ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ М.В.ЛОМОНОСОВА»

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
КАФЕДРА ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ УПРАВЛЕНИЯ

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

«Методы контактной геометрии в задачах управления термодинамическими состояниями газов»

Выполнил студент 442 группы:
Гаврилов В. Р.

____

Научный руководитель:
д.ф.-м.н. Кушнер А. Г.

____

Допущен к защите _____________ 2022 г.

Зав. кафедрой _____________

Москва
2022

Содержание

1 Введение

Построение термодинамических процессов, на которых максимизируется механическая работа системы, является одной из основополагающих задач классической термодинаимики и отсылает к работам Сади Карно [6]. В наши дни при решении задач динамики газов и фильтрации в пористых средах в тех случаях, когда процессами можно управлять с помощью внешних воздействий, важной является идея оптимального управления.

В работе [1] рассмотрена задача оптимального управления идеальным газом по максимизации механической работы. Исследуется дифференциальная **форма Гиббса**, которая задает контактную структуру на термодинамическом фазовом пространстве. Функции состояния идеального газа используются для построения двумерного лежандрова многообразия на контактной структуре и контактных векторных полей на данном многообразии. Ставится задача оптимального управления с функционалом качества, выраженным через дифференциальную форму работы. Находятся интегралы и траектории гамильтоновой системы.

В данной работе предлагается иной способ интегрирования гамильтоновой системы: численный. Так как данная система представляет из себя систему нелинейных ОДУ первого порядка, то решение соответствующей краевой задачи можно получить **методом стрельбы**, если в качестве прицельного параметра рассмотреть начальное значение сопряженной переменной. Приводится алгоритм и его программная реализация на языке **Python**.

Данный способ значительно расширяет область применимости метода, предложенного в работе [1], так как позволяет рассматривать более сложные модели термодинамических систем без надобности аналитического поиска интегралов гамильтоновой системы. В частности, в качестве развития данной тематики, планируется решение задачи для газа Ван-дер-Ваальса.

2 Математические основы

2.1 Векторные поля

def *Касательным вектором* к пространству $\mathbb{R}^n$ в точке $a \in \mathbb{R}^n$ называется отображение $X_a : C^\infty(\mathbb{R}^n) \longrightarrow \mathbb{R}$, удовлетворяющее следующим аксиомам:
1) $X_a(f+g) = X_a(f) + X_a(g)$
2) $X_a(\lambda f) = \lambda X_a(f)$
3) $X_a(fg) = X_a(f)g(a) + f(a)X_a(g)$
$\forall f, g \in C^\infty(\mathbb{R}^n)$ и $\forall \lambda \in \mathbb{R}$
В координатах $x_1, x_2, ..., x_n$ пространства $\mathbb{R}^n$ касательные векторы имеют вид дифференциальных операторов первого порядка с постоянными коэффициентами:

$$X_a = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \partial_{x_i}|_a$$

На множестве всех касательных векторов к $\mathbb{R}^n$ в точке a введем структуру линейного пространства, поточечно определив операции сложения и умножения на число:

$$(X_a + Y_a)(f) = X_a(f) + Y_a(f), (\lambda X_a)(f) = \lambda X_a(f)$$

Это линейное пространство назыветя *касательным пространством* к $\mathbb{R}^n$ в точке a и обозначается через T_aM. Его нулевым векотором является оператор $0|_a$, отображающий любую функцию в нуль, а касательные векторы

$$\partial_{x_1}|_a, ..., \partial_{x_n}|_a$$

образуют базис данного пространства. Очевидно, что $dim(T_aM) = n$.

Важно понимать, как касательные пространства преобразуются при отображениях. Пусть M и N - экземпляры пространства $\mathbb{R}^n$ и пусть $\Phi : M \longrightarrow N$ гладкое отображение. Пусть также $\Phi^* : C^\infty(N) \longrightarrow C^\infty(M)$, определяемая, как $\Phi^*(f) = f \circ \Phi$.
def *Дифференциалом отображения* Φ в точке $a \in M$ называется отобра-

жение $\Phi_{*,a} : T_aM \longrightarrow T_{\Phi(a)}N$, которое определяется, как:

$$\Phi_{*,a}(X_a) = X_a \circ \Phi^*$$

Координаты вектора $X_a \in T_aM : \alpha_1, ..., \alpha_n$ при отображении $\Phi_{*,a}$ связаны с координатами вектора $Y_a \in T_{\Phi(a)}N : \beta_1, ..., \beta_n$ через матрицу Якоби отображения Φ:

$$\beta = J_\Phi(a)\alpha$$

Некоторым обобщением касательных векторов на все пространство являются векторные поля.

def *Векторным полем* на пространстве $\mathbb{R}^n$ называется отображение $X : C^\infty(\mathbb{R}^n) \longrightarrow C^\infty(\mathbb{R}^n)$, удовлетворяющее следующим аксиомам:

1) $X(f + g) = X(f) + X(g)$

2) $X(\lambda f) = \lambda X(f)$

3) $X(fg) = X(f)g + fX(g)$

$\forall f, g \in C^\infty(\mathbb{R}^n)$ и $\forall \lambda \in \mathbb{R}$

В координатах $x_1, x_2, ..., x_n$ пространства $\mathbb{R}^n$ векторные поля имеют вид дифференциальных операторов первого порядка:

$$X = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i(x)\partial_{x_i}$$

где функции $\alpha_i(x)$ являются гладкими.

На множестве всех векторных полей на $\mathbb{R}^n$ введем структуру $C^\infty(\mathbb{R}^n)$-модуля, определив операции сложения и умножения на функцию:

$$(X + Y)(f) = X(f) + Y(f), (hX)(f) = hX(f)$$

Это пространство будем обозначать через $D(\mathbb{R}^n)$. Векторные поля

$$\partial_{x_1}, ..., \partial_{x_n}$$

образуют базис данного пространства. Очевидно, что $dim(D(\mathbb{R}^n)) = n$.

