

一类特殊非完整力学系统的辛算法计算*

刘世兴[†] 郭永新 刘 畅

(辽宁大学物理学院, 沈阳 110036)

(2007 年 4 月 27 日收到, 2007 年 7 月 3 日收到修改稿)

对一类特殊的非完整力学系统的动力学性质进行数值研究, 采用当前比较优越的保结构算法进行数值计算, 并和传统的 Runge-Kutta 方法进行比较. 通过计算结果的比较而得出辛算法在这类特殊的非完整力学系统的数值计算中的优越性.

关键词: 非完整约束, 辛算法, 辛差分格式

PACC: 0320

1. 引 言

非完整系统是一类广泛存在于物理学、力学以及工程等领域中的动力学系统. 近 10 年来, 非完整力学系统的发展主要集中在两个相互关联的方向上, 一个是非完整运动规划, 另一个则是非完整约束系统的几何动力学. 这两个方面的研究都是充分利用了现代几何学, 如纤维丛理论, 辛流形和 Poisson 流行结构等^[1-3]. 而数值计算对非完整力学的理论验证和应用研究越来越重要, 数值计算不仅是非完整约束力学系统几何动力学的有力补充, 而且几何动力学是保结构数值计算的基础, 同时数值计算也是联系非完整力学的理论研究和实际应用的纽带. 因此, 对非完整力学系统的数值算法的研究就非常的重要. 但目前, 非完整约束力学系统的数值计算方面的研究工作屈指可数^[4,5], 这将严重影响非完整力学系统的理论研究新成果对运动规划及在实际生产等领域中的应用.

众所周知, 几乎所有的完整系统, 都能表示成 Hamilton 正则方程的形式. 正则坐标和正则动量形成的相空间具有辛结构. 冯康^[6]正是基于 Hamilton 力学的基本原理: 正则方程的解由一个单参数辛群 $\{g_t^i; -\delta < t < \delta\}$ 生成, 提出了 Hamilton 系统的辛算法, 它使离散化后的差分方程保持原有系统的辛

结构, 从而使数值计算精度得到了大大的提高, 并在许多领域得到了广泛的应用, 例如, 辛算法已经应用到量子力学和强场物理, 化学反应动力学, 天体力学和大气与海洋科学, 分子动力学、等离子体物理和地学等领域的研究中.

由于在非完整系统中, 非完整约束对力学系统相空间辛结构的破坏^[7-12], 使得对于完整系统成立的保辛算法不再适用, 需要寻求新的保结构数值算法来进行非完整力学系统的数值计算, 以得到较精确的数值结果. 但对于一些特殊的非完整系统, 在适当的条件下, 却可以将非完整系统的运动方程的积分问题归结为有条件的完整系统运动方程的积分问题^[13], 对于这类方程, 我们仍然可以应用 Hamilton 系统的辛算法对其进行数值求解.

本文将对在非势广义力和约束反力为广义势情形的非完整力学系统进行数值计算, 采用辛算法和 Runge-Kutte 方法, 并分别将算得的数值结果和解析解进行比较, 得出辛算法计算的优越性.

2. 带乘子的方程的 Lagrange 化^[13]

设力学系统的位形由 n 个广义坐标 q_1, \dots, q_n 确定, 系统受有 g 个一阶非线性非完整约束

$$f_\beta(q_s, \dot{q}_s, t) = 0, (\beta = 1, \dots, g; s = 1, \dots, n), \quad (1)$$

* 国家自然科学基金(批准号: 10472040), 辽宁省优秀青年科研人才培养基金(批准号: 3040005), 教育部留学回国人员科研启动基金(批准号: 2004527), 教育部春晖计划项目(批准号: Z2005-1-21006)和辽宁省教育厅基础研究计划项目(批准号: Q5L155)资助的课题.

