

# 弹性细杆弯曲的 Kirchhoff 方程的违约校正求解\*

黄 磊 包光伟 刘延柱

(上海交通大学工程力学系, 上海 200240)

(2004 年 9 月 3 日收到 2004 年 10 月 20 日收到修改稿)

采用 Euler 四元数表示的 Kirchhoff 方程来研究受力挤压作用下的弹性细杆的拓扑构形, 进一步研究弹性细杆的力学性质, 将得到的微分方程与约束条件组成微分代数方程后再转化为微分方程规范形式以便求解; 为满足边界条件, 应用数值打靶法求解边值条件, 并将弹性细杆在力作用下的拉压过程用 Matlab 仿真出来. 同时对由于误差导致的违约现象进行处理, 并针对欧拉参数的特征, 选取合适的修正系数以保持方程的稳定性.

关键词: DNA, Euler 四元数, Kirchhoff 方程, 弹性细杆, 违约修正

PACC: 0200, 0340D, 8715B

## 1. 引 言

早在 1730 年, Daniel Bernoulli 和 Euler 就开展了对弹性杆力学问题的研究. Kirchhoff 于 1859 年<sup>[1]</sup>利用弹性杆静力学与刚体动力学的相似性建立了描述弹性圆截面细杆在无轴向变形、无体积力、杆间接触力情况下静力学的动力学相似理论基础. 弹性杆的平衡和稳定有着广泛的应用背景: 如电缆、绳索、纤维、攀藤植物的细茎、人体毛细血管都可以作为弹性细杆的力学模型. 20 世纪中期以来, 随着 DNA 基础理论研究的不断发展, DNA 的双螺旋结构又被抽象为具有初始挠率的圆截面弹性细杆, 可利用经典力学的基本原理和方法来研究 DNA 三维构形, 弹性杆的杨氏模量、泊松比、截面的抗弯刚度以及抗扭刚度均可由试验来确定. 关于 DNA 弹性杆的研究已经有大量文献发表在物理和化学物理、物理化学、生物化学和高分子化学以及分子生物学等学科的刊物上, 其中大多数工作是以 Kirchhoff 理论为基础的解析研究, 如: 大尺寸结构弹性模型<sup>[2]</sup>, 受约束圆截面 DNA 的扭曲与螺旋<sup>[3]</sup>, DNA 双螺旋的扭转刚度与超螺旋统计力学<sup>[4]</sup>, 高超螺旋 DNA 弹性模型<sup>[5]</sup>, 环形 DNA 的超螺旋转变<sup>[6]</sup>, 环形 DNA 的三维形状<sup>[7]</sup>, 基因力学模型<sup>[8,9]</sup>, 考虑到杆间自接触的如: DNA 超螺旋的有限元分析<sup>[10]</sup>, DNA 超螺旋自接触模型<sup>[11]</sup>; 有限长

Kirchhoff 弹性杆的边值问题<sup>[12]</sup>; 国内最新讨论了受曲面约束弹性细杆的平衡问题<sup>[13]</sup>, 从动力学的观点讨论了弹性细杆的平衡稳定性<sup>[14]</sup>. 人体中的 DNA 可长达 1—2 m, 而分子的螺旋半径约为 2 nm, 因此弹性细杆所描述的不是传统弹性力学的研究对象, 而是有一定刚性而又可以卷曲的 DNA 分子.

DNA 的复制与转录能力与 DNA 分子局部的弹性力学性质有着密切的关系<sup>[15]</sup>, 细长的弹性分子被挤压在核小体内, 这将导致分子构形的变化, 同样与蛋白质分子的缠绕与挤压也将有同样的现象产生; 为此, 本文建立了 DNA 弹性细杆受力挤压情况下的一般模型.

本文首先建立欧拉参数形式的 Kirchhoff 方程, 并与系统的约束方程组成微分代数方程; 为求解微分代数混合方程, 采用增广法进一步将此混合方程转化为标准的纯微分方程, 为满足系统的边界条件, 对纯微分方程进行打靶法, 同时对由于误差导致的违约进行修正, 通过数值计算与仿真, 希望能够进一步了解 DNA 分子的一些弹性力学性质. 欧拉参数的无奇点性给方程的求解带来极大的方便; 利用欧拉参数表示的 Kirchhoff 方程使得微分方程更加简洁与规范.