По аналогии с преобразованием касательных векторов можно ввести преобразование векторных полей при некотором отображении. Пусть M и N - экземпляры пространства $\mathbb{R}^n$ и пусть $\Phi : M \longrightarrow N$ гладкое отображение. Определим отображение модулей векторных полей $\Phi_*(X) : D(M) \longrightarrow D(N)$, индуцированное отображением Φ, как

$$\Phi_*(X) = (\Phi^*)^{-1} \circ X \circ \Phi^*$$

Одной из важнейших характеристик векторного поля является его поток.

Пусть задана кривая $\phi : \mathbb{R} \supset I \longrightarrow \mathbb{R}^n$, координатно задаваемая как:

$$\phi : \{x_1 = \phi_1(t), ..., x_n = \phi_n(t)\},$$

где t - координата на I.

def Кривая ϕ называется *интегральной кривой* векторного поля X, если $\forall t_0 \in I$:

$$X_{\phi(t_0)} = \phi_{*,t_0}(\partial_t|t_0)$$

Как уже было сказано, координаты касательных векторов при отображении ϕ преобразуются через матрицу Якоби этого отбражения, которая в данном случае выглядит, как:

$$J_\phi(t) = \begin{pmatrix} \partial_t \phi_1(t) \\ \vdots \\ \partial_t \phi_n(t) \end{pmatrix}$$

Поэтому условие на интегральность кривой примет вид:

$$\begin{cases} \partial_t \phi_1(t) = X_1(\phi_1(t), ..., \phi_n(t)) \\ \vdots \\ \partial_t \phi_n(t) = X_n(\phi_1(t), ..., \phi_n(t)) \end{cases}$$

Таким образом, интегральная кривая векторного поля X, проходящая при $t = 0$ через точку $x^0 = (x_1^0, ..., x_n^0) \in \mathbb{R}^n$, является решением задачи Коши:

$$\begin{cases} \partial_t \phi_1(t) = X_1(\phi_1(t), ..., \phi_n(t)) \\ \vdots \\ \partial_t \phi_n(t) = X_n(\phi_1(t), ..., \phi_n(t)) \\ x_1(0) = x_1^0, ..., x_n(0) = x_n^0 \end{cases}$$

Обозначим через $x = \Phi(t, x_0)$ решение данной задачи.
def *Потоком векторного поля* X назывется отображение $\phi_t : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$, такое, что:

$$\phi_t(x) = \Phi(t, x)$$

С потоком векторного поля связано определение производной вдоль его траекторий.
def Функция

$$L_X(f) = \partial_t|_{t=0}\phi_t^*(f)$$

называется *производной Ли функции* $f \in C^\infty(\mathbb{R}^n)$ вдоль траекторий векторного поля X
Th $\forall f \in C^\infty(\mathbb{R}^n)$ выполняется:

$$L_X(f) = X(f)$$

2.2 Дифференциальные 1-формы

def Пусть V - линейное пространство. Отображение $\alpha : V \longrightarrow \mathbb{R}$ называется *1-формой* или *ковектором*, если:
1) $\alpha(x + y) = \alpha(x) + \alpha(y)$
2) $\alpha(kx) = k\alpha(x)$
$\forall x, y \in V$ и $\forall k \in \mathbb{R}$
На множестве всех ковекторов введем структуру линейного пространства, поточечно определив операции сложения ковекторов и умножения ковектора на число:

$$(\alpha + \beta)(x) = \alpha(x) + \beta(x), (k\alpha)(x) = k(\alpha(x))$$

Это линейное пространство обозначается V^* и назывется сопряженным пространством к пространству V.
def Кокасательным пространством T_a^*M к пространству $\mathbb{R}^n$ в точке a называется пространство, сопряженное к касательному пространству в этой точке:

$$T_a^*M = (T_aM)^*$$

def *Дифференциалом функции* $f \in C^\infty(\mathbb{R}^n)$ в точке a называется ковектор $d_a f : T_a M \longrightarrow \mathbb{R}$, определенный следующим образом: $d_a f(X_a) = X_a(f)\ \forall X_a \in T_a M$

Ковекторы $d_a x_1, ..., d_a x_n$ образуют базис кокасательного пространства, дуальный базису $\partial_{x_1}|_a, ..., \partial_{x_n}|_a$ и любой ковектор α_a имеет следующее координатное представление:

$$\alpha_a = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i d_a x_i$$

Важно понимать, как кокасательные пространства преобразуются при отображениях. Пусть M и N - экземпляры пространства $\mathbb{R}^n$ и пусть $\Phi : M \longrightarrow N$ гладкое отображение. Определим отображение кокасательных пространств $\Phi_a^* : T_a^* N \longrightarrow T_{\Phi(a)}^* M$, индуцированное отображением Φ, как:

$$\Phi_a^*(\alpha) = \alpha \circ \Phi_{*,a}$$

Координаты вектора $\alpha \in T_{\Phi(a)}^* N : \alpha_1, ..., \alpha_n$ при отображении Φ_a^* связаны с координатами вектора $\beta \in T_a^* M : \beta_1, ..., \beta_n$ через матрицу транспонированную матрице Якоби отображения Φ:

$$\beta = J_\Phi^T(a)\alpha$$

Некоторым обобщением ковекторов на все пространство являются дифференциальные формы.

def *Дифференциальной 1-формой* на пространстве $\mathbb{R}^n$ называется отображение $\alpha : D(\mathbb{R}^n) \longrightarrow C^\infty(\mathbb{R}^n)$, для которого выполняются следующие аксиомы:

1) $\alpha(X+Y) = \alpha(X) + \alpha(Y)$

2) $\alpha(fX) = f\alpha(X)$

$\forall X, Y \in D(\mathbb{R}^n)$ и $\forall f \in C^\infty(\mathbb{R}^n)$

На множестве всех дифференциальных 1-форм введем структуру $C^\infty(\mathbb{R}^n)$-модуля, определив операции сложения дифференциальных 1-форм и умножения дифференциальной 1-формы на функцию:

$$(\alpha+\beta)(X) = \alpha(X) + \beta(X), (f\alpha)(X) = f\alpha(X)$$

Это пространство будем обозначать через $\Omega^1(\mathbb{R}^n)$.
def *Внешним дифференциалом* функции $f \in C^\infty(\mathbb{R}^n)$ называется дифференциальная 1-форма df, определенная как $df(X) = X(f)\ \forall X \in D(\mathbb{R}^n)$
Диффернциальные 1-формы $dx_1, ..., dx_n$ образуют базис пространства $\Omega^1(\mathbb{R}^n)$, дуальный базису $\partial_{x_1}, ..., \partial_{x_n}$ и любая дифференциальная 1-форма α имеет следующее координатное представление:

$$\alpha = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i(x) x_i$$

По аналогии с преобразованием касательных векторов можно ввести преобразование векторных полей при некотором отображении. Пусть M и N - экземпляры пространства $\mathbb{R}^n$ и пусть $\Phi : M \longrightarrow N$ гладкое отображение. Определим отображение модулей дифференциальных 1-форм $\Phi^*(\alpha) : \Omega^1(N) \longrightarrow \Omega^1(M)$, индуцированное отображением Φ, как

$$\Phi^*(\alpha) = (\Phi^*)^{-1} \circ \alpha \circ \Phi_*$$

Перегружая оператор L_X, можно ввести производную Ли для дифференциальных 1-форм.
def Дифференциальная 1-форма

$$L_X(\omega) = \partial_t|_{t=0} \phi_t^*(\omega)$$

называется *производной Ли* дифференциальной 1-формы $\omega \in D(\mathbb{R}^n)$ вдоль траекторий векторного поля X.
Производные Ли дифференциальных 1-форм обладают следующими свойствами:
1) Оператор L_X является линейным
2) $L_X(f\omega) = L_X(f)\omega + f L_X(\omega)$
3) $L_X \circ d = d \circ L_X$
4) $[L_X, L_Y] = L_{[X,Y]}$

2.3 Дифференциальные формы высших порядков

def Пусть V - линейное пространство. Отображение $\alpha : V \times ... \times V \longrightarrow \mathbb{R}$ называется *мультилинейной k-формой*, если:

1) $\alpha(x_1, ..., x_{i-1}, y+z, x_{i+1}, ..., x_k) = \alpha(x_1, ..., x_{i-1}, y, x_{i+1}, ..., x_k) + \alpha(x_1, ..., x_{i-1}, z, x_{i+}$

2) $\alpha(x_1, ..., x_{i-1}, \lambda y, x_{i+1}, ..., x_k) = \lambda\alpha(x_1, ..., x_{i-1}, y, x_{i+1}, ..., x_k)$

$\forall i = 1, ..., k, \forall y, z \in V, \forall \lambda \in \mathbb{R}$

На множестве всех мультилинейных k-форм аналогично ковекторам введем структуру линейного пространства. Данное пространство будем обозначать через $T^k(V)$.

def *Тензорным произведением* двух мультилинейных форм $\alpha \in T^r(V)$ и $\beta \in T^s(V)$ называется мультилинейная $(r+s)$-форма $\alpha \otimes \beta \in T^{r+s}(V)$, вычисляемая по формуле:

$$\alpha \otimes \beta(x_1, ..., x_r, x_{r+1}, ..., x_{r+s}) = \alpha(x_1, ..., x_r)\beta(x_{r+1}, ..., x_{r+s})$$

Тензорное произведение мультилинейных форм обладает следующими свойствами:

1) $\alpha \otimes \beta \neq \beta \otimes \alpha \ \forall \alpha \neq 0, \beta \neq 0 : \alpha \neq \beta$

2) $(\alpha \otimes \beta) \otimes \gamma = \alpha \otimes (\beta \otimes \gamma)$

3) $a(\alpha \otimes \beta) = (a\alpha) \otimes \beta = \alpha \otimes (a\beta) \ \forall a \in \mathbb{R}$

4) $\alpha \otimes (\beta + \gamma) = \alpha \otimes \beta + \alpha \otimes \gamma$

Пусть ковекторы $e_1^*, ..., e_n^*$ образуют базис сопряженного пространства V^*. Тогда тензорные произведения $e_{i_1}^* \otimes ... \otimes e_{i_k}^* (i_1, ..., i_k = 1, ..., n)$ образуют базис пространства $T^k(V)$ и любая мультилинейная форма α может быть представлена в виде:

$$\alpha = \sum_{i_1, ..., i_k = 1, .., n} \alpha_{i_1, ..., i_k} e_{i_1}^* \otimes ... \otimes e_{i_k}^*$$

def Мультилинейная k-форма называется *симметричной* [*кососимметричной*], если $\sigma(\alpha) = \alpha$ $[\sigma(\alpha) = (-1)^\sigma \alpha]$ для любой перестановки принимаемых аргументов.

Здесь $\sigma(\alpha)(x_1, ..., x_k) = \alpha(x_{\sigma(1)}, ..., x_{\sigma(k)})$, а σ - количество парных перестановок аргументов, необходимых для получения исходного набора. Подпространство симметричных k-форм будем обозначать через $S^k(V)$, антисимметричных через $\Lambda^k(V)$. Кососимметричные формы также носят название *внешних.*

def Отображение $A : T^k(V) \longrightarrow \Lambda^k(V)$, которое задается, как:

$$A(\alpha) = \frac{1}{k!}\sum_{\sigma(\cdot)}(-1)^\sigma \sigma(\alpha)$$

назывется *оператором альтернатирования.*

def *Внешним произведением* двух кососимметричных мультилинейных форм $\alpha \in \Lambda^p(V)$ и $\beta \in \Lambda^q(V)$ называется $(p+q)$-форма $\alpha \wedge \beta$, вычисляемая по формуле:

$$\alpha \wedge \beta = \frac{(p+q)!}{p!q!}A(\alpha \otimes \beta)$$

Внешнее произведенение мультилинейных форм обладает следующими свойствами:

