

Integración de ODEs

Miguel Ángel Otaduy

Animación Avanzada
20 de Septiembre de 2010

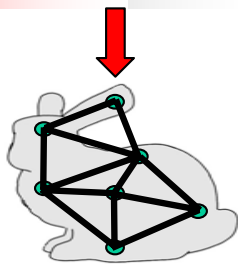


Índice

- 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



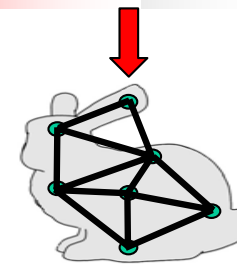
$$M\ddot{x} = \sum F_i(x)$$

$$\sum F_i(x) = 0$$

- 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



$$M\ddot{x} = \sum F_i(x)$$

$$\sum F_i(x) = 0$$

- Pregunta: ¿Qué tipo de ecuaciones hemos de resolver? ¿Cómo se puede hacer?
Sistema de ecuaciones no-lineales. Método de bisección, método de Newton-Raphson...

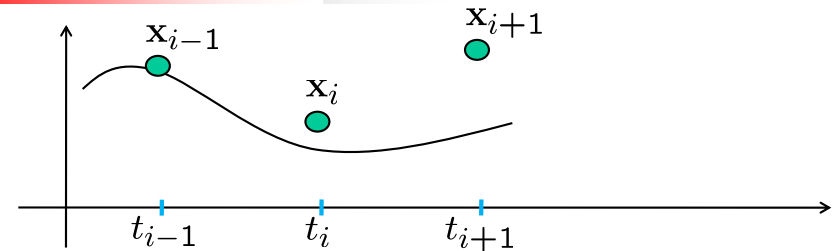


Problema Dinámico

- Hemos de resolver una ecuación diferencial \rightarrow
Calcular la función $x(t)$
tal que se cumpla $M\ddot{x} = \sum F_i(x)$
- Solución en simulación:
Calcular muestras $\{\dots x(t_i), x(t_{i+1}) \dots\}$
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:

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

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 $t_1 = t_0 + \Delta t$

$$x(t_0 + \Delta t) = x(t_0) + x'(t_0)\Delta t \quad \text{Serie truncada!}$$

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:

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

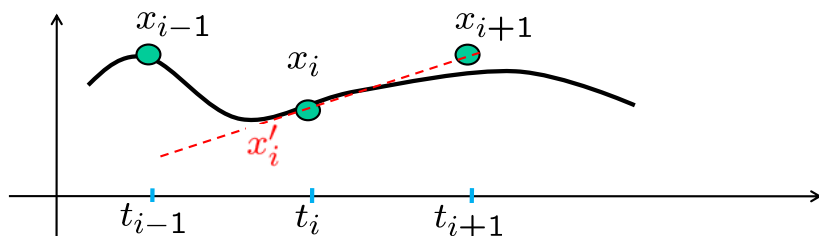
- 4) Integramos:

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

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:

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

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:

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

$$x'(t) = v(t)$$

- Integración con Euler explícito:

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

El caso multidimensional no comporta mayor dificultad



Euler Explícito Modificado

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

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

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \Delta t \cdot v(t + \Delta t)$$

Alterna la solución de posición y velocidad.

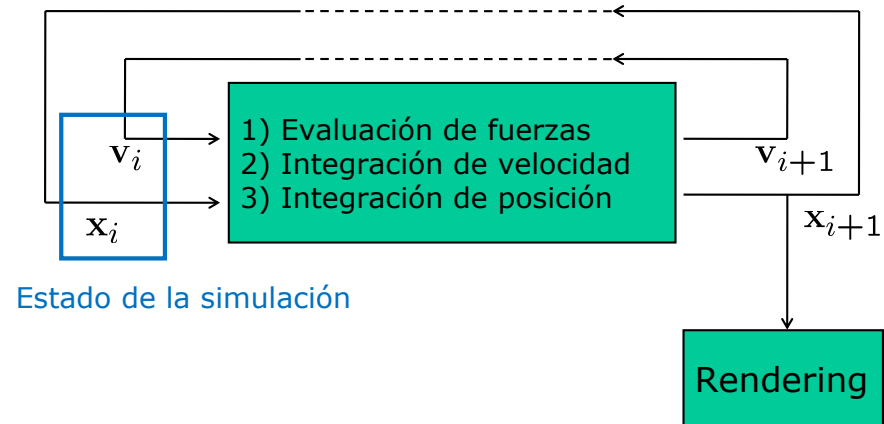
Mismo coste que Euler explícito.