## 2. 模型的提出与假设

现考虑一端部受力作用的简支—简支细长弹性

\* 国家自然科学基金项目(批准号: 10472067)资助的课题.

细杆的弯曲 如图 1 所示 杆的截面几何中心连成的空间曲线  $C$  为杆的中心线 以其中一个端点  $O$  为原点沿中心线建立弧坐标  $s$ . 则由曲线上任意一点  $P$  相对于固定点  $O$  的矢径  $r(s)$  完全确定曲线  $C$  的几何形状.

### 2.1. 基本假定

- a) 杆为均匀各向异性 本构方程为线性关系;
- b) 杆为等截面 截面沿主轴方向有相同的几何尺寸;
- c) 忽略杆的体积力以及杆与杆之间的接触力;
- d) 杆存在着初始曲率与挠率;
- e) 杆的长度和曲率半径远远大于截面的尺寸;
- f) 杆无伸长或缩短 任意二截面沿中心线的距离不变.

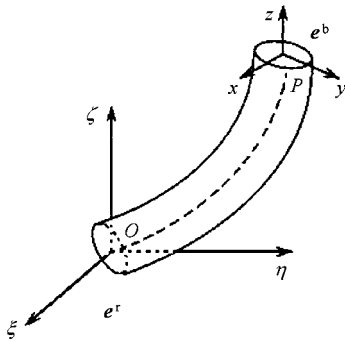


图 1 弹性细杆的空间姿态

### 2.2. 平衡方程

如图 1 所示 以  $O$  点为原点建立空间固定的直角坐标系  $(O-\xi\eta\zeta)$  参考基  $e^r$ ; 以杆中心线上的任意点  $P$  为原点 建立截面的主轴坐标系  $(P-xyz)$  连体基  $e^b$  引入  $\omega$  为  $P$  点处刚性截面相对弧坐标  $s$  的角位移变化率; 设  $P$  点处截面上作用的内力主矢和主矩分别为  $F$  和  $M$ ,  $e_3$  为  $z$  轴的基矢量. 利用微元体的平衡可以导出弹性细杆的平衡方程为

$$\begin{aligned} \frac{dF}{ds} &= 0, \\ \frac{dM}{ds} + e_3 \times F &= 0. \end{aligned} \tag{1}$$

弹性细杆本构关系:

$$M = J \cdot (\omega - \omega_0), \tag{2}$$

$J$  为惯量张量 其矩阵形式为:  $J = \begin{bmatrix} A & 0 & 0 \\ 0 & B & 0 \\ 0 & 0 & C \end{bmatrix}$ . 且

本构关系在截面连体基  $e^b$  上的坐标阵为

$$M^b = \begin{bmatrix} A & 0 & 0 \\ 0 & B & 0 \\ 0 & 0 & C \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \omega_1 - \omega_0^1 \\ \omega_2 - \omega_0^2 \\ \omega_3 - \omega_0^3 \end{pmatrix}, \tag{3}$$

$A, B, C$  分别为截面绕  $x$  轴和  $y$  轴的抗弯刚度以及绕  $z$  轴的抗扭刚度.  $\omega_0^i = \omega_0^i(s)$  ( $i = 1, 2, 3$ ) 为细杆在无力作用 (包括力与力偶) 状态下存在的弯扭度分量<sup>[13]</sup> 即杆存在着初始曲率和挠率.

由力平衡方程 得到截面作用力主矢为一常量:

$$F = F_0. \tag{4}$$

力矩平衡方程在截面连体基  $e^b$  上的表达式为

$$\frac{dM}{ds} + \omega \times M + e_3 \times F_0 = 0, \tag{5}$$

即

$$J \cdot (\omega' - \omega_0') + \omega \times J \cdot (\omega - \omega_0) + e_3 \times F_0 = 0. \tag{6}$$

其在截面连体基的矩阵式为

$$J(\omega - \omega_0') + \tilde{\omega} J(\omega - \omega_0) + \tilde{e}_3 F_0 = 0. \tag{7}$$

