Géométrie Algorithmique
Données, Modèles, Programmes

6. Espace des configurations

Jean-Daniel Boissonnat

Collège de France
17 mai 2017

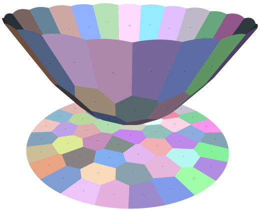
Géométrie algorithmique

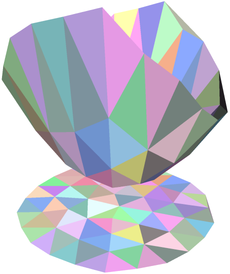
Données, modèles, programmes

1. Modèles géométriques discrets
   F. Cazals : Modèles géométriques pour la prédiction des interactions macro-moléculaires
2. La puissance de l'aléa : algorithmes randomisés
   P. Calka : Probabilités géométriques
3. Le calcul géométrique
   S. Pion : La bibliothèque logicielle CGAL
4. Génération de maillages
   J-M. Mirebeau : Les deux réductions de Voronoï et leur application aux équations aux dérivées partielles
5. Courbes et surfaces
   P. Alliez : Reconstruction de surfaces
6. Espaces de configurations
   A. de Mesmay : Dessin de graphes
7. Structures de données géométriques
   D. Feldman : Core sets
8. Géométrie des données
   F. Chazal : Analyse topologique des données

1. Exemples d'espaces de configuration
2. Un peu de topologie
3. Fonctions distance et reconstruction homotopique
4. Triangulation des variétés topologiques

$$B(c,r) \subset \mathbb{R}^d \quad \to \quad \hat{b} = (c, c^2 - r^2) \in \mathbb{R}^{d+1}$$

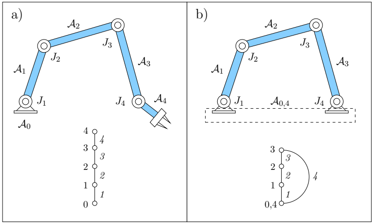


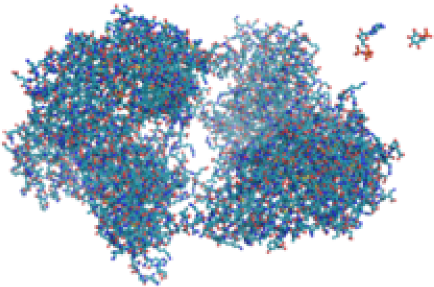


$$D(b_1, b_2) = (p_1 - p_2)^2 - r_1^2 - r_2^2$$

Espaces de configurations d'un système physique

Associer un point à chaque configuration du système



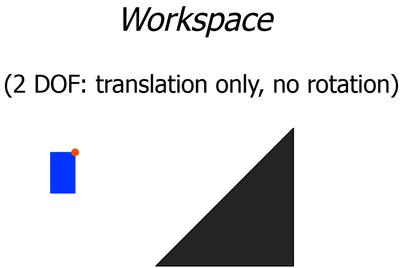


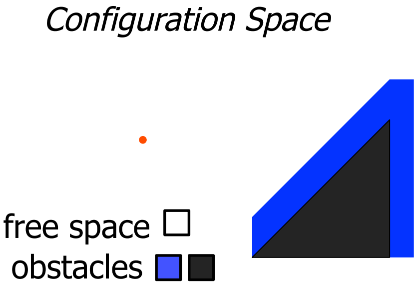
Le problème du déménageur de pianos

Configuration : 3 paramètres (par ex., la position d'un point de référence et l'orientation du piano)

Une configuration est libre si le piano n'est pas en collision avec un obstacle

L'algorithme du déménageur de piano





1. Initialisation : Calculer l'ensemble des configurations libres L
2. Requête : Etant données une configuration de départ A et une configuration d'arrivée B, chercher un chemin reliant A à B dans L

Du piano aux robots

- Le principe marche encore...
- ... mais la dimension de l'espace des configurations rend le problème difficile

Si on ne calcule L que pour 100 valeurs de chacun des paramètres,
il faut tester $P = 100^d$ positions où d est le nombre de degrés de liberté

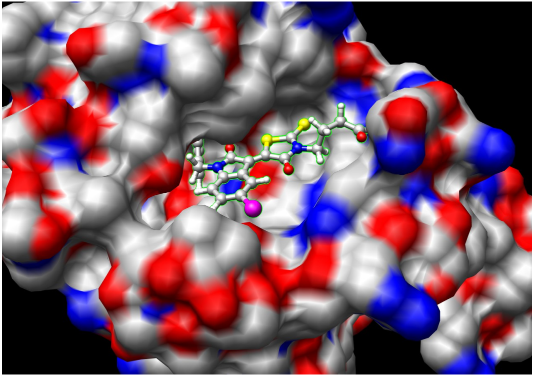
Piano : $d = 3$, $P = 10^6$ (1 million)

Robot industriel : $d = 6$, $P = 10^{12}$

Robot humanoide ? ? [Laumond]

Espace des configurations de molécules

Docking, repliement, analyse des champs énergétiques



L'espace des configurations peut être de très grande dimension

Espace des images

Une image de 10 millions de pixels

$\rightarrow$ un point dans un espace de 10 millions de dimensions !

