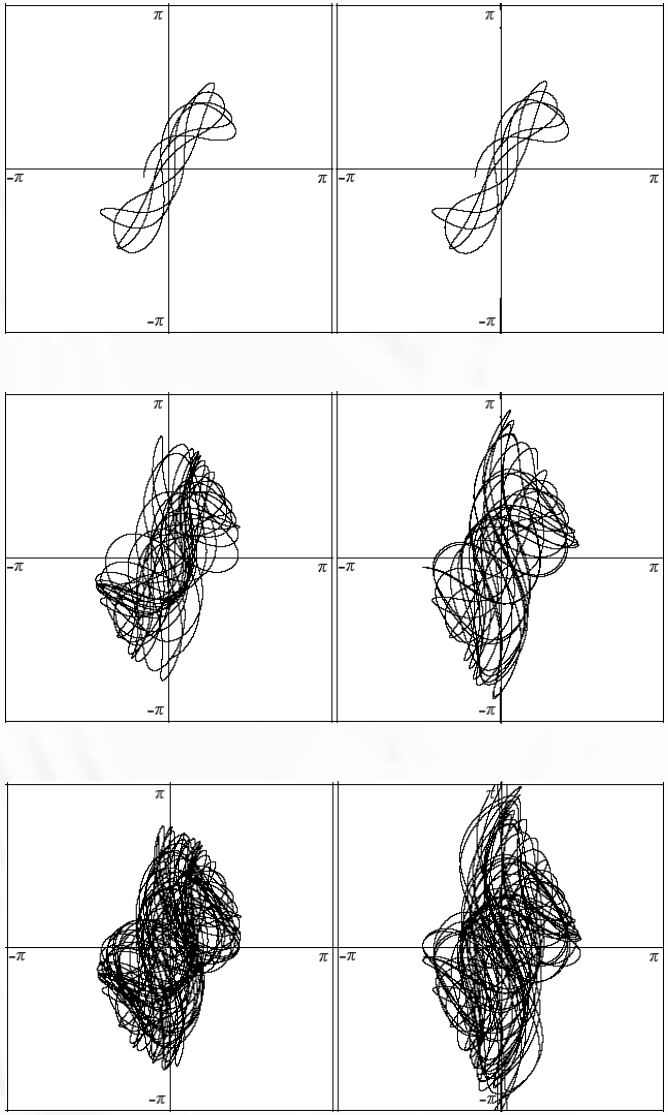
Exemples

- Interconnection entre deux milieux
- Contraintes





Pendule double



Intégrateur de Dirac vs Euler, même Δt

- Graphiques à $t = 10,\ 50,\ 100$
- Différences à $t = 50$
  - ★ Dirac: Oscillations
  - ★ Euler: Oscillations + full-returns

    Les full-returns disparaissent si Δt plus petit
- Schémas standard d'ordres plus élevés (Trapèze, RK):

  Même phénomène qu'Euler

Structure multisymplectique

$$\frac{\partial \mathbf{s}}{\partial t} \lrcorner \omega + \frac{\partial \mathbf{s}}{\partial x} \lrcorner \kappa = \mathrm{d}H \qquad \text{ou} \qquad \mathbb{W}\frac{\partial \mathbf{s}}{\partial t} + \mathbb{K}\frac{\partial \mathbf{s}}{\partial x} = \nabla_{\mathbf{s}} H$$

Loi de conservation: $\dfrac{\partial \omega}{\partial t} + \dfrac{\partial \kappa}{\partial x} = 0$

Structure multisymplectique

$$\frac{\partial \mathbf{s}}{\partial t} \lrcorner \omega + \frac{\partial \mathbf{s}}{\partial x} \lrcorner \kappa = \mathrm{d}H \qquad \text{ou} \qquad \mathbb{W}\frac{\partial \mathbf{s}}{\partial t} + \mathbb{K}\frac{\partial \mathbf{s}}{\partial x} = \nabla_{\mathbf{s}} H$$

Loi de conservation: $\dfrac{\partial \omega}{\partial t} + \dfrac{\partial \kappa}{\partial x} = 0$

Equation d'onde

$u_{tt} - u_{xx} = -V'(u)$

V : terme source

$$\Longrightarrow \quad \begin{cases} -v_t + w_x = V'(u), \\ u_t = v, \\ u_x = w, \end{cases} \quad , \mathbf{s} = (u, v, w)$$

$H = \frac{1}{2}v^2 - \frac{1}{2}w^2 + V(u), \qquad \omega = \mathrm{d}v \wedge \mathrm{d}u, \qquad \kappa = \mathrm{d}u \wedge \mathrm{d}w$

Structure multisymplectique

$$\frac{\partial \mathbf{s}}{\partial t} \lrcorner \omega + \frac{\partial \mathbf{s}}{\partial x} \lrcorner \kappa = \mathrm{d}H \qquad \text{ou} \qquad \mathbb{W}\frac{\partial \mathbf{s}}{\partial t} + \mathbb{K}\frac{\partial \mathbf{s}}{\partial x} = \nabla_{\mathbf{s}} H$$

Loi de conservation: $\dfrac{\partial \omega}{\partial t} + \dfrac{\partial \kappa}{\partial x} = 0$

Equation d'onde

$u_{tt} - u_{xx} = -V'(u)$

V : terme source

$$\longrightarrow \quad \begin{cases} -v_t + w_x = V'(u), \\ u_t = v, \\ u_x = w, \end{cases} \quad , \mathbf{s} = (u, v, w)$$

$H = \frac{1}{2}v^2 - \frac{1}{2}w^2 + V(u), \qquad \omega = \mathrm{d}v \wedge \mathrm{d}u, \qquad \kappa = \mathrm{d}u \wedge \mathrm{d}w$

Korteweg-de Vries: $u_t + uux + u_{xxx} = 0$

Schrödinger non-linéaire: $i\psi_t + \psi_{xx} + |\psi|^2\psi = 0$ $\qquad i^2 = -1$

Intégrateur multisymplectique

Schéma de discrétisation qui respecte la loi: $\dfrac{\partial \omega}{\partial t} + \dfrac{\partial \kappa}{\partial x} = 0$

Sine-Gordon: $\dfrac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} = -V'(u) \qquad V = -\cos u$

Périodique, $x \in [-10, 10]$

- Leapfrog: semi-symplectique (en temps)

(conserve une 2-forme spatiale au cours du temps)

$$\frac{u_i^{n+1} - 2u_i^n + u_i^{n-1}}{\Delta t^2} - \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2} + V'(u_i^n) = 0$$

- Un schéma (non multisymplectique) conservant l'énergie (EC)

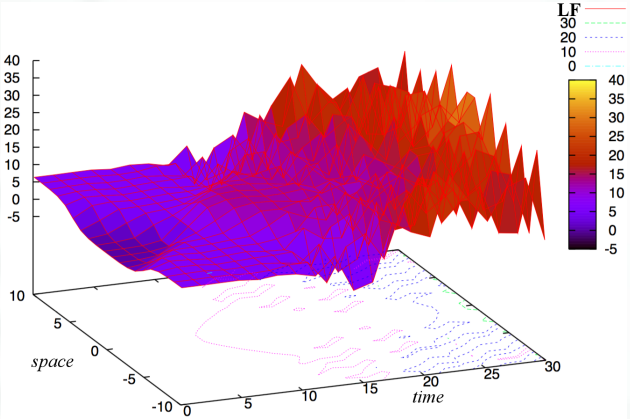
$$\frac{u_i^{n+1} - 2u_i^n + u_i^{n-1}}{\Delta t^2} - \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2} + \frac{V(u_i^{n+1}) - V(u_i^{n-1})}{u_i^{n+1} - u_i^{n-1}} = 0$$

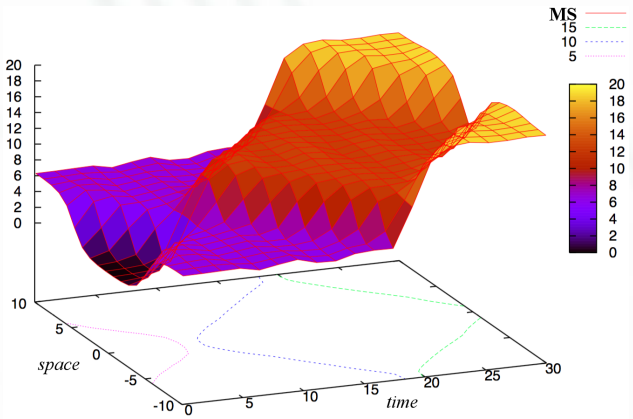
- Runge-Kutta multisymplectique, récrit avec la variable originale u

$$\Delta_t^2 \left(u_i^{n+1} - 2u_i^n + u_i^{n-1} \right) - \Delta_x^2 \left(u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n \right)$$
$$+ V'\left(u_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \right) + V'\left(u_{i+\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} \right) + V'\left(u_{i-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \right) + V'\left(u_{i-\frac{1}{2}}^{n-\frac{1}{2}} \right) = 0$$

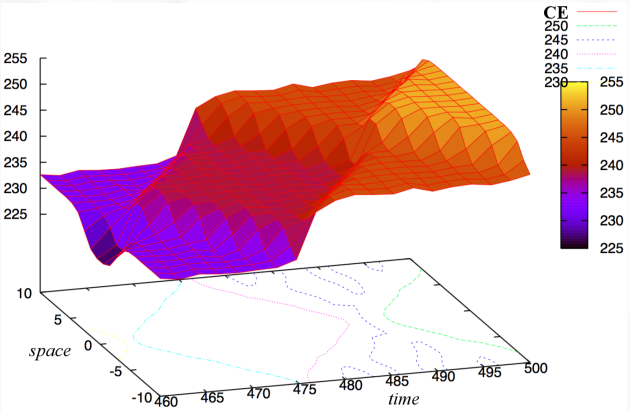
Résultats

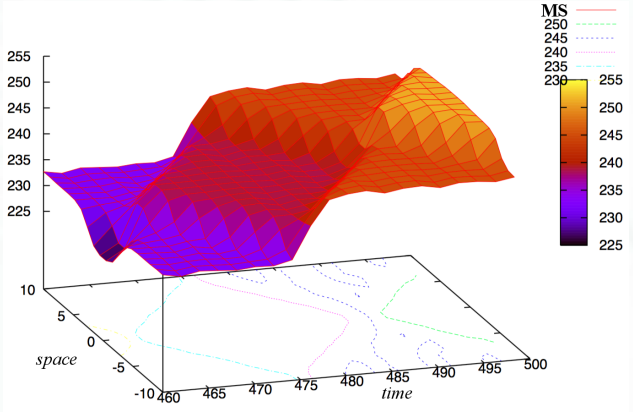
- $\Delta t \ll \Delta x$ petits: résultats acceptables avec les trois schémas
- $\Delta t \simeq \Delta x$: Leapfrog instable





