

## MÉTODOS DE INTEGRACIÓN POR CUANTIFICACIÓN EN SISTEMAS HAMILTONIANOS.

Mario Bortolotto <sup>\*,1</sup> Ernesto Kofman <sup>\*,2</sup>  
Gustavo Migoni <sup>\*,3</sup>

*\* Laboratorio de Sistemas Dinámicos. FCEIA-UNR.  
CIFASIS-CONICET. Riobamba 245 bis - (2000) Rosario.  
bortolotto,kofman,migoni@cifasis-conicet.gov.ar*

Resumen: Este artículo estudia algunas propiedades de los métodos de integración por cuantificación al ser aplicados a sistemas Hamiltonianos. En base a este estudio, se desarrolla un nuevo método denominado CQSS (Centered Quantized State Systems) que permite integrar sistemas Hamiltonianos conservando las principales propiedades geométricas. Además de ser el primer método de cuantificación para sistemas Hamiltonianos, CQSS tiene la particularidad de ser un método explícito. Se presentan también dos ejemplos prácticos que ilustran algunas de las propiedades del nuevo método.

Palabras claves: Sistemas Hamiltonianos, Integradores Geométricos, Integración basada en la Cuantificación, DEVS.

### 1. INTRODUCCIÓN

Los sistemas Hamiltonianos constituyen una clase especial dentro de los sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias, dentro de la que se pueden encuadrar la mayor parte de los sistemas físicos que conservan energía.

Desde el punto de vista matemático, son sistemas cuya evolución temporal cumple ciertas características geométricas que a su vez tienen una interpretación física importante.

Dado que en general estos sistemas no se pueden integrar de manera analítica, se debe recurrir a la integración numérica y el problema es que la mayor parte de los métodos de integración no conservan las características geométricas antes mencionadas.

Por ejemplo, si utilizamos el método de Forward Euler (o cualquier método explícito de Runge Kutta) en un sistema Hamiltoniano lo primero que observaremos es que la energía aumenta a medida que pasa el tiempo. De manera similar, si utilizamos Backward Euler observaremos que la energía disminuye.

Estas distorsiones en las soluciones numéricas motivaron el desarrollo de ciertos métodos de integración que conservan las distintas propiedades geométricas de los sistemas Hamiltonianos, lo que dio lugar a la teoría de *integradores geométricos* (Hairer *et al.*, 2006).

Un enfoque esencialmente distinto al de los métodos de integración clásica (y al de los métodos de integración geométricos que también se basan en la discretización del tiempo) surge al reemplazar la discretización del tiempo por la cuantificación de las variables de estado. Esta idea dio lugar a los *métodos de integración por cuantificación*, que aproximan las ecuaciones diferenciales ordinarias

---

<sup>1</sup> Becario Doctoral CONICET.

<sup>2</sup> Docente UNR-FCEIA, Investigador Ajunto CONICET.

<sup>3</sup> Docente FCEIA-UNR, Becario Doctoral CONICET.

por *sistemas de eventos discretos* en términos del formalismo DEVS (Zeigler *et al.*, 2000).

El primero de estos métodos es el de QSS1 (*Quantized State Systems*) Kofman and Junco (2001), que realiza una aproximación de primer orden. En base a principios similares, se desarrollaron también métodos de segundo orden (QSS2) (Kofman, 2002) y de tercer orden (QSS3) (Kofman, 2006), que permiten obtener una mejor precisión sin incrementar mucho el número de cálculos y también se desarrolló un método de primer orden para sistemas *stiff* denominado BQSS (*Backward QSS*) (Migoni *et al.*, 2007).

Los métodos de QSS tienen propiedades teóricas muy fuertes (estabilidad y existencia de cota de error global calculable para sistemas lineales) y presentan grandes ventajas al simular sistemas discontinuos Kofman (2004). Sin embargo, como veremos, no son apropiados para la simulación de sistemas Hamiltonianos al no conservar las principales propiedades geométricas.

En este trabajo entonces estudiaremos el problema de la aplicación de los métodos de integración por cuantificación en sistemas Hamiltonianos, desarrollando un nuevo método (denominado CQSS) que conserva las principales características geométricas de dichos sistemas.

El artículo está organizado como sigue: tras la presentación de los conceptos y principios de los sistemas Hamiltonianos y de la integración geométrica, la sección 2 repasa los métodos de integración por cuantificación y muestra los problemas que tienen para simular sistemas Hamiltonianos. Luego, la sección 3 presenta el resultado principal: un estudio de las características que deben tener los MIC para conservar propiedades geométricas en sistemas Hamiltonianos y la definición de un método que cumple con estas propiedades (CQSS). Por último, la sección 4 muestra algunos resultados de simulación con este nuevo método que corroboran sus propiedades geométricas.

### 1.1 Sistemas Hamiltonianos e Integradores Geométricos

Integración geométrica es el término que se suele usar para describir los métodos numéricos utilizados para resolver ecuaciones diferenciales que preservan una o más propiedades físicas/matemáticas del sistema original.

