

基于四元数表示的一种改进的 刚体动力学保辛积分*

徐小明, 钟万勰

(大连理工大学 工程力学系;工业装备结构分析国家重点实验室(大连理工大学), 辽宁 大连 116024)

(本刊编委钟万勰来稿)

摘要: 根据四元数刚体动力学基本理论,将四元数时间导数与角速度之间的恒等变换引入动能项,由此可以直接得到非奇异的四元数质量矩阵.将其与分析结构力学结合,可以得到4种形式的保辛积分算法.该算法以离散系统作用量变分原理代替四元数微分方程,单位长度约束以代数约束的方式在积分格点处满足.数值仿真结果表明该方法不仅避免了陀螺稳态进动数值仿真中严重的章动误差,并且对于一般情况也展现出很大的精度改善.

关键词: 分析结构力学; 单位四元数; 刚体动力学; 保辛积分; 恒等变换; 重陀螺

中图分类号: TP391.9; O313.3 **文献标志码:** A

doi: 10.3879/j.issn.1000-0887.2014.11.001

引 言

刚体动力学在工程、物理、化学以及分子动力学领域均有广泛的应用.刚体运动可以拆分为两个独立的部分^[1],其一是参考点的平移运动,其二是刚体关于该参考点的旋转运动.对于刚体运动的理论分析与数值模拟,平移运动易于表达并且形式唯一,但是刚体旋转及其表述形式至今仍是较为活跃的研究方向.从机器人与机械科学的角度出发,使用 Euler(欧拉)角来表示刚体的有限转动不失为一种上佳选择.但是,当刚体运动包含大角度的旋转时,采用单一 Euler角表示刚体旋转时会出现奇异位置,导致该位置附近数值求解精度欠佳甚至不能求解.这时,采用单位四元数或者旋转矩阵来表示旋转运动方法往往更加方便.

当采用单位四元数或者旋转矩阵来表示刚体旋转时,代数约束将不可避免地出现在微分方程中,对于保守系统,问题转入约束 Hamilton(哈密顿)系统领域.对于约束 Hamilton 系统,高效、长时间稳定的数值方法研究长期以来一直是算法研究的难点与重点,对于刚体动力学仿真研究亦是如此.应对这一挑战,保结构积分算法扮演了十分重要的角色.自 20 世纪 90 年代开始,基于四元数及旋转矩阵,人们提出了各种各样的保辛算法,其中有代表性的例如 RATTLE 算法^[2]以及各种各样的 splitting 方法^[3].另一种保辛算法源自离散的 Hamilton 原理,基于刚体动力学的四元数表示,Wendlandt 及 Marsden 提出了一种保辛算法以及与之对应的离散的 Eul-

* 收稿日期: 2014-06-26; 修订日期: 2014-09-11

基金项目: 国家自然科学基金(面上项目)(11472067)

作者简介: 徐小明(1986—),男,辽宁东港人,博士生(通讯作者. E-mail: xxm@mail.dlut.edu.cn);
钟万勰(1934—),男,浙江德清人,教授,中科院院士(E-mail: zwoffice@dlut.edu.cn).

er-Lagrange 方程^[4].此外,对于长时间稳定数值仿真,能量-动量守恒积分是另一种选择.在这一方面,亦有 Simo 等的工作^[5-7]值得关注.

最近, Betsch 和 Siebert 针对刚体动力学引入了四元数表示的 Hamilton 框架,并且以此提出了一种能量-动量差分格式^[8].通过与两种基于四元数以及一种基于旋转矩阵的保结构算法进行比较,发现所有这些格式在模拟陀螺稳态进动时都会产生十分严重的周期性的章动误差.随后, Krenk 以及 Nielsen^[9-10]也观察到了这一现象,并且针对旋转矩阵表示的能量动量算法^[10],通过将体轴系的原点置于质心,继而将旋转与平移运动相结合,部分地消除了这一章动误差.