### 2.3. 欧拉参数标准形式的 Kirchhoff 方程

定义欧拉四元数  $q$  其导数为  $Q$  并引入  $L$  与  $R$ <sup>[16]</sup>,

$$q = \begin{bmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \\ q_4 \end{bmatrix}, Q = \begin{bmatrix} \dot{q}_1 \\ \dot{q}_2 \\ \dot{q}_3 \\ \dot{q}_4 \end{bmatrix} \text{ 并满足}$$

$$q^T q = 1, \tag{8}$$

$$\begin{aligned} L &= \begin{bmatrix} q_4 & q_3 & -q_2 & -q_1 \\ -q_3 & q_4 & q_1 & -q_2 \\ q_2 & -q_1 & q_4 & -q_3 \end{bmatrix}, \\ R &= \begin{bmatrix} q_4 & -q_3 & q_2 & -q_1 \\ q_3 & q_4 & -q_1 & -q_2 \\ -q_2 & q_1 & q_4 & -q_3 \end{bmatrix}. \end{aligned} \tag{9}$$

参考基  $e^r$  与连体基  $e^b$  之间的方向余弦阵

$$A^{br} = RL^T, A^{br} = LR^T. \tag{10}$$

在连体基  $e^b$  上弯扭度  $\omega^b$  的表达为<sup>[11]</sup>

$$\begin{aligned} \omega^b &= 2L(q)Q, Q = \frac{1}{2}L^T(q)\omega^b, \\ \tilde{\omega}^b &= 2L(q)L^T(Q). \end{aligned} \tag{11}$$

欧拉四元数表达的 Kirchhoff 方程的标准形式 (无量纲化)

$$q' = Q', q' = Q, Q' = S \text{ 或}$$

$$\begin{aligned} Q' &= \frac{1}{2} L^T(Q) \omega + \frac{1}{2} L^T(q) \omega', \\ r'^r &= R(q) L^T(q) e_3^b. \end{aligned} \quad (12)$$

在上式中,  $\omega = \omega^b = 2L(q)Q$ ,  $e_3^b = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ ,  $\mu = \frac{B}{A}$ ,  $\nu =$

$\frac{C}{A}$ , 由(7)得到

$$\begin{aligned} \omega' &= -J^{-1}[\tilde{\omega} J(\omega - \omega_0) + \tilde{e}_3 A^b F_0^r], \\ \tilde{e}_3 &= \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, J = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \mu^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & \nu^{-1} \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

### 3. 微分代数方程的混合问题

由(12)可以得出系统方程的一般形式:

$$\ddot{q} = S(q, \dot{q}), \quad (13)$$

并与条件(8)组合为微分代数方程:

$$\begin{cases} \ddot{q} = S(q, \dot{q}), \\ \Phi(q) = q_1^2 + q_2^2 + q_3^2 + q_4^2 - 1 = 0. \end{cases} \quad (14)$$

下面将采用直接增广法将微分代数方程的混合问题转化为纯微分方程而求解. 系统变分形式的方程为

$$\delta q^T(-\ddot{q} + S(q, \dot{q})) = 0. \quad (15)$$

将(14)中的约束方程进行变分后转置

$$\delta q^T \Phi_q^T = 0. \quad (16)$$

设  $\lambda$  为与约束方程  $\Phi(q) = 0$  相对应的拉格朗日乘子,  $\Phi_q$  为约束方程关于欧拉四元数  $q$  的 Jacobi 矩阵. 将(16)乘以  $\lambda$  与(15)相减得到

$$\delta q^T(-\ddot{q} - \Phi_q^T \lambda + S(q, \dot{q})) = 0. \quad (17)$$

由此得出带有拉格朗日乘子的微分方程

$$\ddot{q} + \Phi_q^T \lambda = S(q, \dot{q}), \quad (18)$$

将  $\Phi(q) = 0$  对弧坐标  $s$  求一阶和二阶导数得

$$\Phi_q \dot{q} = -\Phi_s, \quad (19)$$

$$\Phi_q \ddot{q} = \gamma, \quad (20)$$

其中  $\gamma = -(\Phi_q \dot{q})_q \dot{q} - 2\Phi_{qt} \dot{q} - \Phi_{tt}$ .

