

MODELOWANIE UKŁADÓW WIELOCZŁONOWYCH

Metody obliczeniowe dynamiki

Metody całkowania RRA. Część I

Opracowanie wykładu było współfinansowane przez Unię Europejską
w ramach Europejskiego Funduszu Społecznego, poprzez realizację projektu
Program rozwoju dydaktycznego Wydziału Mechanicznego Energetyki i Lotnictwa Politechniki Warszawskiej

Plan wykładu



- Definicja układu RRA, pojęcie indeksu różniczkowego
- RRA jako układy sztywne
- Całkowanie bezpośrednie układów RRA o różnym indeksie
- Całkowanie RRA jako RRZ we współrzędnych zależnych
- Całkowanie RRA jako RRZ we współrzędnych niezależnych
- Całkowanie RRA z zastosowaniem macierzy pseudoinwersji
- Przegląd dostępnych procedur ogólnego przeznaczenia



Definicje RRA



Układ RRA jest konsekwencją opisu układu we współrzędnych uogólnionych zależnych (pojawiają się równania więzów). W ogólnym przypadku RRA można zapisać (zagadnienie początkowe) w postaci niejawnej (uwikłanej):

$$\mathbf{F}(\dot{\mathbf{y}}, \mathbf{y}, t) = \mathbf{0} \quad \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0$$

Zakładamy, że \mathbf{F} i \mathbf{y} mają ten sam wymiar i są różniczkowalne tą samą liczbę razy. Macierz $\mathbf{F}_{\dot{\mathbf{y}}}$ może być osobliwa (!).

W dynamice UW równania te mają na ogół prostszą (znaną już postać):

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{q}} - \mathbf{v} = \mathbf{0} \\ \mathbf{M}\dot{\mathbf{v}} + \mathbf{\Phi}_q^T \boldsymbol{\lambda} = \mathbf{Q} \\ \mathbf{\Phi}(\mathbf{q}, t) = \mathbf{0} \end{cases}$$

Jeśli \mathbf{M} jest dodatnio określona to powyższe jest RRA w postaci *półjawnej*. Obie powyższe formy RRA są najczęściej dyskutowane w piśmiennictwie przedmiotu

Indeks różniczkowy RRA



Pojęcie indeksu RRA: Indeks różniczkowy RRA to minimalna liczba różniczkowań względem czasu niektórych lub wszystkich RRA potrzebna aby wyznaczyć $\dot{\mathbf{y}}$ jako ciągłą funkcję (\mathbf{y}, t) . W równaniach powyższych wymagane są wyrażenia dla $\dot{\mathbf{q}}$, $\dot{\mathbf{v}}$, $\dot{\lambda}$. Jeśli liczba różniczkowań jest równa 0 to RRA ma indeks równy 0. RRA o indeksie 0 to RRZ. Jeśli liczba różniczkowań jest równa 1 to RRA ma indeks 1, jeśli 2 to RRA ma indeks 2 etc.

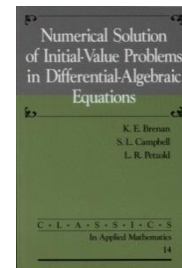
Reguła: Im wyższy indeks tym większe trudności w rozwiązaniu numerycznym RRA.

Równania Lagrange’a UW w powyższej postaci mają indeks co najwyżej równy 3 (dlatego oznaczono je I3).

Przykład: Pokazać, że równania ruchu RRA wahadła fizycznego mają indeks równy 3.

Należy wykonać następujące czynności:

- zróżniczkować dwukrotnie równania więzów (to 2 różniczkowania)
- Obliczyć zmienne $\dot{\mathbf{q}}$, $\dot{\mathbf{v}}$ z RR i podstawić do równań więzów
- Zróżniczkować otrzymane równanie jednokrotnie względem czasu (3 róż.)



Metody i procedury całkowania RRA - podział



Metody rozwiązywania RRA (wybrane):

1. Bezpośrednie zastosowanie schematów numerycznych do równań I3 (ale który schemat ?) (nazywane dalej całkowaniem bezpośrednim równań RRA I3)
2. Przekształcenie RRA do postaci o niższym indeksie (I2 lub I1) i zastosowanie schematu numerycznego (ale, który schemat ?) (nazywane dalej całkowaniem bezpośrednim RRA I1 lub I2)
3. Przekształcenie RRA do postaci RRZ i rozwiązanie RRZ dostępnymi procedurami
4. Zastosowanie technik rozwiązywania w sensie minimalnokwadratowym (zwłaszcza w przypadkach niejednoznaczności gdy np. więzy są zależne).

Czy istnieją procedury biblioteczne ogólnego przeznaczenia ?:

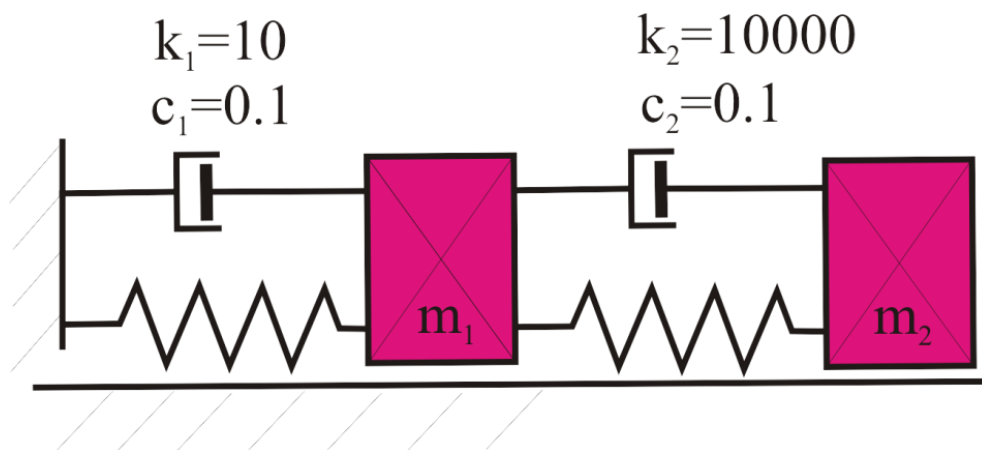
- Jeśli RRA zapisane są w postaci I1 to istnieje wiele procedur (jedna z najstarszych to DASSL). Jeśli RRA zapisane są w postaci I2 to liczba dostępnych procedur jest mniejsza (np. RADAU, RADAU 5)
- Całkowanie numeryczne RRA I3 lub wyższym, to ciągle problem badawczy, istniejące kody mają charakter eksperymentalny

Całkowanie bezpośrednie RRA, układy sztywne



Przy całkowaniu bezpośrednim układy RRA mają cechy RRZ źle uwarunkowanych (równań „sztywnych” ang. „stiff”).

Intuicja układów RRZ sztywnych:



Układ sztywny z powodów „fizycznych”

Układ sztywny z powodów „fizycznych”:

- Drgania z wysokimi i niskimi częstotliwościami (gdy iloraz mas i sztywności mały)
- Wysokie częstotliwości i małe tłumienie (drgania o tych częstotliwościach trwają długo)

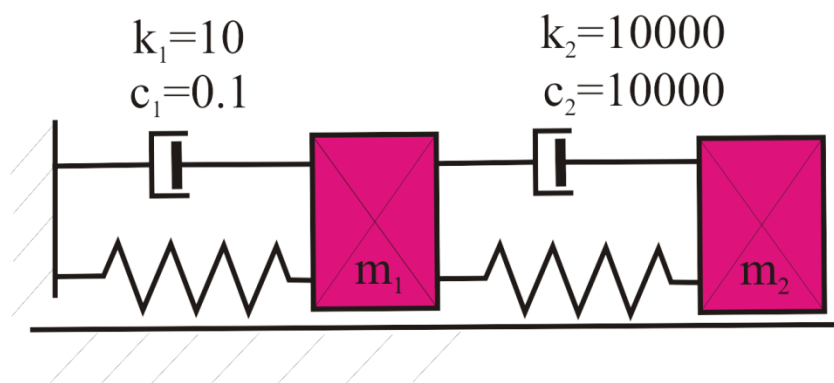


Całkowanie bezpośrednie RRA, układy sztywne



Przy całkowaniu bezpośrednim układy RRA mają cechy RRZ źle uwarunkowanych (równań „sztywnych” ang. „stiff”).

