Коррекция численного интегрирования как задача оптимального управления

Ю.Г.Палий

Лаборатория Информационных Технологий,
Объединенный Институт Ядерных Исследований, Дубна, Россия

Проблема дрейфа численного решения динамической системы с поверхности интегралов и связей решается при помощи управляющей градиентной добавки к уравнениям движения. Добавка вынуждает изображающую точку в фазовом пространстве идти по нормали к заданной поверхности. Проводится сравнение с интегрированием уравнений в обобщенной гамильтоновой динамике Дирака. Расчеты выполнены в системе **Maple V R5** с использованием стандартной процедуры **dsolve/numeric** численного решения обыкновенных дифференциальных уравнений методом Рунге – Кутта 4-го порядка.

1 Введение

Численное интегрирование динамических систем сталкивается с фундаментальной трудностью – решения уходят со временем с поверхности связей, интегралы движения не сохраняются [1]. В существующих подходах стабильность поведения решения вблизи заданной поверхности обеспечивается специализированными средствами [2]. Например, для гамильтоновых систем разработаны симплектические интеграторы [4], а также используются уравнения обобщенной гамильтоновой динамики Дирака [5]. Используется возможность переписать систему уравнений в виде произведения кососимметричной матрицы на вектор градиента к поверхности [3].

В работе рассматривается потенциально достаточно общий подход к проблеме стабилизации поверхности интегралов и связей. Он состоит в том, чтобы используя теорию автоматического управления [7] удерживать изображающую точку в фазовом пространстве вблизи требуемой поверхности. Подход позволяет влиять на стабильность системы, используя уже существующие методы, и не требует разработки особых интеграторов или разностных схем. Необходимо найти управляющий сигнал и добавить его в уравнения движения.

Простейшей реализацией подхода, использованной в работе, является управляющая градиентная добавка. Изображающая точка по нормали отправляется к требуемой поверхности, движение на самой поверхности определяется исходными уравнениями. [1]

Во втором пункте излагается предлагаемый подход, иллюстрируемый на примере, в котором заданная точка "сажается"на выбранную поверхность. В третьем пункте проводится сравнение с интегрированием уравнений в обобщенной гамильтоновой динамике Дирака [6]

[1]Свойства специальной разностной аппроксимации градиента исследовались при построении консервативной схемы для системы уравнений Гамильтона [8].

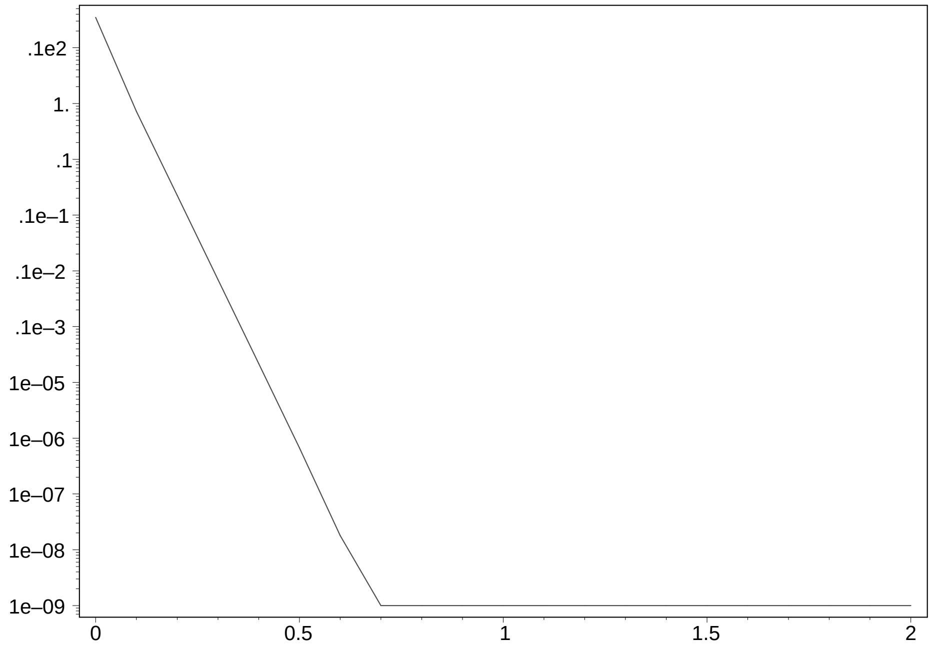

Рис. 1: $\log|\phi(t)|$.