1) $\alpha \wedge \beta = (-1)^{pq}\beta \wedge \alpha \ \forall \alpha \in \Lambda^p(V), \beta \in \Lambda^q(V)$

2) $(\alpha \wedge \beta) \wedge \gamma = \alpha \wedge (\beta \wedge \gamma)$

3) $a(\alpha \wedge \beta) = (a\alpha) \wedge \beta = \alpha \wedge (a\beta) \ \forall a \in \mathbb{R}$

4) $\alpha \wedge (\beta + \gamma) = \alpha \wedge \beta + \alpha \wedge \gamma$

Имея представление о внешнем произведении, можно ввести понятие дифференциальных форм высших порядков. Пусть $x_1, ..., x_n$ являются координатами пространства $\mathbb{R}^n$. Тогда базисом пространства $\Lambda^k(T_aM)$ является множество:

$$dx_{i_1}|_a \wedge ... \wedge dx_{i_1}|_a \ (1 \leq i_1 < ... < i_k \leq n)$$

Рассмотрим объединение данных пространств по пространству:

$$\Omega^k(\mathbb{R}^n) = \bigcup_{a \in \mathbb{R}^n} \Lambda^k(T_aM)$$

Проекция

$$\pi : \Omega^k(\mathbb{R}^n) \longrightarrow \mathbb{R}^n, \ \pi : \alpha_a \mapsto a$$

определяет касательное расслоение дифференциальных k-форм. Сечения данного расслоения называются *дифференциальными к-формами*:

$$\omega : \mathbb{R}^n \longrightarrow \Omega^k(\mathbb{R}^n),\ \omega : a \mapsto \omega_a \in \Lambda^k(T_aM)$$

Таким образом *дифференциальной k-формой называется* называется кососимметричное и $C^\infty(\mathbb{R}^n)$-линейное отображение:

$$\omega : D(M) \times ... \times D(M) \longrightarrow C^\infty(\mathbb{R}^n)$$

Перегружая оператор d, можно ввести понятие внешнего дифференцирования.

Th $\exists!$ $\mathbb{R}$-линейное отображение $d : \Omega^k(\mathbb{R}^n) \longrightarrow \Omega^{k+1}(\mathbb{R}^n)$, такое, что $\forall k \geq 0$ выполнены следующие условия:

1) Если f - гладкая функция, то df является дифференциалом f

2) Если $\alpha \in \omega^p(\mathbb{R}^n)$, то для любой дифференциальной формы β выполнено:

$$d(\alpha \wedge \beta) = d\alpha \wedge \beta + (-1)^p \alpha \wedge d\beta$$

3) $d^2 = 0$

Данное отображение называется *оператором внешнего дифференцирования* и для формы

$$\omega = \sum_{i_1 < ... < i_k} \omega_{i_1,...,i_k} dx_{i_1} \wedge ... \wedge dx_{i_k}$$

вычисляется по формуле:

$$d\omega = \sum_{i_1 < ... < i_k} d\omega_{i_1,...,i_k} dx_{i_1} \wedge ... \wedge dx_{i_k}$$

Для пояснения определения рассмотрим пример:

Ex Рассмотрим пространство $\mathbb{R}^2$ с координатами (x_1, x_2)

1) Пусть задана функция f. По определению:

$$df = f_{x_1} dx_1 + f_{x_2} dx_2$$

и df является дифференциальной 1-формой.

2) Пусть задана дифференциальная 1-форма $\omega = fdx_1 + gdx_2$. По определению:

$$d\omega = f_{x_1}dx_1\wedge dx_1+f_{x_2}dx_2\wedge dx_1+f_{x_1}dx_1\wedge dx_2+f_{x_2}dx_2\wedge dx_2 = (f_{x_1}-f_{x_2})dx_1\wedge dx_2$$

и $d\omega$ является дифференциальной 2-формой.
3) Для любой 2-формы $d\omega = fdx_1 \wedge dx_2$ на пространстве $\mathbb{R}^2$ $d\omega = 0$ всилу свойства $dx_i \wedge dx_i = 0$.

2.4 Контактная структура

В математике под распределением могут пониматься разные объекты. Рассмотрим понятие распределения в дифференциальной геометрии.
def *Распределением* на $\mathbb{R}^n$ будем называть отображение пространства $\mathbb{R}^n$ на множество k-мерных подпространств касательных пространств:

$$P : a \in M \mapsto P(a) \in T_aM$$

Число k будем называть размерностью распределения P, а число $m = n-k$ - его коразмерностью.
Набор векторных полей $X_1, ..., X_k$ на $\mathbb{R}^n$ задает распределение, если:
1) $X_{1,a}, ..., X_{k,a}$ линейно независимы
2) $P(a) = \langle X_{1,a}, ..., X_{k,a}\rangle$
Будем также говорить, что *векторное поле X принадлежит распределению P*, если $\forall a \in \mathbb{R}^n : X_a \in P(a)$. Все векторные поля, принадлежащие распределению P образуют $C^\infty(\mathbb{R}^n)$-модуль, который обозначается через $D(P)$
Набор дифференциальных форм $\omega_1, .., \omega_m$ на $\mathbb{R}^n$ задает распределение, если:
1) $\omega_{1,a}, ..., \omega_{m,a}$ линейно независимы
2) $P(a) = \bigcap\limits_{i=1}^{m} ker\omega_{i,a}$
def Подмножество $L \subset \mathbb{R}^n$ называется интегральным множеством распределения P, $T_aL \subset P(a)\ \forall a \in L$
def Интегральное множество L распределения P называется *максимальным*, если $\forall a \in L\ \exists$ окрестность O_a этой точки, в которой $\nexists$ интегрального

множества L' распределения P, содержащего L

С понятием распределения тесно связаны понятия контактных преобразований и векторных полей.

def Диффеоморфизм $\Phi : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$ назывется *контактным преобразованием* для распределения P, если он сохраняет это распределение, т.е. $\Phi_*(P) = P$

def Векторное поле X на $\mathbb{R}^n$ называется *контактным векторным полем*, если поток ϕ_t этого векторного поля является контактным преобразованием.

