Théorie effective des invariants en mécanique du solide, un tour d'horizon

Atelier du GDR GDM : Symétries et Matériaux

Boris Kolev

avec Nicolas Auffray, Boris Desmorat, Rodrigue Desmorat, Marc Olive et Michel Petitot

Laboratoire de Mécanique Paris-Saclay (LMPS)
Université Paris-Saclay, CentraleSupélec, ENS Paris-Saclay, CNRS

2 mai 2022

LIGNES DIRECTRICES

Lignes directrices

Contexte

- Les lois fondamentales qui décrivent le mouvement ou l'équilibre d'un solide déformable sont sous-déterminées : il est nécessaire d'ajouter des lois de comportement.
- Lorsque la microstructure d'un matériau possède une certains symétrie (cristalline par exemple), les lois de comportements qui implique ce matériau hérite de cette symétrie (principe de Curie).
- Dans les modèles linéaires, ces lois de comportements sont représentées par des tenseurs, dont le tenseur d'élasticité est le prototype.
- Ces lois de comportement devant satisfaire le principe d'invariance galiléenne (principe de relativité), ce n'est pas tant ces tenseurs de comportement eux-même qui décrivent la mécanique mais leurs orbites sous l'action du groupe des rotations.

Exemple : le tenseur d'élasticité

- Le tenseur d'élasticité $\mathbf{C} = (C^{ijkl})$ est un tenseur d'ordre 4 qui est une généralisation tensorielle de la constante de raideur k d'un ressort qui apparaît dans la loi de Hooke (1670) :

$$F = k\Delta l.$$

- Il relie la contrainte $\boldsymbol{\sigma}$ à la déformation $\boldsymbol{\varepsilon}$

$$\sigma^{ij} = C^{ijkl}\varepsilon_{kl}.$$

- Il possède les symétries indicielles suivantes

$$C^{ijkl} = C^{jikl} = C^{ijlk} = C^{klij}$$

Classification des matériaux élastiques

- Tout changement d'orientation d'un matériau, représenté par une rotation $g \in \mathrm{SO}(3,\mathbb{R})$, correspond à un nouveau tenseur d'élasticité

$$\mathbf{C} \mapsto \overline{\mathbf{C}} = g \star \mathbf{C}, \qquad \overline{E}^{ijkl} := g^i_p g^j_q g^k_r g^l_s E^{pqrs}$$

- A chaque matériau, correspond un tenseur d'élasticité $\mathbf{C}$ mais cette correspondance n'est pas univoque. Elle est relative à une orientation particulière du matériau dans l'espace.
- Du point de vue de l'élasticité linéaire, décrire les matériaux élastiques homogènes, c'est décrire les orbites de la représentation de $\mathrm{SO}(3)$ sur l'espace vectoriel de dimension 21, $\mathbb{E}la$ des tenseurs d'élasticité.
- L'utilisation des invariants permet de réduire le nombre de paramètres matériaux, 2 par exemple au lieu de 21, pour une loi isotrope linéaire.

LIGNES DIRECTRICES

Invariants polynomiaux

- On considère l'action linéaire ρ d'un groupe G sur un espace vectoriel $\mathbf{V}$ (représentation linéaire de G).
- L'action de G sur $\mathbf{V}$ induit une action de G sur l'algèbre $K[\mathbf{V}]$ des fonctions polynomiales définies sur $\mathbf{V}$ à coefficients dans K ($\mathbb{R}$ ou $\mathbb{C}$)

$$(g \star \mathrm{p})(v) := \mathrm{p}(\rho(g^{-1})v), \qquad \mathrm{p} \in K[\mathbf{V}], \quad g \in G.$$

- Un polynôme $p \in K[\mathbf{V}]$ est invariant par G si

$$g \star \mathrm{p} = \mathrm{p}, \quad \text{pour tout} \quad g \in G.$$

- Les polynômes invariants forment une sous-algèbre de $K[\mathbf{V}]$, notée $K[\mathbf{V}]^G$, c'est l'algèbre des invariants.

Le problème de la finitude

Un résultat abstrait du à Hilbert

- Si G est fini ou compact, alors l'algèbre des invariants $K[\mathbf{V}]^G$ est finiment engendrée (Hilbert, 1890) : on peut trouver (en théorie) $I_1, \dots, I_n \in K[\mathbf{V}]^G$ tels que tout $\mathrm{p} \in K[\mathbf{V}]^G$ se réécrive

$$\mathrm{p}(v) = P(I_1(v), \dots, I_n(v)), \qquad \text{où } P \text{ est un polynôme}$$

- La famille $\{I_1, \dots, I_n\}$ est appelée une base d'intégrité.
- Une base d'intégrité est minimale si aucune sous-famille n'est une base d'intégrité.

Exemple

Une base d'intégrité minimale pour l'action du groupe des rotations $\mathrm{SO}(3)$ sur les tenseurs symétrique d'ordre 2 est donnée par

$$\operatorname{tr} \mathbf{a}, \quad \operatorname{tr} \mathbf{a}^2, \quad \operatorname{tr} \mathbf{a}^3.$$

Les problèmes fondamentaux de la théorie des invariants

De la théorie à la pratique

1. Comment générer les invariants ?
2. Comment calculer une base d'intégrité minimale ?
3. Comment exprimer les invariants par des formules compactes ?
4. Les éléments d'une base d'intégrité minimale sont en général assujettis à des relations. Comment trouver ces relations ?

