Integración de ODEs

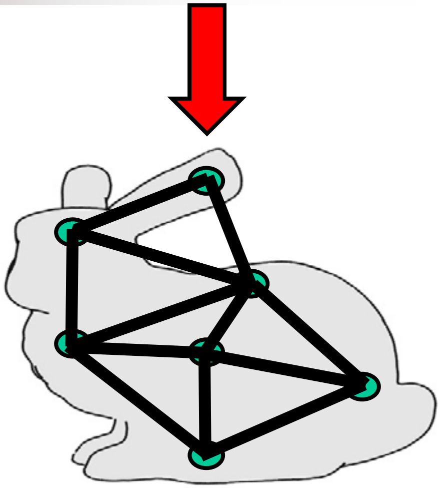
Miguel Ángel Otaduy

Animación Avanzada
30 de Enero de 2014

Índice

- Integración de ODEs
  - Problema estático vs. dinámico.
  - Ecuaciones diferenciales ordinarias (ODEs).
  - Desarrollo de Taylor.
  - Euler explícito.
  - Algoritmo de simulación.
  - Métodos Runge-Kutta.
  - ODEs de 2º orden.
  - Integración implícita.
  - Resolución de sistemas no-lineales.
  - Matriz de rigidez.
  - Aplicación a masa-muelle.

Problema Estático



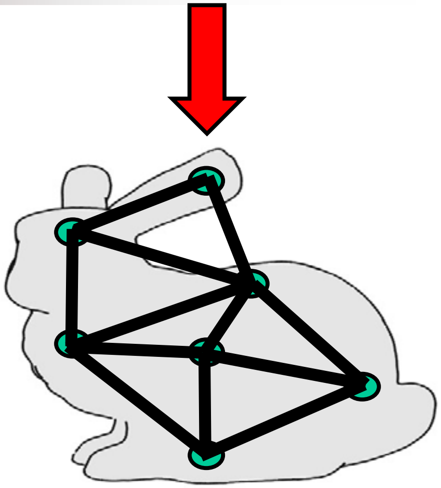
$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{x}} = \sum \mathbf{F}_i(\mathbf{x})$$

$$\downarrow$$

$$\sum \mathbf{F}_i(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$$

- Dadas unas fuerzas externas ("condiciones de contorno"), calcular la deformación resultante.
- ¡Cuidado! Las condiciones de contorno también pueden ser deformaciones (p.ej., deformación 0 en las patas del conejo).

Problema Estático



$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{x}} = \sum \mathbf{F}_i(\mathbf{x})$$

$$\downarrow$$

$$\sum \mathbf{F}_i(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$$

- Pregunta: ¿Qué tipo de ecuaciones hemos de resolver? ¿Cómo se puede hacer?

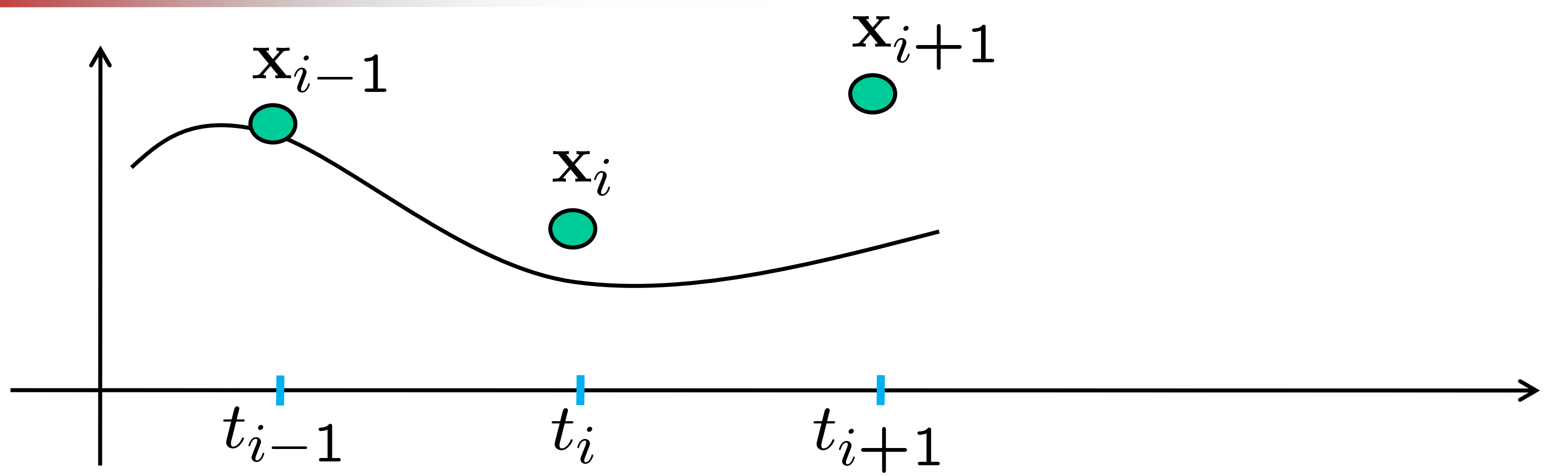
  Sistema de ecuaciones no-lineales. Método de bisección, método de Newton-Raphson…

Problema Dinámico

- Hemos de resolver una ecuación diferencial →
  Calcular la función $\mathbf{x}(t)$
  tal que se cumpla $\mathbf{M}\ddot{\mathbf{x}} = \sum \mathbf{F}_i(\mathbf{x})$
- Solución en simulación:

  Calcular muestras $\{\ldots \mathbf{x}(t_i), \mathbf{x}(t_{i+1}) \ldots\}$
  que aproximen la solución real.

