

MASTER

Systeemidentificatie met behulp van periodieke oplossingen berekend met de shooting methode

Vankan, W.J.

Award date:
1992

[Link to publication](#)

Disclaimer

This document contains a student thesis (bachelor's or master's), as authored by a student at Eindhoven University of Technology. Student theses are made available in the TU/e repository upon obtaining the required degree. The grade received is not published on the document as presented in the repository. The required complexity or quality of research of student theses may vary by program, and the required minimum study period may vary in duration.

General rights

Copyright and moral rights for the publications made accessible in the public portal are retained by the authors and/or other copyright owners and it is a condition of accessing publications that users recognise and abide by the legal requirements associated with these rights.

- Users may download and print one copy of any publication from the public portal for the purpose of private study or research.
- You may not further distribute the material or use it for any profit-making activity or commercial gain

**Systeemidentificatie met behulp van
periodieke oplossingen berekend met
de shooting methode**

W.J. Vankan
rapportnummer WFW 92.081

Afstudeerverslag
van W.J. Vankan
juli 1992

Technische Universiteit Eindhoven
Faculteit Werktuigbouwkunde
Vakgroep Fundamentele Werktuigkunde

Samenvatting

Het nauwkeurig beschrijven van het dynamisch gedrag van mechanische systemen vereist een precieze modellering van deze systemen. Omdat een model per definitie niet gelijk is aan de werkelijkheid, zal het werkelijke dynamische gedrag nooit exact beschreven kunnen worden. Om toch met een bepaald model, dat het gedrag van een beschouwd systeem redelijk kan benaderen, een zo nauwkeurig mogelijke beschrijving van dat systeem te bereiken, kan gebruik gemaakt worden van parameterschatten. Er worden dan in het model van het beschouwde systeem bepaalde parameters aangenomen waarvoor waarden bepaald worden, zodanig dat de uitgangen van het model zo goed mogelijk overeenkomen met de uitgangen van het beschouwde systeem. Hiertoe wordt een beginschatting voor de parameterwaarden gedaan, waarmee de uitgangen van het model berekend kunnen worden. De uitgangen van het mechanische systeem worden gemeten, waarbij ervan uitgegaan wordt dat de ingangen exact hetzelfde zijn als de ingangen van het model. Als de uitgangen van elkaar verschillen, kan uit dit verschil een aanpassing voor de parameterwaarden berekend worden. Iteratief kunnen zo parameterwaarden berekend worden waarvoor de verschillen in de uitgangen minimaal zijn.

Er is in het verleden onderzoek gedaan naar het schatten van parameters in modellen voor de beschrijving van het dynamisch gedrag van mechanische systemen. Hierbij werd het transiënte gedrag van het systeem beschouwd. In dit onderzoek wordt het steady state gedrag van het systeem beschouwd. Het systeem wordt hiertoe periodiek geëxciteerd en voor het model worden periodieke oplossingen berekend. Er is een parameterschatprogramma geschreven waarin de periodieke oplossingen van het model berekend worden met behulp van de tijdsdiscretisatie methode. Om eventuele problemen bij de berekening van de periodieke oplossingen met deze methode te kunnen vermijden, was het wenselijk om ook de mogelijkheid te hebben om de periodieke oplossingen te berekenen met de tijdsintegratie methode. Deze mogelijkheid wordt geboden door de shooting methode, en er is in het parameterschatprogramma naast het tijdsdiscretisatie algoritme een algoritme geïmplementeerd dat periodieke oplossingen berekend met behulp van de shooting methode.

Inhoudsopgave

1	Inleiding	1
2	Identificatie van mechanische systemen	3
2.1	Parameterschatten	3
2.2	Modelschatten	3
2.3	Optimalisering	6
3	Dynamische systemen	9
4	De shooting methode	13
4.1	Directe shooting methode	13
4.2	Meervoudige shooting methode	14
4.3	De shooting methode in de NAG Fortran bibliotheek	17
5	Afgeleiden	21
5.1	Tijdsdiscretisatie methode	21
5.2	Tijdsintegratie methode	22
6	Testproblemen	25
6.1	Duffing systeem	25
6.2	Botsende kar	26
6.3	Starre penverbinding met speling	27
6.4	Periodieke oplossingen van de OLEO	28
6.5	Schatten van de OLEO	29
7	Conclusies	33
	Literatuur	35
A	Shooting in de periodieke oplosser	39
B	Shooting in het schattingsprogramma	43

Lijst van figuren

3.1	De botsende kar.	11
3.2	Periodieke oplossingen van de botsende kar voor verschillende wandstijfheden, berekend met de tijdsdiscretisatie methode en de shooting methode. .	12
4.1	Integratieverloop bij directe en meervoudige shooting methode.	17
6.1	Periodieke oplossingen voor een Duffing syteem volgens Ueda en berekend met de shooting methode.	26
6.2	Periodieke oplossingen voor de botsende kar berekend door de Jager en met het shooting algoritme.	27
6.3	Starre penverbinding met speling.	28
6.4	Gemeten excitatie krachten en periodieke oplossingen voor de twee vrijheidsgraden in het OLEO model berekend met tijdsdiscretisatie, en verschillen tussen de resultaten berekend met het tijdsdiscretisatie algoritme en het shooting algoritme.	29
6.5	Iteratieverlopen van de geschatte parameters en de uitgangen van het OLEO model berekend met het tijdsdiscretisatie algoritme en verschillen tussen de resultaten voor de parameters en de "optimale" oplossing berekend met tijdsdiscretisatie en shooting.	30
6.6	Iteratieverlopen van de berekende uitgangen, de gemeten en berekende uitgangen en de residuen, berekend met het oude en het nieuwe OLEO model.	31

Hoofdstuk 1

Inleiding

Het simuleren van het gedrag van mechanische systemen is vandaag de dag een belangrijk gereedschap in vele takken van onderzoek. Voor een succesvol gebruik van dit gereedschap zijn twee voorwaarden van belang:

1. Krachtige rekenapparatuur in combinatie met goede software,
2. Mathematische modellen die de beschouwde systemen nauwkeurig beschrijven.

Aan de eerste voorwaarde kan voldaan worden door het aanschaffen van materiaal dat ruimschoots wordt aangeboden op de betreffende markten. De mate waarin voldaan kan worden aan de tweede voorwaarde, is afhankelijk van het inzicht in het te beschrijven systeem. Dit inzicht kan verkregen worden door nauwkeurige analyse van het beschouwde systeem en de processen die zich in dat systeem afspelen. Zo'n analyse resulteert in informatie over het systeem zelf, zoals afmetingen en materiaaleigenschappen: de parameters, en kennis over de fysische processen in het systeem. Met behulp van de natuurwetten kunnen voor de fysische processen wiskundige relaties afgeleid worden. Deze relaties vormen een kwalitatief model van het beschouwde systeem, dat kwantitatief gespecificeerd kan worden met de parameters. Er vanuit gaande dat de fysische processen juist worden beschreven door de gebruikte natuurwetten, kunnen onvolkomenheden in de modellering van het systeem alleen voortkomen uit onjuiste parameterwaarden of het niet exact determineren van van alle fysische processen die zich in het systeem afspelen. Om het systeem zo nauwkeurig mogelijk te beschrijven, wordt naar parameterwaarden gezocht waarvoor de uitgangen van het model zo goed mogelijk overeenkomen met de uitgangen van het werkelijke systeem, als de ingangen exact gelijk zijn. Het vinden van deze parameterwaarden wordt parameterschatting genoemd.

DAF S.P. heeft in samenwerking met de TUE een onderzoek gestart naar een alternatieve testmethode voor landingsgestellen van vliegtuigen (Verbeek, 1991). De in deze landingsgestellen voorkomende dempers, die ook wel OLEO's genoemd worden, vertonen een complex dynamisch gedrag. Dit wordt veroorzaakt door het zich tegelijkertijd afspelen van een aantal fysische processen. Voor de beschrijving van het dynamisch gedrag wordt een mathematisch model bepaald met behulp van parameterschatmethoden. In tegenstelling tot de gebruikelijke methode om het transiënte gedrag van het systeem te analyseren,

wordt het steady state gedrag geanalyseerd. Het systeem wordt hiertoe periodiek geëxciteerd en de uitgangen, eveneens periodiek met dezelfde periodetijd als de excitatie, worden gemeten. Van het aangenomen mathematische model worden ook de periodieke uitgangen als gevolg van dezelfde periodieke excitatie berekend en vergeleken met de gemeten uitgangen. Indien deze uitgangen niet overeenkomen, worden de parameterwaarden aangepast. Het verschil tussen de gemeten en berekende uitgangen is een maat voor de aanpassing van de parameters. In een iteratief proces kunnen zo de parameterwaarden bepaald worden waarvoor een minimaal verschil tussen gemeten en berekende uitgangen geldt.

Voor de berekening van periodieke oplossingen van het mathematische model werd aanvankelijk alleen gebruik gemaakt van tijdsdiscretisatie methoden. Om eventuele problemen bij de berekening van de periodieke oplossingen te vermijden, was het wenselijk om eveneens de beschikking te hebben over een tijdsintegratie algoritme. Een mogelijkheid om periodieke oplossingen te berekenen met behulp van tijdsintegratiemethoden, wordt geboden door de shooting methode (Ling, 1981; Vankan, 1992). In het algemeen kan de methode gebruikt worden om tweepunts randwaardeproblemen op te lossen. Het uitgangspunt van de berekening is een beginschatting voor de onbekende randwaarden op één van de randen. Vanuit deze randwaarden kan vervolgens numeriek geïntegreerd worden over het beschouwde interval. Door de geschatte en de uit de numerieke integratie volgende randwaarden in te vullen in de randvoorwaarden, volgt een residuvector. Met numerieke differentiatie kan de afgeleide van de residuvector naar de geschatte randwaarden berekend worden. Met behulp van deze afgeleide kan met een Newton iteratie een minimum voor de residuvector bepaald worden. Dit minimum representeert dan de residuvector behorende bij de benaderingsoplossing van het tweepunts randwaardeprobleem.

Een shooting algoritme is geïmplementeerd in het parameterschatprogramma dat is geschreven voor het schatten van de OLEO. Naast de berekening van de periodieke oplossingen met het shooting algoritme, moet ook de berekening van de afgeleiden van de uitgangen naar de parameters, die nodig zijn in het schattingsproces (Verbeek, 1991), aangepast worden. Dit is het gevolg van de iets andere afhankelijkheden van de grootheden in het geval van de tijdsintegratie methode. In het shooting algoritme wordt namelijk in tegenstelling tot in het tijdsdiscretisatie algoritme, gewerkt met de toestandsbeschrijving. De uitgangen worden hier berekend als functie van de toestanden. Hierdoor dienen de afgeleiden met betrekking tot de toestanden bepaald te worden om de afgeleiden van de uitgangen naar de parameters te kunnen samenstellen.

Hoofdstuk 2

Identificatie van mechanische systemen

2.1 Parameterschatten

Bij het beschrijven van mechanische systemen wordt getracht om een mathematisch model op te stellen dat het gedrag van het systeem weerspiegelt. Als van een systeem enkel een aantal ingangen met bijbehorende uitgangen bekend zijn, zonder enige kennis over de relaties tussen deze in- en uitgangen, dan wordt het afleiden van een model voor zo'n systeem niet-parametrische identificatie genoemd (de Kraker, 1990). We richten ons hier echter op parametrische identificatie, oftewel parameterschatten. Hierbij kunnen voor het systeem relaties tussen de in- en uitgangen uitgedrukt worden in analytische functies. In deze functies kunnen parameters voorkomen die niet zonder meer exact bekend zijn. De identificatie van het systeem komt dan neer op de bepaling van die parameterwaarden waarmee het model het gedrag van het systeem zo goed mogelijk beschrijft.

Er wordt bij parameterschatten onderscheid gemaakt tussen modelfitten en modelschatten (Verbeek, 1991). Bij modelfitten worden enkel de parameterwaarden bepaald waarvoor de berekende uitgangen van het model zo goed mogelijk overeenkomen met de werkelijke (gemeten) uitgangen. Het resultaat wordt een puntschatting genoemd, i.e. concrete waarden voor de parameters. Bij modelschatten worden de parameterwaarden samen met hun stochastische eigenschappen bepaald. Dit resultaat wordt intervalschatting genoemd. De stochastische eigenschappen van de parameters zijn het gevolg van stochastische verschijnselen in de metingen als gevolg van meetruis. Er wordt in het volgende alleen ingegaan op modelschatten.

2.2 Modelschatten

Bij modelschatten kan gebruik gemaakt worden van verschillende schattingsalgoritmen (Verbeek, 1991). In het meest uitgebreide algoritme, de Bayesiaanse schatter, wordt alle informatie over het mathematische model, de stochastische eigenschappen van de meetfou-

ten en voorkennis met betrekking tot de parameters meegenomen in het schattingsproces. Bij maximum Likelihood schatten wordt de voorkennis met betrekking tot de parameters buiten beschouwing gelaten. Als voor de meetfouten een normale verdeling wordt aangenomen, houdt men gewogen kleinste kwadraten schatten over. Als de meetfouten bovendien onafhankelijk verondersteld worden met gelijke covarianties, dan spreekt men van ongewogen kleinste kwadraten schatten. In feite wordt dan dus alle stochastische informatie buiten beschouwing gelaten. Om toch de stochastische eigenschappen van de parameters te kunnen bepalen, worden de parameters meerdere malen berekend. Uit de zo bepaalde set van schattingen voor de parameterwaarden kunnen de stochastische eigenschappen afgeleid worden.

De verschillende schattingsalgoritmen onderscheiden zich door verschillende doelfuncties voor de parameters. Ter afleiding van deze doelfuncties beschouwen we eerst het mathematische model, dat genoteerd kan worden als:

$$\tilde{y} = f(x, \tilde{\theta}) \quad (2.1)$$

Hierin is:

- \tilde{y} : vector met berekende uitgangen
- f : vectorfunctie die het mathematische model representeert
- x : vector met onafhankelijke variabelen
- $\tilde{\theta}$: vector met willekeurige parameterwaarden

We definiëren de exacte uitgangen volgens:

$$\hat{y} = \hat{f}(x, \hat{\theta}) \quad (2.2)$$

met:

- \hat{y} : vector met exacte uitgangen
- \hat{f} : vectorfunctie die het systeem exact kan beschrijven
- $\hat{\theta}$: parametervector behorende bij exacte representatie van het systeem

Verschillen tussen gemeten en berekende uitgangen kunnen het gevolg zijn van het niet exact representeren van de werkelijkheid door het mathematische model en inexacte metingen. Er wordt geen onderscheid gemaakt tussen deze twee soorten fouten en er wordt één totaal fout gedefiniëerd volgens:

$$\epsilon \equiv y - \hat{y} \quad (2.3)$$

We nemen nu aan dat voor deze foutvector een normale kansverdeling geldt met gemiddelde nul en covariantiematrix V . Voor de kansdichtheidsfunctie van de foutvector kan dan afgeleid worden:

$$p(\epsilon | V_1, V_2, \dots, V_n) = (2\pi)^{-\frac{ns}{2}} \prod_{\mu=1}^n (\det^{-\frac{1}{2}} V_{\mu}) e^{(-\frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^n \epsilon_{\mu}^T V_{\mu}^{-1} \epsilon_{\mu})} \quad (2.4)$$

waarin:

V_μ : variantiematrix voor de foutvector op meettijdstp t_μ

ϵ_μ : foutvector voor de uitgangen op meettijdstp t_μ

n : aantal meettijdstippen

s : aantal uitgangen

l : aantal parameters

We definiëren nu een residuvector \mathbf{e} als het verschil tussen de gemeten uitgangen \mathbf{y} en de uitgangen $\tilde{\mathbf{y}}$ berekend met een niet exacte parametervector $\tilde{\boldsymbol{\theta}}$ volgens:

$$\mathbf{e} = \mathbf{y} - \mathbf{f}(\mathbf{x}, \tilde{\boldsymbol{\theta}}) \quad (2.5)$$

Voor de residuvector worden dezelfde stochastische eigenschappen aangenomen als voor de foutvector. Uit de kansverdeling voor de foutvector kan een Likelihoodfunctie voor de parameters afgeleid worden, uitgedrukt in de residuvector:

$$L(\boldsymbol{\theta} | V_1, V_2, \dots, V_n) = (2\pi)^{-\frac{ns}{2}} \prod_{\mu=1}^n (\det^{-\frac{1}{2}} V_\mu) e^{(-\frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^n \mathbf{e}_\mu^T V_\mu^{-1} \mathbf{e}_\mu)} \quad (2.6)$$

waarin \mathbf{e}_μ de residuvector voor de uitgangen op meettijdstp t_μ voorstelt. Behalve de parameters dienen nu dus ook hun stochastische eigenschappen geschat te worden. Al deze grootheden kunnen opgeslagen worden in een uitgebreide parametervector $\boldsymbol{\Phi}$.