Dentro de los sistemas con propiedades geométricas especiales, encontramos a los sistemas *Hamiltonianos*. Éstos pueden ser descritos por ecuaciones diferenciales de la forma:

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{x}}_1 &= -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}_2}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2), \\ \dot{\mathbf{x}}_2 &= \frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}_1}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)\end{aligned}\quad (1)$$

donde  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \mathbb{R}^d$  constituyen el estado,  $H : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$  es el llamado Hamiltoniano del sistema y  $d$  es el número de grados de libertad (dimensión del problema). Es común encontrar el Hamiltoniano dado de la siguiente forma:

$$H(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{1}{2} \mathbf{x}_1^T M(\mathbf{x}_2)^{-1} \mathbf{x}_1 + U(\mathbf{x}_2) \quad (2)$$

siendo  $M(\mathbf{x}_2)$  una matriz simétrica de *masa* y definida positiva, y la matriz de *potencial*  $U(\mathbf{x}_2)$ . En este caso la función  $H(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$  representa la energía total del sistema.

Los sistemas Hamiltonianos cumplen con varias propiedades geométricas debido a su estructura (Hairer, 2005).

Denominando flujo,  $\varphi_t(\mathbf{y})$ , a la solución analítica del sistema partiendo de un conjunto de condiciones iniciales  $\mathbf{y} = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$  a lo largo del tiempo  $t$ , se cumplen las siguientes propiedades.

1. La propiedad de grupo,  $\varphi_t \circ \varphi_s = \varphi_{t+s}$ , es satisfecha por toda ecuación diferencial. Un caso particular de esta propiedad es la de *simetría*:

$$\varphi_t \circ \varphi_{-t} = \varphi_0 = \text{identidad} \quad (3)$$

2. El Hamiltoniano  $H(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$  es constante a través de las soluciones de (1) lo cual significa que la energía se conserva.
3. El flujo, o solución analítica, de (1) es una transformación simpléctica, es decir,

$$\varphi_t'(\mathbf{y})^T J \varphi_t'(\mathbf{y}) = J, \forall t \geq 0, J = \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix} \quad (4)$$

donde la prima en  $\varphi_t'(\mathbf{y})$  denota la derivación con respecto a  $\mathbf{y}$ . Debido a que  $\det \varphi_t'(\mathbf{y}) = 1$ , esto implica que el flujo es conservatorio del volumen

$$\mu(\varphi_t(A)) = \mu(A) \forall t \geq 0 \quad (5)$$

Para sistemas de un sólo grado de libertad simplecticidad es equivalente a preservación del área del flujo.

4. Si  $H(-\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = H(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ , el flujo  $\varphi_t$  es  $\rho$ -reversible con respecto a la reflexión  $\rho(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = (-\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ , o sea satisface:

$$(\rho \circ \varphi_t)(\mathbf{y}) = (\varphi_t^{-1} \circ \rho)(\mathbf{y}) \quad \forall t, \mathbf{y} \quad (6)$$

La idea de los integradores geométricos es que preserven algunas de las propiedades antes enumeradas.

Assumiendo que un método numérico para resolver ecuaciones diferenciales ordinarias es un mapeo

$\Phi_h$  definido sobre el espacio de estados que aproxima en tiempo  $h$  el flujo  $\varphi_t$ , la aproximación numérica en el tiempo  $t = nh$  es obtenida por medio de  $\mathbf{y}_n = \Phi_h(\mathbf{y}_{n-1})$ .

En función de las propiedades geométricas que el método preserva, decimos lo siguiente:

1. El método es *simétrico*, o reversible en el tiempo, si satisface

$$\Phi_h \circ \Phi_{-h} = I \quad \text{o} \quad \Phi_h = \Phi_{-h}^{-1}, \quad (7)$$

2. es *conservatorio de la energía* a través de las soluciones numéricas de (1) si

$$H(\mathbf{x}_{1n}, \mathbf{x}_{2n}) = \text{constante}, \quad (8)$$

3. es llamado *simpléctico* si  $\Phi_h$  satisface

$$\Phi_h'(y)^T J \Phi_h'(y) = J, \quad (9)$$

4. es  $\rho$ -*reversible* si, cuando  $H(-\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = H(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ , resulta que

$$(\rho \circ \Phi_h)(\mathbf{y}) = (\Phi_h^{-1} \circ \rho)(\mathbf{y}) \quad \forall h, \mathbf{y}. \quad (10)$$

Un ejemplo de método simétrico es la *regla implícita del punto medio*:

$$\mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}_n + h \cdot \mathbf{f}\left(\frac{\mathbf{y}_n + \mathbf{y}_{n+1}}{2}\right) \quad (11)$$

(puede verse fácilmente la simetría ya que la fórmula queda inalterada después de intercambiar  $\mathbf{y}_n \longleftrightarrow \mathbf{y}_{n+1}$  y  $h \longleftrightarrow -h$ ).

Un ejemplo de método simpléctico en tanto está dado por el *método de Euler simpléctico*:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{1n+1} &= \mathbf{x}_{1n} - h \cdot \frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}_2}(\mathbf{x}_{1n+1}, \mathbf{x}_{2n}) \\ \mathbf{x}_{2n+1} &= \mathbf{x}_{2n} + h \cdot \frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}_1}(\mathbf{x}_{1n+1}, \mathbf{x}_{2n}) \end{aligned} \quad (12)$$

Como podemos ver, ambos métodos son *implícitos*, y esto es una característica general de los integradores geométricos. Hay casos particulares (cuando el Hamiltoniano es separable) en el que algunos de estos métodos se vuelven explícitos (Hairer *et al.*, 2006).