Algoritmo de Simulación



- Partimos del estado en $t = 0$. Dadas las fuerzas, calculamos el estado en $t = \Delta t$, y así sucesivamente.
- La solución puede diverger en el tiempo, pero aproxima la función real localmente.

Ecuaciones Diferenciales Ordinarias (Ordinary Differential Equations)

- ODE general (ecs. con derivadas con respecto a una variable, t):

$$f(t, x(t), x'(t), x''(t) \dots x^{(n)}(t)) = 0$$

Como de costumbre, x puede ser una función vectorial

- ODE lineal:

$$a_0 x^{(n)}(t) \dots + a_{n-1} x'(t) + a_n x(t) + t = 0$$

- Ej: 2ª ley de Newton

$$m x''(t) - \boxed{F(x(t), x'(t), t)} = 0$$

Típicamente, no lineal

Desarrollo de Taylor

- Dada una función (y sus derivadas) conocida en un punto, permite aproximar la función en cualquier otro punto:

$$x(t_0 + \Delta t) = x(t_0) + x'(t_0)\Delta t + \frac{1}{2!}x''(t_0)\Delta t^2 \ldots$$

Si la serie es infinita, el valor es exacto!

Euler Explícito

- ODE de primer orden:

$$x'(t) = f(x(t), t)$$

- Condiciones iniciales: conocemos $x(t_0) = x_0$

- Aproximación por Taylor en $t_1 = t_0 + \Delta t$

$$\boxed{x(t_0 + \Delta t) = x(t_0) + x'(t_0)\Delta t}$$

Serie truncada!

Euler explícito

- ¡Ya está! Tenemos una fórmula que nos permite integrar ODEs de primer orden.

Euler Explícito

1) Calculamos la derivada:

$$x'_0 = x'(t_0) = f(x_0, t_0)$$

2) Integramos:

$$x_1 = x(t_1) = x_0 + x'_0 \Delta t$$

3) Calculamos la derivada:

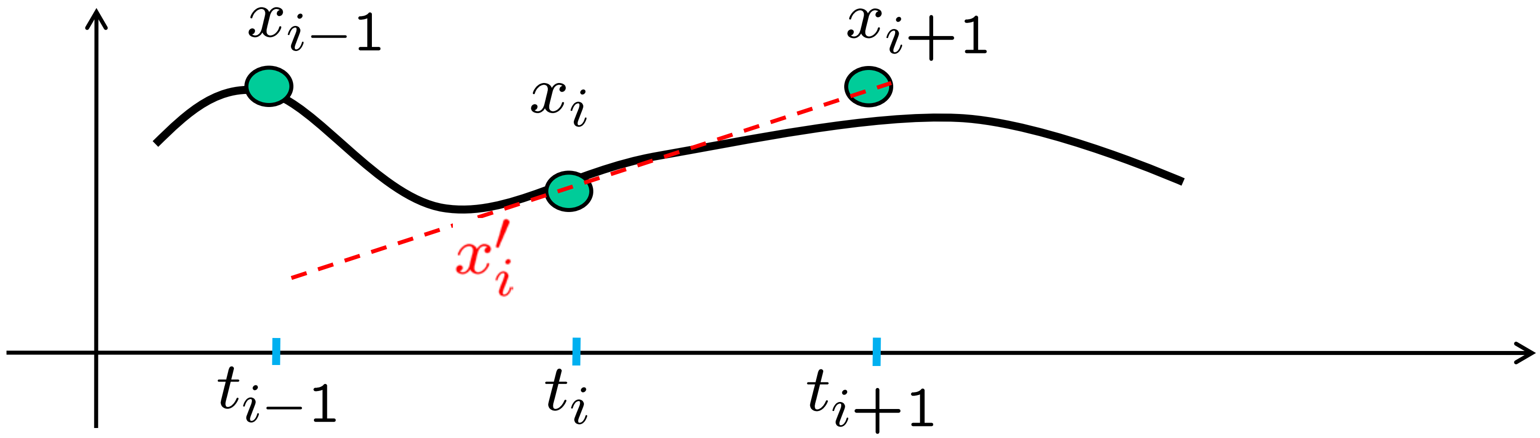
$$x'_1 = x'(t_1) = f(x_1, t_1)$$

4) Integramos:

$$x_2 = x(t_2) = x_1 + x'_1 \Delta t$$

etc.