- L'algèbre des polynômes $K[\mathbf{V}]$ s'écrit comme la somme directe des sous-espaces de dimension finie, $K[\mathbf{V}]_k$, des polynômes homogènes de degré k sur $\mathbf{V}$:

$$K[\mathbf{V}] = \bigoplus_{k=0}^{+\infty} K[\mathbf{V}]_k$$

- L'action de G sur $K[\mathbf{V}]$ préserve chaque sous-espace $K[\mathbf{V}]_k$.
- On pourra donc toujours se limiter à la recherche d'invariants polynomiaux homogènes.

Définition

L'opérateur de Reynolds $\mathrm{R}_G : K[\mathbf{V}] \to K[\mathbf{V}]^G$ est défini par

$$\mathrm{R}_G(\mathrm{p}) := \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} g \star \mathrm{p},$$

où $|G|$ est le cardinal du groupe G.

Remarque

Si G est compact mais infini alors la somme finie doit être remplacée par l'intégrale de Haar (une mesure de probabilité bi-invariante sur G)

$$\mathrm{R}_G(\mathrm{p}) := \int_G (g \star \mathrm{p})\, \mu.$$

- Une représentation est unitaire si elle préserve un produit scalaire (c'est toujours le cas pour un groupe compact).
- Dans ce cas, l'opérateur de Reynolds correspond, pour chaque k, à la projection orthogonale de $K[\mathbf{V}]_k$ sur le sous-espace des invariants $K[\mathbf{V}]_k^G$, *i.e.*

$$\mathrm{R}_G(\mathrm{R}_G(\mathrm{p})) = \mathrm{R}_G(\mathrm{p}), \qquad \langle \mathrm{R}_G(\mathrm{p}), \mathrm{p} - \mathrm{R}_G(\mathrm{p}) \rangle = 0.$$

Série de Hilbert

Encoder le nombre d'invariants homogènes de degré k linéairement indépendants

Définition

La série de Hilbert de la représentation ρ de G sur $\mathbf{V}$ est définie par

$$H_\rho(z) = \sum_{k=0}^{+\infty} a_k\, z^k, \qquad a_k := \dim(K[\mathbf{V}]_k^G).$$

Cette série est une fonction rationnelle qui peut être calculée a priori.

Théorème (Formule de Molien-Weyl)

La série de Hilbert de la représentation ρ s'écrit :

$$H_\rho(z) = \frac{1}{|G|} \sum_{g\in G} \frac{1}{\det(I - z\rho(g))}.$$

- Une base d'intégrité minimale n'est pas unique. Toutefois, toute base d'intégrité minimale homogène, formée par des invariants homogènes, a le même cardinal et la liste des degrés des générateurs est une constante.
- Un invariant homogène est réductible si il peut s'écrire comme le produit de deux invariants homogènes (non constants) ou plus généralement comme la somme de produits de deux invariants homogènes (non constants). Sinon, il est dit irréductible.
- Une base d'intégrité minimale homogène ne contient que des éléments irréductibles.

1. Postuler un système générateur fini $\mathcal{G}$ de l'algèbre des invariants.
2. Au degré 1, ne garder qu'un système d'invariants linéairement indépendants de cardinal a_1 donné par la série de Hilbert.
3. Par récurrence sur le degré n, générer tous les invariants réductibles au degré $n+1$. Si la dimension de l'espace engendré ne matche pas a_{n+1}, ajouter un par un des éléments de $\mathcal{G}$ pour essayer d'obtenir a_{n+1}. Si cela n'est pas possible, échec. Sinon passer à l'étape suivante.
4. L'algorithme s'arrête :
   - soit parce qu'on connaît une borne sur le degré d'un système générateur ;
   - soit parce qu'on sait que le système est générateur.

Lignes directrices

Bornes sur le degré des générateurs

On considère une action linéaire d'un groupe fini G sur un espace vectoriel $\mathbf{V}$.

- On désigne par $\beta(G, \mathbf{V})$ le sup des degrés d'une base d'intégrité minimale homogène de $K[\mathbf{V}]^G$ (notion intrinsèque). Il n'existe pas *a priori* de méthode pour calculer ce nombre sinon de calculer une base d'intégrité minimale.
- On définit ensuite

$$\beta(G) = \sup_{\mathbf{V}} \beta(G, \mathbf{V}),$$

sur toutes les représentations linéaires (de dimension finie) $\mathbf{V}$ de G.

Théorème (Théorème de Noether 1916)

$$\beta(G) \leq |G|,$$

où $|G|$ est le cardinal du groupe.

Exemple : le groupe diédral

La borne de Noether est loin d'être optimale

Le groupe diédral $\mathbb{D}_n$ d'index n correspond au groupe de symétrie d'un polygone régulier à n côtés. Il est engendré par la rotation d'angle $2\pi/n$ et par la réflexion d'axe Ox. C'est un groupe d'ordre $2n$, la borne de Noether s'écrit

$$\beta(\mathbb{D}_n) \leq 2n.$$

On a toutefois le résultat optimal suivant.

Théorème (Schmidt 1991)

$$\beta(\mathbb{D}_n) = n + 1.$$

- Le nombre de représentations irréductibles (à isomorphisme près) d'un groupe fini est fini et ce nombre est égal au nombre de classes de conjugaison.
- Le théorème de polarisation de Weyl (1940) permet de montrer que la borne $\beta(G) = \sup_{\mathbf{V}} \beta(G, \mathbf{V})$ est atteinte pour la représentation

$$\mathbf{V}_{min} := \bigoplus_{p=1}^{N} \mathbf{V}_p^{\beta_p}$$

où $\mathbf{V}_p$ parcourt l'ensemble des représentations irréductibles de G et $\beta_p = \dim \mathbf{V}_p$.

