Intégrateurs variationnels et leur implémentation

Pierre CARRÉ

Équipe S3AM, IRCAM

GDR, 4-6 novembre 2020

Cadre de la présentation

- Formulation lagrangienne
- Approcher les solutions numériquement
- Préserver numériquement les propriétés physiques des systèmes

Continu	Discret
Lagrangien $\mathcal{L}$	
$\downarrow$ $\delta \int \mathcal{L} = 0$	
Équations d'Euler-Lagrange	
$\downarrow$	
Solution analytique	

Continu | Discret

$$
\begin{tikzcd}
\text{Lagrangien } \mathcal{L} \arrow[d, "\delta \int \mathcal{L} = 0"'] & \\
\text{Équations d'Euler-Lagrange} \arrow[r] \arrow[d, dotted] & \text{Équations d'Euler Lagrange} \arrow[d] \\
\text{Solution analytique} & \text{Solution numérique}
\end{tikzcd}
$$

Exemple : pendule simple

Équation d'Euler-Lagrange

$$\ddot{\theta} + \frac{g}{l}\sin(\theta) = 0$$

Méthode d'Euler explicite

$$\theta_{k+1} = \theta_k + h\dot{\theta}_k$$
$$\dot{\theta}_{k+1} = \dot{\theta}_k + h\sin\theta_k$$

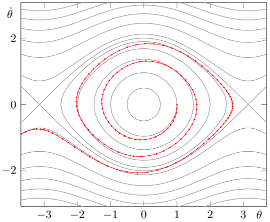
Exemple : pendule simple

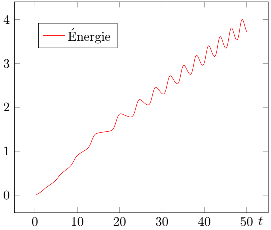
Équation d'Euler-Lagrange

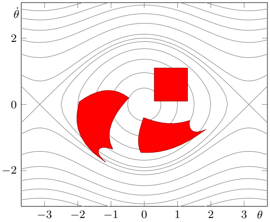
$$\ddot{\theta} + \frac{g}{l}\sin(\theta) = 0$$

Méthode d'Euler explicite

$$\theta_{k+1} = \theta_k + h\dot{\theta}_k$$
$$\dot{\theta}_{k+1} = \dot{\theta}_k + h\sin\theta_k$$







Continu | Discret

$$\begin{tikzcd}
\text{Lagrangien } \mathcal{L} \arrow[d, "\delta \int \mathcal{L} = 0"'] \arrow[drr, bend left, "\text{invariants ?}"] & & \\
\text{Équations d'Euler-Lagrange} \arrow[rr] \arrow[d, dotted] & & \text{Équations d'Euler Lagrange} \arrow[d] \\
\text{Solution analytique} & & \text{Solution numérique}
\end{tikzcd}$$

Continu | Discret

$$\begin{tikzcd}[column sep=huge, row sep=large]
\text{Lagrangien } \mathcal{L} \arrow[r] \arrow[d, "\delta \int \mathcal{L} = 0"'] \arrow[dr, bend right, "\text{invariants ?}"] & \text{Lagrangien } \mathcal{L}_d \arrow[d, "\delta \Sigma \mathcal{L}_d = 0"] \\
\text{Équations d'Euler-Lagrange} \arrow[r] \arrow[d, dotted] & \text{Équations d'Euler Lagrange} \arrow[d] \\
\text{Solution analytique} & \text{Solution numérique}
\end{tikzcd}$$

Méthodes variationnelles

Contexte

- Q espace de configuration
- Lagrangien $L : TQ \to \mathbb{R}$
- Action $\mathcal{A}(q) = \int_0^T L(q(t), \dot{q}(t))dt$

Méthodes variationnelles

Contexte

- Q espace de configuration
- Lagrangien $L : TQ \to \mathbb{R}$
- Action $\mathcal{A}(q) = \int_0^T L(q(t), \dot{q}(t))dt$

Principe de la méthode

- Définir

$$L_d(q_k, q_{k+1}) \approx \underset{\substack{q:[t_k, t_{k+1}] \to Q \\ q(t_k)=q_k,\ q(t_{k+1})=q_{k+1}}}{\text{ext}} \int_{t_k}^{t_{k+1}} L\left(q(t), \dot{q}(t)\right) dt$$