Th Для контактного векторного поля X выполнется равенство

$$L_X(\omega) = h\omega$$

для формы ω, задающей распределение и для некоторой функции $h \in C^\infty(\mathbb{R}^n)$

Теперь, наконец, есть все необходимые части для того, чтобы ввести понятие котактной структуры.

def Пусть $n = 2k + 1$ и пусть P - $2k$-мерное распределение на $\mathbb{R}^n$, такое, что $P = \mathrm{ker}\lambda$ для какой-то дифференциальной 1-формы. Распределение P назывется *контактной структурой*, если:

$$\lambda \wedge (d\lambda)^n \neq 0$$

Форма λ носит название *контактной формы.*

Максимальное интегральное пространство на контактной структуре имеет размерность k и называется *Лежандровым многообразием.*

3 Термодинамическое фазовое пространство

3.1 Форма Гиббса

Контактная структура естственным образом возникает в термодинамике. Рассмотрим термодинамическое фазовое пространство $M = \mathbb{R}^5$ с координатами s, e, v, p, T, где s - энтропия, e - внутренняя энергия, v - объем, p - давление, T - температура.
Рассмотрим следующую дифференциальную 1-форму (форму Гиббса):

$$\omega = ds - \frac{1}{T}de - \frac{p}{T}dv$$

Покажем, что $\omega \wedge d\omega \wedge d\omega \neq 0$ и, таким образом, ω определяет контактную структуру на термодинамическом фазовом пространстве:
1) $d\omega = d(ds) - d(\frac{1}{T}de) - d(\frac{p}{T}dv) = \frac{1}{T^2}dT \wedge de - \frac{1}{T}dp \wedge dv + \frac{p}{T^2}dT \wedge dv$
2) $\omega \wedge d\omega = \frac{1}{T^2}ds \wedge dT \wedge de - \frac{1}{T}ds \wedge dp \wedge dv + \frac{p}{T^2}ds \wedge dT \wedge dv + \frac{1}{T^2}de \wedge dp \wedge dv$
3) $\omega \wedge d\omega \wedge d\omega = -\frac{2}{T^3}ds \wedge dT \wedge de \wedge dp \wedge dv \neq 0$

3.2 Контактные векторные поля на термодинамическом фазовом пространстве

Найдем контактное векторное поле для введенной контакной структуры. По свойству контактных векторных полей должно выполняться условие $L_X(\omega) = k\omega$. Пусть в базисе $(\partial_s, \partial_T, \partial_p, \partial_e, \partial_v)$ векторное поле имеет вид $X = C_s\partial_s + C_T\partial_T + C_p\partial_p + C_e\partial_e + C_v\partial_v$. Тогда:

$$L_X(\omega) = dL_X(s) - L_X(\frac{1}{T})de - \frac{1}{T}L_X(de) - L_X(\frac{p}{T})dv - \frac{p}{T}L_X(dv) =$$

$$= dC_s + \frac{C_T}{T^2}de - \frac{1}{T}dC_e - (\frac{1}{T}C_p - \frac{p}{T^2}C_T)dv - \frac{p}{T}dC_v$$

Таким образом, учитывая условие $L_X(\omega) = k\omega$:

$$\begin{cases} (C_s)_s - \frac{1}{T}(C_e)_s - \frac{p}{T}(C_v)_s = k \\ (C_s)_T - \frac{1}{T}(C_e)_T - \frac{p}{T}(C_v)_T = 0 \\ (C_s)_p - \frac{1}{T}(C_e)_p - \frac{p}{T}(C_v)_p = 0 \\ (C_s)_e + \frac{C_T}{T} - \frac{1}{T}(C_e)_e - \frac{p}{T}(C_v)_e = -\frac{k}{T} \\ (C_s)_v - \frac{1}{T}(C_e)_v - (\frac{1}{T}C_p - \frac{p}{T}C_T) - \frac{p}{T}(C_v)_v = -\frac{kp}{T} \end{cases}$$

Рассмотрим производящую функцию $f = \omega(X) = C_s - \frac{1}{T}C_e - \frac{p}{T}C_v$. Считая ее частные производные по каждой из переменных и пользуясь полученной системой, получим следующие результаты:

$$\begin{cases} f_s = k \\ f_T = \frac{1}{T^2}C_e + \frac{p}{T^2}C_v \\ f_p = -\frac{1}{T}C_v \\ f_e = -\frac{1}{T^2}C_T - \frac{k}{T} \\ f_v = -\frac{kp}{T} + \frac{C_p}{T} - \frac{p}{T^2}C_T \end{cases}$$

Решая данную систему, получаем явный вид контактного векторного поля:

$$X_f = (f + Tf_T)\partial_s - T(Tf_e + f_s)\partial_T + T(f_v - pf_e)\partial_p + T(Tf_T + pf_p)\partial_e - Tf_p\partial_v$$

3.3 Функции состояния термодинамических систем

В тердмодинамике под функцией состояния термодинамической системы понимается функция от термодинамических переменных следующего вида:

$$f(s, e, v, ...) = 0$$

С помощью функций состояния можно задавать Лежандрово многообразие в фазовом термодинамическом пространстве. Например, функции

$$f_1 = p - \frac{\sigma_v}{\sigma_e},\ f_2 = T - \frac{1}{\sigma_e},\ f_3 = s - \sigma(e, v)$$

задают двумерное Лежандрово многообразие

$$L = \{f_1 = 0, f_2 = 0, f_3 = 0\},$$

а ограничения Y_{f_i} векторных полей $X_{f_1}, X_{f_2}, X_{f_3}$ на L имеют вид:

$$Y_1 = \frac{\sigma_v}{\sigma_e^2}\partial_e - \frac{1}{\sigma_e}\partial_v,\ Y_2 = \frac{1}{\sigma_e^2}\partial_e,\ Y_3 = 0$$

Функции состояния не являются независимыми: если мы знаем две из них, то можем построить и третью.

def Пусть функции f и g являются функциями состояний термодинамической системы. Тогда функция

$$[f, g] = \omega([X_f, X_g])$$

называется скобкой Лагранжа функций f и g.