для трехмерного математического маятника в декартовых координатах. В заключении анализируются полученные результаты.

2 Градиентное управление

В результате численного интегрирования уравнений движения изображающая точка фазового пространства оказывается вне поверхности интегралов и связей, даже если начальные условия им удовлетворяли. Рассмотрим отдельную задачу – "посадить"данную точку $x(t)$ трехмерного пространства на некоторую поверхность $\phi(x) = 0$. Зададим уравнения движения

$$\frac{dx_i}{dt} = -k\phi(x)\frac{\nabla_i\phi(x)}{|\nabla\phi(x)|}\ , \quad i = 1, 2, 3 \quad k = const. \tag{1}$$

Здесь нормированный градиент задает движение точки по нормали к поверхности, множитель $\phi(x)$ со знаком минус обеспечивает движение в нужную сторону и остановку при попадании на поверхность. Коэффициент k выбирается из соображений наилучшей эффективности управления. Использование уравнений (1) продемонстрировано на рис. 1, где показано изменение во времени функции $\phi(t) = x^2(t) + y^2(t) - z^2(t)$ при движении точки из начального положения $x_o = -1.0,\ y_o = 0.1,\ z_o = 6.0$ к поверхности $\phi = x^2 + y^2 - z^2 = 0$. Интегрирование проводилось методом Рунге – Кутта 4-го порядка с шагом 0.01 при коэффициенте $k = 5$.

3 Сравнение управления с обобщенной динамикой Дирака

Модель 3-мерного математического маятника в декартовых координатах задается лагранжианом

$$L = \frac{1}{2}(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) - z - \lambda\phi, \tag{2}$$

где λ – множитель Лагранжа, а связь ϕ

$$\phi = \frac{1}{2}(x^2 + y^2 + z^2 - 1) = 0 \tag{3}$$

которая выражает сохранение длины маятника. Классические гамильтоновы уравнения имеют вид

$$\dot{x} = p_x\ ,\quad \dot{y} = p_y\ ,\quad \dot{z} = p_z\ ,\quad \dot{p}_x = \lambda x\ ,\quad \dot{p}_y = \lambda y\ ,\quad \dot{p}_z = \lambda z - 1, \tag{4}$$

где

$$\lambda = -\frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 - z}{x^2 + y^2 + z^2}. \tag{5}$$

В системе сохраняются энергия E и вращательный момент M_z

$$E = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + z = const_1, \qquad M_z = xp_y - yp_x = const_2 \tag{6}$$

В рамках обобщенной гамильтоновой динамики Дирака этот пример на плоскости разобран в работе [5]. Уравнения Гамильтона – Дирака имеют вид

$$\left\{\begin{array}{l} \dot{x} = p_x + \mu x, \\ \dot{y} = p_y + \mu y, \\ \dot{z} = p_z + \mu z, \end{array}\right. \qquad \left\{\begin{array}{l} \dot{p}_x = \lambda x - \mu p_x, \\ \dot{p}_y = \lambda y - \mu p_y, \\ \dot{p}_z = \lambda z - \mu p_z - 1, \end{array}\right. \tag{7}$$

где

$$\mu = -\frac{xp_x + yp_y + zp_z}{x^2 + y^2 + z^2}. \tag{8}$$

Можно ввести расширенный гамильтониан

$$H_e = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + z - \lambda\phi + \mu\psi, \tag{9}$$