## 2. MÉTODOS DE INTEGRACIÓN POR CUANTIFICACIÓN

Esta sección presenta los principios de los métodos de integración por cuantificación y muestra los problemas que tienen para simular sistemas Hamiltonianos.

### 2.1 Ejemplo introductorio

Consideremos el siguiente sistema (correspondiente a un oscilador armónico):

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= x_2 \\ \dot{x}_2 &= -x_1 \end{aligned} \quad (13)$$

y la siguiente *aproximación*:

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= \text{int}(x_2) \triangleq q_2 \\ \dot{x}_2 &= -\text{int}(x_1) \triangleq -q_1 \end{aligned} \quad (14)$$

Aquí, las variables  $q_i$  (en este caso la parte entera de  $x_i$ ) se denominan variables cuantificadas. Este nuevo sistema modificado (que denominaremos *sistema cuantificado*) puede resolverse de muy fácilmente de manera analítica.

Por ejemplo, considerando condiciones iniciales  $x_1(0) = 4,5$  y  $x_2(0) = 0,5$  ocurre lo siguiente: en  $t = 0$  tenemos  $q_1 = 4$  y  $q_2 = 0$ . Por lo tanto  $\dot{x}_1 = 0$  y  $\dot{x}_2 = -4$ . Esta situación se mantiene hasta que  $x_i = q_i$  o hasta que  $x_i = q_i + \Delta Q_i$  para  $i = 1$  o  $i = 2$ .

El próximo cambio en  $q_2$  es entonces agendado para  $t = 0,5/4 = 0,125$  mientras que en el caso de  $q_1$  quedará agendado para  $t = \infty$  ya que la pendiente de  $x_1$  es nula.

Por lo tanto en  $t = 0,125$  hay un nuevo paso tras el cual,  $q_1(0,125) = 4$ ,  $q_2(0,125) = -1$ ,  $x_1(0,125) = 4,5$  y  $x_2(0,125) = 0$ . Las derivadas quedan  $\dot{x}_1 = -1$  y  $\dot{x}_2 = -4$ . El próximo cambio en  $q_1$  se reagenda para  $t = 0,125 + 0,5/1 = 0,625$  mientras el siguiente cambio en  $q_2$  se agenda en  $t = 0,125 + 1/4 = 0,375$ . Por lo tanto, el siguiente paso es en  $t = 0,375$ .

En  $t = 0,375$  tenemos  $q_1(0,375) = 4$ ,  $q_2(0,375) = -2$ ,  $x_1(0,375) = 4,25$  y  $x_2(0,375) = -2$  y las derivadas son  $\dot{x}_1 = -2$  y  $\dot{x}_2 = -4$ . Luego el próximo paso de  $q_2$  está agendado en el tiempo  $t = 0,375 + 1/4 = 0,625$  y en  $q_1$  será en  $t = 0,375 + 0,25/2 = 0,5$ .

Por lo tanto el próximo paso es en  $t = 0,5$  donde será  $q_1(0,5) = 3$ ,  $q_2(0,5) = -2$ ,  $x_1(0,625) = 4$  y  $x_2(0,5) = -2,5$  y las derivadas son  $\dot{x}_1 = -2$  y  $\dot{x}_2 = -3$ .

Ahora tenemos que el próximo paso para  $q_1$  está agendado para  $t = 0,5 + 1/2 = 1$  y para  $q_2$  en  $t = 0,5 + 0,5/3 \simeq 0,667$ .

Por lo tanto en  $t \simeq 0,667$  se produce la conmutación de,  $q_2(0,667) = -3$ , quedando  $q_1(0,667) = 3$ ,  $x_1(0,667) = 3,667$  y  $x_2(0,667) = -2$  y las derivadas son  $\dot{x}_1 = -3$  y  $\dot{x}_2 = -3$ .

Si continuamos los cálculos de este modo, encontramos que cuando  $t = 6,22222\dots$  se repite nuevamente la condición inicial. La simulación resultante se muestra en la Figura 1.

En este caso, el método utilizado parece funcionar muy bien, ya que conserva incluso la característica periódica de la solución original (lo cual es un hecho muy interesante pensando en integración geométrica).

Sin embargo, en casos generales, este método no funcionará debido a que pueden aparecer oscila-

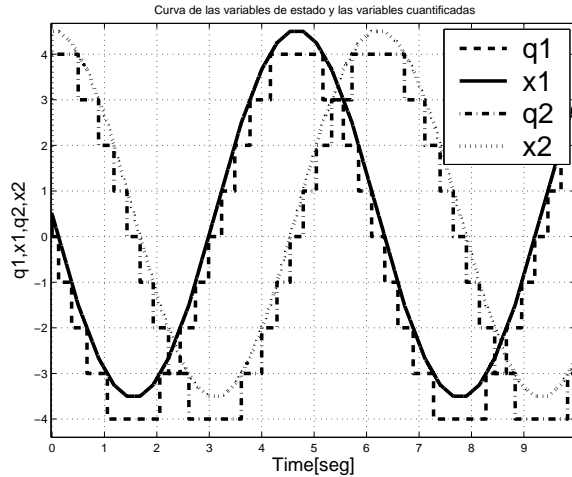


Figura 1. Solución analítica del sistema cuantificado de la Ec.(14)

ciones infinitamente rápidas (Cellier and Kofman, 2006). Este problema se soluciona con el agregado de histéresis, lo que nos lleva a la definición del método de QSS.