Exemple : le groupe symétrique $\mathfrak{S}_3$

Importance de la table des caractères

irrep / CG	e	(ab)	(abc)
triv	1	1	1
ϵ	1	-1	1
φ	2	0	-1

Table – Table des caractères de $\mathfrak{S}_3$

Borne optimale pour $\mathfrak{S}_3$

La table des caractères nous permet d'écrire :

$$\mathbf{V}_{min} = \mathbf{V}_{\text{triv}} \oplus \mathbf{V}_{\epsilon} \oplus {\mathbf{V}_{\varphi}}^2$$

et on peut montrer que $\beta(\mathfrak{S}_3) = 4$, en calculant une base d'intégrité minimale pour cette représentation.

Lemme

Soit G un groupe agissant sur un ensemble X et N un sous-groupe normal de G. Alors X^N est stable par G et $X^G = \left(X^N\right)^{G/N}$.

Remarque

Ce lemme a été utilisé par Smith dans les années 60 pour calculer des bases d'invariants des « point groups » cristallographiques en les « dévissant » car ce sont tous des groupes résolubles (avec des quotients cycliques)

$$G_0 = \{e\} \triangleleft G_1 \triangleleft \cdots \triangleleft G_n = G, \qquad G_{k+1}/G_k \quad \text{cyclique.}$$

Théorème (Schmidt 1991)

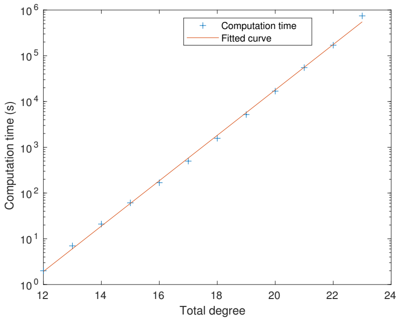
Soit G un groupe fini et N un sous-groupe normal de G. Alors,

$$\beta(G) \leq \beta(G/N)\beta(N).$$

UNE APPLICATION DANS LE CADRE DE LA MAGNÉTOSTRICTION

COUPLAGE MÉCANIQUE-MAGNÉTISME (TAURINES 2021)

Le problème consistait à calculer une base d'invariants pour une loi couplée cubique (le groupe $\mathbb{O}^+$, d'ordre 24) impliquant un vecteur **m** (magnétisation) et le tenseur des contraintes $\boldsymbol{\sigma}$. Alors, le théorème de Schmidt nous permet d'obtenir $\beta(\mathbb{O}^+) \leq 12$ alors que la borne de Noether est 24.



LIGNES DIRECTRICES

Tenseurs harmoniques

- Un tenseur harmonique est un tenseur totalement symétrique de trace nulle.
- L'espace $\mathbb{H}^n(\mathbb{R}^d)$ des tenseurs harmoniques d'ordre n sur $\mathbb{R}^d$ est une représentation irréductible du groupe orthogonal $\mathrm{O}(d)$.
- Pour $d \leq 3$, toute représentation $\mathbf{V}$ de $\mathrm{O}(d)$ (ou $\mathrm{SO}(d)$) se décompose en somme directe de sous-espaces vectoriels isomorphes à des $\mathbb{H}^n(\mathbb{R}^d)$ (décomposition harmonique).

Exemple (Tenseurs symétriques d'ordre 2)

$$S^2(\mathbb{R}^3) \simeq \mathbb{H}^2(\mathbb{R}^3) \oplus \mathbb{H}^0(\mathbb{R}^3)$$

correspond à la décomposition en parties déviatorique et sphérique des mécaniciens.

Polynômes harmoniques

- A tout tenseur totalement symétrique $\mathbf{S}$ d'ordre n sur $\mathbb{R}^d$ correspond un polynôme homogène p de degré n sur $\mathbb{R}^d$

$$\mathrm{p}(\boldsymbol{x}) = \mathbf{S}(\boldsymbol{x}, \ldots \boldsymbol{x}) = S_{i_1 \cdots i_n} x^{i_1} \cdots x^{i_n}.$$

- Cette correspondance est biunivoque, l'inverse s'obtenant par polarisation.
- Elle commute avec l'action de $\mathrm{O}(d)$.
- Dans cette correspondance, un tenseur harmonique correspond à un polynôme harmonique ($\triangle p = 0$) et *vice versa*.
- L'espace $\mathcal{H}_n(\mathbb{R}^d)$ des polynômes harmoniques de degré n fournit un autre modèle pour les représentations irréductibles de $\mathrm{O}(d)$ si $d \leq 3$.

- De façon euristique, un covariant polynomial d'un tenseur $\mathbf{T}$ est un polynôme homogène p (ou un tenseur symétrique $\mathbf{S}$) sur $\mathbb{R}^d$ qui dépend de manière polynomiale et équivariante de $\mathbf{T}$.
- Un covariant de $\mathbf{T} \in \mathbf{V}$ correspond à un invariant joint de $\mathbf{V} \oplus \mathbb{R}^d$.
- On définit l'algèbre des covariants de $\mathbf{V}$ comme

$$\mathbf{Cov}(\mathbf{V}) := \mathbb{C}[\mathbf{V} \oplus \mathbb{R}^d]^G, \qquad G \subset \mathrm{GL}(d).$$

- Le degré d'un covariant $\mathrm{p} \in \mathbf{Cov}(\mathbf{V})$ est le degré d de p en $\mathbf{T} \in \mathbf{V}$, alors que le degré k de p en $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d$ est dénommé l'ordre de p.
- Le concept de covariant polynomial est nécessaire pour établir certains algorithme. Il permet également d'écrire les invariants sous forme compact et intrinsèque.