- Principe de Hamilton appliqué à $\mathcal{A}_d(q_d) = \sum_{k=0}^{N-1} L_d(q_k, q_{k+1})$
- Équations d'Euler-Lagrange discrètes

$$D_1 L_d(q_k, q_{k+1}) + D_2 L_d(q_{k-1}, q_k) = 0$$

Lagrangien discret

$$L(\theta, \dot{\theta}) = \frac{1}{2}\dot{\theta}^2 + \frac{g}{l}\cos\theta \qquad \rightarrow \qquad L_d(\theta_k, \theta_{k+1}) = hL\left(\theta_k, \frac{\theta_{k+1} - \theta_k}{h}\right)$$

Méthode d'Euler symplectique

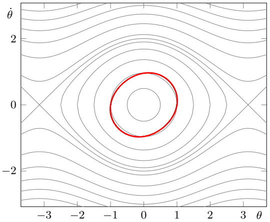
$$\frac{\theta_{k+1} - 2\theta_k + \theta_{k-1}}{h^2} + \sin(\theta_k) = 0$$

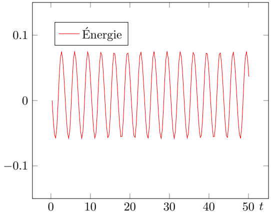
Lagrangien discret

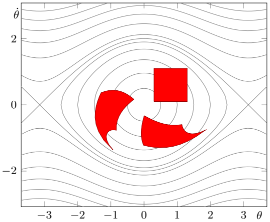
$$L(\theta,\dot\theta) = \frac{1}{2}\dot\theta^2 + \frac{g}{l}\cos\theta \qquad \rightarrow \qquad L_d(\theta_k,\theta_{k+1}) = hL\left(\theta_k, \frac{\theta_{k+1}-\theta_k}{h}\right)$$

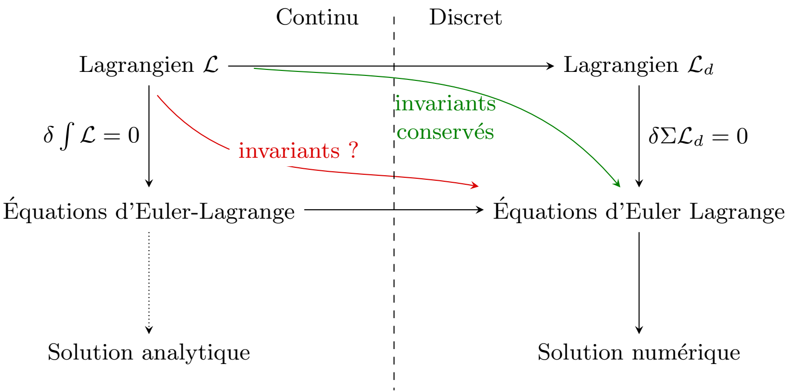
Méthode d'Euler symplectique

$$\frac{\theta_{k+1}-2\theta_k+\theta_{k-1}}{h^2} + \sin(\theta_k) = 0$$








Continu
Discret
Lagrangien $\mathcal{L}$
Lagrangien $\mathcal{L}_d$
$\delta \int \mathcal{L} = 0$
invariants ?
invariants conservés
$\delta \Sigma \mathcal{L}_d = 0$
Équations d'Euler-Lagrange
Équations d'Euler Lagrange
Solution analytique
Solution numérique

Équations d'Euler-Lagrange discrètes

$$D_2 L_d(q_{k-1}, q_k) + D_1 L_d(q_k, q_{k+1}) = 0$$

$$\text{où } L_d(q_k, q_{k+1}) \approx \underset{\substack{q:[t_k, t_{k+1}] \to Q \\ q(t_k)=q_k,\ q(t_{k+1})=q_{k+1}}}{\text{ext}} \int_{t_k}^{t_{k+1}} L\left(q(t), \dot{q}(t)\right) dt$$

Comment construire un intégrateur variationnel ?