微分方程(18)和约束方程的二阶导数式可合写成

$$\begin{bmatrix} I & \Phi_q^T \\ \Phi_q & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ddot{q} \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S \\ \gamma \end{bmatrix}. \quad (21)$$

由(18)式可以得到  $\ddot{q} = S - \Phi_q^T \lambda$  并代入(20)式得出

$$\Phi_q(S - \Phi_q^T \lambda) = \gamma, \quad (22)$$

求得拉格朗日乘子  $\lambda$  为

$$\lambda = (\Phi_q \Phi_q^T)^{-1} (\Phi_q S - \gamma). \quad (23)$$

将上式代入(18)式, 可以得出类似于(13)的纯微分方程

$$\ddot{q} = S^*(q, \dot{q}), \quad (24)$$

其中  $S^* = S - \Phi_q^T (\Phi_q \Phi_q^T)^{-1} (\Phi_q S - \gamma)$ .

考虑到力的因素, 微分方程(12)变化为

$$\begin{aligned} q' &= Q, \\ Q' &= S^*, \\ r'^r &= R(q) L^T(q) e_3^b, \end{aligned} \quad (25)$$

$$F'^\gamma = 0.$$

其中  $S^* = S - \Phi_q^T (\Phi_q \Phi_q^T)^{-1} (\Phi_q S - \gamma)$ ,

$$S = \frac{1}{2} L^T(Q) \omega + \frac{1}{2} L^T(q) \omega'.$$

另外, 由约束方程知道:  $\Phi_q = \mathcal{X}(q_1, q_2, q_3, q_4)$ ,

$$\gamma = -\mathcal{X}(q_1^2 + q_2^2 + q_3^2 + q_4^2).$$

到此, 将(14)转化为封闭的纯微分方程(25), 完成了对系统微分代数混合方程的处理.

### 4. 违约校正

在数值积分方程(24)的过程中, 由于积分误差的影响, 得到的  $q$  与  $\dot{q}$  不能满足约束方程(14)与(19), 出现违约现象, 必须加以校正. Baumgarte<sup>[17]</sup>约束违约稳定法的原理是引入反馈控制理论, 在方程中加入修正项, 通过对  $q$  与  $\dot{q}$  的间接校正, 以达到违约校正的目的. 对于扰动方程:  $\ddot{\Phi} = 0$ , 当受到扰动后, 解  $\Phi = 0$  有可能发散, 即意味(14)与(19)式中的误差超过给定的精度. 若加上反馈回路, 方程变为

$$\ddot{\Phi} + 2\alpha\dot{\Phi} + \beta^2\Phi = 0. \quad (26)$$

通过引入正参数  $\alpha$  与  $\beta$ , 使得微分系统在  $\Phi = 0$  解渐进稳定. 则相应的违约校正形式的微分方程为

$$\begin{bmatrix} I & \Phi_q^T \\ \Phi_q & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ddot{q} \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S \\ \gamma - 2\alpha\dot{\Phi} - \beta^2\Phi \end{bmatrix}. \quad (27)$$

故将(25)式中相应的  $\gamma$  换成  $\gamma^*$ , 即可得出弹性杆满足约束方程的微分形式. 其中  $\gamma^* = \gamma - 2\alpha\dot{\Phi} - \beta^2\Phi$ . 显然, 当  $\alpha = \beta = 0$  时(27)式退化为(21)式. 当  $\alpha, \beta \neq 0$  时, 校正项的引入使得数值解在精确解附近振荡, 其振荡频率依赖于  $\alpha$  与  $\beta$  的选取. 考虑到欧拉四元数的值较小, 在选取  $\alpha$  与  $\beta$  时应取较小的正整数, 以维持微分系统的稳定. 另外, 考虑到(25)式, 将(27)式中的  $S$  换为  $S^*$  即可. 到此, 完成了在直接增广法基础上的约束违约校正.

