

多体系统动力学微分/代数方程组数值方法*

潘振宽 赵维加

洪嘉振 刘延柱

青岛大学自动化系, 青岛 266071

上海交通大学工程力学系, 上海 200030

提要 多体系统动力学微分/代数混合方程组又称 Euler-Lagrange 方程, 是近十年来动力学和计算数学领域研究的热点之一。本文介绍这两个领域中引入的传统的数值积分方法与新的理论。

关键词 多体系统; 动力学; Euler-Lagrange 方程; 数值积分方法

1 引言

复杂系统计算机辅助分析 (CAA) 是计算机辅助工程 (CAE) 的重要环节^[1], 并日益受到国内外工程界的重视。在机械设计领域, 设计者已习惯于在生产样机前用多体软件对产品进行仿真, 分析和优化, 大大缩短了生产周期, 降低了产品成本。多体系统动力学 CAA 包括^[2]:

- a) 计算机辅助建立系统运动学与动力学数学模型;
- b) 数学模型的计算机自动分析;
- c) 数值结果的自动解释。

经过20多年的发展, 多体系统的数学模型问题已基本解决。根据系统的拓扑结构及描述系统构形所用坐标, 多体系统动力学方程可分为以下两类^[3]:

第 I 类数学模型

$$A(q, t)\ddot{q} = B(q, \dot{q}, t) \quad (1)$$

其中, A, B, q 分别为系统广义质量阵, 广义力列阵, 广义坐标矢量。该式可直接转化为如下形式的状态方程

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

其中, $y = [q^T, \dot{q}^T]^T$, $f = [\dot{q}^T(A^{-1}B)^T]^T$ 。式(2)数值积分方法的研究已很成熟, 本文不做评述。

第 II 类数学模型

$$M(q, t)\ddot{q} + \phi_q^T(q, t)\dot{\lambda} = F(q, \dot{q}, t) \quad (3a)$$

* 国家自然科学基金和山东省自然科学基金资助项目

$$\phi(q, t) = 0 \quad (3b)$$

其中, $M(q, t) \in \mathcal{R}^{n \times n}$ 为系统广义质量矩阵, $q \in \mathcal{R}^n$ 为系统广义坐标矢量, $\lambda \in \mathcal{R}^m$ 为 Lagrange 乘子矢量, $\phi(q, t): \mathcal{R}^n \times \mathcal{R} \rightarrow \mathcal{R}^m$ 为系统运动学约束方程左部, $\phi_q(q, t) \equiv \partial \phi(q, t) / \partial q$ 为 Jacobi 矩阵, $F(q, \dot{q}, t): \mathcal{R}^n \times \mathcal{R}^n \times \mathcal{R} \rightarrow \mathcal{R}^n$ 为系统广义力矢量, 包括广义外力及速度二次项.

式 (3) 又称 Euler-Lagrange 方程, 或微分/代数混合方程组 (DAES). 在本文我们做如下假设:

- 1) 式 (3) 中所有映射均 $\rho (\rho \geq 3)$ 次连续可微, 即属 C^ρ 类;
- 2) $\text{rank } \phi_q(q, t) = m, (m < n)$;
- 3) 对任意 $a \in \text{Ker } \phi_q(q, t), a^T M(q, t) a > 0$.

DAES 同一般微分方程 (ODEs) 有很大不同, 例如, 在标准假设下, ODEs 对任意初始条件有唯一解, 而 DAES 可能无解, 或只有初始条件满足某相容条件时才有相应的解. 假设式 (3) 初始条件为:

$$\begin{cases} q_0 = q(0) \\ \dot{q}_0 = \dot{q}(0) \end{cases} \quad (4a)$$

$$(4b)$$

其相应的相容条件为

$$\begin{cases} \phi(q_0, 0) = 0 \\ \phi_q(q_0, 0) \dot{q}_0 = -\phi_t(q_0, 0) \\ \lambda_0 = \lambda(q_0, \dot{q}_0, 0) \end{cases} \quad (5a)$$

$$(5b)$$

$$(5c)$$

那么只有满足 (4), (5) 的 Euler-Lagrange 方程才有唯一最大延拓解^[4].

据最近公认的分类术语^[5], Euler-Lagrange 方程为指标 3 问题, 存在求解上的困难, 以下将其降为指标 1 问题, 对 (3b) 求导后得到数值积分过程中必须满足的方程组如下:

$$M(q, t) \ddot{q} + \phi_q^T(q, t) \lambda = F(q, \dot{q}, t) \quad (6a)$$

$$\phi(q, t) = 0 \quad (6b)$$

$$\phi_q(q, t) \dot{q} = \eta \quad (6c)$$

$$\phi_q(q, t) \ddot{q} = \gamma \quad (6d)$$

其中, $\eta = -\phi_t(q, t), \gamma = -(\phi_q(q, t) \dot{q})_q \dot{q} - 2\phi_{qt}(q, t) \dot{q} - \phi_{tt}(q, t)$

式 (6) 为 $n+m$ 个变量 $n+3m$ 个方程的超定系统, (6a) 的解必须满足 (6b)~(6d) 及 (4), (5). 近十年来, 由于多体系统动力学数字仿真的需要, 动力学与数值分析领域发展了多种 Euler-Lagrange 方程组的数值积分方法, 概括起来可分为增广法与缩并法 (或消去法)^[3].

2 传统增广法

传统增广法包括直接积分法和约束稳定法^[6].

