

rotações ótimas: experimentos computacionais com duas descrições alternativas

Rodrigo Silva Lima^{*}, Margarida Pinheiro Mello,

Depto de Matemática Aplicada, IMECC, Unicamp,
 rodrilima@ime.unicamp.br, margarid@ime.unicamp.br

Neste trabalho enfocamos dois problemas de otimização que envolvem a descrição de rotações: o controle da orientação de um satélite no espaço e o empacotamento de moléculas. Cada um desses problemas será formulado e resolvido utilizando tanto *quatérnios* quanto *ângulos de Euler* para representar as rotações envolvidas.

1 Controle da orientação de um satélite

Um satélite de massa 1 kg é enviado ao espaço com a missão de coletar imagens de corpos celestes. Durante a missão, é preciso controlar sua orientação de modo a assegurar que seu instrumento óptico não fique exposto ao brilho do sol ao longo da manobra, para não danificá-lo. Tratamos do problema de controle que consiste em determinar o torque $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$ necessário para reorientar o satélite de modo que o cone que emana do instrumento fotográfico evite os raios solares.

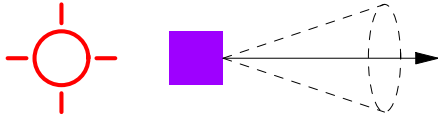


Figura 1: Satélite e raios solares.

Denotando o intervalo de tempo correspondente à manobra por $[t_0, t_f]$, desejamos determinar $\mathbf{u}(t)$, para $t \in [t_0, t_f]$, de modo que o vetor velocidade angular $\boldsymbol{\omega}(t)$ e os parâmetros que representam a orientação do satélite satisfaçam determinadas condições iniciais e finais.

A dependência entre o torque e a velocidade angular é modelada pelas equações de Euler

$$J_1 \dot{\omega}_1(t) - (J_2 - J_3) \omega_2(t) \omega_3(t) = u_1(t) \quad (1)$$

$$J_2 \dot{\omega}_2(t) - (J_3 - J_1) \omega_3(t) \omega_1(t) = u_2(t) \quad (2)$$

$$J_3 \dot{\omega}_3(t) - (J_1 - J_2) \omega_1(t) \omega_2(t) = u_3(t), \quad (3)$$

onde $J_1 = 100 \text{ kg m}^2$, $J_2 = 200 \text{ kg m}^2$, $J_3 = 300 \text{ kg m}^2$ e o sistema de equações diferenciais que descreve a relação entre a orientação do satélite e sua velocidade angular. Esta última equação depende da parametrização escolhida. Em [1], as

rotações são descritas por *quatérnios*, de modo que a variação temporal desses parâmetros, neste caso, é dada por

$$\dot{q}(t) = \frac{1}{2} \Omega(t) q(t), \quad (4)$$

onde

$$\Omega(t) = \begin{bmatrix} 0 & \omega_3(t) & \omega_2(t) & \omega_1(t) \\ -\omega_3(t) & 0 & \omega_1(t) & \omega_2(t) \\ \omega_2(t) & -\omega_1(t) & 0 & \omega_3(t) \\ -\omega_1(t) & -\omega_2(t) & -\omega_3(t) & 0 \end{bmatrix}.$$

Se, no entanto, representarmos as rotações por *ângulos de Euler*, temos as equações

$$\begin{bmatrix} \dot{\phi}(t) \\ \dot{\theta}(t) \\ \dot{\psi}(t) \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} \omega_1(t) \\ \omega_2(t) \\ \omega_3(t) \end{bmatrix}, \quad (5)$$

onde

$$M = \begin{bmatrix} 1 & \tan \theta(t) \sin \phi(t) & \tan \theta(t) \cos \phi(t) \\ 0 & \cos \phi(t) & -\sin \phi(t) \\ 0 & \sec \theta(t) \sin \phi(t) & \sec \theta(t) \cos \phi(t) \end{bmatrix},$$

e os ângulos ϕ , θ e ψ , são os ângulos de rotação da seqüência de Euler *ZYX*.