本文深入研究了四元数表示的刚体动力学理论,强调其中存在一个常被忽略的恒等关系.该恒等式描述了四元数速度与角速度之间的内在变换关系,在数值积分的构造中起到了至关重要的作用.在基于四元数刚体动力学理论中,质量矩阵的奇异性一直困扰着四元数在刚体动力学中的应用.目前通常的做法是通过引入人工参数来消除奇异性^[8-9].本文通过将恒等变换引入动能项,可以直接生成非奇异的四元数表示的质量矩阵.

最近,徐小明与钟万颢^[11]基于分析结构力学理论引入离散系统的区段作用量,并借鉴祖冲之方法论在积分点上严格满足约束条件,提出了一种保辛积分算法.本文在此基础上,将四元数速度与角速度之间的恒等变换引入离散系统,进而推导出 4 种形式保辛积分,改进了原有算法.数值结果表明改进的保辛积分极大地改善了原有算法的精度,并且对于陀螺稳态进动问题,也大大减小了章动误差,使其控制在一个合理的范围内.

1 运动学表述

考虑刚体绕固定点转动问题.为了更好地描述运动关系,定义两个坐标系:其一,惯性坐标系(全局坐标系);其二,贴体坐标系(局部坐标系),该参考系坐标轴随刚体移动.将刚体所绕固定点取为两坐标系的原点.这样,两个坐标系之间的变换可以表示为

$$\mathbf{x}_0 = \mathbf{Q}^T(t)\mathbf{x}, \quad (1)$$

其中矩阵 \mathbf{Q} 为三维正交矩阵.在刚体动力学中,向量 $\mathbf{x} \in R^3$ 表示刚体上的一点在贴体系中的坐标表示,而与之对应 $\mathbf{x}_0 \in R^3$ 则是相同的点在惯性系中的坐标表示.因此,矩阵 \mathbf{Q} 表示了从初始构型到当前构型的位置变换.

由于贴体系固定于刚体之上, \mathbf{x} 是一个常矢量,所以对式(1)两端进行求导,可以得到

$$\mathbf{v}_0 = d\mathbf{x}_0/dt = \dot{\mathbf{Q}}^T\mathbf{x}. \quad (2)$$

式(2)表明了牵连速度与位置之间的变换关系.另一方面,根据经典力学理论^[1],牵连速度在贴体系中可以表示为

$$\mathbf{v} = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{x} = -\mathbf{A}\mathbf{x}, \quad (3)$$

其中

$$(\boldsymbol{\omega} \times) = -\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & -\omega_3 & \omega_2 \\ \omega_3 & 0 & -\omega_1 \\ -\omega_2 & \omega_1 & 0 \end{bmatrix}, \quad (4)$$

向量 $\boldsymbol{\omega}$ 表示角速度,其沿 3 个贴体轴的分量分别为 ω_1, ω_2 以及 ω_3 .由于 $\mathbf{v} = \mathbf{Q}\mathbf{v}_0$,并结合式(2)与式(3),可以得到位置变换矩阵 \mathbf{Q} 的微分方程:

$$\dot{\mathbf{Q}} = \mathbf{A}\mathbf{Q}. \quad (5)$$

由于 \mathbf{A} 是一个反对称矩阵,保证了 \mathbf{Q} 在整个运动过程中的正交性,所以该方程描述了旋转群 $SO(3)$ 上的微分关系.通过式(5)确定 \mathbf{Q} 随时间的变化规律,便可得到整个刚体的运动状态,所以式(5)便是刚体旋转的运动学方程.因为 $\mathbf{Q}^T \mathbf{Q} = \mathbf{I}$,对式(5)两端右乘 \mathbf{Q}^T ,再对所得公式两端右乘本身的转置,可得

$$\dot{\mathbf{Q}}\dot{\mathbf{Q}}^T = \mathbf{A}\mathbf{A}^T, \tag{6}$$

此式揭示了旋转矩阵与角速度之间的恒等变换.