Leapfrog (à gauche) et Multisymplectique (à droite) à $t \in [0, 30]$. $\Delta t = \Delta x = 5 \cdot 10^{-2}$





EC (à gauche) et Multisymplectique (à droite) à $t \in [460, 500]$. $\Delta t = \Delta x = 5 \cdot 10^{-2}$

Résultats

- $\Delta t > \Delta x$: Le schéma conservant l'énergie explose dès les premières itérations

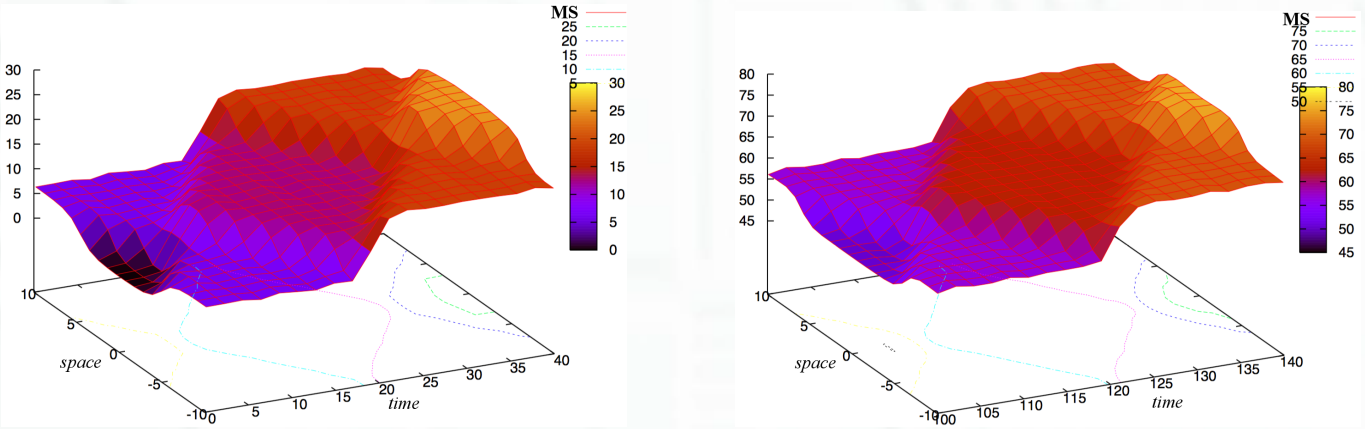


Schéma Multisymplectique pour $t \in [0, 40]$ (à gauche) et $t \in [100, 140]$ (à droite). $\Delta t = 2\Delta x = 10^{-1}$

Structure de groupe de symétrie

EDP: $E(\mathbf{z}, \mathbf{u}, \mathbf{u}^{(1)}, \cdots, \mathbf{u}^{(k)}) = 0 \qquad (\mathcal{E})$ Peut être dissipatif

Symétrie de l'équation $(\mathcal{E})$

Transformation $g : (\mathbf{z}, \mathbf{u}) \mapsto (\widehat{\mathbf{z}}, \widehat{\mathbf{u}})$ telle que
si $\mathbf{u}(\mathbf{z})$ est solution alors $\widehat{\mathbf{u}}(\widehat{\mathbf{z}})$ est aussi solution

Groupe de symétrie de $(\mathcal{E})$

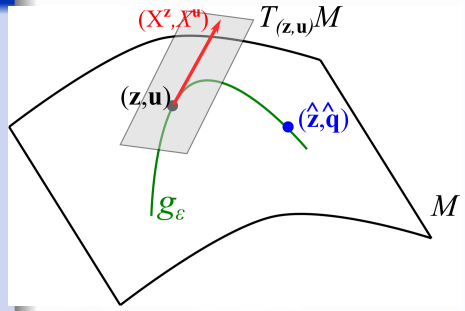
Ensemble G de symétries $g_\epsilon : (\mathbf{z}, \mathbf{u}) \mapsto \left(\widehat{\mathbf{x}}(\epsilon), \widehat{\mathbf{u}}(\epsilon)\right)$
ayant une structure de groupe de Lie

Calcul du groupe de symétrie: algèbre de Lie

- Générateur infinitésimal : $X = X^{\mathbf{z}}\partial_{\mathbf{z}} + X^{\mathbf{u}}\partial_{\mathbf{u}}$

$$X^{\mathbf{z}} = \left.\frac{\partial \widehat{\mathbf{z}}}{\partial \epsilon}\right|_{\epsilon=0}, \qquad X^{\mathbf{u}} = \left.\frac{\partial \widehat{\mathbf{u}}}{\partial \epsilon}\right|_{\epsilon=0}$$

- Prolongation: $X^{(k)} = X + X^{\mathbf{u}_{\mathbf{z}}}\partial_{\mathbf{u}_{\mathbf{z}}} + X^{\mathbf{u}_{\mathbf{zz}}}\partial_{\mathbf{u}_{\mathbf{zz}}} + \cdots$
- g_ϵ symétrie $\iff$ $X^{(k)} \cdot E = 0$ lorsque $E = 0$



☞ Packages de calcul symbolique

Ecoulement d'un fluide incompressible

Groupe de symétrie des équations de Navier-Stokes anisothermes

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{u}\otimes\mathbf{u}) + \tfrac{1}{\rho}\nabla p - \nu\Delta\mathbf{u} + \beta g\theta \mathrm{e}_3 = 0, \qquad \frac{\partial \theta}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{u}\theta) - \kappa\Delta\theta = 0, \qquad \operatorname{div}\mathbf{u} = 0$$

- Translation temporelle: $(t+\epsilon, \mathbf{x}, \mathbf{u}, p, \theta)$
- Translation spatiale: $(t, \mathbf{x}+\mathbf{x}_0, \mathbf{u}, p, \theta)$
- Translation de pression : $(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}, p+\zeta(t), \theta)$
- Translation pression-temperature: $(t, \mathbf{x}, \mathbf{u}, p+\epsilon\beta x_3, \theta+\epsilon/\rho)$
- Transformation galiléenne généralisée : $\left(t, \mathbf{x}+\boldsymbol{\alpha}(t), \mathbf{u}+\boldsymbol{t}\dot{\alpha}(t), p+\rho\,\mathbf{x}\,.\,\boldsymbol{t}\ddot{\alpha}(t), \theta\right)$
- Rotation horizontale: $(t, \mathrm{R}\mathbf{x}, \mathrm{R}\mathbf{u}, p, \theta)$
- Transformation d'échelle: $(\mathrm{e}^{2\epsilon}t, \mathrm{e}^{\epsilon}\mathbf{x}, \mathrm{e}^{-\epsilon}\mathbf{u}, \mathrm{e}^{-2\epsilon}p, \mathrm{e}^{-3\epsilon}\theta)$
- 2ème transformation d'échelle: $(t, \mathrm{e}^{\epsilon}\mathbf{x}, \mathrm{e}^{\epsilon}\mathbf{u}, \mathrm{e}^{2\epsilon}p, \mathrm{e}^{\epsilon}\theta, \mathrm{e}^{2\epsilon}\nu, \mathrm{e}^{2\epsilon}\kappa)$

☞ Groupe de Lie de dim 8 et 4 groupes de dim infinie

Importance des symétries

Le groupe de symétrie encode des propriétés physiques importantes

- Principes physiques fondamentaux (invariance galiléenne, d'échelle, ...)
- Solutions autosimilaires (vortex, chocs, ...)
- Théorèmes de Nœther
  - ★ À chaque symétrie correspond une loi de conservation
  - ★ Si cas non lagrangien, introduction d'un bilagrangien

$$\begin{cases} NS(u,p) = 0 \\ NS_{adj}(u, u_{adj}, p, p_{adj}) = 0 \end{cases} \longleftarrow L(u, u_{adj}, p, p_{adj})$$

- En turbulence: lois de paroi, loi d'échelle, ...
  - ★ Loi linéaire: $U_1 = C_1 x_2 + C_3, \quad \Theta = C_2 x_2 + C_4$
  - ★ Loi logarithmique : $U_1 = C_1 \ln(x_2 + b) + C_3, \quad \Theta = C_2 [x_2 + b]^{-1} + C_4$
  - ★ Loi exponentielle: $U_1 = C_1 \exp(C x_2) + C_3, \quad \Theta = C_2 \exp(2 C x_2) + C_4$
  - ★ Loi algebrique: $U_1 = C_1 (x_2 + b)^a + C_3, \quad \Theta = C_2 (x_2 + b)^{2a-1} + C_4$

Schémas invariants

Schéma invariant par groupe de symétrie de Lie:

Schéma qui conserve les symétries au niveau discret

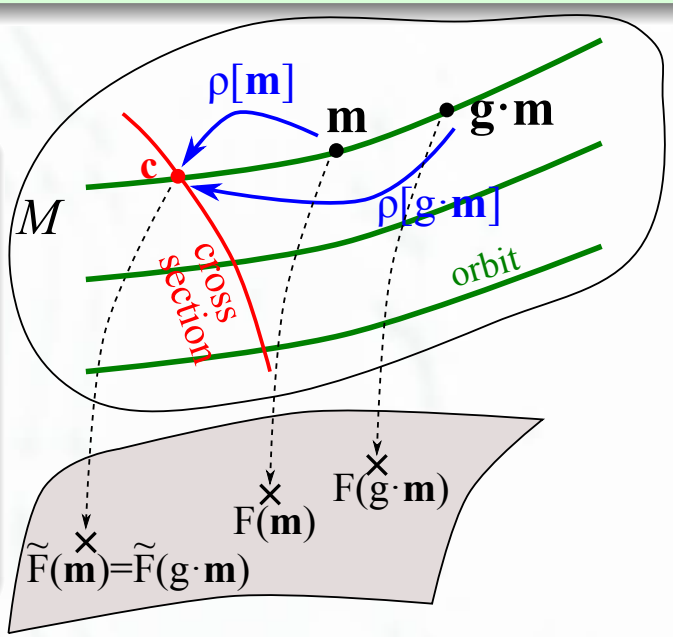
Schéma: $F(\text{stencil}) = 0$

Repère mobile d'un groupe de Lie G (Elie Cartan)
agissant régulièrement et librement sur une variété M

$$\rho : \begin{array}{ccc} M & \longrightarrow & G \\ \mathbf{m} & \longmapsto & \rho[\mathbf{m}] \end{array}$$

tel que

$$\rho[g \cdot \mathbf{m}] = \rho[\mathbf{m}] g^{-1} \qquad \forall g \in G$$



Soit $F(\mathbf{m})$ une fonction et $\widetilde{F}(\mathbf{m}) = F(\rho[\mathbf{m}] \cdot \mathbf{m})$. Alors

