

多体系统 Euler-Lagrange 方程组 的一类新数值分析方法^{*}

杨东武 段宝岩 狄杰建

(西安电子科技大学 西安 710071)

摘要: 针对受完整约束的多体系统, 首先指出其动力学 Euler-Lagrange 方程组是高指标(index > 2)的微分代数方程组; 不同于传统的直接增广法和直接消去法, 文中提出了一类将微分代数方程直接视为非线性代数方程组求解的新的数值分析方法; 最后, 以典型的单摆模型为例给出了新算法与其他方法的比较, 结果表明新算法优于 BDF 方法及违约修正方法。

关键词: 多体系统动力学; 微分-代数方程; 微分指标

中图分类号: O313.7 **文献标识码:** A

1 引言

近年来国内外对微分代数方程的数值积分方法研究较多, 较为成熟的数值方法有 BDF 方法^[1] 和 Runge-Kutta 方法^[2,3]。这些方法主要用于求解低指标问题, 对于高指标微分代数方程, 如多体系统动力学中的 Euler-Lagrange 方程, 其求解方法的研究主要集中在 Euler-Lagrange 方程的数值积分方法的设计、系统相关约束的处理及约束违约修正等问题上^[4], 其数值方法宏观上可分为: 不完全增广法或称简单的直接增广方法、直接消去法、完全增广方法、罚函数方法等。其中, 直接增广法以系统动力学方程与加速度级的约束方程为算法设计的出发点, 简便易用, 但是, 该方法导致位移和速度级约束方程的违约; 直接消去法以系统约束流形上的常微分方程为出发点, 其核心工作是在积分的每一步确定出约束空间, 即约束方程 Jacobian 矩阵零空间中的一组独立基矢量, 从而选择在这组基上的分量作为独立坐标进行数值积分, 这种方法尽管数值稳定性较好, 但是其计算效率较低, 而且编程较为复杂, 不易于实现。鉴于此, 针对多体系统动力学 Euler-La-

grange 方程, 本文提出了一种新的求解微分代数方程的数值分析方法。新算法将微分代数方程组视为非线性代数方程组来求解, 思路清晰, 易于编程, 且数值求解精度较高。文末, 以典型的单摆模型(index = 3) 为例给出了新算法的数值结果, 并与文献[5] 中的约束误差小扰动自我稳定方法及较为通用的求解低指标问题的 BDF 方法进行了比较。

2 微分代数方程组的基本概念

定义 1

对于一阶微分系统

$$F(x(t), x(t), t) = 0 \quad (1)$$

其中 $F \in R^m$, $x(t) \in R^m$, $x(t) \in R^m$ 。如果 F_x 非奇异, 则式(1) 可等价于

$$\dot{x}(t) = f(x(t), t) \quad (2)$$

称式(1) 为隐式 ODE 系统, 而式(2) 为显式 ODE 系统。如果 F_x 奇异, 则称式(1) 为 DAE 系统。

定义 2^[6]

对于线性 DAE 系统

* 基金项目: 总装备部预研项目(41321070301) 来稿日期: 2004-04-12 修回日期: 2004-10-22

第一作者简介: 杨东武, 男, 1978 年生, 博士生, 西安电子科技大学机电工程学院; 研究方向: 多柔体系统动力学。

$$Ax(t) + Bx(t) = q(t) \quad (3)$$

将该方程组或其部分方程对时间 t 求导, 以便将该系统化式(2)的形式, 其中所需的最小的求导次数 k 称为该 DAE 系统的指标数。

考虑受完整约束多体系统动力学方程 (DAEs)^[7]

$$M(q)\ddot{q} + G_q^T(q, t)\lambda = F(q, q, t) \quad (4a)$$

$$G(q, t) = 0 \quad (4b)$$

其中: t 为时间, $M \in R^{n \times n}$ 为系统广义质量矩阵; $q \in R^n$ 为系统广义坐标向量; $\lambda \in R^m$ 为 Lagrange 乘子向量; $G \in R^m$ 是由 m 个约束函数构成的向量; $G_q = \partial G / \partial q$ 为 G 关于 q 的 Jacobian 矩阵; $F(q, q, t)$ 为系统广义力向量。方程组(4) 称为多体系统动力学第二类数学模型或 Euler-Lagrange 方程组。一般情况下, 系统方程中不显含时间, 且系统质量矩阵 M 正定, 于是式(4) 可化为如下形式

