

Un intégrateur géométrique basé sur la *Double Generator Boundary Augmented bracket structure* pour la thermo-élastodynamique couplée.

B. Georgette¹, D. Dureisseix¹, A. Gravouil¹

¹ INSA Lyon, CNRS, LaMCoS, UMR5259, 69621 Villeurbanne, France, <benjamin.georgette,david.dureisseix,anthony.gravouil>@insa-lyon.fr

Résumé — La *Double Generator Boundary Augmented bracket structure* est une formulation variationnelle unifiée pour la thermodynamique des milieux continus, encodant la vérification des principes de conservation (conservation de la quantité de mouvement, du moment angulaire, premier et second principes de la thermodynamique). Nous illustrerons sa construction sur l'exemple de la thermo-élastodynamique unidimensionnelle, où thermique et mécanique sont fortement couplées. Puis, nous montrerons comment obtenir un intégrateur espace-temps géométrique (*structure-preserving*) vérifiant les principes de conservation au sens discret.

Mots clés — Intégrateur géométrique ; Thermo-élastodynamique couplée ; Double Generator Boundary Augmented bracket structure

1 Introduction

Les méthodes d'intégration géométriques sont des méthodes de construction d'intégrateurs spatio-temporels visant à préserver, au sens discret, les équations de conservation. Leur formulation repose sur la compréhension fine de la géométrie sous-jacente des équations différentielles étudiées. Par exemple, les intégrateurs symplectiques sont obtenus par discrétisation du principe variationnel d'Hamilton, ce qui permet à la méthode, par le théorème de Noether discret, de préserver automatiquement le flot symplectique de l'équation [5] - ce qui se traduit *in fine* par la conservation du volume dans l'espace des phases. Pour l'exemple du pendule pesant non-linéaire, le flot symplectique discret est exactement conservé par intégration *via* la différence centrée - issue du principe de Hamilton discret - contrairement aux méthodes d'Euler explicite ou implicite, qui rendent le schéma numériquement instable ou dissipatif (voir illustration Figure 1).

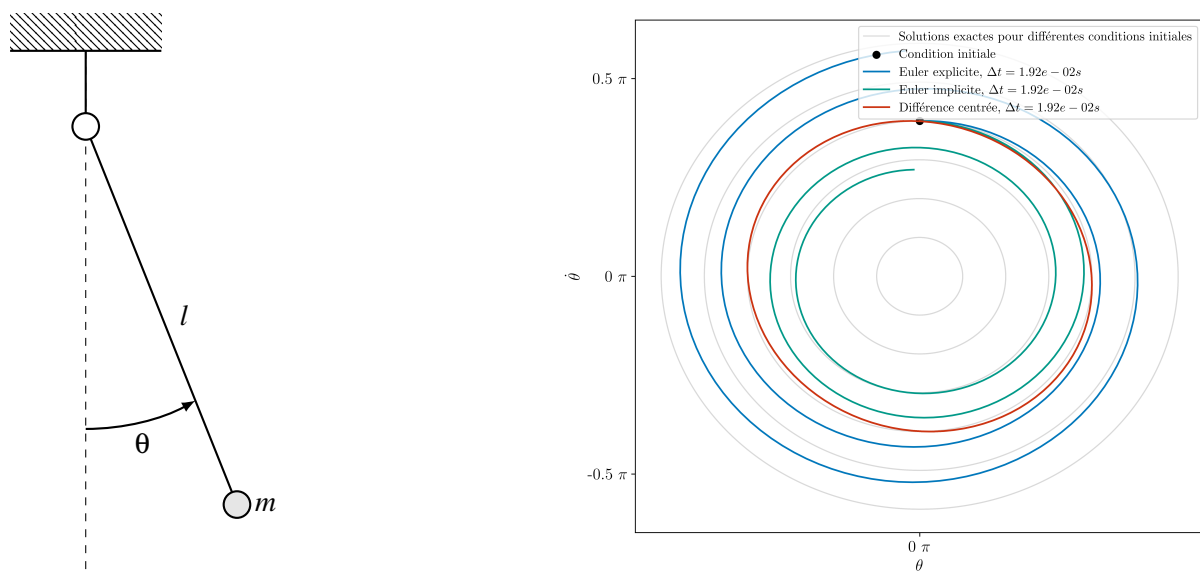


FIGURE 1 – Pendule pesant non linéaire (longueur du pendule $l = 1\text{m}$, conditions initiales $(\theta_0, \dot{\theta}_0) = (0, (\pi/8)\text{rad.s}^{-1})$).