Équations d'Euler-Lagrange discrètes

$$D_2 L_d(q_{k-1}, q_k) + D_1 L_d(q_k, q_{k+1}) = 0$$

$$\text{où } L_d(q_k, q_{k+1}) \approx \underset{\substack{q:[t_k, t_{k+1}]\to Q \\ q(t_k)=q_k,\ q(t_{k+1})=q_{k+1}}}{\operatorname{ext}} \int_{t_k}^{t_{k+1}} L\left(q(t), \dot{q}(t)\right) dt$$

Comment construire un intégrateur variationnel ?

- approximation de l'espace des solutions

Équations d'Euler-Lagrange discrètes

$$D_2 L_d(q_{k-1}, q_k) + D_1 L_d(q_k, q_{k+1}) = 0$$

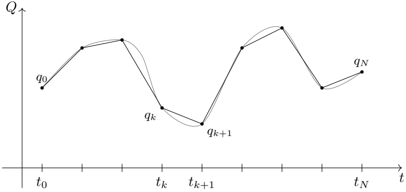
$$\text{où } L_d(q_k, q_{k+1}) \approx \underset{\substack{q:[t_k, t_{k+1}] \to Q \\ q(t_k)=q_k,\ q(t_{k+1})=q_{k+1}}}{\operatorname{ext}} \int_{t_k}^{t_{k+1}} L\left(q(t), \dot{q}(t)\right) dt$$

Comment construire un intégrateur variationnel ?

- approximation de l'espace des solutions
- quadrature de l'intégrale $\int L(q, \dot{q}) dt$

Exemple simple : Midpoint

Approximation de l'espace des solutions

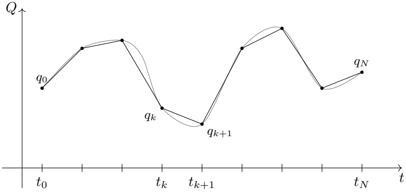


$$q_d\big|_{[t_k,t_{k+1}[}(t) = q_k + (t - t_k)\frac{q_{k+1} - q_k}{h}$$

$$\dot{q}_d\big|_{[t_k,t_{k+1}[}(t) = \frac{q_{k+1} - q_k}{h}$$

Exemple simple : Midpoint

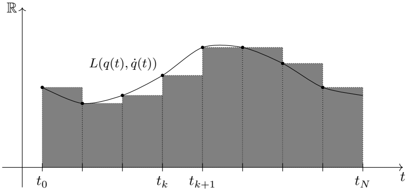
Approximation de l'espace des solutions



$$q_d|_{[t_k, t_{k+1}[}(t) = q_k + (t - t_k)\frac{q_{k+1} - q_k}{h}$$

$$\dot{q}_d|_{[t_k, t_{k+1}[}(t) = \frac{q_{k+1} - q_k}{h}$$

Quadrature de l'intégrale $\int_{t_k}^{t_{k+1}} L(q, \dot{q})dt$



$$L_d(q(t_k), q(t_{k+1})) = hL\left(q(t_{k+\frac{1}{2}}), \dot{q}(t_{k+\frac{1}{2}})\right)$$

Exemple simple : Midpoint

Définition du Lagrangien discret

$$L_d(q_k, q_{k+1}) = hL\left(\frac{q_k + q_{k+1}}{2}, \frac{q_{k+1} - q_k}{h}\right)$$

Équation d'Euler-Lagrange

$$\frac{h}{2}\frac{\partial L}{\partial q}\left(\frac{q_k + q_{k+1}}{2}, \frac{q_{k+1} - q_k}{h}\right) - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\left(\frac{q_k + q_{k+1}}{2}, \frac{q_{k+1} - q_k}{h}\right)$$
$$+ \frac{h}{2}\frac{\partial L}{\partial q}\left(\frac{q_{k-1} + q_k}{2}, \frac{q_k - q_{k-1}}{h}\right) + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\left(\frac{q_{k-1} + q_k}{2}, \frac{q_k - q_{k-1}}{h}\right) = 0$$

Exemple simple : Midpoint

Remarques

- Méthodes (souvent) implicites :

Exemple : méthode Midpoint pour $L(q,\dot{q}) = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 - U(q)$

