Géométrie généralisée et graduée pour la mécanique

V. SALNIKOV[a], A. HAMDOUNI[b]

a. Laboratoire des Sciences de l'Ingénieur pour l'Environnement (LaSIE), Université de La Rochelle, Centre National de la Recherche Scientifique : UMR7356,
vladimir.salnikov@univ-lr.fr

b. Laboratoire des Sciences de l'Ingénieur pour l'Environnement (LaSIE), Université de La Rochelle,
aziz.hamdouni@univ-lr.fr

Résumé :

Dans cette communication on va décrire certains objets de la géométrie dite généralisée, qui apparaissent naturellement dans l'analyse des systèmes mécaniques. En particulier, on présentera les structures de Dirac, que l'on illustrera sur l'exemple des systèmes avec contraintes. Les structures de Dirac généralisent à la fois les structures symplectiques et celles de Poisson. Elles sont le bon cadre pour décrire géométriquement les systèmes dits Hamiltoniens à ports. Nous présenterons aussi une structure plus générale, qui est celle des variétés différentielles graduées (dites aussi Q-variétés).
L'objectif final de ce travail est la construction de schémas numériques qui préservent ces structures géométriques et garantissent ainsi un bon comportement physique dans les simulations.

Abstract :

In this contribution we will describe some objects of the so-called generalized geometry that appear naturally in the analysis of mechanical systems. In particular we will discuss the Dirac structures that we will illustrate by the example of systems with constraints. Dirac structures generalize simultaneously symplectic and Poisson structures. They provide a convenient framework to give a gemetric description of the so-called port-Hamiltonian systems. Then, we will present a framework which is even more general – the one of differential graded manifolds (also called Q-manifolds).
The ultimate goal of this work is to construct numerical methods that preserve these geometric structures, and thus guarantee good physical behavior of the simulated systems.

Mots clefs : mécanique géométrique ; géométrie généralisée et graduée ; intégrateurs géométriques ; préservation de structure

1 Introduction

L'importance de la modélisation et du calcul numérique pour comprendre les mécanismes naturels et améliorer les technologies industrielles est incontestable. Même si à présent il est facile d'avoir accès aux calculateurs puissants, le développement des méthodes efficaces qui préservent les propriétés physiques des systèmes, reste un vrai challenge. Dans beaucoup de cas liés à la modélisation pour les applications réalistes, c'est-à-dire des systèmes complexes éventuellement multi-physiques et multi-échelles, on a besoin de schémas numériques fiables mais avec un coût raisonnable en ressources de calcul.

L'enjeu est donc de comprendre quelles propriétés mathématiques il faut préserver en discrétisant les équations pour s'assurer de la conservation des quantités physiques. Les schémas produits par une telle étude sont souvent appelés *intégrateurs géométriques*, car les structures mathématiques sur lesquelles ils sont basés proviennent souvent de la géométrie différentielle ou algébrique.

Le but principal de cet article est d'expliquer comment les structures de la géométrie dite supérieure ("higher structures") et graduée apparaissent naturellement dans la modélisation des systèmes mécaniques. La première partie (section 2) est un survol des concepts géométriques pertinents. Bien évidemment on ne va pas entrer dans les détails des définitions mais plutôt donner des idées générales – le lecteur intéressé peut lire les références mentionnées. Dans la deuxième partie (section 3), un peu technique, on va expliciter ces structures géométriques sur un exemple simple d'un modèle des vibrations induites par vortex.

2 Préliminaires géométriques

Pour des *systèmes mécaniques conservatifs* le formalisme Hamiltonien/Lagrangien donne un cadre assez commode pour l'analyse des propriétés qualitatives (comme l'intégrabilité ou la stabilité par exemple). Du côté numérique les intégrateurs dites *symplectiques* ([1, 2]) existent depuis plusieurs dizaines d'années déjà – ils permettent de contrôler la conservation d'énergie ([3]). L'idée derrière la méthode est de construire une discrétisation qui va automatiquement préserver une structure symplectique – une 2-forme différentielle ω définie sur l'espace des phases, cette forme est fermée et non-dégénérée. Ceci est une généralisation de l'aire pour la dimension plus grande que 2. La préservation de ω garantit la conservation d'une fonction d'Hamilton qui va osciller dans un petit voisinage autour de l'énergie totale du système. Ce phénomène persiste sur des grands intervalles de temps contrairement aux autres schémas numériques même d'ordre plus élevé. La contrepartie Lagrangienne de cette construction est liée aux intégrateurs dits *variationnels* ([4, 5]). Une application naturelle est la Dynamique Moléculaire où il s'agit justement d'effectuer des calculs sur un intervalle de temps très long par rapport au pas de temps – les méthodes populaires sont basées sur le schéma de Verlet (e.g. "velocity leapfrog"), qui est symplectique. Ceci est historiquement un des premiers exemples qui montrent l'utilité de l'étude des structures géométriques dans le contexte des méthodes numériques fiables.