### 5. 微分方程边值问题与数值模拟

考虑到弹性细杆要满足初始条件与端点条件

#### 5.1. 打靶法初始条件

$$r'(0) = (0 \ 0 \ 0)^T, Q(0) = (0 \ 0 \ 0 \ 0)^T, F_y(0) = 0, x = (q_1 \ q_2 \ q_3 \ q_4 \ F_x \ F_z)^T. \quad (28)$$

#### 5.2. 打靶法端点条件

杆的末端位置：

$$r'(L) = (H_x \ 0 \ H_z)^T, \quad (29)$$

平衡力条件： $M(L) = 0$ ，即

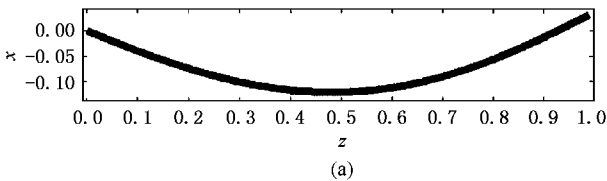
$$\begin{aligned} \omega_1(L) - \omega_0^1 &= 0, \\ \omega_2(L) - \omega_0^2 &= 0, \\ \omega_3(L) - \omega_0^3 &= 0. \end{aligned} \quad (30)$$

#### 5.3. 纯微分方程的规范化

$$y = (q_1 \ q_2 \ q_3 \ q_4 \ Q_1 \ Q_2 \ Q_3 \ Q_4 \ r_x \ r_y \ r_z \ F_x \ F_y \ F_z)^T.$$

将微分方程(25)化为  $y = f(y, s)$  即

$$y' = \begin{bmatrix} Q \\ S^* \\ R(q)L^T(q)e_3 \\ O \end{bmatrix} \quad 0 \leq s \leq 1, \quad (31)$$



(a)  $\lambda(1) = (0.031682 \ 0 \ 0.98911)^T$

### 5.4. 数值计算程序框图

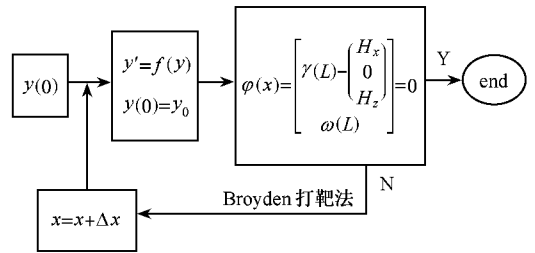


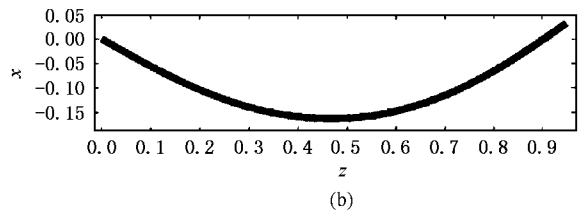
图 2 打靶法流程示意图

图 2 中  $x = (q_1 \ q_2 \ q_3 \ q_4 \ F_x \ F_z)^T$ .

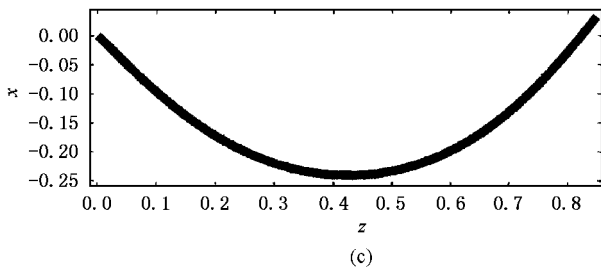
#### 5.5. 数值试验与图示弹性细杆的弯曲

由于 DNA 分子的微观尺寸，可以将其弯曲看作平面内的行为：DNA 弹性细杆端部受压力作用，细杆的两端均为简支，在  $x-z$  平面内将细杆的末端从初始位置向左移动，细杆的弯曲变形如下列图所示。细杆将最终形成 8 字形的形状如图 3(a)–3(j)所示。采用 Matlab 编制计算程序并画出图形。在算例中，取各参数如下：

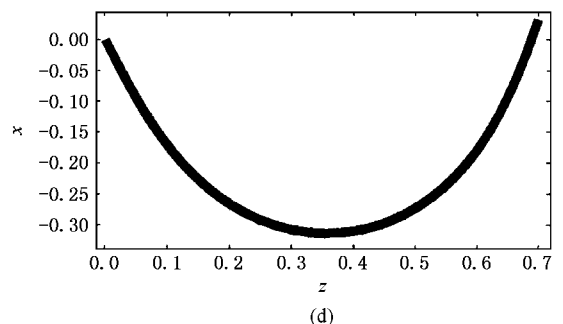
$$\mu = \frac{B}{A} = 1, \nu = \frac{C}{A} = 1, \alpha = 2, \beta = 3.$$