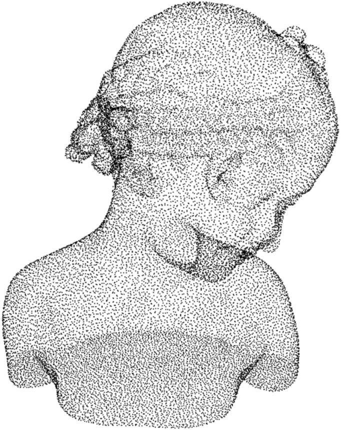
caméra : 3 ddl
lumière : 2 ddl

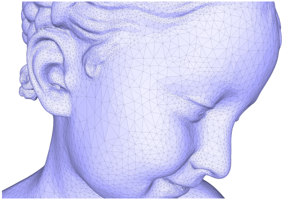
Les points-images sont proches d'une structure de dimension intrinsèque 5 plongée dans un espace ambiant de très grande dimension

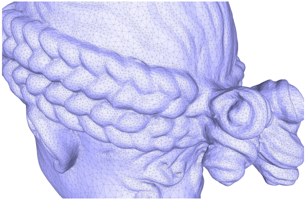
Capture de mouvement

Typiquement $N = 100$, $D = 100^3$, $d \leq 15$

Pour une théorie de l'échantillonnage géométrique







- Quels espaces ?
- Critères de qualité

- Conditions d'échantillonnage
- Algorithmes de reconstruction

Homéomorphisme

$f : X \to Y$ est une application bijective continue et d'inverse continue

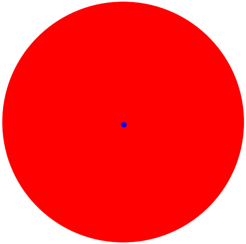
$$X \approx Y$$

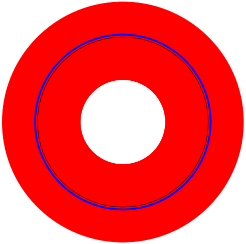
Plongement

Si $f : X \to Y$ est un homéomorphisme sur son image, f est appelé un plongement de X dans Y

Deux applications continues $f_0, f_1 : X \to Y$ sont homotopes s'il existe une application continue $h : [0,1] \times X \to Y$ t.q.

$$\forall x \in X, \quad h(0,x) = f_0(x) \quad \text{et} \quad h(1,x) = f_1(x)$$

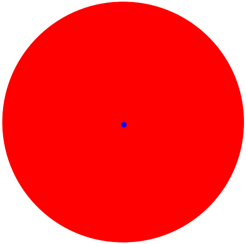


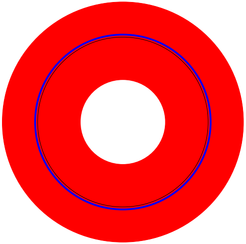


Rétract par déformation : $f : X \to Y \subseteq X$ est un rétract par déformation si f est homotope à l'application identité.

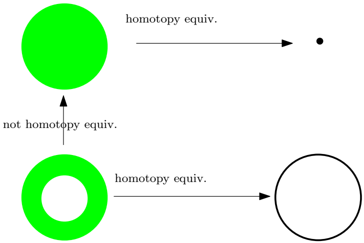
Deux applications continues $f_0,\ f_1 : X \to Y$ sont homotopes s'il existe une application continue $h : [0,1] \times X \to Y$ t.q.

$$\forall x \in X, \quad h(0,x) = f_0(x) \quad \text{et} \quad h(1,x) = f_1(x)$$





Rétract par déformation : $f : X \to Y \subseteq X$ est un rétract par déformation si f est homotope à l'application identité.



X et Y ont le même type d'homotopie ($X \simeq Y$) s'il existe deux applications continues $f : X \to Y$ et $g : Y \to X$ telles que

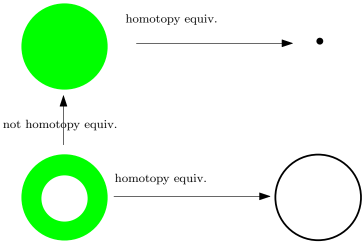
$f \circ g$ est homotopique à l'application identité dans Y

$g \circ f$ est homotopique à l'application identité dans X

X est dit contractible s'il a le même type d'homotopie qu'un point

Connectivité et applications continues entre espaces

Equivalence d'homotopie



X et Y ont le même type d'homotopie ($X \simeq Y$) s'il existe deux applications continues $f : X \to Y$ et $g : Y \to X$ telles que

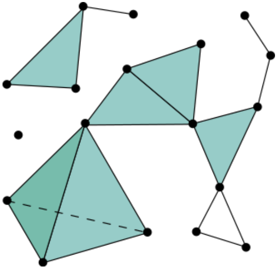
$f \circ g$ est homotopique à l'application identité dans Y

$g \circ f$ est homotopique à l'application identité dans X

X est dit contractible s'il a le même type d'homotopie qu'un point

Complexes simpliciaux

Représenter la topologie d'un objet par une structure combinatoire



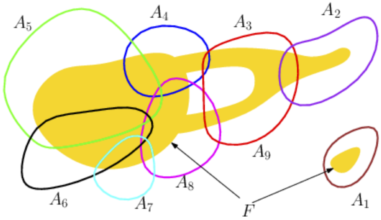
H. Poincaré (1854-1912)

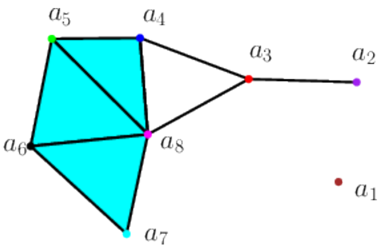
Soit V un ensemble fini. Un complexe simplicial (abstrait) sur V est un ensemble fini de sous-ensembles de V appelés les simplexes ou faces de K qui vérifient :