Intuicja układów RRZ sztywnych:



Układ sztywny z powodów „numerycznych”

Układ sztywny z powodów „numerycznych”:

- Drgania z wysokimi i niskimi częstotliwościami (gdy iloraz mas i sztywności mały) jak poprzednio
- Silnie tłumione drgania o wysokiej częstotliwości ω_2 – szybko zanikają
- Tylko drgania o niskiej częstotliwości ω_1 trwają długo
- System jest klasyfikowany jako sztywny gdy:

$$\frac{\omega_2}{\omega_1} \geq 200$$



Całkowanie bezpośrednie RRA sztywne

Z praktyki i teorii metod numerycznych wiadomo, że:

- Wszystkie metody numeryczne całkowania mają trudności z całkowaniem układów sztywnych z powodów fizycznych (całkowanie wymaga małego kroku w długim czasie)
- Układy sztywne z powodów numerycznych wymagają dedykowanych algorytmów całkowania (o tzw. dużym obszarze stabilności absolutnej)

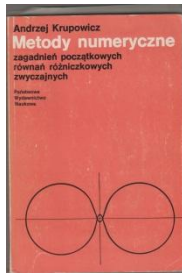
Problem: Które schematy numeryczne zaimplementować:

Ogólny podział metod całkowania:

- Jawne albo niejawne
- Przeznaczone do całkowanie równań sztywnych i takie, które są mało efektywne w takich przypadkach


Inny podział:

Jednokrokowe vs. wielokrokowe, stały albo zmienny krok, stały albo zmienny rząd



Notka: wielokrokowe metody jawne


Równanie całkowane: $\dot{y} = f(t, y), y(t_0) = y_0$

Metoda **jawna wielokrokowa**: $y_{n+1} = \sum_{j=0}^p \alpha_j y_{n-j} + h \sum_{j=0}^p \beta_j \dot{y}_{n-j}$ 

Przykład: metoda pierwszego rzędu (schemat jawny Eulera): $y_{n+1} = y_n + h\dot{y}_n$

Zalety i wady: metoda szybka (rozwiązanie nie wymaga iteracji), aproksymuje rozwiązanie tylko na podstawie historii, ograniczenia na krok całkowania (stabilność) !

Zastosowania: gładkie przebiegi, dokładność nie jest istotna, funkcja f może być obliczeniowo pracochłonna

Metoda **niejawna wielokrokowa**: $y_{n+1} = \sum_{j=0}^p \alpha_j y_{n-j} + h \sum_{j=-1}^p \beta_j \dot{y}_{n-j}$ 

Przykład: metoda pierwszego rzędu (schemat niejawny Eulera):

$$y_{n+1} = y_n + h\dot{y}_{n+1}$$

Notka: wielokrokowe metody niejawne

Zalety i wady: metoda stabilna (aktualna wartość funkcji jest brana pod uwagę) ale wymaga iteracji (równanie nieliniowe) a iteracje mogą się niezbiegać

Zastosowania: gdy koszt obliczeń funkcji f jest niski, problemy wymagające stabilności metody, bez wymagań co do dokładności.

Dlatego do całkowania bezpośredniego RRA wybiera się metody niejawne (!)

Metoda wielokrokowa przeznaczona dla całkowania RRZ sztywnych:

$$y_{n+1} = \sum_{j=0}^p \alpha_j y_{n-j} + h \beta_0 \dot{y}_{n+1} \quad \text{Metoda I rzędu to:} \quad y_{n+1} = y_n + h \dot{y}_{n+1}$$

Proces całkowania z zastosowaniem tej metody przebiega tak:

W pętli $i=1, \dots, n$

$$t_n = t_{n-1} + h, \quad y_{n+1}^{(0)} = \sum_{k=0}^p \alpha_k y_{n-k} + h \sum_{k=0}^p \beta_k \dot{y}_{n-k} \quad \longleftarrow \text{algorytm jawny (predykcja)}$$

$$\Delta y_{n+1}^j = -(I - h \beta_0 \cdot \partial f / \partial y)^{-1} \left\{ y_{n+1}^j - h \beta_0 f(t_{n+1}, y_{n+1}^{j-1}) - \sum_{j=0}^p \alpha_j y_{n-j} \right\} \quad \longleftarrow \text{Korekcja NR}$$

Notka: metody dla równań sztywnych

Zalety i wady: metoda stabilna (aktualna wartość funkcji jest brana pod uwagę) ale wymaga kosztownych iteracji (równanie nieliniowe), macierz Jacobiego może być niedostępna w formie jawnej

Zastosowania: Układy z silnym tłumieniem, przy wymuszeniach o silnie zmiennych częstościach, może służyć do rozwiązywania zadań z dużą dokładnością ale nie tak efektywnie jak inne metody.

W problemach rozwiązywania RRA metodą całkowania bezpośredniego stosuje się w ostatnich 30 - latach **metody wstecznego różniczkowania** (BDF) oraz metody niejawne Rungego-Kutty (IRK). Powyższy schemat jest zapisem schematu BDF k-tego rzędu. W zastosowaniu do RRA I3 można przepisać wzory w postaci:

$$\dot{\mathbf{q}}_{n+1} = \frac{1}{h\beta_0} (\mathbf{q}_{n+1} - \sum_{j=0}^p \alpha_j \mathbf{q}_{n-j})$$

$$\dot{\mathbf{v}}_{n+1} = \frac{1}{h\beta_0} (\mathbf{v}_{n+1} - \sum_{j=0}^p \alpha_j \mathbf{v}_{n-j})$$

Notka: Całkowanie bezpośrednio RRA I3 BDF



Wzory te można podstawić do RRA I3:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{h\beta_0} (\mathbf{q}_{n+1} - \sum_{j=0}^p \alpha_j \mathbf{q}_{n-j}) = \mathbf{v}_{n+1} \\ \mathbf{M}(\mathbf{q}_{n+1}) \frac{1}{h\beta_0} (\mathbf{v}_{n+1} - \sum_{j=0}^p \alpha_j \mathbf{v}_{n-j}) = \mathbf{Q}_{n+1} - \Phi_{\mathbf{q}}^T(\mathbf{q}_{n+1}) \lambda_{n+1} \\ \Phi(\mathbf{q}_{n+1}, t) = \mathbf{0} \end{array} \right.$$

Jest to nieliniowe równanie algebraiczne, które może być rozwiązane metodą Newtona-Raphsona (lub innymi metodami). Metoda powyższa była jedną z pierwszych zaimplementowanych w programach komercyjnych (ADAMS). Jest także zaimplementowana w procedurze DASSL (jedna z pierwszych procedur ogólnego przeznaczenia do całkowania DASSL). W dużej liczbie problemów w analizie UW jest skuteczna. Metoda może mieć zmienny krok i zmienny rząd.