[†] E-mail: ydylsx@163.com

则系统的运动方程为

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_s} \right) - \frac{\partial T}{\partial q_s} = Q_s + \Lambda_s, (s = 1 \dots n) \quad (2)$$

其中

$$\Lambda_s = \sum_{\beta=1}^g \lambda_{\beta} \frac{\partial f_{\beta}}{\partial \dot{q}_s}$$

利用(1)(2)两式,可以把 Lagrange 乘子 λ_{β} 表示成广义坐标,广义速度和时间的函数,即

$$\lambda_{\beta} = \lambda_{\beta}(q_s, \dot{q}_s, t),$$

将其代入(2)式,可以得到

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_s} \right) - \frac{\partial T}{\partial q_s} = Q'_s, (s = 1 \dots n), \quad (3)$$

其中

$$Q'_s = Q_s + \Lambda_s = Q'_s(t, q, \dot{q})$$

根据非完整系统 Lagrange 力学逆问题的理论,我们有如下的结论:

定理 若 Q'_s 有广义势,即满足自伴随条件

$$\frac{\partial Q'_k}{\partial \dot{q}_i} = - \frac{\partial Q'_i}{\partial \dot{q}_k}, \quad \frac{\partial Q'_i}{\partial q_k} = \frac{\partial Q'_k}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial Q'_k}{\partial \dot{q}_i},$$

$$(i, k = 1 \dots n), \quad (4)$$

则非完整系统(3)有下面的解析表达式:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L'}{\partial \dot{q}_s} \right) - \frac{\partial L'}{\partial q_s} = 0, (s = 1 \dots n), \quad (5)$$

这里

$$L' = T + \sum_{k=1}^n \dot{q}_k \int_0^1 Q'_k(t, \tau q, \tau \dot{q}) d\tau. \quad (6)$$

该 Lagrange 函数的构造并不是唯一的.

利用 Legendre 变换,则可以得到对应的 Hamilton 函数和广义动量

$$H' = \sum_{s=1}^n p'_s \dot{q}_s - L', \quad p'_s = \frac{\partial L'}{\partial \dot{q}_s}, (s = 1 \dots n), \quad (7)$$

从而我们可以得到系统的 Hamilton 正则方程

$$\dot{q}_s = \frac{\partial H'}{\partial p'_s}, \quad \dot{p}'_s = - \frac{\partial H'}{\partial q_s}, (s = 1 \dots n), \quad (8)$$

方程(8)有完整力学系统正则方程的形式,所以非完整系统是可以作为有条件的完整力学系统问题来研究的,求解方程(8)就可以得出非完整系统运动的相应解.

3. 一般经典 Hamilton 系统的辛格式^[14]

Hamilton 函数(7)是 $2n$ 个变量 $p'_1, \dots, p'_n; q_1, \dots, q_n$ 的可微函数.

... q_n 的可微函数.

令 $z = (p'_1, \dots, p'_n, q_1, \dots, q_n)^T$, 则正则方程(8)可以写成下面紧凑的形式:

$$\frac{dz}{dt} = J^{-1} \frac{\partial H'}{\partial z}, \quad (9)$$

其中

$$J = \begin{pmatrix} 0 & I_n \\ -I_n & 0 \end{pmatrix} \quad (10)$$

是标准辛矩阵, I_n 和 0 分别是 n 阶单位矩阵和零矩阵. 基于 Hamilton 力学的基本原理,正则方程的解由一个单参数辛群 $\{g_t^H; -\delta < t < \delta\}$ 生成,采用冯康^[4]等人提出的正则方程的辛算法,可以计算上面的正则方程(8),从而得到方程(8)的数值解.

冯康考虑正则恒等变换的生成函数,可以生成一个辛变换,因而基于 Hamilton 相流的生成函数,可以构造辛差分格式. 例如对于一般经典 Hamilton 系统(9),Euler 中点格式

$$\frac{z^{n+1} - z^n}{\tau} = J^{-1} \left(\frac{\partial H'}{\partial z} \right) \Big|_{\left(\frac{z^{n+1} + z^n}{2} \right)} \quad (11)$$

是 2 阶辛格式,这里 τ 是时间步长. 又如基于生成函数构造的 1 阶辛差分格式为

$$p'^{n+1} = p'^n - \tau \left(\frac{\partial H'}{\partial q} \right) \Big|_{(p'^{n+1}, q^n)},$$

$$q'^{n+1} = q^n + \tau \left(\frac{\partial H'}{\partial p'} \right) \Big|_{(p'^{n+1}, q^n)}, \quad (12)$$