1. Les éléments de V appartiennent à K (sommets)
2. Si $\tau \in K$ et $\sigma \subseteq \tau$, alors $\sigma \in K$

Nerf d'un recouvrement

Représenter la topologie d'un objet par une structure combinatoire





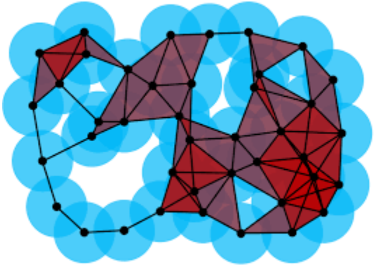
Théorème du nerf (J. Leray, 1945)

Si le éléments du recouvrement sont contractiles, le nerf et la réunion des boules ont le même type d'homotopie.

Complexe de Čech

Nerf d'un ensemble de boules

Un ensemble fini de points $\mathcal{P} \in \mathbb{R}^d$

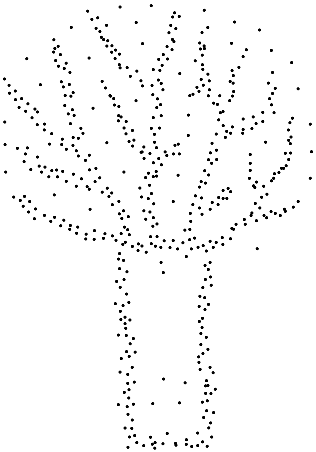


J. Leray

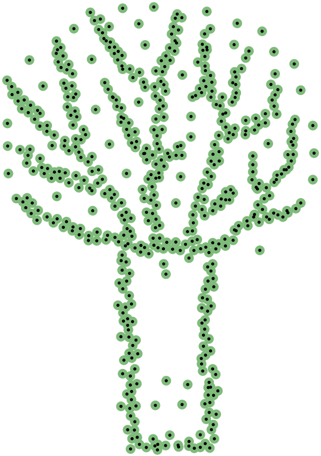
(1906-1998)

Corollaire du théorème du nerf (J. Leray, 1945)

Le complexe de Čech a le même type d'homotopie que l'union des boules



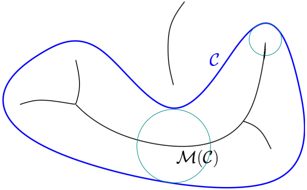
Echantillon P



Union des boules $P^{+\alpha}$

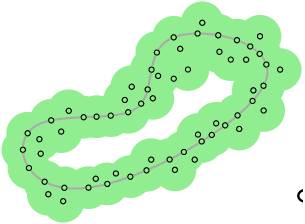
Théorèmes de reconstruction

Union de boules et fonctions distance



Niyogi, Smale, Weinberger [2008]

Si $\mathbb{M}$ est une sous-variété de portée τ positive,
P un échantillon ε-dense de $\mathbb{M}$,
alors pour tout $\alpha \in [\sim \varepsilon, \sim \tau]$, $P^{+\alpha} \simeq \mathbb{M}$



Chazal, Cohen-Steiner, Lieutier [2009]

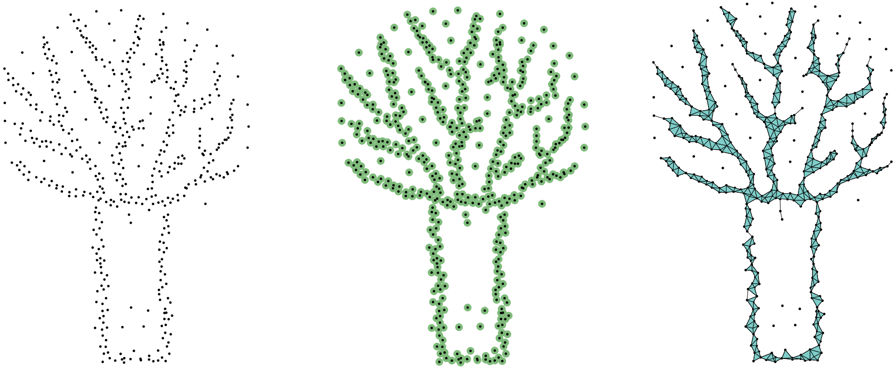
Extension au cas de compacts généraux

Chazal, Cohen-Steiner, Mérigot [2011]

Extension au cas de données comportant des points aberrants

Reconstruction de formes géométriques

Du discret au continu (AR)



Objet → Echantillon → Union de boules → Complexe simplicial

Deux questions

La question algorithmique

Le complexe de $\check{\mathrm{C}}$ech est gros ($O(n^d)$) et difficile à calculer

(il faut calculer des petites boules englobantes)

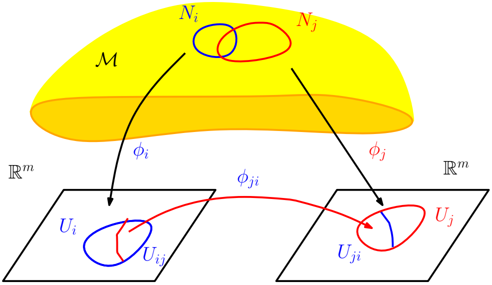
- peut-on éviter la dépendance exponentielle en d ?
- peut-on majorer la complexité combinatoire par une mesure de la dimension intrinsèque ?
- recherche de représentations compactes

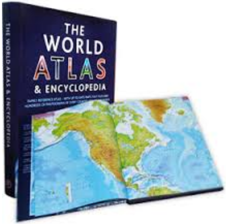
La question de la qualité de l'approximation