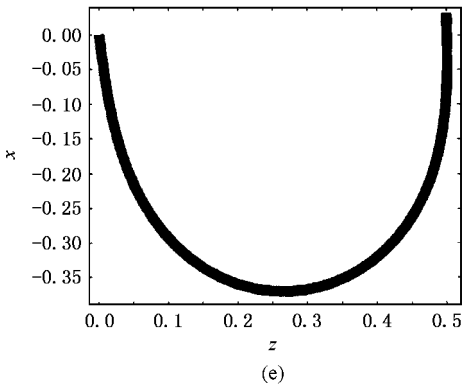
(b)  $\lambda(1) = (0.031682 \ 0 \ 0.94911)^T$



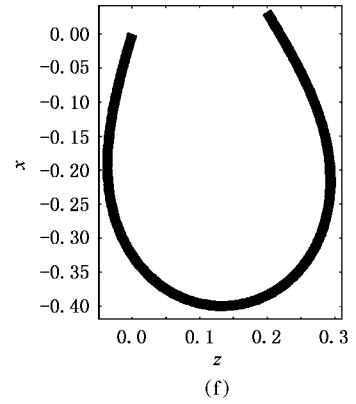
(c)  $\lambda(1) = (0.031682 \ 0 \ 0.84911)^T$



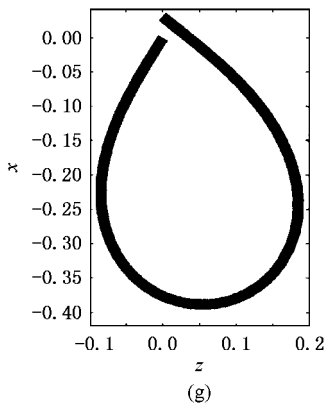
(d)  $\lambda(1) = (0.031682 \ 0 \ 0.69911)^T$



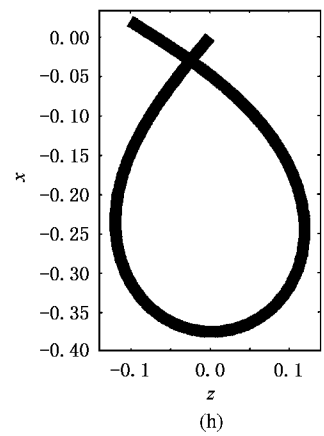
$$(e)(1) = (0.031682 \quad 0 \quad 0.49911)^T$$



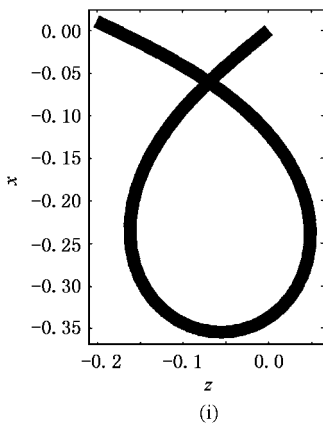
$$(f)(1) = (0.031682 \quad 0 \quad 0.19911)^T$$



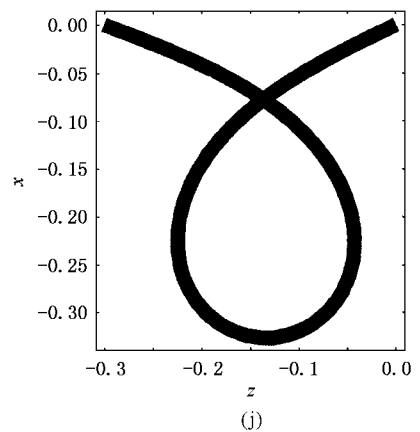
$$(g)(1) = (0.030682 \quad 0 \quad -0.00089)^T$$



$$(h)(1) = (0.020682 \quad 0 \quad -0.10089)^T$$



$$(i)(1) = (0.010682 \quad 0 \quad -0.20089)^T$$



$$(j)(1) = (0.000682 \quad 0 \quad -0.30089)^T$$

图 3 弹性细杆数值模拟的拓扑构形



## 6. 结 论

在将细杆的末端从初始位置向左移动的过程中,细杆的起始端位置始终固定在  $O$  点,由于细杆是用铰链固定,所以可以绕  $O$  点转动,这样最终细

杆在拉压力作用下变化成 8 字形的形状,显然, DNA 弹性杆的可拉压性预示着 DNA 分子的可压缩性能,将细长的 DNA 分子压缩在极小的空间内具有结构和功能的意义,不仅能包装诸如蛋白质分子等,而且能够为复制、转录、翻译等生物过程储存必要的能量.