Opérations covariantes

Les deux opérations covariantes suivantes permettent de générer tous les covariants polynomiaux d'une représentation linéaire de $\mathrm{SO}(d)$ ($d \leq 3$). Soit $\mathbf{S}^1 \in \mathbb{S}^p(\mathbb{R}^d)$ et $\mathbf{S}^2 \in \mathbb{S}^q(\mathbb{R}^d)$.

- La contraction symétrisée d'ordre r :

$$(\mathbf{S}^1 \overset{(r)}{\cdot} \mathbf{S}^2)^s;$$

- Le produit vectoriel généralisé (ε est le tenseur de Levi-Civita) :

$$\mathbf{S}^1 \times \mathbf{S}^2 := -\left(\mathbf{S}^2 \cdot \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{S}^1\right)^s \in \mathbb{S}^{p+q-1}(\mathbb{R}^3).$$

Remarque

La trace de $\mathbf{S}$ s'obtient comme une contraction (ici $\mathbf{q}$ est la forme euclidienne)

$$\operatorname{tr}\mathbf{S} = \mathbf{S} : \mathbf{q}.$$

Exemples de covariants polynomiaux

1. Soit $\mathbf{a}$ un tenseur symétrique d'ordre 2, alors $\mathbf{a}^2$ est un $\mathrm{O}(d)$-covariant polynomial de a d'ordre 2 et de degré 2.
2. Soit $\mathbf{a}$ un tenseur symétrique d'ordre 2, alors $\mathbf{a} \times \mathbf{a}^2$ est un $\mathrm{SO}(d)$-covariant polynomial de a d'ordre 3 et de degré 3.
3. Soit $\mathbf{C}$ un tenseur d'élasticité, alors $\mathbf{d} := \operatorname{tr}_{12}\mathbf{C}$ (tenseur de dilatation) est un $\mathrm{O}(3)$ covariant polynomial de $\mathbf{C}$ d'ordre 2 et de degré 1.
4. La forme euclidienne $\mathbf{q}$ est un $\mathrm{O}(d)$-covariant polynomial de n'importe quel tenseur $\mathbf{T}$ d'ordre 2 et de degré 0.
5. Un invariant polynomial homogène de degré n d'un tenseur $\mathbf{T}$ est un covariant polynomial de $\mathbf{T}$ d'ordre 0 et de degré n.

Lignes directrices

POLYNÔMES HARMONIQUES EN 2D

- L'espace $\mathcal{H}_n(\mathbb{R}^2)$ des polynômes harmoniques et de dimension 2 et a pour base
$$(\mathrm{Re}\, z^n, \mathrm{Im}\, z^n),$$
où $z = x + iy$.
- Un élément de $\mathbf{h} \in \mathcal{H}_n(\mathbb{R}^2)$ s'écrit
$$\mathbf{h} = \mathrm{Re}(\bar{z}_n z^n),$$
où $z_n = x_n + iy_n$ et (x_n, y_n) sont les composantes de $\mathbf{h}$ dans cette base.
- Dans cette base, l'action de $\mathrm{O}(2)$ a pour expression matricielle
$$\rho_n(r_\theta) = \begin{pmatrix} \cos(n\theta) & -\sin(n\theta) \\ \sin(n\theta) & \cos(n\theta) \end{pmatrix} \qquad \rho_n(\sigma) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$
où σ est la réflexion d'axe Ox.

Le cas de $\mathrm{SO}(2)$

Calcul d'une base d'intégrité de $\mathbb{R}[\mathbf{V}]^{\mathrm{SO}(2)}$

1. **On décompose** la représentation $\mathbf{V}$ en facteurs harmoniques

$$\nu_0\mathbb{H}^0 \oplus \mathbb{H}^{n_1} \oplus \cdots \oplus \mathbb{H}^{n_r}, \qquad n_k \geq 1,$$

   en diagonalisant la représentation infinitésimale par exemple.

2. **On complexifie** chaque $\mathbb{H}^{n_k}$: si $\mathbf{h}_k = (x_k, y_k)$, on pose $z_k = x_k + iy_k$, de sorte que $r_\theta \star z_k = e^{in_k\theta} z_k$. Alors, tout polynôme

$$\mathrm{p}(x_1, y_1, \dots, x_r, y_r) \quad \text{se réécrit} \quad \tilde{\mathrm{p}}(z_1, \dots, z_r, \overline{z}_1, \dots, \overline{z}_r),$$

   et l'action de $\mathrm{SO}(2)$ est diagonale dans la base des monômes

$$z_1^{\alpha_1} \dots z_r^{\alpha_r} \overline{z}_1^{\beta_1} \dots \overline{z}_r^{\beta_r}.$$

Réduction à une équation diophantienne

- Un polynôme $\tilde{\mathrm{p}}(z_1, \dots, z_r, \bar{z}_1, \dots, \bar{z}_r)$ est invariant ssi il est somme de monômes
$$m = z_1^{\alpha_1} \cdots z_r^{\alpha_r} \bar{z}_1^{\beta_1} \cdots \bar{z}_r^{\beta_r}$$
tels que
$$n_1\alpha_1 + \cdots + n_r\alpha_r - n_1\beta_1 - \cdots - n_r\beta_r = 0. \tag{1}$$
- Une solution de l'équation diophantienne (1) est minimale si elle n'est pas la somme de deux solutions.
- Il existe seulement un nombre fini de solutions minimales (Gordan 1873).
- Les solutions $(\alpha_1, \dots, \alpha_r, \beta_1, \dots \beta_r)$ de (1) sont engendrées par ses solutions minimales.

