



HAL
open science

Construction des intégrateurs pseudo-géométriques

D Loziienko, A Hamdouni, Vladimir Salnikov

► **To cite this version:**

D Loziienko, A Hamdouni, Vladimir Salnikov. Construction des intégrateurs pseudo-géométriques. 2022. hal-03782512

HAL Id: hal-03782512

<https://hal.science/hal-03782512>

Submitted on 21 Sep 2022

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Construction des intégrateurs pseudo-géométriques

D. LOZIENKO^a, A. HAMDOUNI^a, V. SALNIKOV^c

a. La Rochelle Université, daria.lozierenko1@univ-lr.fr

b. La Rochelle Université, aziz.hamdouni@univ-lr.fr

c. CNRS / La Rochelle Université, vladimir.salnikov@univ-lr.fr

Résumé :

Dans cet article on considère le problème de conception des intégrateurs géométriques — les schémas numériques préservant une structure géométrique associée aux équations de la dynamique d'un système mécanique. En particulier on étudie les cas où la préservation de la structure de manière exacte en discrétisation n'est pas possible ou elle est déraisonnablement compliquée techniquement même à petit ordre du schéma. Dans ces cas les méthodes habituelles d'amélioration d'ordre ne marchent pas — on introduit donc les intégrateurs pseudo-géométriques qui le font de manière approchée avec une combinaison des méthodes de type Runge-Kutta pour les différentes variables du système. L'exemple principal qui a motivé cette construction sont les structures de Dirac pour les systèmes avec les contraintes (liaisons holonomes ou non-holonomes), mais le domaine d'application est potentiellement beaucoup plus conséquent.

Abstract :

In this paper we consider the problem of construction of geometric integrators – numerical methods preserving a certain geometric structure associated to evolution equations of a mechanical system. In particular we study the cases when exact preservation of the structure is impossible or technically unreasonably complicated even for small order of discretisation. In these cases standard methods to increase the order of the numerical method are not applicable – we thus introduce the concept of pseudo-geometric integrators, that solve the problem approximately, by combining the Runge-Kutta type methods for different variables of the system. The main example that has motivated this construction are Dirac structures for systems with constraints (holonomic or non-holonomic), but the range of potential applications is much wider.

Mots clefs : Intégrateurs géométriques, structures de Dirac.

Remerciements.

Ce travail est en partie soutenu par le projet CNRS MITI “GraNum”.

1 Introduction

Cet article continue la série des travaux sur les intégrateurs géométriques pour les systèmes mécaniques, c'est-à-dire des méthodes numériques préservant une structure géométrique naturellement associée au système en question. L'exemple historique de telles méthodes est donné par les intégrateurs symplectiques pour les systèmes Hamiltoniens (voir par exemple [1]) qui permettent de mieux contrôler la préservation d'énergie. Depuis, beaucoup de progrès a été fait pour préserver d'autres structures géométriques : cf. [2] pour la géométrie "classique" et notre survol [3] concernant la géométrie "contemporaine", en particulier généralisée et graduée.

Notre intérêt à la question dans cet article est lié en premier lieu aux systèmes mécaniques avec les contraintes. Il s'agit des systèmes pour lesquels certaines conditions sont imposées sur les variables dynamiques. Dans cette situation, même dans le cas conservatif, la géométrie symplectique n'est plus pertinente. La "bonne" géométrie est donnée par les structures de Dirac (voir [4] pour les définitions précises), et donc la question de leur préservation se pose naturellement.

2 Préservation des structures de Dirac – état de l'art

Les structures de Dirac généralisent simultanément les structures symplectiques et de Poisson, ainsi que d'autres objets géométriques. Leur apparition dans le contexte des systèmes avec des contraintes ([5]) est très naturelle et provient d'un résultat plus général pour les feuilletages. Pour rappel, la structure de (presque) Dirac est un sous-fibré de la somme directe des fibrés tangent et cotangent à une variété lisse, dont les sections satisfont une condition linéaire. Si en plus une condition d'intégrabilité est satisfaite pour ces sections, la structure est dite de Dirac. Mécaniquement, la différence est exactement comme entre les contraintes (liaisons) holonomes et non-holonomes. Pour ce qui suit la condition d'intégrabilité n'est pas forcément importante, on va donc omettre le mot "presque".