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.



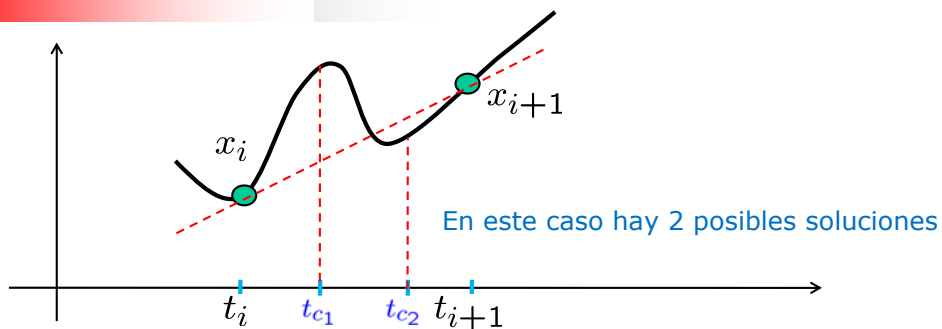
Algoritmo de Simulación (Euler Explícito)



Estado de la simulación



Métodos Runge-Kutta



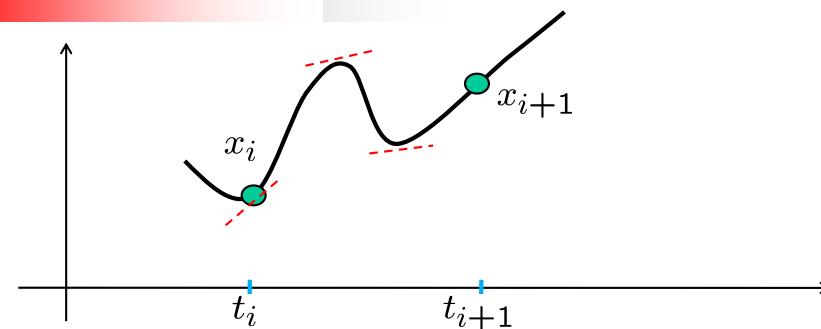
- Desarrollo de Taylor:

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

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

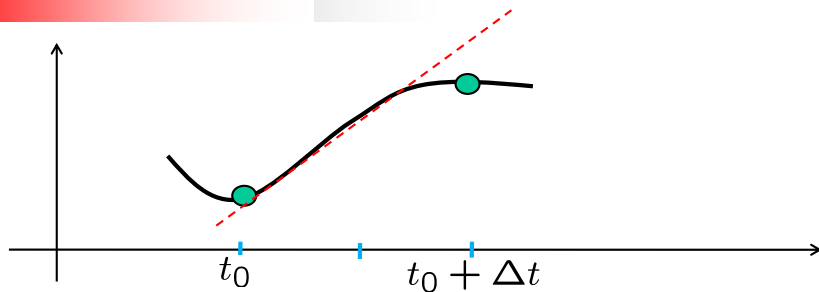


- Métodos Runge-Kutta:

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):

$$x(t_0 + \frac{\Delta t}{2}) = x(t_0) + x'(t_0)\frac{\Delta t}{2}$$

$$x(t_0 + \Delta t) = x(t_0) + x'(t_0 + \frac{\Delta t}{2})\Delta t$$

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 IV	4	$O(h^5)$

En animación basada en física, es extraño ver métodos complejos como R-K IV, 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 1º 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 1º 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:

$$x(t+h) = x(t) + v(t)h + \frac{1}{2}a(t)h^2 + \frac{1}{6}x'''(t)h^3 + O(h^4)$$

$$x(t-h) = x(t) - v(t)h + \frac{1}{2}a(t)h^2 - \frac{1}{6}x'''(t)h^3 + O(h^4)$$

- La suma da lugar a la integración de posición:

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

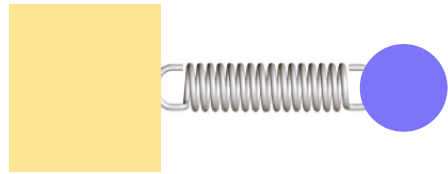
Por cancelación de términos, tenemos integración de posición con error $O(h^4)$ pero sólo 1 cálculo de fuerzas!

- 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:

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

Euler implícito



Euler Implícito

- ODE de 1er orden:

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

- Aplicando Euler implícito:

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

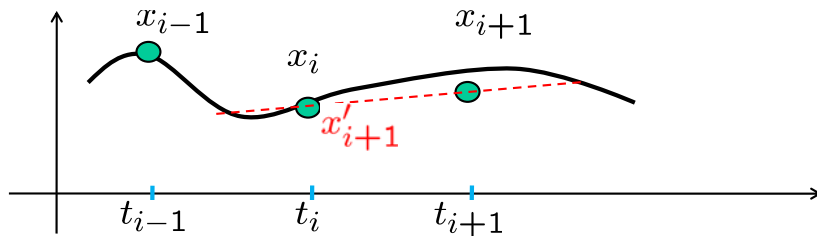
- ¿Hay alguna dificultad?

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 \rightarrow más estable.



Euler (Semi-) Implícito

- Linealizamos la derivada de la ODE:

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

- Sustituimos en la integración con Euler impl.:

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

- Reordenando términos

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

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 1º orden):

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

- 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:

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



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:

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



Euler (Semi-)Implícito

- También se suele escribir:

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

Matriz de amortiguamiento

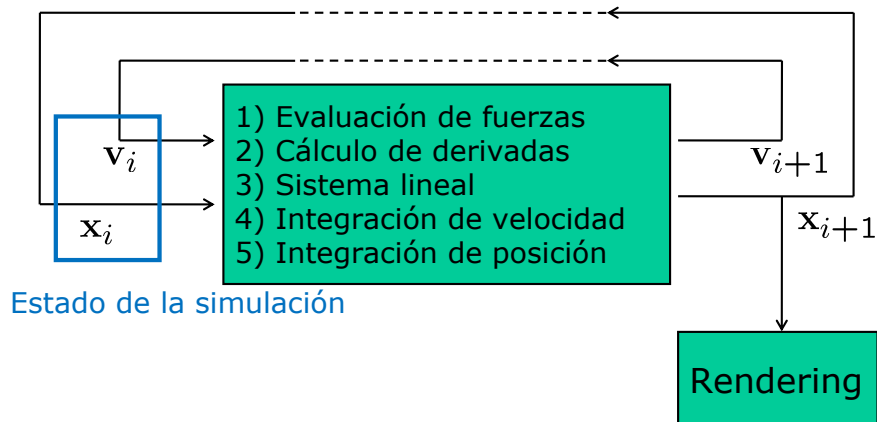
$$\mathbf{D} = -\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{v}}$$

Matriz de rigidez

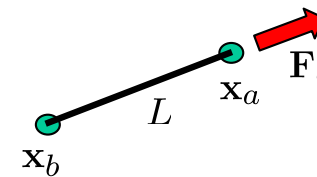
$$\mathbf{K} = -\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{x}}$$



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?
 $3n \times 3n$
- ¿Qué representa cada término?
Derivada de fuerza con respecto a posición
- ¿Qué términos no son 0?
Bloques 3×3 en la diagonal (representan los nodos), más bloques 3×3 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:
$$A\mathbf{v}(t+h) = \mathbf{b}$$
$$A = M + hD + h^2K$$
$$\mathbf{b} = (M + hD)\mathbf{v}(t) + h\mathbf{F}(\mathbf{x}(t), \mathbf{v}(t))$$
- 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.