Le complexe de $\check{\mathrm{C}}$ech n'est en général pas homéomorphe à X et ne peut pas être plongé dans le même espace que X

Courbes, surfaces et variétés

Cartes et atlas





Variété : X est une variété sand bord de dimension k si tout $x \in X$ a un voisinage homéomorphe à une boule ouverte de dimension k

ϕ_i homéomorphisme

ϕ_{ij} application de transition entre cartes

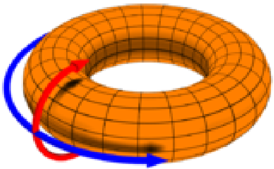
Exemple : Les espaces de configurations de mécanismes

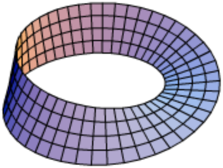
Dimension intrinsèque et plongement

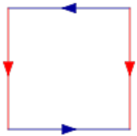
Théorème de plongement de Whitney

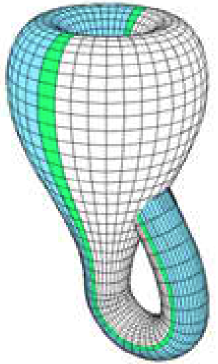
Toute variété de dimension k peut être plongée dans $\mathbb{R}^{2k+1}$

Certaines surfaces comme la bouteille de Klein
ne peuvent pas être plongées dans $\mathbb{R}^3$



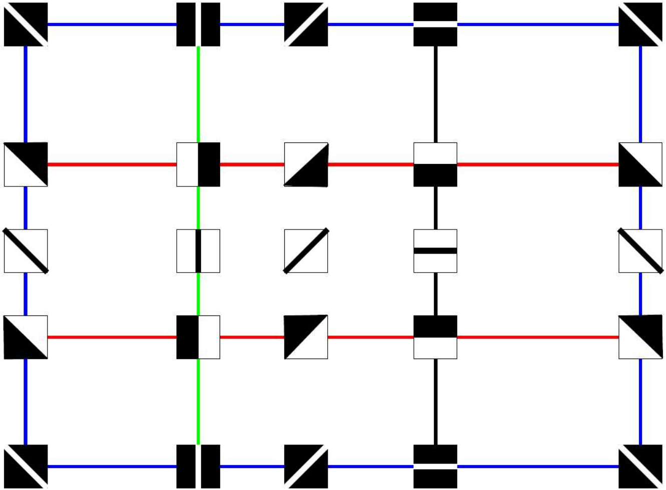






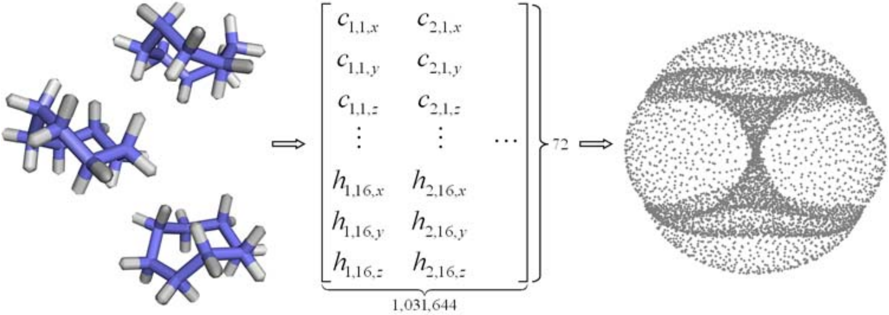
L'espace des images naturelles

Patches à fort contraste [Lee, Pedersen, Mumford 2003], [Carlsson et al 2008]

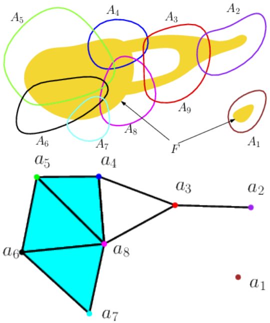


La géométrie complexe du cyclo-octane C_8H_{16}

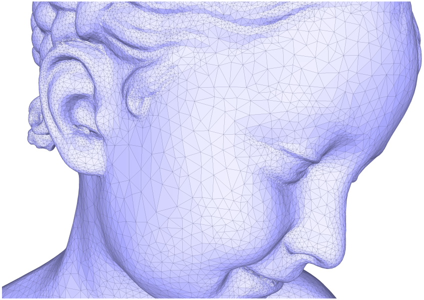
Variétés stratifiées



Martin et al. [2010]

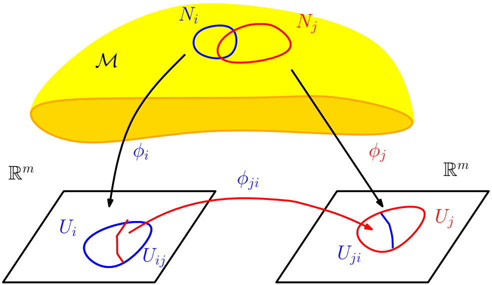


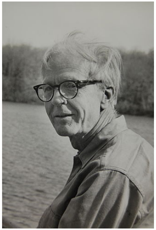
A_5
A_4
A_3
A_2
A_9
A_1
A_6
A_7
A_8
F
a_5
a_4
a_3
a_2
a_6
a_8
a_1
a_7



Triangulation des variétés lisses

Une longue histoire [Cairns, Whitehead, Whitney,...]