$$\begin{cases} q = v = f_1(v) \end{cases} \quad (5a)$$

$$\begin{cases} v = M^{-1}(q)[F(q, v) - G_q^T(q)\lambda] = f_2(v, q, \lambda) \end{cases} \quad (5b)$$

$$\begin{cases} 0 = G(q) \end{cases} \quad (5c)$$

进一步, 结合上式中的变量关系可得到如下微分关系式

$$G_q(q)v = G_q(q)f_1(v) = h(q, v) = 0 \quad (6)$$

$$h_q(q, v)v + h_v(q, v)v =$$

$$h_q(q, v)f_1(v) + h_v(q, v)f_2(v, q, \lambda) =$$

$$h(q, v, \lambda) = 0 \quad (7)$$

$$h_q(q, v, \lambda)q + h_v(q, v, \lambda)v + h_\lambda(q, v, \lambda)\lambda = 0 \quad (8)$$

注意到, 当系统的约束方程中不存在相关约束时, 式(8) 中的 $h_\lambda(q, v, \lambda)$ 通常为非奇异矩阵, 因此, 式(4) 可最终转化为如下形式

$$\begin{cases} q = v = f_1(v) \end{cases} \quad (9a)$$

$$\begin{cases} v = M^{-1}(q)[F(q, v) - G_q^T(q)\lambda] = f_2(v, q, \lambda) \end{cases} \quad (9b)$$

$$\begin{cases} \lambda = -h_\lambda^{-1}(q, v, \lambda)[h_q(q, v, \lambda)q + h_v(q, v, \lambda)v] \end{cases} \quad (9c)$$

结合以上有关微分指标的定义得知, 一般情况下方程组(4) 的指标数为 3。

3 微分代数方程组的数值分析方法

为讨论方便, 总是假定式(4) 满足以下条件^[7]。

- ① G, M, F 足够光滑。
- ② M 为对称正定矩阵。
- ③ G_q 为行满秩矩阵。
- ④ 系统初值满足相容性条件。

传统的数值求解方法是式(4) 转化为纯微分

方程来求解^[4], 比如在直接增广法中

$$\ddot{q}(I \ 0) \begin{bmatrix} M & G_q^T \\ G_q & 0 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} F \\ \gamma \end{bmatrix} \quad (11)$$

其中 I 是单位矩阵, $\gamma(q, q, t) = -(G_q q) \cdot q - 2G_q q - G_n$ 。而在直接消去法中, 则首先要要求出 G_q 零空间中的一组基 V , 然后有

$$\ddot{q} = \begin{bmatrix} V^T M \\ G_q \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} V^T F \\ \gamma \end{bmatrix} \quad (12)$$

很显然, 直接增广法与直接消去法都是用加速度级的约束条件

$$\ddot{G} = G_q \ddot{q} + (G_q q) \cdot q + 2G_q q + G_n \quad (13)$$

代替位移(完整) 约束条件式(4b), 并与式(4a) 联立而生成的数值方法。这种思路, 在理论上得到了与原动力学控制方程组(4) 同解的方程(11) 或式(12), 但在数值求解过程中, 由于误差干扰, 它们不可能同解, 于是人们提出了各种违约修正方法^[4], 如文献[5] 中的约束误差小扰动自我稳定方法就是其中的一例。但一般的违约修正方法无疑会影响原动力学方程的平衡性, 从而使所求得系统响应偏离真实值; 利用零空间方法求解时, 违约修正及积分方法的设计又过于复杂, 不易于实现。

实际上不妨直接考虑系统在每一步积分当中的已知条件及求解目标, 即在时间 $t_n = t_0 + nh$ 时, 假设相应的 $q_k, \dot{q}_k$ 和 $\lambda_k (k \leq n)$ 为已知条件, 需要计算下一时刻 t_{n+1} 对应的状态变量 $q_{n+1}, \dot{q}_{n+1}$ 和 λ_{n+1} 。注意到在以上的初值条件式(10) 下, 微分/代数方程(4) 的解唯一^[7], 同时, 对于给定的 λ_{n+1}^* , 式(4a) 变为普通的纯微分方程, 若数值积分方法及积分步长 h 给定, 则通过积分可以得到下一时刻的状态变量 $q_{n+1}^*, \dot{q}_{n+1}^*$ 值, 换句话说, 可以把 $q_{n+1}^*, \dot{q}_{n+1}^*$ 看作是 λ_{n+1}^* 的函数, 即就是

$$q_{n+1}^* = \Psi(\lambda_{n+1}^*) \quad (14)$$

$$\dot{q}_{n+1}^* = \Phi(\lambda_{n+1}^*) \quad (15)$$

考虑到约束函数 $G(q, t)$ 又是 q_{n+1}^* 的函数, 再式(14) 代入式(4b) 便有

$$G^* = G(q_{n+1}^*, t_{n+1}) = G(\Psi(\lambda_{n+1}^*), t_{n+1}) = 0 \quad (16)$$