Th Множество функций состояний термодинамической системы замкнуто относительно операции взятия скобки Лагранжа.

4 Постановка задачи

Выберем векторные поля Y_1, Y_2 в качестве базисных на множестве L. Тогда искомый термодинамический процесс будет интегральной кривой векторного поля $Y = u_1 Y_1 + u_2 Y_2$, где $u = (u_1, u_2)$ является вектором управления.

Для задания области допустимых управлений рассмотрим следующую 2-форму:

$$k = d(\frac{1}{T}) \cdot de + d(\frac{p}{T}) \cdot dv$$

С помощью данной формы можно ограничить относительную дисперсию измерений вектора $x = (e, v)$ числом $\delta > 0$ следующим образом:

$$-\frac{k(Y,Y)}{e^2} \leq \delta$$

что равносильно:

$$-k(Y_1, Y_1)u_1^2 - 2k(Y_1, Y_2)u_1 u_2 - k(Y_2, Y_2)u_2^2 \leq \delta e^2$$

поэтому область допустимых управлений U имеет эллиптическую границу. Введем 1-форму $W = pdv$, которая будет характеризовать работу. Тогда функционал качества процесса будет иметь вид:

$$J = \int\limits_0^T W(Y)dt$$

Пусть помимо прочего $Y^{(1)}(x, u)$ и $Y^{(2)}(x, u)$ - координаты поля Y в базисе ∂_e, ∂_v:

$$Y = Y^{(1)}(x, u)\partial_e + Y^{(2)}(x, u)\partial_v$$

Тогда постановка задачи имеет следующий вид:

$$\begin{cases} \dot{x} = F(x, u),\ x \in \mathbb{R}^2,\ u \in U \\ x(0) = x^{(0)},\ x(T) = x^{(T)} \\ J = \int\limits_0^T W(Y)dt \longrightarrow \max\limits_{u \in U} \end{cases}$$

где $x = (e, \upsilon)^T$, $F(x, u) = (Y^{(1)}(x, u), Y^{(2)}(x, u))^T$
Таким образом, гамильтониан задачи имеет следующий вид:

$$H(x, \psi, u) = W(Y) + \langle \psi, F \rangle = W(Y) + \psi_1 Y^{(1)} + \psi_2 Y^{(2)}$$

5 Решение задачи для модели идеального газа

5.1 Построение гамильтониана

Функции состояния идеального газа имеют вид:

$$f_1 = pv - RT,\ f_2 = \frac{nRT}{2},\ f_3 = s - Rln(e^{n/2}v),$$

где R - универсальная газовая постоянная, n - число степеней свободы. Ограничения векторных полей X_{f_i} на множество $\{f_1 = 0, f_2 = 0, f_3 = 0\}$ имеют вид:

$$Y_1 = -\frac{2ev}{nR}\partial_v,\ Y_2 = -\frac{2e^2}{nR}\partial_e,\ Y_3 = 0$$

Чтобы упростить запись гамильтониана введем следующий диффеоморфизм:

$$q_1 = \frac{nR}{2e},\ q_2 = -\frac{nR}{2e}lnv$$

В новом базисе векторные поля Y_i примут вид:

$$Y_1 = \partial_{q_2},\ Y_2 = \partial_{q_1} + \frac{q_2}{q_1}\partial_{q_2},\ Y_3 = 0,$$

а координаты поля Y:

$$Y^{(1)} = u_2, Y^{(2)} = u_1 + \frac{q_2}{q_1}u_2$$

В свою очередь поле "работы"в базисе (q_1, q_2) запишется, как:

$$pdv = -\frac{R}{q_1^2}dq_2 + \frac{Rq_2}{q_1^3}dq_1$$

Таким образом, гамильтониан задачи оптимального управления для модели идеального газа в дополнительном базисе (q_1, q_2) имеет вид:

$$H(q, \psi, u) = -\frac{Ru_1}{q_1^2} + \psi_1 u_2 + \psi_2(\frac{q_2}{q_1}u_2 + u_1)$$

5.2 Оптимальное управление

В координатах (e, v) форма k имеет вид:

$$k = -\frac{nR}{2e^2} de \cdot de - \frac{R}{v^2} dv \cdot dv$$

и, следовательно, область допустимых управлений будет иметь вид:

$$U = \{(u_1, u_2) : \frac{4}{n^2 R} u_1^2 + \frac{2}{nR} u_2^2 \leq \delta\}$$

Так как гамильтониан задачи линеен по u_1 и u_2, то своего максимального значения он достигает на границе ∂U. Так как ∂U является эллипсом, то её можно параметризовать следующим образом:

$$u_1 = \frac{n\sqrt{R\delta}}{2} cos\varphi,\ u_2 = \sqrt{\frac{nR\delta}{2}} sin\varphi,\ \varphi \in [0, 2\pi)$$

В таком случае гамильтониан перепишется в виде:

$$H(q, \psi, \varphi) = \frac{n\sqrt{R\delta}(q_1^2 \psi_2 - R)}{2q_1^2} cos\varphi + \frac{q_1\sqrt{2R\delta n}(\psi_1 q_1 + \psi_2 q_2)}{2q_1^2} sin\varphi$$

Точки максимума гамильтониана определяет уравнение $\partial_\tau H = 0$, что эквивалетно уравнению:

$$tg\varphi = \frac{\sqrt{2} q_1 (\psi_1 q_1 + \psi_2 q_2)}{\sqrt{n}(q_1^2 \psi_2 - R)}$$