где с помощью еще одного множителя Лагранжа включена вторичная связь

$$\psi = xp_x + yp_y + zp_z = 0. \tag{10}$$

Она выражает касательность скорости к траектории и обеспечивает сохранение связи $\phi = 0$ (3) во времени. Уравнения с гамильтонианом H_e имеют вид

$$\left\{\begin{array}{l} \dot{x} = \left(2 - 1/(x^2 + y^2 + z^2)\right) p_x + \mu x, \\ \dot{y} = \left(2 - 1/(x^2 + y^2 + z^2)\right) p_y + \mu y, \\ \dot{z} = \left(2 - 1/(x^2 + y^2 + z^2)\right) p_z + \mu z, \\ \dot{p}_x = \lambda x/(x^2 + y^2 + z^2) - 2\mu p_x - 2\mu^2 x, \\ \dot{p}_y = \lambda y/(x^2 + y^2 + z^2) - 2\mu p_y - 2\mu^2 y, \\ \dot{p}_z = \lambda z/(x^2 + y^2 + z^2) - 2\mu p_z - 2\mu^2 z \\ \qquad - \left(1 + 1/(x^2 + y^2 + z^2)\right)/2. \end{array}\right. \tag{11}$$

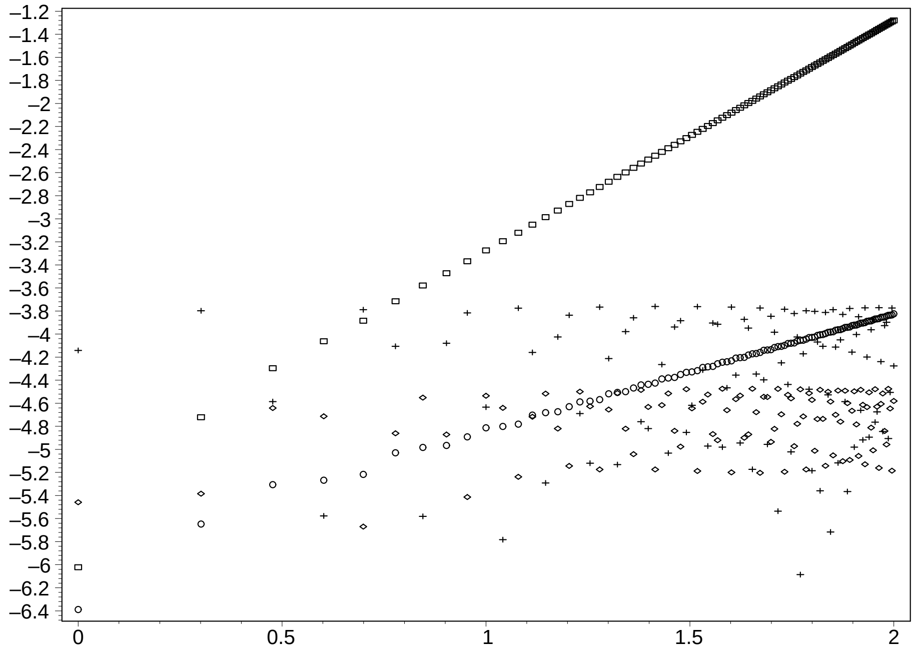

Рис. 2: $\log|\phi|$ как функция $\log t$, $\square$ – классические уравнения (4), o – уравнения Гамильтона – Дирака (7), $+$ – уравнения с расширенным гамильтонианом (11), $\diamondsuit$ – классические уравнения с управлением.

Сравним результаты интегрирования классических гамильтоновых уравнений (4), уравнений Гамильтона – Дирака (7), уравнений с расширенным гамильтонианом (11) с интегрированием классических уравнений, в которые включено управление (1), содержащее четыре слагаемых (интегралы движения E и M_z (6) и связи ϕ (3) и ψ (10)). Расчеты выполнены методом Рунге – Кутта 4-го порядка с шагом 0.1 во всех случаях при начальных условиях $x_o = 1.0$, $y_o = 0$, $z_o = 0$, $(p_x)_o = 0$, $(p_y)_o = 1.0$, $(p_z)_o = 0$ и коэффициентах $k_i = 1$, $i = 1...4$. На рис. 2 и 3 показано изменение во времени ϕ и $\delta E = E - E_o$ соответственно.