Néanmoins, la construction d'intégrateurs géométriques dans le cadre de la thermodynamique des milieux continus reste une question ouverte [1]. De même que pour les intégrateurs symplectiques, la discrétisation doit reposer sur un principe variationnel adapté aux systèmes continus dissipatifs. Les méthodes dites à crochet, telles que celles issues du formalisme GENERIC [9, 8] ou metriplectic [7], apportent une réponse partielle à cette problématique. Elles proposent des structures construites *a priori*, qui nécessitent d'être adaptées par la suite aux problèmes considérés.

En revanche, la *Double Generator Boundary Augmented bracket structure* (DGBA bracket structure), qui est une structure dite à deux générateurs [3], est obtenue par le développement des équations de la thermodynamique des milieux continus. Par essence, elle satisfait - sans ajout d'hypothèses supplémentaires sur les champs - les principes de conservation de la thermodynamique des milieux continus (conservation de la quantité de mouvement, du moment angulaire, première et seconde loi de la thermodynamique). La discrétisation spatio-temporelle de cette structure s'effectue ensuite par intégration sur un pas de temps, ce qui confère à la structure un caractère variationnel espace-temps, une approche inédite dans la littérature.

Cette communication présentera dans un premier temps les équations de la *DGBA bracket structure* dans le cadre de la thermo-élastodynamique fortement couplée. Puis, dans un second temps, elle abordera la discrétisation spatio-temporelle abstraite de la structure variationnelle. Cette approche permettra non seulement d'obtenir un schéma numérique, mais aussi de déduire automatiquement les équations de conservation associées.

2 La DGBA bracket structure

2.1 Cadre abstrait

La *DGBA bracket structure* se construit en considérant un vecteur d'état z , tel que l'évolution du système continu est gouvernée par l'évolution de ce vecteur d'état. Nous remarquerons que l'évolution de ce vecteur d'état z se divise en deux parties une évolution réversible, notée $(\partial z/\partial t)_{\text{rev}}$, et une évolution irréversible, notée $(\partial z/\partial t)_{\text{irr}}$

$$\frac{\partial z}{\partial t} = \left(\frac{\partial z}{\partial t}\right)_{\text{rev}} + \left(\frac{\partial z}{\partial t}\right)_{\text{irr}} \quad (1)$$

Pour un milieu continu dont la configuration Lagrangienne est notée Ω_X , on obtient la *DGBA bracket structure* par dérivation temporelle d'une fonctionnelle générale \mathcal{F} , dépendant du vecteur d'état $\mathcal{F} = \int_{\omega_X} f(z) dX$, avec $\omega_X \subset \Omega_X$, X la position dans la configuration de référence $X \in \omega_X$

$$\frac{d\mathcal{F}}{dt} = \int_{\omega_X} \left(\frac{\partial f}{\partial z} \cdot \left(\frac{\partial z}{\partial t}\right)_{\text{rev}} + \frac{\partial f}{\partial z} \cdot \left(\frac{\partial z}{\partial t}\right)_{\text{irr}} \right) dX = \{\mathcal{F}, \hat{\mathcal{E}}_{\text{tot}}\} + (\mathcal{F}, \mathcal{S}) + \text{boundary terms} \quad (2)$$

avec l'énergie totale $\hat{\mathcal{E}}_{\text{tot}}$, l'entropie totale \mathcal{S} . C'est par l'application des lois d'évolution que la structure géométrique émerge. Le crochet $\{\cdot, \cdot\}$, bilinéaire et antisymétrique, décrit l'évolution réversible du système. Il émerge des équations obtenues par le principe de Hamilton. De plus, si ce crochet vérifie l'identité de Jacobi, alors ce crochet est un crochet de Poisson.