2.1 直接积分法

该方法是将 (6a), (6d) 联立在一起, 同时求出 \ddot{q} 与 λ , 然后对 \ddot{q} 积分得 \dot{q}, q_0 , 即求解

$$\begin{bmatrix} M & \phi_q^T \\ \phi_q & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ddot{q} \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F \\ \gamma \end{bmatrix} \quad (7)$$

该式为线性代数方程组，其系数矩阵非奇异，可采用 Gauss 消去法等求解。但未考虑(6b)，(6c)的违约问题，积分过程中误差积累严重，很易发散。

2.2 约束稳定法

为了避免直接法的缺陷，Baumgarte^[7]将反馈控制理论引入 Euler-Lagrange 方程数值积分方法的设计。将(6b)–(6d)写为：

$$\begin{cases} \phi(q, t) = 0 & (8a) \\ \dot{\phi}(q, t) = 0 & (8b) \\ \ddot{\phi}(q, t) = 0 & (8c) \end{cases}$$

直接积分方法仅利用(8c)，在积分过程中，由于误差积累上述三式变为：

$$\phi(q, t) = \varepsilon_1 \quad (9a)$$

$$\dot{\phi}(q, t) = \varepsilon_2 \quad (9b)$$

$$\ddot{\phi}(q, t) = \varepsilon_3 \quad (9c)$$

为了保持式(8)在积分过程中恒成立，将(8c)修改为

$$\ddot{\phi} + 2\alpha\dot{\phi} + \beta^2\phi = 0 \quad (10)$$

由于初始时满足相容条件(5)，那么当 $\alpha > 0$ 时，该式的解在每一步都趋向零，即 $\varepsilon_1 \rightarrow 0$ ， $\varepsilon_2 \rightarrow 0$ ， $\varepsilon_3 \rightarrow 0$ 。将(9)代入(10)有

$$\phi_q \ddot{q} = -2\alpha\dot{\phi} - \beta^2\phi + \gamma \equiv \gamma^* \quad (11)$$

这样约束稳定法是求解如下线性方程组

$$\begin{bmatrix} M & \phi_q^T \\ \phi_q & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ddot{q} \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F \\ \gamma^* \end{bmatrix} \quad (12)$$

显然， $\alpha = \beta = 0$ 时，(12)退化为(7)。

当 $\alpha, \beta \neq 0$ 时，修正项的引入使得数值解在精确解附近振荡，如图1。其振荡频率依赖 α, β 的选取。通常取 $\alpha, \beta = 5-50$ ，而 $\alpha = \beta$ 时达到临界误差阻尼状态，响应稳定最快。据统计，当给

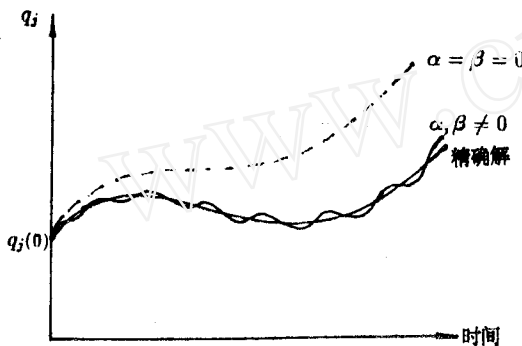


图1 约束稳定法

系统正确初始条件时，该方法稳定率为75%左右^[8]。如何选取 α, β 仍是一个值得深入研究的问题。

3 传统缩并法

由(3)知受约束系统自由度为 $p = n - m$ 。传统缩并法的基本思路是通过各种矩阵分解方法将描述系统的 n 个广义坐标用 p 个独立坐标表达，从而将式(3)从数值上化为第I类数学模型。但由于问题的强非线性耦合，该方法只能在局部实现。这些方法包括广义坐标分块法(LU分解法，Gauss消去法)，QR分解法，SVD方法，零空间方法等分别对应着Jacobi矩阵的不同分解。

3.1 广义坐标分块法^[9]

在引言假设的前提下，对解曲面上的任一点 q_0 ， $\phi_q(q_0)$ 满秩，从而它有 m 个线性无关

列。不妨设前 m 个列线性无关，把 q 做如下分块

$$q = [u^T \ v^T]^T \quad (13)$$

则 (3b) 可写为

$$\phi(u, v, t) = 0 \quad (14)$$

由于 $\phi_u(u_0, v_0, t_0)$ 非奇异，由隐函数存在定理，在 q_0 的某邻域内存在唯一连续可微函数 $\phi(v, t)$ ，使得

$$u = \phi(v, t) \quad (15)$$

满足 (3b)，即有

$$\phi(\phi(v, t), v, t) = 0 \quad (16)$$

与 (13) 同，有

$$\dot{q} = [\dot{u}^T \ \dot{v}^T]^T \quad (17a)$$

$$\ddot{q} = [\ddot{u}^T \ \ddot{v}^T]^T \quad (17b)$$

这样，(6c)，(6d) 可分别写为

$$\phi_u \dot{u} + \phi_v \dot{v} = \eta \quad (18a)$$

$$\phi_u u + \phi_v v = \gamma \quad (18b)$$

ϕ_u, ϕ_v 是通过 ϕ_q 分块得到，这些物理坐标的分块可通过 Gauss 消去法、LU 分解法实现。由式 (18) 得

$$\dot{q} = H \dot{v} + \eta' \quad (19a)$$

$$\ddot{q} = H \ddot{v} + \gamma' \quad (19b)$$

其中， $H = [(-\phi_u^{-1} \phi_v)^T \ I^T]^T$ ， $\eta' = \phi_u^{-1} \eta$ ， $\gamma' = \phi_u^{-1} \gamma$ ， ϕ_u 为 m 阶满秩方阵。将 (19b) 代入 (6a)，并用 H^T 左乘方程两边，因为