Euler Explícito



- Se calcula el siguiente valor tomando la aproximación lineal de la función (la tangente a la función).
- El error se analiza mediante la serie de Taylor:

$$x(t_0 + \Delta t) = x(t_0) + x'(t_0)\Delta t + \boxed{O(\Delta t^2)}$$

Error de truncamiento

Integración de la 2ª Ley de Newton

- ODE de 2º orden:

$$m \cdot x''(t) = F(x(t), x'(t), t)$$

- Descomposición en 2 ODEs de 1er orden:

$$\begin{aligned} m \cdot v'(t) &= F(x(t), v(t), t) \\ x'(t) &= v(t) \end{aligned}$$

- Integración con Euler explícito:

$$\begin{aligned} v(t+\Delta t) &= v(t) + \Delta t \cdot v'(t) &&= v(t) + \Delta t \cdot \tfrac{1}{m} F(x(t), v(t), t) \\ x(t+\Delta t) &= x(t) + \Delta t \cdot x'(t) &&= x(t) + \Delta t \cdot v(t) \end{aligned}$$

El caso multidimensional no comporta mayor dificultad

Euler Simpléctico

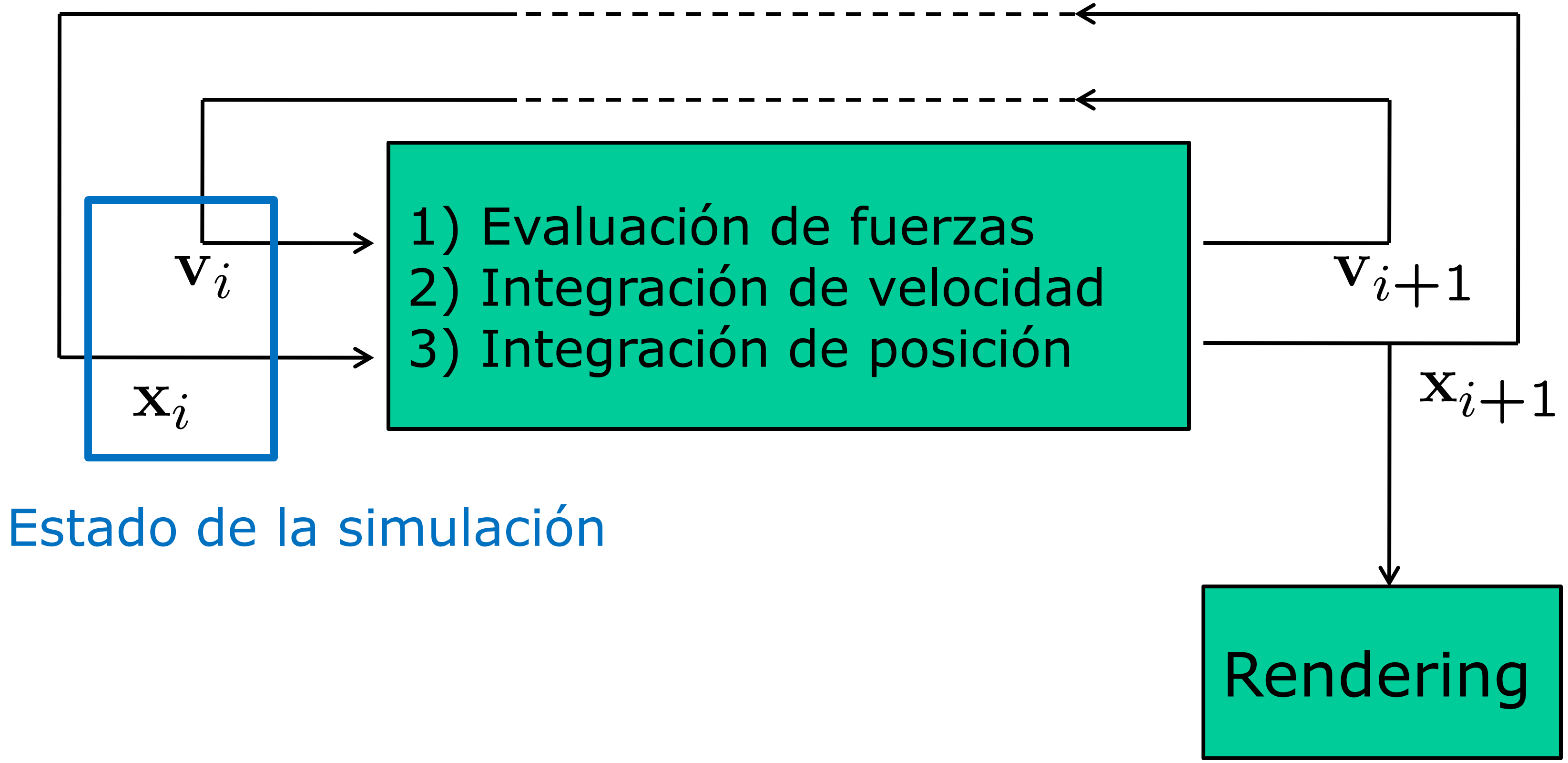
- En la integración de posición, se aprovecha que la nueva velocidad ya está calculada:

$$
\begin{aligned}
v(t+\Delta t) &= v(t) + \Delta t \cdot \frac{1}{m} F(x(t), v(t), t) \\
x(t+\Delta t) &= x(t) + \Delta t \cdot v(t+\Delta t)
\end{aligned}
$$