Une généralisation naturelle est de considérer les systèmes avec *dissipation* ou *interaction avec le milieu*, ou des systèmes *couplés*. Contrairement au cas *conservatif* la situation ici est moins claire du point de vue géométrique. Un des formalismes appropriés est lié aux systèmes dits *Hamiltoniens à ports* ([6]), c'est-à-dire avec des termes qui correspondent à l'interaction avec les autres systèmes (via les 'ports'). On considère par exemple des systèmes de la forme suivante :

$$\dot{\mathbf{q}} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}, \quad \dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} + \mathbf{F},$$

où $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^n$ (ou M – une variété lisse) – les coordonnées (généralisées), $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^n$ (ou $T^*_q M$) – les moments conjugués (appelés aussi 'les impulsions' – moralement les vitesses). La dynamique est donc définie par la fonction de Hamilton $H = H(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ et la force $\mathbf{F}$. Ou plus généralement, on peut considérer les systèmes sous la forme

$$\dot{\mathbf{x}} = (J(\mathbf{x}) - R(\mathbf{x}))\frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}} + G(\mathbf{x})\mathbf{f}, \tag{1}$$

avec $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m$ (m un entier naturel) est le vecteur d'état, $J(\mathbf{x})$ une matrice antisymétrique, $R(\mathbf{x})$ une matrice symétrique définie non négative, $\mathbf{f} \in \mathbb{R}^p$ est le vecteur des entrées (forces externes), $G(\mathbf{x})$ est une matrice (qui peut se réduire à une colonne). L'hypothèse sur $R(\mathbf{x})$ est celle utilisée dans les présentations des systèmes hamiltoniens à ports. Elle permet d'assurer la positivité de la dissipation. Cependant, pour une formulation géométrique des systèmes hamiltoniens à ports via les structures de Dirac, cette hypothèse n'intervient pas explicitement.

Ce cadre permet de donner une description uniforme des circuits électriques interconnectés (d'où le nom "à ports"), des systèmes mécaniques avec des contraintes, des systèmes avec dissipation interne ou externe, etc... Pour la description géométrique des systèmes Hamiltoniens à ports il y deux points importants à mentionner.

Premièrement, il s'avère que l'analogue de la géométrie symplectique pour les systèmes Hamiltoniens à ports est lié ([7]) aux *structures de Dirac* ([8]), qui sont les sous-fibrés de ce qu'on appelle le fibré tangent généralisé $\mathbb{T}M = TM \oplus T^*M$ avec certaines propriétés. Plus précisément, on considère les couples (champ de vecteurs, champ de covecteurs), sur ces couples, deux opérations sont définies : le crochet de Courant–Dorfmann ([8]), et le "produit scalaire" (plutôt un crochet de dualité). La structure de Dirac est un sous-ensemble (maximal) de ces couples, sur lequel le "produit scalaire" s'annule [1] et qui est stable par le crochet. [2]

Cette description permet d'interpréter les phénomènes physiques dans un langage géométrique très explicite. Par exemple l'interaction entre deux systèmes Hamiltoniens à ports va se traduire dans la somme des structures de Dirac respectives. Et la condition de l'annulation du "produit scalaire" correspond précisément à l'évolution de l'énergie du système, c'est-à-dire à la conservation de *bilan des puissances*. Les structures de Dirac ont été introduites par T. Courant avec une motivation d'analyser les systèmes dynamiques, mais n'étaient presque pas utilisées dans ce contexte avant les systèmes Hamiltoniens à ports. Une autre application importante des structures de Dirac (ou 'presque') est liée aux systèmes avec contraintes ([9, 10, 11, 12]).