- $\widetilde{F}(g \cdot \mathbf{m}) = \widetilde{F}(\mathbf{m}), \qquad \forall g \in G$
- G groupe de symétrie de $\widetilde{F}(\mathbf{m}) = 0$

Choix de c: Consistance du schéma

Schémas invariants

Equation de Burgers. $\frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$

Groupe de symétrie

- Translation spatiale: $(t + \epsilon_1, x, u)$
- Translation temporelle: $(t, x + \epsilon_2, u)$
- Translation projection: $(\frac{t}{1-\epsilon_3 t}, \frac{x}{1-\epsilon_3 t} + \epsilon_2, u(1 - \epsilon_3 t) + \epsilon_3 x)$
- Transformation d'échelle: $(e^{2\epsilon_4}\, t, e^{\epsilon_4}\, x, e^{-\epsilon_4}\, u)$
- Transformation galiléenne: $(t, x + \epsilon_5 t, u + \epsilon_5)$

FTCS (explicite en temps, centré en espace), $O(\Delta t, \Delta x^2)$

$$F(\mathbf{m}) \equiv \frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} + u_i^n \left[\frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x}\right] - \nu \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2} = 0 \qquad \mathbf{m} = (u_i^n)$$

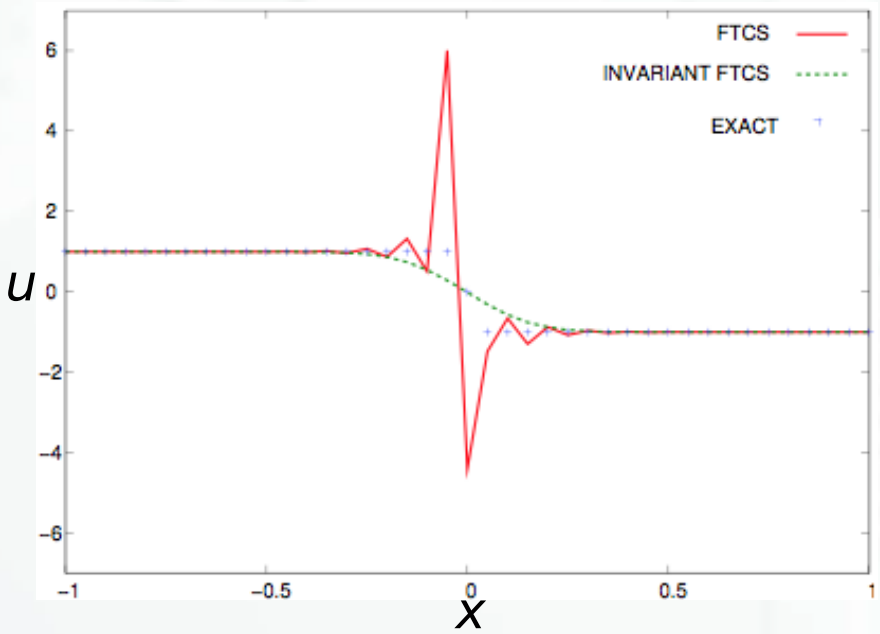
FTCS "invariantisé" par repères mobiles, $O(\Delta t, \Delta x^2)$

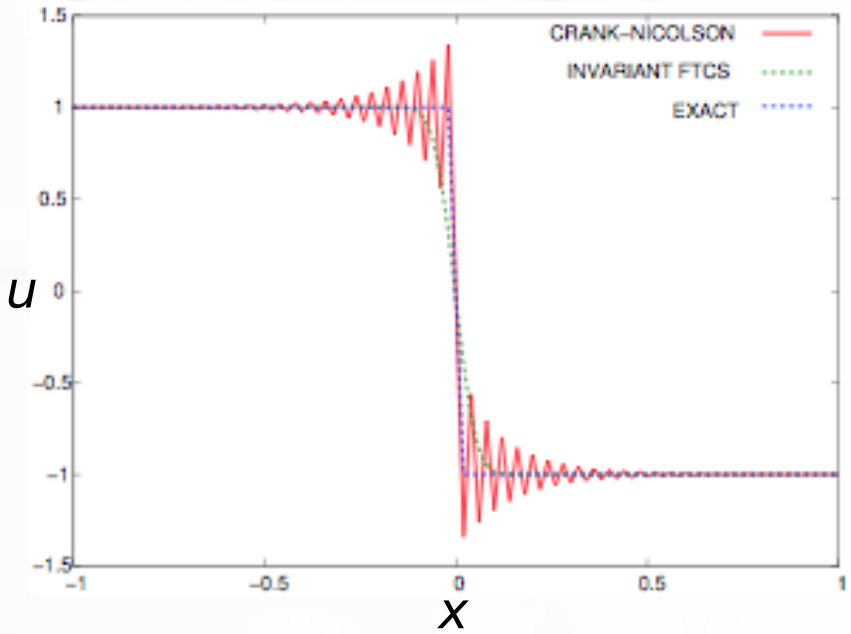
$$\widetilde{F}(\mathbf{m}) \equiv \frac{u_i^{n+1}(1-\epsilon_3 \Delta t) - u_i^n}{\Delta t}(1 - \epsilon_3 \Delta t) + [u_i^n + \epsilon_5]\left[\frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x} + \epsilon_3\right] - \nu \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2} = 0$$

$$\epsilon_3 = \frac{u_{i+1}^n - u_{i-1}^n}{2\Delta x}, \quad \epsilon_5 = f u_{i+1}^n + e u_i^n + f u_{j-1}^n, \quad e + 2f = 1$$

Schémas invariants

Pseudo-choc: $u(t,x) = \frac{\sinh\left(\frac{x}{2\nu}\right)}{\cosh\left(\frac{x}{2\nu}\right)+\exp\left(\frac{-t}{4\nu}\right)}$

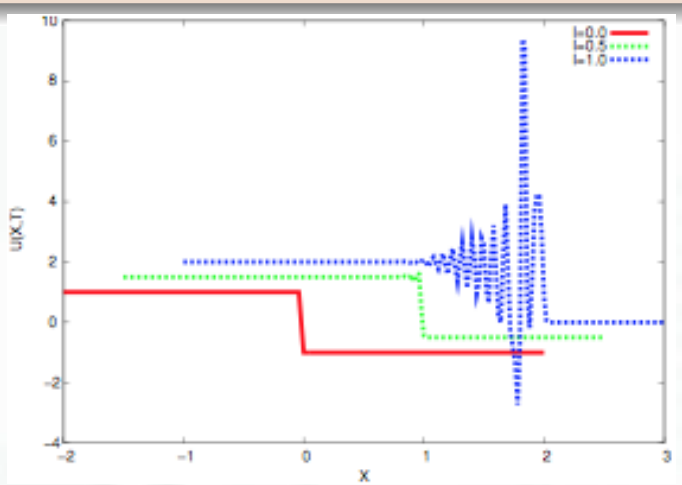




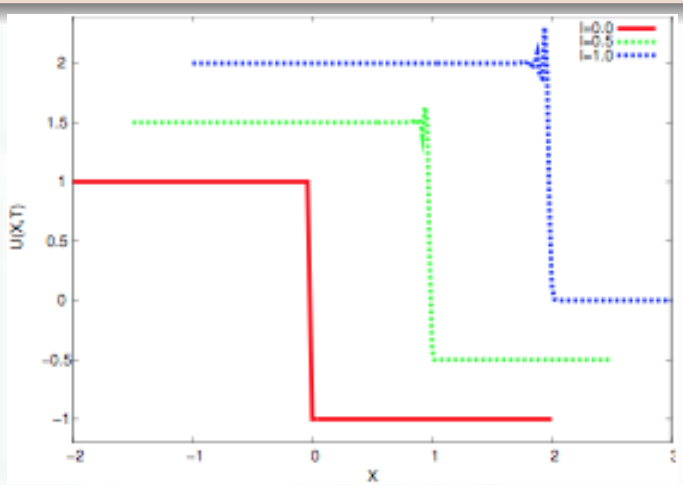
Gauche: $\nu = 8 \cdot 10^{-3}$. Droite: $\nu = 7.5 \cdot 10^{-4}$

