

PA081: Programování numerických výpočtů

6. Simulace dynamických dějů

jaro 2016

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

- ▶ objekty reálného světa kolem nás
 - ▶ velká část počítačových her
- ▶ vesmírná tělesa
- ▶ plyn a kapaliny
 - ▶ předpověď počasí
 - ▶ simulace požárů, povodní, ...
- ▶ elektrický proud
- ▶ interakce atomů a molekul

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semíimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

- ▶ fyzikální zákony
 - ▶ postihují principy chování reálného světa
 - ▶ jejich dodržení v simulaci dodává důvěryhodnost

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

- ▶ fyzikální zákony
 - ▶ postihují principy chování reálného světa
 - ▶ jejich dodržení v simulaci dodává důvěryhodnost
- ▶ Newtonovy
 1. setrvačnosti
 2. síly - $F = ma$
 3. akce a reakce
- ▶ termodynamické
 1. *Celková energie izolovaného systému zůstává konstantní.*
 2. *Entropie izolovaného systému nikdy neklesá.*

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

2. termodynamický zákon

- ▶ energie má snahu rovnoměrně se rozptýlit.
- ▶ psychologické vnímání času je souhrn zkušeností s jeho projevy.
 - ▶ pozpátku puštěný film poznáme na první pohled.
 - ▶ nelze zcela snadno vyjádřit proč.

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

2. termodynamický zákon

- ▶ energie má snahu rovnoměrně se rozptýlit.
- ▶ psychologické vnímání času je souhrn zkušeností s jeho projevy.
 - ▶ pozpátku puštěný film poznáme na první pohled.
 - ▶ nelze zcela snadno vyjádřit proč.
- ▶ dovoluje uchovávat energii (palivo/potrava + kyslík)
 - ▶ de-facto podmínka existence života
 - ▶ ale také příčina smrti

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

2. termodynamický zákon

- ▶ energie má snahu rovnoměrně se rozptýlit.
- ▶ psychologické vnímání času je souhrn zkušeností s jeho projevy.
 - ▶ pozpátku puštěný film poznáme na první pohled.
 - ▶ nelze zcela snadno vyjádřit proč.
- ▶ dovoluje uchovávat energii (palivo/potrava + kyslík)
 - ▶ de-facto podmínka existence života
 - ▶ ale také příčina smrti
- ▶ příčina Murphyho zákonů
- ▶ více viz <http://secondlaw.oxy.edu>

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

- ▶ stavové proměnné
 - ▶ popisují, v jakém stavu se systém nachází
 - ▶ poloha, rychlost, ...
- ▶ jejich změny v čase
 - ▶ jak na sebe stavové proměnné působí vzájemně (rychlost ~ změna polohy)
 - ▶ jak se projevují vnější impulsy (síla mění rychlost)
- ▶ diferenciální rovnice (obyčejné)
 - ▶ vztah stavových proměnných a jejich časových derivací
 - ▶ postupným řešením (integrací) získáme vývoj systému v čase

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

- ▶ analytické
 - ▶ jen speciální případy
 - ▶ i tak komplikované metody
- ▶ dopředná (explicitní) Eulerova metoda
 - ▶ použita v následujících příkladech
 - ▶ v praxi téměř nepoužitelná (viz dále)
- ▶ zpětná (implicitní) Eulerova metoda
- ▶ semiimplicitní metody
- ▶ komplexnější metody

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

Padající kulička

- ▶ stavové proměnné: výška z , rychlost pádu v
- ▶ změna výšky odpovídá rychlosti: $dz = -v dt$
- ▶ změna rychlosti - gravitační síla: $dv = g dt$
- ▶ korektní zápis systému rovnic

$$dz/dt = -v \quad dv/dt = g$$

- ▶ v kódu přímočará náhrada dt konečným krokem

```
float  z = 2, v = 0;
float  dt = 0.001, g = 9.81;

while (...) {
    z += -v * dt;
    v += g * dt;
    ...
}
```

Dynamické
systémyDiferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádůVýpočet
integráluDynamika
pevného tělesaKomplexní
příklad

- ▶ hmotný bod na pružině, pohyb jen v jednom směru
 - ▶ vše ostatní zanedbáno
- ▶ změna polohy y odpovídá rychlosti, tj. hybnost/hmotnost

$$dy = \frac{P}{m} dt$$

- ▶ změna hybnosti odpovídá působící síle, ta je úměrná vychýlení pružiny

$$dP = F = -ky dt$$

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálů

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

Pružinový oscilátor

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semíimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

```
float    k = 1.3, m = 0.2, p = 1, y = 0, t = 0,  
         dt = 0.001;  
  
while (...) {  
    float p1 = p - k*y*dt,  
          y1 = y + p/m*dt;  
  
    t += dt;  
    p = p1; y = y1;  
}
```