Deuxièmement, même si la description des structures de Dirac à l'aide de la géométrie différentielle classique est assez compliquée, on peut introduire le langage de la *géométrie graduée* et des *Q-structures* dans le contexte. On définit une variété graduée via l'introduction d'une graduation sur le faisceau des fonctions – c'est-à-dire les coordonnées vont avoir des "labels" – des degrés qui sont importants pour les relations de commutation. L'exemple typique est le fibré tangent $T[1]M$ à une variété lisse – on voit les formes différentielles sur M comme les fonctions polynomiales sur $T[1]M$ où certaines coordonnées anticommutent, et le degré de la forme correspond au degré du polynôme. Une Q-structure est un champ de vecteurs de degré 1 homologique (c'est-à-dire de carré nul) sur une variété graduée. Pour $T[1]M$ la différentielle de De Rham est un exemple d'un tel champ de vecteurs. Une variété graduée munie d'une Q-structure est donc appelée variété *différentielle* graduée, ou Q-variété.

1. Un tel sous-ensemble s'appelle un sous-fibré maximal isotrope (Lagrangien).
2. Sans cette deuxième condition la structure est appelée presque Dirac, mais dans la littérature le mot 'presque' est parfois omis, ce qui provoque une légère confusion.

Le cadre de la géométrie graduée est très vaste : elle permet de donner une description uniforme de la plupart des objets qui apparaissent naturellement dans la géométrie contemporaine : les structures symplectiques, de Poisson, de Dirac, les algébroïdes. Les Q-structures sont utilisées en physique des particules pour analyser les symétries et le jaugeage des fonctionnelles.

Dans la suite nous allons montrer sur un exemple comment des problèmes mécaniques dissipatifs peuvent être formalisés par une Q-structure. Dans les travaux existants sur les hamiltoniens à ports, de nombreux auteurs en partant d'un système Hamiltonien, rajoutent des termes supplémentaires (une dissipation, une force externe, un contrôle ...), le système obtenu est ensuite réécrit sous forme hamiltonien à ports (1) pour lequel une structure de Dirac est associée. Dans notre travail nous adopterons une approche différente. D'une part, notre point de départ sera un système d'équations quelconques, qui n'a pas forcément une structure Hamiltonienne. D'autre part, notre approche permet de construire un champ de vecteurs Q sur une variété graduée qui permet de coder les différentes structures géométriques (en particulier celle de Dirac). C'est ce champ de vecteurs qui doit être conservé dans les schémas numériques. En réalité ce que l'on construira c'est une (presque) Q-variété associée au problème physique. [3]

3 Exemple : vibrations induites par vortex

On considère un modèle très simplifié d'interaction fluide–structure [13]. Le problème modèle est l'écoulement d'un fluide autour d'un cylindre très long qui induit des vibrations de ce dernier. Les oscillations du cylindre vont à leur tour modifier l'écoulement. Il s'agit des vibrations induites par vortex. C'est un problème couplé fluide-structure. Dans le modèle simplifié proposé par [13], le mouvement de la structure est décrit par une seule variable y vérifiant l'équation d'un système masse ressort soumis à une force extérieure proportionnelle à l'intensité q des tourbillons. L'intensité des tourbillons q est modélisée grâce à un oscillateur de Van der Pol forcé, de pulsation propre Ω, de coefficient de non-linéarité ε et d'excitation externe proportionnelle à l'accélération du cylindre. Les équations du modèle sont :

$$\begin{aligned} \ddot{y} \quad &+ \quad y = m\Omega^2 q \\ \ddot{q} \quad &- \quad \varepsilon(1-q^2)\dot{q} + \Omega^2 q = A\ddot{y}, \end{aligned} \tag{2}$$

où m et A sont des constantes.

Pour ce cas on peut expliciter la géométrie jusqu'au résultat final, à savoir la *description graduée*. On considère maintenant une variété graduée $\mathcal{M} = T^*[1]M$, qui est une version “shiftée” du fibré tangent à une variété M de dimension 5 avec les coordonnées x^i. Moralement les x^i correspondent aux degrés de liberté du système : les quatre pour les variables dynamiques et leurs dérivées ($x^1 = y, x^2 = \dot{y}$, $x^3 = q, x^4 = \dot{q}$), et la cinquième pour le terme de couplage. Ensuite, on les déclare d'être de degré 0, et les p_i associés (les coordonnées sur les fibres) – de degré 1.

3. ‘Presque Q-structure’ n'est pas un terme officiel, il s'agit juste d'affaiblir la condition homologique pour le champ de vecteurs Q sur une variété graduée.