考虑到 t_{n+1} 此时为常量, 因此, 上式又可记为

$$G^* = G(\lambda_{n+1}^*) = 0 \quad (17)$$

式(17) 表明完整约束式(4b) 实际上仅仅是 λ_{n+1}^* 的隐函数, 因此, 求解微分代数方程(4) 的过程实际上就是求解非线性方程组

$$G(\lambda_{n+1}^*) = 0 \quad (18)$$

的过程。方程组(18) 的解则正是所求的对应于 t_{n+1} 时刻的拉格朗日乘子 λ_{n+1}^* 的值。结合求解非线性方

程组的拟 Newton 迭代法可构造求解形如式(4) 的微分代数方程组的新算法如下

取计算步长为 h , 设当前状态为 $t = t_n, \mathbf{q} = \mathbf{q}_n, \dot{\mathbf{q}} = \dot{\mathbf{q}}_n$ 和 $\lambda = \lambda_n$, 如果仅对微分代数方程积分一步, 则其求解步骤如下。

步骤 1: 利用求解非线性方程组的较为常用的 B-F-S (Broyden-Fletcher-Shanno) 秩 2 算法求 λ_{n+1} , 具体迭代公式如下^[8]

$$\begin{aligned}\lambda^{(k+1)}_{n+1} &= \lambda^{(k)}_{n+1} - \mathbf{B}_k \mathbf{G}(\lambda^{(k)}_{n+1}), \\ \mathbf{p}_k &= \lambda^{(k+1)}_{n+1} - \lambda^{(k)}_{n+1}, \\ \mathbf{q}^k &= \mathbf{G}(\lambda^{(k+1)}_{n+1}) - \mathbf{G}(\lambda^{(k)}_{n+1}) \\ \mu_k &= 1 + \frac{\mathbf{q}^{kT} \mathbf{B}_k \mathbf{q}^k}{\mathbf{p}_k^T \mathbf{q}^k}, \\ \mathbf{B}_{k+1} &= \mathbf{B}_k + \frac{\mu_k \mathbf{p}_k \mathbf{p}_k^T - \mathbf{B}_k \mathbf{q}^k \mathbf{p}_k^T - \mathbf{p}_k \mathbf{q}^{kT} \mathbf{B}_k}{\mathbf{p}_k^T \mathbf{q}^k}\end{aligned}\quad (19)$$

其中, $\lambda^{(0)}_{n+1} = \lambda_n, \mathbf{B}_0$ 可通过以下方法求取: 首先取 $\mathbf{B}^{(1)} = \mathbf{I}, \lambda^{(1)} = \lambda_n, \mathbf{p}^{(j)} = \lambda^{(j+1)} - \lambda^{(j)} = \delta \mathbf{e}_j, \delta$ 为较小的实数, $j = 1, 2, \dots, m$. 按以下过程产生 $\mathbf{B}_0$

$$\begin{aligned}\mathbf{q}^{(j)} &= \mathbf{G}(\lambda^{(j+1)}) - \mathbf{G}(\lambda^{(j)}), \\ \mu^{(j)} &= 1 + \frac{\mathbf{q}^{(j)T} \mathbf{B}^{(j)} \mathbf{q}^{(j)}}{\mathbf{p}^{(j)T} \mathbf{q}^{(j)}}, \\ \mathbf{B}^{(j+1)} &= \mathbf{B}^{(j)} + \\ &\frac{\mu^{(j)} \mathbf{p}^{(j)} \mathbf{p}^{(j)T} - \mathbf{B}^{(j)} \mathbf{q}^{(j)} \mathbf{p}^{(j)T} - \mathbf{p}^{(j)} \mathbf{q}^{(j)T} \mathbf{B}^{(j)}}{\mathbf{p}^{(j)T} \mathbf{q}^{(j)}}, \\ (j &= 1, 2, \dots, m)\end{aligned}\quad (20)$$