Notka: Całkowanie bezpośrednio RRA I3 BDF



Wady metody to:

- Brak kontroli błędu dla prędkości i mnożników Lagrange'a (więzy dla przyspieszeń), więzy dla prędkości mogą być naruszone (pojawiają się błędy tych więzów oraz ostre „piki” w przebiegach) (siły reakcji !)
- Dla małych kroków całkowania macierz Jacobiego w iteracjach Newtona-Raphsona staje się źle uwarunkowana
- Brak zbieżności korekcji przy mało dokładnej predykcji
- Brak zbieżności korekcji przy źle uwarunkowanej macierzy Jacobiego
- Jako metoda wielomianowa jest mało efektywna przy nagłych zmianach zmiennych i więzów (nieciągłe przebiegi).
- Metoda nie jest samostartująca

Postulat: Zapisać równania ruchu w równoważnej analitycznie formie układu o niższym indeksie I2 albo nawet I1 (tzw. redukcja indeksu równań). I otrzymany układ powtórnie całkować przedstawionymi algorytmami.

Zadanie: Zastosuj schemat BDF do równania wahadła z przykładu



Całkowanie bezpośrednie, redukcja indeksu



Redukcja wprost przez jednokrotne zróżniczkowanie równań więzów. Otrzymujemy RRA I2

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{q}} - \mathbf{v} = \mathbf{0} \\ \mathbf{M}\dot{\mathbf{v}} + \Phi_{\mathbf{q}}^T \boldsymbol{\lambda} = \mathbf{Q} \\ \Phi_{\mathbf{q}} \mathbf{v} + \Phi_t = \mathbf{0} \end{cases}$$

Redukcja wprost przez dwukrotne zróżniczkowanie równań więzów. Otrzymujemy RRA I1

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{q}} - \mathbf{v} = \mathbf{0} \\ \mathbf{M}\dot{\mathbf{v}} = -\Phi_{\mathbf{q}}^T \boldsymbol{\lambda} + \mathbf{Q} \\ \Phi_{\mathbf{q}} \dot{\mathbf{v}} - \boldsymbol{\Gamma} = \mathbf{0} \end{cases} \quad \text{lub macierzowo:} \quad \begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{M} & \Phi_{\mathbf{q}}^T \\ \mathbf{0} & \Phi_{\mathbf{q}} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{\mathbf{q}} \\ \dot{\mathbf{v}} \\ \boldsymbol{\lambda} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{v} \\ \mathbf{Q} \\ \boldsymbol{\Gamma} \end{bmatrix}$$

Gdy zapomniłeś co przedstawia wektor $\boldsymbol{\Gamma}$, zajrzyj do równań kinematyki !.



Komentarz:

1. Z teorii wiadomo, że gdyby zastosować schemat BDF do RRA I1 to metoda jest stabilna i zbieżna przy zmiennym rzędzie i przy zmiennym kroku (pod warunkiem, że warunki początkowe spełniają równania więzów z wystarczającą dokładnością).
2. Przy powyższych metodach redukcji uzyskane rozwiązanie może nie leżeć na hiperpowierzchni więzów. W trakcie numerycznego całkowania następuje naruszenie więzów (tzw. ang. efekt *drift-off*), a uzyskany błąd położenia względem powierzchni więzów może narastać nawet kwadratowo. **Zrózniczkowane równania więzów nie są równoważne w sensie numerycznym więzom pierwotnym.**
3. Z punktu widzenia stabilności, własności układu o zredukowanym indeksie nie odpowiadają własnościom układu pierwotnego o indeksie równym
4. W praktyce stosuje się bardziej wyszukane metody redukcji indeksu

Redukcja indeksu z czynnikiem stabilizującym



Redukcja poprzez dodanie równania więzów dla prędkości i dodatkowego czynnika. Otrzymujemy RRA SI2 (S – oznacza stabilizację):

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{\mathbf{q}} = \mathbf{v} + \Phi_{\mathbf{q}}^T \boldsymbol{\mu} \\ \mathbf{M} \dot{\mathbf{v}} = -\Phi_{\mathbf{q}}^T \boldsymbol{\lambda} + \mathbf{Q} \\ \Phi(\mathbf{q}, t) = \mathbf{0} \\ \Phi_{\mathbf{q}} \mathbf{v} = -\Phi_t \end{array} \right.$$

Nowy czynnik
stabilizujący

Dodatkowe równanie

Dalsza redukcja poprzez dodanie równania więzów dla prędkości i dodatkowego czynnika zależnego różniczkowo od pozostałych. Otrzymujemy RRA SI1:

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{\mathbf{q}} = \mathbf{v} + \Phi_{\mathbf{q}}^T \dot{\mathbf{k}} \\ \mathbf{M} \dot{\mathbf{v}} = \mathbf{Q} - \Phi_{\mathbf{q}}^T \dot{\boldsymbol{\sigma}} \\ \Phi(\mathbf{q}, t) = \mathbf{0} \\ \Phi_{\mathbf{q}} \mathbf{v} = -\Phi_t \end{array} \right.$$

Pochodna czynnika

Pochodna mnożnika
Lagrange'a



Całkowanie bezpośrednio redukcja indeksu



Komentarz:

1. Pomysł pochodzi z pracy [Gear, Gupta Leimkuhler (1985)]
2. Powyższe techniki redukcji zaimplementowano w programie komercyjnym ADAMS.
3. Zalety całkowania bezpośredniego RRA SI2 w zestawieniu z RRA I3 (według autorów algorytmów ADAMS-a):
 - Spełnione są równania więzów dla położeń i dla prędkości (brak szumu widocznego w całkowaniu RRA I3)
 - Korekcja odbywa się względem kroku całkowania mnożonego przez czynniki
 - Nie występuje problem złego uwarunkowania macierzy Jacobiego przy małym kroku
 - Brak „pików” w przebiegach prędkości i przyspieszeń

Zadanie: Zastosuj schemat BDF do równania wahadła z przykładu zapisanego w postaci RRA SI2. Porównaj wyniki z wynikami zadania poprzedniego



Całkowanie bezpośrednio redukcja indeksu



Komentarz: Oto poglądowe zestawienie różnych skuteczności całkowania bezpośredniego odmianą schematu BDF RRA w formie I3 - SI2 - SI1:

	Indeks 3	Indeks 2 ze stabilizacją SI2	Indeks 1 ze stabilizacją SI1
Dokładność	q : wysoka v, q̇ : warunkowo	q, v, q̇ : wysoka	q, v, q̇, λ : wysoka
Odporność na całkowanie z małym krokiem	średnia	duża	duża
Tolerancja dla zmian w modelu	duża	średnia	mała
wydajność	duża	średnia	średnia
Śledzenie wysokich częstotliwości	umiarkowane	dobrze	najlepsze

Według materiałów szkoleniowych firmy MSC.Software

Zadanie: Na podstawie rozwiązań poprzednich zadań spróbuj sformułować swoje wnioski



Całkowanie RRZ (indeks 1): współrzędne zależne



Metoda 1: Najprostsza – przekształcenie do indeksu 1 i traktowanie jak równanie RRZ

$$\begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{M} & \Phi_q^T \\ \mathbf{0} & \Phi_q & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{\mathbf{q}} \\ \dot{\mathbf{v}} \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{v} \\ \mathbf{Q} \\ \Gamma \end{bmatrix}$$

Najprostsza – równanie liniowe względem $\begin{bmatrix} \dot{\mathbf{q}}^T & \dot{\mathbf{v}}^T & \lambda^T \end{bmatrix}^T$ (macierz rzadka)

można także wyeliminować mnożniki Lagrange'a (jeśli macierz bezwładności jest dodatnio określona) otrzymując:

$$\dot{\mathbf{v}} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{Q} - \mathbf{M}^{-1}\Phi_q^T\lambda \quad \longleftarrow \quad \text{Z równania 2 powyżej} \quad (\text{a})$$

$$\Phi_q \mathbf{M}^{-1}\Phi_q^T\lambda = \Phi_q \mathbf{M}^{-1}\mathbf{Q} - \Gamma \quad \longleftarrow \quad \text{Po wstawieniu do 3} \quad (\text{b})$$

Wyznaczamy λ z równania (b) i wstawiamy do (a) potem całkujemy jak RRZ.