O próximo passo consiste em modelar a restrição relativa à orientação do instrumento óptico. Sejam \mathbf{x} (especificado em coordenadas inerciais) o vetor unitário que aponta para o sol e \mathbf{y} (especificado no sistema de coordenadas preso ao satélite) o vetor unitário que representa o eixo principal do cone de exclusão, que tem ângulo central α . Precisamos garantir que, durante a manobra, o vetor \mathbf{y}_I , que expressa o eixo no sistema inercial, exclua \mathbf{x} , de acordo com a Figura 2.

Esta restrição é modelada pela inequação

$$\mathbf{x}^T \cdot \mathbf{y}_I \leq \cos \alpha, \quad (6)$$

onde α é um ângulo agudo fixo.

O problema de controle de orientação é resolvido via discretização. Para tanto, o intervalo de tempo $[t_0, t_f]$ é uniformemente dividido em N subintervalos de comprimento Δt . A solução (aproximada) é obtida resolvendo-se uma seqüência de problemas de otimização não lineares, um para cada instante de tempo $t_k = t_0 + k\Delta t$, com $k = 0, 1, \dots, N - 2$.

^{*}bolsista de mestrado - CAPES

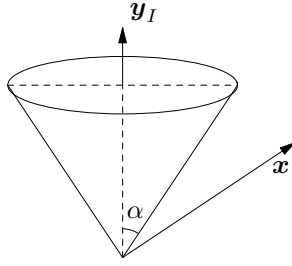


Figura 2: Zona de exclusão.

Os termos envolvendo derivadas nas equações (1), (2) e (3) são discretizados utilizando-se diferenças finitas avançadas

$$J_i \dot{\omega}_i = J_i \left(\frac{\omega_i(t_{k+1}) - \omega_i(t_k)}{\Delta t} \right), \quad (7)$$

para $i = 1, 2, 3$. Note que as restrições resultantes do problema discretizado serão lineares (a incógnita é $\omega(t_{k+1})$). As equações (4) e (5) serão discretizadas analogamente. A função objetivo a ser minimizada em cada formulação representa a soma do erro entre a velocidade angular a cada instante de tempo e a velocidade angular final e do erro entre a orientação controlada e a orientação final desejada.

2 Empacotamento de moléculas

O problema de encontrar uma configuração inicial para um sistema de moléculas pode ser formulado como um problema de empacotamento e resolvido por um procedimento de otimização. Neste problema, devemos distribuir uma quantidade $nmol$ de moléculas em uma região finita do espaço de modo que a distância entre pares de átomos de moléculas diferentes não seja menor que uma tolerância $\epsilon > 0$. Para tal é conveniente tratar cada molécula como um corpo rígido. Assim a localização do j -ésimo átomo da i -ésima molécula pode ser descrita por meio de uma tripla de coordenadas $\mathbf{A}(i, j)$ com relação a um sistema de referência S_i com centro no baricentro da molécula i . Sabendo portanto a posição do baricentro \mathbf{C}_i da i -ésima molécula com relação ao sistema de referência fixo S_0 (comum a todas as moléculas) e a orientação R_i do sistema S_i com relação ao sistema S_0 , podemos facilmente calcular as coordenadas $\mathbf{P}(i, j)$ de cada átomo com relação ao sistema S_0 . Deste modo

$$\mathbf{P}(i, j) = \mathbf{C}_i + R_i \mathbf{A}(i, j).$$

Note que R_i é uma matriz de rotação. Nosso objetivo é encontrar R_i e \mathbf{C}_i , $i = 1, \dots, nmol$, de modo que os átomos de moléculas diferentes estejam suficientemente separados, isto é

$$\|\mathbf{P}(i, j) - \mathbf{P}(i', j')\| \geq \epsilon,$$

sempre que $i \neq i'$. Além disso, queremos que os átomos estejam dentro da região finita do espaço pré-fixada. Esta região é a caixa de centro na origem e lado de comprimento 2000, $[-1000, 1000]^3$. A função objetivo é a soma de funções do tipo $(\max\{0, b\})^2$, onde b pode ser o quanto ϵ excede a distância intra-átomos ou o quanto uma coordenada excede o limite da caixa. Como se trata de uma soma de quadrados, o valor da função objetivo é não-negativo, e assume zero somente quando os átomos estão “toleravelmente” separados e dentro da caixa pré-fixada.