Indien men over voorkennis met betrekking tot de parameterwaarden beschikt, kan deze aan het model worden toegevoegd door middel van een a priori kansdichtheidsfunctie $p_0(\boldsymbol{\Phi})$. Combinatie met de reeds afgeleide Likelihoodfunctie voor de parameters levert de a posteriori kansdichtheidsfunctie:

$$p^*(\boldsymbol{\Phi}) = \left[\int L(\boldsymbol{\Phi}) p_0(\boldsymbol{\Phi}) d\boldsymbol{\Phi} \right]^{-1} L(\boldsymbol{\Phi}) p_0(\boldsymbol{\Phi}) \quad (2.7)$$

Bij Bayesiaans schatten wordt een doelfunctie afgeleid uit de a posteriori kansdichtheidsfunctie (2.7) volgens:

$$\phi_b(\boldsymbol{\Phi}) = \ln(p^*(\boldsymbol{\Phi})) \quad (2.8)$$

wat overgaat in:

$$\phi_b(\boldsymbol{\Phi}) = \ln(L(\boldsymbol{\Phi})) + \ln(p_0(\boldsymbol{\Phi})) \quad (2.9)$$

als de a priori kansdichtheidsfunctie $p_0(\boldsymbol{\Phi})$ nergens gelijk aan nul wordt. Uitschrijven levert:

$$\begin{aligned} \phi_b(\boldsymbol{\Phi}) = & -\frac{ns}{2} \ln(2\pi) - \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^n \ln(\det V_\mu) - \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^n \mathbf{e}_\mu^T V_\mu^{-1} \mathbf{e}_\mu + \\ & -\frac{l}{2} \ln(2\pi) - \frac{1}{2} \ln\left(\prod_{\alpha=1}^l \sigma_\alpha^2\right) - \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^l \frac{1}{\sigma_\alpha^2} (\Phi_\alpha - \bar{\Phi}_\alpha)^2 \end{aligned} \quad (2.10)$$

waarin σ_α^2 de variantie en $\bar{\Phi}_\alpha$ het gemiddelde van de parameters Φ_α representeren. Bij maximum Likelihood schatten wordt de a priori kansdichtheidsfunctie $p_0(\boldsymbol{\Phi})$ niet meegenomen in de doelfunctie, waardoor de volgende doelfunctie resulteert:

$$\phi_l(\boldsymbol{\Phi}) = \ln(L(\boldsymbol{\Phi})) \quad (2.11)$$

Met de aanname dat de covariantiematrix V_μ gedurende de hele meetsessie niet verandert en dat de residuen in alle uitgangen statistisch onafhankelijk zijn met covariantie σ_β^2 , kan de doelfunctie verder vereenvoudigd worden tot:

$$\phi_l(\Phi) = -\frac{ns}{2}\ln(2\pi) - \frac{n}{2} \sum_{\beta=1}^s \ln(\sigma_\beta^2) - \frac{1}{2} \sum_{\beta=1}^s \frac{1}{\sigma_\beta^2} M_{\beta\beta}(\theta) \quad (2.12)$$

met

$$M(\theta) = \sum_{\mu=1}^n \mathbf{e}_\mu \mathbf{e}_\mu^T \quad (2.13)$$

In het geval van kleinste kwadraten schatten worden de covarianties van de foutvector bekend verondersteld, waardoor de doelfunctie reduceert tot:

$$\phi_s(\Phi) = C - \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^n \mathbf{e}_\mu^T V_\mu^{-1} \mathbf{e}_\mu \quad (2.14)$$

De te minimaliseren doelfunctie bij kleinste kwadraten schatten luidt dan:

$$\phi_s(\theta) = \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^n \mathbf{e}_\mu^T W_\mu \mathbf{e}_\mu \quad (2.15)$$

waarin W_μ een weegmatrix voorstelt die omgekeerd evenredig is met de bekend veronderstelde covariantiematrix V_μ . De aanname dat de fouten voor alle uitgangen onafhankelijk zijn en gelijke covariantie hebben, levert voor W_μ een diagonaalmatrix op en leidt tot ongewogen kleinste kwadraten schatten.

Als men nu een bepaalde doelfunctie afgeleid heeft, kan een keuze gemaakt worden voor de waarde van de doelfunctie die de oplossing van het schattingsprobleem representeert. Zo kan bijvoorbeeld het maximum, het gemiddelde of de mediaan van de verdeling gekozen worden. We zullen hier alleen ingaan op de bepaling van het maximum van de doelfunctie, waardoor het schattingsprobleem overgaat in een optimaliseringsprobleem.

2.3 Optimalisering

Voor de bepaling van het maximum (of minimum) van de gekozen doelfunctie kan gebruik gemaakt worden van optimaliseringstechnieken. Bij numerieke optimalisering is het raadzaam om zoveel mogelijk afgeleide-informatie die redelijkerwijze berekend kan worden, mee te nemen in het optimaliseringsproces. Ter illustratie van de in dit onderzoek gebruikte Newton-Gauss optimaliseringstechniek (Verbeek, 1991), beschouwen we als doelfunctie de eenvoudige ongewogen niet-lineaire kleinste kwadraten som van de residuen:

$$\phi(\tilde{\theta}) = \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^n \mathbf{e}_\mu^T \mathbf{e}_\mu = \frac{1}{2} \|\mathbf{y} - \tilde{\mathbf{y}}\|_2^2 \quad (2.16)$$

Taylor reeksontwikkeling van de doelfunctie, met verwaarlozing van hogere dan tweede orde termen levert:

$$\phi(\tilde{\theta} + \delta\tilde{\theta}) = \phi(\tilde{\theta}) + \delta\tilde{\theta}^T \mathbf{q}(\tilde{\theta}) + \frac{1}{2} \delta\tilde{\theta}^T H(\tilde{\theta}) \delta\tilde{\theta} \quad (2.17)$$

met:

$$\mathbf{q}(\tilde{\theta}) = \sum_{\mu=1}^n \mathbf{e}_{\mu}^T,_{\tilde{\theta}} \mathbf{e}_{\mu} = -\tilde{\mathbf{y}}^T,_{\tilde{\theta}} (\mathbf{y} - \tilde{\mathbf{y}}) = -J^T(\tilde{\theta})\mathbf{e} \quad (2.18)$$

$$\begin{aligned} H(\tilde{\theta}) &= \sum_{\mu=1}^n \mathbf{e}_{\mu}^T,_{\tilde{\theta}} \mathbf{e}_{\mu, \tilde{\theta}} + \sum_{\alpha=1}^l \sum_{\mu=1}^n \mathbf{e}_{\mu}^T,_{\tilde{\theta}} \tilde{\theta}_{\alpha} \mathbf{e}_{\mu} = \\ &= J^T(\tilde{\theta})J(\tilde{\theta}) + Q(\tilde{\theta}) \end{aligned} \quad (2.19)$$

Als de parametervector $\tilde{\theta}$ de exacte waarden $\hat{\theta}$ redelijk benaderd, zullen de residuen \mathbf{e}_{μ} klein zijn, en kan $Q(\tilde{\theta})$ in de uitdrukking voor $H(\tilde{\theta})$ verwaarloosd worden ten opzichte van de eerste term $J^T(\tilde{\theta})J(\tilde{\theta})$. De zoekrichting voor het kwadratische optimaliseringsproces kan afgeleid worden door te stellen dat de eerste orde variatie in de parametervector geen invloed heeft op de waarde van de doelfunctie, zoals dat in een extremum het geval is:

$$\phi(\tilde{\theta} + \delta\tilde{\theta}) - \phi(\tilde{\theta}) = \delta\tilde{\theta}^T \mathbf{q}(\tilde{\theta}) + \frac{1}{2} \delta\tilde{\theta}^T H(\tilde{\theta}) \delta\tilde{\theta} = 0 \quad (2.20)$$

Hieruit volgt dus voor de zoekrichting $\delta\tilde{\theta}$:

$$\delta\tilde{\theta} = [J^T(\tilde{\theta})J(\tilde{\theta})]^{-1} J^T(\tilde{\theta})\mathbf{e} = J^+(\tilde{\theta})\mathbf{e} \quad (2.21)$$

De hierin voorkomende J^+ wordt de pseudo inverse van J genoemd.

Een optimaliseringsproces waarin de zoekrichting op deze manier berekend wordt, wordt Newton-Gauss optimalisering genoemd. In dit onderzoek wordt deze optimaliseringstechniek toegepast op de Bayesiaanse doelfunctie. Hierdoor komen in (2.21) extra termen in de uitdrukking van de pseudo inverse voor als gevolg van de stochastische informatie die in dit algoritme wordt meegenomen.

Hoofdstuk 3

Dynamische systemen

Dynamische systemen kunnen opgevat worden als systemen die dynamisch gedrag vertonen. Binnen deze ruime klasse van systemen beperken we ons in dit onderzoek tot analyse van het dynamische gedrag van mechanische systemen. De beschrijving van dit gedrag kan gevat worden in een stelsel van tweede orde differentiaalvergelijkingen. Het mathematische model voor dit soort systemen kan dan als volgt genoteerd worden ($\dot{\cdot} \equiv \frac{d}{dt}$):

$$\mathbf{g}(\mathbf{u}, \dot{\mathbf{u}}, \ddot{\mathbf{u}}, \mathbf{x}, t, \boldsymbol{\theta}) = \mathbf{0} \quad (3.1)$$

met:

- \mathbf{u} : verplaatsingen in de vrijheidsgraden
- $\dot{\mathbf{u}}$: snelheden in de vrijheidsgraden
- $\ddot{\mathbf{u}}$: versnellingen in de vrijheidsgraden
- \mathbf{x} : vector met onafhankelijke variabelen
- t : tijd
- $\boldsymbol{\theta}$: parametervector

Deze tweede orde beschrijving kan teruggebracht worden tot een eerste orde beschrijving door introductie van een toestandsvector:

$$\mathbf{s} \equiv [\mathbf{u}^T \dot{\mathbf{u}}^T]^T \quad (3.2)$$

Voorwaarde voor deze transformatie is dat de eventueel in het model voorkomende massamatrix geïnverteerd moet kunnen worden. Het model kan dan als volgt genoteerd worden:

$$\dot{\mathbf{s}} = \mathbf{h}(\mathbf{s}, \mathbf{x}, t, \boldsymbol{\theta}) \quad (3.3)$$

Dynamische systemen kunnen globaal op twee manieren geanalyseerd worden.

1. Analyse van het transiënte gedrag van het systeem gedurende een bepaald tijdsinterval, startend vanuit een bepaalde initiële toestand. De beschrijvingswijze die hiervoor meestal gebruikt wordt is de toestandsbeschrijving. De initiële toestand, die bekend moet zijn, wordt uitgedrukt in een initiële toestandsvector die afhankelijk kan zijn van de onafhankelijke variabelen en de parametervector:

$$\mathbf{s}_{(t=0)} = \mathbf{s}_0(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) \quad (3.4)$$

Met behulp van tijdsintegratiemethoden kan vanuit deze initiële toestand de oplossing over het beschouwde interval berekend worden. Om de mogelijkheden van het model te vergroten, wordt het mathematische model, analoog aan de in de regeltheorie gebruikte methode, uitgebreid met een set uitgangsvergelijkingen:

$$\mathbf{y} = \mathbf{f}_s(\mathbf{s}, \mathbf{x}, t, \boldsymbol{\theta}) \quad (3.5)$$

2. Ook kan het steady state gedrag van het dynamische systeem geanalyseerd worden. We beperken ons hier tot systemen die periodiek steady state gedrag vertonen. Het uitgangspunt bij deze systemen is dat de verplaatsingen die in het systeem optreden periodiek zullen zijn met dezelfde periodetijd als de excitatie. Voor de beschrijving van het systeem kan gebruik gemaakt worden van de tijdsdiscretisatie methode (Fey, 1991). Bij deze methoden wordt de tijd over een periode geschaald met de excitatiefrequentie volgens:

$$\tau = t \cdot f_e \quad ; \quad \tau \in [0, 1 > \quad (3.6)$$

De afhankelijke variabelen worden meegeschaald volgens ($' \equiv \frac{d}{d\tau}$):

$$\mathbf{z}(\tau) = \mathbf{u}(t) \quad ; \quad \mathbf{z}'(\tau) = \frac{\dot{\mathbf{u}}(t)}{f_e} \quad ; \quad \mathbf{z}''(\tau) = \frac{\ddot{\mathbf{u}}(t)}{f_e^2} \quad (3.7)$$

Met behulp van eindige differentieschema's kunnen de afgeleiden \mathbf{z}' en \mathbf{z}'' uitgedrukt worden in \mathbf{z} . Bij gebruik van bijvoorbeeld tweede orde centrale differentie volgt voor \mathbf{z}' en \mathbf{z}'' :

$$\mathbf{z}'(\tau_i) = \frac{1}{2d}(-\mathbf{z}(\tau_{i-1}) + \mathbf{z}(\tau_{i+1})) \quad (3.8)$$

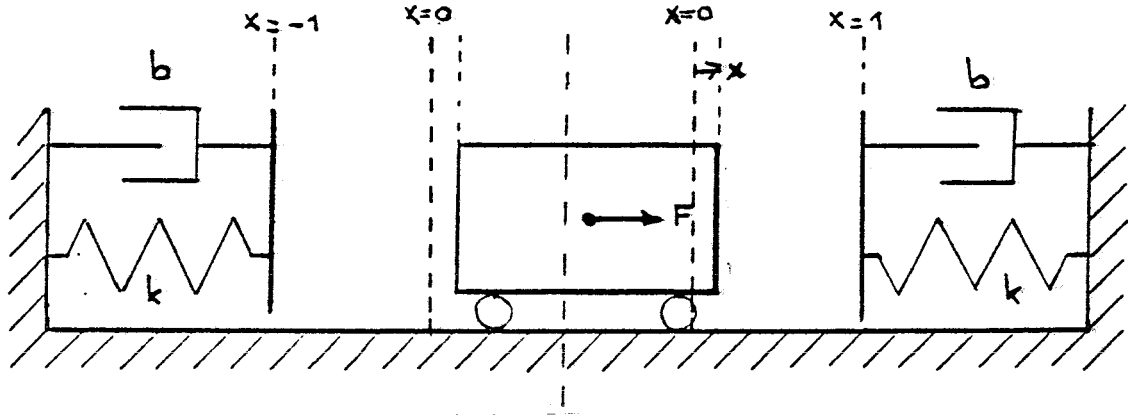
$$\mathbf{z}''(\tau_i) = \frac{1}{d^2}(\mathbf{z}(\tau_{i-1}) - 2\mathbf{z}(\tau_i) + \mathbf{z}(\tau_{i+1})) \quad (3.9)$$

Hierin stelt d de geschaalde tijdsdiscretisatie stapgrootte voor. Het mathematische model kan vervolgens genoteerd worden als:

$$\mathbf{g}^*(\mathbf{z}^*, \mathbf{x}^*, \boldsymbol{\tau}^*, \boldsymbol{\theta}) = \mathbf{0} \quad (3.10)$$

De hierin voorkomende vectoren \mathbf{z}^* , \mathbf{x}^* en $\boldsymbol{\tau}^*$ bevatten de gediscrètiseerde waarden voor \mathbf{z} , \mathbf{x} en τ op ieder tijdstip τ_i , en \mathbf{g}^* repesenteert dus een groot stelsel algebraïsche vergelijkingen waarin de randvoorwaarden voor periodiciteit van de oplossing zijn opgenomen. Als de periodieke oplossing bepaald is, kunnen uit de oplossingsvector voor de verplaatsingen, \mathbf{z}^* , de bijbehorende oplossingen voor de snelheden, $\mathbf{z}^{*'}$, en de versnellingen, $\mathbf{z}^{*''}$, berekend worden met behulp van het gekozen differentieschema. De uitgangen kunnen dan expliciet als functie van \mathbf{z}^* , $\mathbf{z}^{*'}$ en $\mathbf{z}^{*''}$ geschreven worden volgens:

$$\mathbf{y} = \mathbf{f}_z(\mathbf{z}^*, \mathbf{z}^{*'}, \mathbf{z}^{*''}, \mathbf{x}^*, \boldsymbol{\tau}^*, \boldsymbol{\theta}) \quad (3.11)$$



Figuur 3.1: De botsende kar.