- ▶ poloha \mathbf{x} , nenulová počáteční rychlost \mathbf{v}
 - ▶ pro zjednodušení vektory ve 2D
- ▶ změna polohy odpovídá rychlosti: $d\mathbf{x} = \mathbf{v}dt$
- ▶ změna rychlosti dána gravitačním působením Slunce:

$$d\mathbf{v} = -G \frac{\mathbf{x}}{\|\mathbf{x}\|} \frac{m_k m_S}{\|\mathbf{x}\|^2} dt$$

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

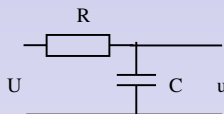
Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

Jednoduchý elektrický obvod

- ▶ vstupním napětím U nabíjíme kondenzátor přes odpor



- ▶ výstupní napětí je úměrné kapacitě a náboji: $u = q/C$
- ▶ změna náboje je velikost proudu: $dq/dt = i$
- ▶ proud podle Ohmova zákona: $i = (U - u)/R$

```
float u = 0, U = 14, R = 22e3, C = 1e-6, dt = 0.00001;

while (...) {
    float dq = (U-u)/R * dt;
    u += dq/C;
}
```

- ▶ stejně i pro proměnlivý vstup, např. $U = \sin(2\pi \cdot 10^{-3} \cdot t$

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

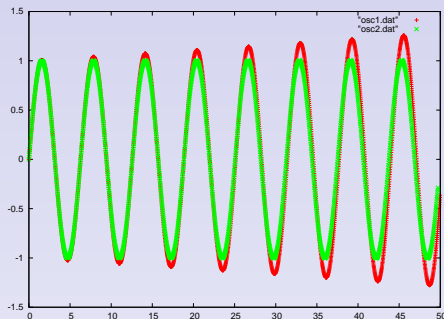
Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

- ▶ nejvíce se projeví na pružinovém oscilátoru



$\Delta t = 0.0001$ (zelená), $\Delta t = 0.01$ (červená)

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

- ▶ řešíme rovnici (resp. systém rovnic)

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y(t))$$

- ▶ počítáme posloupnost

$$y_{n+1} = y_n + \Delta t \left. \frac{dy}{dt} \right|_{t_n}$$

- ▶ výsledná $\sin x$ je ideálně nešikovná funkce
 - ▶ pro $x \in [0, \pi]$ je $\sin x > 0$ a je konkávní,
 - ▶ pro $x \in [\pi, 2\pi]$ je $\sin x < 0$ a je konvexní
 - ▶ použitá derivace vždy nadhodnocuje
 - ▶ výpočet do systému “přidává energii”

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

- ▶ použijeme derivaci až v bodě t_{n+1}

$$y_{n+1} = y_n + \Delta t \left. \frac{dy}{dt} \right|_{t_{n+1}}$$

- ▶ dosazením vede na řešení rovnice

$$y_{n+1} = y_n + \Delta t f(t_{n+1}, y_{n+1})$$

- ▶ implicitní metoda
 - ▶ pro výpočet dalšího kroku musíme řešit rovnici nebo systém rovnic
 - ▶ obecně nemusí být triviální

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semíimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

- ▶ pro pružinový oscilátor

$$\begin{aligned}y_{n+1} &= y_n + \frac{\Delta t}{m} p_{n+1} \\ p_{n+1} &= p_n - \Delta t k y_{n+1}\end{aligned}$$

- ▶ jednoduchý systém lineárních rovnic
- ▶ řešení lze vyjádřit analyticky a naprogramovat

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

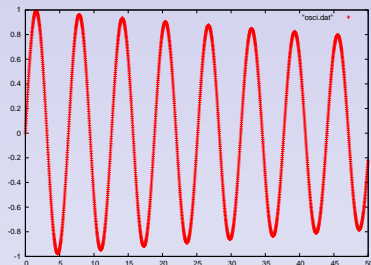
Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

- ▶ výstup pro $\Delta t = 0.01$



- ▶ metoda také není numericky stabilní
- ▶ má sklon systém tlumit
 - ▶ pro simulace v principu vyhovuje
 - ▶ nutné řešení systému rovnic v každém kroku může být problém

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálů

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

Semiimplicitní metoda

- ▶ kompromis mezi dopřednou (explicitní) a zpětnou (implicitní)
- ▶ nevyžaduje řešení komplikovaného systému rovnic
- ▶ nahrazuje ho vhodnou aproximací