O problema original proposto em [3] foi formulado utilizando a seqüência de Euler ZXZ para descrever o movimento de rotação de cada molécula. O problema é resolvido utilizando-se o pacote `easy`, que implementa o método de lagrangiano aumentado para problemas de otimização não-lineares, ver [2]. Martínez et al. formularam uma interface para a resolução do problema de empacotamento de moléculas por meio do `easy`, o programa `packmol`, disponível em <http://www.ime.unicamp.br/~martinez/packmol>.

Nossa contribuição consiste na reformulação do problema, expressando a matriz de rotação em termos de quatérnios, ao invés de ângulos de Euler. Com isto aumentamos ligeiramente o número de variáveis do problema (de $6nmol$, três coordenadas de baricentro e três ângulos para cada molécula, para $7nmol$, pois os três ângulos são substituídos pelas quatro componentes dos quatérnios) e acrescentamos $nmol$ restrições não-lineares de igualdade (cada quatérnio deve ter norma unitária). A vantagem desta reformulação consiste na eliminação das funções trigonométricas, substituídas por funções polinomiais, cujo cálculo consome tempo menor.

3 Resolução dos problemas de otimização

Os problemas apresentados nas seções 1 e 2 são casos particulares do problema

$$\begin{aligned} \min \quad & f(\mathbf{x}) \\ \text{s.a} \quad & \mathbf{h}(\mathbf{x}) = 0 \\ \text{com} \quad & \ell \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{u} \end{aligned} \quad (8)$$

onde

$$\begin{aligned} f & : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R} \\ \mathbf{h} & : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^m \end{aligned}$$

Em ambos os casos as funções f e \mathbf{h} são continuamente diferenciáveis.

Resolvemos (8) com auxílio do *software easy*, uma implementação do método do lagrangiano aumentado. Este método compreende iterações externas e internas. A cada iteração externa é encontrada a solução aproximada do subproblema abaixo, apenas com restrições de caixa, que tem por obje-

tivo minimizar a função lagrangiana aumentada

$$L_A(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu}) = f(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{h}(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^n \mu_i h_i^2(\mathbf{x}), \quad (9)$$

onde o vetor $\boldsymbol{\mu} > 0$ contém parâmetros de penalização e $\boldsymbol{\lambda}$ é uma aproximação do vetor de multiplicadores de Lagrange. As iterações internas são executadas na resolução dos subproblemas. O algoritmo para a resolução dos subproblemas utiliza aproximação quadrática da função objetivo, e trabalha com gradientes projetados e região de confiança. Os vetores $\boldsymbol{\lambda}$ e $\boldsymbol{\mu}$ são atualizados a cada iteração externa.

4 Resultados Computacionais

5 Problema do satélite

- Dados iniciais: $\theta = 50^\circ$, $[t_0, t_f] = [0, 500]$, $\mathbf{x} = (0, 0, 0)^T$, $\mathbf{y} = (0.750, 0.433, 0.500)^T$

- Condições de contorno:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\omega}(t_0) &= (0, 0, 0)^T \text{rad/s} \\ \mathbf{q}(t_0) &= (0, 0.258, 0.993, 0.025)^T \\ \boldsymbol{\omega}(t_f) &= (0, 0, 0)^T \text{rad/s} \\ \mathbf{q}(t_f) &= (0.025, 0.025, 0.999, 0.025)^T \end{aligned}$$

Os ângulos de Euler que serão utilizados na simulação são obtidos, por meio de regras de conversão, dos quatérnios acima.