- [ 1 ] Kirchhoff G 1859 *J. Rein. Angew. Math.* **56** 285
- [ 2 ] Benham C J 1979 *Biopolymers* **18** 609
- [ 3 ] Le Bret M 1979 *Biopolymers* **18** 1709
- [ 4 ] Vologodskii A V, Anshelevich V V and Lukashin A V, Frank-Kamenetskii M D 1979 *Nature* **280** 294
- [ 5 ] Tsuru H and Wadasi M 1986 *Biopolymers* **25** 2083
- [ 6 ] Juelicher F 1994 *Phys. Rev. E* **49** 2429
- [ 7 ] Starostin E L 1996 *Meccanica* **31** 235
- [ 8 ] Liu Y Z 2002 *J. Shanghai Jiaotong Univ.* **36** 1587 ( in Chinese )  
[ 刘延柱 2002 上海交通大学学报 **36** 1587 ]
- [ 9 ] Liu Y Z 2003 *Mechanics in Engineering* **25** 1 ( in Chinese ) [ 刘延柱 2003 力学与实践 **25** 1 ]
- [ 10 ] Yang Y, Irwin T and Wilma K O 1993 *J. Chem. Phys.* **98** 1673
- [ 11 ] Timothy P, Irwin T and Wilma K O 1997 *J. Chem. Phys.* **107** 3967
- [ 12 ] Alexandre F and Marcus A M 2003 *Physica D* **181** 53
- [ 13 ] Xue Y, Chen L Q and Liu Y Z 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 2040 ( in Chinese ) [ 薛 纭、陈立群、刘延柱 2004 物理学报 **53** 2040 ]
- [ 14 ] Liu Y Z, Xue Y and Chen L Q 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 2424 ( in Chinese ) [ 刘延柱、薛 纭、陈立群 2004 物理学报 **53** 2424 ]
- [ 15 ] Suo J, Fan X J and Yang G T 1998 *Advances in Mechanics* **28** 532 [ 索 瑾、樊学军、杨桂通 1998 力学进展 **28** 532 ]
- [ 16 ] Hong J Z 1999 *Computational Dynamics of Multibody Systems* ( Beijing : Higher Education Press ) p33, p54 ( in Chinese ) [ 洪嘉振 1999 计算多体系统动力学(北京:高等教育出版社) p33, p54 ]
- [ 17 ] Baumgarte E 1972 *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* **1** 1

# Solution of the Kirchhoff equation for thin elastic rod under bending by constraint violation correction method<sup>\*</sup>

Huang Lei Bao Guang-Wei Liu Yan-Zhu

( Department of Engineering Mechanics , Shanghai Jiaotong University , Shanghai 200240 , China )

( Received 3 September 2004 ; revised manuscript received 20 October 2004 )

## Abstract

To further study the mechanical property of a thin elastic rod , this paper will employ the Kirchhoff equation which takes the form of Euler quaternion and study the topological configuration of the rod under compression. Adding the constraint condition to the differential equation , we can get a differential-algebraic equation( DAE ). In order to be solved easily , DAE will be transformed into a criterion form. To satisfy the boundary condition , we apply the shooting technique to get the solution satisfying the boundary condition , and imitate the procedure of pulling and pressing of thin elastic rod suffering a force. Simultaneously to deal with the constraint stabilization phenomenon which is caused by errors , and according to the Euler quaternion character , we select a proper correction coefficient to keep the stability of the differential equation.

**Keywords** : DNA , Euler quaternion , Kirchhoff equation , elastic rod , constraint violation correction

**PACC** : 0200 , 0340D , 8715B

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China( Grant No. 10472067 ).