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

**Semiimplicitní
metoda**

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

Semiimplicitní metoda

- ▶ kompromis mezi dopřednou (explicitní) a zpětnou (implicitní)
- ▶ nevyžaduje řešení komplikovaného systému rovnic
- ▶ nahrazuje ho vhodnou aproximací
- ▶ časovou derivaci dy/dt chápeme jako funkci $\mathbf{f}(\mathbf{y})$
- ▶ dosadíme ji do zpětné metody

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + \Delta t \mathbf{f}(\mathbf{y}_{n+1})$$

- ▶ použijeme Taylorův rozvoj

$$\mathbf{f}(\mathbf{y}_{n+1}) = \mathbf{f}(\mathbf{y}_n) + \left. \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}} \right|_{\mathbf{y}_n} (\mathbf{y}_{n+1} - \mathbf{y}_n) + \dots$$

- ▶ zanedbáme vyšší členy

$$\left(I - \Delta t \left. \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}} \right|_{\mathbf{y}_n} \right) (\mathbf{y}_{n+1} - \mathbf{y}_n) = \Delta t \mathbf{f}(\mathbf{y}_n)$$

Dynamické
systémyDiferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádůVýpočet
integráluDynamika
pevného tělesaKomplexní
příklad

Kometa semiimplicitní metodou

- ▶ stavový vektor $\mathbf{y} = (\mathbf{x}, \mathbf{v})^T$
- ▶ pohybová rovnice

$$\mathbf{f}(\mathbf{y}) = \frac{d\mathbf{y}}{dt} = \begin{pmatrix} d\mathbf{x}/dt \\ d\mathbf{v}/dt \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{v} \\ \mathbf{g} \end{pmatrix}$$

kde $\mathbf{g} = -Gm_k m_S \mathbf{x} / r^3$ a $r = \|\mathbf{x}\| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2}$

- ▶ Jakobián pro Taylorův rozvoj

$$\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}} = \begin{pmatrix} \partial \mathbf{v} / \partial \mathbf{x} & \partial \mathbf{v} / \partial \mathbf{v} \\ \partial \mathbf{g} / \partial \mathbf{x} & \partial \mathbf{g} / \partial \mathbf{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \partial \mathbf{g} / \partial \mathbf{x} & 0 \end{pmatrix}$$

- ▶ výpočet $\partial \mathbf{g} / \partial \mathbf{x}$ podle pravidel o derivování složené funkce

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

- ▶ v čase n máme přímo k dispozici hodnoty stavových proměnných $\mathbf{y} = (\mathbf{x}, \mathbf{v})^T$
- ▶ na základě pohybové rovnice $d\mathbf{y}/dt = \dots$ (zahrnuje i externí silové působení) spočteme jejich derivace, tj. $\mathbf{f}(\mathbf{y}_n)$
- ▶ podle předem spočteného vzorce získáme $\partial\mathbf{g}/\partial\mathbf{x}$ v čase n
- ▶ dosadíme do rovnice

$$\left(I - \Delta t \left. \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{y}} \right|_{\mathbf{y}_n} \right) (\mathbf{y}_{n+1} - \mathbf{y}_n) = \Delta t \mathbf{f}(\mathbf{y}_n)$$

- ▶ řešením je $\Delta\mathbf{y} = \mathbf{y}_{n+1} - \mathbf{y}_n$
- ▶ narozdíl od zpětné metody je to jen systém 4 lineárních rovnic

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálů

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

- ▶ metoda „leap frog“
- ▶ specializovaná pro systémy tvaru

$$d\mathbf{x}/dt = \mathbf{v} \quad d\mathbf{v}/dt = \mathbf{F}(\mathbf{x})$$

- ▶ v sudém kroku integrujeme pozici, v lichém rychlost

$$\mathbf{x}_{2n} = \mathbf{x}_{2n-2} + \Delta t \mathbf{v}_{2n-1}$$

$$\mathbf{v}_{2n+1} = \mathbf{v}_{2n-1} + \Delta t \mathbf{F}(\mathbf{x}_{2n})$$

- ▶ pro harmonické systémy je numericky stabilní
 - ▶ nepřidává energii
 - ▶ chyba dopředné metody v sudém kroku je kompenzována chybou v lichém kroku
- ▶ v praxi velmi rozšířená metoda