Całkowanie współrzędne zależne: stabilizacja



Metoda 1: Bardzo efektywna numerycznie ale występuje efekt naruszenia więzów dla położen o którym była już mowa (*drift-off*) Przyczyna:

Równanie więzów dla przyspieszeń i jego rozwiązanie:

$$\ddot{\Phi} = \mathbf{0} \Rightarrow \Phi = \mathbf{C}_1 t + \mathbf{C}_2 \quad \text{Równanie niestabilne, błąd narasta}$$

Pomysł (tzw. stabilizacja Baumgarte'a [1972]): zmodyfikować równanie więzów dla przyspieszeń :

$$\ddot{\Phi} + 2\alpha\dot{\Phi} + \beta^2\Phi = \mathbf{0} \Rightarrow \Phi = \mathbf{C}_1 e^{s_1 t} + \mathbf{C}_2 e^{s_2 t} \quad \text{Teraz nie, jeśli } \alpha \text{ i } \beta \text{ odpowiednio dobrane. Nie ma reguły; sugerują:}$$

$$\alpha = \beta = (1 \text{ do } 20)$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{M} & \Phi_q^T \\ \mathbf{0} & \Phi_q & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{\mathbf{q}} \\ \dot{\mathbf{v}} \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{v} \\ \mathbf{Q} \\ \Gamma - 2\alpha\dot{\Phi} - \beta^2\Phi \end{bmatrix}$$

← **Metoda 2: (modyfikacja 1)**
Prosta i skuteczna



Całkowanie współrzędne zależne: projekcja



Metoda 3: Metoda rzutowa (eliminacja mnożników Lagrange'a).

Pomysł – znajdujemy macierz \mathbf{D} zwaną macierzy projekcji taką, że (na przykładzie więzów skleronomicznych):

$$\Phi_q \dot{\mathbf{q}} = \mathbf{0} \quad \Phi_q \mathbf{D} = \mathbf{0}$$

$$\mathbf{v} = \dot{\mathbf{q}} = \mathbf{D}\dot{\mathbf{z}}$$

\mathbf{D} jest macierzą dopełnienia ortogonalnego przestrzeni złożonej z wektorów wierszy macierzy Φ_q Jacobiego w przestrzeni liniowej n – wymiarowej. Wektor \mathbf{z} ma wymiar $(N-m) \times 1$ (!)

Równanie RRA I1 ma postać RRZ (ponownie układ liniowy wymiary $N \times N$):

$$\begin{bmatrix} \mathbf{D}^T \mathbf{M} \\ \Phi_q \end{bmatrix} \ddot{\mathbf{q}} = \begin{bmatrix} \mathbf{D}^T \mathbf{Q} \\ \Gamma \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \mathbf{D}^T \mathbf{M} \\ \Phi_q \end{bmatrix} \ddot{\mathbf{q}} = \begin{bmatrix} \mathbf{D}^T \mathbf{Q} \\ \Gamma - 2\alpha \dot{\Phi} - \beta^2 \Phi \end{bmatrix}$$

Tutaj także występuje konieczność stabilizacji więzów. Metoda Baumgarte'a.

Pytanie. Jak obliczyć macierz \mathbf{D} i czy jednokrotnie dla całej symulacji ?



Całkowanie współrzędne zależne: ALF+Proj.



Metoda 4: Metoda rozszerzonego lagranżjanu z projekcją [Bayo, Ledesma, 1996]

Jest to metoda iteracyjna pochodząca z teorii optymalizacji. Można ją stosować samodzielnie, można uzupełnić o M-ortogonalną projekcję na odpowiednie więzy

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{q}} + \Phi_q^T \kappa(\ddot{\Phi} + 2\Omega\mu\dot{\Phi} + \Omega^2\Phi) + \Phi_q^T \lambda^\bullet = \mathbf{Q}$$

$$\begin{aligned} & (\mathbf{M} + \Phi_q^T \kappa \Phi_q) \ddot{\mathbf{q}} + \Phi_q^T \lambda^\bullet = \\ & = \mathbf{Q} + \Phi_q^T \kappa(\Gamma - 2\Omega\mu\Phi_q\dot{\mathbf{q}} - \Omega^2\Phi) \end{aligned}$$

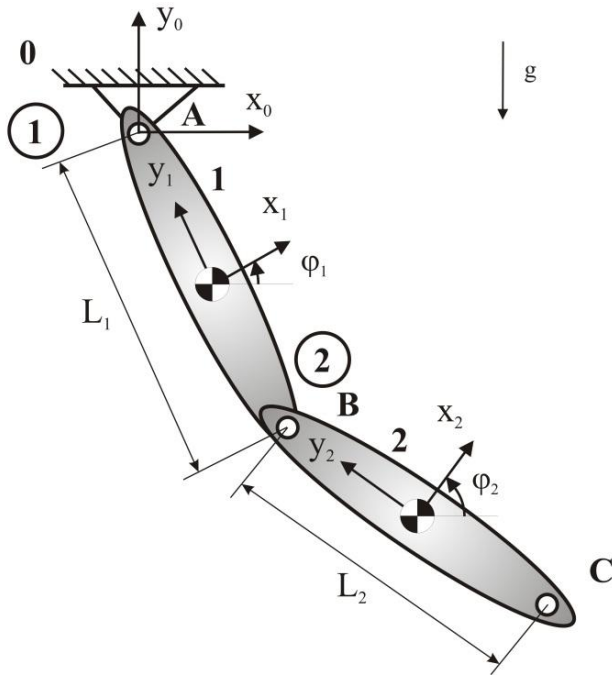
$$\lambda_{i+1}^\bullet = \lambda_i^\bullet + \kappa(\Phi_q \ddot{\mathbf{q}}_{i+1} - \Gamma + 2\Omega\mu\Phi_q\dot{\mathbf{q}} + \Omega^2\Phi)$$

Projekcja względem położeń, prędkości, przyspieszeń:

$$\min_{\mathbf{q}} V = \frac{1}{2} (\mathbf{q} - \mathbf{q}^*)^T \mathbf{M}(\mathbf{q} - \mathbf{q}^*)$$



Przykład testowy: podwójne wahadło



$$\mathbf{q}^T = [x_1 \quad y_1 \quad \varphi_1 \quad x_2 \quad y_2 \quad \varphi_2]$$

$$\mathbf{r}^T = [x \quad y] \quad \mathbf{s}_1^T = [0 \quad -L_1/2] \quad \mathbf{s}_0^T = [0 \quad L_1/2]$$

$$\Phi(\mathbf{q}) = \begin{bmatrix} \mathbf{r}_1 + \mathbf{R}_1 \mathbf{s}_1 - \mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_2 \mathbf{s}_2 \\ \mathbf{r}_1 + \mathbf{R}_1 \mathbf{s}_0 \end{bmatrix} = \mathbf{0}_{4 \times 1}$$

$$\Phi_q(\mathbf{q}) = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_{2 \times 2} & \Omega \mathbf{R}_1 \mathbf{s}_0 & \mathbf{0}_{2 \times 2} & \mathbf{0}_{2 \times 1} \\ \mathbf{I}_{2 \times 2} & \Omega \mathbf{R}_1 \mathbf{s}_1 & -\mathbf{I}_{2 \times 2} & \Omega \mathbf{R}_2 \mathbf{s}_2 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{M} = \text{diag}[m_1 \quad m_1 \quad J_1 \quad m_2 \quad m_2 \quad J_2]$$