Hassler Whitney

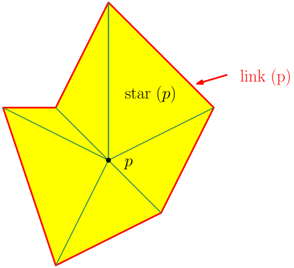
Triangulation d'une variété $\mathbb{M}$

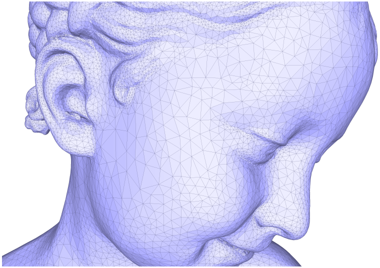
Un complexe simplicial homéomorphe à $\mathbb{M}$

Variétés PL

Définition

Un complexe simplicial $\hat{\mathcal{S}}$ est une variété PL de dimension k ssi le link de chaque sommet est la triangulation d'une sphère (topologique) de dimension k





Triangulation de Delaunay des variétés

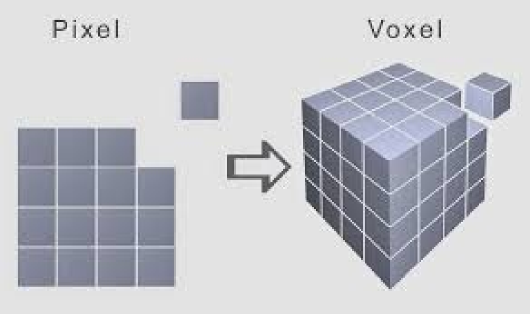
Peut-on étendre les techniques de maillage de surfaces ?

- Le fléau de la dimension
  - La complexité combinatoire de DT dépend exponentiellement de la dimension ambiante d même si les points appartiennent à une sous-variété de petite dimension

    Le cas le pire est obtenu quand les points appartiennent à une curve, e.g. la courbe des moments
  - Les prédicats requis pour construire DT sont les signes de polynômes de degré $d+2$ des coordonnées des points
- Codimensions élevées
  - La plupart des méthodes de maillage et de reconstruction de surfaces de $\mathbb{R}^3$ reposent sur le fait que les surfaces sont des variétés de codimension 1

Le fléau de la dimension

On ne peut pas subdiviser l'espace ambiant !



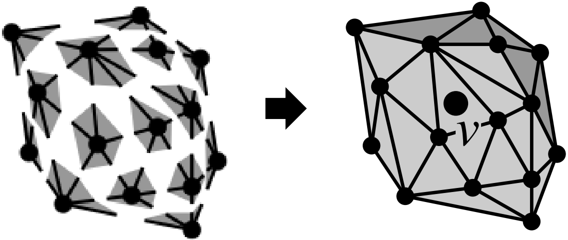
Résolution $= 1/N$

$\Downarrow$

Nombre de cellules $= N^d$

$N = 1000$

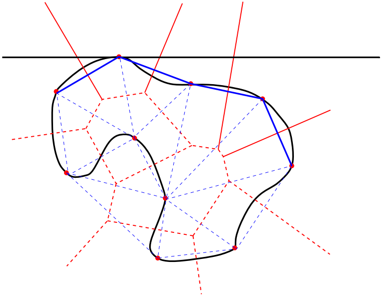
$N^2 = 1$ million $\quad N^3 = 1$ milliard $\quad N^6 = 1.000.000.000.000.000.000$

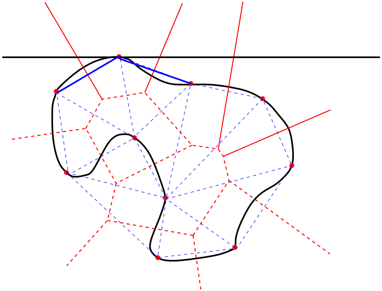


1. Construire des triangulations de Delaunay locales (étoiles)
2. Stabiliser les triangulations locales en les perturbant si besoin
   - $\Rightarrow$ un simplexe apparait dans l'étoile de tous ses sommets
3. Réunir les étoiles pour former une variété PL

Le cas des sous-variétés de $\mathbb{R}^d$

Le complexe de Delaunay tangent



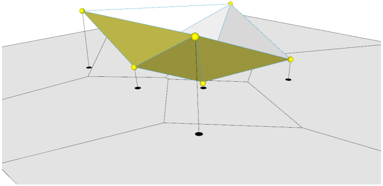


Triangulations locales

$$\forall p \in \mathcal{P}: \qquad T_p(\mathcal{P}) = \mathrm{star}(p, \mathrm{Del}_{|T_p}))$$

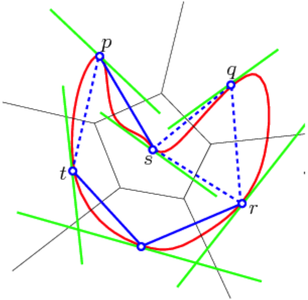
Complexe tangent

$$TC(\mathcal{P}) = \{T_p(\mathcal{P}), p \in \mathcal{P}\}$$



Le complexe de Delaunay tangent

[Freedman 2002], [B.& Flottoto 2004], [B. Ghosh 2014]



+ Sous-complexe de $\mathrm{Del}(\mathcal{P})$: $\mathrm{Del}_{T\mathbb{M}}(\mathcal{P}) \subseteq \mathrm{Del}(\mathcal{P})$

+ Complexité : $\mathrm{Del}_{T\mathbb{M}}(\mathcal{P})$ peuvent être calculés sans calculer $\mathrm{Del}(\mathcal{P})$