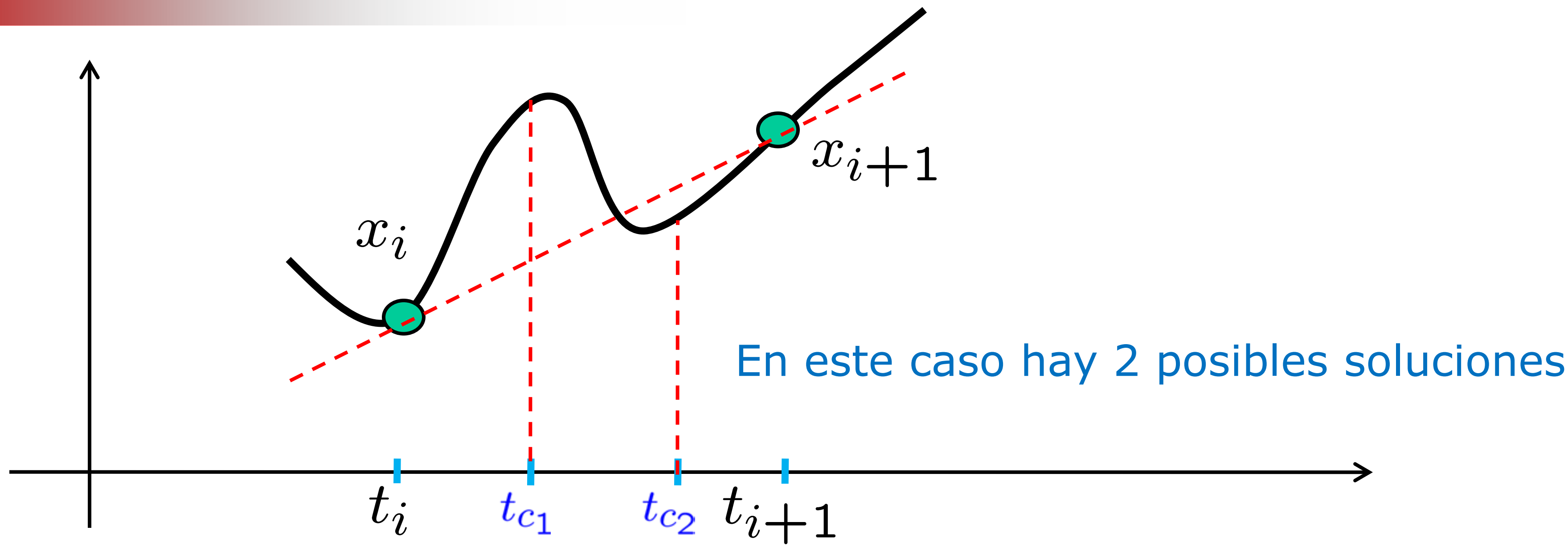
Alterna la solución de posición y velocidad.

Mismo coste que Euler explícito.
Mismo orden de error, pero mejor conservación de energía.
¡Cuidado! A veces se le llama 'semi-implícito', pero ese término se utiliza para describir varios tipos de métodos.

Algoritmo de Simulación (Euler Explícito/Simpléctico)



Métodos Runge-Kutta

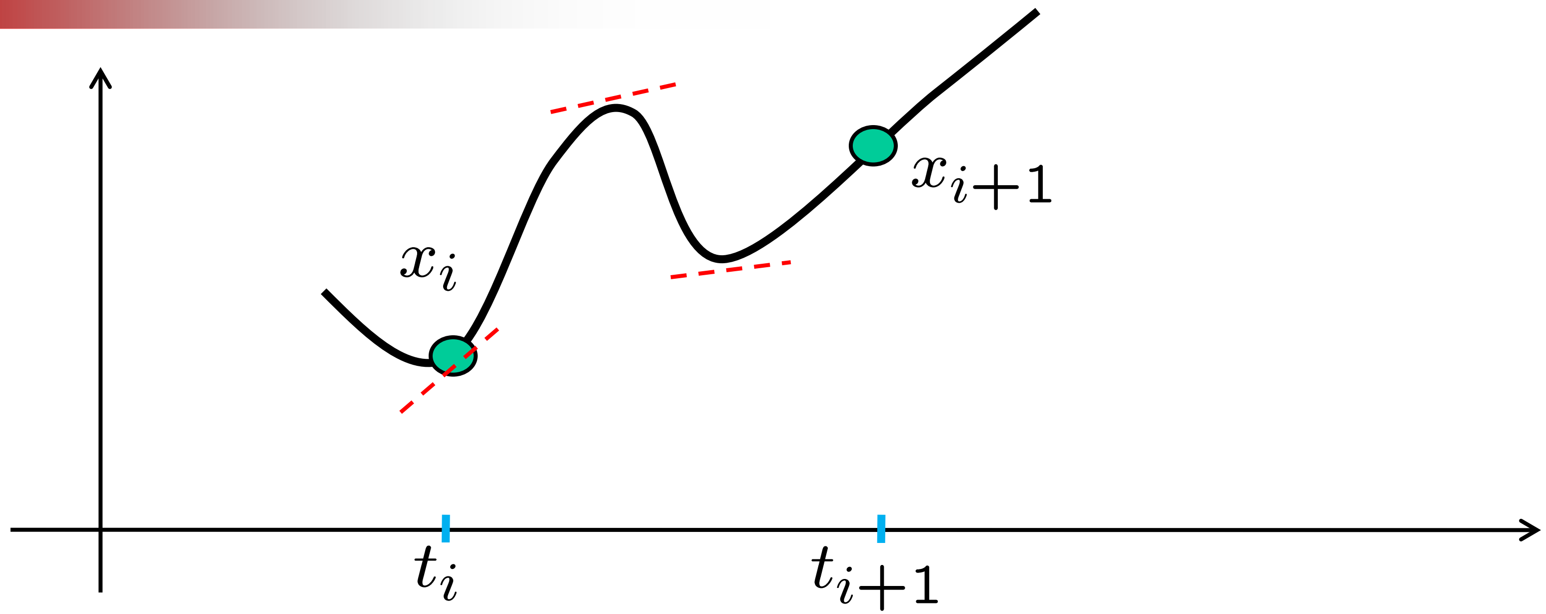


- Desarrollo de Taylor:

$$x(t_{i+1}) = x(t_i) + x'(t_c)(t_{i+1} - t_i)$$

El resultado es *exacto* si evaluamos la derivada
en un punto $t_c \in [t_i, t_{i+1}]$.
Pero no conocemos t_c ☹

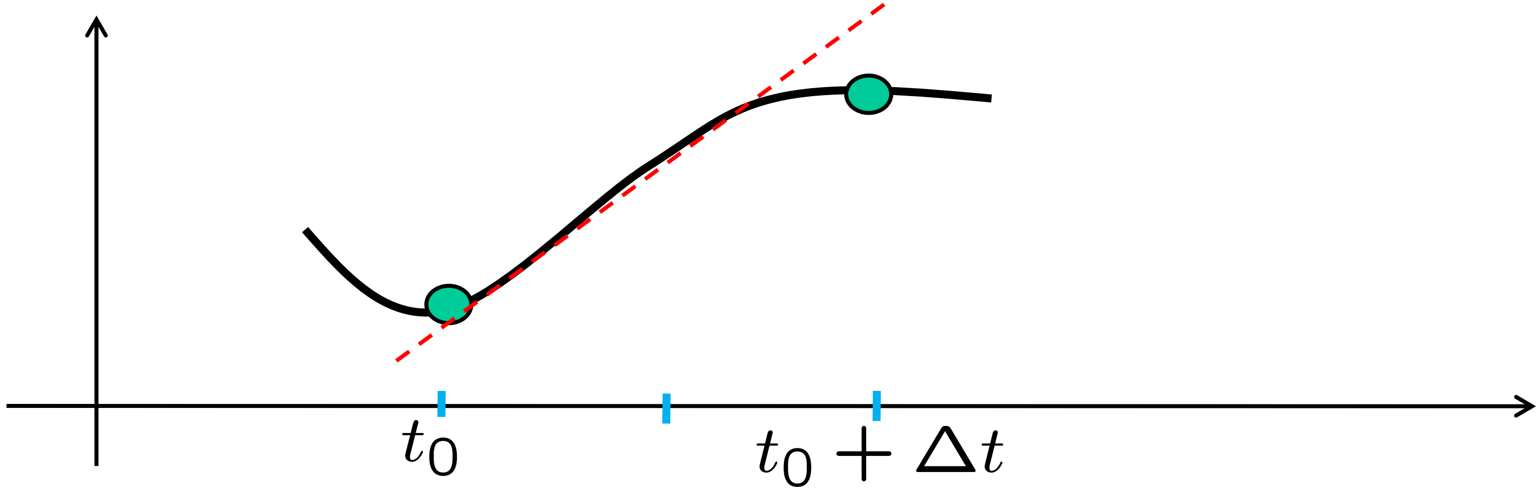
Métodos Runge-Kutta



- Métodos Runge-Kutta:

Evalúan la derivada varias veces para tratar de aproximar $x'(t_c)$.
Euler explícito es un método R-K de orden 1.

Métodos Runge-Kutta



- Método del Punto Medio (Midpoint):

$$\begin{aligned} x(t_0 + \tfrac{\Delta t}{2}) &= x(t_0) + x'(t_0)\tfrac{\Delta t}{2} \\ x(t_0 + \Delta t) &= x(t_0) + x'(t_0 + \tfrac{\Delta t}{2})\Delta t \end{aligned}$$

Primero se estima una derivada en el punto medio, que se usa luego para realizar la integración final.
ODEs de 2º orden (Newton): se aplica a posición y velocidad.

Resumen Métodos R-K

Método	Cálculos de derivadas	Error
Euler explícito	1	$O(h^2)$
Midpoint	2	$O(h^3)$
Heun	2	$O(h^3)$
Runge-Kutta 4	4	$O(h^5)$

En animación basada en física, es extraño ver métodos complejos como RK4, porque el paso de integración ($\Delta t = h$) viene limitado a menudo por otros factores (p.ej., tratamiento de colisiones).

Métodos para ODEs de 2º Orden

- Los métodos R-K integran ODEs de 1er orden. Aproximan la derivada basándose en diversas aplicaciones del desarrollo de Taylor.
- Con ODEs de 2º orden, los métodos R-K simplemente las descomponen en 2 ODEs de 1er orden.
- ¿Por qué no realizar desarrollos de Taylor hasta la 2ª derivada y trabajar directamente con la ODE de 2º orden?