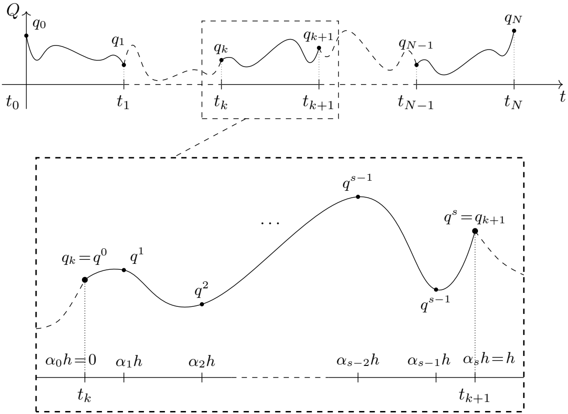
$$(EL) \quad \frac{h}{2}U'\left(\frac{q_k + q_{k+1}}{2}\right) - m\frac{q_{k+1} - q_k}{h} = \frac{h}{2}U'\left(\frac{q_k + q_{k+1}}{2}\right) + m\frac{q_k - q_{k-1}}{h}$$

- Ordre limité

Exemple : intégrateur de Galerkin

Trajectoire interpolée par polynômes de Lagrange

- $\phi_\nu : [0,1] \to \mathbb{R}$ polynôme de Lagrange de degré s
- $q_d(t; \{q^\nu\}) = \sum_{\nu=0}^{s} q^\nu \phi_\nu(t/h)$



Exemple : intégrateur de Galerkin

Quadrature de l'intégrale d'action

- Coefficients $(c_i, w_i)_{i=1}^r$
- $\int_0^h L(q, \dot{q})dt \approx h \sum_{i=1}^r w_i L(q(hc_i), \dot{q}(hc_i))$

Définition du lagrangien discret

Définition implicite ($s - 1$ équations)

$$L_d(q_k, q_{k+1}) = \underset{\substack{\{q^\nu\}_{\nu=1}^{s-1} \in Q \\ q^0 = q_k,\ q^s = q_{k+1}}}{\operatorname{ext}} h \sum_{i=1}^r w_i L\left(q_d(hc_i; \{q^\nu\}), \dot{q}_d(hc_i; \{q^\nu\})\right)$$

Exemple : intégrateur de Galerkin

Intégrateur variationnel de Galerkin

- Résoudre pour $\{q^\nu\}_{\nu=1}^s$

$$(EL) \qquad h\sum_{i=1}^{r} w_i\left(\phi_0(c_i)\frac{\partial L}{\partial q}(c_i h;\tilde{q}_k)+\frac{1}{h}\dot{\phi}_0(c_i)\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}(c_i h;\tilde{q}_k)\right)$$
$$+\,h\sum_{i=1}^{r} w_i\left(\phi_s(c_i)\frac{\partial L}{\partial q}(c_i h;\tilde{q}_{k-1})+\frac{1}{h}\dot{\phi}_s(c_i)\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}(c_i h;\tilde{q}_{k-1})\right)=0$$

$$\forall\nu\in[1,s-1],\quad h\sum_{i=1}^{r} w_i\left(\phi_\nu(c_i)\frac{\partial L}{\partial q}(c_i h;\{q^\mu\})+\frac{1}{h}\dot{\phi}_\nu(c_i)\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}(c_i h;\{q^\mu\})\right)=0$$

- Update $q_{k+1}=q^s$

Exemple : intégrateur de Galerkin

Intégrateur variationnel de Galerkin

- Résoudre pour $\{q^\nu\}_{\nu=1}^s$

$$(EL) \qquad h\sum_{i=1}^{r} w_i \left(\phi_0(c_i)\frac{\partial L}{\partial q}(c_i h; \tilde{q}_k) + \frac{1}{h}\dot{\phi}_0(c_i)\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}(c_i h; \tilde{q}_k)\right) + h\sum_{i=1}^{r} w_i \left(\phi_s(c_i)\frac{\partial L}{\partial q}(c_i h; \tilde{q}_{k-1}) + \frac{1}{h}\dot{\phi}_s(c_i)\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}(c_i h; \tilde{q}_{k-1})\right) = 0$$

$$\forall \nu \in [1, s-1], \quad h\sum_{i=1}^{r} w_i \left(\phi_\nu(c_i)\frac{\partial L}{\partial q}(c_i h; \{q^\mu\}) + \frac{1}{h}\dot{\phi}_\nu(c_i)\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}(c_i h; \{q^\mu\})\right) = 0$$