$$\phi_q H = 0 \quad (20)$$

有

$$H^T M H \ddot{v} = H^T (F - M \gamma') \quad (21)$$

由于引入独立广义坐标后自然地将表示约束反力的 Lagrange 乘子项消掉，故本方法又称消去法。 v, \dot{v}, \ddot{v} 由式 (21) 确定，而非独立变量 \dot{u}, u 由式 (19) 确定， u 通过对式 (6b) 进行 Newton-Raphson 迭代求得。设 u^* 为某时间步的迭代终值，存在 $\phi(u^*, v, t) = 0$ ，其迭代过程为

$$\phi_u(u^{(i)}, v, t) \Delta u^{(i)} = -\phi(u^{(i)}, v, t) \quad (22a)$$

$$u^{(i+1)} = u^{(i)} + \Delta u^{(i)} \quad (22b)$$

迭代结束满足条件为：

$$\|\phi(u^{(i+1)}, v, t)\| < \varepsilon \quad (22c)$$

$$u^* = u^{(i+1)} \quad (22d)$$

该方法误差可用 $\phi_u^{-1} \phi_v$ 的每行的范数控制，只要其每个元素小于 1，则 v 的误差不会传播给 u 。

3.2 QR 方法

Gould^[10]，Businger^[11] 提出的一类 QR 分解法被用于 Euler-Lagrange 方程的求解^[12]。对于 $\phi_q(q, t)$ ，存在正交矩阵 $Q_{n \times n}$ 和上三角矩阵 $R_{1(m \times m)}$ ，使得

$$\phi_q^T = Q\bar{R} \quad (23)$$

其中 $R_{n \times m} = [R_1^T \ 0^T]^T$. 将 Q 作分块如下:

$$Q = [Q_1, Q_2] \quad (24)$$

其中 Q_1 为 m 列, 则

$$\phi_q^T = Q_1 R_1 \quad (25)$$

那么 Q_1 的列构成 Jacobi 矩阵的行空间基矢量, 用 Q_2^T 左乘 (25) 有

$$\phi_2^T \phi_q^T = Q_2^T Q_1 R_1 = 0 \quad (26)$$

或

$$\phi_q Q_2 = 0 \quad (27)$$

说明 Q_2 的列是 Jacobi 矩阵零空间的一组基. 这样, Jacobi 矩阵的行空间和零空间是 \mathcal{R}^n 空间的正交子空间. 由于 Jacobi 矩阵的行空间正交于其约束流型, 而其零空间张成其约束表面的切平面, Q_2 的列就是约束切平面的正交基, 可以证明 Q_1 唯一, 而 Q_2 不唯一.

初始时, (6c) 为

$$\phi_q(q_0, 0)\dot{q}_0 = \eta_0 \quad (28)$$

将 (25) 代入 (28) 得:

$$Q_1^T \dot{q}_0 = (RT)^{-1} \eta_0 \equiv \hat{\eta}_0 \quad (29)$$

该式一般解为

$$\dot{q}_0 = Q_1 \hat{\eta}_0 + Q_2 \dot{z} \quad (30)$$

其中, $Q_1 \hat{\eta}_0$ 是特解, $Q_2 \dot{z}$ 是 $Q_1^T \dot{q}_0 = 0$ 的齐次解, 而 \dot{z} 是 p 个元素构成列阵. 几何上, 解落在 \mathcal{R}^n 空间中与 Jacobi 矩阵零空间平行的平面上, 但沿特解方向发生平移. 而特解落在约束表面的法平面内. 图 2 是三维构形空间中约束表面的法向及切向速度分量. 其法向速度是

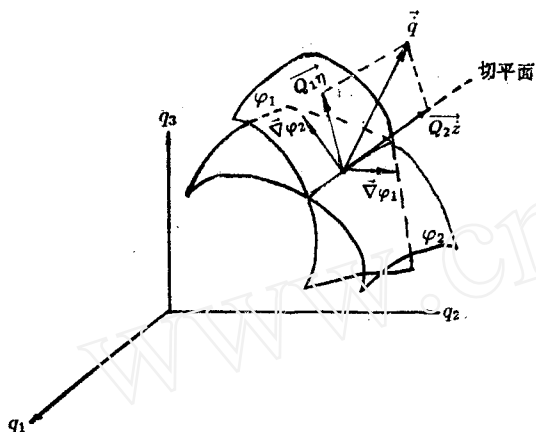


图 2 约束切平面中的独立速度

由系统运动学激励导致, 应从约束速度方程求得. 切向速度分量表示系统的自由动力学方程, 由系统运动学方程确定. 因为 Q_2 的列形成了约束表面切平面的正交基, 方程 (30) 中 \dot{z} 的每个元素表示沿着切平面每个基矢量方向速度元素的幅值. 如果约束定常, 则 $\hat{\eta}_0 = 0$, $Q_2 \dot{z}$ 落在约束表面的切平面内. 当约束非定常时, 其法向速度分量由 (29) 求出. 此时, \dot{z} 仅表达广义速度在约束切平面内的切向速度分量. 这样, 可将 \dot{z} 看作一矢量, 且用以表达系统的无约束运动, 将 \dot{z} 选作受约束动力学系统的独立速度. 因为虚位移矢量落在切平面内, 那么在小时间间隔内由 \dot{z} 积分引起广义坐标的变化, 不会导致大的约束违约.