Método de Verlet

- 2 desarrollos de Taylor para posición:

$$\begin{aligned} x(t+h) &= x(t) + v(t)h + \tfrac{1}{2}a(t)h^2 + \tfrac{1}{6}x'''(t)h^3 + O(h^4) \\ x(t-h) &= x(t) - v(t)h + \tfrac{1}{2}a(t)h^2 - \tfrac{1}{6}x'''(t)h^3 + O(h^4) \end{aligned}$$

- La suma da lugar a la integración de posición:

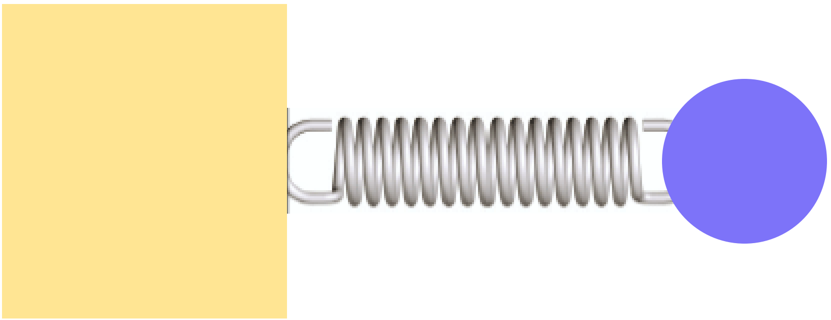
$$x(t+h) = 2x(t) - x(t-h) + a(t)h^2 + O(h^4)$$

Por cancelación de términos, tenemos integración de posición con error $O(h^4)$ pero sólo 1 cálculo de fuerzas!

- Y para velocidad:

$$v(t+h) = \frac{x(t+h)-x(t-h)}{2h} + O(h^2)$$

(In)estabilidad



$$F = -k \cdot x$$

$$m\ddot{x} = F$$

$$\begin{aligned} v(0) &= 0 & x(0) &= x_0 \\ v(h) &= -h\frac{k}{m}x_0 & x(h) &= x_0 - h^2\frac{k}{m}x_0 \end{aligned}$$

- Pregunta: ¿Para qué valor de *h* gana energía el muelle? (Es decir, se hace inestable)

$$h = \sqrt{2\frac{m}{k}}$$

(In)estabilidad

- En animación en tiempo real, el mayor problema de los métodos explícitos no es su error, sino la posibilidad de que la simulación se vuelva inestable.
- Análisis de estabilidad: se plantea la integración numérica como una recursión, y se analiza si converge (análisis de valores propios, etc.)

Euler Implícito

- Euler explícito:

$$x(t+h) = x(t) + x'(t)h$$

- Aproximando por Taylor al revés:

$$x(t) = x(t+h) - x'(t+h)h$$

- Reordenando los términos:

$$\boxed{x(t+h) = x(t) + x'(t+h)h}$$

Euler implícito

Euler Implícito

- ODE de 1er orden:

$$x'(t) = f(x(t), t)$$

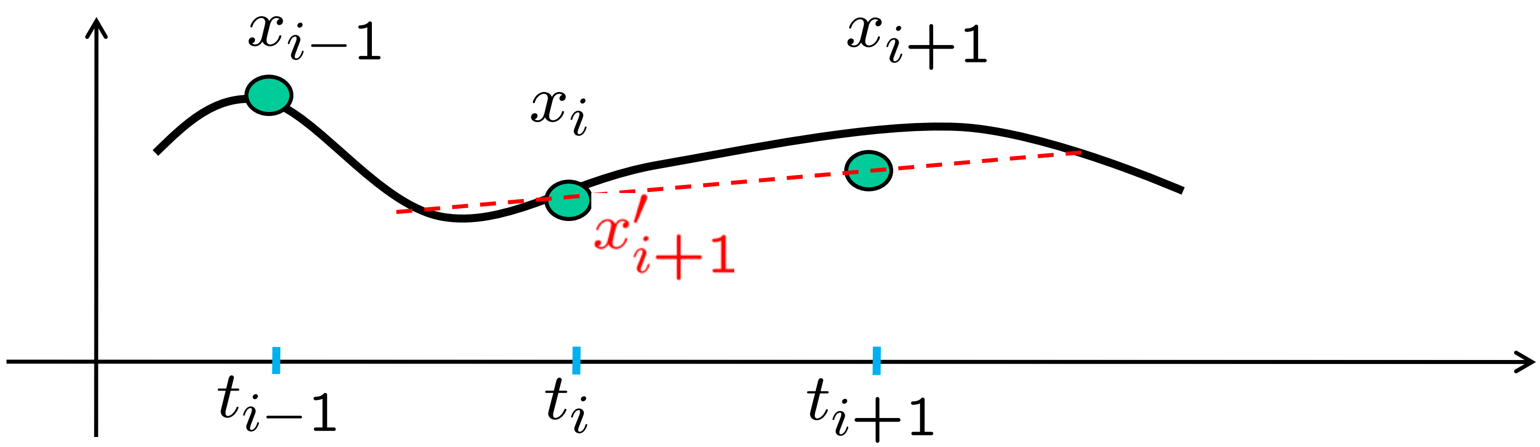
- Aplicando Euler implícito:

$$x(t+h) = x(t) + f(x(t+h), t+h)h$$

- ¿Hay alguna dificultad?