- Update $q_{k+1} = q^s$

$\rightarrow$ Ordre arbitraire
$\rightarrow$ Système implicite de s équations à s inconnues ($\times \dim(Q)$)
$\rightarrow$ Complexe à implémenter

Intégrateurs variationnels et groupes de Lie

Contexte

- $Q = G$ groupe de Lie, $L : G \times \mathfrak{g} \to \mathbb{R}$
- Objectif : conserver la structure de G numériquement

Intégrateurs variationnels et groupes de Lie

Contexte

- $Q = G$ groupe de Lie, $L : G \times \mathfrak{g} \to \mathbb{R}$
- Objectif : conserver la structure de G numériquement

Principe

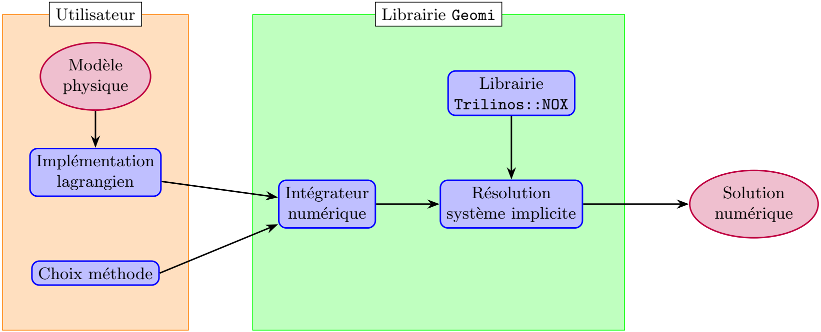
- Difféomorphisme local $\tau : \mathfrak{g} \to G$
- Écrire $q_{k+1} = q_k \tau(h\xi_k)$, $\xi \in \mathfrak{g}$
- Construire

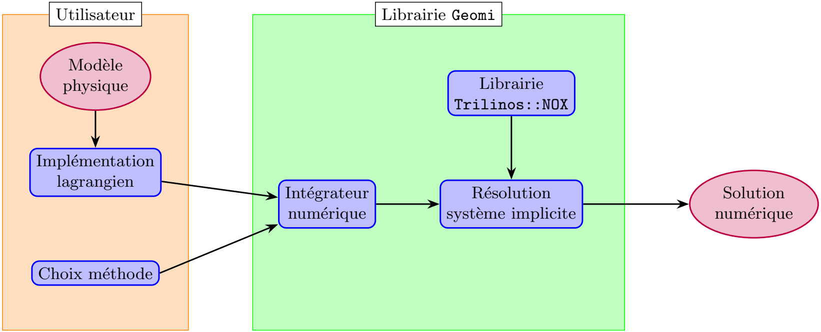
$$L_d(q_k, \xi_k) \approx \underset{\substack{q:[t_k, t_{k+1}] \to Q \\ q(t_k)=q_k,\ q(t_{k+1})=q_k\tau(h\xi_k)}}{\text{ext}} \int_{t_k}^{t_{k+1}} L\left(q(t), TL_{q^{-1}}\dot{q}(t)\right) dt$$

- Résoudre Euler-Lagrange pour ξ_k et déduire q_{k+1}

Méthodes variationnelles :

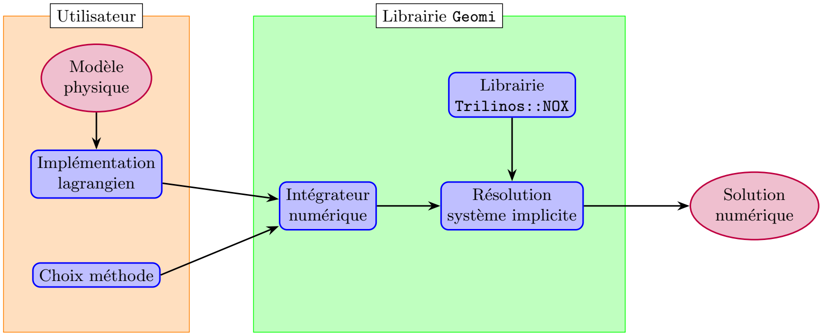
- Conservation des invariants
- Préservation des structures
- Compliquées à implémenter
- Nécessitent la résolution de systèmes implicites
- Mais formulation variationnelle unifiée