Решения классических уравнений (4) дрейфуют с заданных поверхностей быстрее всего. Для уравнений Гамильтона – Дирака (7) дрейф гораздо меньше. Использование уравнений с расширенным гамильтонианом (11) дает стабильность связи ϕ. Однако добиться стабильности как связей, так и интегралов движения позволяет только управление.

В использованном методе подразумевается существование нормированного градиента к стабилизируемой поверхности и не слишком большое отклонение от соответствующего интеграла или связи. Их большое количество или сложная топология могут привести к снижению эффективности столь простого метода. Зависимость от времени также требует модификаций. Могут быть сбои и в случае сложного фазового портрета системы (например, наличия критических точек у маятника). [2]

Метод потенциально применим к системам уравнений как в обычных производных, так

[2] Автор благодарен Н. Васильеву за это замечание.

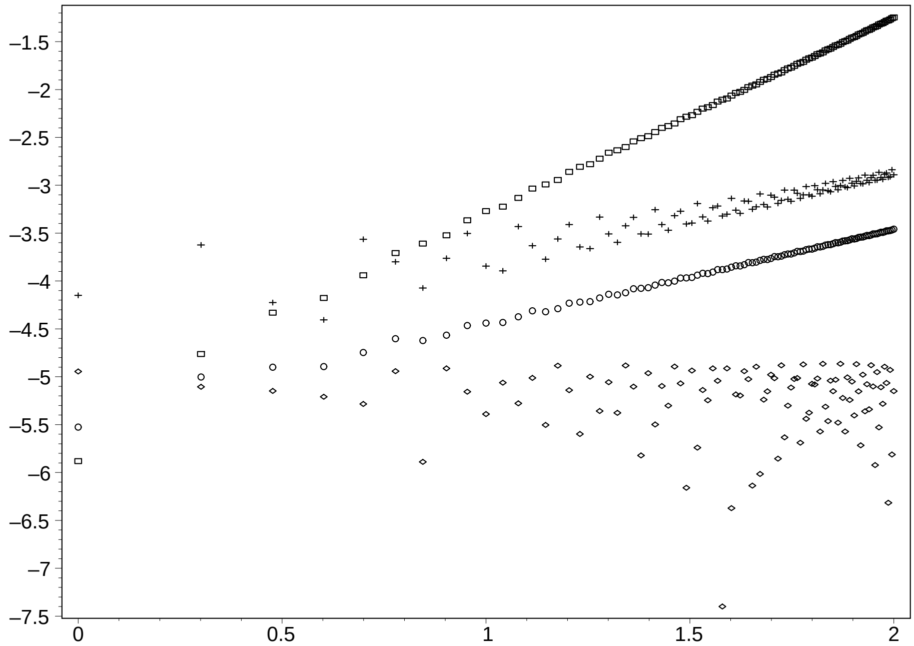

Рис. 3: $\log|\delta E|$ как функция $\log t$, обозначения соответствуют рис.2

и в частных. Представляется интересным опробовать его в системах дифференциально–алгебраических уравнений.

Большей эффективности видимо можно достичь, если после одного или нескольких шагов интегрирования собственно уравнений движения проводить коррекцию, то есть в фиктивном времени воздействовать на изображающую точку только управлением.

4 Заключение

Основная цель статьи – попытка использовать метод управления системой уравнений для повышения точности численного интегрирования. Теория оптимального управления применима не только к системам обыкновенных дифференциальных уравнений, но и к системам уравнений в частных производных, а также к функциональным уравнениям. Нахождение управления включает в себя формулировку целевого функционала и решение вытекающих из его минимизации уравнений на заданном классе допустимых управляющих функций. Получение уравнений и требований к этим функциям хорошо разработаны [9], интегрирование их является очень сложной задачей. Возможно, использование методов компьютерной алгебры [10] окажется здесь полезным. Следует отметить, что компьютерная алгебра может быть использована для исследования симметрии уравнений [11], что важно для нахождения интегралов, а также в реализации алгоритма Дирака [12] для определения связей. Эта информация необходима в задаче о коррекции численного решения рассматриваемой системы. Реальное движение динамической системы лежит на поверхности интегралов движения и имеющихся в системе связей. Вне их результаты численного решения не имеют физического смысла. Для решения этой проблемы в статье предлагается ввести в классические уравнения управляющую градиентную добавку, имеющую простой геометрический смысл – направить изображающую точку в фазовом пространстве по нормали к поверхности. Управление по сути решает классическую задачу вариационного исчисления с одним подвижным концом и удовлетворяет принципу максимума Понтрягина [13]. С другой стороны, оно соответствует теории Дирака, где для стабилизации поверхности связей используется тот факт, что связи являются генераторами движения ортогонально их поверхности. Видимо, это и есть причина сравнимой эффективности методов для стабилизации связей. Преимуществом предлагаемого метода является универсальный подход к стабилизации интегралов и связей. Кроме того, при интегрировании уравнений в теории Дирака дрейф интегралов не устраняется.