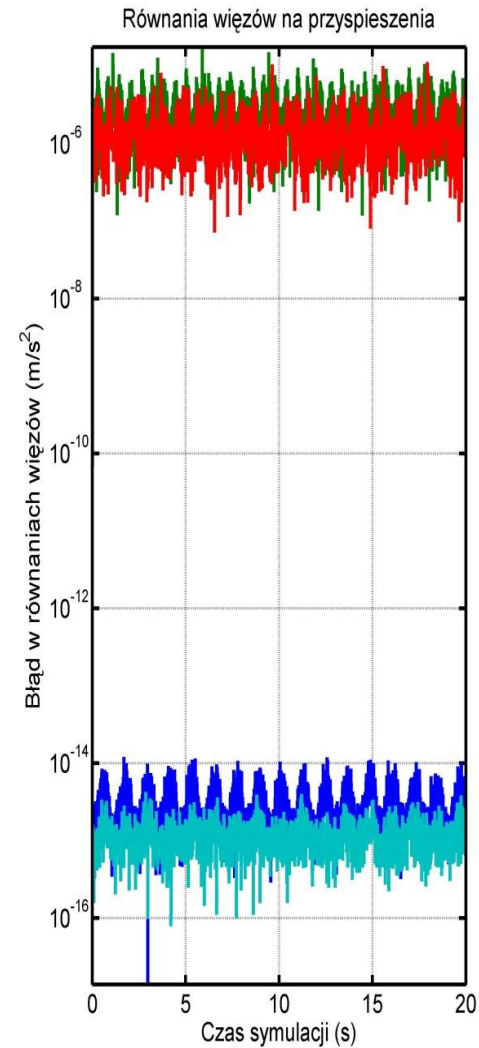
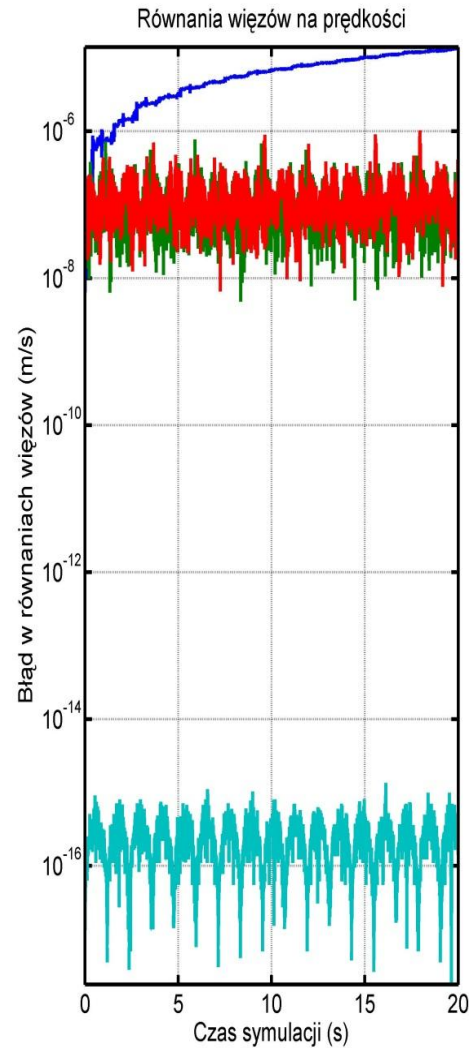
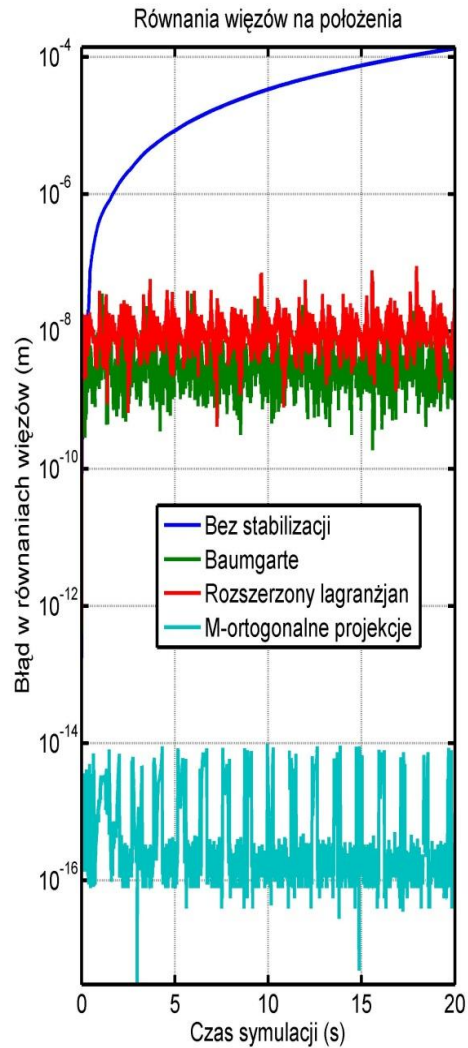
$$\lambda^T = [\lambda_1 \quad \lambda_2 \quad \lambda_3 \quad \lambda_4]$$

$$\mathbf{Q}^T = [0 \quad -m_1 g \quad 0 \quad 0 \quad -m_2 g \quad 0]$$

$$\begin{cases} \mathbf{M}(\mathbf{q}) \ddot{\mathbf{q}} + \Phi_q^T \lambda = \mathbf{Q} \\ \Phi(\mathbf{q}, t) = \mathbf{0} \end{cases}$$



Przykład: Porównanie metod (podsumowanie)



MODELOWANIE UKŁADÓW WIELOCZŁONOWYCH

Metody obliczeniowe dynamiki

Metody całkowania RRA. Część II

Opracowanie wykładu było współfinansowane przez Unię Europejską
w ramach Europejskiego Funduszu Społecznego, poprzez realizację projektu
Program rozwoju dydaktycznego Wydziału Mechanicznego Energetyki i Lotnictwa Politechniki Warszawskiej

Plan wykładu



- Definicja układu RRA, pojęcie indeksu różniczkowego
- RRA jako układy sztywne
- Całkowanie bezpośrednio układów RRA o różnym indeksie
- Całkowanie RRA jako RRZ we współrzędnych zależnych
- **Całkowanie RRA jako RRZ we współrzędnych niezależnych**
- **Całkowanie RRA z zastosowaniem macierzy pseudoinwersji**
- **Przegląd dostępnych procedur ogólnego przeznaczenia**



Całkowanie współrzędne niezależne

Pomysł: Konstrukcja takiej macierz \mathbf{B} (stałej), że $\dot{\mathbf{z}} = \mathbf{B}\dot{\mathbf{q}}$

\mathbf{B} jest macierzą o wymiarze $(N-m) \times N$ o pełnym rzędzie; wektor współrzędnych niezależnych \mathbf{z} może być traktowany jako rzut prędkości uogólnionej na podprzestrzeń rozpinaną przez wektory wiersze macierzy \mathbf{B}

Konstrukcja tej macierzy oraz decyzja, w którym momencie powinna być zaktualizowana ma kluczowy wpływ na efektywność całkowania.