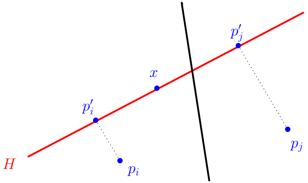
– Incohérences : Un simplexe n'apparait pas nécessairement dans les étoiles de tous ses sommets

  $\Rightarrow \mathrm{Del}_{T\mathbb{M}}(\mathcal{P})$ n'est pas nécessairement une variété PL

Construction de $\mathrm{Del}_{T\mathbb{M}}(\mathcal{P})$

Complexité linéaire en d, exponentielle en k

Si $H \subset \mathbb{R}^d$ est un sous-espace affine de dimension k, $\mathrm{Vor}(\mathcal{P}) \cap H$ est un diagramme de Voronoï pondéré de H



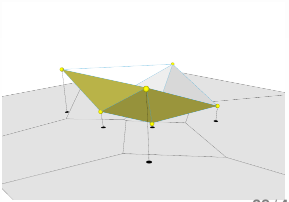
$$\|x - p_i\|^2 \leq \|x - p_j\|^2$$
$$\Leftrightarrow \quad \|x - p_i'\|^2 - \|p_i - p_i'\|^2 \leq \|x - p_j'\|^2 - \|p_j - p_j'\|^2$$

$$\psi_p(p_i) = (p_i', -\|p_i - p_i'\|^2) \qquad \text{(point pondéré)}$$

$$\mathrm{Vor}(\mathcal{P}) \cap H \;=\; \mathrm{Vor}(\psi_p(\mathcal{P})) \qquad \text{(diag. de Laguerre)}$$

Corollaire : construction de $\mathrm{Del}_{T_p}(\mathcal{P})$

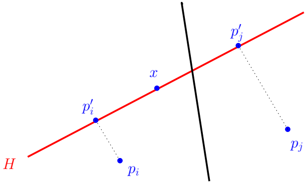
1. projeter $\mathcal{P}$ dans T_p en temps $O(dn)$
2. construire $\mathrm{star}(\psi_p(p_i))$ dans $\mathrm{Del}(\psi_p(p_i)) \subset T_{p_i}$
3. $\mathrm{star}(p_i) \approx \mathrm{star}(\psi_p(p_i))$ (isomorphe)



Construction de $\mathrm{Del}_{T\mathbb{M}}(\mathcal{P})$

Complexité linéaire en d, exponentielle en k

Si $H \subset \mathbb{R}^d$ est un sous-espace affine de dimension k, $\mathrm{Vor}(\mathcal{P}) \cap H$ est un diagramme de Voronoï pondéré de H



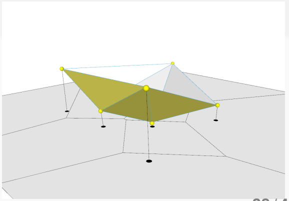
$$\|x - p_i\|^2 \leq \|x - p_j\|^2$$
$$\Leftrightarrow \quad \|x - p'_i\|^2 - \|p_i - p'_i\|^2 \leq \|x - p'_i\|^2 - \|p_j - p'_j\|^2$$

$$\psi_p(p_i) = (p'_i, -\|p_i - p'_i\|^2) \qquad \text{(point pondéré)}$$

$$\mathrm{Vor}(\mathcal{P}) \cap H \quad = \quad \mathrm{Vor}(\psi_p(\mathcal{P})) \qquad \text{(diag. de Laguerre)}$$

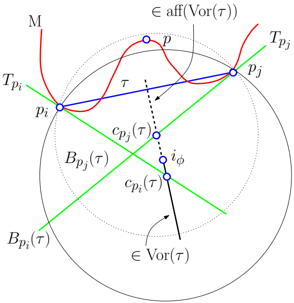
Corollaire : construction de $\mathrm{Del}_{T_p}(\mathcal{P})$

1. projeter $\mathcal{P}$ dans T_p en temps $O(dn)$
2. construire $\mathrm{star}(\psi_p(p_i))$ dans $\mathrm{Del}(\psi_p(p_i)) \subset T_{p_i}$
3. $\mathrm{star}(p_i) \approx \mathrm{star}(\psi_p(p_i))$ (isomorphe)



Configurations témoins

1. $\tau \in \mathrm{star}(p_i) \Rightarrow \quad B(c_{p_i}(\tau) \cap \mathcal{P} = \emptyset$
2. $\tau \notin \mathrm{star}(p_j) \Rightarrow \quad B(c_{p_j}(\tau) \cap \mathcal{P} = \mathcal{C} \neq \emptyset$
3. $\exists p \in \mathcal{C} : \quad \phi = \tau * p \in \mathrm{Del}(\mathcal{P})$
   $(\dim(\phi) = k + 1)$



si le diamètre de τ est $O(\varepsilon)$ et son épaisseur $O(1)$

$\Rightarrow$ c_i et c_j sont proches & $\mathrm{aff}(\tau) \approx T_{p_i} \approx T_{p_j}$

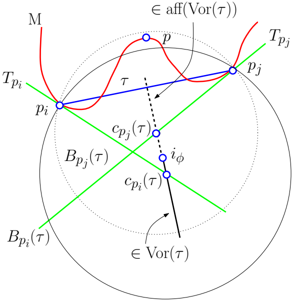
$\Rightarrow$ la protection de $\phi = \tau * p$ est $O(\varepsilon^2)$

ϕ est appelé une configuration témoin (d'une incohérence)