位置矩阵 \mathbf{Q} 可以由其本身表示.也就是通过 \mathbf{Q} 自身 9 个矩阵元表示,再加上 6 个代数约束来保证 \mathbf{Q} 的正交性,这也被称作旋转矩阵表示.通过引入单位四元数,未知数可以降低到 4 个.单位四元数可以表示为 $q = q_0 + q_1\mathbf{i} + q_2\mathbf{j} + q_3\mathbf{k}$,有自身的运算法则,也可以通过酉矩阵表示来代替繁复的四元数运算.通过酉矩阵,可以建立起单位四元数群 $SP(1)$ 与旋转群 $SO(3)$ 之间的局部同构关系,进而可以使用四元数代替旋转矩阵 \mathbf{Q} 来描述刚体旋转.关于单位四元数与旋转矩阵之间关系的详尽讨论可参见文献[11].简而言之,正交矩阵 \mathbf{Q} 可以表示为四元数的形式:

$$\mathbf{Q}(q) = \begin{bmatrix} q_0^2 + q_1^2 - q_2^2 - q_3^2 & 2(q_1q_2 + q_0q_3) & 2(q_1q_3 - q_0q_2) \\ 2(q_1q_2 - q_0q_3) & q_0^2 - q_1^2 + q_2^2 - q_3^2 & 2(q_2q_3 + q_0q_1) \\ 2(q_1q_3 + q_0q_2) & 2(q_2q_3 - q_0q_1) & q_0^2 - q_1^2 - q_2^2 + q_3^2 \end{bmatrix},$$

其中需对四元数施加一单位约束

$$q_0^2 + q_1^2 + q_2^2 + q_3^2 = 1 \tag{7}$$

来保证 \mathbf{Q} 的正交性.而对应于式(5),四元数表示的刚体运动方程为

$$\begin{Bmatrix} \dot{q}_0 \\ \dot{q}_1 \\ \dot{q}_2 \\ \dot{q}_3 \end{Bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & -\omega_1 & -\omega_2 & -\omega_3 \\ \omega_1 & 0 & \omega_3 & -\omega_2 \\ \omega_2 & -\omega_3 & 0 & \omega_1 \\ \omega_3 & \omega_2 & -\omega_1 & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} q_0 \\ q_1 \\ q_2 \\ q_3 \end{Bmatrix}. \tag{8}$$

在 Lie(李)群理论中,这是四元数群(三维球面)上的微分方程.

从几何角度出发,单位四元数可以看作三维单位球面上的一点,也就是说,可以将单位四元数看做是四维空间中的向量,并且附加上一单位长度约束.所以,本文定义四元数向量

$$\mathbf{q} = \{q_0 \ q_1 \ q_2 \ q_3\}^T, \tag{9}$$

则约束(7)可以表示为

$$g(\mathbf{q}) = \mathbf{q}^T \mathbf{q} - 1 = 0. \tag{10}$$

然后,引入 3 个自旋矩阵:

$$\mathbf{G}_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \mathbf{G}_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \mathbf{G}_3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \tag{11}$$

根据这一定义,运动方程(8)可以改写为

$$\dot{\mathbf{q}} = -(\omega_1 \mathbf{G}_1 \mathbf{q} + \omega_2 \mathbf{G}_2 \mathbf{q} + \omega_3 \mathbf{G}_3 \mathbf{q})/2. \tag{12}$$

这 3 个自旋矩阵是反对称的,它们满足

$$\begin{cases} \mathbf{G}_1 \mathbf{G}_2 = -\mathbf{G}_2 \mathbf{G}_1 = \mathbf{G}_3, \mathbf{G}_2 \mathbf{G}_3 = -\mathbf{G}_3 \mathbf{G}_2 = \mathbf{G}_1, \\ \mathbf{q}^T \mathbf{G}_i \mathbf{q} = 0, \mathbf{G}_i \mathbf{G}_i = -\mathbf{I}, \quad i = 1, 2, 3, \end{cases} \tag{13}$$