Utilisateur
Modèle physique
Implémentation lagrangien
Choix méthode
Librairie Geomi
Librairie Trilinos::NOX
Intégrateur numérique
Résolution système implicite
Solution numérique



Langage C++

- Modularité (orienté objet)
- Factorisation du code
- Classes templates



Langage C++

- Modularité (orienté objet)
- Factorisation du code
- Classes templates

Données à implémenter

- Espace de configuration
- Dérivées partielles $\partial L / \partial q$ et $\partial L / \partial \dot{q}$
- Dérivées d'ordre 2 (résolution systèmes implicites)

Exemple : solide indéformable

Modèle continu

- Solide représenté par un élément $R \in \mathrm{SO}(3)$
- Vitesse angulaire $\omega = TL_{R^{-1}}\dot{R} \in \mathfrak{so}(3)$
- Lagrangien réduit $L(\omega) = \frac{1}{2}\langle \mathbb{I}\omega, \omega\rangle$

Équation d'Euler-Poincaré

$$\dot{\pi} + \widehat{\omega}\pi = 0, \qquad \pi = \mathbb{I}\omega$$

Exemple : solide indéformable

Modèle discret

- Approximation de trajectoire $q_d|_{t_k,t_{k+1}}(t) = q_k \operatorname{cay}\left((t - t_k)\omega_k\right)$ où $\operatorname{cay} : \mathfrak{so}(3) \to SO(3)$, $\operatorname{cay}(\omega) = (I - \widehat{\omega}/2)^{-1}(I + \widehat{\omega}/2)$
- Quadrature d'intégrale par méthode des rectangles
- Lagrangien discret $L_d(\omega_k) = hL(\omega_k)$
- Résoudre pour ω_k

$$\left(d \operatorname{cay}^{-1}_{h\omega_k}\right)^* \mathbb{I}\omega_k = \operatorname{Ad}^*_{\operatorname{cay}(h\omega_{k-1})} \left(d \operatorname{cay}^{-1}_{h\omega_{k-1}}\right)^* \mathbb{I}\omega_{k-1}$$

- Effectuer $q_{k+1} = q_k \operatorname{cay}(\omega_k)$

Exemple : solide indéformable

Modèle discret

- Approximation de trajectoire $q_d|_{t_k,t_{k+1}}(t) = q_k \,\mathrm{cay}\left((t - t_k)\omega_k\right)$ où $\mathrm{cay} : \mathfrak{so}(3) \to SO(3)$, $\mathrm{cay}(\omega) = (I - \widehat{\omega}/2)^{-1}(I + \widehat{\omega}/2)$
- Quadrature d'intégrale par méthode des rectangles
- Lagrangien discret $L_d(\omega_k) = hL(\omega_k)$
- Résoudre pour ω_k

$$\left(d\,\mathrm{cay}^{-1}_{h\omega_k}\right)^* \mathbb{I}\omega_k = \mathrm{Ad}^*_{\mathrm{cay}(h\omega_{k-1})} \left(d\,\mathrm{cay}^{-1}_{h\omega_{k-1}}\right)^* \mathbb{I}\omega_{k-1}$$

- Effectuer $q_{k+1} = q_k \,\mathrm{cay}(\omega_k)$

Implémentation du modèle

- Implémentation de $SO(3)$, $\mathfrak{so}(3)$
- Implémentation de $\frac{\partial L}{\partial \omega} = \mathbb{I}\omega$ et $\frac{\partial^2 L}{\partial \omega^2} = \mathbb{I}$
- Choix de la méthode numérique