但在实际计算中, 由于 Q_2 不唯一, 在数值处理中很难保证零空间基方向的连续性. 为克服这一问题, 先将当前速度分解为投影到 t_0 时刻的正交子空间上的两个速度分量, 即

$$\dot{q} = [Q_1 \ Q_2] \begin{bmatrix} \dot{e} \\ \dot{z} \end{bmatrix} \quad (31)$$

将上式代入 (6c) 得

$$\phi_q Q_1 \dot{e} + \phi_q Q_2 \dot{z} = \eta \quad (32)$$

只要构形微变时 ϕ_q 的秩不变, 则 $\phi_q Q_1$ 非奇异. 于是

$$\dot{e} = (\phi_q Q_1)^{-1} (\eta - \phi_q Q_2 \dot{z}) \quad (33)$$

将 (33) 代入 (31) 有

$$\dot{q} = [\hat{Q}_1 \quad \hat{Q}_2] \begin{bmatrix} \eta \\ \dot{z} \end{bmatrix} \quad (34)$$

其中

$$\hat{Q}_1 = Q_1 (\phi_q Q_1)^{-1} \quad (35a)$$

$$\hat{Q}_2 = Q_2 - \hat{Q}_1 \phi_q Q_2 \quad (35b)$$

\hat{Q}_1, \hat{Q}_2 有如下特性:

$$\phi_q \hat{Q}_1 = I_{m \times m} \quad (36a)$$

$$\phi_q \hat{Q}_2 = 0 \quad (36b)$$

这样由 \hat{Q}_2 定义了 Jacobi 矩阵的修正的零空间, \hat{Q}_1 张成了原 Jacobi 矩阵在 t_0 时刻的行空间. 同样有

$$\ddot{q} = [\hat{Q}_1 \quad \hat{Q}_2] \begin{bmatrix} \gamma \\ \ddot{z} \end{bmatrix} \quad (37)$$

将 $\hat{Q}^T = [\hat{Q}_1^T \quad \hat{Q}_2^T]^T$ 左乘 (6a), 并将 (37) 代入得缩并后的动力学方程:

$$\hat{M} \ddot{z} = \hat{Q}_2^T (F - M \hat{Q}_1 \gamma) \quad (38)$$

其中, $\hat{M} = \hat{Q}_2^T M \hat{Q}_2$ 为正定矩阵.

3.3 SVD 缩并法

Mani 等人^[13], Singh 等人^[14] 用 SVD 方法对 (6) 进行缩并. 对 ϕ_q 进行 SVD 分解有

$$\phi_q = USV^T = U_1 \Sigma V^T \quad (39)$$

其中 U, V 分别为 $m \times m, n \times n$ 阶正交阵, S 为 $m \times n$ 阶对角阵, $S = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r, 0, \dots, 0)$ ($r \leq m, \sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_r$) σ_i 为 ϕ_q 的奇异值, U, V 分别为左右奇异向量, $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r)$, $U = [U_1, U_2]$, $V = [V_1, V_2]$, U_1, U_2, V_1, V_2 分别为 $m \times r, m \times (m-r), n \times r, n \times (n-r)$ 阶矩阵, (39) 式可改写为

$$\phi_q = U_1 \Sigma V^T \quad (40)$$

将 (40) 代入 (6d), 并将 (6d) 两边左乘 U_1^T 得

$$\Sigma V_1^T \ddot{q} = U_1^T \gamma \quad (41)$$

用 V_2^T 左乘 (6a) 两端得

$$V_2^T M \ddot{q} = V_2^T F \quad (42)$$

由 (41), (42) 得缩并后的系统动力学方程为

$$A \ddot{q} = B \quad (43)$$

其中

$$A = \begin{bmatrix} V_2^T M \\ \Sigma V_1^T \end{bmatrix} \quad (44a)$$

$$B = \begin{bmatrix} V_2^T F \\ U_1^T \gamma \end{bmatrix} \quad (44b)$$

显然该方程非最简，且未用到 (6b)，(6c)，可用约束稳定法改善其数值性态。

也可将 (6c)，(6d) 改写为：

$$\dot{q} = \phi_q^+ \eta \quad (45)$$

$$\ddot{q} = \phi_q^+ \gamma \quad (46)$$

ϕ_q^+ 是 ϕ_q 的广义逆。引入 $n-r$ 个变量 x ，将 (45)，(46) 改为其等价形式：

$$\dot{q} = V_2 \dot{x} + \phi_q^+ \eta \quad (47)$$

$$\ddot{q} = V_2 \ddot{x} + \phi_q^+ \gamma \quad (48)$$

将 (48) 代入 (42) 得

$$A\ddot{x} = B \quad (49)$$

其中

$$A = V_2^T M V_2 \quad (50a)$$

$$B = V_2^T (F + M \phi_q^+ \gamma) \quad (50b)$$

但仍未考虑坐标违约，必须加以校正。

3.4 可微零空间方法

约束 Jacobi 矩阵的零空间可不用求解特征值问题直接得到。Hemami, Weimer^[10] 用矩阵方法通过直接构造 Jacobi 矩阵 ϕ_q 的零空间对系统方程降阶，但存在的问题是零空间基不唯一，且对大尺度系统很难构造出其 Jacobi 矩阵零空间基。Liang, Lance^[15] 提出的可微零空间方法通过采用 Gram-Schmidt 过程自动产生可微、唯一的零空间基。

通过 Gram-Schmidt 过程，对任意一组 n 个线性独立的 n 维矢量我们都可构造 n 维矢量空间的正交基。设 p_i ($i=1, 2, \dots, n$) 为一组 n 个线性独立矢量（不必正交），那么可得到如下 n 个正交矢量 V_i ($i=1, \dots, n$)

$$V_i = a_i \left[p_i - \sum_{j=1}^{i-1} (v_j^T p_i) v_j \right] \quad (51a)$$

$$a_i = 1 / \left(\left\| p_i - \sum_{j=1}^{i-1} (v_j^T p_i) v_j \right\| \right) \quad (i=1, \dots, n) \quad (51b)$$