Z kinematyki wynikają zależności (macierz \mathbf{B} jest stała !):

$$(a) \quad \begin{bmatrix} \Phi_q \\ \mathbf{B} \end{bmatrix} \dot{\mathbf{q}} = \begin{bmatrix} -\Phi_t \\ \dot{\mathbf{z}} \end{bmatrix} \longrightarrow \dot{\mathbf{q}} = \begin{bmatrix} \Phi_q \\ \mathbf{B} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} -\Phi_t \\ \dot{\mathbf{z}} \end{bmatrix} = \mathbf{S}\Phi_t + \mathbf{D}\dot{\mathbf{z}}$$

$$(b) \quad \begin{bmatrix} \Phi_q \\ \mathbf{B} \end{bmatrix} \dot{\mathbf{q}} = \begin{bmatrix} \Gamma \\ \ddot{\mathbf{z}} \end{bmatrix} \longrightarrow \ddot{\mathbf{q}} = \begin{bmatrix} \Phi_q \\ \mathbf{B} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \Gamma \\ \ddot{\mathbf{z}} \end{bmatrix} = \mathbf{S}\Gamma + \mathbf{D}\ddot{\mathbf{z}}$$

Macierz projekcji

Całkowanie współrzędne niezależne



Iloczynny $\mathbf{S}\mathbf{\Gamma}$ oraz $\mathbf{S}\mathbf{\Phi}_t$ można obliczyć podstawiając odpowiednio $\dot{\mathbf{z}} = \mathbf{0}$ i $\ddot{\mathbf{z}} = \mathbf{0}$

Równania ruchu przybierają postać :

$$\mathbf{D}^T \mathbf{M} \ddot{\mathbf{q}} = \mathbf{D}^T \mathbf{Q}$$

Mnożenie obu stron przez macierz projekcji.

$$(c) \quad \mathbf{D}^T \mathbf{M} \mathbf{D} \ddot{\mathbf{z}} = \mathbf{D}^T \mathbf{Q} - \mathbf{D}^T \mathbf{M} \mathbf{S} \mathbf{\Gamma}$$

Wstawienie do równania więzów dla przyspieszeń. Jest to *de facto* RRZ

Metody doboru macierzy \mathbf{B} :

Metoda 1 – stara, prosta skuteczna, podział LU współrzędnych [Haug, Wehage, 1980]

$$\begin{bmatrix} \mathbf{\Phi}_u & \mathbf{\Phi}_z \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{\mathbf{u}} \\ \dot{\mathbf{z}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\mathbf{\Phi}_t \\ \dot{\mathbf{z}} \end{bmatrix} \quad \dot{\mathbf{q}} = \begin{bmatrix} \dot{\mathbf{u}} \\ \dot{\mathbf{z}} \end{bmatrix} \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} \mathbf{0}_{mxm} & \mathbf{I}_{mx(N-m)} \end{bmatrix}$$

Kolejność eliminowania kolumn pokazuje na dobór współrzędnych niezależnych.



Całkowanie współrzędne niezależne



Jedna z wersji algorytmu całkowania wygląda tak:

Start: Znane położenia i prędkości niezależne z



Rozwiązanie zadania na położenia i prędkości (kinematyka)



Wyznaczenie macierzy projekcji D - wzór (a), obliczenie macierzy w równaniu ruchu



Obliczenie iloczynów $S\Gamma$ oraz $S\Phi_t$ w równaniu (a) i (b) (podstawienie zerowych prędkości i przyspieszeń niezależnych)



Obliczenie \ddot{z} z równania (c)



Obliczenie wektora $\begin{bmatrix} z^T & \dot{z}^T \end{bmatrix}^T$ w kroku następnym



Powrót na początek



Całkowanie współrzędne niezależne



Zalety:

Prosty algorytm, macierze rzadkie, dokonana faktoryzacja jest aktualna w kilku krokach

Dwie wady:

Pracochłonne zadanie na położenia,

Kiedy zmienić podział zmiennych ? (sugestia w piśmiennictwie – gdy element główny staje się bardzo mały, inne podane w [Nikraves, 1989])

Metoda 2 – Dekompozycja **QR** [Kim, Vanderploeg 1986], Amirouche [1990]

$$\Phi_q^T = [Q_1 \quad Q_2] \begin{bmatrix} R_1 \\ 0 \end{bmatrix} = Q_1 R_1$$

$$Q_2^T Q_1 = 0 \quad D = Q_2$$

$$Q_2^T Q_2 = I \quad B = Q_2^T$$

Równanie ruchu:

$$Q_2^T M D \ddot{z} = Q_2^T Q - Q_2^T M S \Gamma$$



Całkowanie współrzędne niezależne



Metoda 3 – Metoda zerowych wartości własnych [Walton, Steeves 1969, Kamman Houston, 1985]. Wykorzystujemy fakty:

$$\mathbf{A} = \mathbf{\Phi}_q^T \mathbf{\Phi}_q$$

Macierz \mathbf{A} (wymiaru $N \times N$) jest symetryczna i jej wartości własne są nieujemne. Konstruujemy macierz ortogonalną wektorów własnych \mathbf{T}

$$\mathbf{T}^T \mathbf{A} \mathbf{T} = \mathbf{\Lambda}$$

Jest to przekształcenie podobieństwa. Macierz $\mathbf{\Lambda}$ jest macierzą wartości własnych (diagonalną). Zerowym wartościom własnym odpowiada podmacierz \mathbf{T}_1 wymiaru $N \times (N-m)$ macierzy \mathbf{T} to znaczy:

$$\mathbf{T} = [\mathbf{T}_1 \quad \mathbf{T}_2]$$

\mathbf{T}_1 odpowiada zerowym wartościom własnym macierzy diagonalnej $\mathbf{\Lambda}$

Przyjmujemy:

$$\mathbf{D} = \mathbf{T}_1 \quad \mathbf{B} = \mathbf{T}_1^T$$



Całkowanie współrzędne niezależne



Metoda 4 – Metoda rozkładu według wartości szczególnych SVD (ang. *singular value decomposition*) [Mani, Haug, 1985, Singh, Likins, 1985].

Macierz Jacobiego dekomponuje się według następującego schematu:

$$\Phi_q^T = \mathbf{W} \mathbf{L} \mathbf{U}^T$$

Macierze $\mathbf{W}_{N \times N}$ oraz $\mathbf{U}_{m \times m}$ są ortogonalne. Macierz \mathbf{L} jest diagonalna i składa się z podmacierzy o m wartościach niezerowych (tzw. wartości szczególnych) oraz $N-m$ kolumn zerowych. Ponadto:

$$\Phi_q^T = \begin{bmatrix} \mathbf{W}_{d N \times m} & \mathbf{W}_{i N \times (N-m)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Lambda_{m \times m} \\ \mathbf{0}_{(N-m) \times m} \end{bmatrix} \mathbf{U}_{m \times m}^T = \mathbf{W}_d \Lambda \mathbf{U}^T$$

Jako macierze \mathbf{B} i \mathbf{D} dobiera się:

$$\mathbf{D} = \mathbf{W}_i$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{P}^T$$

Obliczenia są kosztowne bo metoda jest iteracyjna a koszt jest podobny jak numerycznym rozwiązywaniu zagadnienia własnego.



Całkowanie współrzędne niezależne



Metoda 5 – Rozkład Schura (równoważna metodzie zerowych wartości własnych)

$$\mathbf{A} = \mathbf{\Phi}_q^T \mathbf{\Phi}_q$$

Macierz \mathbf{A} (wymiaru $N \times N$) jest symetryczna i jej wartości własne są nieujemne.

Macierz \mathbf{A} rozkładamy następująco (rozkład Schura):

$$\mathbf{K}^T \mathbf{A} \mathbf{K} = \mathbf{U}$$

gdzie \mathbf{K} jest macierzą unitarną (przeczytaj definicję macierzy unitarnej !) i \mathbf{U} jest macierzą górnoprzekątniową z wartościami własnymi na przekątnej. Macierz \mathbf{K} można podzielić na podmacierze:

$$\mathbf{K} = [(\mathbf{K}_1)_{N \times (N-m)} \quad (\mathbf{K}_2)_{N \times m}]$$

Wobec tego:

$$\mathbf{D} = \mathbf{K}_1 \quad \mathbf{B} = \mathbf{K}_1^T$$



Całkowanie - metody pseudoinwersji



Słowo o macierzach pseudoodwrotnych (pseudoinwersji) lub także uogólnionych macierzach odwrotnych (ang. Moore-Penrose generalized inverse). Macierz pseudoodwrotną do macierzy \mathbf{A} (która może być prostokątna i o niepełnym rzędzie) oznacza się \mathbf{A}^+ . Macierz taka musi spełniać warunki:

$$\mathbf{A}\mathbf{A}^+\mathbf{A} = \mathbf{A}$$

$$\mathbf{A}^+\mathbf{A}\mathbf{A}^+ = \mathbf{A}^+$$

$$\mathbf{A}\mathbf{A}^+ = (\mathbf{A}\mathbf{A}^+)^T$$

$$\mathbf{A}^+\mathbf{A} = (\mathbf{A}^+\mathbf{A})^T$$



Fakty:

1. \mathbf{A}^+ zawsze istnieje
2. Gdy \mathbf{A} jest kwadratowa i nieosobliwa to:

$$\mathbf{A}^+ = \mathbf{A}^{-1}$$

3. Wyrażenie:

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^+\mathbf{b}$$

Określa wektor \mathbf{x} , dla którego iloczyn skalarny (problem minimalno- kwadratowy)

$$Z(\mathbf{x}) = (\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b})^T (\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b})$$

ma wartość minimalną, a przy tym \mathbf{x} ma długość najmniejszą z możliwych.