En ce qui concerne la préservation des structures de Dirac dans la discrétisation des équations de mouvement, le concept a été établi dans [6] en s'inspirant des intégrateurs variationnels. Le résultat était effectivement prometteur, au sens que la méthode construite préservait les contraintes mieux que les discrétisations naïves, mais uniquement les plus "basiques", comme celle d'Euler. La difficulté principale d'amélioration de cette méthode est qu'il n'y a pas de résultat qui garantit la préservation de la structure de Dirac de manière exacte, ni c'est observé dans les tests numériques, c'est-à-dire l'intégrateur construit n'est pas géométrique au sens propre du terme, contrairement aux méthodes symplectiques par exemple. Cela explique le fait que les approches habituelles pour augmenter l'ordre de la méthode (comme le splitting) ne donnent pas des résultats souhaités.

Nous avons essayé d'améliorer la qualité de la méthode construite ([4]), mais toujours avec une "educated guess" plutôt que une vraie technique. Plus précisément, dans la discrétisation de Dirac on utilise les coordonnées, les vitesses et les impulsions (les quantités de mouvement). Pour les impulsions la discrétisation est "intelligente" et provient effectivement de la structure de Dirac ; quant au lien entre les coordonnées et les vitesses, il reste toujours "naïf". Dans ce qui suit, on explique comment les deux groupes de variables peuvent être traités de la même manière. Et en plus on commente la question posée dans la discussion de [7], d'automatisation de cette démarche.

3 Intégrateurs pseudo-géométriques

Avec la discussion ci-dessus, on voit bien que dans certaines situations la préservation exacte de la structure géométrique peut s'avérer compliquée, voire pratiquement impossible. Cela nous emmène à la définition très naturelle des intégrateurs pseudo-géométriques ([8]).

Définition. On appelle une méthode numérique *pseudo-géométrique d'ordre* (k, m) , si elle approxime la solution de l'équation à l'ordre k et préserve la structure géométrique à l'ordre au moins m .

Dans ces notations une "vraie" méthode géométrique d'ordre k est pseudo-géométrique d'ordre (k, ∞) .

Pour la construction des intégrateurs pseudo-géométriques on suppose que la condition de préservation de la structure géométrique peut être exprimée explicitement, c'est-à-dire par des conditions algébriques sur les variables dynamiques du système. Et pour approximer les solutions on utilise la discrétisation de type Runge–Kutta. L'algorithme est alors le suivant :

Algorithme.

1. Pour toutes les variables du système écrire les quadratures de Runge–Kutta à s points intermédiaires, avec les coefficients indéterminés.
2. Supposer que les conditions d'appartenance à la structure géométrique sont satisfaites exactement au pas de temps n . Avec le développement de Taylor en pas de temps, estimer l'erreur des conditions d'appartenance au pas de temps $(n+1)$ en utilisant le premier point comme incrément des variables dynamiques.
3. Dans l'ordre croissant des puissances du pas de temps, expliciter les conditions d'annulation des termes respectifs du développement – cela donne les conditions explicites sur les coefficients des quadratures du premier point. Quand le nombre maximal possible de ces conditions est satisfait on obtient la méthode.

On peut montrer facilement que dans ce cadre les méthodes classiques d'ordre k sont pseudo-géométriques d'ordre (k, k) , au moins pour les conditions géométriques suffisamment régulières. Les vrais résultats intéressants sont donc obtenus pour $m > k$. La possibilité d'améliorer la préservation de la géométrie dans cette situation est liée à la liberté du choix potentiellement différent des méthodes de Runge–Kutta pour chaque variable dynamique. Bien évidemment elles ne sont pas toutes obligées d'avoir les coefficients distincts, ce qui permet de simplifier la procédure.

En ce qui concerne l'implémentation, chaque étape d'algorithme ci-dessus est un problème très précis du calcul des polynômes. Quelques subtilités potentielles sont évidemment liées à la recherche des coefficients dans le point 3. Pour chaque terme consécutif, on ne peut pas savoir en avance si il donne des nouvelles conditions par rapport aux termes précédents, et si c'est le cas si elles sont compatibles. Cela peut être un problème compliqué du calcul formel, mais comme on n'est pas obligé de trouver la solution la plus générale et optimale possible, en pratique il se simplifie beaucoup : par exemple la forme précise de la structure géométrique en question permettra de regrouper les variables dynamiques et choisir une famille des méthodes de Runge–Kutta pour chaque groupe.