Résultats numériques

Compatibilité avec l'invariance galiléenne

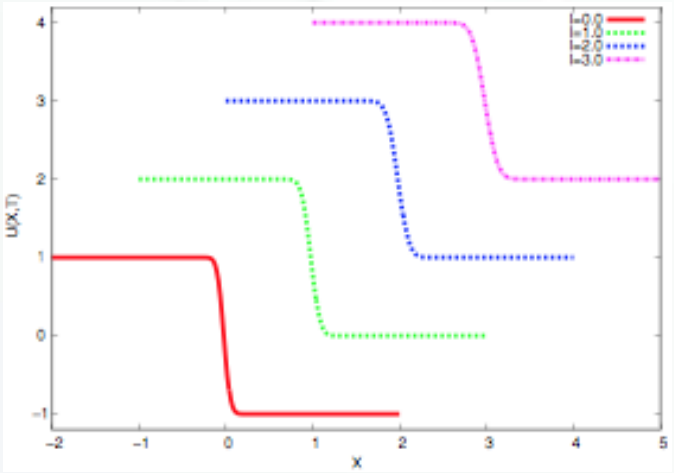


FTCS

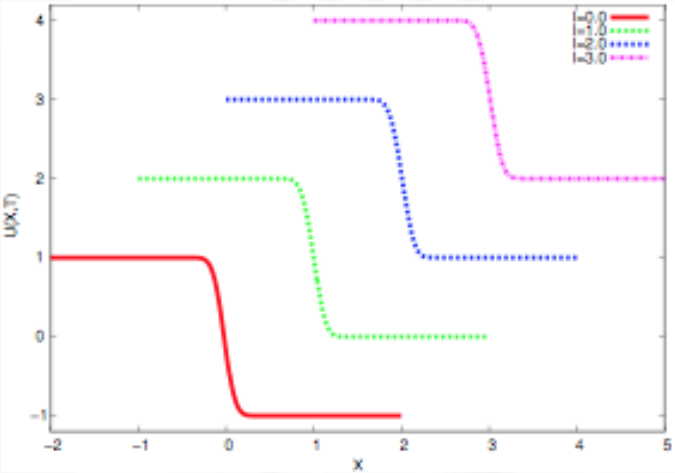


Crank-Nicholson

$\nu = 5 \cdot 10^{-3}$



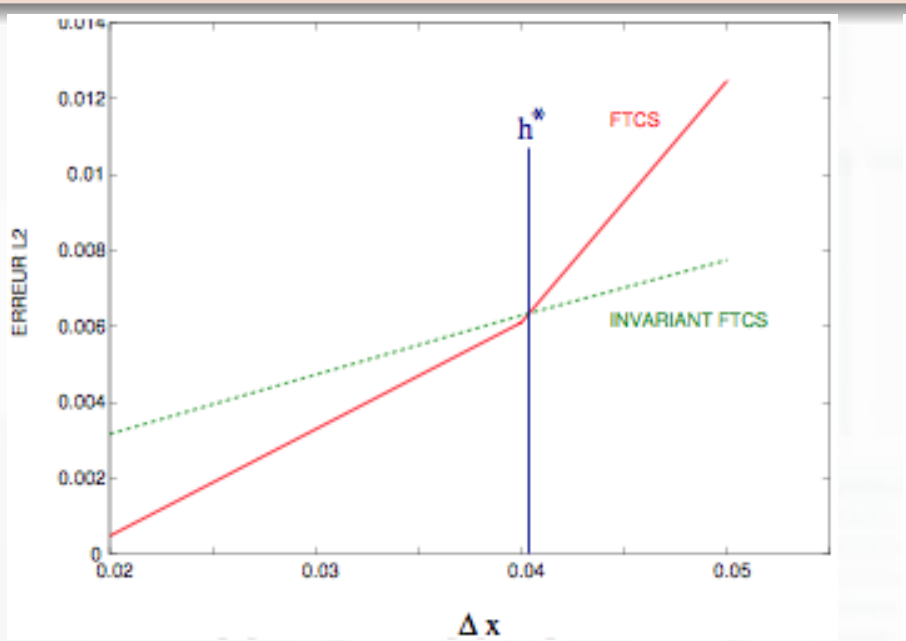
FTCS invariant



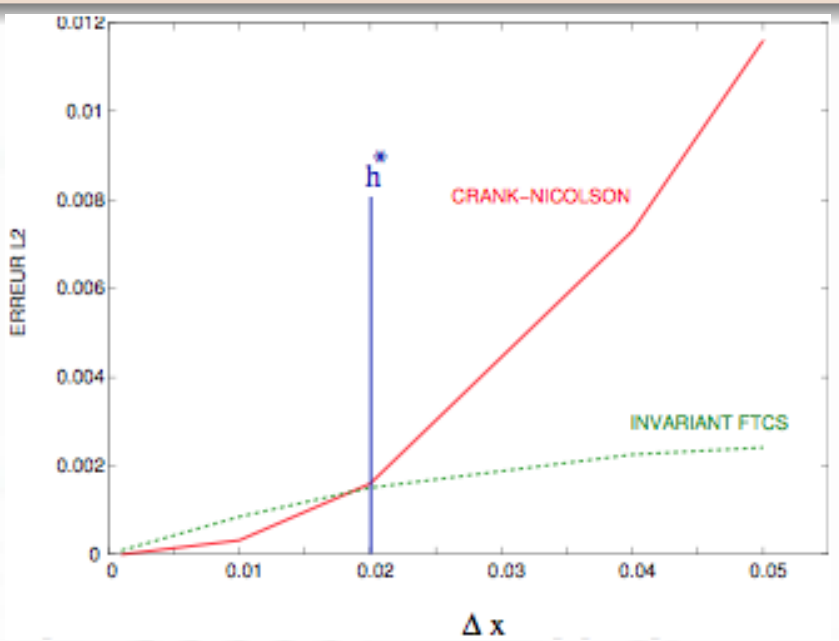
Crank-Nicholson invariant

Résultats numériques

Maillage plus grossier



CFL=0.3



CFL=0.5

- Respect de la structure géométrique ⟶ capturer les solutions autosimilaires
- ⟶ relaxer le maillage
- Théorème de Nœther discret ⟶ lois de conservation

Calcul exterieur discret

Calcul extérieur sur une variété orientable M de dim n

- $\Lambda^k = \{\alpha : \ k-\text{forme différentielle sur } TM\}$
- Structure cohomologique $\quad \Lambda^0 \xrightarrow{\mathrm{d}} \Lambda^1 \xrightarrow{\mathrm{d}} \quad \cdots \quad \Lambda^{n-1} \xrightarrow{\mathrm{d}} \Lambda^n \xrightarrow{\mathrm{d}} 0$
- $\mathrm{d}^2 = 0$ $\qquad$ $\mathrm{d}=$ dérivée extérieure

Dans $\mathbb{R}^3$,

$\mathrm{d} : \Lambda^0 \longrightarrow \Lambda^1$	⟺	$\mathrm{grad} : C^\infty(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}) \longrightarrow C^\infty(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3)$
$\mathrm{d} : \Lambda^1 \longrightarrow \Lambda^2$	⟺	$\mathrm{rot} \ : C^\infty(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3) \longrightarrow C^\infty(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3)$
$\mathrm{d} : \Lambda^2 \longrightarrow \Lambda^3$	⟺	$\mathrm{div} \ : C^\infty(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^3) \longrightarrow C^\infty(\mathbb{R}^3, \mathbb{R})$
$\mathrm{d}^2 = 0$	⟺	$\mathrm{rot}\ \mathrm{grad} = 0, \ \ \mathrm{div}\ \mathrm{rot} = 0$

Quelques avantages

- Etude des géométries complexes
- Facilite la lecture des structures géométriques
- Calcul des lois de conservation
- Indépendant des coordonnées

⟹ Présentation de Rama Ayoub

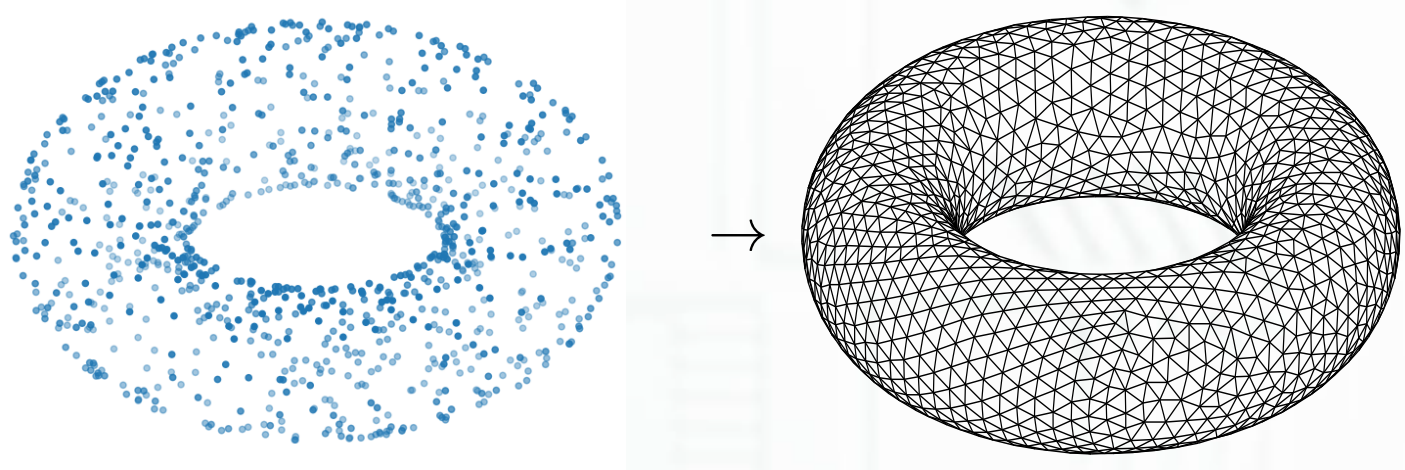
Conclusion

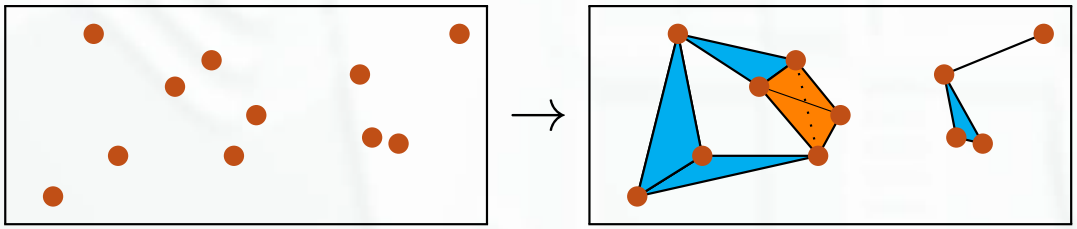
- Système hamiltonien
  - ★ Intégrateur symplectique $\varphi_n^* \omega = \omega$
  - ★ Erreur bornée sur H, iso-spectralité, ...
- Système lagrangien
  - ★ Intégrateur variationnel $\delta \mathcal{L}_n = 0$
  - ★ Lois de conservation: $E_n = E_0$, ...
- Structure de Dirac
  - ★ Intégrateur de Dirac $D_n = D_n^\perp$
  - ★ Robustesse
- EDP symplectique
  - ★ Intégrateur multisymplectique $\left(\frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{\partial \kappa}{\partial x}\right)_n = 0$
  - ★ Robustesse
- EDP générale
  - ★ Schéma invariant $G \subset G_n$
  - ★ Robustesse