Całkowanie współrzędne niezależne



Metoda 6 – Bezpośrednia metoda eliminacji mnożników Lagrange'a ([Wang, Houston, 1989]) . Już wzmiankowana.

$$\ddot{\mathbf{q}} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{Q} - \mathbf{M}^{-1}\mathbf{\Phi}_q^T\boldsymbol{\lambda} \quad (a)$$

Obliczamy przyspieszenie i mnożniki Lagrange'a z równania o indeksie 1

$$\mathbf{\Phi}_q\mathbf{M}^{-1}\mathbf{\Phi}_q^T\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{\Phi}_q\mathbf{M}^{-1}\mathbf{Q} - \boldsymbol{\Gamma} \quad (b)$$

Wstawiamy (b) do (a) i otrzymujemy:

$$\ddot{\mathbf{q}} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{\Phi}_q^T(\mathbf{\Phi}_q\mathbf{M}^{-1}\mathbf{\Phi}_q^T)^{-1}\boldsymbol{\Gamma} - \mathbf{M}^{-1}\mathbf{Q}(\mathbf{M}^{-1}\mathbf{\Phi}_q^T(\mathbf{\Phi}_q\mathbf{M}^{-1}\mathbf{\Phi}_q^T)^{-1}\mathbf{\Phi}_q - \mathbf{I})$$

Macierz współczynników być źle uwarunkowana stąd niekiedy proponuje się modyfikację tej metody [Pennestri, 2008], wprowadzając macierz pseudoodwrotną:

$$\ddot{\mathbf{q}} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{\Phi}_q^T(\mathbf{\Phi}_q\mathbf{M}^{-1}\mathbf{\Phi}_q^T)^+ \boldsymbol{\Gamma} - \mathbf{M}^{-1}\mathbf{Q}(\mathbf{M}^{-1}\mathbf{\Phi}_q^T(\mathbf{\Phi}_q\mathbf{M}^{-1}\mathbf{\Phi}_q^T)^+ \mathbf{\Phi}_q - \mathbf{I})$$



Całkowanie współrzędne niezależne



Metoda 7 – Rozwiązanie w sensie minimalno-kwadratowym z zastosowaniem macierzy pseudodwrotnej [Udwadia-Kalaba, 2001]. Dla równania I1 - **wariant I**:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{M} & \Phi_q^T \\ \Phi_q & \mathbf{0} \end{bmatrix}^+ = \begin{bmatrix} \mathbf{M}^{-1} - \mathbf{M}^{-1} \Phi_q^T \mathbf{C}^+ \Phi_q \mathbf{M}^{-1} & \mathbf{M}^{-1} \Phi_q^T \mathbf{C}^+ \\ \mathbf{C}^+ \Phi_q \mathbf{M}^{-1} & -\mathbf{C}^+ \end{bmatrix}$$

(Uwaga: zakłada się, że macierz bezwładności \mathbf{M} jest odwracalna). Stąd:

$$\ddot{\mathbf{q}} = (\mathbf{I} - \Phi_q^T \mathbf{C}^+ \Phi_q \mathbf{M}^{-1}) \mathbf{M}^{-1} \mathbf{Q} + \mathbf{M}^{-1} \Phi_q^T \mathbf{C}^+ \Gamma$$

Wariant II – oblicza się pseudoodwrotność całej macierzy wprost (nie wymaga założenia odwracalności macierzy bezwładności) i dodaje ewentualnie stabilizację Baumgarta:

$$\begin{bmatrix} \ddot{\mathbf{q}} \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{M} & \Phi_q^T \\ \Phi_q & \mathbf{0} \end{bmatrix}^+ \begin{bmatrix} \mathbf{Q} \\ \Gamma - 2\alpha\dot{\Phi} - \beta^2\Phi \end{bmatrix}$$

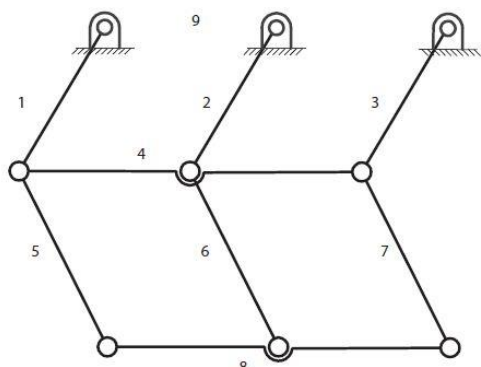


Całkowanie współrzędne niezależne

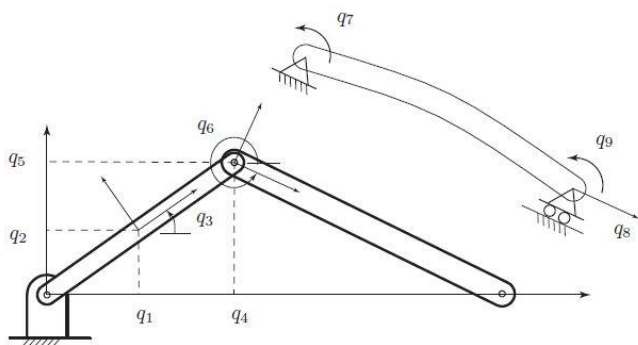
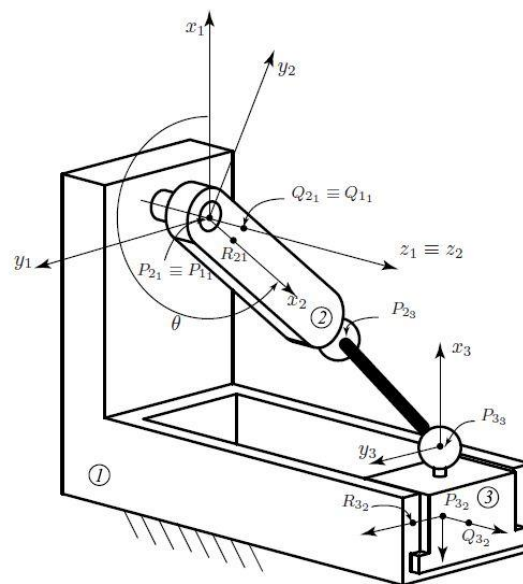


Przykład: Porównanie na trzech przykładach (rotacje opisane parametrami Eulera).
Źródło: [Pennestri, 2010] (rotacje w przestrzeni opisane parametrami Eulera)

1. Płaski mechanizm równoległowodowy



2. Przestrzenny mechanizm korbowo-wodzikowy



3. Płaski mechanizm korbowo-wodzikowy z odkształcalnym łącznikiem



Całkowanie RRA współrzędne niezależne



Przykład: Porównanie na trzech przykładach (rotacje opisane parametrami Eulera).
Źródło: [Pennestri, 2010] (rotacje w przestrzeni opisane parametrami Eulera)