Base d'intégrité minimale sous SO(2)

Théorème

Soit $(\mathbf{V}, \rho)$ une représentation réelle de SO(2) qui se décompose comme

$$\mathbf{V} \simeq \nu_0 \mathbb{H}^0 \oplus \mathbb{H}^{n_1} \oplus \cdots \oplus \mathbb{H}^{n_r}.$$

Alors, une base d'intégrité minimale de $\mathbb{R}[\mathbf{V}]^{\mathrm{SO}(2)}$ s'écrit

$$\lambda_i, \quad |z_k|^2, \quad \operatorname{Re} m_l, \quad \operatorname{Im} m_l,$$

où $1 \leq i \leq \nu_0$, $1 \leq k \leq r$, et m_l sont les monômes associés aux solutions minimales de l'équation diophantienne (1) telles que $m_l \neq \bar{m}_l$.

Exemple (Vianello 1997)

Une base d'intégrité minimale pour le tenseur d'élasticité en 2D sous l'action de SO(2) qui correspond à la décomposition harmonique $2\mathbb{H}^0 \oplus \mathbb{H}^2 \oplus \mathbb{H}^4$ s'écrit

$$\lambda_1, \quad \lambda_2, \quad |z_2|^2, \quad |z_4|^2, \quad \operatorname{Re}(z_2^2\overline{z_4}), \quad \operatorname{Im}(z_2^2\overline{z_4}).$$

Base d'intégrité minimale sous O(2)

Théorème

Soit $(\mathbf{V}, \rho)$ une représentation réelle de $\mathrm{O}(2)$ qui se décompose comme

$$\mathbf{V} \simeq m_{-1}\mathbb{H}^{-1} \oplus m_0\mathbb{H}^0 \oplus \mathbb{H}^{n_1} \oplus \cdots \oplus \mathbb{H}^{n_r},$$

où $\mathbb{H}^{-1}$ correspond à la représentation de dimension 1, $g \star \xi = \det(g)\xi$.
Alors, une base d'intégrité de $\mathbb{R}[\mathbf{V}]^{\mathrm{O}(2)}$ s'écrit

$$\lambda_k, \quad |z_l|^2, \quad \operatorname{Re} m_l, \quad \xi_i\xi_j, \quad \xi_i \operatorname{Im} m_l, \quad \operatorname{Im} m_p \operatorname{Im} m_q,$$

où $0 \leq i, j \leq m_{-1}$, $0 \leq k \leq m_0$, m_l sont les monômes associés aux solutions minimales de l'équation diophantienne (1) telles que $m_l \neq \bar{m}_l$.

Remarque

En général, cette base d'intégrité n'est pas minimale et nécessite un processus de nettoyage pour en extraire une base d'intégrité minimale.

Il peut être utile en mécanique de traduire les expressions des invariants polynomiaux en z_k sous forme tensorielle. Des règles de traduction systématiques existent.

Exemple

Soit $\mathbf{C} \in \mathbb{E}la$ un tenseur d'élasticité 2D. Sa décomposition harmonique s'écrit $\mathbf{C} \simeq (\lambda, \mu, \mathbf{h}, \mathbf{H})$, avec $\mathbf{h} \in \mathbb{H}^2$ et $\mathbf{H} \in \mathbb{H}^4$. A $\mathbf{h}$ correspond le polynôme harmonique $\operatorname{Re}(\bar{z}_2 z^2)$ et à $\mathbf{H}$, $\operatorname{Re}(\bar{z}_4 z^4)$, avec $z_2 = h_{11} + ih_{12}$ et $z_4 = H_{1111} + iH_{1112}$. Alors aux quatre invariants

$$z_2\overline{z_2}, \quad z_4\overline{z_4}, \quad \operatorname{Re}(z_2^2\overline{z_4}), \quad \operatorname{Im}(z_2^2\overline{z_4})$$

correspondent les invariants tensoriels

$$\mathbf{h} : \mathbf{h}, \quad \mathbf{H} :: \mathbf{H}, \quad \mathbf{h} : \mathbf{H} : \mathbf{h}, \quad \mathbf{h} : \mathbf{H} : (\mathbf{q} \times \mathbf{h}).$$

Lignes directrices

Calcul d'une base d'intégrité en 3D

- En 3D, le calcul d'une base d'intégrité d'une représentation de $\mathrm{SO}(3)$ se ramène également à la résolution d'équations diophantiennes après complexification comme en 2D mais ce processus de complexification est beaucoup plus subtil et requiert plusieurs étapes supplémentaires.
- Le problème se ramène à la théorie classique des invariants des formes binaires où les algorithmes de Gordan réduisent le calcul d'une base d'intégrité à la résolution d'équations diophantiennes.
- Enfin, un processus de dé-complexification non trivial est nécessaire pour traduire les résultats sous forme réelle.

Formes binaires

Définition

Une forme binaire $\mathbf{f}$ de degré n est un polynôme homogène complexe à deux variables u, v de degré n :

$$\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}) = a_0 u^n + a_1 u^{n-1} v + \cdots + a_{n-1} u v^{n-1} + a_n v^n,$$

où $\boldsymbol{\xi} = (u, v) \in \mathbb{C}^2$ et $a_k \in \mathbb{C}$. On note S_n l'espace vectoriel des formes binaires de degré n (de dimension complexe $n + 1$).