## 2.2 Métodos de QSS

Dado el sistema <sup>4</sup>:

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t)) \quad (15)$$

el método de QSS1 lo aproxima por

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{q}(t)) \quad (16)$$

En este último sistema,  $\mathbf{q}$  es el vector de variables cuantificadas, cuyas componentes se relacionan con las del vector de estado  $\mathbf{x}$  mediante la siguiente función de cuantificación con histéresis:

$$q_j(t) = \begin{cases} q_j(t^-) + \Delta Q_j & \text{si } x_j(t^-) - q_j(t) \geq \Delta Q_j \\ q_j(t^-) - \Delta Q_j & \text{si } q_j(t^-) - x_j(t) \geq \varepsilon_j \\ q_j(t^-) & \text{en otro caso} \end{cases}$$

donde  $\Delta Q_j$  se denomina *quantum* y  $\varepsilon_j$  se denomina *ancho de histéresis*.

El ancho de histéresis en general se toma igual al quantum (para reducir oscilaciones sin aumentar el error). En tal caso, puede verse fácilmente que  $q_j(t)$  sigue una trayectoria seccionalmente constante, que sólo cambia cuando la diferencia con  $x_j(t)$  se hace igual al quantum, y tras cada cambio queda  $q_j(t) = x_j(t)$ .

El sistema definido por el método de QSS1 (16) es equivalente a un modelo DEVS (Zeigler *et al.*, 2000), por lo que la forma habitual de implementar este método es a través de simuladores de sistemas DEVS.

<sup>4</sup> Aquí definimos los métodos de QSS sólo para sistemas invariantes en el tiempo, ya que trataremos con sistemas Hamiltonianos. La definición general, sin embargo, incluye también los casos forzados (Cellier and Kofman, 2006).

Además del método de QSS1, existen métodos similares de orden superior: QSS2 (Kofman, 2002) y QSS3 (Kofman, 2006); y un método para sistemas stiff denominado BQSS (Migoni *et al.*, 2007).

Un resumen de las propiedades teóricas y de la metodología de implementación de dichos métodos puede encontrarse en los Capítulos 11 y 12 de (Cellier and Kofman, 2006).

## 2.3 Métodos de QSS en sistemas Hamiltonianos

Utilizando los métodos de integración por cuantificación de QSS1 (método explícito de 1<sup>er</sup> orden) y BQSS (método *Backward* de 1<sup>er</sup> orden) simulamos el sistema de la Ecuación (13), en ambos casos utilizando el quantum igual a 1.

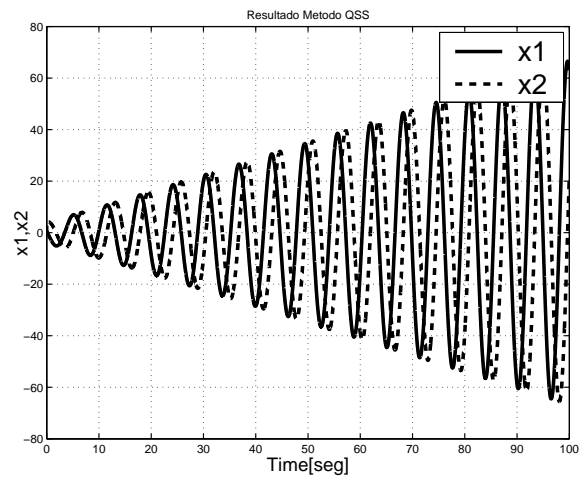


Figura 2. Simulación del oscilador armónico con QSS1

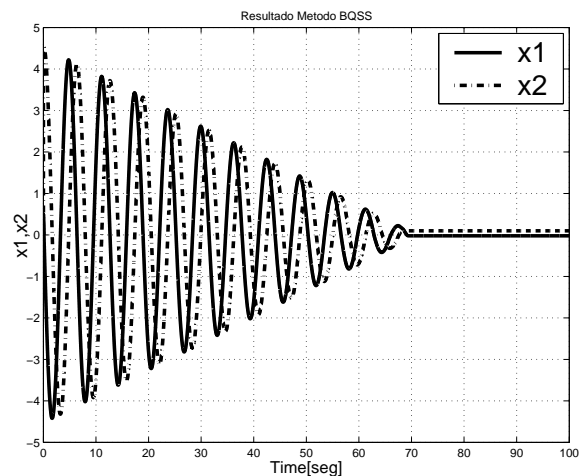


Figura 3. Simulación del oscilador armónico con BQSS

Como se ve en los resultados, mostrados en las Figuras 2 y 3, en ninguno de los dos casos se preserva la respuesta cualitativa del sistema.

La única diferencia entre el método de QSS1 y el método usado en el ejemplo introductorio (consistente en tomar  $q_i$  como la parte entera de  $x_i$ ) es la presencia de histéresis. Aparentemente, la histéresis es lo que arruinó la propiedad geométrica que se observaba en la Fig.1.

En la siguiente sección utilizaremos esta observación como base para desarrollar una pequeña teoría sobre integración geométrica por cuantificación.