No podemos evaluar f, porque depende de valores sin calcular.
Además, f es generalmente no-lineal.
Requiere, p.ej., método de Newton…

Euler Implícito



- Para la aproximación lineal, se intenta tomar la derivada en el valor de destino.
- Intuitivamente, hace pensar que la función no crecerá sin límite → más estable.

Euler (Semi-)Implícito

- Linealizamos la derivada de la ODE:

$$
\begin{aligned}
f(x(t+h), t+h) &= f(x(t), t) + \\
&+ \frac{\partial f}{\partial x}(x(t+h) - x(t)) + \frac{\partial f}{\partial t} h
\end{aligned}
$$

- Sustituimos en la integración con Euler impl.:

$$
\begin{aligned}
x(t+h) = x(t) + f(x(t), t)h + \\
\frac{\partial f}{\partial x}(x(t+h) - x(t))h + \frac{\partial f}{\partial t} h^2
\end{aligned}
$$

- Reordenando términos

$$
(I - h\boxed{\frac{\partial f}{\partial x}})(x(t+h) - x(t)) = f(x(t), t)h + \frac{\partial f}{\partial t} h^2
$$

Derivada de un vector de funciones con respecto a un vector (en el caso multidimensional)

Euler (Semi-)Implícito

- En el caso multidimensional, se ha de resolver un sistema lineal de ecuaciones.
- ¿Cómo se aplica a la 2ª ley de Newton (ODE de 2º orden)?
  - Se han de linealizar las fuerzas, y el cálculo de nuevas velocidades requiere la resolución de un sistema lineal.
  - El cálculo de posición es trivial (ya es lineal).

Euler (Semi-)Implícito

- Ley de Newton multidimensional (descompuesta en ODEs de 1er orden):

$$
\begin{aligned}
\mathbf{M}\dot{\mathbf{v}} &= \mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{v}) \\
\dot{\mathbf{x}} &= \mathbf{v}
\end{aligned}
$$

- Aplicación de Euler implícito:

$$
\begin{aligned}
\mathbf{x}(t+h) &= \mathbf{x}(t) + h\mathbf{v}(t+h) \\
\mathbf{v}(t+h) &= \mathbf{v}(t) + h\mathbf{a}(t+h)
\end{aligned}
$$

- Multiplicando la 2ª ec. por la matriz de masas:

$$
\begin{aligned}
\mathbf{x}(t+h) &= \mathbf{x}(t) + h\mathbf{v}(t+h) \\
\mathbf{M}\mathbf{v}(t+h) &= \mathbf{M}\mathbf{v}(t) + h\mathbf{F}(\mathbf{x}(t+h), \mathbf{v}(t+h))
\end{aligned}
$$

Euler (Semi-)Implícito

- Linealizamos las fuerzas:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}(t+h),\mathbf{v}(t+h)) = \mathbf{F}(\mathbf{x}(t),\mathbf{v}(t)) + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x}(t+h)-\mathbf{x}(t)) + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{v}}(\mathbf{v}(t+h)-\mathbf{v}(t))$$

- Sustituimos las fuerzas y la integración de posición en la ecuación de velocidad. Después de reordenar:

$$(\mathbf{M} - h\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{v}} - h^2\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{x}})\mathbf{v}(t+h) = (\mathbf{M} - h\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{v}})\mathbf{v}(t) + h\mathbf{F}(\mathbf{x}(t),\mathbf{v}(t))$$

Euler (Semi-)Implícito

- También se suele escribir:

$$(\mathbf{M} + h\boxed{\mathbf{D}} + h^2\boxed{\mathbf{K}})\mathbf{v}(t+h) = (\mathbf{M} + h\mathbf{D})\mathbf{v}(t) + h\mathbf{F}(\mathbf{x}(t), \mathbf{v}(t))$$