- Le groupe
$$\mathrm{SL}(2, \mathbb{C}) := \{\gamma \in \mathrm{M}_2(\mathbb{C});\ \det \gamma = 1\}$$
agit sur S_n par $(\gamma \star \mathbf{f})(\boldsymbol{\xi}) := \mathbf{f}(\gamma^{-1}\boldsymbol{\xi})$.
- Les espaces S_n sont des représentations irréductibles de $\mathrm{SL}(2, \mathbb{C})$ et toute représentation algébrique de $\mathrm{SL}(2, \mathbb{C})$ se décompose en une somme directe de S_n.

Application de Cartan

- L'application bilinéaire $\omega(\boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2) := \det(\boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2)$ induit un isomorphisme SL$(2, \mathbb{C})$-équivariant entre $\mathbb{C}^2$ et son dual

$$\boldsymbol{\xi} = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \mapsto \boldsymbol{\xi}^\omega = \begin{pmatrix} -v & u \end{pmatrix}$$

- L'application de Cartan est une application $\phi : \mathbb{C}^2 \to \mathrm{M}_2(\mathbb{C})$, SL$(2, \mathbb{C})$-équivariante, définie par

$$\phi : \boldsymbol{\xi} \mapsto M := \boldsymbol{\xi}\boldsymbol{\xi}^\omega = \begin{pmatrix} -uv & u^2 \\ -v^2 & uv \end{pmatrix},$$

- On peut vérifier que $\operatorname{tr} \phi(\boldsymbol{\xi}) = 0$ et que son image correspond au cône isotrope $\det M = 0$ dans

$$\mathfrak{sl}(2, \mathbb{C}) := \{M \in \mathrm{M}_2(\mathbb{C});\ \operatorname{tr} M = 0\}.$$

Matrices de Pauli

- Le choix de la base (matrices de Pauli multipliées par i)

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}$$

de $\mathfrak{sl}(2,\mathbb{C})$ nous permet d'identifier $\mathfrak{sl}(2,\mathbb{C})$ avec $\mathbb{C}^3$ et induit la paramétrisation suivante de $\mathfrak{sl}(2,\mathbb{C})$ par $\mathbb{C}^3$

$$\begin{pmatrix} iz & x+iy \\ -x+iy & -iz \end{pmatrix}.$$

- Dans cette base, l'application de Cartan s'écrit

$$\phi : (u,v) \mapsto \left(x = \frac{u^2+v^2}{2}, y = \frac{u^2-v^2}{2i}, z = iuv \right).$$

LIEN ENTRE $\mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$ ET $\mathrm{SO}(3,\mathbb{C})$

- L'action adjointe de $\mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$ sur son algèbre de Lie $\mathfrak{sl}(2,\mathbb{C})$

  $$M \mapsto \gamma M \gamma^{-1}$$

  préserve la forme quadratique complexe $\det M$ qui s'écrit

  $$\det M = x^2 + y^2 + z^2$$

  dans la base des matrices de Pauli (multipliées par i).
- Elle induit un morphisme de groupe

  $$\pi : \mathrm{SL}(2,\mathbb{C}) \to \mathrm{SO}(3,\mathbb{C}), \qquad \gamma \mapsto \mathrm{Ad}_\gamma,$$

  où

  $$\mathrm{SO}(3,\mathbb{C}) := \{g \in \mathrm{M}_3(\mathbb{C});\ g^t g = I\,,\ \det g = 1\}\,.$$

- Le pullback $\phi^* : \mathrm{S}_n(\mathbb{C}^3) \to \mathrm{S}_{2n}(\mathbb{C}^2)$

$$(\phi^*\mathrm{p})(u,v) := \mathrm{p}\left(\frac{u^2+v^2}{2}, \frac{u^2-v^2}{2i}, iuv\right)$$

  est une application linéaire surjective entre l'espace des formes ternaires $\mathrm{S}_n(\mathbb{C}^3)$ d'ordre n et les formes binaires $\mathrm{S}_{2n}(\mathbb{C}^2)$ d'ordre $2n$.
- Cette application est $\mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$-équivariante au sens suivant

$$\phi^*(\mathrm{Ad}_\gamma \star \mathrm{p}) = \gamma \star \phi^*(\mathrm{p}).$$

- Restreinte aux polynômes harmoniques complexes $\mathcal{H}_n(\mathbb{C}^3)$, ϕ^* est un isomorphisme, car un polynôme harmonique qui s'annule sur le cône isotrope est identiquement nul.

Lien entre $SU(2,\mathbb{C})$ et $SO(3,\mathbb{R})$

- Il existe une relation étroite entre le groupe $SO(3,\mathbb{R})$ et le groupe

$$SU(2,\mathbb{C}) := \{\gamma \in M_2(\mathbb{C});\ \bar{\gamma}^t\gamma = \mathbf{1},\ \det\gamma = 1\}\,.$$

- L'action adjointe $\mathrm{Ad}_\gamma : M \mapsto \gamma M \gamma^{-1}$ de $SU(2,\mathbb{C})$ sur $\mathfrak{su}(2,\mathbb{C})$ préserve la forme quadratique $\det M = x^2 + y^2 + z^2$ et induit un morphisme de groupe

$$\pi : SU(2,\mathbb{C}) \to SO(3,\mathbb{R}), \qquad \gamma \mapsto \mathrm{Ad}_\gamma\,.$$

- La paramétrisation de l'algèbre de Lie $\mathfrak{su}(2,\mathbb{C})$ sous forme matricielle suivante

$$\boldsymbol{x} := (x,y,z) \mapsto M = \begin{pmatrix} iz & x+iy \\ -x+iy & -iz \end{pmatrix},$$

identifie $\mathfrak{su}(2,\mathbb{C})$ avec $\mathbb{R}^3$.