### 3. MÉTODOS GEOMÉTRICOS DE QSS

Aquí estudiaremos en primer lugar las principales propiedades geométricas de los métodos de QSS sin histéresis, y desarrollaremos un nuevo método que satisfice propiedades de simetría y  $\rho$ -reversibilidad.

#### 3.1 Resultado Principal

Los siguientes resultados muestran que los métodos de QSS sin histéresis son siempre simétricos, que bajo cierta condición en la cuantificación preservan la  $\rho$ -reversibilidad respecto de la reflexión y que, bajo ciertas restricciones adicionales en el sistema Hamiltoniano original, son también simplécticos y conservan la energía.

*Teorema 3.1.* Supongamos que un método de integración aplicado al sistema de la Ec.(15) resuelve analíticamente el sistema de la Ec.(16), donde  $q_i = q_i(x_i)$  es una función sin memoria (por lo tanto sin histéresis).

Entonces, dicho método resulta ser *simétrico*.

**Demostración.** Definiendo:

$$\mathbf{f}_Q(\mathbf{x}) \triangleq \mathbf{f}(\mathbf{q}(\mathbf{x})) \quad (17)$$

el sistema (16) puede reescribirse como

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}_Q(\mathbf{q}(t)) \quad (18)$$

que es una ecuación diferencial normal, por lo tanto su solución es *simétrica*.  $\square$

*Teorema 3.2.* Supongamos que un método de integración aplicado al sistema de la Ec.(15) resuelve analíticamente el sistema de la Ec.(16), donde  $q_i = q_i(x_i)$  es una función sin memoria (por lo tanto sin histéresis) que además es impar, es decir,  $q_i(-x_i) = -q_i(x_i)$ .

Entonces, dicho método preserva la  $\rho$ -reversibilidad respecto a la reflexión.

**Demostración.** De la definición de  $\rho$ -reversibilidad (Hairer *et al.*, 2006), resulta que una

ecuación diferencial de la forma (15) es reversible respecto a una transformación lineal invertible  $\rho$  del espacio de estados si se cumple que

$$\rho(\mathbf{f}(\mathbf{x})) = -\mathbf{f}(\rho(\mathbf{x})) \quad (19)$$

Notar que debido a la propiedad  $q_i(-x_i) = -q_i(x_i)$  ( $\mathbf{q}$  es impar), resulta que cuando  $\rho$  es una reflexión,  $\rho(\mathbf{q}(\mathbf{x})) = \mathbf{q}(\rho(\mathbf{x}))$ .

Entonces, definiendo  $\mathbf{f}_Q$  como en la Ec.(17), vemos que

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{f}_Q(\mathbf{x})) &= \rho(\mathbf{f}(\mathbf{q}(\mathbf{x}))) \text{ por definición de } \mathbf{f}_Q \\ &= -\mathbf{f}(\rho(\mathbf{q}(\mathbf{x}))) \text{ porque } \mathbf{f} \text{ es } \rho\text{-reversible} \\ &= -\mathbf{f}(\mathbf{q}(\rho(\mathbf{x}))) \text{ porque } \mathbf{q} \text{ es impar} \\ &= -\mathbf{f}_Q(\rho(\mathbf{x})) \end{aligned}$$

lo que demuestra que  $\mathbf{f}_Q$  es  $\rho$ -reversible respecto de la reflexión. Es decir, la solución numérica preserva la  $\rho$ -reversibilidad.  $\square$

*Teorema 3.3.* Supongamos que un método de integración aplicado al sistema (15) resuelve analíticamente el sistema (16), donde  $q_i = q_i(x_i)$  es una función sin memoria.

Entonces, dicho método aplicado a un sistema *Hamiltoniano* donde  $\frac{\partial^2 H}{\partial x_i \partial x_j} = 0$  si  $i \neq j$ , resuelve de manera analítica un sistema Hamiltoniano similar al original.

**Demostración.** Dado el Hamiltoniano  $H(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ , el sistema tiene la forma:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{x}}_1 &= -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}_2}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \\ \dot{\mathbf{x}}_2 &= \frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}_1}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \end{aligned} \quad (20)$$

El sistema cuantificado, en tanto, se puede escribir como:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{x}}_1 &= -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}_2}(\mathbf{q}_1(\mathbf{x}_1), \mathbf{q}_2(\mathbf{x}_2)), \\ \dot{\mathbf{x}}_2 &= \frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}_1}(\mathbf{q}_1(\mathbf{x}_1), \mathbf{q}_2(\mathbf{x}_2)) \end{aligned} \quad (21)$$

Definimos una función  $H_Q(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$  de la siguiente manera:

$$H_Q(\mathbf{x}) \triangleq \sum_{i=1}^n H_{Q_i}(\mathbf{x}) \quad (22)$$

donde las  $H_{Q_i}(\mathbf{x})$  están definidas como:

$$H_{Q_i}(\mathbf{x}) \triangleq \int_0^{x_i} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}_i}(\mathbf{q}(\mathbf{z}^{(i)})) dz_i \quad (23)$$

Aquí,  $\mathbf{z}^{(i)}$  es tal que:

$$z_j^{(i)} = \begin{cases} z_i, & i=j; \\ x_j, & i \neq j. \end{cases} \quad (24)$$