Beide analyses hebben voor- en nadelen, maar voor toepassing bij modelschatten heeft de analyse van periodieke oplossingen een aantal wezenlijke voordelen (Verbeek, 1991). Zo kan bijvoorbeeld na iedere parameter update de vorige periodieke oplossing gebruikt worden als beginschatting voor de huidige periodieke oplossing. Daarentegen heeft de analyse van het transiënte gedrag als voordeel dat snelle en nauwkeurige numerieke integratiealgoritmen, zoals bijvoorbeeld vierde-vijfde orde Runge-Kutta algoritmen met stapgrootte sturing, gebruikt kunnen worden om de differentiaalvergelijkingen op te lossen (Crosbie et al., 1971; Hall et al., 1976). Dit zou vooral van voordeel kunnen zijn indien er gebieden in het beschouwde tijdsinterval voorkomen waar het systeem zich complex gedraagt, i.e. waar grote afgeleiden of eventueel discontinuïteiten voorkomen. Tijdsdiscretisatie methoden kunnen in die gevallen namelijk soms zeer moeizaam de oplossing berekenen.

Daar verwacht werd dat de OLEO zich in bepaalde gebieden van het beschouwde tijdsinterval complex zou gaan gedragen door het optreden van wrijving en aanslagen, wilde men naast de tijdsdiscretisatie methode ook beschikking hebben over een tijdsintegratie techniek voor de bepaling van de periodieke oplossingen in het schattingsprogramma. Een mogelijkheid om periodieke oplossingen te bepalen met behulp van de tijdsintegratie methode wordt geboden door de shooting methode. De werking van deze methode zal in het volgende hoofdstuk uiteengezet worden.

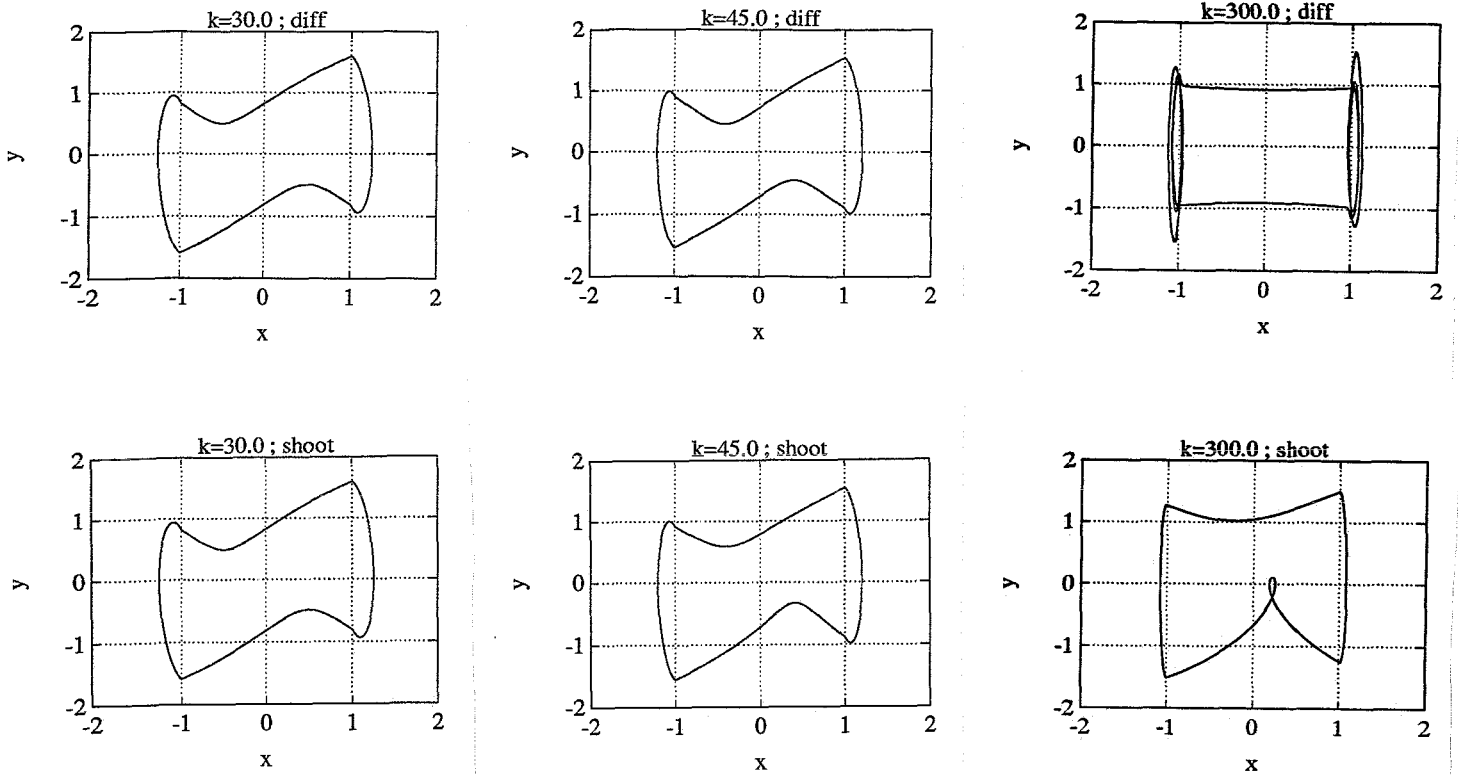
Ter illustratie van de voordelen van de shooting methode ten opzichte van de tijdsdiscretisatie methode is een eenvoudig dynamisch systeem dat discontinu gedrag vertoont geanalyseerd. Het systeem bestaat uit een kar die weerstandsloos kan bewegen tussen twee verende wanden en periodiek geëxciteerd wordt. Zie figuur 3.1. De dimensieloze bewegingsvergelijking voor de kar is te schrijven als:

$$\ddot{x} + b(x)\dot{x} + k(x) = \gamma \sin \omega t \quad (3.12)$$

met

$$k(x) = \begin{cases} k(x-1) & x > 1 \\ 0 & |x| \leq 1 \\ k(x+1) & x < -1 \end{cases}, \quad b(x) = \begin{cases} b & x > 1 \\ 0 & |x| \leq 1 \\ b & x < -1 \end{cases} \quad (3.13)$$

(de Jager, 1991). Met de tijdsdiscretisatie methode en de shooting methode zijn periodieke oplossingen berekend voor verschillende waarden van de wandstijfheid k . Voor de overige parameters wordt genomen: $b = 2$, $\gamma = 1$ en $\omega = 1$. Het gedrag van het systeem zal sterker



Figuur 3.2: Periodieke oplossingen van de botsende kar voor verschillende wandstijfheden, berekend met de tijdsdiscretisatie methode en de shooting methode.

discontinu worden naarmate de wandstijfheid toeneemt. In figuur 3.2 zijn de berekende periodieke oplossingen weergegeven; de figuren in de bovenste rij zijn resultaten berekend met de tijdsdiscretisatie methode en in de onderste rij met de shooting methode. Voor wandstijfheden groter dan 45 convergeert het oplosproces bij de tijdsdiscretisatie methode niet meer: de methode faalt. De shooting methode daarentegen berekent nog periodieke oplossingen voor wandstijfheden van meer dan 3000. Door de stapgrootte sturing in het numerieke integratieproces van de shooting methode kan er namelijk zeer nauwkeurig gerekend worden in de buurt van de botsings- en loslaatpunten, terwijl bij de tijdsdiscretisatie methode met een equidistant discretisatie grid gerekend wordt. Verfijning van het grid is op een gegeven moment praktisch niet meer haalbaar door te grote rekentijden.

Hoofdstuk 4

De shooting methode

4.1 Directe shooting methode

Met de ontwikkeling van numerieke integratie algoritmen werd het oplossen van startwaardeproblemen voor gewone differentiaalvergelijkingen steeds eenvoudiger en nauwkeuriger. Startwaardeproblemen zijn echter een bijzonder geval van de algemene klasse van randwaardeproblemen, welke niet zonder meer met numerieke integratie opgelost kunnen worden. Randwaardeproblemen kunnen als volgt gedefiniëerd worden (Keller, 1976):

$$y' = f(x, y) \quad ; \quad (' \equiv \frac{d}{dx}) \quad (4.1)$$

met randvoorwaarden

$$g(y(a), y(b)) = 0 \quad (4.2)$$

g Is hier een vectorfunctie van de randwaarden $y(a)$ en $y(b)$. Er wordt nu een oplossing gezocht voor de differentiaalvergelijking (4.1) op het interval $[a, b] \equiv \{x \mid a \leq x \leq b\}$ die voldoet aan de randvoorwaarden (4.2). Om dit randwaarde probleem op te lossen, beschouwen we het verwante startwaardeprobleem:

$$u' = f(x, u) \quad (4.3)$$

met startwaarde

$$u(a) = s \quad (4.4)$$

waarin s de nader te bepalen shooting parametervector is. Deze moet zodanig zijn dat aan de volgende voorwaarde voldaan wordt:

$$\phi(s) \equiv g(s, u(b; s)) = 0 \quad (4.5)$$

waarin $u(b; s)$ de oplossing van het startwaardeprobleem (4.3) is op $x = b$. Als $s = s^*$ een oplossing is van (4.5) dan is $y(x) \equiv u(x; s^*)$ een oplossing van het randwaardeprobleem (4.1). Zo is dus het randwaardeprobleem gereduceerd tot het bepalen van de nulpunten van de functionaal $\phi(s)$.

Voor de bepaling van de nulpunten van (4.5) kan gebruik gemaakt worden van de Newton methode. Met deze methode wordt iteratief de oplossing \mathbf{s}^* bepaald volgens:

$$\mathbf{s}_{v+1} = \mathbf{s}_v - Q^{-1}(\mathbf{s}_v) \cdot \phi(\mathbf{s}_v) \quad ; \quad v = 0, 1, \dots \quad (4.6)$$

waarin \mathbf{s}_0 de beginschatting van de shooting parametervector is en $Q(\mathbf{s}_v)$ de Jacobiaan in de v^e iteratie is:

$$Q(\mathbf{s}_v) \equiv \frac{\partial \phi(\mathbf{s}_v)}{\partial \mathbf{s}_v} = \frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{u}_v(a), \mathbf{u}_v(b))}{\partial \mathbf{u}_v(a)} U(a; \mathbf{s}_v) + \frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{u}_v(a), \mathbf{u}_v(b))}{\partial \mathbf{u}_v(b)} U(b; \mathbf{s}_v) \quad ; \quad v = 0, 1, \dots \quad (4.7)$$

Hierin is:

$$\mathbf{u}_v(x) \equiv \mathbf{u}(x; \mathbf{s}_v) \quad (4.8)$$

$$U(x; \mathbf{s}_v) \equiv \frac{\partial \mathbf{u}(x; \mathbf{s}_v)}{\partial \mathbf{s}_v} \quad (4.9)$$

en omdat $\mathbf{u}_v(a) = \mathbf{s}_v$, geldt:

$$U(a; \mathbf{s}_v) = I \quad (4.10)$$

$U(b; \mathbf{s}_v)$ kan dan opgelost worden uit het volgende matrix startwaarde probleem:

$$U'(x; \mathbf{s}_v) = \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{u}_v} \cdot U(x; \mathbf{s}_v) \quad ; \quad (' \equiv \frac{d}{dx}) \quad (4.11)$$

met als startwaarde $U(a; \mathbf{s}_v) = I$. Naast deze formele manier om de Jacobiaan te berekenen bestaat ook de mogelijkheid om een benadering ervan te berekenen met numerieke differentiatie.

Daar nu bekend is hoe (in iedere iteratieslag) de Jacobiaan bepaald kan worden, kan nu het nulpuntprobleem (4.5), en daarmee dus ook het randwaardeprobleem, opgelost worden. Aan de aanname dat het nulpuntprobleem opgelost kan worden liggen een aantal voorwaarden ten grondslag. Globaal komen deze voorwaarden erop neer dat er een goede beginschatting voor het iteratieproces nodig is en dat de te integreren differentiaalvergelijkingen van het randwaardeprobleem niet instabiel mogen zijn. Met betrekking tot deze convergentie eisen worden analytisch enkele bewijzen geleverd door Keller, 1976. Met betrekking tot het gebruik van de shooting methode in het algemeen wordt er verwezen naar Roberts et al., 1972, Osborne, 1969, Hall et al., 1976, Ling, 1981, Meijaard, 1991, en Vankan, 1992.

4.2 Meervoudige shooting methode

Bij de shooting methode zoals tot nu toe gepresenteerd, kunnen eventuele problemen veroorzaakt worden door:

1. Slechte beginschattingen voor de parametervector
2. Instabiliteit van het startwaarde probleem.

Eisen die aan de beginschatting gesteld moeten worden kunnen in sommige gevallen wel afgeleid worden, maar daarmee is nog geen beginschatting bepaald. Er is geen algemeen geldige procedure aan te geven waarmee goede beginschattingen bepaald kunnen worden. Een goede beginschatting kan in de regel gemaakt worden als er een goede voorkennis van het beschouwde systeem is. Als dit niet het geval is, is het niet ongewoon om tot 90 % van de rekeninspanning te wijden aan het bepalen van een omgeving van de oplossing, i.e. een goede beginschatting (Keller, 1968). De tweede oorzaak heeft tot gevolg dat het nulwaarde probleem (4.5) slecht geconditioneerd wordt. De functionaal ϕ kan dan immers zeer gevoelig voor de startwaarde s worden. Problemen als gevolg hiervan kunnen soms verholpen worden door grotere rekennauwkeurigheid. Dat is echter vaak geen praktische oplossing door te grote rekentijden. Een andere oplossing voor dit probleem kan gevonden worden in het gebruik van de zogenaamde meervoudige shooting methode (Keller, 1968).

Bij de meervoudige shooting methode wordt het beschouwde interval $[a, b]$ verdeeld in een aantal deelintervallen met knooppunten ξ_j :

$$a = \xi_0 < \xi_1 < \dots < \xi_J = b \quad (4.12)$$

Op ieder deelinterval $[\xi_{j-1}, \xi_j]$ wordt nu een startwaarde probleem gedefiniëerd:

$$\mathbf{u}'_j = \mathbf{f}(x, \mathbf{u}_j) \quad ; \quad \xi_{j-1} \leq x \leq \xi_j \quad ; \quad (' \equiv \frac{d}{dx}) \quad (4.13)$$

$$\mathbf{u}_j(\xi_{j-1}) = \mathbf{s}_j \quad ; \quad j = 1, 2, \dots, J \quad (4.14)$$

Er wordt nu gezocht naar zodanige startwaarde vectoren \mathbf{s}_j dat een continu verloop van de oplossing ontstaat op het gehele interval $[a, b]$. Deze continue oplossing voldoet dan vanzelf aan (4.1) en het oorspronkelijke randwaardeprobleem is opgelost.