其导数为：

$$\dot{V}_i = \dot{a}_i \left[p_i - \sum_{j=1}^{i-1} (v_j^T p_i) v_j \right] + a_i \left\{ \dot{p}_i - \sum_{j=1}^{i-1} [(\dot{v}_j^T p_i + v_j^T \dot{p}_i) v_j + (v_j^T p_i) \dot{v}_j] \right\} \quad (52a)$$

$$\dot{a}_i = - \left[(p_i^T p_i) - \sum_{j=1}^{i-1} (v_j^T p_i)^2 \right]^{-3/2} \left[(\dot{p}_i^T p_i) - \sum_{j=1}^{i-1} (v_j^T p_i) (\dot{v}_j^T p_i + v_j^T \dot{p}_i) \right] \quad (i=1, \dots, n) \quad (52b)$$

其中 $P_{n \times n}$ 可由 ϕ_q^T 与 $B_{n \times (n-m)}^T$ 构造，即

$$P = [\phi_q^T \quad B^T] \quad (53)$$

除非 P 要求非奇异， B 可以是任意矩阵。通过 Gram-Schmidt 过程将 P 化为如下正交矩阵

$$V = [V_D \quad V_I] \quad (54)$$

V_D, V_I 维数分别与 ϕ_q^T, B^T 相同，且 V_D 与 ϕ_q^T 张成相同的子空间，并可证明 $\phi_q V_D$ 非奇

异, 即

$$\det[\phi_q, \dot{V}_D] \neq 0 \quad (55)$$

因为 V_D, V_I 正交, 那么 V_I 与 ϕ_q^T 正交, 即

$$\phi_q V_I = 0 \quad (56)$$

这样 V_I 定义了 ϕ_q^T 的零空间。由于 V 是 P 经 Gram-Schmidt 过程转换来的正交非奇异矩阵, 那么可引入新的 n 个元素的速度矢量 z ,

$$\dot{z} = V^T \dot{q} \quad (57)$$

上式等价于

$$\dot{q} = V \dot{z} \quad (58)$$

对应于 V_D, V_I 分别定义非独立速度矢量 $z_{D \times 1}$ 与独立速度矢量 z_I , 即

$$\dot{z} = [\dot{z}_D^T \ \dot{z}_I^T]^T \quad (59a)$$

同时,

$$z = [z_D^T \ z_I^T]^T \quad (59b)$$

将 (58) 代入 (c) 有

$$\phi_q V \dot{z} = \eta \quad (60)$$

将 V 按分块后整理得

$$\dot{z}_D = (\phi_q V_D)^{-1} \eta \quad (61)$$

对 (58) 求导得

$$\dot{q} = V \dot{z} + \dot{V} z \quad (62)$$

将 (62) 代入 (6d) 得:

$$\dot{z}_D = (\phi_q V_D)^{-1} (\gamma - \phi_q \dot{V} z) \quad (63)$$

用 V_I^T 左乘 (6a) 两边得

$$V_I^T M \dot{q} = V_I^T F \quad (64)$$

将 (62) 代入 (64) 得

$$\bar{M} \dot{z}_I = V_I^T (F - MG) \quad (65)$$

其中,

$$\bar{M} = V_I^T M V_I \quad (66a)$$

$$G = -V_D \dot{z}_D - \dot{V} z \quad (66b)$$

当系统受完整定常约束时, 可以证明

$$\dot{z}_D = z_D = 0 \quad (67)$$

$$G = -\dot{V}_I z_I \quad (68)$$

4 基于一阶模型的缩并法——局部参数化方法

受约束多体系统动力学微分/代数混合方程也可用 Kane 方法等直接写成一阶形式。基于这样的模型, 动力学工作者们也发展了一些缩并方法, 如由 Walton 等人提出、Kamman, Huston^[17] 发展的零特征值方法, Wampler, Buffington & Jia^[18] 提出的 C-D 分解法, Ider, Amirouche^[19] 基于 Gauss 消去法与 Gram-Schmidt 过程的方法, 及 Amirouche 等人^[20] 基于递推 Householder 转换的伪上三角形分解法等, 其基本思想与前面介绍的相同。

下面是近年数值分析领域发展的局部参数化缩并方法^[21,24,25]。先将(6a)–(6d)改写为如下等价的一阶形式

$$\dot{x} = g(x) \quad (69a)$$

$$T(x) = 0 \quad (69b)$$

其中

$$x = [q^T \ v^T]^T, \quad v = \dot{q} \quad (70a)$$

$$g(x) = [\dot{q}^T \ \ddot{q}^T]^T \equiv [v^T \ f^T(q, v)]^T \quad (70b)$$

$$T(x) = [(\phi_q \ v)^T \ \phi^T(q)]^T \quad (70c)$$

$$f(q, v) = [I_n \ 0] \begin{bmatrix} M & \phi_q^T \\ \phi_q & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F \\ \gamma \end{bmatrix} \quad (70d)$$

在此将时间 t 暂并于变量 q 。

据 Rheinboldt^[22] 的思想, Euler-Lagrange 方程可看作在运动学约束方程定义的流形上的微分方程。那么以下用切空间局部参数化方法将 Euler-Lagrange 方程降为参数空间上的常微分方程。