Выражая из него точку максимума φ^* и подставляя её в выражение для H, получим, что на оптимальных траекториях гамильтониан имеет вид:

$$H(q, \psi) = \frac{1}{2q_1^2} \sqrt{nR\delta(nq_1^4\psi_2^2 + 2q_1^4\psi_1^2 + 4q_1^3 q_2 \psi_1 \psi_2 + 2q_1^2 q_2^2 \psi_2^2 - 2Rnq_1^2\psi_2 + R^2 n)}$$

5.3 Численное решение гамильтоновой системы

Как известно из принципа максимума Понтрягина, набор (q, λ) должен удовлетворять уравнению состояния, а также сопряженному уравнению. То есть для нахождения оптимальных траекторий, необходимо решить следующую краевую задачу:

$$\begin{cases} \dot{q} = \partial_\psi H \\ \dot{\psi} = -\partial_q H \\ q(0) = q^{(0)},\ q(T) = q^{(T)} \end{cases}$$

Учитывая выражение для гамильтониана, которое было получено в предыдущем параграфе, можно выписать явный вид гамильтоновой системы:

$$\begin{cases} \dot{q_1} = \dfrac{nR\delta(4q_1^4\lambda_1 + 4q_1^3q_2\lambda_2)}{4q_1^2h(q,\lambda)} \\ \dot{q_2} = \dfrac{nR\delta(2nq_1^4\lambda_2 + 4q_1^3q_2\lambda_1 + 4q_1^2q_2^2\lambda_2 - 2Rnq_1^2)}{4q_1^2h(q,\lambda)} \\ \dot{\lambda_1} = \dfrac{h(q,\lambda)}{4q_1^3} - \dfrac{nR\delta(4nq_1^3\lambda_2^2 + 8q_1^3\lambda_1^2 + 12q_1^2q_2\lambda_1\lambda_2 + 4q_1q_2^2\lambda_2^2 - 4Rnq_1\lambda_2)}{4q_1^2h(q,\lambda)} \\ \dot{\lambda_2} = -\dfrac{nR\delta(4q_1^3\lambda_1\lambda_2 + 4q_1^2q_2\lambda_2^2)}{4q_1^2h(q,\lambda)} \end{cases}$$

Здесь за $h(q,\lambda)$ обозначена следующая конструкция:

$$h(q,\lambda) = \sqrt{nR\delta(nq_1^4\psi_2^2 + 2q_1^4\psi_1^2 + 4q_1^3q_2\psi_1\psi_2 + 2q_1^2q_2^2\psi_2^2 - 2Rnq_1^2\psi_2 + R^2n)}$$

Данная система является автономной системой нелинейных ОДУ 1-го порядка. В свою очередь, краевая задача не является корректно поставленной, так как не определены краевые условия для сопряженной переменной. В совокупности эти ограничения наталкивают на размышления об использовании *метода стрельбы*. Метод стрельбы заключается в сведении исходной краевой задачи к вспомогательной задаче Коши для той же системы ДУ путем итеративного подбора начальных условий, дающих наиболее подходящее решение по следующему алгоритму:

1) Случайным образом выбирается значение вектора ψ на левом конце $\psi(0) = \psi^{(0)}$

2) Решается задача Коши с начальными условиями $q(0) = q^{(0)}$, $\psi(0) = \psi^{(0)}$. Полученное решение имеет параметрическую зависимость $q = q(t, \psi^{(0)})$.

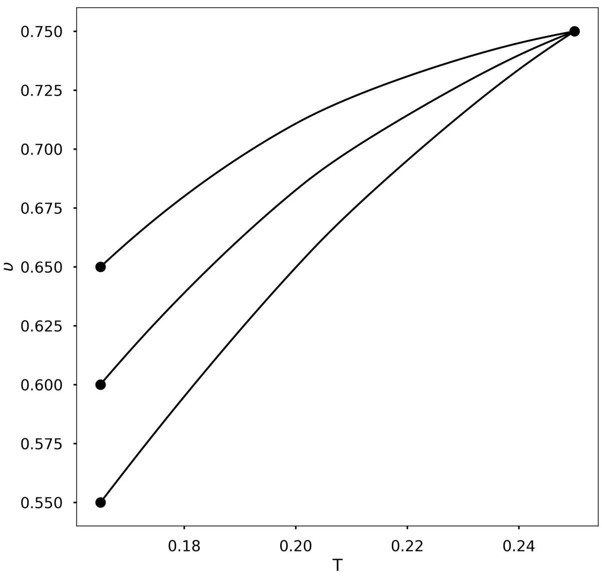

Рис. 1: Оптимальные траектории идеального газа

3) Вычисляется разность $\Delta = q(T, \psi^{(0)}) - q^{(T)}$, и если выполняется условие $|\Delta| < \varepsilon$, где $\varepsilon > 0$ задается наперёд, то алгоритм возращает решение $q = q(t, \psi^{(0)})$. В обратном случае алгоритм переходит к исполнению 1-го шага.

Данный алгоритм был реализован на языке Python с помощью библиотеки scipy, а точнее с помощью функций solve_ivp и fsolve. Первая численно решает задачу Коши для системы ОДУ первого порядка одним из доступных методов (например, методом Рунге-Кутты), а вторая ищет корни системы уравнений вида $f(x) = 0$. В самом коде также реализовано несколько функций. В частности residual и hamiltonian_system возвращают значения гамильтониана и правой части гамильтоновой системы, а objective решает систему с некоторыми начальными условиями для сопряженной переменной и возвращает невязку. Функция objective необходима для последующей передачи её в функцию fsolve, которая найдет реализующие минимальную невязку начальные условия для сопряженной переменной. Листинг программы приведен в приложении к работе.

Полученные численным интегрированием оптимальные траектории для идеального, одноатомного ($n = 3$) газа при ограничивающем параметре $\delta = 0.1$, начальном условии $(T, \upsilon) = (0.25, 0.75)$ и конечных условиях $(T, \upsilon) = (0.165, 0.55)$, $(0.165, 0.6)$, $(0.165, 0.65)$ представлены на (Рис. 1)

6 Выводы

1. Указан принцип посторения задачи оптимального управления термодинамической системой для нахождения оптимальных процессов, максимизирующих работу, по заданным термодинамическим функциям состояния.