Teneinde (4.13) op te lossen, wordt in plaats van (4.5) de volgende functionaal Φ opgesteld:

$$\Phi(\hat{\mathbf{s}}) = \begin{pmatrix} \mathbf{g}(\mathbf{s}_1, \mathbf{u}_J(b; \mathbf{s}_J)) \\ \mathbf{s}_2 - \mathbf{u}_1(\xi_1; \mathbf{s}_1) \\ \vdots \\ \mathbf{s}_J - \mathbf{u}_{J-1}(\xi_{J-1}; \mathbf{s}_{J-1}) \end{pmatrix} = \mathbf{0} \quad (4.15)$$

waarin:

$$\hat{\mathbf{s}} = \begin{pmatrix} \mathbf{s}_1 \\ \mathbf{s}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{s}_J \end{pmatrix} \quad (4.16)$$

In principe kan dit nieuwe probleem gezien worden als een uitbreiding van het oorspronkelijke randwaardeprobleem met een aantal dimensies. Om (4.15) in de vorm van (4.5) te kunnen schrijven, voeren we de nieuwe onafhankelijke variabele \hat{x} in:

$$\hat{x} = \frac{(x - \xi_{j-1})}{\Delta_j} \quad , \quad \Delta_j \equiv \xi_j - \xi_{j-1} \quad ; \quad j = 1, 2, \dots, J \quad (4.17)$$

Hiermee kan het randwaarde probleem (4.1) geschreven worden als:

$$\hat{y}' = \hat{f}(\hat{x}, \hat{y}) \quad ; \quad 0 \leq \hat{x} \leq 1 \quad ; \quad (' \equiv \frac{d}{d\hat{x}}) \quad (4.18)$$

waarin

$$\hat{y} \equiv \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_J \end{pmatrix} \quad ; \quad \hat{f} \equiv \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_J \end{pmatrix} \quad (4.19)$$

Voor \hat{y} en \hat{f} geldt:

$$y_j(\hat{x}) \equiv y(\xi_{j-1} + \hat{x}\Delta_j) \quad (4.20)$$

en

$$f_j(\hat{x}, y_j(\hat{x})) \equiv \Delta_j f(\xi_{j-1} + \hat{x}\Delta_j, y(\xi_{j-1} + \hat{x}\Delta_j)) \quad ; \quad j = 1, 2, \dots, J \quad (4.21)$$

Annaloog aan (4.2) volgt voor de continuïteits- en randvoorwaarden:

$$\hat{g}(\hat{y}(0), \hat{y}(1)) \equiv \begin{pmatrix} g(y_1(0), y_J(1)) \\ y_2(0) - y_1(1) \\ \vdots \\ y_J(0) - y_{J-1}(1) \end{pmatrix} = \mathbf{0} \quad (4.22)$$

In plaats van het startwaarde probleem (4.13) schrijven we nu:

$$\hat{u}' = \hat{f}(\hat{x}, \hat{u}) \quad ; \quad 0 \leq \hat{x} \leq 1 \quad ; \quad (' \equiv \frac{d}{d\hat{x}}) \quad (4.23)$$

$$\hat{u}(0) = \hat{s} \quad (4.24)$$

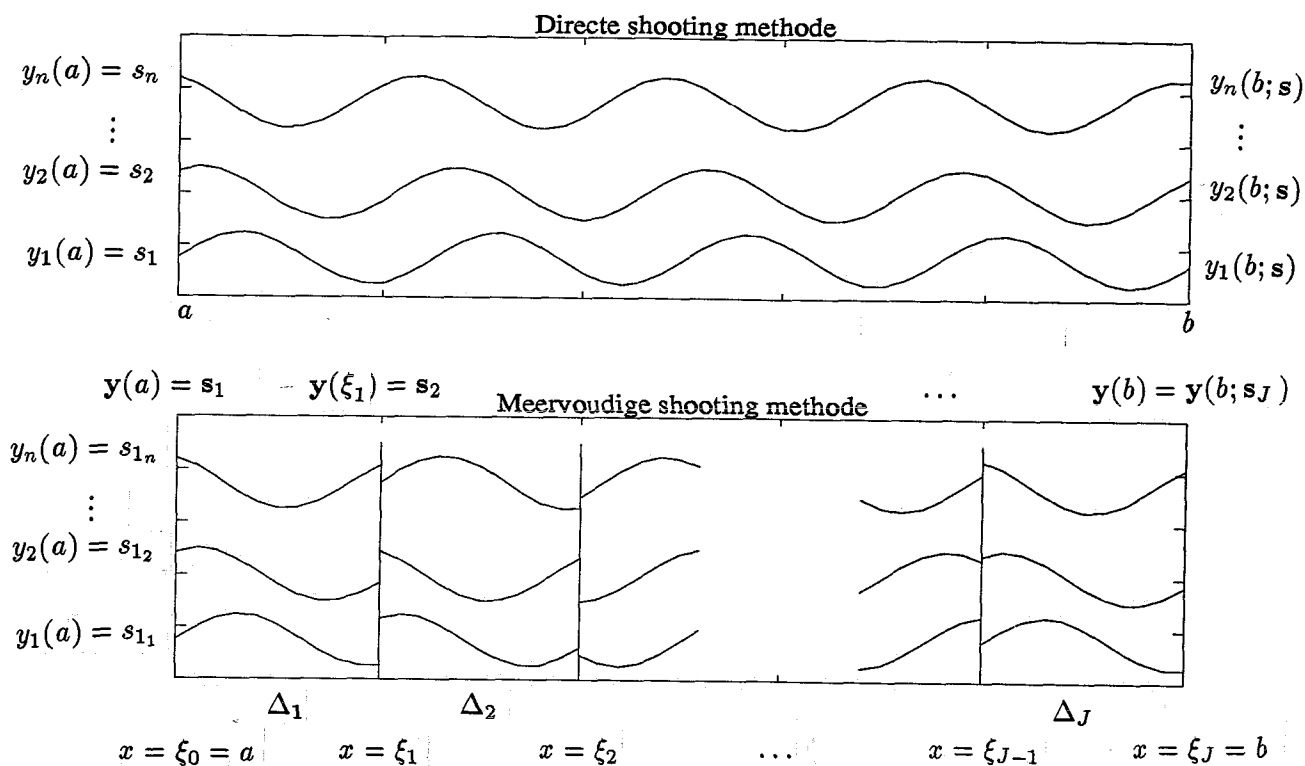
met:

$$\hat{u}(\hat{x}; \hat{s}) \equiv \begin{pmatrix} u_1(a + \hat{x}\Delta_1; s_1) \\ u_2(\xi_1 + \hat{x}\Delta_2; s_2) \\ \vdots \\ u_J(\xi_{J-1} + \hat{x}\Delta_J; s_J) \end{pmatrix} \quad (4.25)$$

en in plaats van de functionaal (4.15) schrijven we:

$$\hat{\Phi}(\hat{s}) \equiv \hat{g}(\hat{s}, \hat{u}(1; \hat{s})) \quad (4.26)$$

Het sterke punt van deze nieuwe formulering is eenvoudig in te zien, namelijk dat het integratie interval teruggebracht is van $[a, b]$ naar maximaal $\Delta_{max} \equiv \max(\Delta_j)$; $j = 1, 2, \dots, J$. Dit is in het bijzonder voordelig bij instabiele startwaarde problemen, waardoor de meervoudige shooting methode in deze gevallen eventueel een oplossing kan bieden voor problemen die niet opgelost kunnen worden met de directe shooting methode. De integratieprocessen voor de directe en de meervoudige shooting methode, zijn geïllustreerd in figuur 4.1.



Figuur 4.1: Integratieverloop bij directe en meervoudige shooting methode.

4.3 De shooting methode in de NAG Fortran bibliotheek

In dit onderzoek wordt gebruik gemaakt van de directe shooting methode zoals die geprogrammeerd is in een aantal subroutines van de NAG Fortran bibliotheek. De routines bevinden zich in het hoofdstuk "Numerieke integratie van gewone differentiaalvergelijkingen" van de NAG bibliotheek en staan geregistreerd als respectievelijk D02HAF, D02HBF en D02SAF. We volstaan hier met een beknopte beschrijving van de werking van de meest uitgebreide routine, D02SAF, en zullen kort ingaan op de verschillen met de andere twee routines. De reden hiervoor is dat alleen D02SAF gebruikt wordt in de implementatie van het shooting algoritme in het parameterschatprogramma.

De routine D02SAF biedt de mogelijkheid om de differentiaalvergelijking

$$y' = f_1(x, y, z, s) \quad ; \quad x \in [x_1, x_N] \quad ; \quad (' \equiv \frac{d}{dx}) \quad (4.27)$$

met stuurvergelijkingen

$$z' = f_2(x, z) \quad ; \quad x \in [x_1, x_N] \quad (4.28)$$

en randvoorwaarden

$$y(x_1(s)) = g_1(s) \quad ; \quad y(x_N(s)) = g_2(s) \quad (4.29)$$

$$z(x_1(s)) = h(s) \quad (4.30)$$

op te lossen. In principe ontstaan de differentiaalvergelijkingen en stuurvergelijkingen uit één oorspronkelijk stelsel differentiaal vergelijkingen:

$$\dot{\mathbf{y}}' = \begin{bmatrix} \mathbf{y}' \\ \mathbf{z}' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}_1(x, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \mathbf{s}) \\ \mathbf{f}_2(x, \mathbf{z}) \end{bmatrix} = \hat{\mathbf{f}}(x, \hat{\mathbf{y}}, \mathbf{s}) \quad (4.31)$$

Indien er in dit oorspronkelijke stelsel echter differentiaalvergelijkingen voorkomen die geen functie van de shooting parametervector \mathbf{s} zijn, dan worden deze vergelijkingen apart genomen en beschouwd als een stelsel stuurvergelijkingen. Het oorspronkelijke probleem wordt n -dimensionaal verondersteld en de shooting parametervector m -dimensionaal. De toestandsvector \mathbf{y} wordt n_1 -dimensionaal verondersteld en uit de randvoorwaarden (4.29) kunnen dus n_1 algebraïsche vergelijkingen in m onbekende componenten van \mathbf{s} afgeleid worden en er moet gelden:

$$n_1 \leq m \quad (4.32)$$

Als $n_1 = m$, is met de vergelijkingen die volgen uit (4.29) het probleem volledig gedefiniëerd volgens:

$$\mathbf{g}(\mathbf{g}_1(\mathbf{s}), \mathbf{g}_2(\mathbf{s})) = \mathbf{0} \quad (4.33)$$

Als $n_1 < m$ moeten $m - n_1$ algebraïsche vergelijkingen in de overgebleven onbekende parameters uit \mathbf{s} toegevoegd worden:

$$\mathbf{e}(\mathbf{s}) = \mathbf{0} \quad (4.34)$$

Deze overgebleven $m - n_1$ onbekende parameters uit \mathbf{s} kunnen bijvoorbeeld gebruikt worden ter bepaling van parameters in de differentiaal vergelijkingen of x waarden van gezochte knooppunten op het interval. De subroutine biedt namelijk de mogelijkheid om het beschouwde interval in subintervallen te verdelen door knooppunten te definiëren:

$$x_1(\mathbf{s}) < x_2(\mathbf{s}) < \dots < x_N(\mathbf{s}) \quad (4.35)$$

Op ieder interval kunnen nu een aantal specifieke wensen, zoals initiële- en maximum integratie stapgrootte, gedefiniëerd worden. Hiermee kunnen bijvoorbeeld stukken met complex gedrag van de oplossingen $\mathbf{y}(x)$ en $\mathbf{z}(x)$ nauwkeurig geïntegreerd worden. Verder kunnen discontinue functies \mathbf{f}_1 en \mathbf{f}_2 gedefiniëerd worden, door op de verschillende subintervallen verschillende differentiaal vergelijkingen voor te schrijven.

Het randwaardeprobleem kan nu opgelost worden door de functionaal vergelijking

$$\phi(\mathbf{s}) = \mathbf{0} \quad (4.36)$$

op te lossen voor \mathbf{s} . Hierin geldt voor de functionaal ϕ :

$$\phi = \begin{bmatrix} \mathbf{g} \\ \mathbf{e} \end{bmatrix} \quad (4.37)$$

Na integratie kan ϕ berekend worden. De uiteindelijke (benaderings)oplossing \mathbf{s}^* van (4.36) wordt bepaald met een gemodificeerd Newton proces:

$$\mathbf{s}_{v+1} = \mathbf{s}_v - \lambda \tilde{Q}^{-1} \phi_v \quad (4.38)$$

Hierin is s_v de waarde van s in de v^{de} iteratie; $\phi_v = \phi(s_v)$ en \tilde{Q} is een benadering van Q , de Jacobiaan:

$$Q \equiv \left(\frac{\partial \phi}{\partial s}\right)_{(s_v)} \quad (4.39)$$

Q wordt berekend met numerieke differentiatie. Als Q bijna singulier is of als het iteratie proces van (4.38) niet convergeert wordt Q aangepast tot \tilde{Q} . Verschillende geschikte methoden voor deze aanpassing worden besproken in Gay, 1976. De factor λ wordt gebruikt om de werking van het Newton proces te verbeteren. λ is gelijk aan de meest geschikte waarde uit de rij:

$$\frac{1}{2^i} \quad ; \quad i = 0, 1, \dots, 4 \quad (4.40)$$

zodanig dat de volgende aanpassing van s volgens (4.38) kleiner zal zijn dan de huidige aanpassing:

$$\| \tilde{Q}^{-1} \phi_{v+1} \| \leq 0.9 \| \tilde{Q}^{-1} \phi_v \| \quad (4.41)$$

Alleen indien nodig, i.e. als

$$\| \tilde{Q}^{-1} \phi_{v+1} \| > 0.0625 \left(1 - \frac{1}{m+1}\right) \| \tilde{Q}^{-1} \phi_v \| \quad (4.42)$$

wordt de Jacobiaan \tilde{Q} opnieuw bepaald. Dit is omdat de bepaling van $\tilde{Q}(m \times m)$ vrij rekenintensief is. De iteratie wordt alleen beëindigd als:

1. zij niet gestart kan worden ($\phi(s_0)$ of $Q(s_0)$ kunnen niet bepaald worden),
2. voor geen enkele λ of \tilde{Q} aan (4.41) voldaan kan worden.

De Jacobiaan wordt afhankelijk van de vereiste nauwkeurigheid berekend met voorwaartse, achterwaartse of centrale differentie. Omdat de Jacobiaan met numerieke differentiatie bepaald wordt, bestaat bij deze routines de mogelijkheid om andere waarden dan startwaarden op te lossen als shooting parameters. Edoch zal deze faciliteit niet gebruikt worden in dit onderzoek. Parameters in het mathematische model van het te onderzoeken systeem worden in eerste instantie immers bekend verondersteld en slechts de periodieke oplossing behoeft bepaald te worden. De modelparameters worden elders in het parameterschatprogramma bepaald met behulp van de berekende periodieke oplossingen.

De subroutine D02SAF bevat verder nog een breed scala van controle-, stuur- en correctie mechanismen ten behoeve van het Newton proces en de numerieke integratie, waardoor zij vrij robuust genoemd mag worden. De twee andere routines verschillen voornamelijk door het ontbreken van deze robuustheid en een aantal mogelijkheden. Globaal komt het erop neer dat de "middelste" routine, D02HBF, niet de mogelijkheid van intervalverdeling bezit en de simpelste routine, D02HAF, bovendien niet de mogelijkheid heeft om andere waarden dan randwaarden te bepalen met het shooting proces. Voor een beschrijving van de routines wordt verwezen naar de NAG Fortran Library Manual, Gladwel, 1979, en Hall et al. 1976.