假设 $T: \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}^m$, $g: \mathcal{R}^n \rightarrow \mathcal{R}^n$ 足够光滑, 且 T 为 C^r 类 ($r \geq 3$), 该系统有唯一解^[22], 令 $p = n - m$, 那么

$$\mu = \{x \in \mathcal{R}^n; T(x) = 0, \text{rank}(DT(x)) = m\} \quad (71)$$

是 p 维 C^r 流形。流形 μ 在 x 点的切空间由下式确定:

$$T_x \mu = \{v \in \mathcal{R}^n; DT(x)v = 0\} = \text{Ker } DT(x) \quad (72)$$

\mathcal{R}^n 中切空间的补是 μ 在 x 点的法空间 $N_x \mu$, 定义 $T\mu = \bigcup_{x \in \mu} T_x \mu$ 为 μ 的切丛, 并定义 μ 在 $x_0 \in \mu$ 的局部参数 ϕ 是 C^r 微分同胚, 使得

$$\phi: \alpha \rightarrow \beta, \quad \phi(y_0) = x_0, \quad y_0 \in \mathcal{R}^p \quad (73)$$

其中 α 是 \mathcal{R}^p 含 y_0 的开集, β 是 μ 中 x_0 点的开邻域。局部参数的 Jacobi 阵 $D\phi$ 是 $n \times p$ 列满秩阵, 那么事实上(69)是流形上的微分方程, 并可局部写为

$$D\phi(y)\dot{y} = g(\phi(y)), \quad y \in \alpha \subseteq \mathcal{R}^p \quad (74)$$

此为超定方程组, 引入 Jacobi 矩阵伪逆得

$$\dot{y} = (D\phi^T(y)D\phi(y))^{-1}D\phi^T(y)g(\phi(y)) \quad (75)$$

$$y(0) = 0, \quad y \in \alpha \subseteq \mathcal{R}^p$$

由于 $\phi(y)$ 是隐函数, $g(\phi(y))$ 的 Jacobi 矩阵难于计算, 以下用切空间局部参数化方法降低其计算复杂性。

设 $U_0 = U(x_0)$ 为 $n \times p$ 矩阵, 且其列矢量构成切空间 $T_{x_0} \mu$ 的正交基, U_0 可由 $DT(x_0)^T$ 的如下 QR 分解得到, 即

$$DT(x_0)^T = Q_0 R_0 \quad (76)$$

Q_0, R_0 分别为

$$Q_0 = [U_0 \ V_0], R_0 = \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix} \quad (77)$$

Q_0 为酉矩阵, R 为上三角阵, V_0 的列构成 μ 在 x_0 点的法空间 $N_{x_0} \mu$ 的正交基。可用 U_0 这

样得到 μ 的局部参数化 ϕ : 给定原点的 α 邻域中一点 $y \in \mathcal{R}^p$, 计算点 $x_0 + U_0 y$, 那么可定义点 $x = \phi(y)$ 为流形 μ 同过 $x_0 + U_0 y$ 且平行于法空间 $N_{x_0} \mu$ 的超平面的交点, 如图 3 所示. 这样, 对给定的 $y \in \alpha$, 点 x 是如下非线性方程的解:

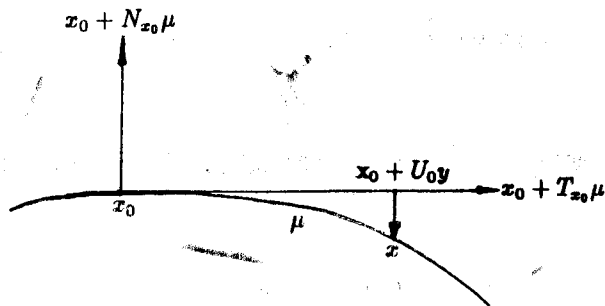


图3 切空间局部参数化

$$T(x) = 0 \quad (78a)$$

$$U_0^T(x - x_0) - y = 0 \quad (78b)$$

该非线性方程组可由起点 $x_0 + U_0 y$ 应用 Newton 迭代法计算.

对于 $l = 0, 1, \dots$ 直到收敛,

$$x^{(l+1)} = x^{(l)} - A(x^{(l)})^{-1} G(x^{(l)})$$

在此,

$$A(x) = \begin{bmatrix} DT(x) \\ U_0^T \end{bmatrix}, \quad G(x) = \begin{bmatrix} T(x) \\ U_0^T(x - x_0) - y \end{bmatrix}$$

对于 x_0 的 β 邻域内任一点 x , 有

$$D\phi(y) = \begin{bmatrix} DT(x) \\ U_0^T \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 0 \\ I_p \end{bmatrix} \quad (79)$$

证明如下: 对 $T(\phi(y)) = 0$ 微分有

$$DT(x) D\phi(y) = 0 \quad (80)$$

即 $D\phi(y)$ 的列是 $DT(x)$ 的零空间, 即 $T_x \mu$. 另一方面, 对于 (78b) 关于 y 微分得

$$U_0^T D\phi(y) = I_p \quad (81)$$

I_p 为 $p \times p$ 单位矩阵. 由 (81) 同时考虑到 (80) 及 $A(x)$ 可逆, 即可得到式 (79). 由 (79), (74) 可将 (69) 局部化为如下微分方程, 得

$$\dot{y} = U_0^T g(D\phi(y)), \quad y(0) = 0 \quad (82)$$

可利用各种方法 (如 Adams 隐式法) 求解这方程:

$$y_{n+1} = \sum_{i=0}^k a_i y_{n-i} + h \sum_{i=-1}^k b_i U_0^T g[D\phi(y_{n-i})] \quad (83)$$

利用 (78b) 知 $y_i = U_0^T(x_i - x_0)$, 从而上式为

$$U_0^T \left[x_{n+1} - \sum_{i=1}^k a_i x_{n-i} - h \sum_{i=-1}^k b_i g(x_{n-i}) \right] = 0 \quad (84)$$

与约束方程联立知 x_{n+1} 是如下方程

$$\begin{cases} T(x) = 0 & (85a) \\ U_0^T \left(x - \sum_{i=0}^k a_i x_{n-i} - h \sum_{i=-1}^k b_i g(x_{n-i}) - h b_{-1} g(x) \right) = 0 & (85b) \end{cases}$$

的解, 该式可用 Newton-Raphson 方法计算.