Wyniki dla przedstawionych przykładów

Metoda	Przykład 1	Przykład 2	Przykład 3
	Czas obliczeń %	Czas obliczeń %	Czas obliczeń %
Podział współrzędnych	100	100	100
Rozkład QR	51	56	53
Zerowe wartości własne	54	56	53
Rozkład SVD	64	57	54
Dekompozycja Schura	54	56	53
Eliminacja mnożników	2	Macierz M osobliwa	Macierz M osobliwa
Pseudoinwersja wariant 1	2	Macierz M osobliwa	Macierz M osobliwa
Pseudoinwersja wariant 2	3	10	21



Procedury do numerycznego rozwiązywania RRA (wybrane):

1. **DASSL** (<http://www.netlib.org/ode/>)
 2. **RADAU/RADAU5** (<http://www.unige.ch/~hairer/software.html>)
 3. **GAMD** (<http://www.dm.uniba.it/~mazzia/ode/gam.html>)
- Metody niejawne (konieczne jest obliczanie macierzy Jacobiego – analitycznie bądź numerycznie – pytanie jak będzie lepiej?)
 - Przeznaczone do całkowania układów sztywnych
 - Możliwość wykorzystania w programach napisanych w Fortranie, C, C++, Matlabie i innych
 - Dostępne jako OpenSource w postaci „gotowych” procedur

Procedury dostępne w pakiecie MATLAB:

ode15s, ode23t – niejawne, przeznaczone do układów sztywnych

1. Wszystkie opisywane procedury pozwalają na bezpośrednie całkowanie równań RRA I1. Ponadto algorytmy RADAU, RADAU5 i GAMD pozwalają na bezpośrednie całkowanie RRA I2, jak również RRA I3
2. Warunki początkowe najczęściej muszą być zgodne
3. Ze względu na zbieżność rozwiązania oraz wydajność obliczeniową, dobrze jest podać postać analityczną macierzy Jacobiego dla rozwiązywanych równań. Jednak w niektórych przypadkach lepszym rozwiązaniem (z punktu widzenia zbieżności, nie wydajności) może być numeryczne obliczenie tej macierzy
4. Na dokładność rozwiązania i wydajność w istotny sposób wpływa dobór odpowiedniego algorytmu (ale, jak go dokonać?), jak również zadane wartości błędu względnego ($Rtol$) i bezwzględnego ($Atol$)

Wartość **błędu lokalnego** i -tej składowej rozwiązania: $|\varepsilon_i| \leq Rtol \cdot |y_i| + Atol$

DASSL – Differential Algebraic System Solver

<http://www.netlib.org/ode/>

- Implementacja **metody wstecznego różniczkowania**
- Automatyczna kontrola błędu rozwiązania oraz doboru kroku całkowania
- Zmienny rząd metody (od 1 do 5)
- Pozwala na bezpośrednie rozwiązywanie RRA I1, wybrane (tylko które?) układy można rozwiązać bezpośrednio w postaci I2
- L. R. Petzold, 1983

DASSL umożliwia rozwiązanie RRA w postaci niejawnej:

$$\mathbf{F}(\dot{\mathbf{y}}, \mathbf{y}, t) = \mathbf{0} \qquad \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0$$

Postać macierzy Jacobiego:

$$\mathbf{J} = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{y}} + c_j \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \dot{\mathbf{y}}}$$

Równania zapisujemy w postaci RRA SI1. Wektor opisujący układ, jak również wektor stanu przyjmują poniższą postać:

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \dot{\mathbf{q}} - \mathbf{v} - \Phi_q^T \boldsymbol{\mu} \\ \mathbf{M}\dot{\mathbf{v}} + \Phi_q^T \boldsymbol{\lambda} - \mathbf{Q} \\ \Phi \\ \Phi_q \mathbf{v} + \Phi_t \end{bmatrix} \quad \mathbf{y} = \begin{bmatrix} \mathbf{v} \\ \mathbf{q} \\ \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\kappa} \end{bmatrix} \quad \dot{\mathbf{y}} = \begin{bmatrix} \dot{\mathbf{v}} \\ \dot{\mathbf{q}} \\ \boldsymbol{\lambda} \\ \boldsymbol{\mu} \end{bmatrix}$$

Macierze Jacobiego dla wektora \mathbf{F} przyjmują skomplikowaną, nieliniową postać, przez co wydajność tego sformułowania jest umiarkowana. Natomiast dzięki zastosowaniu stabilizacji, rozwiązanie charakteryzuje się dużą dokładnością.

Wykorzystując powyższe sformułowania należy zwrócić uwagę, by przez cały czas trwania symulacji wartość wektora $\boldsymbol{\mu}$ była stale równa zero.

RADAU i RADAU5

<http://www.unige.ch/~hairer/software.html>

- Implementacja **niejawnej metody Rungego-Kutty** (tzw. Radau IIa)
- Automatyczna kontrola błędu rozwiązania oraz doboru kroku całkowania
- Zmienny rząd metody (5, 9 i 13) w przypadku RADAU
- Stały rząd równy 5 w przypadku RADAU5
- Pozwala na bezpośrednie rozwiązywanie RRA I3
- E. Hairer i G. Wanner, 1998

GAMD

<http://www.dm.uniba.it/~mazzia/ode/gam.html>

- Implementacja **uogólnionej metody Adamsa**
- Automatyczna kontrola błędu rozwiązania oraz doboru kroku całkowania
- Zmienny rząd metody (3, 5, 7 i 9)
- Pozwala na bezpośrednie rozwiązywanie RRA I3
- F. Iavernaro i F. Mazzia, 1997

Całkowanie RRA, procedury ogólne



RADAU, RADAU5 oraz GAMD umożliwia rozwiązanie RRA w następującej postaci:

$$\mathbf{H}\dot{\mathbf{y}} = \mathbf{F}(\mathbf{y}, t) \quad \mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0$$

Przy czym macierz \mathbf{H} musi być macierzą stałą (oraz może być osobliwa, co pozwala na rozwiązywania RRA)

Macierz Jacobiego tym razem przyjmuje prostą postać (w porównaniu z postacią macierzy Jacobiego dla procedury DASSL):

$$\mathbf{J} = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{y}}$$

Wykorzystując sformułowanie RRA I3 możemy zapisać:

lecz tutaj macierz \mathbf{H} nie jest (w ogólności) macierzą stałą!

$$\begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{M} & \mathbf{0} & \Phi_q^T \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{\mathbf{v}} \\ \dot{\mathbf{q}} \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{v} \\ \mathbf{Q} \\ \Phi \end{bmatrix}$$



Do układu wprowadzamy nowe współrzędne o charakterze przyspieszeń:

$$\mathbf{w} = \dot{\mathbf{v}}$$

Dzięki temu, równania dynamiki mogą zostać zapisane w funkcji wektora stanu \mathbf{y} i potraktowane jako dodatkowe równania więzów. Wówczas odpowiednie wielkości można zapisać jako:

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \quad \mathbf{F} = \begin{bmatrix} \mathbf{w} \\ \mathbf{v} \\ \mathbf{M}\mathbf{w} + \Phi_{\mathbf{q}}^T \boldsymbol{\lambda} - \mathbf{Q} \\ \Phi(\mathbf{q}, t) \end{bmatrix} \quad \mathbf{y} = \begin{bmatrix} \mathbf{v} \\ \mathbf{q} \\ \mathbf{w} \\ \boldsymbol{\lambda} \end{bmatrix}$$

Równania zapisane w tej postaci zawierają (niestety) dodatkowe współrzędne, lecz opisywany układ jest rzadki. Ponadto macierz \mathbf{H} jest macierzą diagonalną. Dzięki temu można stosunkowo efektywnie całkować wskazany układ.