Hoofdstuk 5

Afgeleiden

Bij het optimaliseringsproces in het schattingsalgoritme wordt gebruik gemaakt van de afgeleiden van de residuen naar de parameters, $\mathbf{e}, \tilde{\theta}$ (zie paragraaf 2.3, vergelijkingen 2.18 en 2.19). Daar voor de residuen geldt $\mathbf{e} \equiv \mathbf{y} - \tilde{\mathbf{y}}$ en de gemeten uitgangen \mathbf{y} geen functie zijn van de modelparameters $\tilde{\theta}$, zijn deze afgeleiden tegengesteld aan de afgeleiden van de berekende uitgangen naar de parameters: $\mathbf{e}, \tilde{\theta} = -\tilde{\mathbf{y}}, \tilde{\theta}$. Ten behoeve van het optimaliseringsproces worden nu de afgeleiden van de berekende uitgangen naar de modelparameters bepaald. De methode die gebruikt wordt voor de berekening van de periodieke oplossingen bepaalt van welke grootheden de berekende uitgangen afhankelijk zijn. In het volgende worden de berekende uitgangen genoteerd als \mathbf{y} .

5.1 Tijdsdiscretisatie methode

Bij de tijdsdiscretisatie methode worden de uitgangen geschreven als een expliciete functie van de verplaatsingen, snelheden en versnellingen:

$$\mathbf{y} = \mathbf{f}_z(\mathbf{z}^*, \mathbf{z}^{*'}, \mathbf{z}^{*''}, \mathbf{x}^*, \tau^*, \theta) \quad (5.1)$$

Voor de totale afgeleide van de uitgangen naar de parameters geldt:

$$\frac{d\mathbf{y}}{d\theta} = \frac{d}{d\theta} \mathbf{f}_z(\mathbf{z}^*, \mathbf{z}^{*'}, \mathbf{z}^{*''}, \mathbf{x}^*, \tau^*, \theta) \quad (5.2)$$

$$= \frac{\partial \mathbf{f}_z}{\partial \theta} + \frac{\partial \mathbf{f}_z}{\partial \mathbf{z}^*} \frac{\partial \mathbf{z}^*}{\partial \theta} + \frac{\partial \mathbf{f}_z}{\partial \mathbf{z}^{*'}} \frac{\partial \mathbf{z}^{*'}}{\partial \theta} + \frac{\partial \mathbf{f}_z}{\partial \mathbf{z}^{*''}} \frac{\partial \mathbf{z}^{*''}}{\partial \theta} \quad (5.3)$$

Omdat hier echter de snelheden en versnellingen berekend zijn uit de verplaatsingen met behulp van het gekozen differentieschema, kunnen de afgeleiden van snelheid en versnelling naar de parameters uitgedrukt worden in partiële afgeleiden van snelheid en versnelling naar verplaatsing en van verplaatsing naar parameters:

$$\frac{\partial \mathbf{z}^{*'}}{\partial \theta} = \frac{\partial \mathbf{z}^{*'}}{\partial \mathbf{z}^*} \frac{\partial \mathbf{z}^*}{\partial \theta} \quad ; \quad \frac{\partial \mathbf{z}^{*''}}{\partial \theta} = \frac{\partial \mathbf{z}^{*''}}{\partial \mathbf{z}^*} \frac{\partial \mathbf{z}^*}{\partial \theta} \quad (5.4)$$

Invullen hiervan in (5.3) levert:

$$\frac{dy}{d\theta} = \frac{\partial f_z}{\partial \theta} + \frac{\partial f_z}{\partial z^*} \frac{\partial z^*}{\partial \theta} + \frac{\partial f_z}{\partial z^{*'}} \frac{\partial z^{*'}}{\partial z^*} \frac{\partial z^*}{\partial \theta} + \frac{\partial f_z}{\partial z^{*''}} \frac{\partial z^{*''}}{\partial z^*} \frac{\partial z^*}{\partial \theta} = \quad (5.5)$$

$$= \frac{\partial f_z}{\partial \theta} + \left(\frac{\partial f_z}{\partial z^*} + \frac{\partial f_z}{\partial z^{*'}} \frac{\partial z^{*'}}{\partial z^*} + \frac{\partial f_z}{\partial z^{*''}} \frac{\partial z^{*''}}{\partial z^*} \right) \frac{\partial z^*}{\partial \theta} \quad (5.6)$$

De afgeleiden $\frac{\partial z^{*'}}{\partial z^*}$ en $\frac{\partial z^{*''}}{\partial z^*}$ representeren hier het gekozen differentieschema en resulteren in matrices met een bandstructuur. De overige afgeleiden kunnen analytisch, of door combinatie van andere afgeleiden bepaald worden. De afgeleiden die analytisch bepaald kunnen worden zijn: $\frac{\partial f_z}{\partial \theta}$, $\frac{\partial f_z}{\partial z^*}$, $\frac{\partial f_z}{\partial z^{*'}}$ en $\frac{\partial f_z}{\partial z^{*''}}$. De resterende afgeleide $\frac{\partial z^*}{\partial \theta}$ kan afgeleid worden uit het mathematische model (3.10) volgens:

$$\frac{d}{d\theta}(\mathbf{g}^*(z^*, \mathbf{x}^*, \boldsymbol{\tau}^*, \theta)) = \frac{\partial \mathbf{g}^*}{\partial \theta} + \frac{\partial \mathbf{g}^*}{\partial z^*} \frac{\partial z^*}{\partial \theta} = 0 \quad (5.7)$$

De gelijkheid aan nul van (5.7) volgt uit het feit dat voor iedere parametervector $\tilde{\theta}$ een oplossing \tilde{z}^* geldt waarvoor:

$$\mathbf{g}^*(\tilde{z}^*, \mathbf{x}^*, \boldsymbol{\tau}^*, \tilde{\theta}) = 0 \quad (5.8)$$

zodat een variatie in $\tilde{\theta}$ alleen leidt tot een expliciete variatie in de oplossing \tilde{z}^* , maar niet tot een expliciete variatie in \mathbf{g}^* . Uit (5.7) kan afgeleid worden:

$$\frac{\partial z^*}{\partial \theta} = -\left[\frac{\partial \mathbf{g}^*}{\partial z^*} \right]^{-1} \frac{\partial \mathbf{g}^*}{\partial \theta} \quad (5.9)$$

waarin $\frac{\partial \mathbf{g}^*}{\partial z^*}$ en $\frac{\partial \mathbf{g}^*}{\partial \theta}$ analytisch bepaald kunnen worden. Met al deze afgeleiden kan $\frac{dy}{d\theta}$ samengesteld worden volgens (5.6).

5.2 Tijdsintegratie methode

Bij de tijdsintegratie methode, waar gebruik gemaakt wordt van de toestandsbeschrijving, worden de uitgangen als expliciete functie van de toestanden geschreven:

$$\mathbf{y} = \mathbf{f}_s(\mathbf{s}, \mathbf{x}, t, \theta) \quad (5.10)$$

De grootheden \mathbf{y} , \mathbf{s} en \mathbf{x} representeren de waarden van respectievelijk de uitgangen, de toestanden en de onafhankelijke variabelen op tijdstip t . Voor de totale afgeleide van de uitgangen naar de parameters kan hier genoteerd worden:

$$\frac{d\mathbf{y}}{d\theta} = \frac{d}{d\theta} \mathbf{f}_s(\mathbf{s}, \mathbf{x}, t, \theta) \quad (5.11)$$

$$= \frac{\partial \mathbf{f}_s}{\partial \theta} + \frac{\partial \mathbf{f}_s}{\partial \mathbf{s}} \frac{\partial \mathbf{s}}{\partial \theta} \quad (5.12)$$

De partiële afgeleiden $\frac{\partial f_s}{\partial \theta}$ en $\frac{\partial f_s}{\partial s}$ kunnen analytisch bepaald worden. De afgeleide $\frac{\partial s}{\partial \theta}$ kan bepaald worden door berekening van de periodieke oplossing van de zogenaamde gevoeligheidsvergelijkingen. Deze gevoeligheidsvergelijkingen vormen een stelsel gelineariseerde vergelijkingen om de periodieke oplossing van de toestanden heen. Het stelsel kan afgeleid worden door differentiatie van het mathematische model (3.3) naar de parameters:

$$\frac{\partial \dot{s}}{\partial \theta} = \frac{d\dot{s}}{d\theta} = \frac{d}{d\theta} h(s, x, t, \theta) \quad (5.13)$$

$$= \frac{\partial h}{\partial s} \frac{\partial s}{\partial \theta} + \frac{\partial h}{\partial \theta} \quad (5.14)$$

Omkeren van de volgorde van differentiatie in het linkerlid levert:

$$\left(\frac{\partial s}{\partial \theta} \right) = \frac{\partial h}{\partial s} \frac{\partial s}{\partial \theta} + \frac{\partial h}{\partial \theta} \quad (5.15)$$

wat als een eerste orde differentiaalvergelijking in $\frac{\partial s}{\partial \theta}$ beschouwd kan worden. Omdat de oplossing van dit stelsel de gradiënten van s naar θ om de periodieke oplossing voor s beschrijft, zal deze oplossing eveneens periodiek zijn. Als al deze afgeleiden bekend zijn, kan de afgeleide $\frac{dy}{d\theta}$ samengesteld worden volgens (5.12).

Hoofdstuk 6

Testproblemen

Alvorens de shooting methode te implementeren in het schattingsprogramma, is de werking ervan getest aan de hand van een aantal voorbeeldproblemen uit de literatuur. Er is getracht om periodieke oplossingen te berekenen voor verschillende soorten niet-lineaire dynamische systemen:

Een continu tweede orde systeem: Duffing vergelijking (Ueda, 1991)

Een systeem met discontinuïteiten in de tweede orde termen: de botsende kar (zie hoofdstuk 3)

Een systeem met discontinuïteiten in de eerste orde termen: starre penverbinding met speling (de Jager, 1991)

De berekening van periodieke oplossingen met het shooting algoritme voor een model van de OLEO is ook getest. De resultaten hiervan zijn vergeleken met resultaten van berekeningen met de tijdsdiscretisatie methode.

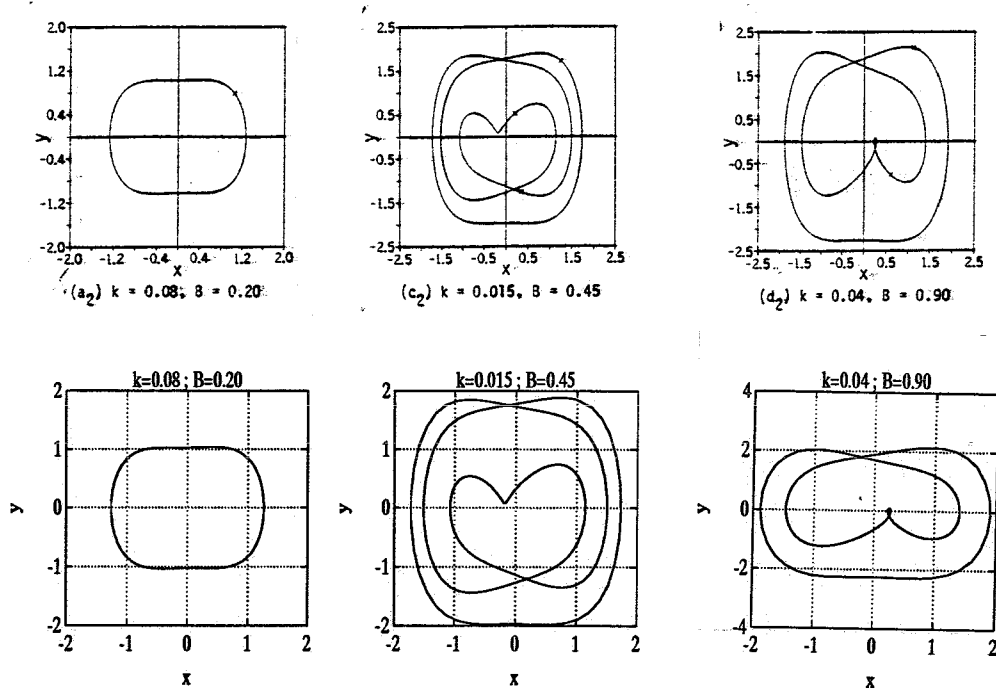
Ten slotte is de implementatie van het shooting algoritme in het schattingsprogramma getest. Ook hier zijn de resultaten weer vergeleken met de resultaten van de berekeningen met behulp van de tijdsdiscretisatie methode.

6.1 Duffing systeem

In Ueda (1991) zijn een aantal periodieke oplossingen voor een Duffing systeem weergegeven. De differentiaalvergelijking wordt geschreven volgens ($\dot{} \equiv \frac{d}{dt}$):

$$\dot{x} = y \quad ; \quad \dot{y} = -ky - x^3 + B \cos t \quad (6.1)$$

Enkele van deze oplossingen zijn nagerekend met het hier gebruikte shooting algoritme. Globaal komen de resultaten goed overeen. Zie figuur 6.1. In de bovenste rij zijn de resultaten van Ueda weergegeven en in de onderste rij de resultaten berekend met het shooting algoritme. Zowel 1- en 2- als 3-periodieke oplossingen (respectievelijk het eerste, derde en tweede plaatje in de rijen) kunnen berekend worden. Aangenomen kan worden dat het shooting algoritme gebruikt kan worden voor de berekening van periodieke oplossingen van niet-lineaire dynamische systemen.



Figuur 6.1: Periodieke oplossingen voor een Duffing systeem volgens Ueda en berekend met de shooting methode.

6.2 Botsende kar

Om een idee te hebben van de bruikbaarheid van het shooting algoritme voor de berekening van periodieke oplossingen van discontinue systemen, is een dergelijk systeem geanalyseerd waarvoor reeds periodieke oplossingen berekend zijn (de Jager, 1991).

We beschouwen nogmaals de botsende kar uit hoofdstuk 3 (zie figuur 3.1). Als de kar los is van de wanden kan zij wrijvingsloos bewegen. Als een van de wanden geraakt wordt, zal de bewegingsvergelijking (het mathematische model) van vorm veranderen doordat er een dempings- en een veerterm bijkomen. Deze verandering gebeurt op één bepaald tijdstip, waardoor een discontinu gedrag ontstaat.