另外还有具有更高精度的基于生成函数构造的 4 阶辛差分格式为

$$\frac{z^{n+1} - z^n}{\tau} = J^{-1} (\nabla H') \Big|_{\left(\frac{z^{n+1} + z^n}{2} \right)} - \frac{\tau^2}{24} J^{-1} \nabla_z \left((\nabla H')^T J H'_{zz} J \nabla H' \right) \Big|_{\left(\frac{z^{n+1} + z^n}{2} \right)}. \quad (13)$$

以上的(11)(12)(13)式都是隐式的形式,计算起来比较繁琐,需要做迭代.

而对于 Hamilton 函数显含时间的可分 Hamilton 系统,其 Hamilton 函数有下面的形式

$$H'(p', q, t) = \frac{1}{2} [p'^T H(t) p' + q^T H(t) q] = H_1(p', t) + H_2(q, t). \quad (14)$$

对于显含时间的可分 Hamilton 系统(14),我们可以有 1 阶显式辛格式

$$p'^{n+1} = p'^n - \tau \left(\frac{\partial H_2(q, t)}{\partial q} \right) \Big|_{\left(q^n, t_{n+\frac{1}{2}} \right)},$$

$$q^{n+1} = q^n + \tau \left(\frac{\partial H_1(p', t)}{\partial p'} \right)_{(p'^{n+1}, t_{n+\frac{1}{2}})}, \quad (15)$$

和 2 阶显式辛格式

$$\begin{aligned} p'^1 &= p'^n, \\ q^1 &= q^n + \frac{\tau}{2} \left(\frac{\partial H_1(p', t)}{\partial p'} \right)_{(p'^n, t_{n+\frac{1}{2}})}, \\ p'^{n+1} &= p^1 - \tau \left(\frac{\partial H_2(q, t)}{\partial q} \right)_{(q^1, t_{n+\frac{1}{2}})}, \\ q^{n+1} &= q^1 + \frac{\tau}{2} \left(\frac{\partial H_1(p', t)}{\partial p'} \right)_{(p'^{n+1}, t_{n+\frac{1}{2}})}, \end{aligned} \quad (16)$$

其中 $t_{n+\frac{1}{2}} = t_0 + \left(n + \frac{1}{2}\right)\tau$.

依此类推,我们还可以得到更高阶的显式辛格式^[15].

4. 算 例

在此,我们给出一个例题,利用辛算法和一般的 Runge-Kutta (R-K)方法对同一个问题求解,并与精确解进行比较.

例 设力学系统的位置用两个广义坐标 q_1, q_2 来确定,动能 T 和势能 V 分别为

$$T = \frac{1}{2}(\dot{q}_1^2 + \dot{q}_2^2), \quad V = 0,$$

系统所受的非完整约束

$$f = \dot{q}_1 + at\dot{q}_2 - aq_2 + t = 0, \quad (17)$$

其中 a 为常数.

系统的 Routh 方程为

$$\ddot{q}_1 = \lambda, \quad \ddot{q}_2 = \lambda at, \quad (18)$$

将(17)式两端对 t 求导,得

$$\ddot{q}_1 + at\ddot{q}_2 + 1 = 0, \quad (19)$$

将(18)式代入(19)式,解得 $\lambda = -\frac{1}{1+a^2t^2}$,则系统的运动方程表示为

$$\ddot{q}_1 = -\frac{1}{1+a^2t^2}, \quad \ddot{q}_2 = -\frac{at}{1+a^2t^2}.$$

从而可以写出 L' 为

$$\begin{aligned} L' &= \frac{1}{2}(\dot{q}_1^2 + \dot{q}_2^2) + \frac{1}{a}\dot{q}_1 \arctan at \\ &\quad + \frac{1}{2a}\dot{q}_2 \ln(1+a^2t^2), \end{aligned}$$

这样由 $p'_s = \frac{\partial L'}{\partial \dot{q}_s}$ 得出

$$p'_1 = \dot{q}_1 + \frac{1}{a} \arctan at, \quad p'_2 = \dot{q}_2 + \frac{1}{2a} \ln(1+a^2t^2), \quad (20)$$