Mêmes coûts que les schémas standard

Persistance topologique

Persistance topologique

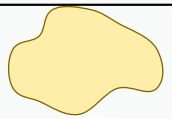
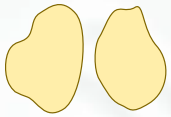
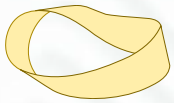
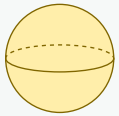




- Proximité ▶ distance, function filtre
- Connection entre 2 points: segment, 3 points: triangle, . . . ▶ simplex
- Triangulation ▶ complexe simpliciel
- Propriétés topologiques ▶ connexité, trou, . . . , nombres de Betti
- Analyse multi-échelle, bruits ▶ filtration, persistence

Nombres de Betti

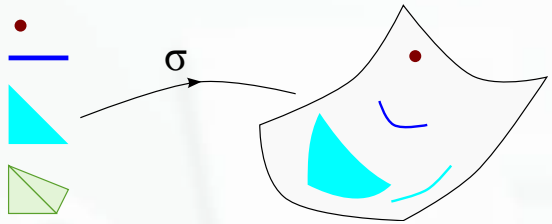
Nombre de Betti β_k: Mesure de la "complexité" topologique d'ordre k, $k \in \mathbb{N}$

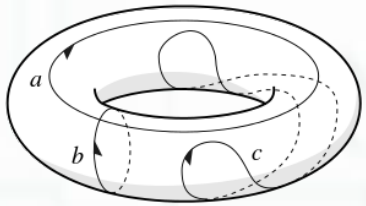
	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6	β_7	β_8	...
	1	0								
	2	0								
	1	1	0							
	1	3	0							
	1	0	1	0						
	1	2	1	0						
	1	2	1	0						
SO(3)	1	0	1	0						
SO(4)	1	0	0	2	0	0	1	0		
SO(5)	1	0	0	1	0	0	0	1	0	

Espace projectif $\mathbb{P}^n(\mathbb{R})$:
$\beta_0 = 1$,
$\beta_i = 0, i = 1, \ldots, n-1$,
$\beta_n = 1$ si n impair,
0 si n pair
$\beta_i = 0$ si $i > n$

Homologie d'un espace topologique

Singular k-simplex: fonction continue $\sigma : \Delta_k \longrightarrow M$



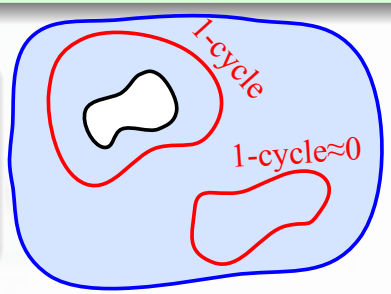


Singular k-chain: $\sum c^i \sigma_i \quad \in \quad \Omega_k(M) = \text{span}_{\mathbb{Z}}\{\text{sing. } k-\text{simplex}\}$ $\mathbb{Z}-$module

Bord d'un singular k-simplex: $\partial_k : \Omega_k(M) \longrightarrow \Omega_k(M)$

$$\partial_k \sigma = \sum \sigma_{|f}$$ somme sur les restrictions de σ aux $k-1$-faces f de Δ_k

- k-cycle $\in \ker \partial_k$, k-bord $\in \text{Im}\, \partial_{k+1}$
- $k^{\text{è}}$ groupe d'homologie: $H_k = \ker \partial_k / \text{Im}\, \partial_{k+1}$
- $k^{\text{è}}$ nombre de Betti: $\beta_k = \text{rank}\, H_k$



☞ Invariants par homomorphismes

Deux espaces topologiques X et Y sont homéomorphes s'il existe une bijection F tq

$F : X \longrightarrow Y$ et $F^{-1} : Y \longrightarrow X$ sont continues

Homomorphisme: parfois trop fort pour l'analyse de données

Equivalence homotopique

$f, f' : X \longrightarrow Y$ sont homotopes s'il existe une fonction

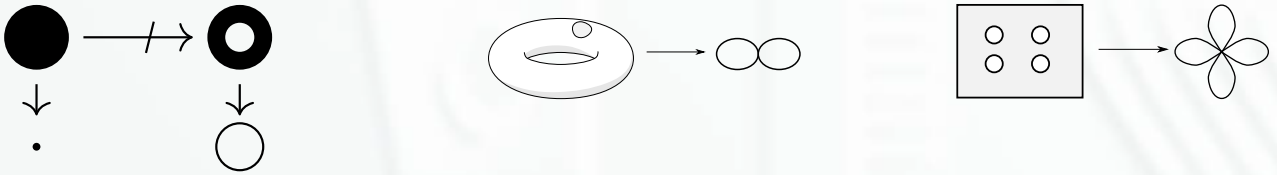
$$H : \begin{array}{ccc} [0,1] \times X & \longrightarrow & Y \\ (t,x) & \longmapsto & H(t,x) \end{array} \quad \text{continue} \quad \text{telle que} \quad \begin{array}{l} H(0,\cdot) = f \\ H(1,\cdot) = f' \end{array}$$

H est un chemin faisant passer de f à f' de manière continue

Deux espaces topologiques X et Y sont homotopiquement équivalents s'il existe deux fonctions

- $F : X \longrightarrow Y$ et $G : Y \longrightarrow X$ continues telles que
- $F \circ G$ est homotope à Id_Y
- $G \circ F$ est homotope à Id_X

☞ X peut se rétracter de manière continue en Y (Cas $Y \subset X$)



Espace contractible: homotopiquement équivalent à un point

X et Y homotopiquement équivalents $\implies$ $\beta_k(X) = \beta_k(Y), \quad \forall k \in \mathbb{N}$

D'un nuage de points vers une triangulation

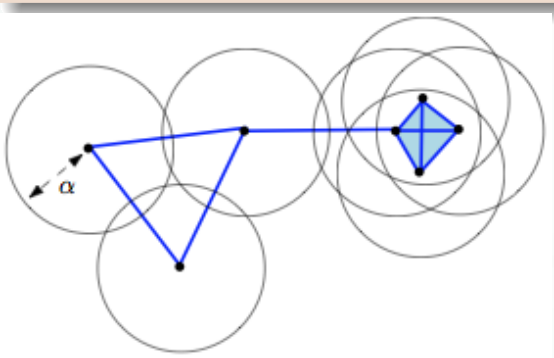
$V = \{v_0, \cdots, v_n\} \subset M$ espace métrque, $\alpha \geq 0$ fixé

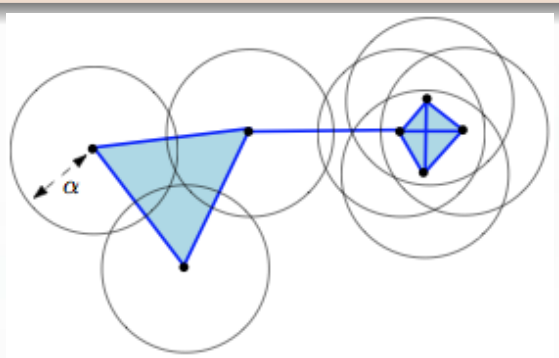
Triangulation par complexe simpliciel:

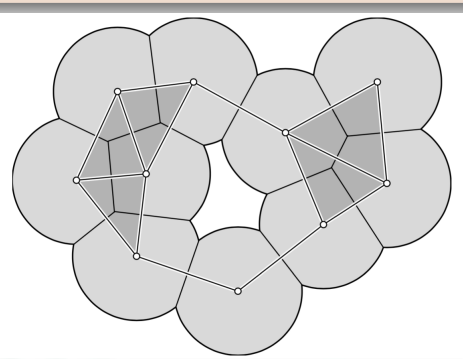
0-simplexe: sommet, 1-simplexe: segment, 2-simplexe: triangle, 3-simplexe: tetrahèdre, ...

Cech complex

$$Cech(V, \alpha) = \{(v_{i_0}, \cdots, v_{i_k}) \mid \cap_{j=1}^{k} \overline{B}(v_{i_j}, \alpha) \neq \emptyset\}$$







Vietoris-Rips complex

$$Rips(V, \alpha) = \{(v_{i_0}, \cdots, v_{i_k}) \mid d(v_{i_j}, v_{i_p}) \leq \alpha, \quad \forall j, p = 0, \cdots, k\}$$

☞ Plus facile à calculer

Alpha complex: $\overline{B}(v_i, \alpha) \longrightarrow \overline{B}(v_i, \alpha) \cap \text{Voronoi}(v_i)$

☞ Homotopiquement équivalent à Cech mais beaucoup moins de simplexes et plus de calcul

☞ Autres posssibilités: Witness complex, cubical complex

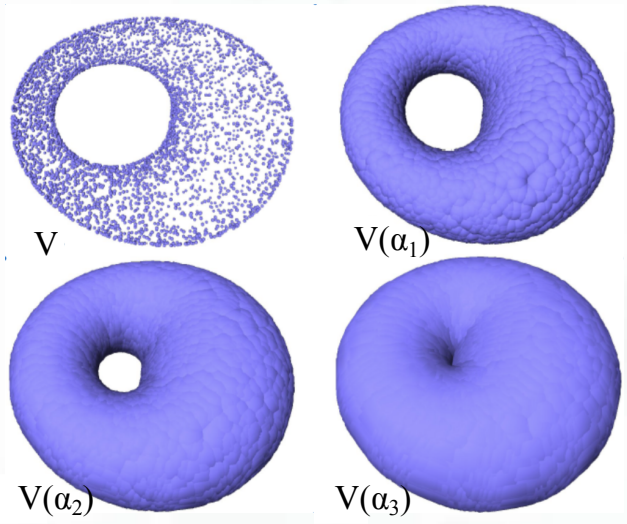
☞ Peut être étendu à des nuages de données

Reconstruction dans $\mathbb{R}^d$

$V = \{v_i \in X, i = 1 \dots n\} \quad \subset \quad X$

Sous certaine condition sur $d_H(V_\alpha, X)$ et pour α bien choisi,

X est homotopiquement équivalent à $V_\alpha = \cup B(v_i, \alpha)$ et à $Cech(V_\alpha)$