2. С помощью языка Python и библиотеки SciPy реализован скрипт, позволяющий численно решать краевую задачу для гамильтоновой системы с помощью метода пристрелки по параметру.

3. Произведено численное интегрирование гамильтоновой системы для случая иделального газа.

7 Заключение

В данной работе был изучен метод построения задачи оптимального управления для термодинамических систем с помощью контактной геометрии. Данный метод является вполне естественным, так как форма Гиббса задаёт контактную структуру на нечетномерном термодинамическом фазовом пространстве.

Указанный авторами статьи [1] метод решения оптимальной задачи управления удачно применим в случае идеального газа. В случаях исследования других термодинамических систем (например, газа Ван-дер-Ваальса) гамильтониан задачи оптимального управления может иметь более сложную структуру, что усложняет поиск интегралов системы.

Для облегчения интегрирования гамильтоновых систем был предложен численный метод решения краевой задачи. В силу того, что гамильтонова система является системой ОДУ, для её решения применим метод пристрелки по начальному значению сопряженной координаты. Работоспособность алгоритма и программы, реализованной на языке Python, была подтверждена на примере идеального газа.

Таким образом, получен удобный инструмент для решения гамильтоновой системы, следующей из задачи оптимального управления для термодинамической системы и нахождение оптимальных траекторий фактически сводится к поиску гамильтониана. В дальнейшем планируется решить аналогичную задачу для модели газа Ван-дер-Ваальса и других моделей термодинамических систем.

Список литературы

[1] Kushner A, Lychagin V, Roop M. Optimal Thermodynamic Processes For Gases. Entropy (Basel). 2020 Apr 15;22(4):448. doi: 10.3390/e22040448. PMID: 33286222; PMCID: PMC7516934.

[2] Alexei G. Kushner. Introduction to contact geometry and nonlinear differential equations

[3] Л. И. Розоноэр, А. М. Цирлин, “Оптимальное управление термодинамическими процессами. I”, Автомат. и телемех., 1983, № 1, 70–79; Autom. Remote Control, 44:1 (1983), 55–62

[4] Qingkai Kong, Timmy Siauw, Alexandre Bayen. Python Programming and Numerical Methods: A Guide for Engineers and Scientists 1st Edition

[5] Арнольд В.И. Математические методы классической механики. М.: УРСС, 2003.

[6] Carnot, S.; Thurston, R.H. (Eds.) Reflections on the Motive Power of Heat; John Willey & Sons.: New York, NY, USA, 1897.

8 Приложение (программная реализация)

Возвращаемое функцией hamiltonian_system значение намерено "закомментировано"троеточием, так как слишком громоздко, но не несет в себе особого смысла. Актуальный листинг программы можно найти по адресу: `https://github.com/fruitmotive/diplom`.

```python
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.integrate import solve_ivp
from scipy.optimize import fsolve
plt.style.use('seaborn-poster')
from scipy.optimize import fsolve


n = 3
R = 8.31
delta = 0.1


e_start = [n * R * 0.25 / 2, n * R * 0.25 / 2, n * R * 0.25 / 2]
e_end = [n * R * 0.165 / 2, n * R * 0.165 / 2, n * R * 0.165 / 2]


v_start = [0.75, 0.75, 0.75]
v_end = [0.55, 0.60, 0.65]


sc = [[n * R / (2 * e_start[i]), \
       - n * R / (2 * e_start[i]) * np.log(v_start[i])] for i in range(3)]
ec = [[n * R / (2 * e_end[i]), \
       - n * R / (2 * e_end[i]) * np.log(v_end[i])] for i in range(3)]


start_time = [0, 0, 0]
end_time = [2.175, 2.03, 1.93]
time_dots = [10000, 10000, 10000]
time_net = [np.linspace(start_time[i], end_time[i], \
                        time_dots[i]) for i in range(3)]


sol = []


# var[0] = q_1, var[1] = q_2, var[2] = l_1, var[3] = l_2
def residual(var):
    return np.sqrt(n * R * delta * (n * var[0]**4 * var[3]**2 +
```

```
                                   2 * var[0]**4 * var[2]**2 +
                                   4 * var[0]**3 * var[1] * var[2] * var[3] +
                                   2 * var[0]**2 * var[1]**2 * var[3]**2 -
                                   2 * R * n * var[0]**2 * var[3] +
                                   R**2 * n))


def hamiltonian_system(t, var):
    return (...)


def objective(sl, i):
    sol = solve_ivp(hamiltonian_system, \
                    [start_time[i], end_time[i]], \
                    [sc[i][0], sc[i][1], sl[0], sl[1]], \
                    t_eval = time_net[i])
    q_1 = sol.y[0]
    q_2 = sol.y[1]
    return [q_1[-1] - ec[i][0], q_2[-1] - ec[i][1]]


for i in range(3):
    root = fsolve(objective, [0, 0], args=(i))
    sol.append(solve_ivp(hamiltonian_system, \
                         [start_time[i], end_time[i]], \
                         [sc[i][0], sc[i][1], root[0], root[1]], \
                         t_eval = time_net[i]))


e = [n * R / (2 * sol[i].y[0]) for i in range(3)]
v = [np.exp(- sol[i].y[1] / sol[i].y[0]) for i in range(3)]
T = [2 * e[i] / (n * R) for i in range(3)]


plt.figure(figsize = (10, 10))
for i in range(3):
    plt.plot(T[i], v[i], color="black", linewidth=2)
plt.plot(0.25, 0.75, 'ro', color="black")
plt.plot(0.165, 0.65, 'ro', color="black")
plt.plot(0.165, 0.60, 'ro', color="black")
plt.plot(0.165, 0.55, 'ro', color="black")
plt.xlabel("T")
plt.ylabel(r"$\upsilon$")
plt.savefig("graph.png", dpi=400)
```