其中 \mathbf{I} 是 4×4 单位矩阵. 对式 (12) 两端同时左乘 $\mathbf{q}^T \mathbf{G}_i (i = 1, 2, 3)$, 可以得到

$$\mathbf{q}^T \mathbf{G}_i \dot{\mathbf{q}} = -(\omega_1 \mathbf{q}^T \mathbf{G}_i \mathbf{G}_1 \mathbf{q} + \omega_2 \mathbf{q}^T \mathbf{G}_i \mathbf{G}_2 \mathbf{q} + \omega_3 \mathbf{q}^T \mathbf{G}_i \mathbf{G}_3 \mathbf{q})/2. \quad (14)$$

考虑式 (13) 中的等式关系以及约束 (10), 可以得到角速度的显式表达式:

$$\omega_i = 2\mathbf{q}^T \mathbf{G}_i \dot{\mathbf{q}}, \quad i = 1, 2, 3. \quad (15)$$

此外, 还可以得到

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{q}}^T \dot{\mathbf{q}} &= 4^{-1}(\omega_1 \mathbf{G}_1 \mathbf{q} + \omega_2 \mathbf{G}_2 \mathbf{q} + \omega_3 \mathbf{G}_3 \mathbf{q})^T (\omega_1 \mathbf{G}_1 \mathbf{q} + \omega_2 \mathbf{G}_2 \mathbf{q} + \omega_3 \mathbf{G}_3 \mathbf{q}) = \\ &= 4^{-1}(-\omega_1^2 \mathbf{q}^T \mathbf{G}_1 \mathbf{G}_1 \mathbf{q} - \omega_2^2 \mathbf{q}^T \mathbf{G}_2 \mathbf{G}_2 \mathbf{q} - \omega_3^2 \mathbf{q}^T \mathbf{G}_3 \mathbf{G}_3 \mathbf{q}), \end{aligned} \quad (16)$$

即

$$(\omega_1^2 + \omega_2^2 + \omega_3^2) = 4\dot{\mathbf{q}}^T \dot{\mathbf{q}}. \quad (17)$$

此式揭示了角速度与单位四元数时间导数之间的恒等变换关系. 通过式 (17) 导出的过程可以看出式 (17) 是式 (6) 的一种等价表示. 通过将恒等关系式 (17) 引入动能项, 可以成功避免动力学描述过程中四元数质量矩阵的奇异性, 这将在下一节详细介绍.

2 动力学与 Lagrange 描述

对于刚体旋转问题, 系统的动能可以表示为

$$T = \frac{1}{2} \boldsymbol{\omega}^T \mathbf{J} \boldsymbol{\omega}, \quad (18)$$

其中 \mathbf{J} 是刚体在贴体系中的惯性张量. 不失一般性, 假设贴体系坐标轴与惯性张量的主轴重合. 在这种情况下, 惯性张量可以表示为 $\mathbf{J} = \text{diag}(I_1, I_2, I_3)$. 这样, 将式 (15) 代入式 (18), 便可得到动能的具体表达式:

$$T = 2I_1(\dot{\mathbf{q}}^T \mathbf{G}_1 \mathbf{q})^2 + 2I_2(\dot{\mathbf{q}}^T \mathbf{G}_2 \mathbf{q})^2 + 2I_3(\dot{\mathbf{q}}^T \mathbf{G}_3 \mathbf{q})^2. \quad (19)$$

对于保守系统, 势能具有如下形式:

$$V = V(\mathbf{q}). \quad (20)$$

结合约束条件 (10), 可以写出该约束 Hamilton 系统的 Lagrange 函数:

$$L_e(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, \lambda) = T - V - \lambda g(\mathbf{q}), \quad (21)$$

其中 Lagrange 乘子 λ 用于满足系统的约束条件. 通过 Legendre(勒让德)变换, 与四元数向量 \mathbf{q} 对应的广义动量可以表达为

$$\mathbf{p} = \partial L_e / \partial \dot{\mathbf{q}} = \mathbf{M}^{(4)}(\mathbf{q}) \dot{\mathbf{q}}, \quad (22)$$

其中

$$\mathbf{M}^{(4)}(\mathbf{q}) = -4(I_1 \mathbf{G}_1 \mathbf{q} \mathbf{q}^T \mathbf{G}_1 + I_2 \mathbf{G}_2 \mathbf{q} \mathbf{q}^T \mathbf{G}_2 + I_3 \mathbf{G}_3 \mathbf{q} \mathbf{q}^T \mathbf{G}_3). \quad (23)$$

由此得到的四元数质量矩阵 $\mathbf{M}^{(4)}$ 为奇异矩阵, 上标“(4)”用于区分下面将要提出的 3 种非奇异的广义质量矩阵.