5 ODAE 方法

以下为基于一阶模型的增广法. 由于式 (6) 超定, 先记 $v = \dot{q}$, 将式 (6) 化为如下阶 DAE:

$$\dot{q} - v = 0 \quad (86a)$$

$$M\dot{v} + \phi_q^T \lambda = F \quad (86b)$$

$$\phi(q, t) = 0 \quad (86c)$$

$$\phi_q v = \eta \quad (86d)$$

$$\phi_q \dot{v} = \gamma \quad (86e)$$

一般 (86) 为严重病态的刚性方程组, 计算过程所需步长很小, 算法限制性较大, 从而限制了这种方法的应用. 近年文献[27][28][29]在上述方程组中引入各种未知参数, 把它当作非超定系统, 使计算的稳定性明显改变. 以 [27] 中的方法为例, 引入向量参数 μ, τ , 作“正方形”方程组

$$\dot{q} - v + \phi_q(q, t)^T \mu = 0 \quad (87a)$$

$$M(q, t)\dot{v} + \phi_q^T(q, t)\lambda + M(q, t)\phi_q^T(q, t)\tau = F \quad (87b)$$

$$\phi_q(q, t)\dot{v} + \phi_q(q, t)\phi_q(q, t)^T \tau = \gamma \quad (87c)$$

$$\phi_q(q, t)v = \eta \quad (87d)$$

$$\phi(q, t) = 0 \quad (87e)$$

可以证明方程组的解一定满足 $\mu, \tau = 0$, 从而是原超定系统方程组的解.

6 其它问题

微分/代数方程是常微分方程、矩阵理论、非线性代数方程等的交叉和综合. Brenan 等人^[9]奠定了其数值分析方法设计的基础. 近年来尽管已提出不少算法, 但对方法的效率、误差估计、收敛性及稳定性分析研究极少. 此外, 在实施过程中初始值的精确与否直接影响着整个计算过程. 而对复杂系统来讲, 很难直观给出满足相容条件的初条件, 而只能给出部分精确条件, 此时可将初条件确定问题转化为如下最小值问题 (以初位移为例):

设 $t = t_0$ 时, 系统的初位移为 q_{0i} ($i = 1, 2, \dots, n$), 定义 L_0 :

$$L_0 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n w_i (q_i - q_{0i})^2 + \sum_{j=1}^m \lambda_j^0 \phi_j \quad (88)$$

其中, w_i 为权系数, λ_j^0 为 Lagrange 乘子, 使 L_0 最小, 应有

$$\frac{\partial L_0}{\partial q_i} = 0 \quad \frac{\partial L_0}{\partial \lambda_j^0} = 0 \quad (i = 1 \dots n, j = 1 \dots m) \quad (89)$$

此为 $n + m$ 个非线性代数方程, 即

$$\begin{cases} w_i(q_i - q_{0i}) + \sum_{j=1}^m \lambda_j^0 \frac{\partial \phi_j}{\partial q_i} = 0 & (90a) \\ \phi_j = 0 & (90b) \end{cases}$$

上式可缩写为含 n 个元素的矢量 f 与含 m 个元素的矢量 g , 则有

$$\begin{cases} f(q, \lambda^0) = 0 & (91a) \\ g(q) = 0 & (91b) \end{cases}$$

再通过 Newton-Rophson 迭代计算 q 与 λ^0 如下:

$$\begin{bmatrix} f_q & f_{\lambda^0} \\ g_q & 0 \end{bmatrix}_p \begin{bmatrix} \Delta q \\ \Delta \lambda^0 \end{bmatrix}_p = \begin{bmatrix} -f \\ -g \end{bmatrix}_p \quad (92)$$

将 (90) 代入 (92) 即可得 $\Delta q_p, \Delta \lambda_p^0$, 那么

$$q_{p+1} = q_p + \Delta q_p \quad (93a)$$

$$\lambda_{p+1}^0 = \lambda_p^0 + \Delta \lambda_p^0 \quad (93b)$$

直到收敛。

7 结束语

Euler-Lagrange 方程起源于 Lagrange 的分析动力学, 在80年代初, 由于复杂系统动力学仿真的需要促进了其数值分析方法的研究。尽管提出的方法各有千秋, 但大多基于“提出—实施”的模式, 对各方法之间的联系, 各方法在计算效率、误差阶、收敛性, 稳定性方面的优劣, 研究者甚少, 但研究的趋势大致为: (1) 基于各种矩阵分解的缩并技术仍大量应用并不断完善, (2) 简单增广法已不再使用, 但其中的约束稳定思想却在缩并法中得到发展, (3) 利用相容条件将微分方程与代数方程联立求解的算法逐步替代了将它们分别讨论, 交替求解的传统算法。