当 $j = m$ 时, 令 $\mathbf{B}_0 = \mathbf{B}^{(m+1)}$, 这时 $\mathbf{B}_0$ 即为非线性方程组的雅可比矩阵的逆矩阵 $D\mathbf{G}(\lambda_n)^{-1}$ 的近似。

步骤 2: 将步骤 1 中所得到的 λ_{n+1} 代入式(4a), 则可得到以下方程

$$\ddot{\mathbf{q}} = \mathbf{F}(\mathbf{q}, \mathbf{q}) \quad (21)$$

其中

$$\mathbf{F}(\mathbf{q}, \mathbf{q}) = \mathbf{M}^{-1}(\mathbf{F}(\mathbf{q}, \mathbf{q}, t_{n+1}) - \mathbf{G}_q^T \lambda_{n+1}) \quad (22)$$

方程的初值条件为

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}_n, \quad \dot{\mathbf{q}} = \dot{\mathbf{q}}_n \quad (23)$$

微分方程式(21) 降阶后, 采用通用的数值积分方法求解即可得到 $\mathbf{q}_{n+1}, \dot{\mathbf{q}}_{n+1}$. 至此, 便实现了对方程式(4) 积分一步。值得注意的是: 第一, 步骤 2 实际上是求解步骤 1 中 $\mathbf{G}(\lambda_{n+1}^k)$ 的过程的一部分, 在实际编程中, 考虑到步骤 1 迭代结束时 $\mathbf{q}_{n+1}^*, \dot{\mathbf{q}}_{n+1}^*$ 恰好就是所要求的 $\mathbf{q}_{n+1}, \dot{\mathbf{q}}_{n+1}$, 步骤 2 可以省略; 第二, 以上求解非线性方程组的过程可以看作是一个最优化过程, 即寻求 $\min(|\mathbf{G}(\lambda_{n+1})|)$ 在 λ_n 附近的最优解, 同时, 求解微分方程式(21) 的积分方法可以根据微分方程的性质决定, 如果是刚性微分方程组, 则应该选

取求解刚性方程组较为有效的积分方法, 因此, 以上所提出的新算法实际上是一类方法体, 而本文给出的算法也只是其中的一例。

4 数值算例

测试一个微分代数系统算法的好坏, 有一个较流行的标准就是用这个算法去解指标为 3 的单摆模型, 其 Euler-Lagrange 动力学控制方程如下

$$\begin{bmatrix} m & 0 \\ 0 & m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ddot{x} \\ \ddot{y} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 2x \\ 2y \end{bmatrix} \lambda = \begin{bmatrix} 0 \\ -mg \end{bmatrix} \quad (24a)$$

$$x^2 + y^2 - l^2 = 0 \quad (24b)$$

该模型为 Fortran Powerstation 4.0 中库函数 DASPG/DDASPG (Single/Double precision) 的一个示例模型。显然, 该模型满足讨论式(4) 时的假设条件。由库函数的算法说明可知, DASPG/DDASPG 采用了较为成熟的 Pelzold-Gear BDF 方法编写。为方便结果比较, 系统参数及初值条件仍然与该示例中相同, 即

单摆质量 $m = 44.452050 \text{ kg}$; 时间 $t_0 = 0$; 质心位移, $x(0) = 1.98120 \text{ m}, y(0) = 0 \text{ m}$; 质心速度 $\dot{x}(0) = 0, \dot{y}(0) = 0$ 。

在以上初值条件下, 针对微分代数系统式(24), 下面采用以下三种算法分别对其进行数值仿真并将仿真结果进行比较。

1) BDF 方法

考虑到函数 DASPG/DDASPG 只能求解指标 0 或 1 问题, 必须降低系统的指标。为此, 将完整约束式(24b) 微分两次后并结合(24a) 改写成如下形式

$$m(x^2 + y^2) - mgy - 2l^2 \lambda = 0 \quad (25)$$

联立式(24a) 与式(25), 并令 $y_1 = x, y_2 = y, y_3 = \lambda$ 得到

$$\left. \begin{aligned} g_1 &= y_3 - y_1 = 0 \\ g_2 &= y_4 - y_2 = 0 \\ g_3 &= -2y_1 y_5 - m y_3 = 0 \\ g_4 &= -2y_2 y_5 - mg - m y_4 = 0 \\ g_5 &= m(y_3^2 + y_4^2) - mgy_2 - 2l^2 y_5 = 0 \end{aligned} \right\} \quad (26)$$

微分代数系统式(26) 指标为 1, 且与式(24) 完全等价, 可用函数 DDASPG 直接求解。

2) 约束误差小扰动自我稳定方法(违约修正法)