Teniendo en cuenta que

$$\frac{\partial^2 H}{\partial x_i \partial x_j} = 0, \quad i \neq j \quad (25)$$

resulta que

$$\frac{\partial H_{Q_i}(\mathbf{x})}{\partial x_j} = \begin{cases} \frac{\partial H}{\partial x_i}(\mathbf{q}(\mathbf{x})), & \text{si } i=j; \\ 0, & \text{si } i \neq j. \end{cases} \quad (26)$$

Entonces, considerando la Ec.(22), resulta que

$$\frac{\partial H_Q(\mathbf{x})}{\partial x_i} = \frac{\partial H}{\partial x_i}(\mathbf{q}(\mathbf{x})) \quad (27)$$

de donde,

$$\frac{\partial H_Q(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}_1} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}_1}(\mathbf{q}(\mathbf{x})) \quad (28)$$

y

$$\frac{\partial H_Q(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}_2} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}_2}(\mathbf{q}(\mathbf{x})) \quad (29)$$

Reemplazando en la Ec.(21) resulta:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{x}}_1 &= -\frac{\partial H_Q}{\partial \mathbf{x}_2}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \\ \dot{\mathbf{x}}_2 &= \frac{\partial H_Q}{\partial \mathbf{x}_1}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \end{aligned} \quad (30)$$

que define un sistema Hamiltoniano normal con Hamiltoniano  $H_Q$ .  $\square$

*Corolario 3.1.* Un método que cumple con las hipótesis del teorema 3.3, aplicado a un sistema Hamiltoniano que cumple las hipótesis adicionales de dicho teorema, es *simétrico*, *simpléctico* y *conserva la energía*.

**Demostración.** Todas estas propiedades se cumplen ya que la solución numérica del método es la solución analítica de un sistema Hamiltoniano, con  $H = H_Q$ .  $\square$

### 3.2 Método de CQSS (Centered Quantized State System)

Cómo se pudo ver en la sección 2.1, el método de integración aplicado en el ejemplo introductorio (consistente en cambiar  $x_i$  por  $\text{int}(x_i)$ ) verifica las hipótesis del Teorema 3.1. Además, como el sistema Hamiltoniano de dicho ejemplo verifica las hipótesis del Teorema 3.3, obtuvimos una solución que cumple con todas las propiedades de los sistemas Hamiltonianos.

Sin embargo, en casos más generales, la función de cuantificación utilizada no cumple con las hipótesis del Teorema 3.2 ya que  $\text{int}(x_i)$  no es una función impar.

Por otro lado, el error en los métodos de QSS siempre depende de la máxima diferencia entre  $q_i$  y  $x_i$  (Cellier and Kofman, 2006).

Entonces, si queremos llevar al mínimo la diferencia entre las variables cuantificadas  $q_i$  y las variables de estado  $x_i$ , y además conservar la

propiedad de  $\rho$ -reversibilidad, no debemos utilizar la parte entera sino el promedio entre el piso y el techo de cada intervalo de cuantificación. Esto define el método de QSS Centrado (CQSS).

*Definición 3.1.* Dado el sistema:

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) \quad (31)$$

el método CQSS lo aproxima por:

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{q}, t) \quad (32)$$

donde las componentes  $q_i$  de  $\mathbf{q}$  verifican:

$$q_i(t) = \text{int} \left( \frac{x_i(t)}{\Delta Q_i} \right) \cdot \Delta Q_i + \frac{\Delta Q_i}{2} \quad (33)$$

En virtud de los Teoremas 3.1 y 3.2, el método de CQSS resulta *simétrico* y preserva la  $\rho$ -reversibilidad respecto de la reflexión. Estas dos propiedades son suficientes para garantizar que el método tendrá un muy buen comportamiento a largo plazo con respecto a la conservación de la energía (Hairer *et al.*, 2006).

Cabe destacar que el método de CQSS cumple con estas propiedades siendo totalmente *explícito*.

## 4. EJEMPLOS

Presentamos a continuación tres ejemplos de simulación de sistemas Hamiltonianos.

Todas las simulaciones presentadas en estas sección se realizaron en un computador con procesador Intel Celeron M, de 1,46GHz con 512 Mb de RAM y fueron realizadas en el simulador PowerDEVS.

### 4.1 Oscilador Armónico

Retomamos aquí el sistema de la Ec.(13). La simulación con CQSS utilizando un quantum  $\Delta Q_i = 1$  para ambas variables arroja el resultado de la Fig.4. Puede verse que la solución numérica es periódica y conserva energía (tal como lo garantiza el Teorema 3.3).

Además, comparando con lo obtenido en el ejemplo introductorio cuantificando con la parte entera (Figura 1), podemos ver que CQSS recupera una propiedad geométrica que se había perdido: las trayectorias son simétricas respecto a los ejes (esto se debe a la  $\rho$ -reversibilidad).