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálů

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

- ▶ obecná formule metody 1. řádu

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$$

pro $f(x_n, y_n) = \left. \frac{dy}{dx} \right|_{x_n}$ je to Eulerova dopředná

- ▶ lze ukázat, že její chyba je $O(h^2)$
 - ▶ Taylorovým rozvojem hypoteticky známého výsledku
 - ▶ o 1 vyšší exponent kroku, proto 1. řád
- ▶ metody vyšších řádů mají chybu $O(h^{k+1})$

Ilustrativní metoda 2. řádu

- ▶ začneme stejně

$$k_1 = hf(x_n, y_n)$$

- ▶ pokusný mezikrok do poloviny intervalu h

$$k_2 = hf\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_1\right)$$

- ▶ definitivní krok s použitím výsledků mezikroku

$$y_{n+1} = y_n + k_2$$

- ▶ lze ukázat, že chyba je $O(h^3)$
- ▶ k posunu o h potřebujeme $2\times$ vyhodnotit f
- ▶ lepší než metoda 1. řádu s polovičním krokem

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

- ▶ metoda 4. řádu
- ▶ posloupnost výpočtu

$$k_1 = hf(x_n, y_n)$$

$$k_2 = hf\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_1\right)$$

$$k_3 = hf\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_2\right)$$

$$k_4 = hf(x_n + h, y_n + k_3)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}k_1 + \frac{1}{3}k_2 + \frac{1}{3}k_3 + \frac{1}{6}k_4$$

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálů

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

- ▶ Která metoda je nejlepší?

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semíimplicitní
metoda

Leap frog

**Metody vyšších
řádů**

Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

- ▶ Která metoda je nejlepší?
 - ▶ jak kdy, záleží na konkrétním problému
 - ▶ neplatí, že čím vyšší řád, tím delší krok si můžeme dovolit

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semíimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

- ▶ Která metoda je nejlepší?
 - ▶ jak kdy, záleží na konkrétním problému
 - ▶ neplatí, že čím vyšší řád, tím delší krok si můžeme dovolit
- ▶ adaptivní délka kroku
 - ▶ dlouhé kroky v plochých oblastech, krátké v bohatších
 - ▶ zdvojnásobení kroku metody Runge-Kutta
 - ▶ Fehlberguv algoritmus
 - ▶ zpětnovazební metody
 - ▶ ...
- ▶ Bulirsch-Stoer
 - ▶ dlouhý krok s vnitřní extrapolací na nekonečně krátké mezikroky
- ▶ více viz Numerical Recipes

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

- ▶ neurčitý integrál

$$f(t) = \int g(t) dt$$

odpovídá nalezení libovolného řešení f rovnice

$$df(t)/dt = g(t)$$

- ▶ určitý integrál

$$y = \int_{t_0}^{t_1} g(t) dt = f(t_1) - f(t_0)$$

odpovídá konkrétnímu řešení téže rovnice s počáteční podmínkou $f(t_0) = 0$

- ▶ položíme $y_0 = 0$ a vhodnou numerickou metodou integrujeme od t_0 do t_1

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semíimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

- ▶ hmotný bod je příliš zjednodušující abstrakce
- ▶ pevné těleso
 - ▶ nenulový objem, nepodléhá žádným deformacím
- ▶ k popsání stavu systému jsou nutné další veličiny
- ▶ aktuální orientace (natočení)
 - ▶ matice 3×3 nebo kvaternion
- ▶ úhlová rychlost
 - ▶ vektor ω
 - ▶ velikost - rychlost rotace
 - ▶ směr - osa rotace
- ▶ matice (tenzor) setrvačnosti
 - ▶ analogie hmotnosti
 - ▶ prostorové rozložení hmotnosti

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

Matice setrvačnosti a úhlová hybnost

- ▶ lineární hybnost $\mathbf{P} = m\mathbf{v}$ je relativně intuitivní veličina
- ▶ úhlová hybnost $\mathbf{L} = \mathbf{M}\boldsymbol{\omega}$ už ne
 - ▶ jednoduché vyjádření pohybové rovnice

$$d\mathbf{L}(t)/dt = \mathbf{T}(t)$$

- ▶ analogie $d\mathbf{P}(t)/dt = \mathbf{F}(t)$
- ▶ pro volně rotující těleso zůstává \mathbf{L} konstantní ($\boldsymbol{\omega}$ ne)
- ▶ matice setrvačnosti
 - ▶ vychází z $\mathbf{T} = \mathbf{F} \times \mathbf{r}$
 - ▶ pro množinu diskretních bodů

$$\mathbf{M} = \sum \begin{pmatrix} m(r_y^2 + r_z^2) & -mr_x r_y & -mr_x r_z \\ -mr_y r_x & m(r_x^2 + r_z^2) & -mr_y r_z \\ -mr_z r_x & -mr_z r_y & m(r_x^2 + r_y^2) \end{pmatrix}$$