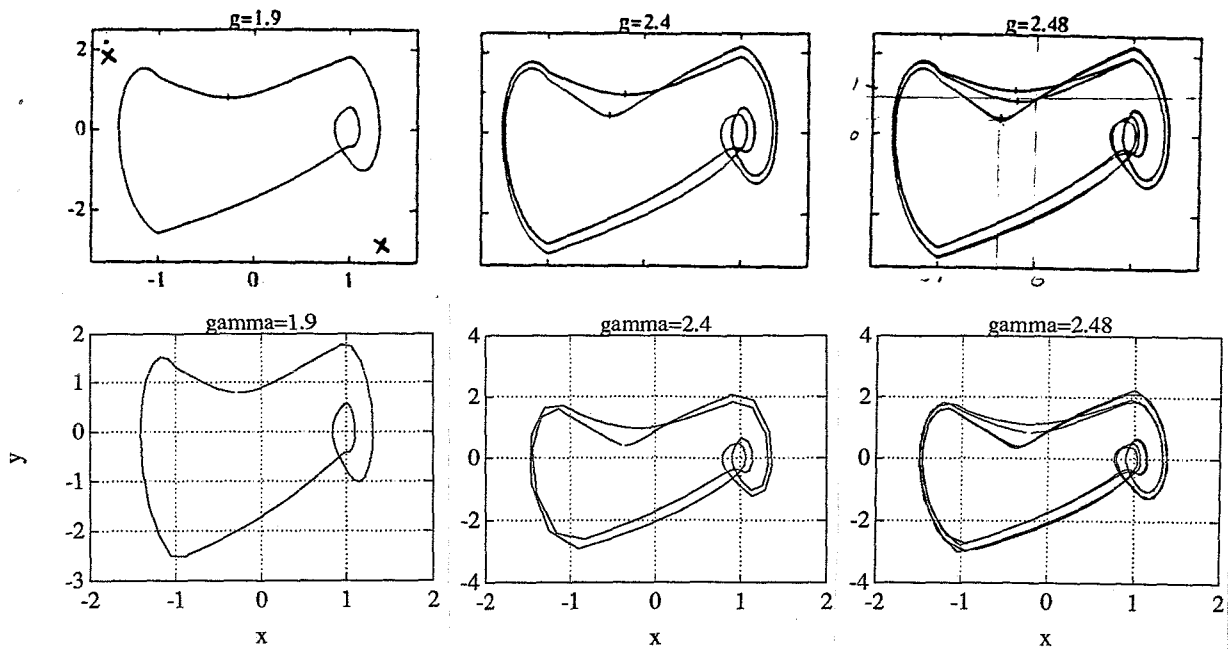
Voor de dimensieloze bewegingsvergelijking geldt (zie ook hoofdstuk 3):

$$\ddot{x} + b(x)\dot{x} + k(x) = \gamma \sin \omega t \tag{6.2}$$

met

$$k(x) = \begin{cases} k(x-1) & x > 1 \\ 0 & |x| \leq 1 \\ k(x+1) & x < -1 \end{cases}, \quad b(x) = \begin{cases} b & x > 1 \\ 0 & |x| \leq 1 \\ b & x < -1 \end{cases} \tag{6.3}$$

Afhankelijk van de parameter γ treden voor dit systeem 1-, 2-, 4-, meer-, quasiperiodieke of chaotische oplossingen op. Er zijn voor verschillende waarden van de dimensieloze excitatie amplitude γ 1-, 2- en 4-periodieke oplossingen berekend met het shooting algoritme. Voor de overige parameters is genomen: $k = 30$, $b = 2$ en $\omega = 1$. De resultaten zijn weergegeven in de onderste rij van figuur 6.2. In de bovenste rij zijn de oplossingen berekend door de Jager weergegeven. De oplossingen berekend met het shooting algoritme komen goed overeen met de oplossingen berekend door de Jager. Zelfs voor de berekening van de minder eenvoudige 4-periodieke oplossing convergeerde de Newton iteratie van



Figuur 6.2: Periodieke oplossingen voor de botsende kar berekend door de Jager en met het shooting algoritme.

het shooting proces al na ongeveer 10 iteraties. Noodzakelijk hiervoor was wel om een beginschatting te doen die niet al te ver ($\pm 50\%$) van de oplossing verwijderd lag.

6.3 Starre penverbinding met speling

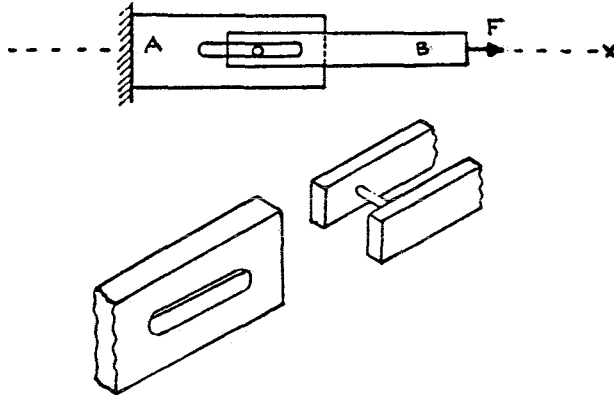
De discontinuïteiten in het model van de botsende kar treden op in de tweede orde termen (een stap in de kracht). Daar er geen tweede orde termen in de toestand voorkomen zou dit een reden kunnen zijn voor het succesvol berekenen van de periodieke oplossingen voor dat systeem. In het gebruikte numerieke integratie algoritme wordt namelijk de integratiefout in de toestanden getest aan de hand van een integratiefout tolerantie. Als er een discontinuïteit in de toestand optreedt, dan zal hier de integratiefout erg groot worden. Of deze fout dusdanig groot wordt dat het integratie algoritme van de shooting oplosser faalt, is nagegaan. Er is hiertoe een systeem geanalyseerd waarin een stap in de eerste orde term (de snelheid) optreedt.

Er is getracht om periodieke oplossingen te berekenen voor een starre penverbinding met speling waarin de pen periodiek geëxciteerd wordt. Zie figuur 6.3. In de Jager (1991) zijn periodieke oplossingen voor dit systeem weergegeven. Botsingen van de pen met de sleufranden, gelegen op $x = \pm 1$, worden inelastisch en dissipatief verondersteld met restitutiecoëfficiënt r . Voor de dimensieloze bewegingsvergelijking kan afgeleid worden:

$$\ddot{x} = \gamma \sin t \quad |x| < 1 \quad (6.4)$$

$$\dot{x} \rightarrow -r\dot{x} \quad |x| = 1 \quad (6.5)$$

Bij de berekening van de periodieke oplossing met het shooting algoritme bleek de numerieke integratie zeer moeizaam te verlopen. Dit is waarschijnlijk te wijten aan de



Figuur 6.3: Starre penverbinding met speling.

de stap in de snelheid die optreedt bij een botsing. Bovendien convergeerde het iteratie proces van van het shooting algoritme niet. Er is voor dit systeem geen periodieke oplossing gevonden met de shooting methode.

6.4 Periodieke oplossingen van de OLEO

De OLEO vertoont discontinu gedrag als gevolg van het optreden van wrijving. De wrijvingsterm wordt gemodelleerd met behulp van een arctan-functie. Deze functie representeert het omslaan van de wrijvingskracht als de beweging van richting wisselt.

Als model voor de OLEO wordt gebruikt (Verbeek, 1992-2):

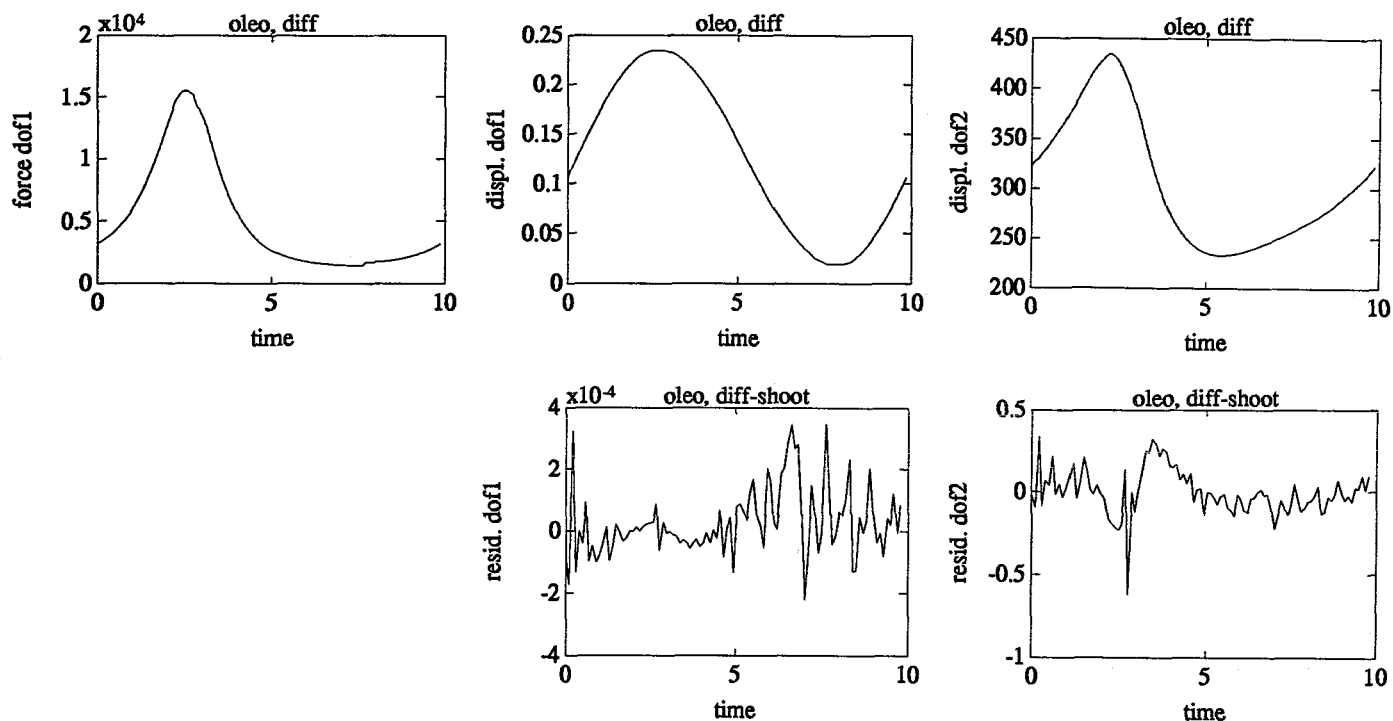
$$\theta_1(\ddot{u} + \theta_2) + \theta_3 |\dot{u}| \dot{u} + \frac{\theta_4 T}{1 + \theta_5 u + \theta_6 T} + (\theta_7 + \theta_8 u^2) \arctan(\theta_9 \dot{u}) + \theta_{10} = F_{ex} \quad (6.6)$$

$$\dot{T} + \theta_{11}(T + \theta_{12}) + \theta_{13} \frac{T \dot{u}}{1 + \theta_5 u} = 0 \quad (6.7)$$

waarin:

u =indrukking	$\theta_1 = 25.0$	$\theta_6 = 0.00013043478$	$\theta_{11} = 0.66718718$
T =temperatuur	$\theta_2 = 9.81$	$\theta_7 = 73.211274$	$\theta_{12} = 293.0$
F_{ex} =excitatie kracht	$\theta_3 = 2897.4615$	$\theta_8 = 2037.1833$	$\theta_{13} = -1.5147826$
	$\theta_4 = 6.0491577$	$\theta_9 = 10000.0$	
	$\theta_5 = -3.7869565$	$\theta_{10} = -313.4$	

De OLEO is hier gemodelleerd door een stelsel gekoppelde, niet-lineaire differentiaalvergelijkingen met twee graden van vrijheid. Vrijheidsgraad u representeert de indrukking en vrijheidsgraad T de absolute temperatuur in de gasveer. Het stelsel vergelijkingen bestaat



Figuur 6.4: Gemeten excitatie krachten en periodieke oplossingen voor de twee vrijheidsgraden in het OLEO model berekend met tijdsdiscretisatie, en verschillen tussen de resultaten berekend met het tijdsdiscretisatie algoritme en het shooting algoritme.

uit een tweede orde differentiaalvergelijking waarin de versnellingen voorkomen, en een eerste orde differentiaalvergelijking waarin het temperatuurverloop beschreven wordt.

Er zijn periodieke oplossingen berekend voor dit model waarbij voor de parameters de hierboven gegeven waarden genomen is. Er is bij deze berekeningen gebruik gemaakt van een gemeten excitatie kracht F_{ex} . De resultaten van de berekeningen met de shooting methode worden vergeleken met die van de tijdsdiscretisatie methode. In figuur 6.4 zijn in de bovenste rij de periodieke oplossingen berekend met de tijdsdiscretisatie methode weergegeven. In de onderste rij zijn de verschillen tussen de periodieke oplossingen berekend met tijdsdiscretisatie en shooting weergegeven. De resultaten komen goed overeen.

6.5 Schatten van de OLEO

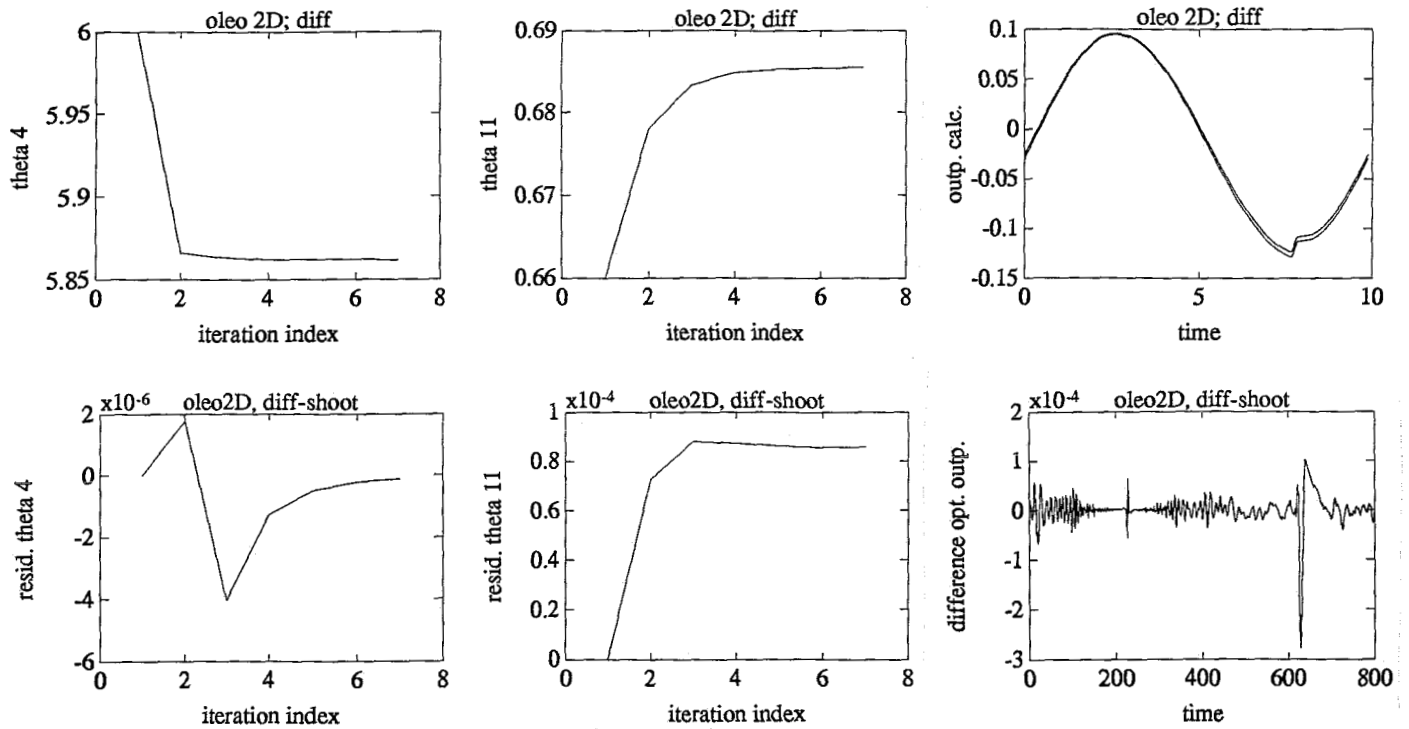
Na de inventarisatie van de mogelijkheden en beperkingen van het shooting algoritme als periodieke oplosser, is de methode geïmplementeerd in het schattingsprogramma. Ter controle van de werking van het algoritme in het schattingsprogramma, zijn tests uitgevoerd met behulp van een model voor de OLEO. Er wordt gebruik gemaakt van het in de vorige paragraaf beschreven model. Voor de parameters θ_7 en θ_9 worden hier echter de waarden genomen:

$$\theta_7 = 41.380285$$

$$\theta_9 = 1000.0$$

Voor de uitgangsvergelijking wordt hier genomen:

$$\hat{y} = \theta_{14} + u \quad ; \quad \theta_{14} = -0.1405 \quad (6.8)$$



Figuur 6.5: Iteratieverlopen van de geschatte parameters en de uitgangen van het OLEO model berekend met het tijdsdiscretisatie algoritme en verschillen tussen de resultaten voor de parameters en de "optimale" oplossing berekend met tijdsdiscretisatie en shooting.