则由 Legendre 变换,得 Hamilton 函数

$$\begin{aligned} H' &= \sum_{s=1}^2 p'_s \dot{q}_s - L' \\ &= \frac{1}{2} \left[p'_1 - \frac{1}{a} \arctan at \right]^2 \\ &\quad + \frac{1}{2} \left[p'_2 - \frac{1}{2a} \ln(1+a^2t^2) \right]^2. \end{aligned}$$

这样我们得到 Hamilton 正则方程组

$$\begin{aligned} \dot{q}_1 &= \frac{\partial H'}{\partial p'_1}, \quad \dot{q}_2 = \frac{\partial H'}{\partial p'_2}, \\ \dot{p}'_1 &= \frac{dp'_1}{dt}, \quad \dot{p}'_2 = \frac{dp'_2}{dt}, \end{aligned} \quad (21)$$

从而构成了 Hamilton 正则方程组,我们就可以利用数值方法来求解上面的正则方程组.

而上面的问题可以利用 Hamilton-Jacobi 方法得到精确解^[14].

$$q_1 = -\frac{t}{a} \arctan at + \frac{1}{2a^2} \ln(1+a^2t^2) + C_1 t + C_2,$$

$$q_2 = \frac{t}{a} - \frac{1}{a^2} \arctan at - \frac{t}{2a} \ln(1+a^2t^2) + D_1 t + D_2,$$

这里的 C_1, C_2, D_1, D_2 都是积分常数,由初始条件来确定,并且有 $C_1 - aD_2 = 0$.

我们对上面的例题分别采用辛算法和 Runge-Kutta 法进行计算,得到该例题的数值解,并通过比较两种数值方法计算所得数值解和精确解之间的相对误差来说明两种数值方法之间的差别.

为了计算方便,我们选取如下的初始条件:

$$q_1(0) = C_2 = 1,$$

$$q_2(0) = D_2 = 1,$$

如果 $a = 1$,则 $C_1 = 1$,而 D_1 没有限制,所以可以任意取值,我们也将其取为 $D_1 = 1$.利用(20)式,可以得到初始时刻的动量为

$$p'_1(0) = C_1 = 1,$$

$$p'_2(0) = D_1 = 1.$$

在计算过程中,我们分别采用了(16)式所示的 2 阶显式辛格式和 2 阶 R-K 方法进行计算,取时间步长为 $\tau = 0.01$,计算到了 $10^9 \tau$ 的时间.

在下面我们给出了采用辛算法和 R-K 方法算得的数值结果和精确解之间的相对误差随时间变化的比较图.图 1 为 q_1 的相对误差,图 2 为 q_2 的相对误差.

从图 1,图 2,我们可以看出,采用辛算法算得的数值结果较相同精度的 R-K 方法算得的相对误差更小,结果更精确.可以肯定,如果我们采用更高阶

的辛格式,将得到更加精确的数值结果.因此我们在计算同类问题时,在精确解不易得到的情况下采

用辛算法进行数值计算可以得到更好的结果,在工程应用中能够给工程带来更精确的参考数据.