Configurations témoins

1. $\tau \in \mathrm{star}(p_i) \Rightarrow \quad B(c_{p_i}(\tau) \cap \mathcal{P} = \emptyset$
2. $\tau \textcolor{red}{\notin} \mathrm{star}(p_j) \Rightarrow \quad B(c_{p_j}(\tau) \cap \mathcal{P} = \mathcal{C} \neq \emptyset$
3. $\exists p \in \mathcal{C} : \quad \phi = \tau * p \in \mathrm{Del}(\mathcal{P})$

   $(\dim(\phi) = k + 1)$



si le diamètre de τ est $\textcolor{red}{O(\varepsilon)}$ et son épaisseur $\textcolor{red}{O(1)}$

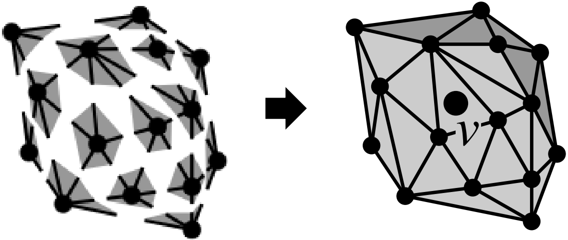
$\Rightarrow \quad c_i$ et c_j sont proches $\quad \& \quad \mathrm{aff}(\tau) \approx T_{p_i} \approx T_{p_j}$

$\Rightarrow \quad$ la protection de $\quad \phi = \tau * p \quad$ est $\quad O(\varepsilon^2)$

ϕ est appelé une configuration témoin (d'une incohérence)

Reconstruction de sous-variétés lisses

1. Pour chaque sommet v, calculer l'étoile $\mathrm{star}(p)$ de p dans $\mathrm{Del}_p(\mathcal{P})$
2. Supprimer les incohérences parmi les étoiles en protégeant les simplexes de $\mathrm{Del}_{T\mathbb{M}}(\mathcal{P})$ et les configurations témoins
3. Réunir les étoiles pour obtenir une triangulation de $\mathcal{P}$



Suppression des incohérentes entre étoiles

Hypotheses

- $\mathbb{M}$: une sous-variété différentiable de portée positive de dim. k $\subset \mathbb{R}^d$
- $\mathcal{P}$: un ε-net de $\mathbb{M}$ pour un ε suffisamment petit
- on connait en chaque point $p \in \mathcal{P}$ l'espace tangent T_p (de dim. k)

Proposition

Sous les hypothèses, l'algorithme termine et supprime toutes les incohérences

$$\Rightarrow \quad \hat{\mathbb{M}} \text{ est une variété PL}$$

Reconstruction de sous-variétés : résultat principal

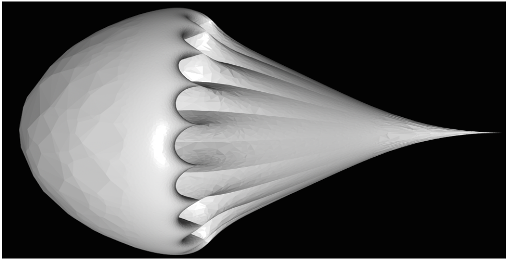
Garanties sur la qualité de l'approximation

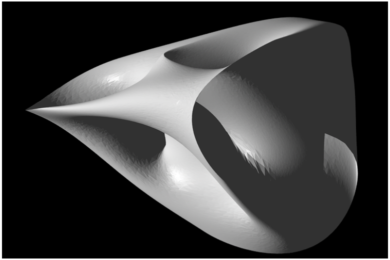
- $\hat{\mathbb{M}}$ est une sous-variété PL de dimension k
- $\hat{\mathbb{M}} \subset$ tub $(\mathbb{M}, O(\varepsilon^2)\mathrm{rch}(\mathbb{M}))$
- Angles entre les facettes et les espaces tangents de $\mathbb{M} = O(\varepsilon)$
- $\hat{\mathbb{M}}$ est homéomorphe à $\mathbb{M}$

Complexité de l'algorithme

- linéaire en d
- exponentielle en k

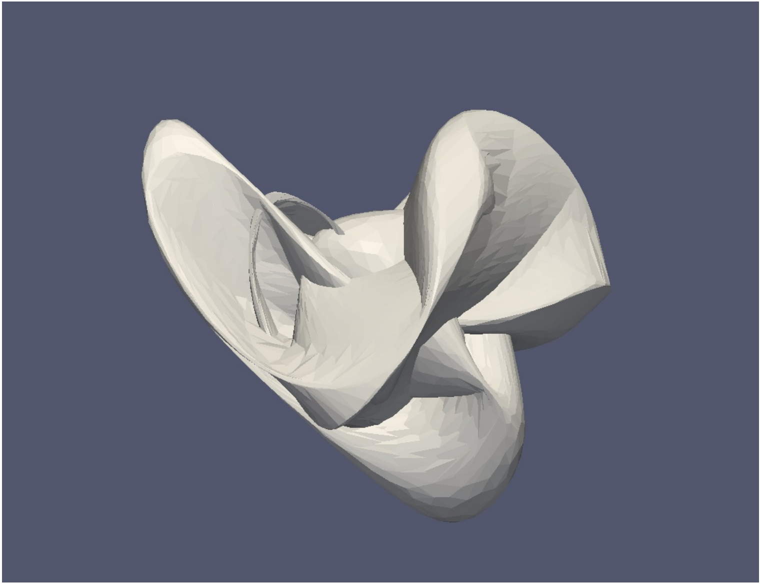
Reconstruction de surfaces de Riemannian plongée dans $\mathbb{R}^8$