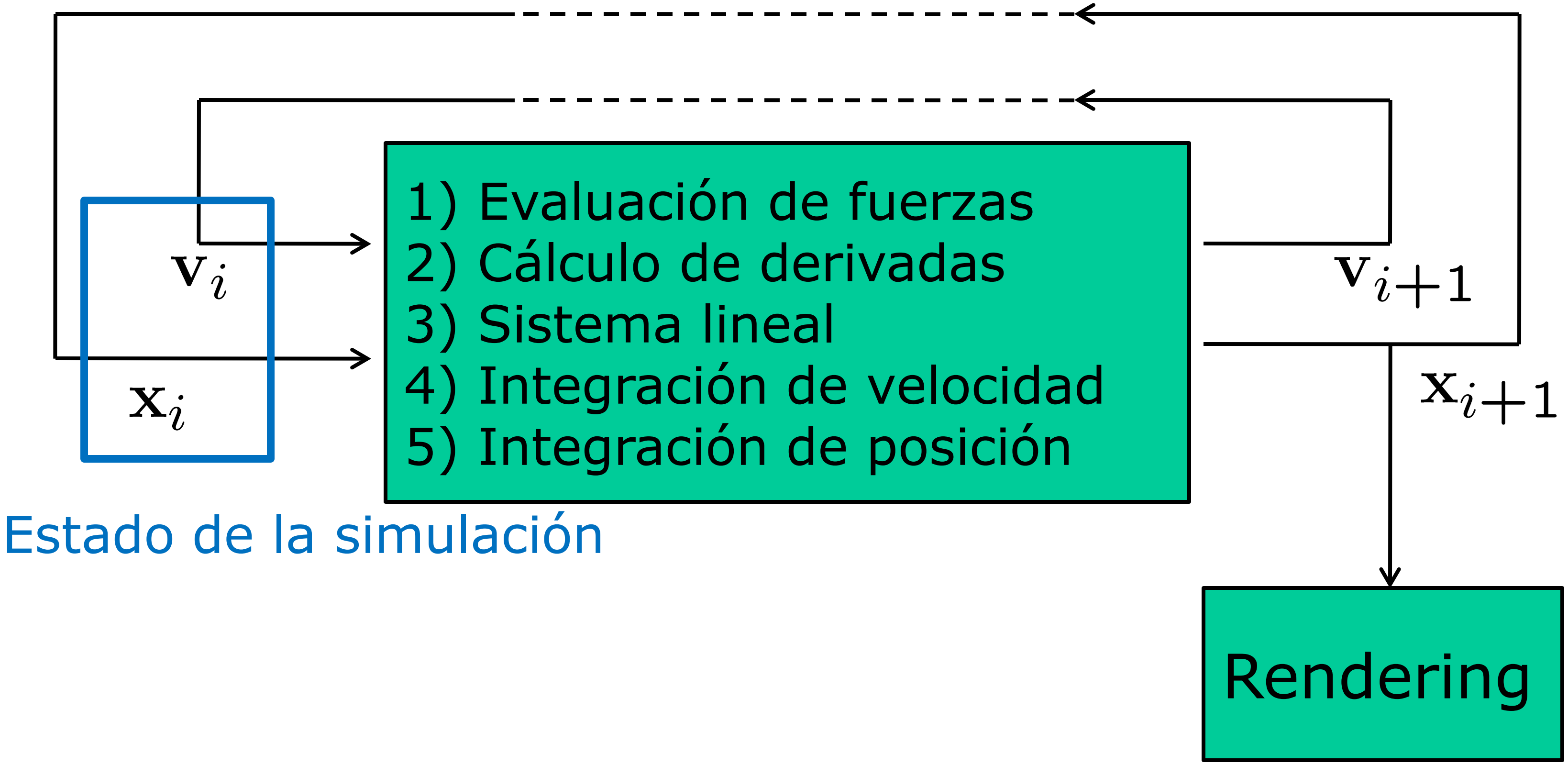
Matriz de amortiguamiento

$$\mathbf{D} = -\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{v}}$$

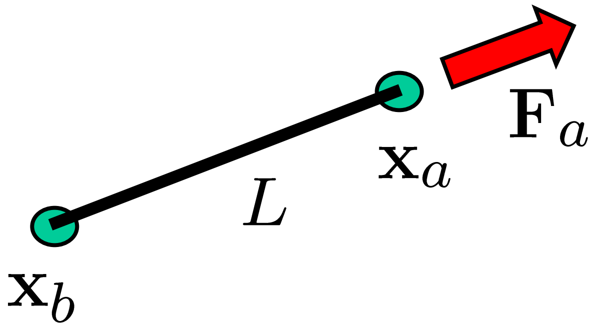
Matriz de rigidez

$$\mathbf{K} = -\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{x}}$$

Algoritmo de Simulación (Euler Implícito)



Aplicación a Masa-Muelle



$$\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{x}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{F}_a}{\partial \mathbf{x}_a} & \frac{\partial \mathbf{F}_a}{\partial \mathbf{x}_b} \\ \frac{\partial \mathbf{F}_b}{\partial \mathbf{x}_a} & \frac{\partial \mathbf{F}_b}{\partial \mathbf{x}_b} \end{pmatrix}$$

Se han de derivar fuerzas con respecto a todas las variables del vector posición

Aplicación a Masa-Muelle

- ¿Cuál es el tamaño de la matriz de rigidez?

  3n x 3n

- ¿Qué representa cada término?

  Derivada de fuerza con respecto a posición

- ¿Qué términos no son 0?

  Bloques 3x3 en la diágonal (representan los nodos), más bloques 3x3 en posición (i,j) para todos aquellos muelles entre nodos i-j.

Aplicación a Masa-Muelle

- Si recordamos la formulación energética:

$$\mathbf{F} = -\nabla_{\mathbf{x}} E$$

- Entonces, la matriz de rigidez es:

$$\mathbf{K} = -\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial^2 E}{\partial \mathbf{x}^2}$$

- Es la derivada segunda de la energía elástica.

Resolución del Sistema Lineal

- Sistema a resolver:

$$\mathbf{A}\mathbf{v}(t+h) = \mathbf{b}$$

$$\mathbf{A} = \mathbf{M} + \mathbf{hD} + \mathbf{h}^2\mathbf{K}$$

$$\mathbf{b} = (\mathbf{M} + \mathbf{hD})\mathbf{v}(\mathbf{t}) + \mathbf{hF}(\mathbf{x}(\mathbf{t}), \mathbf{v}(\mathbf{t}))$$

- Generalmente, la matriz de rigidez es dispersa, simétrica y definida positiva → El sistema lineal de Euler implícito se resuelve eficientemente (gradiente conjugado, factorización de Cholesky…)

Referencias

- Notas de Baraff y Witkin.
- Libro de Erleben.