- ▶ ve spojitém případě analogicky integrováním
- ▶ závisí na aktuální orientaci
- ▶ více viz <http://www.cs.cmu.edu/~baraff/sigcourse/>

Dynamické
systémyDiferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádůVýpočet
integráluDynamika
pevného tělesaKomplexní
příklad

Pohybové rovnice pevného tělesa

- ▶ stavový vektor $\mathbf{y} = (\mathbf{x}, \mathbf{q}, \mathbf{P}, \mathbf{L})^T$
 - ▶ \mathbf{x} - poloha
 - ▶ \mathbf{q} - orientace
 - ▶ \mathbf{P} - lineární hybnost (vyjadřuje rychlost)
 - ▶ \mathbf{L} - úhlová hybnost (vyjadřuje úhlovou rychlost)

- ▶ rovnice

$$\frac{d\mathbf{y}}{dt} = \begin{pmatrix} \frac{1}{m}\mathbf{P} \\ \frac{1}{2}\omega_q\mathbf{q} \\ \mathbf{F} \\ \mathbf{T} \end{pmatrix}$$

- ▶ úhlovou rychlost ω vypočteme

$$\omega = \mathbf{q}(\mathbf{M}^{-1}\mathbf{q}^{-1}(\mathbf{L}))$$

- ▶ ω_q je vnoření ω do prostoru kvaternionů
- ▶ integrace dopřednou nebo semiimplicitní metodou
 - ▶ lineární rovnice o 13 proměnných

Dynamické
systémyDiferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

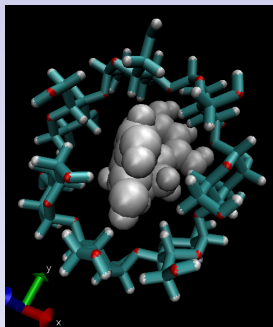
Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádůVýpočet
integráluDynamika
pevného tělesaKomplexní
příklad

Model interakce molekul

- ▶ dvě molekuly
 - ▶ pevná, velká – **receptor**
 - ▶ menší, pohyblivá – **ligand**
- ▶ pohyblivou molekulu ovládáme
 - ▶ myš a klávesnice,
 - ▶ zařízení silové zpětné vazby
- ▶ molekuly silově interagují
 - ▶ přitažlivé i odpudivé síly
 - ▶ každý atom s každým
- ▶ význam
 - ▶ nalezení místa, kde si ligand „sedne“
 - ▶ pochopení vlastností interakce v okolí
- ▶ simulace musí působit důvěryhodně
 - ▶ co nejdokonalejší iluze manipulace s reálnými objekty



Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálů

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

- ▶ vyvinula se z teleoperátorů
 - ▶ manipulace na dálku, např. v nebezpečném prostředí
 - ▶ manipulace s virtuálním prostředím
- ▶ impedanční (odporové)
 - ▶ zařízení snímá polohu, případně rychlost
 - ▶ působí vypočtenou silou
 - ▶ modelovaný systém je vyjádřen jako „odpor“ – silová reakce systému na změnu polohy
- ▶ admitanční (vodivostní)
 - ▶ zařízení snímá silové působení
 - ▶ přesune se do vypočtené polohy
 - ▶ modelovaný systém je vyjádřen jako „vodivost“ – ochota systému reagovat na vnější silové působení

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

- ▶ v ideálním případě lze modelovat vše obojím
 - ▶ vstupují nedokonalosti zařízení
 - ▶ prakticky jsou impedanční zařízení lepší v modelu, kde převládá aktivita operátora

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

- ▶ v ideálním případě lze modelovat vše obojím
 - ▶ vstupují nedokonalosti zařízení
 - ▶ prakticky jsou impedanční zařízení lepší v modelu, kde převládá aktivita operátora
- ▶ hmat má výrazně nižší latenci než zrak
- ▶ nutná obnovovací frekvence 1 kHz
- ▶ vysoká náročnost na numerické vyhodnocení modelu

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

Přímé mapování síly

- ▶ model je de facto statický
 - ▶ vstup (souřadnice zařízení) jsou přímo promítnuty do modelu
 - ▶ na jejich základě je vypočtena silová interakce
 - ▶ síla je opět přímo aplikována na zařízení
- ▶ např. kolize dvou koulí, modelujeme tvrdou pružinou

$$F = \begin{cases} 0 & r \geq R_1 + R_2 \\ k(R_1 + R_2 - r) & r < R_1 + R_2 \end{cases}$$