为得到非奇异质量矩阵, 可将恒等关系式 (17) 引入动能项. 为此, 首先将式 (18) 改写为

$$T = \frac{1}{2} I_i(\omega_i^2 + \omega_j^2 + \omega_k^2) + \frac{1}{2}(I_j - I_i)\omega_j^2 + \frac{1}{2}(I_k - I_i)\omega_k^2, \quad (24)$$

其中, 指标 $(i, j, k) = (1, 2, 3), (2, 3, 1)$ 或者 $(3, 1, 2)$. 将式 (17) 代入上式, 可以得到改进的动能:

$$T = 2I_i \dot{\mathbf{q}}^T \dot{\mathbf{q}} + 2(I_j - I_i)(\dot{\mathbf{q}}^T \mathbf{G}_j \mathbf{q})^2 + 2(I_k - I_i)(\dot{\mathbf{q}}^T \mathbf{G}_k \mathbf{q})^2. \quad (25)$$

通过 Legendre 变换, 则广义动量可以写为

$$\mathbf{p} = 4I_i \dot{\mathbf{q}} - 4(I_j - I_i)(\mathbf{G}_j \mathbf{q} \mathbf{q}^T \mathbf{G}_j) \dot{\mathbf{q}} - 4(I_k - I_i)(\mathbf{G}_k \mathbf{q} \mathbf{q}^T \mathbf{G}_k) \dot{\mathbf{q}}. \quad (26)$$

而引入恒等变换后的广义质量阵为

$$\mathbf{M}^{(i)}(\mathbf{q}) = 4I_i \mathbf{I} - 4(I_j - I_i) \mathbf{G}_j \mathbf{q} \mathbf{q}^T \mathbf{G}_j - 4(I_k - I_i) \mathbf{G}_k \mathbf{q} \mathbf{q}^T \mathbf{G}_k, \quad i = 1, 2, 3. \quad (27)$$

由于 $4I_i \mathbf{I}$ 项的存在, 质量阵 $\mathbf{M}^{(i)}$ 是非奇异的, 上标“(i)”, $i = 1, 2, 3$ 用于区分 3 种不同的质量表达式. 这样广义速度可以显式表示为

$$\dot{\mathbf{q}} = (\mathbf{M}^{(i)})^{-1} \mathbf{p}, \quad i = 1, 2, 3. \quad (28)$$

由于指标 (i, j, k) 具有 3 种形式, 式(24)至(28)提供了 3 种不同的获得非奇异质量矩阵的途径. 结合式(23), 本文给出了 Lagrange 体系的 4 种不同表示形式. 根据如上所述的 4 种形式的 Lagrange 函数, 可以推导出 4 种等价形式的 Lagrange 方程组. 本文也将根据这 4 种表达式, 推导与之对应的保辛积分.

3 保辛积分算法

根据分析结构力学基本概念^[12], 将问题转入离散系统, 进而推导保辛的逐步积分方法. 首先, 在时间区段内采用有限元进行离散; 然后用离散系统的作用量变分原理代替原有的微分方程; 在此基础上, 保证离散积分点的约束条件严格满足. 经此步骤得到的逐步积分方法自动保辛.