$$\text{Anti-symétrie} \quad \{\mathcal{F}, \mathcal{G}\} = -\{\mathcal{G}, \mathcal{F}\} \quad \forall \mathcal{F}, \mathcal{G} \quad (3)$$

$$\text{Identité de Jacobi} \quad \{\{\mathcal{F}, \mathcal{G}\}, \mathcal{H}\} + \{\{\mathcal{G}, \mathcal{H}\}, \mathcal{F}\} + \{\{\mathcal{H}, \mathcal{F}\}, \mathcal{G}\} = 0 \quad \forall \mathcal{F}, \mathcal{G}, \mathcal{H} \quad (4)$$

De plus, le second crochet (\cdot, \cdot) , bilinéaire et positif, décrit l'évolution dissipative du système.

$$\text{Symétrie} \quad (\mathcal{F}, \mathcal{G}) = (\mathcal{G}, \mathcal{F}) \quad \forall \mathcal{F}, \mathcal{G} \quad (5)$$

$$\text{Positivité} \quad (\mathcal{F}, \mathcal{F}) \geq 0 \quad \forall \mathcal{F} \quad (6)$$

Les propriétés des crochets permettent de vérifier automatiquement les principes de conservation, par application de la structure pour différentes valeurs de \mathcal{F} .

2.2 Application à la thermomécanique unidimensionnelle

La *DGBA bracket structure* pour la thermo-élastodynamique unidimensionnelle en petites transformations est obtenue en considérant le vecteur d'état suivant

$$z = (u \quad \varepsilon \quad p \quad T) \quad (7)$$

avec u le déplacement, ε le gradient symétrique du déplacement, p la quantité de mouvement, T la température absolue. Une fois les équations d'évolution de chaque élément du vecteur d'état obtenues, la structure s'écrit comme

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{F}}{dt} = & \{ \mathcal{F}, \hat{\mathcal{E}}_{\text{tot}} \} + (\mathcal{F}, \mathcal{S}) + \\ & + \int_{\partial\omega_X} \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \left(\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial \hat{\mathcal{E}}_{\text{tot}}}{\partial p} \right) d(\partial\omega_X) - \int_{\partial\omega_X} \frac{\partial f}{\partial p} \left(\frac{\partial \hat{\mathcal{E}}_{\text{tot}}}{\partial \varepsilon} - \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)^{-1} \frac{\partial s}{\partial \varepsilon} \frac{\partial \hat{\mathcal{E}}_{\text{tot}}}{\partial T} \right) d(\partial\omega_X) + \\ & - \int_{\partial\omega_X} \frac{1}{\rho} \frac{\partial f}{\partial T} K \frac{T^2}{c^2} \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right) d(\partial\omega_X) \end{aligned} \quad (8)$$

avec les définitions des crochets antisymétriques et symétriques

$$\begin{aligned} \{ \mathcal{F}, \hat{\mathcal{E}}_{\text{tot}} \} = & \int_{\omega_X} \left(\frac{\partial f}{\partial u} \frac{\partial \hat{\mathcal{E}}_{\text{tot}}}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial \hat{\mathcal{E}}_{\text{tot}}}{\partial u} + \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\partial \hat{\mathcal{E}}_{\text{tot}}}{\partial p} \right) - \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\partial f}{\partial p} \right) \frac{\partial \hat{\mathcal{E}}_{\text{tot}}}{\partial \varepsilon} + \right. \\ & \left. + \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)^{-1} \frac{\partial s}{\partial \varepsilon} \left(\frac{\partial \hat{\mathcal{E}}_{\text{tot}}}{\partial T} \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\partial f}{\partial p} \right) - \frac{\partial f}{\partial T} \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\partial \hat{\mathcal{E}}_{\text{tot}}}{\partial p} \right) \right) \right) dX \end{aligned} \quad (9)$$

$$(\mathcal{F}, \mathcal{S}) = \int_{\omega_X} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\partial f}{\partial T} \right) K \frac{T^2}{c^2} \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right) dX \quad (10)$$

avec ρ la densité du milieu, K sa conductivité thermique, c sa capacité thermique massique. Par construction de la structure, nous retrouvons les principes de conservation *via* le choix approprié de la fonction abstraite f

$$f = p \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial p}{\partial t} = - \frac{\partial \hat{\mathcal{E}}_{\text{tot}}}{\partial u} + \frac{\partial \sigma}{\partial X} \quad (11)$$