Dynamické
systémyDiferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádůVýpočet
integráluDynamika
pevného tělesaKomplexní
příklad

Přímé mapování síly

- ▶ model je de facto statický
 - ▶ vstup (souřadnice zařízení) jsou přímo promítnuty do modelu
 - ▶ na jejich základě je vypočtena silová interakce
 - ▶ síla je opět přímo aplikována na zařízení
- ▶ např. kolize dvou koulí, modelujeme tvrdou pružinou

$$F = \begin{cases} 0 & r \geq R_1 + R_2 \\ k(R_1 + R_2 - r) & r < R_1 + R_2 \end{cases}$$

- ▶ jednoduché, přehledné, ale takhle reálný svět nefunguje
 - ▶ veškeré dynamické chování (tj. jaký je efekt aplikované síly) jsme z modelu vyloučili
 - ▶ zejména nedokážeme modelovat různé hmotnosti kolidujících objektů
 - ▶ dynamicky se chová fyzické zařízení atd., ale to nestačí
- ▶ nezatrácujeme úplně, na některé aplikace stačí

Dynamické
systémyDiferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádůVýpočet
integráluDynamika
pevného tělesaKomplexní
příklad

Virtuální spojení

- ▶ „virtual coupling“
- ▶ manipulovaný objekt je k zařízení připojen viskoelastickým spojením
- ▶ paralelní pružina a tlumič

$$F = k\Delta\mathbf{x} + b\Delta\mathbf{v}$$

- ▶ silová zpětná vazba
 - ▶ jakou silou má zařízení působit na operátora
- ▶ vstup pro model
 - ▶ jak působí operátor na manipulovaný virtuální objekt
- ▶ tj. 3. Newtonův zákon v praxi

Dynamické
systémyDiferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádůVýpočet
integráluDynamika
pevného tělesaKomplexní
příklad

- ▶ molekulu ligandu modelujeme jako pevné těleso
 - ▶ vzájemná poloha atomů se nemění
 - ▶ hmotnosti atomů koncentrovány v jádrech → matice setrvačnosti
 - ▶ silová interakce atomu vždy působí v místě jádra

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

Silové interakce molekul

- ▶ molekulu ligandu modelujeme jako pevné těleso
 - ▶ vzájemná poloha atomů se nemění
 - ▶ hmotnosti atomů koncentrovány v jádrech → matice setrvačnosti
 - ▶ silová interakce atomu vždy působí v místě jádra
- ▶ van der Waalsova - LJ potenciál

$$F_{LJ} = -\frac{12A}{r^{13}} + \frac{6B}{r^7}$$

- ▶ elektrostatická

$$F_{el} = \epsilon \frac{q_1 q_2}{r^2}$$

Dynamické
systémyDiferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádůVýpočet
integráluDynamika
pevného tělesaKomplexní
příklad

Silové interakce molekul

- ▶ molekulu ligandu modelujeme jako pevné těleso
 - ▶ vzájemná poloha atomů se nemění
 - ▶ hmotnosti atomů koncentrovány v jádrech → matice setrvačnosti
 - ▶ silová interakce atomu vždy působí v místě jádra
- ▶ van der Waalsova – LJ potenciál

$$F_{LJ} = -\frac{12A}{r^{13}} + \frac{6B}{r^7}$$

- ▶ elektrostatická

$$F_{el} = \epsilon \frac{q_1 q_2}{r^2}$$

- ▶ $n \approx 10^4$ atomů receptoru, $m \approx 100$ atomů ligandu
- ▶ $m \times n$ interakcí nespočítáme $1000\times$ za vteřinu

Dynamické
systémyDiferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

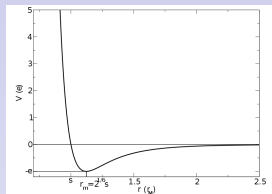
Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádůVýpočet
integráluDynamika
pevného tělesaKomplexní
příklad

van der Waalsova interakce

- ▶ předvýpočet potenciálu na mřížce
 - ▶ běžně používáno v chemickém software
 - ▶ interpolace příliš vyhladí strmé stěny



Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

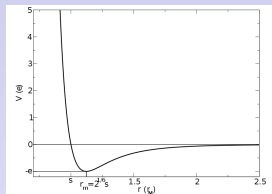
Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