Distance de Hausdorff entre $X, Y \subset M$

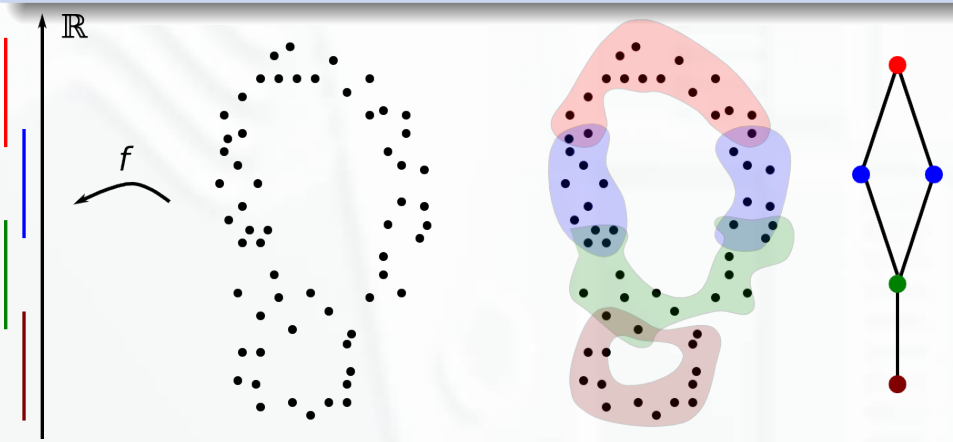
$$d_H(X, Y) = \max\{\sup_{x \in X} d_Y(x), \sup_{y \in Y} d_X(y)\} = \inf\{\epsilon \geq 0 \mid Y \subset X^\epsilon \text{ et } X \subset Y^\epsilon\}$$

Via une fonction filtre

Mapper algorithm

⊙ Utiliser une fonction filtre $f : V \longrightarrow \mathbb{R}$ et
⊙ Un recouvrement $(R_i)_{i=1,\dots,n}$ de $[\min f, \max f]$ avec $R_i \cap R_{i+1} \neq \emptyset$
⊙ Prendre $U_i = f^{-1}(R_i)$
⊙ Raffiner par un cluster algorithm

- par "composantes connexes" si P est un espace continu
- par un distance si l'espace est métrique
- par Nearest neighbor graph si les points sont sur une graphe



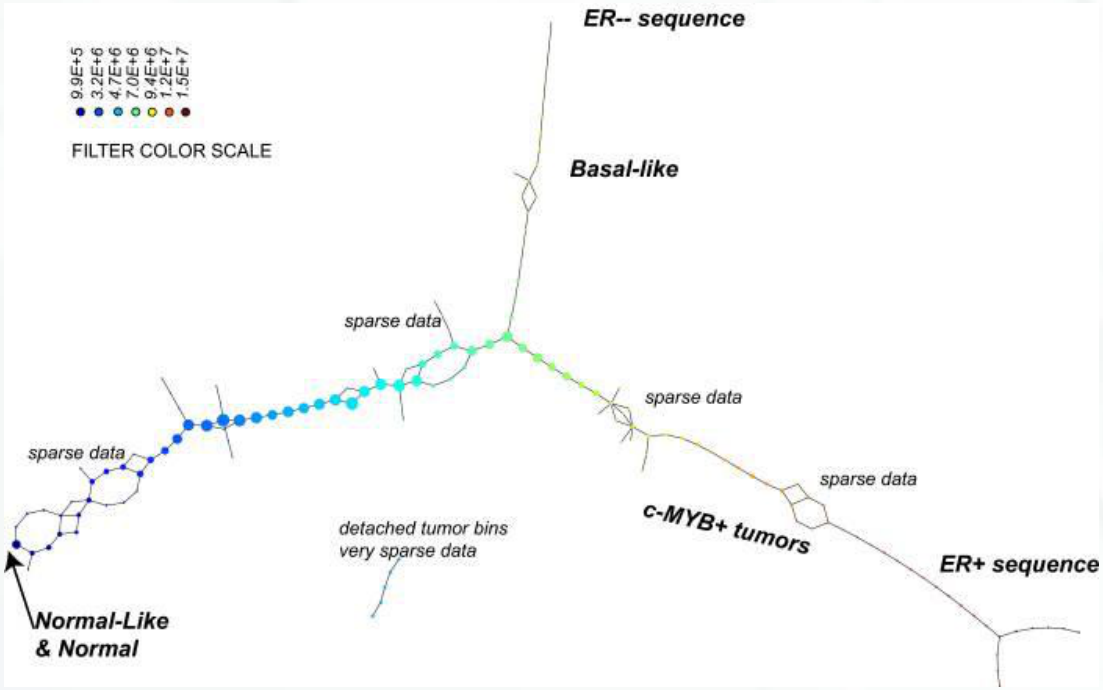
Exemples de $f(x)$:

- Centralité $\left(\sum_{y \in V} d(x,y)^n\right)^{1/n}$, exentricité $f\left(\max_{y \in V} d(x,y)^n\right)^{1/n}$
- Densité estimée de points autour de x
- Coordonnées en analyse en composantes principales (SVD)

Dépend du choix des R_i

Analyse de types de cancer

- V_i: tissus, normaux et malades
- Fonction filtre: deviation par rapport à une tissue normale
- Cluster: correlation distance



[Nicolau et al. Topology based data analysis identifies a subgroup of breast cancers with a unique mutational profile and excellent survival. 2011]

Persistance topoologique

Quelle valeur prendre pour α dans $Cech(V, \alpha)$?
Quelle résolution pour le mapper algorithm ?

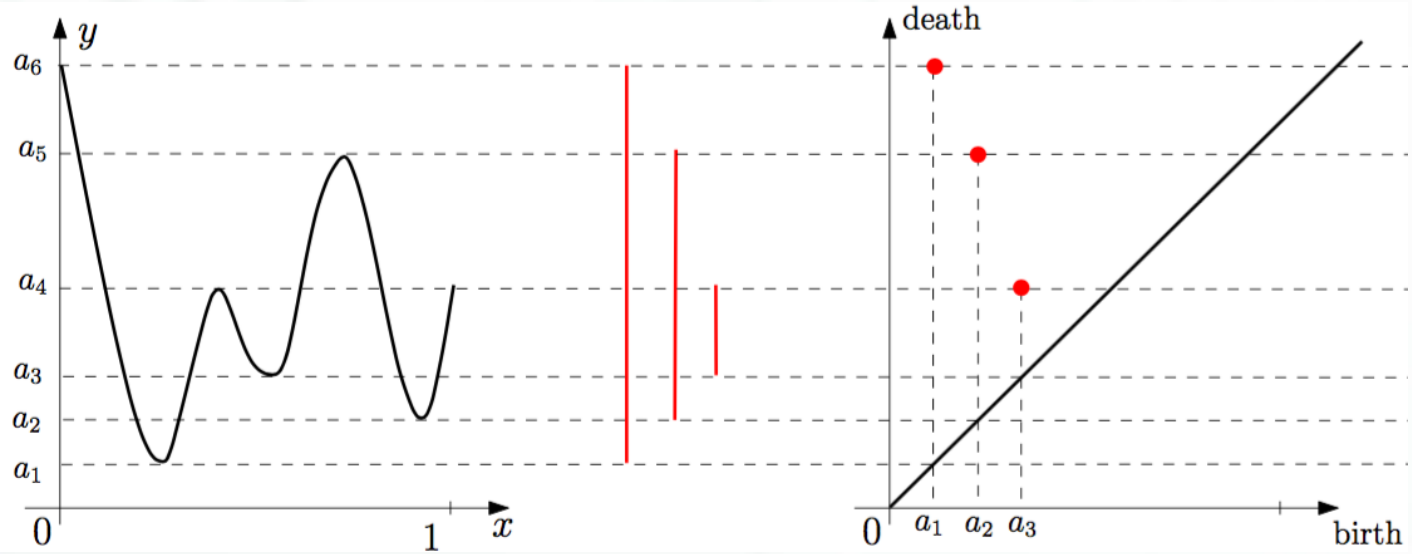
Persistance topoologique

Quelle valeur prendre pour α dans $Cech(V, \alpha)$?
Quelle résolution pour le mapper algorithm ?

$\longrightarrow$ Analyse multi-échelle

Persistance topologique: manière très compacte d'encoder l'évolution de l'homologie avec α

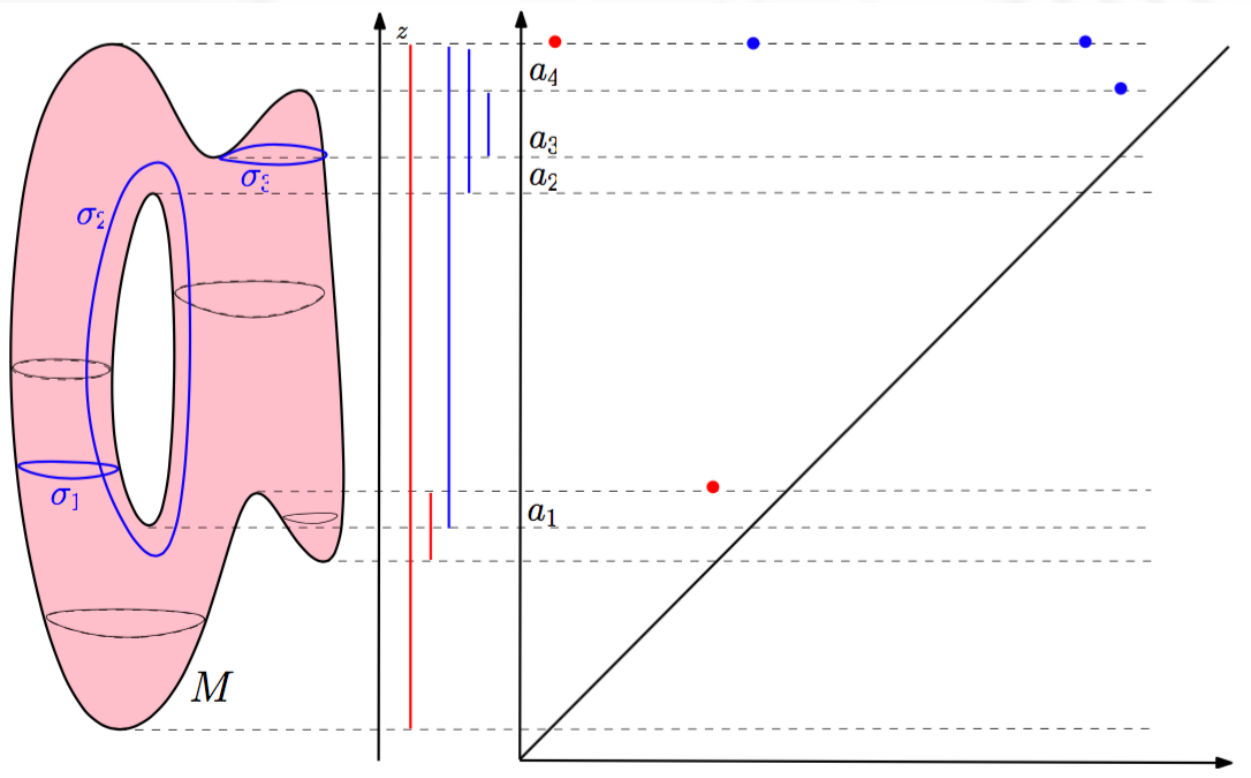
$M =$ graph of $f : [0, 1] \longrightarrow \mathbb{R}$