Données fournies par A. Alvarez

Triangulation de l'espace des conformations de C_8H_{16}



Triangulations de Delaunay de variétés

Extensions et applications

- Cas d'une sous-variété $\mathbb{M}$ de $\mathbb{R}^d$

  Si $\mathcal{P}$ est un net suffisamment dense et protégé de $\mathbb{M}$, alors

  $$\mathrm{Del}_{\mathbb{R}^d|\mathbb{M}}(\mathcal{P}) = \mathrm{Del}_{T\mathbb{M}}(\mathcal{P}) = \mathrm{Del}_{\mathrm{geo}}(\mathcal{P}) \qquad \text{triangulent } \mathbb{M}$$

- Cas d'une variété riemannienne $\mathbb{M}$ équippée d'une métrique $\mathcal{M}$

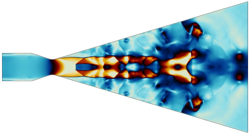
  Si $\mathcal{P}$ est un net suffisamment dense et protégé de $\mathbb{M}$, alors

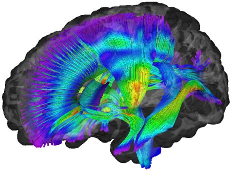
  $\mathrm{Del}_{\mathcal{M}}(\mathcal{P})$ existe et peut être calculé via des triangulations locales dans les espaces tangents (en utilisant l'application exponentielle)

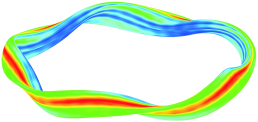
- $\boxed{\text{Z}}$ Une condition sur la densité seule n'est pas suffisante

- Génération de maillages anisotropiques

Phénomènes anisotropes







Maillage anisotrope

- Un complexe simplicial
- Simplexes allongés selon des directions spécifiées

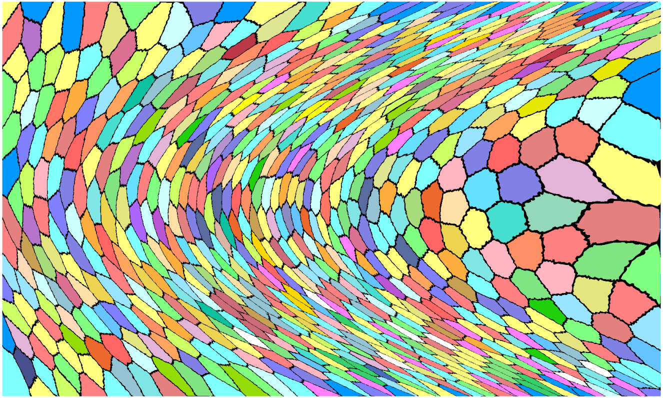
Applications

- Adaptation de maillages (résolution d'EDP pour des phénomènes aniso.)
- Approximation de surfaces liée au tenseur de courbure
- Approximation de fonctions liée à la matrice Hessienne

Approximation de diagrammes de Voronoï riemanniens

Métrique riemannienne g : $x \in \Omega \mapsto G_x$, $\quad G_x$ matrice sym. déf. pos.

Distance anisotrope : $d_{G_x}(a,b) = d_x(a,b) = \sqrt{(a-b)^t G_x (a-b)}$

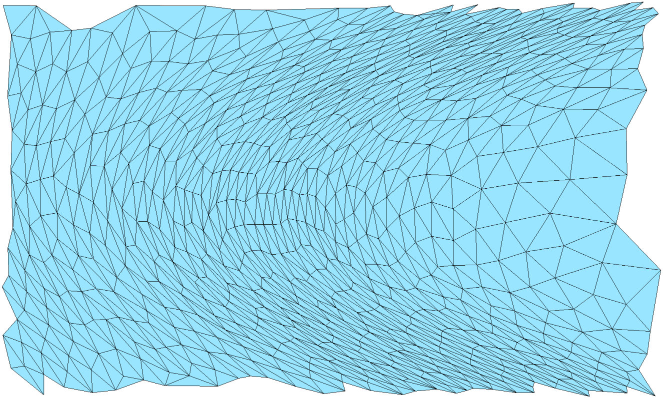


[Boissonnat, Rouxel-Labbé, Wintraeken 2017]

Delaunay triangulation riemannienne

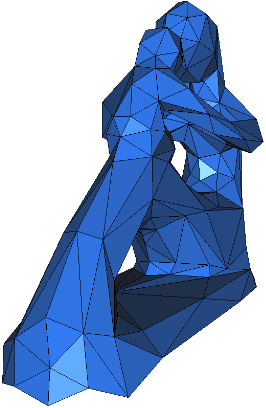
Arêtes droites

Théorème On peut construire un échantillon d'un domaine Ω tel que le nerf du diagramme de Voronoï riemannien soit une triangulation de Ω

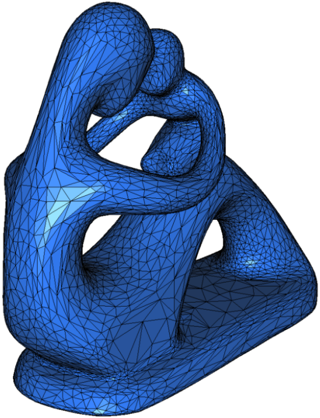


Triangulation de Delaunay riemannienne

Surface PL munie d'une métrique associée à la deuxième forme fondamentale (courbure)



220 sites



6027 sites