$$f = \hat{\mathcal{E}}_{\text{tot}} \quad \Rightarrow \quad \rho \frac{\partial \hat{\mathcal{E}}_{\text{int}}}{\partial t} = \sigma \dot{\varepsilon} - \text{div} q \quad (12)$$

$$f = s \quad \Rightarrow \quad \int_{\omega_X} \left(\rho \frac{\partial s}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{q}{T} \right) \right) dX \geq 0 \Leftrightarrow \int_{\omega_X} \frac{1}{\rho T} \left[- \frac{1}{T} q \frac{\partial T}{\partial X} \right] dX \geq 0 \quad (13)$$

avec q le flux thermique. Par ailleurs, l'application des potentiels de la thermoélasticité linéaires (avec (λ, μ) les coefficients de Lamé, $k = \alpha(3\lambda + 2\mu)$ le coefficient de couplage thermo-mécanique, α la dilatation thermique)

$$s = \frac{k}{\rho} \varepsilon + c \frac{T - T_0}{T_0} \quad (14)$$

$$\hat{\mathcal{E}}_{\text{tot}} = \frac{1}{2} \frac{1}{\rho} p^2 + \frac{1}{2} (\lambda + 2\mu) \varepsilon^2 + T_0 k \varepsilon + \rho c (T - T_0) \quad (15)$$

dans l'expression de la structure permettent de retrouver les équations de la thermoélasticité linéarisée [2] sur un sous-volume ω_X (avec $f = u(X, t) \delta u(X) + p(X, t) \delta p(X) + T(X, t) \delta T(X)$)

$$0 = \int_{\omega_X} \left[\delta u \left(\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{1}{\rho} p \right) + \delta p \left(\frac{\partial p}{\partial t} - \frac{1}{S} F^{\text{ext}} - (\lambda + 2\mu) \frac{\partial \varepsilon}{\partial X} + \frac{\partial k T}{\partial X} \right) + \right. \quad (16)$$

$$\left. + \delta T \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{k T}{\rho c} \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{1}{\rho} p \right) - \frac{1}{\rho c} K \frac{\partial^2 T}{\partial X^2} \right) \right] dX \quad (17)$$

c'est-à-dire

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} = p \quad \text{Transformée de Legendre} \quad (18)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial X} \left((\lambda + 2\mu) \frac{\partial u}{\partial X} - k(T - T_0) \right) \quad \text{Seconde loi de Newton} \quad (19)$$

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} + kT \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{1}{\rho} p \right) = K \frac{\partial^2 T}{\partial X^2} \quad \text{Première loi de la thermodynamique} \quad (20)$$

3 Discrétisation de la *DGBA bracket structure*

On considère le problème présenté dans la Figure 2. Une poutre de section S est encadrée sur son extrémité en $X = 0$, en contact avec un thermostat maintenu à la température T_0 . On impose deux conditions de Neumann sur l'extrémité $X = L$ de la poutre : une force extérieure F^{ext} et un flux extérieur q^{ext} . Le problème est discrétisé en $N_X + 1$ noeuds, de longueur ΔX .

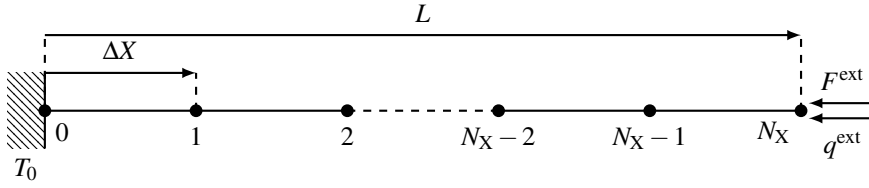


FIGURE 2 – Problème considéré.

Les conditions limites appliquées au problème sont les suivantes

$$\sigma(X = L, t) = F^{\text{ext}}/S \quad \text{for } X = L \quad \text{Condition de Neumann mécanique} \quad (21)$$

$$u(X = 0, t) = 0 \quad \text{for } X = 0 \quad \text{Condition de Dirichlet mécanique} \quad (22)$$

$$q(X = L, t) = q^{\text{ext}} \quad \text{for } X = L \quad \text{Condition de Neumann thermique} \quad (23)$$

$$T(X = 0, t) = T_0 \quad \text{for } X = 0 \quad \text{Condition de Dirichlet thermique} \quad (24)$$