### 4.2 Péndulo

Uno de los ejemplos más simples de sistemas Hamiltonianos es la ecuación del péndulo. Usando

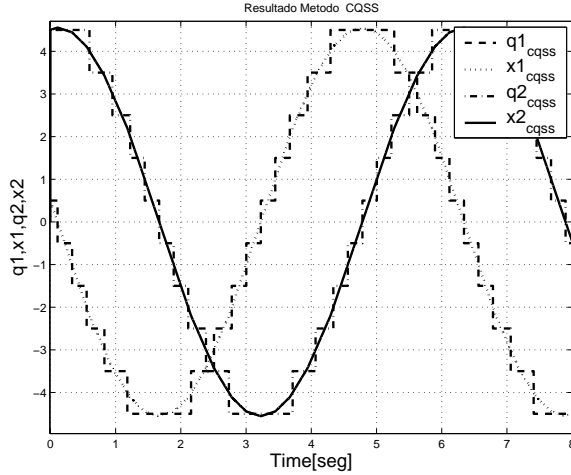


Figura 4. Simulación del oscilador armónico con CQSS

la segunda ley de Newton se puede escribir:  $ml\ddot{\theta} = -mg\sin\theta - kl\dot{\theta}$ , donde  $m$  es la masa de la bola,  $l$  es la longitud del brazo,  $\theta$  es el ángulo entre la vertical y el brazo,  $g$  es la aceleración de la gravedad, y  $k$  es el coeficiente de fricción. En nuestro caso simularemos el sistema sin pérdida de energía, por tanto sin fricción;  $k = 0$ .

Tomando como variables de estado  $x_1 = \theta$  y  $x_2 = \dot{\theta}$  podemos escribir las ecuaciones de estado.

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= x_2, \\ \dot{x}_2 &= -\frac{g}{l}\sin(x_1). \end{aligned} \quad (34)$$

Este sistema se puede reescribir en la forma canónica de un sistema Hamiltoniano:

$$\dot{x}_1 = H_{x_2}(x_1, x_2), \quad \dot{x}_2 = -H_{x_1}(x_1, x_2), \quad (35)$$

Siendo el Hamiltoniano:  $H(x_1, x_2) = \frac{1}{2}x_2^2 - \cos(x_1)$  (con masa  $m = 1$ , longitud del brazo  $l = 1$  y aceleración gravitacional  $g = 1$ .)

Partiendo con condiciones iniciales  $x_1(0) = 1$  y  $x_2(0) = 0$ . El resultado de la simulación, utilizando el método de CQSS con un el mismo quantum en cada uno de los integradores ( $\Delta q = 0,01$ ), luego de 200seg es el mostrado en la figura 5.

Cómo se puede observar el resultado respeta el comportamiento oscilatorio del sistema. La simulación da cuentas de la propiedad conservatoria de energía intrínseca al sistema Hamiltoniano.

En este caso, el sistema cumple con las hipótesis del Teorema 3.3, por lo que se cumplen todas las propiedades geométricas. Particularmente, siendo un sistema de orden 2, resultan trayectorias cerradas, es decir, la solución numérica es periódica (al igual que la solución original).

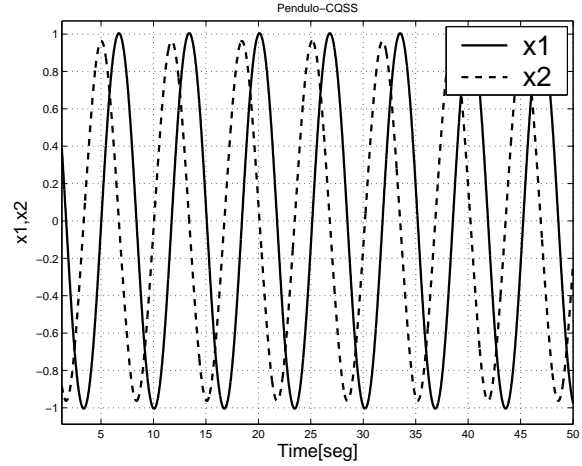


Figura 5. Simulación del Péndulo utilizando CQSS

#### 4.3 Línea de transmisión sin pérdidas

Los modelos de líneas de transmisión se describen mediante sistemas de ecuaciones diferenciales parciales. Sin embargo, estos pueden ser aproximados por modelos concentrados donde los efectos distribuidos de capacidad, inductancia y se representan por una cascada (Figura 6) de capacitores e inductores con valores proporcionales a unidades métricas. Otra manera de obtener modelos concentrados aproximados es mediante la utilización de técnicas de discretización espacial tales como el método de líneas (Cellier and Kofman, 2006).

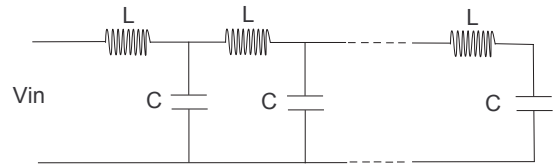


Figura 6. Línea de transmisión LC

En consecuencia, el esquema resulta en una ecuación diferencial ordinaria de orden grande. En la ecuación (36) se presenta un ejemplo compuesto por ocho secciones de circuito LC resultando un sistema lineal de orden 16.

$$\begin{aligned} \frac{di_1}{dt} &= \frac{1}{L}v_{in} - \frac{1}{L}u_1 \\ \frac{du_1}{dt} &= \frac{1}{C}i_1 - \frac{1}{C}i_2 \\ \frac{di_2}{dt} &= \frac{1}{L}u_1 - \frac{1}{L}u_2 \\ \frac{du_2}{dt} &= \frac{1}{C}i_2 - \frac{1}{C}i_3 \\ &\vdots \\ \frac{di_8}{dt} &= \frac{1}{L}u_7 - \frac{1}{L}u_8 \\ \frac{du_8}{dt} &= \frac{1}{C}i_8 \end{aligned} \quad (36)$$

Este sistema puede también expresarse en la forma de sistema hamiltoniano.