- ▶ předvýpočet potenciálu na mřížce
 - ▶ běžně používáno v chemickém software
 - ▶ interpolace příliš vyhladí strmé stěny
- ▶ díky vysokým exponentům relativně krátký dosah
- ▶ můžeme si dovolit ořez
 - ▶ uvažujeme pouze dvojice atomů o vzájemné vzdálenosti menší než daná konstanta
 - ▶ typicky 4-8 Å
- ▶ vypočítat $m \times n$ vzdáleností dvojic atomů je pořád příliš



Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semíimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

- ▶ prostor rozdělíme na pravidelné buňky
 - ▶ tak, aby se „největší“ atom receptoru vešel do jedné buňky
 - ▶ při náhodné pozici zasahuje nanejvýš do 8 buněk
- ▶ hashovací funkce souřadnic buňky
- ▶ struktura připravená před simulací
 - ▶ projdeme všechny atomy receptoru
 - ▶ atomy, které padnou (i částečně) do buňky zařadíme do příslušného řádku

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

- ▶ prostor rozdělíme na pravidelné buňky
 - ▶ tak, aby se „největší“ atom receptoru vešel do jedné buňky
 - ▶ při náhodné pozici zasahuje nanejvýš do 8 buněk
- ▶ hashovací funkce souřadnic buňky
- ▶ struktura připravená před simulací
 - ▶ projdeme všechny atomy receptoru
 - ▶ atomy, které padnou (i částečně) do buňky zařadíme do příslušného řádku

- ▶ atom ligandu uměle zvětšíme o vzdálenost ořezu
- ▶ překryje ≈ 10 –500 buněk
- ▶ uvažujeme pouze atomy receptoru v příslušných řádcích

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

- ▶ i po ořezu zůstává příliš mnoho atomů receptoru
- ▶ silové působení (síla i točivý moment) jsou aditivní
- ▶ první derivace jsou také aditivní
- ▶ lze vše počítat paralelně a na závěr sečíst
 - ▶ round-robin rozdělení atomů receptoru mezi jádra CPU
 - ▶ statisticky rovnoměrné
- ▶ technicky používáme MPI
- ▶ musí běžet na jednom stroji nebo na velmi rychlé síti
 - ▶ vysoké nároky na latenci
 - ▶ rozeslání dat, výpočet, sesbírání výsledku za méně než 1ms

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

- ▶ nízký exponent (2) – dlouhý dosah
- ▶ nelze efektivně použít ořez
- ▶ vypočítáme silové pole na mřížce
 - ▶ působení na jednotkový náboj
 - ▶ lze spočítat dopředu
- ▶ při běhu simulace interpolace pro všechny atomy ligandu
 - ▶ interpolace ořezává vysoké hodnoty
 - ▶ v kombinaci s přesnou VdW interakcí to není problém
 - ▶ extrémy jsou ve stejných místech
 - ▶ VdW nedovolí tohoto stavu dosáhnout
- ▶ mřížka je příliš velká
 - ▶ $256^3 \cdot 3 \cdot 4B \approx 200MB$
 - ▶ adaptivní rozlišení mřížky

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

Celková struktura simulace

- ▶ off-line výpočet
 - ▶ elektrostatického pole
 - ▶ hashovací tabulka pro VdW interakce
- ▶ řídicí simulační vlákno (1 kHz)
 - ▶ elektrostatické působení na všechny atomy ligandu
 - ▶ součet dílčího silového působení VdW sil
 - ▶ působení zařízení silové zpětné vazby na ligand (3 nebo 6 DoF)
 - ▶ integrace pohybové rovnice (semiimplicitní, systém 13 lineárních rovnic)
- ▶ $N \times$ výpočty dílčích VdW sil
 - ▶ synchronně s řídicím vláknem
 - ▶ pevně mezi sebe rozdělené atomy receptoru
 - ▶ každý pro všechny atomy ligandu
- ▶ řízení zařízení silové zpětné vazby (1 kHz)
 - ▶ asynchronní
 - ▶ implementace viskoelastického spojení s ligandem
- ▶ grafika (25 Hz)

Dynamické
systémyDiferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádůVýpočet
integráluDynamika
pevného tělesaKomplexní
příklad

- ▶ model tuhé molekuly neodpovídá realitě
 - ▶ při nenulové teplotě mění svůj tvar spontánně
 - ▶ při vzájemné interakci se ovlivňují a mění tvar
- ▶ spontánní pohyby receptoru umíme napočítat dopředu
- ▶ ~ 1000 a více snímků
- ▶ hash tabulka pro všechny snímky
 - ▶ 1000 × 200 kB není problém
 - ▶ neřešíme, i když umíme přepočítávat změny dostatečně rychle
- ▶ elektrostatické pole
 - ▶ 1000 × 50 MB, kdo neplýtvá diskem s námi ...
 - ▶ komprese proměnlivého vektorového pole