4 Applications aux structures de Dirac.

Comme évoqué ci-dessus, l'exemple principal étudié dans ce cadre concerne les structures de Dirac associées aux systèmes avec des contraintes. Sans rentrer dans les détails techniques on va juste récapituler ici quelques points importants qui illustrent les propos des sections précédentes.

Les variables dynamiques de départ sont les coordonnées et les vitesses d'un système mécanique. La construction avec les structures de Dirac ([5]) y ajoute également les impulsions. L'appartenance à la structure de Dirac (utilisé dans le point 2 d'algorithme) se résume à deux conditions algébriques explicites : les coordonnées (et les vitesses) satisfont les liaisons holonomes (respectivement non-holonomes) ; les impulsions et les vitesses sont liées par le transformé de Legendre.

Pour un système avec N degrés de liberté, on a la possibilité d'avoir une combinaison de $3N$ méthodes de Runge–Kutta différentes, mais en pratique il s'avère commode de regrouper toutes les coordonnées, toutes les vitesses, et toutes les impulsions. Pour chaque groupe c'est important de laisser la possibilité des méthodes implicites, ce qui manquait justement dans les discrétisations "naïves".

Les premières applications de cette approche sur un exemple "académique" sont détaillées dans [8], et le benchmarking pour des systèmes mécaniques plus complexes va apparaître dans [9].

Comme preuve de concept, nous avons considéré l'algorithme ci-dessus pour l'ordre (2, 3). La précision du résultat dépasse (sans surprise) la méthode proposée dans [6], qui dans ce langage est d'ordre (1, 2). En comparant avec la méthode de [4], nous avons observé un certain ralentissement du calcul (ce qui est naturel vu la nature implicite du résultat), mais qui est largement compensé par l'amélioration de précision en préservation des contraintes.

On peut remarquer également que si on considère cette approche pour un système sans contraintes, la seule condition qui reste va être le lien entre les vitesses et les impulsions par le transformé de Legendre. Et la structure de Dirac se réduit au graphe d'une forme symplectique. L'information des vitesses va alors devenir redondante et la construction va reproduire la famille des méthodes de Runge–Kutta symplectiques pour les coordonnées et les impulsions.

Références

- [1] H. Yoshida, Construction of higher order symplectic integrators. *Phys. Lett. A* 150 (5–7) : 262, 1990.
- [2] E. Hairer, G. Wanner, C. Lubich, *Geometric Numerical Integration. Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations*, Springer, 2006.
- [3] V. Salnikov, A. Hamdouni, D. Loziienko, Generalized and graded geometry for mechanics : a comprehensive introduction, *Mathematics and Mechanics of Complex Systems*, Vol. 9, No. 1, 2021.
- [4] V. Salnikov, A. Hamdouni, From modelling of systems with constraints to generalized geometry and back to numerics, *Z Angew Math Mech.* 2019.
- [5] H. Yoshimura, J.E. Marsden, Dirac Structures in Lagrangian Mechanics. Part I : Implicit Lagrangian Systems ; Part II : Variational structures, *Journal of Geometry and Physics*, 57, 2006.
- [6] M. Leok, T. Ohsawa, Discrete Dirac Structures and Implicit Discrete Lagrangian and Hamiltonian Systems, XVIII International Fall Workshop on Geometry and Physics, 91-102, AIP Conference Proceedings 1260, 2010.
- [7] V. Salnikov, A. Hamdouni, Differential Geometry and Mechanics - a source of problems for computer algebra, *Programming and Computer Software*, Vol. 46, Issue 2, 2020.
- [8] D. Loziienko, V. Salnikov, A. Hamdouni, Construction of pseudo-geometric integrators, *Programming and Computer Software*, 2, 2022.
- [9] D. Loziienko, V. Salnikov, A. Hamdouni, Pseudo-geometric integrators in mechanics, in preparation.