La discrétisation espace-temps de la structure d'obtient par intégration de celle-ci sur un intervalle temporel

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \left(\frac{d\mathcal{F}}{dt} - \{\mathcal{F}, \hat{E}_{\text{tot}}\} - (\mathcal{F}, S) - \text{boundary terms} \right) dt \quad (25)$$

En se basant sur les méthodes des intégrateurs variationnels discrets [6, 4] permettant de retrouver le schéma de la différence centrée par calcul variationnel discret, l'intégrale temporelle est approximée par la méthode du point milieu. Dans ce cadre, la quantité de mouvement est évaluée aux demi-intervalles temporels. Par la présence du couplage thermo-mécanique, la discrétisation de la température est déterminée par cascade, en suivant celle du déplacement et de la quantité de mouvement. De plus, la discrétisation spatiale est effectuée par éléments finis

$$u(X, t) = \sum_a N_a^u(X) u^a(t), \quad \delta u(X) = \sum_a N_a^u(X) \delta u^a \quad (26)$$

$$p(X, t) = \sum_a N_a^p(X) p^a(t), \quad \delta p(X) = \sum_a N_a^p(X) \delta p^a \quad (27)$$

$$T(X, t) = \sum_a N_a^T(X) T^a(t), \quad \delta T(X) = \sum_a N_a^T(X) \delta T^a \quad (28)$$

chaque champ étant discrétisé de manière distincte. Ces deux procédures — discrétisation temporelle et

spatiale — permettent ainsi d'aboutir à l'expression discrétisée de la structure.

$$\sum_i \int_0^L \left(\left\langle \frac{\partial \tilde{f}}{\partial u_k^i} \right\rangle_n^{n+1} \frac{[u_k^i]_n^{n+1}}{\Delta t} + \frac{\partial \tilde{f}}{\partial p_{n+1/2}^i} \frac{p_{n+3/2}^i - p_{n-1/2}^i}{\Delta t} + \left\langle \frac{\partial \tilde{f}}{\partial T_k^i} \right\rangle_n^{n+1} \frac{[T_k^i]_n^{n+1}}{\Delta t} \right) dX \quad (29)$$

$$= \sum_{a,b} \int_0^L \left(\left\langle \frac{\partial \tilde{f}}{\partial u_k^a} \right\rangle_n^{n+1} \frac{\partial \tilde{E}_{\text{tot}}}{\partial p_{n+1/2}^b} - \frac{\partial \tilde{f}}{\partial p_{n+1/2}^a} \left\langle \frac{\partial \tilde{E}_{\text{tot}}}{\partial u_k^b} \right\rangle_n^{n+1} + \right. \quad (30)$$

$$\left. + \frac{\partial}{\partial X} \left(\sum_a \frac{\partial \tilde{f}}{\partial p_{n+1/2}^a} \right) \left\langle \left(\sum_b \frac{\partial \tilde{s}}{\partial T_k^b} \right)^{-1} \right\rangle_n^{n+1} \left\langle \sum_d \frac{\partial \tilde{s}}{\partial e_k^d} \right\rangle_n^{n+1} \left\langle \sum_b \frac{\partial \tilde{E}_{\text{tot}}}{\partial T_k^b} \right\rangle_n^{n+1} + \right. \quad (31)$$

$$\left. - \left\langle \sum_a \frac{\partial \tilde{f}}{\partial T_k^a} \right\rangle_n^{n+1} \left\langle \left(\sum_a \frac{\partial \tilde{s}}{\partial T_k^a} \right)^{-1} \right\rangle_n^{n+1} \left\langle \sum_d \frac{\partial \tilde{s}}{\partial e_k^d} \right\rangle_n^{n+1} \frac{\partial}{\partial X} \left(\sum_b \frac{\partial \tilde{E}_{\text{tot}}}{\partial p_{n+1/2}^b} \right) \right) dX + \quad (32)$$

$$+ \sum_{a,b} \int_0^L \frac{1}{\rho} \left\langle \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\partial \tilde{f}}{\partial T_k^a} \right) \right\rangle_n^{n+1} \frac{K}{c^2} (\sum_i N_i^T \langle T_k^i \rangle_n^{n+1}) (\sum_j N_j^T \langle T_k^j \rangle_n^{n+1}) \left\langle \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\partial \tilde{s}}{\partial T_k^b} \right) \right\rangle_n^{n+1} dX + \quad (33)$$