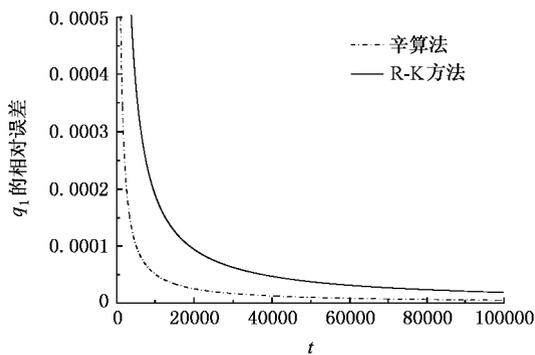


图 1 q_1 的相对误差

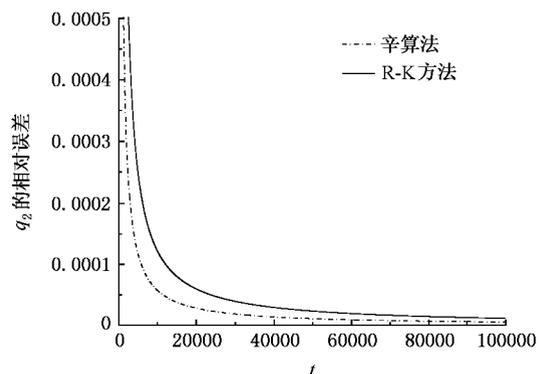


图 2 q_2 的相对误差

- [1] Guo Y X , Luo S K , Mei F X 2004 *Adv. Mech.* **34** 477 (in Chinese) [郭永新、罗绍凯、梅凤翔 2004 力学进展 **34** 477]
- [2] Guo Y X , Zhao Z , Liu S X 2006 *Acta Phys. Sin.* **54** 3838 (in Chinese) [郭永新、赵 刘世兴 2006 物理学报 **55** 3838]
- [3] Wang Y , Guo Y X 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 5517 (in Chinese) [王 勇、郭永新 2005 物理学报 **54** 5517]
- [4] Ostrowsky J 1998 *Rep Math Phys.* **42** (1/2) 185
- [5] Corté J 2002 *Geometric , Control , and Numerical Aspects of Nonholonomic Systems* (Berlin , New York : Springer)
- [6] Feng K , *Proc. of the 1984 Beijing Symposium on Differential Geometry and Differential Equations Computation of Partial Differential Equations* , edited by Feng K (Science Press , Beijing , 1985) 42
- [7] Guo Y X , Song Y B , Zhang X B , Chi D P 2003 *Chin Phys. Lett.* **20** 1192
- [8] Guo Y X , Shang M , Luo S K 2003 *Applied Mathematics and Mechanics* **24** 62 (in Chinese) [郭永新、尚 玫、罗绍凯 2003 应用数学与力学 **24** 62]
- [9] Guo Y X , Shang M , Luo S K , Mei F X 2001 *Int. J. Theor. Phys.* **40** 1197
- [10] Guo Y X , Luo S K , Mei S , Mei F X 2001 *Rep. Math. Phys.* **47** 313
- [11] Guo Y X , Shang M , Mei F X 1999 *Int. J. Theor. Phys.* **38** 1017
- [12] Guo Y X , Chi D P 2003 *Study of Geometric Dynamics of Nonholonomic Constrained Mechanical Systems* , The Final Research Results of KFAS International Scholar Exchange Fellowship Program , Seoul , Korea
- [13] Mei F X , Liu D , Luo Y 1991 *Advanced Analytical Mechanics* (Beijing : Beijing Institute of Technology Press) p458 (in Chinese) [梅凤翔、刘 瑞、罗 勇 1991 高等分析力学 (北京 : 北京理工大学出版社) 第 458 页]
- [14] Liu X S , Ding P Z 2004 *Adv. Phys.* **26** 48 [刘学深、丁培柱 2004 物理学进展 **26** 48]
- [15] Zhu W S , Zhao X S , Tang Y Q 1996 *J. Chem. Phys.* **104** 2275

A special nonholonomic mechanical system calculated by symplectic method^{*}

Liu Shi-Xing[†] Guo Yong-Xin Liu Chang

(*College of Physics, Liaoning University, Shenyang 110036, China*)

(Received 27 April 2007 ; revised manuscript received 3 July 2007)

Abstract

This paper studies numerically a special nonholonomic mechanical system. A better algorithm of structure-preserving is adopted to calculate numerically and compare it to the classical R-K method. By comparing the results of two methods, the advantage of symplectic method used on this special nonholonomic mechanical system is presented.

Keywords : nonholonomic constrain , symplectic algorithm , symplectic difference scheme

PACC : 0320

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10472040), the Outstanding Young Talents Training Fund of Liaoning Province of China (Grant No. 3040005), SRF for ROCS, SEM (Grant No. 2004527), the Chunhui Plan of State Education Ministry of China (Grant No. Z2005-1-21006) and the Foundation Research Plan of Liaoning Educational Bureau (Grant No. 05L155).

[†] Corresponding author. E-mail : ydylsx@163.com