En la Figura 7 y 8 se muestra el resultado de simular utilizando el método CQSS aplicado a la línea de Transmisión sin pérdidas cuyos parámetros son:  $L = 1,25mHy/milla$  y  $C = 2mF/milla$ . De esta manera simulamos una línea de transmisión de 8 millas de longitud. Como alimentación se utiliza un pulso de amplitud, que representa una tensión de alimentación, igual a 10.

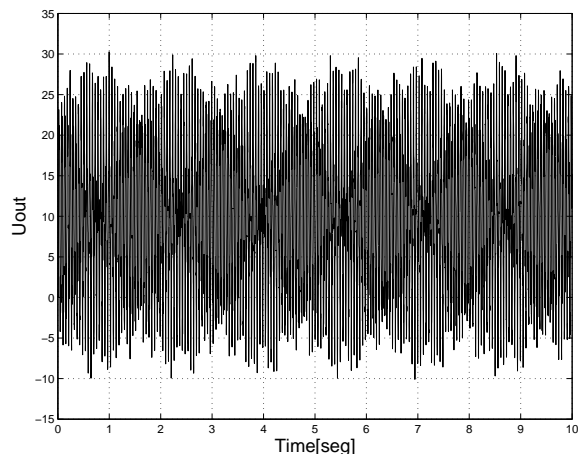


Figura 7. Simulación de la Línea LC con CQSS

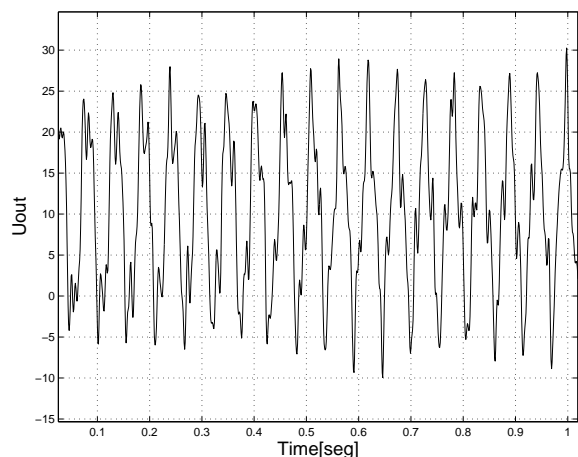


Figura 8. Simulación de la Línea LC con CQSS (Detalle)

## 5. CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO

Presentamos una primera aproximación a la integración numérica de sistemas Hamiltonianos con métodos de integración por cuantificación. Además de analizar las características geométricas generales de estos métodos, propusimos un método denominado CQSS que preserva las principales propiedades de los sistemas Hamiltonianos. Una novedad de este método es que es completamente explícito (lo cual constituye una ventaja con respecto a los métodos de integración geométrica de tiempo discreto).

El método desarrollado es de primer orden por lo que, más allá de las fuertes propiedades teóricas que satisface, no es eficiente cuando se requiere una gran precisión. Otra de las falencias es que carece de histéresis, por lo que no se puede garantizar que funcione en todos los casos (en muchos sistemas puede producir oscilaciones infinitamente rápidas que traban la simulación).

El trabajo futuro estará orientado a resolver las dificultades señaladas en el párrafo anterior, desarrollando métodos de orden superior y buscando solución al problema de las oscilaciones infinitamente rápidas. También nos proponemos como objetivo extender y generalizar las propiedades teóricas estudiadas.

Por otro lado, se estudiará en que clases de aplicaciones estos nuevos métodos presentan ventajas sobre los métodos geométricos convencionales. Teniendo en cuenta las ventajas de los métodos de QSS para el tratamiento de discontinuidades, es de esperar que esta eficiencia se mantenga en los sistemas Hamiltonianos discontinuos.

## REFERENCIAS

- Cellier, F. and E. Kofman (2006), *Continuous System Simulation*, Springer, New York.
- Hairer, E. (2005), "Important Aspects of Geometric Numerical Integration," *Journal of Scientific Computing*, **25**, 67–81.
- Hairer, E., C. Lubich, and G. Wanner (2006), *Geometric Numerical Integration. Second Edition*, Springer, New York.
- Kofman, E. (2002), "A Second Order Approximation for DEVS Simulation of Continuous Systems," *Simulation*, **78**, 76–89.
- Kofman, E. (2004), "Discrete Event Simulation of Hybrid Systems," *SIAM Journal on Scientific Computing*, **25**, 1771–1797.
- Kofman, E. (2006), "A Third Order Discrete Event Simulation Method for Continuous System Simulation," *Latin American Applied Research*, **36**, 101–108.
- Kofman, E. and S. Junco (2001), "Quantized State Systems. A DEVS Approach for Continuous System Simulation," *Transactions of SCS*, **18**, 123–132.
- Migoni, G., E. Kofman, and F. Cellier (2007), "Integración por Cuantificación de Sistemas Stiff," *Revista Iberoamericana de Automática e Informática Industrial*, **4**, 97–106.
- Zeigler, B., T. Kim, and H. Praehofer (2000), *Theory of Modeling and Simulation. Second edition*, Academic Press, New York.