Formes binaires et polynômes harmoniques réels

- Dans la correspondance entre $S_{2n}(\mathbb{C}^2)$ et $\mathcal{H}_n(\mathbb{C}^3)$, $\mathcal{H}_n(\mathbb{R}^3)$ correspond aux formes binaires vérifiant

$$\bar{\mathbf{f}}(-v,u) = \mathbf{f}(u,v),$$

  qui forment un espace vectoriel réel de dimension $2n+1$.

- Ce sous-espace, noté $S_{2n}^{\mathbb{R}}(\mathbb{C}^2)$ est invariant par $SU(2,\mathbb{C})$ et correspond aux formes binaires

$$\mathbf{f}(u,v) := \sum_{k=0}^{2n} a_k u^k v^{2n-k}, \quad \text{où} \quad a_{2n-k} = (-1)^k \overline{a_k}.$$

- On a de plus

$$S_{2n}(\mathbb{C}^2) = S_{2n}^{\mathbb{R}}(\mathbb{C}^2) \oplus i S_{2n}^{\mathbb{R}}(\mathbb{C}^2),$$

  qui est stable par le sous-groupe $SU(2,\mathbb{C})$ de $SL(2,\mathbb{C})$.

Transvectants de formes binaires

Définition

Le transvectant d'indice r de deux formes binaires $\mathbf{f} \in \mathrm{S}_n$ et $\mathbf{g} \in \mathrm{S}_p$ est défini par

$$(\mathbf{f}, \mathbf{g})_r = \left(\Omega^r_{\alpha\beta}\mathbf{f}(\boldsymbol{\xi}_\alpha)\mathbf{g}(\boldsymbol{\xi}_\beta)\right)_{\boldsymbol{\xi}_\alpha=\boldsymbol{\xi}_\beta=\boldsymbol{\xi}}, \quad \Omega_{\alpha\beta} := \frac{\partial}{\partial u_\alpha}\frac{\partial}{\partial v_\beta} - \frac{\partial}{\partial u_\beta}\frac{\partial}{\partial v_\alpha}.$$

Il s'agit d'une opération $\mathrm{SL}(2,\mathbb{C})$-équivariante.

Théorème (Gordan, 1868)

L'algèbre des covariants de S_n, notée $\mathbf{Cov}(\mathrm{S}_n)$, est engendrée par un nombre fini de transvectants itérés

$$\mathbf{f}, \quad (\mathbf{f}, \mathbf{f})_i, \quad (\mathbf{f}, (\mathbf{f}, \mathbf{f})_i)_j, \quad \dots$$

Gordan a formulé deux algorithmes pour calculer une base d'intégrité de l'algèbre des covariants (et donc des invariants).

- Un algorithme pour calculer une base d'intégrité de $\mathbf{Cov}(\mathrm{S}_n)$, connaissant une base d'intégrité de $\mathbf{Cov}(\mathrm{S}_k)$ pour $k < n$.
- Un algorithme pour calculer une base d'intégrité de $\mathbf{Cov}(\mathrm{S}_n \oplus \mathrm{S}_m)$ connaissant des bases d'intégrité de $\mathbf{Cov}(\mathrm{S}_n)$ et $\mathbf{Cov}(\mathrm{S}_m)$.
- Ce sont aujourd'hui les algorithmes les plus efficaces pour calculer des bases d'intégrités de formes binaires.

Bases d'intégrité minimales de $\mathbf{Cov}(S_n)$

A ce jour, des bases d'intégrité minimales sont connues seulement jusqu'à l'ordre 10 pour les formes binaires (et donc jusqu'à l'ordre 5 pour les tenseurs harmoniques)

Algebra	#	Calcul explicite d'une base minimale
$\mathbf{Cov}\, S_2$	2	–
$\mathbf{Cov}\, S_3$	4	–
$\mathbf{Cov}\, S_4$	5	Cayley (1861)
$\mathbf{Cov}\, S_5$	23	Gordan (1868)
$\mathbf{Cov}\, S_6$	26	Gordan (1868)
$\mathbf{Cov}\, S_7$	147	Cröni (2002)
$\mathbf{Cov}\, S_8$	69	Sylvester & Franklin (1879), Bedratyuk (2008), Popoviciu (2014)
$\mathbf{Cov}\, S_9$	476	Olive–Lercier (2015)
$\mathbf{Cov}\, S_{10}$	510	Olive–Lercier (2015)

Table – Bases d'intégrité minimales pour $\mathbf{Cov}\, S_n$

- $\mathbf{Cov}(\mathrm{S}_n \oplus \mathrm{S}_m)$ est engendrée par la suite infinie de transvectants itérés

$$\boldsymbol{\tau} := (\mathbf{f}_1^{\alpha_1} \cdots \mathbf{f}_p^{\alpha_p}, \mathbf{g}_1^{\beta_1} \cdots \mathbf{g}_q^{\beta_q})_r.$$

  où $\mathbf{f}_1, \dots, \mathbf{f}_p$ engendre $\mathbf{Cov}(\mathrm{S}_n)$ et $\mathbf{g}_1, \dots, \mathbf{g}_q$ engendre $\mathbf{Cov}(\mathrm{S}_m)$.
- Mais tout transvectant $\boldsymbol{\tau}$ non nul correspond à une solution

$$\kappa := (\alpha_1, \cdots, \alpha_p, \beta_1, \cdots, \beta_q, u, v, r)$$

  de l'équation diophantienne

$$(S) \ : \ \begin{cases} \alpha_1 a_1 + \cdots + \alpha_p a_p & = u + r \\ \beta_1 b_1 + \cdots + \beta_q b_q & = v + r \end{cases}$$

  où a_i est l'ordre de $\mathbf{f}_i$ et b_j est l'ordre de $\mathbf{g}_j$.