Le champ de vecteurs de degré 1 sur $\mathcal{M}$ associé à (2) s'écrit sous la forme :

$$Q = -p_2\frac{\partial}{\partial x^1} + (p_1 - p_5 m\Omega^2 x^3)\frac{\partial}{\partial x^2} - p_4\frac{\partial}{\partial x^3} + (p_3 - p_5 a(x^3)x^4 - Ax^1)\frac{\partial}{\partial x^4} + \\ +(p_2 m\Omega^2 x^3 + p_4 a(x^3)x^4 - Ax^1)\frac{\partial}{\partial x^5} + \\ +Ap_4p_5p_5\frac{\partial}{\partial p_1} + (-m\Omega^2 p_2p_5 + 2\varepsilon x^3x^4p_4p_5)\frac{\partial}{\partial p_3} - a(x^3)p_4p_5\frac{\partial}{\partial p_4},$$

où on a posé $a(x^3) := \varepsilon(1-(x^3)^2)$.

Pour construire ce champ on cherche d'abord la forme Hamiltonien à ports (1) du système (2). Ce qui définit la structure de (presque) Dirac de rang 5, comme étant un graphe du bivecteur, donné en chaque point par la matrice suivante :

$$D = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & -m\Omega^2 x^3 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -a(x^3)x^4 + Ax_1 \\ 0 & m\Omega^2 x^3 & 0 & a(x^3)x^4 - Ax_1 & 0 \end{pmatrix}.$$

D'après [14], ce bivecteur induit le champ de vecteurs Q ci-dessus. On peut remarquer que ce champ Q n'est pas automatiquement de carré nul, ce qui veut dire qu'il correspond à une structure de (presque) Dirac non-intégrable.

4 Conclusion / Perspectives

Dans cette communication nous présenterons un survol d'une structure géométrique, dite graduée, qui permet d'unifier différentes structures géométriques apparaissant dans la modélisation des systèmes mécaniques (structures symplectique, de Poisson ou de Dirac). Ce formalisme a été introduit historiquement en théorie physique de haute énergie afin de clarifier en particulier la notion des supersymétries. Nous montrons qu'il est possible de l'adapter pour les problèmes de mécanique classique afin d'encoder les propriétés dans un champ de vecteurs Q sur une variété graduée. L'enjeu ensuite est de conserver ce champ de vecteurs lors de la discrétisation ([15]).

Références

[1] L. Verlet, Computer "Experiments" on Classical Fluids", Physical Review 159 : 98–103, 1967.

[2] H. Yoshida, Construction of higher order symplectic integrators. Phys. Lett. A 150 (5–7) : 262, 1990.

[3] D. Razafindralandy, A. Hamdouni, A review of some geometric integrators, Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences, 5 :16, 2018.

[4] J. Marsden, M. West, Discrete mechanics and variational integrators, Acta Numerica, 2001.

[5] A. Lew, J. E. Marsden, M. Ortiz, M. West, Variational time integrators, Int. J. Numer. Meth. Engng, 60, 2004.

[6] B.M. Maschke, A.J. van der Schaft, P. C. Breedveld, An intrinsic Hamiltonian formulation of network dynamics : non-standard Poisson structures and gyrators. J. Franklin Inst. 329, 1992.

[7] A. van der Schaft, Port-Hamiltonian systems : an introductory survey, Proceedings of the International Congress of Mathematicians, Madrid, 2006.

[8] T.J. Courant, Dirac manifolds. Trans. Am. Math. Soc. 319, 631–661, 1990.

[9] H. Yoshimura, J.E. Marsden, Dirac Structures in Lagrangian Mechanics Part I : Implicit Lagrangian Systems, Journal of Geometry and Physics, 57, 2006.

[10] H. Yoshimura, J.E. Marsden, Dirac structures in Lagrangian mechanics. Part II : Variational structures, Journal of Geometry and Physics, 57, 2006.

[11] V. Salnikov, A. Hamdouni, From modelling of systems with constraints to generalized geometry and back to numerics, Z Angew Math Mech. 2019.

[12] D. Razafindralandy, V. Salnikov, A. Hamdouni, A. Deeb, Some robust integrators for large time dynamics, Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences, 2019.

[13] T. Leclercq, E. de Langre, Vortex-induced vibrations of cylinders bent by the flow, Journal of Fluids and Structures, 80, 2018.

[14] V. Salnikov, Graded geometry in gauge theories and beyond, Journal of Geometry and Physics, Volume 87, 2015.

[15] V. Salnikov, A. Hamdouni, Discretization in the graded world, in preparation.