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

- ▶ série snímků, každý 3D mřížka 256^3 vektorů
- ▶ výrazná časová i prostorová spojitost
- ▶ algoritmus komprese vycházející z audia a videa
- ▶ sekvence snímků IBBBBPBBBBP apod.
 - ▶ I - komprimovaný samostatně
 - ▶ P - závisí na předchozím I nebo P
 - ▶ B - interpolace mezi I-P resp. P-P

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

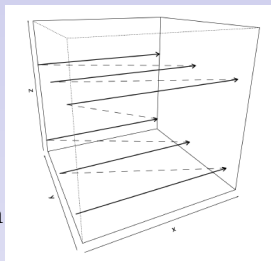
Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

Kompresie vektorového pole

- ▶ I-snímek
- ▶ analogie komprese audia
 - ▶ každá složka zvlášť
 - ▶ logaritmická transformace
 - ▶ kvantizace na 16 bitů
 - ▶ průchod 3D mřížkou definovaným způsobem
- ▶ lineární prediktor
 - ▶ předpokládáme, že následující bod je stejný
 - ▶ zaznamenáváme odchylku
- ▶ Riceovo kódování odchylek
 - ▶ $i = n \operatorname{div} 2^k, j = n \operatorname{mod} 2^k$
 - ▶ unární zakódování i , následované 0 a k bity j
 - ▶ vhodné pro geometrické rozložení



Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

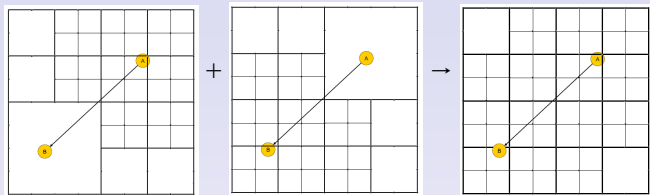
Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

Kompresa vektorového pole

- ▶ B,P snímky
 - ▶ opět Riceovo kódování odchylek
- ▶ adaptivní mřížka
 - ▶ strukturu fixujeme pro frameset
 - ▶ změna mezi framesety může způsobit nespojitosti
 - ▶ zpětné sjednocení mřížek



Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

- ▶ časově náročná komprese příliš nevdí (off-line)
- ▶ rychlá dekomprese je kritická
- ▶ ligand je malý – není třeba celý snímek
- ▶ aktualizace 1–10 Hz
- ▶ paralelní implementace
 - ▶ sady procesů pro I a P/B snímky
 - ▶ celý I s předstihem (závislosti mezi bloky)
 - ▶ B/P jen potřebné bloky (podle polohy ligandu)

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

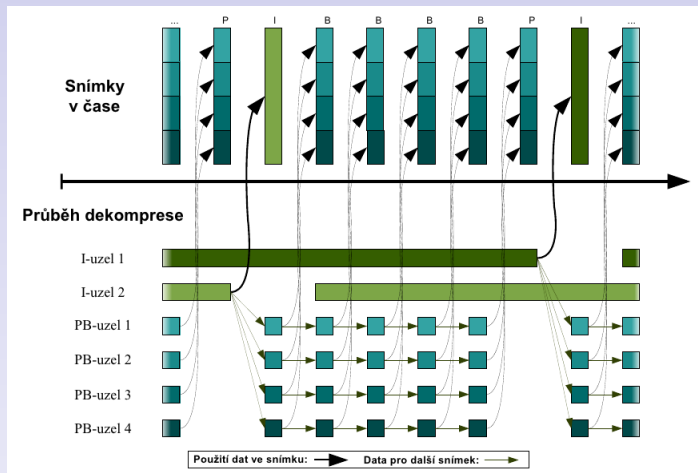
Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

On-line dekomprese



Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semíimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálů

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad

- ▶ změny v tvaru důsledkem interakce s receptorem
 - ▶ nelze napočítat dopředu
- ▶ řádově menší molekula
 - ▶ popsat změny tvaru dalšími volnými proměnnými
 - ▶ zahrnout do on-line simulace
- ▶ vypsaná diplomová práce

Dynamické
systémy

Diferenciální
rovnice

Příklady

Dopředná metoda

Zpětná metoda

Semiimplicitní
metoda

Leap frog

Metody vyšších
řádů

Výpočet
integrálu

Dynamika
pevného tělesa

Komplexní
příklad