Code barre. 3 barres: $[a_1, a_6], [a_2, a_5], [a_3, a_4]$
Diagramme de persistance. $D = \{(a_1, a_6), (a_2, a_5), (a_3, a_4)\}$ $\subset \mathbb{R}^2$

Persistance topologique

$f : (x, y, z) \in M \mapsto z \in \mathbb{R}$ M homeomorphiquement équivalent à un tore

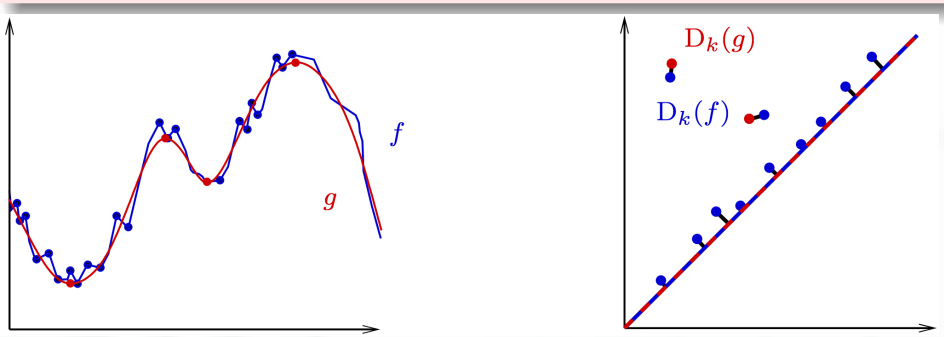


Tore: $\beta_0 = 1, \quad \beta_1 = 2$

Stabilité

Tame functions $f, g : X \longrightarrow \mathbb{R}$

$$d_b(D(f), D(g)) \leq \|f - g\|_\infty$$



Tame function: fonction pas trop sauvage, mais pas forcément continu

Bottleneck distance: $d_b(D_1, D_2) = \inf_{\beta \in B} \sup_{x \in D_1} \|x - \beta(x)\|_\infty$

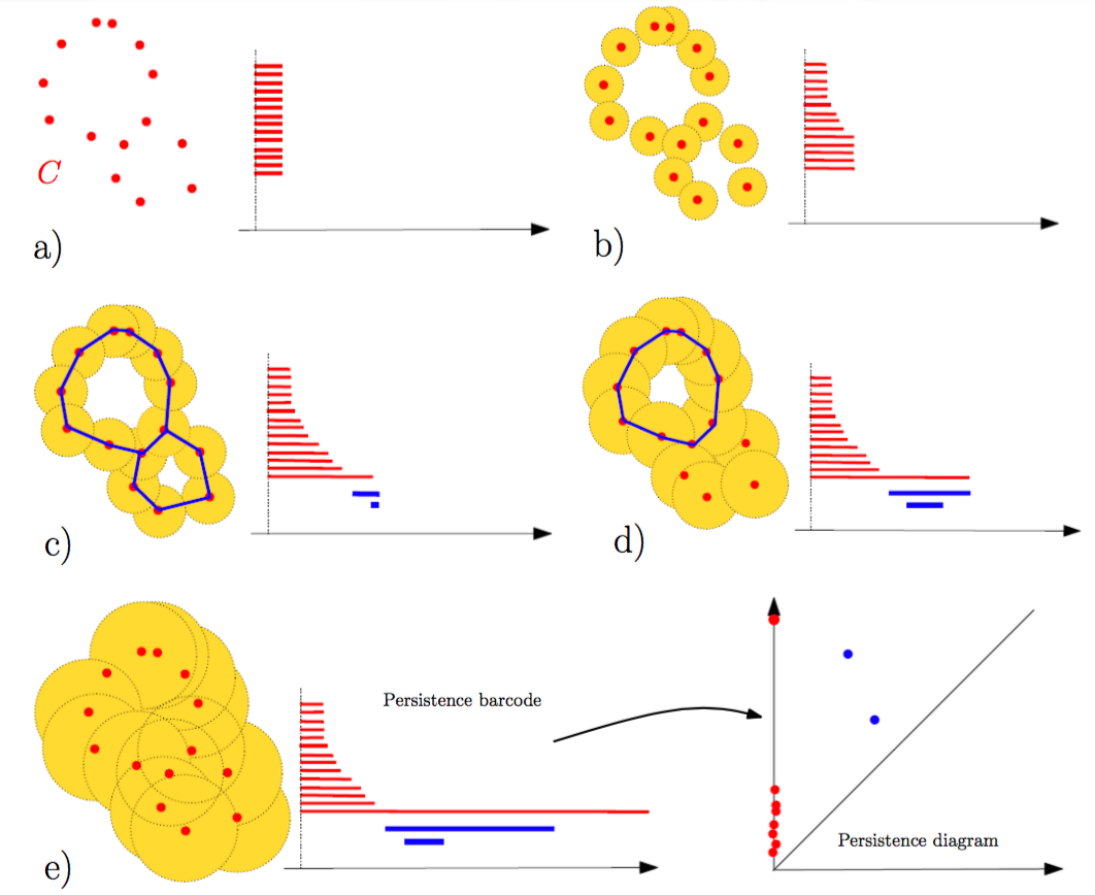
où B est l'ensemble des bijections (matching) entre D_1 et D_2

Si D_1 et D_2 ne sont pas en bijection, ajouter des points de la diagonale

Plus précisément:

- Redéfinir D_i par $D_i \cup$diagonal
- Matching entre D_1 et D_2:
  $\{m \in D_1 \times D_2$ tq chaque point sur $D_i -$diag apparaît exactement une fois dans $m\}$
- $d_b(D_1, D_2) = \inf_{\text{matching } m} \max_{(p,q) \in m} \|p - q\|_\infty$

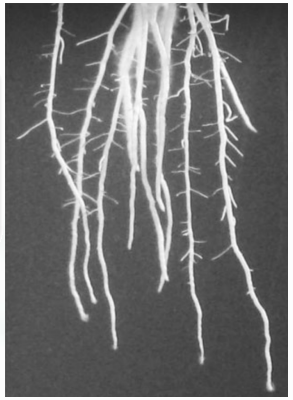
On peut utiliser des distances $\|\cdot\|_p$ à la place de $\|\cdot\|_\infty$ (sensibilité aux bruits)



☞ Calcul numérique des β_k sur une triangulation:
Smith normal form decomposition ($\simeq$SVD) sur $\mathcal{M}(\mathbb{Z}/2\mathbb{Z})$

Segmentation d'image

Niveau de gris:	$f : P \subset \mathbb{R}^2 \longrightarrow [0,1]$
Racine:	$F = f^{-1}([\epsilon, 1])$
Arrière-plan:	$B = f^{-1}([0, \epsilon[)$

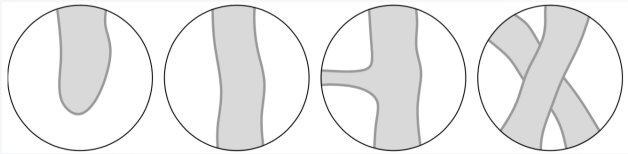


But: Analyse locale en $x \in F$.

Filtration: discretisation of $F^\alpha = F \cap B(x, \alpha)$
Considérer l'homologie relative au bord $F \cap \mathbb{S}^1(x, \alpha)$
Si $x \in$ bout,

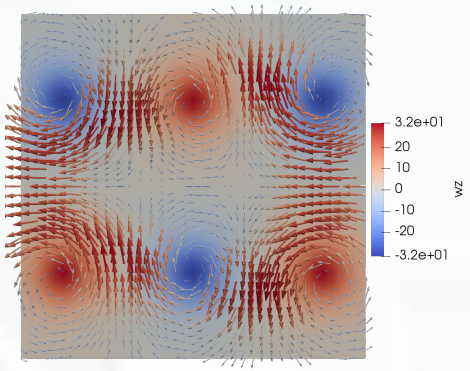
- α très petit, $\beta_1 = 0$
- α assez grand, $\beta_1 = 1$ pendant un certain temps

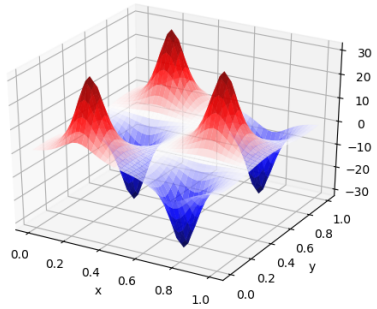
Si $x \in$branche, $\beta_1 = 2$ sur un long α-interval
Si $x \in$embranchement, $\beta_1 = 3$ sur un long α-interval
Si $x \in$croisement, $\beta_1 = 4$ sur un long α-interval