$$+ \frac{\partial \tilde{f}}{\partial p_{n+1/2}^N} \frac{\langle F_k^{\text{ext}}(X=L) \rangle_n^{n+1}}{S} - \frac{\partial \tilde{f}}{\partial p_{n+1/2}^0} \frac{\langle F_k^{\text{ext}}(X=0) \rangle_n^{n+1}}{S} + \quad (34)$$

$$- \frac{1}{\rho c} \left\langle \frac{\partial \tilde{f}}{\partial T_k^N} \right\rangle_n^{n+1} q_{n+1/2}^{\text{ext}}(X=L) + \frac{1}{\rho c} \left\langle \frac{\partial \tilde{f}}{\partial T_k^0} \right\rangle_n^{n+1} q_{n+1/2}^{\text{ext}}(X=0) \quad (35)$$

par définition des opérateurs différence et moyenne

$$\langle \square_k \rangle_n^{n+1} = \frac{1}{2} (\square_{n+1} + \square_n) \quad [\square_k]_n^{n+1} = \square_{n+1} - \square_n \quad (36)$$

En appliquant l'expression des potentiels de la thermoélasticité linéaire (pour de petites variations de température) dans cette expression, on obtient le schéma suivant

$$\tilde{I}^{uu} \frac{\tilde{u}_{n+1} - \tilde{u}_n}{\Delta t} = \tilde{M}^{-1,up} \tilde{p}_{n+1/2} \quad (37)$$

$$\tilde{I}^{pp} \left(\frac{\tilde{p}_{n+3/2} - \tilde{p}_{n+1/2}}{\Delta t} \right) + \tilde{I}^{pp} \left(\frac{\tilde{p}_{n+1/2} - \tilde{p}_{n-1/2}}{\Delta t} \right) \quad (38)$$

$$= -\tilde{H}^{p'u'} \tilde{u}_{n+1} + \tilde{L}^{p'T} (\tilde{T}_{n+1} - \tilde{T}_0) + \tilde{F}_{n+1}^{\text{ext}} - \tilde{H}^{p'u'} \tilde{u}_n + \tilde{L}^{p'T} (\tilde{T}_n - \tilde{T}_0) + \tilde{F}_n^{\text{ext}} \quad (39)$$

$$\tilde{I}^{TT} \frac{\tilde{T}_{n+1} - \tilde{T}_n}{\Delta t} = -\frac{T_0}{\rho c} \tilde{K}^{Tp'} \rho^{-1} \tilde{p}_{n+1/2} - \frac{1}{\rho c} \tilde{K}^{T'T'} \frac{\tilde{T}_{n+1} + \tilde{T}_n}{2} - \tilde{q}_{n+1/2}^{\text{ext}} \quad (40)$$

avec la définition des vecteurs nodaux généralisés \tilde{u} , \tilde{p} , \tilde{T} , les efforts et flux extérieurs \tilde{F}^{ext} , \tilde{q}^{ext} ainsi que les matrices éléments finis

$$\tilde{I}^{uu} = \sum_{a,b} \int_0^L N_a^u N_b^u dX \quad \tilde{I}^{pp} = \sum_{a,b} \int_0^L N_a^p N_b^p dX \quad \tilde{I}^{TT} = \sum_{a,b} \int_0^L N_a^T N_b^T dX \quad (41)$$

$$\tilde{H}^{p'u'} = \sum_{a,b} \int_0^L \frac{\partial N_a^p}{\partial X} (\lambda + 2\mu) \frac{\partial N_b^u}{\partial X} dX \quad \tilde{L}^{p'T} = \sum_{a,b} \int_0^L \frac{\partial N_a^p}{\partial X} k N_b^T dX \quad \tilde{L}^{T p'} = \sum_{a,b} \int_0^L N_a^T k \frac{\partial N_b^p}{\partial X} dX \quad (42)$$

$$\tilde{K}^{T'T'} = \sum_{a,b} \int_0^L \frac{\partial N_a^T}{\partial X} K \frac{\partial N_b^T}{\partial X} dX \quad \tilde{M}^{-1,up} = \sum_{a,b} \int_0^L N_a^u \frac{1}{\rho} N_b^p dX \quad (43)$$