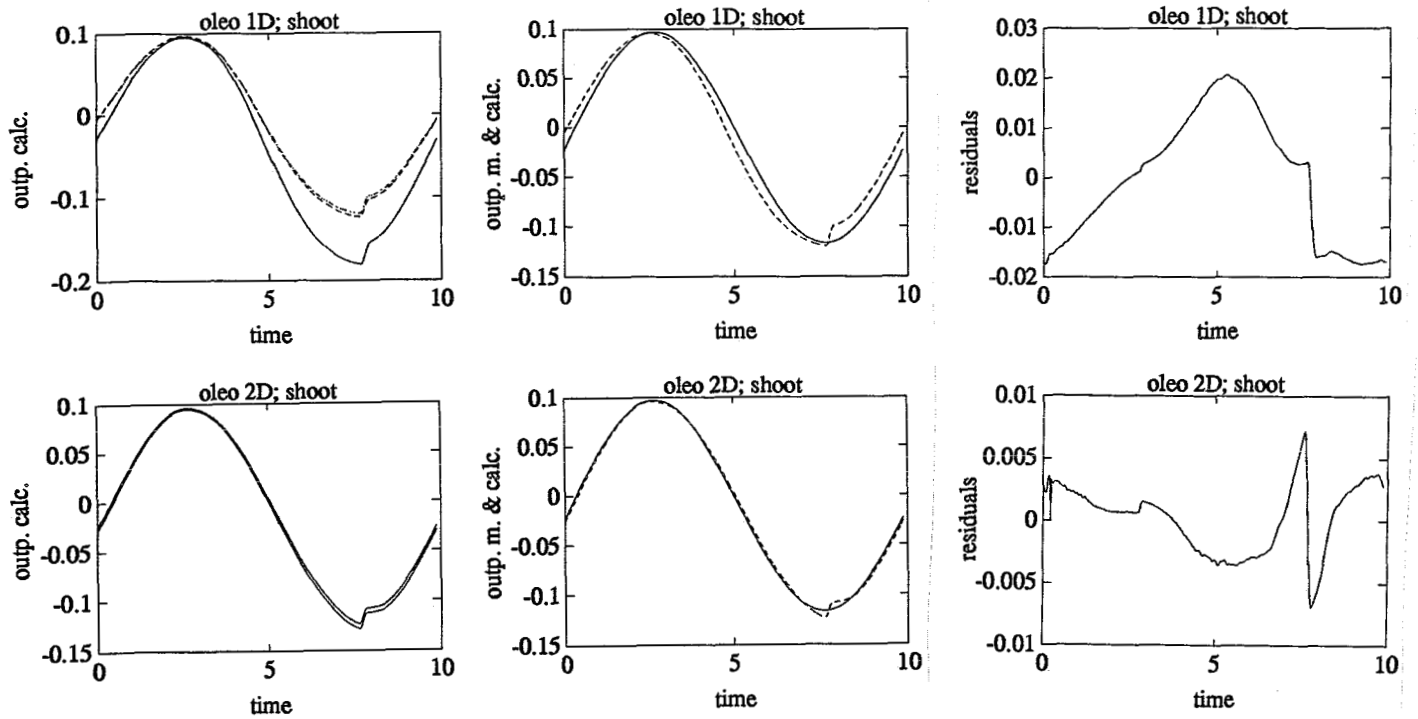
Naast de gemeten excitatie kracht wordt nu ook gebruik gemaakt van gemeten uitgangen. Het schattingsprogramma moet nu waarden berekenen voor de geschatte parameters zodanig dat de berekende uitgangen zo goed mogelijk overeenkomen met de gemeten uitgangen. De parameters θ_4 en θ_{11} worden geschat met het parameterschatprogramma. Als beginschatting voor deze parameters wordt genomen:

$$\begin{aligned}\theta_4 &= 6.0 \\ \theta_{11} &= 0.66\end{aligned}$$

De schattingen berekend met gebruikmaking van het shooting algoritme kunnen vergeleken worden met de schattingen berekend met gebruikmaking van het tijdsdiscretisatie algoritme. De resultaten zijn weergegeven in figuur 6.5. In de bovenste rij zijn de iteratieverlopen voor de geschatte parameters en de uitgangen zoals berekend met het tijdsdiscretisatie algoritme weergegeven. In de onderste rij zijn de verschillen tussen de resultaten voor de parameters en de "optimale" oplossing berekend met tijdsdiscretisatie en shooting weergegeven. Ook deze resultaten komen goed overeen. Het shooting algoritme in het schattingsprogramma blijkt voor dit model goed te werken.

Voordat het tweedimensionale model voor de OLEO was afgeleid, werd er gebruik gemaakt van eenvoudiger, eendimensionaal model. De bewegingsvergelijking voor dit model luidt (de Jonge, 1992):

$$\theta_1(\ddot{u} + g) + \theta_2|\dot{u}|\dot{u} + \theta_3 \left[\frac{1}{1 - u\theta_4} \right]^{\theta_5} + \theta_6 - \theta_8 + \left(\theta_9 \frac{2}{\pi} \right) \arctan(\theta_{10}u) = F_{ex} \quad (6.9)$$



Figuur 6.6: Iteratieverlopen van de berekende uitgangen, de gemeten en berekende uitgangen en de residuen, berekend met het oude en het nieuwe OLEO model.

waarin:

u =indrukking	$\theta_1 = 25.0$	$\theta_6 = 37.0$
g =valversnelling (9.81)	$\theta_2 = 2883.22126873955$	$\theta_8 = 348.35$
F_{ex} =excitatie kracht	$\theta_3 = 1811.5$	$\theta_9 = 81.0$
	$\theta_4 = 3.7$	$\theta_{10} = 170.0$
	$\theta_5 = 1.0$	

Als uitgangsvergelijking wordt bij dit model genomen:

$$\hat{y} = \theta_7 + u \quad ; \quad \theta_7 = -0.1405 \quad (6.10)$$

Ook voor dit model zijn schattingen uitgevoerd met gebruikmaking van de tijdsdiscretisatie methode en de shooting methode. De resultaten van beide berekeningen komen goed overeen.

In het tweedimensionale model worden thermodynamische processen die zich in de gasveer van de OLEO afspelen meegemodelleerd. De bedoeling hiervan is om het dynamische gedrag van de OLEO exacter te kunnen beschrijven. We vergelijken daarom de resultaten die berekend zijn met het nieuwe model met de resultaten berekend met het oude model. In figuur 6.6 zijn in de bovenste rij respectievelijk de iteratieverlopen van de berekende uitgangen, de gemeten en berekende "optimale" uitgangen en de hierbij horende residuen voor het oude model weergegeven. In de onderste rij zijn deze resultaten voor het nieuwe model weergegeven. Het nieuwe model blijkt inderdaad het gedrag van de OLEO beter te beschrijven. Voor beide modellen komen de resultaten berekend met het tijdsdiscretisatie algoritme en het shooting algoritme overeen.

Hoofdstuk 7

Conclusies

De bestaande programmatuur voor de periodieke oplosser en de schatter is uitgebreid met het shooting algoritme. Aan de invoer en de mogelijkheden van de oude programma's is niets veranderd. Er kan nu een keuze gemaakt worden om de tijdsdiscretisatie methode of de shooting methode te gebruiken voor de berekening van de periodieke oplossingen. Bij beide methoden wordt gebruik gemaakt van dezelfde invoer.

De werking van het shooting algoritme in het schattingsprogramma is beperkt getest. Er zijn schattingen berekend voor parameters in enkele OLEO modellen. De resultaten komen goed overeen met resultaten die voor deze modellen berekend zijn met gebruikmaking van de tijdsdiscretisatie methode. (Zie paragraaf 6.5; "Schatten van de niet-lineaire OLEO".) Aangenomen kan worden dat het shooting algoritme goed geïmplementeerd is in het schattingsprogramma.

Voor het schatten van systemen waarbij de tijdsdiscretisatie methode faalt als periodieke oplosser, kan de shooting methode als periodieke oplosser gebruikt worden. Als het falen van de tijdsdiscretisatie methode veroorzaakt wordt door discontinu gedrag van deze systemen, dan is er een goede mogelijkheid dat de shooting methode wel succesvol is. Dit is geïllustreerd met het model van de botsende kar in hoofdstuk 3.

Uit testproblemen is gebleken dat bij de berekening van periodieke oplossingen van discontinue systemen met het shooting algoritme, de rekentijden erg groot kunnen worden. Zowel bij de penverbinding in paragraaf 6.3 als bij de OLEO in paragraaf 6.4 treedt een stap in de snelheid op. Bij de penverbinding ontstaat deze stap door de inelastische botsing. Bij de OLEO ontstaat een hoge piek in de snelheid door het optreden van een stap in de excitatie kracht. Door deze stap in de snelheid kost de numerieke integratie veel tijd omdat op het discontinue punt de integratie stapgrootte sterk verkleind moet worden.

De berekening van de periodieke oplossingen voor de OLEO met het shooting algoritme kostte ongeveer 100 sec., wat 10 tot 100 maal langer is dan bij gebruik van de tijdsdiscretisatie methode. Aan de penverbinding is alleen maar gerekend met het shooting algoritme. De integratie over een periode kostte meer dan 100 sec. Voor dit systeem kon geen periodieke oplossing berekend worden. Dit is waarschijnlijk te wijten aan de stap in de snelheid die hier te groot is om nauwkeurig te kunnen integreren. De berekeningen zijn uitgevoerd op een Silicon Graphics Iris workstation.

Een voorwaarde voor een succesvolle berekening van periodieke oplossingen met de shooting methode is een goede beginschatting voor de shooting parametervector. De toestand van het systeem op tijdstip $t = 0$ in het geval van een periodieke oplossing dient dus ongeveer bekend te zijn. Bij het parameterschatten wordt gebruik gemaakt van gemeten uitgangen van het werkelijke systeem. Uit deze gemeten uitgangen kan een redelijke beginschatting voor de shooting parametervector afgeleid worden.

Het shooting algoritme is zodanig in het schattingsprogramma geïmplementeerd dat het het hele tijdsdiscretisatie algoritme kan vervangen. Voor systemen waarbij de periodieke oplossing moeilijk of niet berekend kan worden met het tijdsdiscretisatie algoritme, kan het shooting algoritme gebruikt worden. Het nadeel van het gebruik van het shooting algoritme is de grote rekestijd. Om de rekestijd voor een hele schatting enigzins te beperken, kan gedeeltelijk gebruik gemaakt worden van het shooting algoritme. Zo zou men bijvoorbeeld de periodieke oplossing berekend met de shooting methode kunnen gebruiken als beginschatting voor de berekening van de periodieke oplossing met de tijdsdiscretisatie methode en vervolgens alleen de tijdsdiscretisatie methode in het schattingsproces gebruiken. Er zijn zo meerdere combinaties van de methoden denkbaar die het rekenproces voor een bepaald probleem zouden kunnen versnellen.

Literatuur

- Crosbie, R. E., Hay, J. L. (1971). 'Variable steplength integration routines', *Simulation*, Vol. 17, pp. 206-212.
- Fey, R. H. B. (1992). *Steady-state behaviour of reduced dynamic systems with local nonlinearities*, Proefschrift TU Eindhoven. ISBN 90-9004680-1.
- Gay, D. (1976). *On modifying singular values to solve possibly singular systems of nonlinear equations*. Working paper 125, Computer Research Centre, National Bureau for Economic and Management Science, Cambridge, Mass.
- Gladwel, I. (1979). 'The development of the boundary value problem codes in the ordinary differential equation chapter of the NAG Fortran library', *Codes for boundary-value problems in ordinary differential equations*, Springer-Verlag, New York, ISBN 3-540-09554-3, pp. 122-143.
- Hall, G., Watt, J. M. (1976). *Modern numerical methods for ordinary differential equations*, Clarendon Press, Oxford, ISBN 0-19-853348-9.
- Jager, M. K. J. de (1991). *Chaotische dynamica en fundamentele werktuigkunde*, Afstudeerverslag TUE, WFW nr. 91.073.
- Jonge, T. W. G. de (1992). *Experimentele modelvorming van een vliegtuig-landingsgestel gebruik makend van periodieke excitatie*, Afstudeerverslag TUE, WFW nr. 92.088.
- Keller, H. B. (1968). *Numerical methods for two-point boundary value problems*, Ginn-Blaisdell, Waltham, Mass.
- Keller, H. B. (1976). *Numerical solution of two-point boundary value problems*, J. W. Arowsmith Ltd., Bristol.
- Kraker, A. de (1976). *Numeriek-experimentele analyse van dynamische systemen*, Dic-taat 4668 TUE.
- Ling, F. (1981). *Numerische Berechnung periodischer Lösungen einiger nicht linearer Schwingungssysteme*. Proefschrift, Universität Stuttgart.

Meijaard, J. P. (1991). *Dynamics of mechanical systems. Algorithms for a numerical investigation of the behaviour of non-linear discrete models*. Proefschrift, TU Delft.

NAG Fortran Library Manual, Mark 13. (1988). Ordinary differential equations chapter. ISBN 1-85206-040-9.

Osborne, M. R. (1969). 'On shooting methods for boundary value problems', *Journal of mathematical analysis and applications*, Vol. 27, pp. 417-433.

Roberts, S. M., Shipman, J. S. (1972). *Two-point boundary value problems: Shooting methods*, American Elsevier, New York, ISBN 0-444-00102-6.

Ueda, Y. (1991). 'Survey of Regular and Chaotic Phenomena in the Forced Duffing Oscillator', *Chaos, Solitons & Fractals*, Vol. 1, No. 3, pp. 199-231.

Vankan, W. J. (1992). *Bepaling van periodieke oplossingen van niet-lineaire systemen met behulp van de shooting methode*, Tussenverslag afstudeeronderzoek, TUE, WFW nr. 92.039.

Verbeek, G. (1991). *Estimation of nonlinear dynamical systems with application to landing gear*, IVO rapport, TUE, ISBN 90-5282-095-3.

Verbeek, G., de Kraker A., Campen, D. H. van (1992-1). *Parametric identification of mechanical systems by means of periodic excitation*, Rapport DAF SP, nr. 2199-5900/92-249/TS

Verbeek, G. (1992-2). *Modeling overleg*.

Specifieke literatuur

Borthwick, W. K. D. (1984). 'The numerical solution of discontinuous structural systems', *Second international conference on recent advances in structural dynamics*, pp. 307-316.

Braekhus, J., Aasen, J. O. (1981). 'Experiments with direct integration algorithms for ordinary differential equations in structural dynamics', *Computers and structures*, Vol. 13, pp. 91-96.

Campen, D. H. van (1989). *Niet-lineaire dynamica*, Dictaat 4661 TUE.

Chai, A. S. (1970). 'Comment on the Runge-Kutta-Merson algorithm', *Simulation*, Vol. 15, pp. 89-91.

Hay, J. L., Crosbie, R. E., Chaplin, R. I. (1974). 'Integration routines for systems with discontinuities', *Computer Journal*, Vol. 17, no. 3, pp. 275-278.

Henon, M. (1982). 'On the numerical computation of Poincaré maps', *Physica*, Vol. 5D,

pp. 412-414.

Lance, G. N. (1960). *Numerical methods for high speed computers*. Iliffe and Sons, London, pp. 56-57.

Merson, R. H. (1957). *An operation method for the study of integration processes*. Weapons research establishment, Salisbury, South Australia.

Na, T. Y. (1979). *Computational mathematics in engineering boundary value problems*, Academic Press, New York, ISBN 0-12-512650-6.

O'Regan, P. G. (1970). 'Step size adjustment at discontinuities for fourth order Runge-Kutta methods', *Computer Journal*, Vol. 13, no. 4, pp. 401-404.