Théorème (Gordan)

Soit $\kappa_1, \cdots, \kappa_l$ les **solutions minimales** de (S) et soit $\boldsymbol{\tau}_1, \cdots, \boldsymbol{\tau}_l$ les transvectants associés. Alors, $\mathbf{Cov}(\mathrm{S}_n \oplus \mathrm{S}_m)$ est engendrée par $\boldsymbol{\tau}_1, \cdots, \boldsymbol{\tau}_l$.

Lien entre $\mathbf{Cov}(\mathcal{H}_n(\mathbb{C}^3))$ et $\mathbf{Cov}(\mathrm{S}_{2n})$

L'application de Cartan induit un isomorphisme équivariant entre

$$\mathbf{Cov}(\mathcal{H}_n(\mathbb{C}^3)) = \mathbb{C}[\mathcal{H}_n(\mathbb{C}^3) \oplus \mathbb{C}^3]^{\mathrm{SL}(2,\mathbb{C})}$$

et

$$\mathbb{C}[\mathrm{S}_{2n} \oplus \mathrm{S}_2]^{\mathrm{SL}(2,\mathbb{C})}$$

qui n'est pas $\mathbf{Cov}(\mathrm{S}_{2n}) = \mathbb{C}[\mathrm{S}_{2n} \oplus \mathbb{C}^2]^{\mathrm{SL}(2,\mathbb{C})}$. On a toutefois le résultat suivant.

Théorème (OKDD2018)

Une base d'intégrité de $\mathbf{Cov}(\mathcal{H}_n(\mathbb{C}^3))$ s'obtient à partir d'une base d'intégrité de $\mathbf{Cov}(\mathrm{S}_{2n})$, en ajoutant le covariant de degré 0

$$\mathrm{q} := x^2 + y^2 + z^2.$$

On peut traduire les covariants de S_{2n} en covariants de $\mathbb{H}^n(\mathbb{C}^3)$.

Théorème (OKDD2018)

Soit $\mathbf{F} \in \mathbb{H}^n(\mathbb{C}^3)$ et $\mathbf{G} \in \mathbb{H}^p(\mathbb{C}^3)$, alors :

$$(\phi^*\mathbf{F}, \phi^*\mathbf{G})_{2r} \propto \phi^*((\mathbf{F} \overset{(r)}{\cdot} \mathbf{G})^s)$$

et

$$(\phi^*\mathbf{F}, \phi^*\mathbf{G})_{2r+1} \propto \phi^*((\mathrm{tr}^r(\mathbf{F} \times \mathbf{G})))$$

La remarque suivante montre que tous les calculs restent réels si on part de $\mathbb{H}^n(\mathbb{R}^3)$ et $\mathbb{H}^p(\mathbb{R}^3)$.

Remarque

$$\mathbf{f} \in \mathrm{S}^{\mathbb{R}}_{2n}, \quad \mathbf{g} \in \mathrm{S}^{\mathbb{R}}_{2p} \implies (\mathbf{f}, \mathbf{g})_r \in \mathrm{S}^{\mathbb{R}}_{2(n+p-2r)}.$$

Résumé

- On a présenté des techniques utiles pour calculer des bases d'intégrité pour les représentations des groupes finis.
- On a détaillé une méthode exhaustive pour calculer des bases d'intégrité pour toute représentation de $\mathrm{SO}(2)$ ou $\mathrm{O}(2)$.
- on a expliqué comment calculer des bases d'intégrité pour les représentations de $\mathrm{SO}(3)$. Dans ce dernier cas, les calculs restent lourds.
- Les notions de contraction symétrisée et de produit vectoriel généralisé ont été introduites, permettant d'écrire tous les invariants/covariants sous forme compacte.
- En 2D, des formules systématiques existent pour traduire les invariants exprimés à l'aide de variables complexes en tenseurs. En 3D les transvectants ont été traduits sous forme tensorielle.

Lectures complémentaires

N. Auffray, B. Kolev, and M. Petitot.
On anisotropic polynomial relations for the elasticity tensor.
Journal of Elasticity, 115(1) :77–103, 2014.

M. Olive.
About Gordan's algorithm for binary forms.
Found. Comput. Math., 17(6) :1407–1466, 2017.

M. Olive, B. Kolev, and N. Auffray.
A minimal integrity basis for the elasticity tensor.
Archive for Rational Mechanics and Analysis, 226(1) :1–31, 2017.

M. Olive, B. Kolev, R. Desmorat, and B. Desmorat.
Characterization of the symmetry class of an elasticity tensor using polynomial covariants.
Mathematics and Mechanics of Solids, 27(1) :144–190, 2022.

B. Desmorat, M. Olive, N. Auffray, R. Desmorat, and B. Kolev.
Computation of minimal covariants bases for 2D coupled constitutive laws
arXiv :2007.01576