Автор благодарен В.П. Гердту за постановку задачи и искренне признателен А.М. Хведелидзе, С.А. Гогилидзе и Д.М. Младенову за неоценимую помощь в изучении формализма Дирака. Работа поддержана грантом РФФИ 01-01-0078.

Список литературы

[1] J.Baumgarte, *“Stabilization of Constraints and Integrals of Motion in Dynamical Systems”*, Comp. Meth. Appl. Mech. Eng. **1** (1972) 1-16.

[2] Uri M. Asher and Linda R. Petzold, *“Stability of Computational Methods for Constrained Dynamics Systems”*, SIAM J. Sci. Comput. **14** 1 (1993) 95-120.

[3] G.R.W.Quispel and G.S.Turner, *“Discrete Gradient Methods for Solving ODEs numerically with Preserving a First Integral”*, J. Phys. **A29** (1996) L341-L349.

[4] B.J.Leimkuhler and R.D.Skeel, *“Symplectic Numerical Integrators in Constrained Hamiltonian Systems”*, J. Comp. Phys. **112** (1994) 117-125.

[5] W.M.Seiler, *“Numerical Integration of Constrained Hamiltonian Systems Using Dirac Brackets”*, Math. Comput. **68** 226 (1998) 661-682.

[6] P.A.M.Dirac, *“Lectures on Quantum Mechanics”*, Belfer Graduate School Monograph Series 3 (Yeshiva University, New York 1964). П.А.М.Дирак,*“Лекции по квантовой механике”*, М. Мир 1968.

[7] Справочник по теории автоматического управления. Под ред. А.А.Красовского, М. Наука 1987.

[8] Ю.А.Криксин, *“Консервативная разностная схема для системы уравнений Гамильтона с внешним воздействием”*, Журнал вычислит. математики и матем. физики **33** (1993) 206-218.

[9] Ж.-Л. Лионс, *“Оптимальное управление системами, описываемыми уравнениями с частными производными”*, М. Мир 1972.
J.L.Lions, *“Contrôle optimal de systèmes gouvernés par des équations aux dérivées partielles”*, Dunod Gauthier-Villars, Paris 1968.

[10] Дж.Дэвенпорт, И.Сирэ, Э.Турнье, *"Компьютерная алгебра. Системы и алгоритмы алгебраических вычислений"*, М. Мир 1991.
J.Davenport, Y.Siret, E.Tournier, *"Calcul formel. Systèmes et algorithmes de manipulations algébriques"*, MASSON, Paris 1987.

[11] V.P.Gerdt Computer Algebra, Symmetry Analysis and Integrability of Nonlinear Evolution Equations In: Physics Computing'92, R.A. de Groot and J. Nadrchal(Eds.), World Scientific Publ. Co., Singapore, 1993, 52-59; International Journal of Modern Physics C, v. 4, No 2, 1993, 279-286.

[12] V.P.Gerdt Computer Algebra and Constrained Dynamics In: Problems of Modern Physics, JINR D2-99-263, Dubna, 1999.

[13] Л.С.Понтрягин, В.Г.Болтянский, Р.В.Гамкрелидзе, Е.Ф.Мищенко, *"Математическая теория оптимальных процессов"*, М. Наука 1983.