Parker, T. S., Chua, L. O. (1988). *Practical numerical algorithms for chaotic systems*, Springer-Verlag, New York.

Bijlage A

Shooting in de periodieke oplosser

Het algoritme voor de berekening van de periodieke oplossingen zoals dat geïmplementeerd is in het schattingsprogramma PPEP, is eveneens geïmplementeerd in een apart periodieke oplossingen programma PS. De programma's zijn zodanig opgebouwd dat de door de gebruiker gedefiniëerde invoer door beiden gebruikt kan worden. De invoer bestaat uit een aantal user routines, waarin het probleem globaal gedefiniëerd wordt door middel van de differentiaalvergelijkingen, en een datafile, waarin het probleem gespecificeerd wordt en de berekening gestuurd kan worden.

In PS worden in de user routines de differentiaalvergelijkingen en de afgeleiden daarvan naar de verplaatsingen, snelheden en versnellingen ingevoerd volgens:

$$\mathbf{g} = \mathbf{g}(\mathbf{u}, \mathbf{ud}, \mathbf{udd}, t, \boldsymbol{\theta}) \quad (\text{A.1})$$

$$\mathbf{g}_{,\mathbf{u}} = G_{\mathbf{u}}(\mathbf{u}, \mathbf{ud}, \mathbf{udd}, t, \boldsymbol{\theta}) \quad (\text{A.2})$$

$$\mathbf{g}_{,\mathbf{ud}} = G_{\mathbf{ud}}(\mathbf{u}, \mathbf{ud}, \mathbf{udd}, t, \boldsymbol{\theta}) \quad (\text{A.3})$$

$$\mathbf{g}_{,\mathbf{udd}} = G_{\mathbf{udd}}(\mathbf{u}, \mathbf{ud}, \mathbf{udd}, t, \boldsymbol{\theta}) \quad (\text{A.4})$$

\mathbf{u} , \mathbf{ud} en \mathbf{udd} stellen hier vectoren met respectievelijk de verplaatsingen, snelheden en versnellingen in de vrijheidsgraden voor. $\boldsymbol{\theta}$ is een vector met mathematische parameters, die in PPEP geschat kunnen worden. In PS dient de gebruiker waarden aan de parameters toe te kennen. \mathbf{g} is een stelsel gekoppelde, niet-lineaire differentiaalvergelijkingen (bewegingsvergelijkingen) en kan gesplitst worden in n_2 tweede orde en n_1 eerste orde differentiaalvergelijkingen volgens:

$$\mathbf{g} = \begin{bmatrix} \mathbf{g}_2 \\ \mathbf{g}_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{g}_2(\mathbf{u}, \mathbf{ud}, \mathbf{udd}, t, \boldsymbol{\theta}) \\ \mathbf{g}_1(\mathbf{u}, \mathbf{ud}, t, \boldsymbol{\theta}) \end{bmatrix} \quad (\text{A.5})$$

met:

\mathbf{g}_2 : stelsel n_2 tweede orde differentiaalvergelijkingen

\mathbf{g}_1 : stelsel n_1 eerste orde differentiaalvergelijkingen

Voor het totale aantal graden van vrijheid geldt: $ndof = n_2 + n_1$. De afgeleiden $\mathbf{g}_{,\mathbf{u}}$, $\mathbf{g}_{,\mathbf{ud}}$ en $\mathbf{g}_{,\mathbf{udd}}$ die ook door de gebruiker ingevoerd worden, zijn nodig voor de berekening van

de periodieke oplossing met de tijdsdiscretisatie methode. Bij gebruik van de shooting methode is enkel het stelsel differentiaalvergelijkingen \mathbf{g} voldoende om de periodieke oplossing te berekenen.

Voor de excitatie kan eveneens een analytische functie ingevoerd worden:

$$\mathbf{g}_f = \mathbf{g}_f(t, \boldsymbol{\theta}_f) \quad (\text{A.6})$$

$\boldsymbol{\theta}_f$ is een vector met excitatie parameters. Ook \mathbf{g}_f is weer een stelsel vergelijkingen dat gesplitst kan worden in n_2 vergelijkingen behorende bij de tweede orde differentiaalvergelijkingen en n_1 vergelijkingen behorende bij de n_1 eerste orde differentiaalvergelijkingen:

$$\mathbf{g}_f = \begin{bmatrix} \mathbf{g}_{f_2}(t, \boldsymbol{\theta}_f) \\ \mathbf{g}_{f_1}(t, \boldsymbol{\theta}_f) \end{bmatrix} \quad (\text{A.7})$$

Ook bestaat de mogelijkheid om in plaats van deze analytische uitdrukking een gemeten signaal als rechterlid te gebruiken.

Om de invoer van de parameterwaarden te vereenvoudigen dient ook een routine geschreven te worden waarin fysische parameters, zoals massa's, dempings- en veerfactoren etc. worden geconverteerd naar de mathematische parameters:

$$\boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta}(\boldsymbol{\theta}_{ph}) \quad (\text{A.8})$$

Al deze vergelijkingen worden met het programma meegecompileerd en in de datafile kan het probleem vervolgens gespecificeerd worden. De waarden van de fysische parameters, het aantal graden van vrijheid van het beschouwde probleem, een beginschatting voor de oplossing, convergentiecriteria en de oplosmethode worden hier ingevoerd.

De periodieke oplossing wordt berekend door het stelsel

$$\mathbf{g}(\mathbf{u}, \mathbf{ud}, \mathbf{udd}, t, \boldsymbol{\theta}) = \mathbf{g}_f \quad (\text{A.9})$$

op te lossen. Als gekozen wordt voor de shooting methode als oplostechiek, dan wordt evenals bij de tijdsdiscretisatie methode, de invoer gebruikt zoals die hierboven beschreven is, ondanks dat het shooting algoritme gebruik maakt van de toestandsbeschrijving. De differentiaalvergelijkingen worden intern getransformeerd naar een toestandsvorm. Als toestanden worden genomen de verplaatsingen in alle vrijheidsgraden, $\mathbf{u} = [\mathbf{u}_2^T \ \mathbf{u}_1^T]^T$, en de snelheden \mathbf{ud}_2 in de n_2 vrijheidsgraden waarvan ook tweede orde termen in de differentiaalvergelijkingen voorkomen. De toestandsvector wordt vervolgens genoteerd volgens:

$$\mathbf{s} = [\mathbf{s}_1^T \ \mathbf{s}_2^T \ \mathbf{s}_3^T]^T = [\mathbf{u}_2^T \ \mathbf{ud}_2^T \ \mathbf{u}_1^T]^T \quad (\text{A.10})$$

Het stelsel toestandsvergelijkingen (zie 3.3) wordt afgeleid uit de differentiaalvergelijkingen \mathbf{g} en de excitatie \mathbf{g}_f . Hiertoe worden de n_2 tweede orde termen (\mathbf{udd}_2) in \mathbf{g}_2 en de n_1 eerste orde termen (\mathbf{ud}_1) in \mathbf{g}_1 nul gemaakt in de aanroep van de user routine met de differentiaalvergelijkingen. Ter berekening van de tweede orde termen wordt de bijdrage

van de overige termen afgetrokken van de excitatie en het verschil wordt gedeeld door de eventueel in de tweede orde termen voorkomende parameters:

$$udd_i = \frac{g_{f_2 i} - g_{2i}(\mathbf{u}, \mathbf{ud}, \mathbf{0}, t, \boldsymbol{\theta})}{\theta_{mi}} \quad (\text{A.11})$$

waarin θ_{mi} de eventuele parameter in de tweede orde term van vrijheidsgraad i is. Voorwaarde voor deze procedure is dat de tweede orde termen geïsoleerd, eventueel in combinatie met parameters, voorkomen in de differentiaalvergelijkingen, zodat zij expliciet in de overige termen zijn uit te drukken. Voor de berekening van de n_1 eerste orde termen geldt een soortgelijke procedure:

$$ud_i = g_{f_1 i} - g_{1i}(\mathbf{u}, \mathbf{0}, t, \boldsymbol{\theta}) \quad (\text{A.12})$$

Het stelsel toestandsvergelijkingen kan nu als volgt genoteerd worden ($\dot{\cdot} \equiv \frac{d}{dt}$):

$$\dot{\mathbf{s}} = \begin{bmatrix} \mathbf{ud}_2 \\ \mathbf{udd}_2 \\ \mathbf{ud}_1 \end{bmatrix} = \mathbf{h}(\mathbf{s}) = \begin{bmatrix} \mathbf{s}_2 \\ M^{-1}(\mathbf{g}_{f_2} - \mathbf{g}_2) \\ \mathbf{g}_{f_1} - \mathbf{g}_1 \end{bmatrix} \quad (\text{A.13})$$

De hierin voorkomende massamatrix M is een vierkante diagonaalmatrix met dimensie n_2 . Het diagonaalelement op de i^e rij bevat de massaparameter in de i^e graad van vrijheid, θ_{mi} , of is gelijk aan 1 als er in de i^e graad van vrijheid geen parameter in de massaterm voorkomt.

Bijlage B

Shooting in het schattingsprogramma

Evenals in de periodieke oplossing PS is in het schattingsprogramma PPEP één enkele invoer geschikt voor gebruik van zowel de tijdsdiscretisatie methode als de shooting methode. Ook hier bestaat de invoer weer uit een aantal user routines en een datafile. Behalve de differentiaalvergelijkingen wordt hier ook een stelsel uitgangsvergelijkingen gedefinieerd. Naast deze uitgangsvergelijkingen worden ook weer de afgeleiden ervan naar de verplaatsingen, snelheden en versnellingen ingevoerd:

$$\mathbf{f} = \mathbf{f}(\mathbf{u}, \mathbf{u}_d, \mathbf{u}_{dd}, t, \boldsymbol{\theta}) \quad (\text{B.1})$$

$$\mathbf{f}_{,\mathbf{u}} = F_{\mathbf{u}}(\mathbf{u}, \mathbf{u}_d, \mathbf{u}_{dd}, t, \boldsymbol{\theta}) \quad (\text{B.2})$$

$$\mathbf{f}_{,\mathbf{u}_d} = F_{\mathbf{u}_d}(\mathbf{u}, \mathbf{u}_d, \mathbf{u}_{dd}, t, \boldsymbol{\theta}) \quad (\text{B.3})$$

$$\mathbf{f}_{,\mathbf{u}_{dd}} = F_{\mathbf{u}_{dd}}(\mathbf{u}, \mathbf{u}_d, \mathbf{u}_{dd}, t, \boldsymbol{\theta}) \quad (\text{B.4})$$

Deze afgeleide-informatie is namelijk nodig om de in het schattingsproces gebruikte afgeleiden van de uitgangen naar de parameters te kunnen berekenen. Voor de berekening van deze afgeleiden zijn bovendien de afgeleiden van de differentiaalvergelijkingen en de uitgangsvergelijkingen naar de parameters nodig, die eveneens analytisch uitgedrukt kunnen worden. Deze afgeleiden worden ook in user routines geprogrammeerd volgens:

$$\mathbf{g}_{,\boldsymbol{\theta}} = G_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{u}, \mathbf{u}_d, \mathbf{u}_{dd}, t, \boldsymbol{\theta}) \quad (\text{B.5})$$

$$\mathbf{f}_{,\boldsymbol{\theta}} = F_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{u}, \mathbf{u}_d, \mathbf{u}_{dd}, t, \boldsymbol{\theta}) \quad (\text{B.6})$$

Met deze afgeleide-informatie worden de afgeleiden van de uitgangen naar de parameters berekend zoals in hoofdstuk 5 staat beschreven. Bij gebruik van de shooting methode wordt de afgeleide van de toestanden naar de parameters berekend met behulp van de gevoeligheidsvergelijkingen (5.15):

$$\left(\frac{\partial \mathbf{s}}{\partial \boldsymbol{\theta}}\right) = \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \mathbf{s}} \frac{\partial \mathbf{s}}{\partial \boldsymbol{\theta}} + \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \boldsymbol{\theta}} \quad (\text{B.7})$$

De hier gebruikte afgeleiden $\frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \mathbf{s}}$ en $\frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \boldsymbol{\theta}}$ kunnen met behulp van de door de gebruiker ingevoerde afgeleiden van de differentiaalvergelijkingen naar de verplaatsingen, snelheden en parameters berekend worden. Voor $\frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \mathbf{s}}$ geldt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \mathbf{s}} &= \begin{bmatrix} \dot{\mathbf{s}}_{1,s} \\ (M^{-1}(\mathbf{g}_{f_2} - \mathbf{g}_2))_{,s} \\ (\mathbf{g}_{f_1} - \mathbf{g}_1)_{,s} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{s}_{2,s} \\ -M^{-1}\mathbf{g}_{2,s} \\ -\mathbf{g}_{1,s} \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} 0 & I & 0 \\ -M^{-1}\mathbf{g}_{2,u_2} & -M^{-1}\mathbf{g}_{2,ud_2} & -M^{-1}\mathbf{g}_{2,u_1} \\ -\mathbf{g}_{1,u_2} & -\mathbf{g}_{1,ud_2} & -\mathbf{g}_{1,u_1} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

waarin \mathbf{g}_{2,u_2} , \mathbf{g}_{2,u_1} , \mathbf{g}_{1,u_2} , en \mathbf{g}_{1,u_1} direct geselecteerd kunnen worden uit $\mathbf{g}_{,u}$. De afgeleiden \mathbf{g}_{2,ud_2} , en \mathbf{g}_{1,ud_2} kunnen geselecteerd worden uit $\mathbf{g}_{,ud}$.

Voor $\frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \boldsymbol{\theta}}$ geldt:

$$\frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \boldsymbol{\theta}} = \begin{bmatrix} \dot{\mathbf{s}}_{1,\theta} \\ (M^{-1}(\mathbf{g}_{f_2} - \mathbf{g}_2))_{,\theta} \\ (\mathbf{g}_{f_1} - \mathbf{g}_1)_{,\theta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -M^{-1}\mathbf{g}_{2,\theta} + m_{,\theta}(\mathbf{g}_{f_2} - \mathbf{g}_2) \\ -\mathbf{g}_{1,\theta} \end{bmatrix} \quad (\text{B.9})$$

waarin m een vector is met de diagonaalelementen van M^{-1} . De afgeleiden $\mathbf{g}_{2,\theta}$ en $\mathbf{g}_{1,\theta}$ kunnen weer direct geselecteerd worden uit de door de gebruiker ingevoerde $\mathbf{g}_{,\theta}$.

In de aanroepen van de user routines ter berekening van $\mathbf{g}_{,u}$, $\mathbf{g}_{,ud}$ en $\mathbf{g}_{,\theta}$ worden \mathbf{udd}_2 en \mathbf{ud}_1 wederom nul gemaakt. Het uitgangspunt was immers dat \mathbf{udd}_2 en \mathbf{ud}_1 geïsoleerd voorkomen en er dus geen koppeltermen van \mathbf{udd}_2 of \mathbf{ud}_1 met \mathbf{u} of \mathbf{ud}_2 zijn, zodat \mathbf{udd}_2 en \mathbf{ud}_1 niet in de uitdrukkingen voor deze afgeleiden voorkomen.

Een laatste beperking die het gebruik van de shooting methode met zich meebrengt, is dat er in de uitgangsvergelijkingen \mathbf{f} geen termen met \mathbf{udd}_2 en \mathbf{ud}_1 mogen voorkomen. De uitgangen moeten immers expliciet als functie van de toestanden geschreven worden en in de toestand zijn \mathbf{udd}_2 en \mathbf{ud}_1 niet opgenomen. Als de shooting methode gebruikt wordt, worden in de aanroep van de routine met de uitgangsvergelijkingen deze termen weer nul gemaakt. De gebruiker dient zelf in acht te nemen of de uitgangen navenant geformuleerd zijn.