根据文献[5], 通过对完整约束式(24b) 微分及求偏导后容易得到自我稳定的系统方程式

$$\begin{bmatrix} m & 0 & 2x \\ 0 & m & 2y \\ 2x & 2y & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ddot{x} \\ \ddot{y} \\ \ddot{\lambda} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -mg \\ y \end{bmatrix} \quad (27)$$

$$\begin{aligned} \ddot{y} = & -2(x^2 + y^2) - (4/h)(xx + yy) - \\ & (2/h^2)(x^2 + y^2 - l^2) \end{aligned} \quad (28)$$

注意到式(21) 与以下方程等价

$$\begin{pmatrix} \ddot{x} \\ \ddot{y} \end{pmatrix} = [I \ 0] \begin{bmatrix} m & 0 & 2x \\ 0 & m & 2y \\ 2x & 2y & 0 \end{bmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ -mg \\ y \end{pmatrix} \quad (29)$$

对式(29) 降阶后直接应用 Runge-Kutta 法便可求解出系统的响应。

3) 新算法

如前所述, 不需要对式(24) 中的微分代数系统作任何处理即可应用新算法(此处的数值积分方法选取四阶龙格库塔法) 对其进行数值仿真。

取步长 $h = 0.01$, 以上三种算法所得到的系统响应及误差比较情况如图 1 ~ 图 4 所示。

为简便起见, 文中给出的只是系统中部分变量的响应曲线或其局部放大图。不难看出, 三种算法所得到的结果基本一致(见图 1), 但违约修正法(或称误差小扰动自我稳定方法) 与新算法及 BDF 方法相比, 违约程度最大(见图 4), 且其仿真结果与其他两种方法相比有所失真。另外, 新算法中的约束违约不随系统的动力学特性而浮动(见图 4), 而且违约程度最小, 因此, 新算法优于其他两种方法。

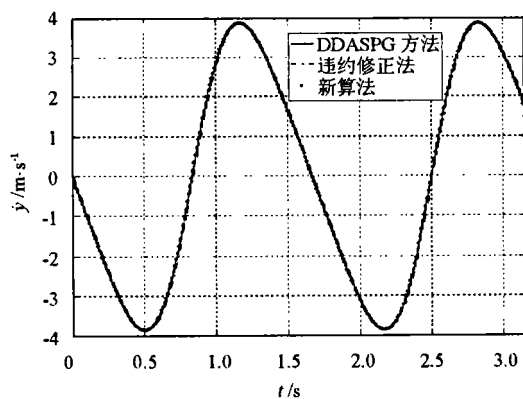


图 1 速度的响应曲线

5 结 束 语

1) 针对多体系统动力学 Euler-Lagrange 方程形式, 本文提出了一类不需要考虑系统指标的处理微分代数方程组的数值分析方法, 在多体系统动力学分析当中, 新算法要比 BDF 方法及约束稳定方法更易于使用。