参 考 文 献

- 1 Haug E J. Computer Aided Kinematics and Dynamics of Mechanical Systems, Vcl.1 Basic Methods, Allyn & Bacon, Boston, MI (1989)
- 2 Haug E J. Elements and methods of computational dynamics. In: Haug ed. Computer Aided Analysis and Optimization of Mechanical System Dynamics. Springer-Verlag (1984)
- 3 洪嘉振, 刘延柱. 离散系统计算动力学现状. 力学进展, 19, 2 (1989): 205—210
- 4 Potra F A, Rheinboldt W C. Differential-geometric techniques for solving differential/algebraic equations, Real-Time Integration Methods for Mechanical System Simulation, NATO ASI Series, Vol. 69, Springer-Verlag (1991)
- 5 Brenan K, Campbell S, Petzold L. Numerical Solution of Initial-Value Problems in Differential/Algebraic Equations, North-Holland, New York (1989)
- 6 Nikravesh P E. Some methods for dynamic analysis of constrained mechanical system, A survey. In: Haug ed. Computer Aided Analysis and Optimization of Mechanical System Dynamics. Springer-Verlag (1984)
- 7 Baumgarte J. Stabilization of constraints and integrals of motion. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 1 (1972)
- 8 Nikravesh P E. Computer Aided Analysis of Mechanical Systems, Prentice Hall (1988)
- 9 Nikravesh P E, Haug E J. Generalized coordinates partitioning for analysis of mechanical systems with nonholonomic constraints, ASME, *J. of Mechanisms, Transmissions, & Automation in Design*, 105 (1983): 384—397
- 10 Gloub G H. Numerical methods for solving linear least square problems. *Numer.Math.*, 7 (1965): 206—216

- 11 Businge P, Golub G H. Linear least square solutions by householder transformations. *Numer. Math.*, **14** (1970)
- 12 Kim S S, Vanderploeg M J. QR decomposition for state space representation of constrained mechanical dynamics system. *J. of Mech., Trans. & Auto. in Design*, **108** (1986) : 183—188
- 13 Mani N K, Haug E J, Atkinson K E. Application of singular value decomposition for analysis of mechanical system dynamics. ASME Paper, 84-DET-89, ASME Design Engineering Technique Conference, Cambridge, MA. Oct. (1984) : 7—10
- 14 Singh R P, Likins P W. Singular value decomposition for constrained dynamic systems. *J. of Applied Mechanics*, **52**, 4 (1985) : 943—948
- 15 Liang C G, Lance G M. A differential null space method for constrained dynamic analysis. *J. Mech. Trans. & Auto. in Design*, **109** (1987) : 405—411
- 16 Hememi H, Weimer F C. Modeling of nonholonomic dynamic systems with applications. *ASME J. of Applied Mechanics*, **48** (1981) : 177
- 17 Kamman J W, Husten R L. Constrained multibody system dynamics—An automated approach. *J. of Computers & Structures*, **18**, 6 (1984) : 999—1112
- 18 Wampler C, Buffinton K, Jia S H. Formulation of equations of motion for systems subject to constraints. *ASME J. of Applied Mechanics*, **52** (1985) : 465—475
- 19 Ider S K, Amirouche F M C. Coordinate reduction in the dynamics of constrained systems—A new approach. *J. of Applied Mechanics*, **55** (1988) : 889—904
- 20 Amirouche F M L, Jia T Y, Ider S K. A recursive householder transformation for complex dynamical systems with constraints. *J. of Applied Mechanics*, **55** (1988) : 729—734
- 21 Potra F A, Rheinboldt W C. On the numerical solution of Euler-Lagrange equations. *Mechanics of structures & Machines*, **19**, 1 (1991) : 1—18
- 22 Rheinboldt W C. Differential algebraic systems as differential equations on manifold. *Math. Comp.*, **43** (1984) : 473—482
- 23 Chace M A. Methods and experiences in computer aided design of large-displacement mechanical systems. In: Haug ed. Computer Aided Analysis and Optimization of Mechanical System Dynamics, Springer-verlag (1984)
- 24 Potra F A, Yen J. Implicit numerical integration for Euler-lagrange equations via tangent space parameterization. *Mechanics of Structures & Machines*, **19**, 1 (1991) : 77—98
- 25 Yen J, Haug E J, Tak T O. Numerical methods for constrained equations of motion in mechanical system dynamics. *Mechanics of Structures & Machines*, **19**, 1 (1991) : 41—76
- 26 Haug E J, Yen J. Implicit numerical integration of constrained equations of motion via generalized coordinate partitioning. *Transactions of the ASME*, **114** (1992) : 296—304
- 27 Petzold L R, Potra F A. ODAE methods for the numerical solution of Euler-Lagrange equations. *Appl. Numer. Math.*, **10** (1992) : 397—413
- 28 Fuhrer C, Leimkuhler B J. Numerical solution of differential-algebraic equations for constrained mechanical motion. *Numer. Math.*, **59** (1991) : 55—69
- 29 Stephen L C. Least squares completions for nonlinear differential algebraic equations. *Numer. Math.*, **65** (1993) : 77—94

ON NUMERICAL ALGORITHMS FOR DIFFERENTIAL/ALGEBRAIC EQUATIONS OF MOTION OF MULTIBODY SYSTEMS

Pan Zhenkuan Zhao Weijia

Hong Jiazhen Liu Yanzhu

Qingdao University, Qingdao 266071

Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200030

Abstract The study of differential/algebraic equations of motion of multibody systems (the Euler-Lagrange equations) is research focus in fields of dynamics and numerical analysis. Various integration methods of such equations are presented in this paper.

Keywords *multibody systems; dynamics; Euler-Lagrange equations; numerical integration methods*