L'expression discretisée abstraite de la *DGBA bracket structure* nous permet de plus d'obtenir les principes de conservation vérifiés au sens discret. Le premier principe de la thermodynamique s'obtient directement par remplacement de \tilde{f} par l'énergie totale

$$\left[\frac{1}{2} \tilde{p}_k^T \tilde{M}^{-1,pp} \tilde{p}_k + \frac{1}{2} \tilde{u}_k^T \tilde{H}^{u'u'} \tilde{u}_k + \tilde{T}_0 \tilde{L}^{T p'} \tilde{u}_k + \frac{1}{2} \frac{\rho c}{T_0} \tilde{T}_k \tilde{I}^{TT} \tilde{T}_k \right]_n^{n+1} - \frac{\Delta t^2}{4} \left[\frac{1}{2} \tilde{u}_k^T \tilde{M}^{pp} \tilde{u}_k \right]_n^{n+1} \quad (44)$$

$$= \left(\langle \tilde{F}_k^{\text{ext}} \rangle_n^{n+1} \right)^T [\tilde{u}_k]_n^{n+1} - \frac{\Delta t}{T_0} \left(\langle \tilde{T}_k \rangle_n^{n+1} \tilde{K}^{T'T'} \langle \tilde{T}_k \rangle_n^{n+1} + \left(\langle \tilde{T}_k \rangle_n^{n+1} \right)^T \tilde{q}_{n+1/2}^{\text{ext}} \right) \quad (45)$$

De même, on obtient le second principe de la thermodynamique

$$\tilde{T}_0 \tilde{L}^{T p'} [\tilde{u}_k]_n^{n+1} + \rho c \tilde{T}_0 \tilde{I}^{TT} [\tilde{T}_k]_n^{n+1} + \Delta t \tilde{q}_{n+1/2}^{\text{ext}} \geq 0 \quad (46)$$

4 Conclusion

La *DGBA bracket structure*, construite à partir des équations de conservation, propose un cadre géométrique adéquat pour la thermodynamique des milieux continus. Sa discrétisation spatio-temporelle, obtenue par intégration sur un pas de temps permet de justifier la discrétisation de la température par le calcul variationnel discret. Elle facilite également l'identification des principes de conservation discrets satisfaits par le schéma numérique. Les résultats obtenus feront l'objet d'une validation numérique, qui sera présentée lors de cette communication.

Par ailleurs, cette structure a été étendue à deux contextes distincts :

- en petites transformations 1D, dans le cadre des matériaux standards généralisés à potentiels quadratiques,
- en grandes transformations 3D, pour la thermo-visco-élastodynamique, dans un formalisme multisymplectique.

Références

- [1] A. N. Beris, B. J. Edwards, *Dissipation in nonequilibrium thermodynamics and its connection to the Rayleighian functional*, Physics of Fluids, p. 013102, 2024.
- [2] W. A. Day, *Heat Conduction Within Linear Thermoelasticity*. Springer New York, 1985.
- [3] F. Gay-Balmaz, H. Yoshimura, *From variational to bracket formulations in nonequilibrium thermodynamics of simple systems*, Journal of Geometry and Physics, p. 103812, 2020.
- [4] B. Georgette, D. Dureisseix, A. Gravouil, *A New Stability Analysis of Variable Time Step Central Difference Method for Transient Dynamics Viscoelastic Problems*, Journal of Scientific Computing, Springer Sci, p. 63, 2025.
- [5] E. Hairer, C. Lubich, G. Wanner, *Geometric Numerical Integration*, Springer Series in Computational Mathematics, 2006.
- [6] J. E. Marsden, M. West, *Discrete mechanics and variational integrators*, Acta Numerica, pp. 357-514, 2001.
- [7] P. J. Morrison, *Bracket formulation for irreversible classical fields*, Physics Letters A, pp. 423-427, 1984.
- [8] H. C. Öttinger, *Beyond Equilibrium Thermodynamics*, Wiley, 2005.
- [9] M. Schiebl, P. Betsch, *Structure-preserving space-time discretization of large-strain thermo-viscoelasticity in the framework of GENERIC*, Numerical Meth Engineering, pp. 3448-3488, 2021.