Exemple : solide indéformable

```
#include "Geomi/Common"
#include "Geomi/Variational"

typedef double                  M;
typedef SO3::Group<double>      Group;
typedef SO3::Algebra<double>    Algebra;
```

Exemple : solide indéformable

```
#include "Geomi/Common"
#include "Geomi/Variational"

typedef double                  M;
typedef SO3::Group<double>      Group;
typedef SO3::Algebra<double>    Algebra;

class RigidBody : public Variational::Abstract::LieProblem<M,Group,Algebra>
{
private:
        Eigen::Matrix<double,3,3> m_Inertia;

public:
        Eigen::Matrix<double,3,1> dLdv (const Algebra g)
        { return this->m_Inertia*g.toVector(); }

        Eigen::Matrix<double,3,3> JvdLdv (const Algebra)
        { return this->m_Inertia; }

        /*...*/
};
```

Exemple : solide indéformable

```
int main (int argc, char* argv[])
{
  RigidBody myProblem;
  /* ... initialisations ... */
```

Exemple : solide indéformable

```
int main (int argc, char* argv[])
{
  RigidBody myProblem;
  /* ... initialisations ... */

  Variational::Abstract::Integrator* integrator;
  Variational::NaturalChartStep<M,Group,Algebra>* step =
    new Variational::NaturalChartStep<M,Group,Algebra>(myProblem);
  integrator =
    new Variational::Integrator
      <M,Group,
      Variational::NaturalChartStepInternals<M,Group,Algebra>,
      Variational::Abstract::LieProblem<M,Group,Algebra>,
      Algebra>(myProblem, *step);
```

Exemple : solide indéformable

```
int main (int argc, char* argv[])
{
  RigidBody myProblem;
  /* ... initialisations ... */

  Variational::Abstract::Integrator* integrator;
  Variational::NaturalChartStep<M,Group,Algebra>* step =
    new Variational::NaturalChartStep<M,Group,Algebra>(myProblem);
  integrator =
    new Variational::Integrator
      <M,Group,
      Variational::NaturalChartStepInternals<M,Group,Algebra>,
      Variational::Abstract::LieProblem<M,Group,Algebra>,
      Algebra>(myProblem, *step);

  integrator->initialize();
  integrator->integrate();
  /* myProblem contient maintenant la solution */
```

Exemple : solide indéformable

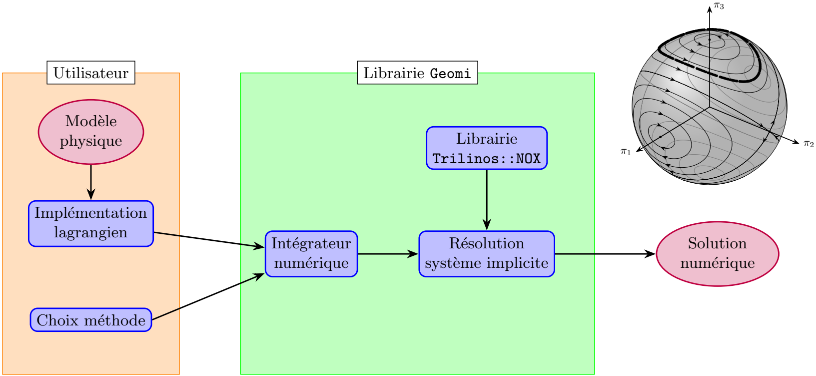
```
int main (int argc, char* argv[])
{
  RigidBody myProblem;
  /* ... initialisations ... */

  Variational::Abstract::Integrator* integrator;
  Variational::NaturalChartStep<M,Group,Algebra>* step =
    new Variational::NaturalChartStep<M,Group,Algebra>(myProblem);
  integrator =
    new Variational::Integrator
      <M,Group,
      Variational::NaturalChartStepInternals<M,Group,Algebra>,
      Variational::Abstract::LieProblem<M,Group,Algebra>,
      Algebra>(myProblem, *step);

  integrator->initialize();
  integrator->integrate();
  /* myProblem contient maintenant la solution */

  /* ... exploitation des resultats ... */
  return 0;
}
```

Exemple : solide indéformable



Merci de votre attention

`carre@ircam.fr`

Github : `rdudisk/GeometricIntegration`