2) 新算法的求解精度要比 BDF 方法及约束违约

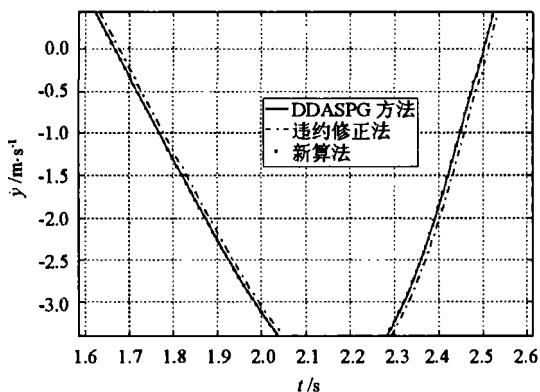


图 2 速度响应的局部放大图

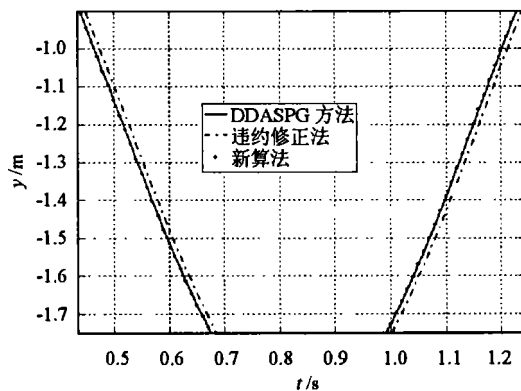


图 3 位移响应的局部放大图

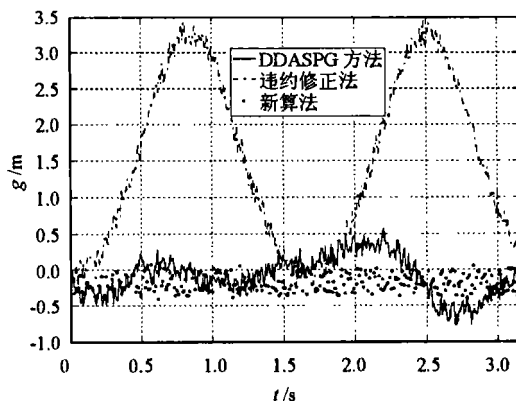


图 4 完整约束违约情况

修正方法好。

3) 本文方法亦适用于受非完整约束的微分代数系统的数值分析。

参 考 文 献

- [1] Gear C W, Petzold L. ODE methods for the solution of differential/algebraic systems[J]. SIAM Journal on Numerical Analysis, 1984, 21: 716-728.

- [2] Gear C W. Differential+algebraic equations, indices and integral algebraic equations[J]. SIAM Journal on Numerical Analysis, 1990, 27: 984-996.
- [3] Hairer E, Lubich C, Roche M. The Numerical Solution of Differential+ Algebraic Systems by Runge-Kutta Methods[M]. Springer-Verlag, 1989: 323-334.
- [4] 赵维加, 潘振宽. 多体系统 Euler-Lagrange 方程的最小二乘法与违约修正[J]. 力学学报, 2002, 34(4): 594-603.
- [5] 赵维加, 潘振宽, 王艺兵. 多体系统动力学微分代数方程约束误差小扰动自我稳定方法[J]. 应用数学和力学, 2000, 21(1): 94-98.
- [6] Brenan K E, Campbell S L, Petzold L R. The numerical solution of initial value problems in ordinary Differential+ Algebraic Equations[J]. SIAM Philadelphia, 1996.
- [7] 王艺兵, 赵维加, 潘振宽. 多体系统动力学微分代数方程组的一类新的数值分析方法[J]. 应用数学和力学, 1997, 18(9): 845-852.
- [8] 蒋长锦. 科学计算和 C 程序集[M]. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 1998: 213-216.

New Algorithm for Solving Euler-Lagrange Equations of Multibody System Dynamics

Yang Dongwu Duan Baoyan Di Jiejian

(School of Electromechanical Engineering, Xidian University, Xi'an 710071, China)

Abstract: For a multibody system with holonomic constraints, the Euler-Lagrange dynamic equations of the system are characterized as a set of differential-algebraic ones with an index larger than 2, the corresponding algorithm is adopted, where the differential-algebraic equations are treated directly as a set of nonlinear algebraic equations to differ from the traditional algorithms, such as constraint regularization method and constraint reduction method. A comparative simulation for typical pendulum indicates that the proposed method outperforms BDF method and constraint stabilization method.

Key word: *multibody system dynamics, differential-algebraic equations, differential index.*

Casting Microporosity Growth Simulation in Single-Crystal Superalloys

Wan Jiansong Lv Zhenzhou Yue Zhufeng

(Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

Abstract: Finite element analysis is employed to investigate casting microporosity behavior in nickel-base single-crystal superalloys. Based on finite deformation rate-dependent crystallographic constitutive equation, the growth simulation of casting microporosity in a unit cell model is carried out within a range of parameters including deviation orientation, type of different slip systems activated. The results show that the deviation orientation exerts remarkable effects on the growth behavior and volume fraction of casting microporosity, but the shape transform of casting microporosity is slightly affected. To ensure the performing safety of the single-crystal superalloy components, it is necessary to control the deviation orientation which may lead to the obvious change of casting microporosity volume during deformation. Similarly, it is important to determine the operative slip systems type associated with Schmid Factor and loading orientation to evaluate accurately the hot spot life.

Key words: *casting microporosity, single-crystal superalloy, crystallographic constitutive equation, unit cell model.*

Investigation to Dynamic Interference on High-Rise Buildings by Integral of Instantaneous Pressure

Xing Yufan Ni Zhenhua Xie Zhuangning

(Department of Civil Engineering, Shantou University, Shantou 515063, China)

Abstract: An alternative approach to investigate the wind-induced interference on buildings was presented via measuring and integrating instantaneous wind pressures distributed on the rigid model surface in wind