Para visualizar a evolução no tempo do vetor quadridimensional \mathbf{q} , é conveniente introduzir o espaço Q , que consiste de vetores da forma

$$\left[\frac{q_1}{q_4}, \frac{q_2}{q_4}, \frac{q_3}{q_4} \right]^T,$$

onde \mathbf{q} é um quatérnio. A trajetória deste vetor tridimensional é exibida na Figura 3.

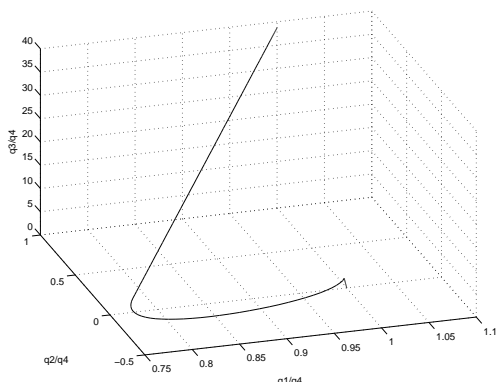


Figura 3: Simulação via quatérnios.

A Figura 4 mostra como os ângulos de Euler variam ao longo do intervalo de tempo $[t_0, t_f]$.

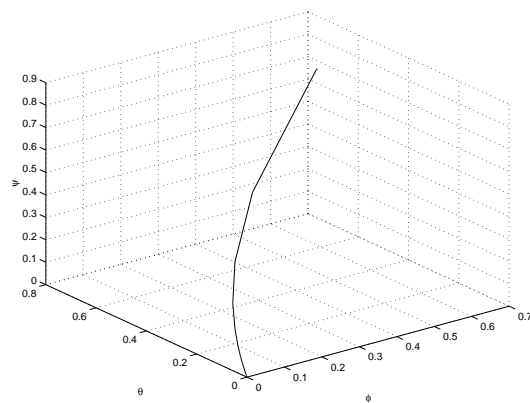


Figura 4: Simulação via ângulos de Euler.

N de mol.	PO	PM
7 H_2O e 5 CCL_4	0.03799	0.09798
8 H_2O e 6 CCL_4	0.05599	0.11998
10 H_2O e 9 CCL_4	0.10698	0.23296
1019 H_2O e 199 CCL_4	32.20610	4514.14453

Tabela 1: Tempo em segundos gastos na resolução de problemas-testes.

6 Problema do empacotamento

Apresentamos a seguir na Tabela 1 o tempo (em segundos) gasto pelos programas packmol original (PO) e modificado (PM) para calcular a configuração de uma quantidade determinada de moléculas de água (H_2O) e clorofórmio (CCL_4). Note que o programa modificado requer um tempo maior para resolver o problema do empacotamento. Isto provavelmente se deve à introdução de restrições não-lineares de igualdade.

Esta parte do trabalho ainda está em andamento. Dentre vários fatores a serem investigados, destacamos a experimentação com os valores dos vários parâmetros envolvidos na implementação do lagrangiano aumentado, e outras alternativas para a definição das variáveis que permitam eliminar as restrições de igualdade.

Referências

- [1] Y. Kim, M. Mesbahi, Quadratically Constrained Attitude Control via Semidefinite Programming, *IEEE Transactions on Automatic Control*, 49 (2004) 731–735.
- [2] N. Krejić, J. M. Martínez, M. P. Mello, E. A. Pilotta, Validation of an augmented Lagrangian algorithm with a Gauss-Newton c Hessian approximation using a set of hard-spheres problems, *Computational Optimization and Applications*, 16 (2000) 247–263.
- [3] J. M. Martínez, L. Martínez, Packing optimization for automated generation of complex system's initial configurations for molecular dy-

namics and docking, *Journal of Computational Chemistry*, 24 (2003) 819–825.