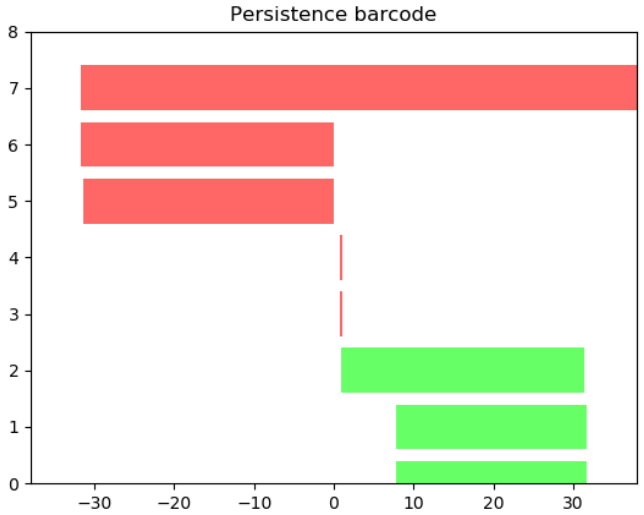
[Computational topology: an introduction. Edelsbrunner, Harer. 2010]

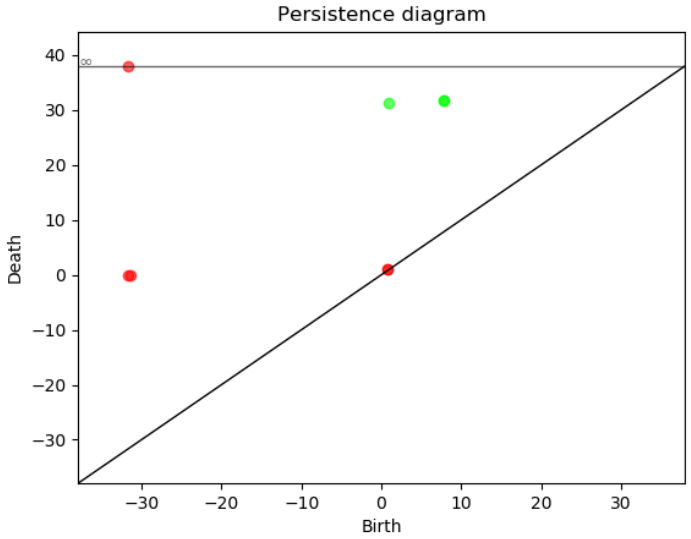
Tourbillons





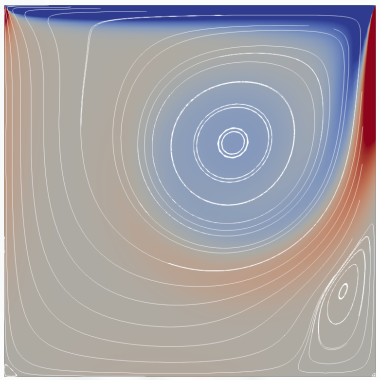
Vorticité

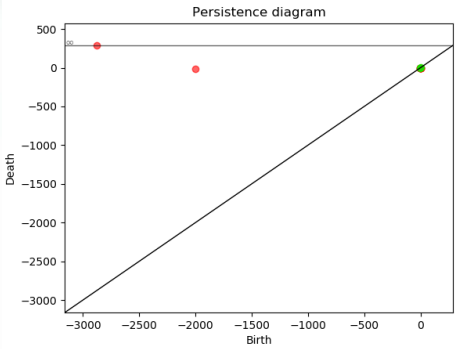




- Bruits dus à la precision
- 3 “vallées” (barres rouges) et 3 ”colines” (barres vertes)

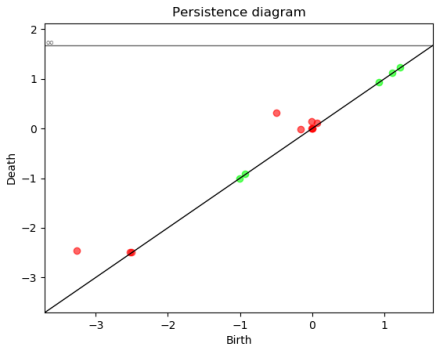
Cavité entraînée stationnaire $Re = 10^3$





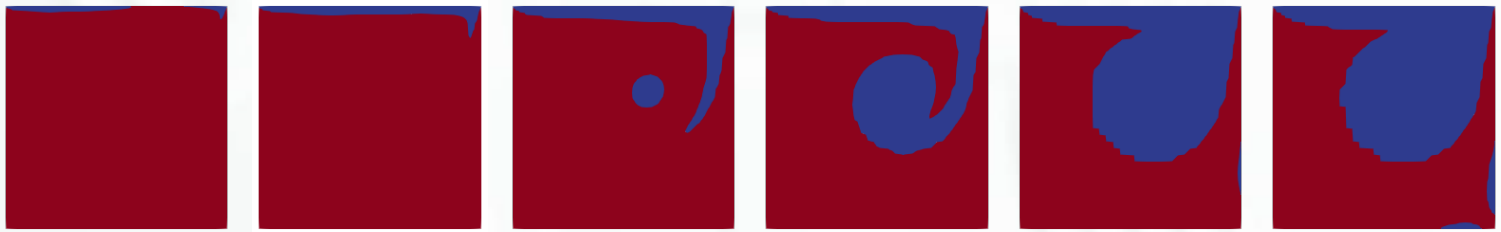
Very big value at upper corners (and close to the lid)

```
Dimension 0
        Birth         Death  Persistence
-2874.8776           inf           inf
-2003.3945    -16.0007     1987.3938
   -0.4913     0.3158        0.8071
   -3.2610    -2.4641        0.7969
   -0.0062     0.1512        0.1574
   -0.1551    -0.0208        0.1343
    0.0650     0.1145        0.0496
   -2.5269    -2.4978        0.0291
   -2.5064    -2.4845        0.0219
   -0.0061    -0.0007        0.0055
   -0.0000     0.0002        0.0003
   -0.0001     0.0000        0.0001
Dimension 1
        Birth         Death  Persistence
    1.1055     1.1224        0.0169
    0.9239     0.9368        0.0129
   -0.9304    -0.9183        0.0121
    1.2206     1.2262        0.0055
   -1.0066    -1.0031        0.0034
```



Zoom
(the two red points removed)

Evolution de la topologie de $\{x,\ \omega(x) < \alpha\}$



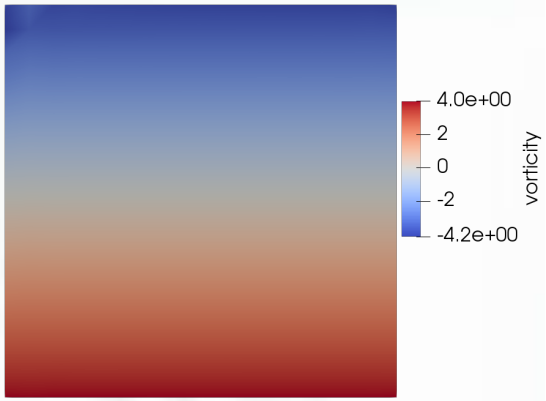
α=-17 -10 -3 -2 -0.2 -.05

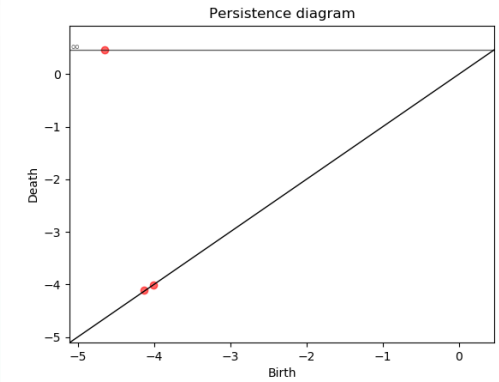


-.02 .06 .1 .15 .2 1.1056

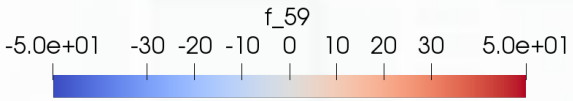
Canal laminaire

- Vorticité dans un canal laminaire

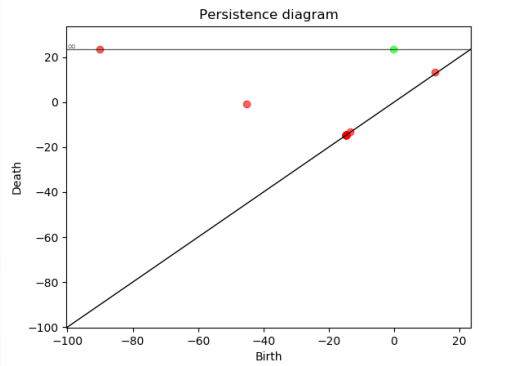




- Dans un écoulement autour d'un cylindre



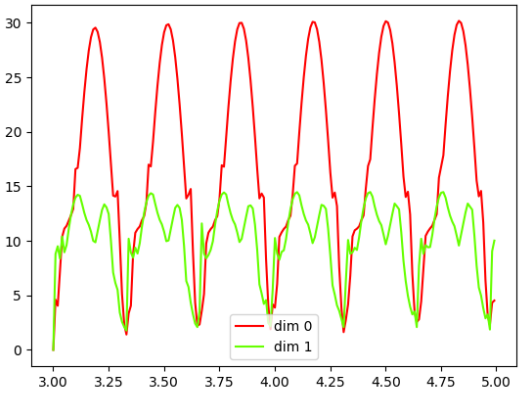




$\omega \in [-90, 90]$. Legend color cropped to $[-50, 50]$

$\omega \in [-286, 300]$. Color limited to:

- Ecoulement bien établi à $t \simeq 3s$
- $d_{Bottlneck}(Diagr(t_i), Diagr(t = 3s))$



Connaître la périodicité sans "regarder" ?

☞ Etudier la persistence topologique du nuage de points $V = (Diagr(t_i))_i$
Périodique $\Longrightarrow$ nombres de Betti d'un cercle

Conclusion

Persistance topologique : Empreinte d'un écoulement

Diagrame de persistance $\longrightarrow$ Image de persistance

- Travailler dans un espace euclidien
- On peut définir des poids
  - ★ Les points les plus persistents ne sont pas toujours les plus importants
  - ★ Mesure de l'age d'un cerveau humain à partir de la géométrie de ses artères: ce sont les points de moyenne persistence qui différentient les données

Autres utilisations

- Reconnaissance de forme (proximité geométrique vs proximité topologique)
- Segmentation d'image
- Imagerie médicale
- Analyse statistique: représentation géométrique d'électeurs, ...
- En mécanique
  - ★ Interpolation respectant la géométrie
  - ★ Autres ?