具体来说, 取离散时间区段 $\eta, t_0 = 0, t_1 = \eta, \dots, t_k = k\eta, \dots$. 可假设 t_{k-1} 时的位移与速度是 $\mathbf{q}_{k-1}, \dot{\mathbf{q}}_{k-1}$ 已知, 并满足 $\mathbf{q}_{k-1}^T \mathbf{q}_{k-1} = 1$ 的约束, 现在的问题是要通过 t_{k-1} 步的已知量计算下一个时间步的 $\mathbf{q}_k, \dot{\mathbf{q}}_k$. 为此首先引入时间 (t_{k-1}, t_k) 的区段作用量(含约束):

$$S_k(\mathbf{q}_{k-1}, \mathbf{q}_k, \lambda_{k-1}, \lambda_k) = \int_{t_{k-1}}^{t_k} L_e(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) dt. \quad (29)$$

然后进行有限元近似, 设在 k -区段内位移取为平均位移, $\mathbf{q}_{\#k} = (\mathbf{q}_{k-1} + \mathbf{q}_k)/2$, 速度为 $\dot{\mathbf{q}}_{\#k} = (\mathbf{q}_k - \mathbf{q}_{k-1})/\eta$, 约束在区段内可近似为 $\lambda g(\mathbf{q}) = (\lambda_{k-1} g(\mathbf{q}_{k-1}) + \lambda_k g(\mathbf{q}_k))/\eta^2$ (Lagrange 乘子乘以一个常数不影响最终计算). 根据式(19)与(25), 可以推导出 4 种形式离散的区段作用量:

$$S_{\#n}^{(i)}(\mathbf{q}_{n-1}, \mathbf{q}_n) = \eta \dot{\mathbf{q}}_{\#n}^T \mathbf{M}^{(i)}(\mathbf{q}_{\#n}) \dot{\mathbf{q}}_{\#n} - \eta V(\mathbf{q}_{\#n}) - \eta^{-1} \lambda_{n-1} g(\mathbf{q}_{n-1})/2 - \eta^{-1} \lambda_n g(\mathbf{q}_n)/2, \quad (30)$$

其中 $i = 1, 2, 3, 4$. 根据分析结构力学理论^[12-13], 可以得到对偶方程:

$$\mathbf{p}_{n-1} = -\partial S_{\#n}^{(i)}/\partial \mathbf{q}_{n-1}, \quad \mathbf{p}_n = \partial S_{\#n}^{(i)}/\partial \mathbf{q}_n, \quad g(\mathbf{q}_{n-1}) = 0, \quad g(\mathbf{q}_n) = 0, \quad (31)$$

其中对于 $i = 1, 2, 3$,

$$\begin{cases} \partial S_{\#n}^{(i)}/\partial \mathbf{q}_{n-1} = -2\mathbf{M}^{(i)}(\mathbf{q}_{\#n}) \dot{\mathbf{q}}_{\#n} + \eta(\mathbf{M}^{(i)}(\dot{\mathbf{q}}_{\#n}) - 4I_i \mathbf{I}) \mathbf{q}_{\#n} - 2^{-1} \eta \partial V(\mathbf{q}_{\#n})/\partial \mathbf{q} - \eta^{-1} \lambda_{n-1} \mathbf{q}_{n-1}, \\ \partial S_{\#n}^{(i)}/\partial \mathbf{q}_n = 2\mathbf{M}^{(i)}(\mathbf{q}_{\#n}) \dot{\mathbf{q}}_{\#n} + \eta(\mathbf{M}^{(i)}(\dot{\mathbf{q}}_{\#n}) - 4I_i \mathbf{I}) \mathbf{q}_{\#n} - 2^{-1} \eta \partial V(\mathbf{q}_{\#n})/\partial \mathbf{q} - \eta^{-1} \lambda_n \mathbf{q}_n, \end{cases} \quad (32)$$

及

$$\begin{cases} \partial S_{\#n}^{(4)}/\partial \mathbf{q}_{n-1} = -2\mathbf{M}^{(4)}(\mathbf{q}_{\#n}) \dot{\mathbf{q}}_{\#n} + \eta \mathbf{M}^{(4)}(\dot{\mathbf{q}}_{\#n}) \mathbf{q}_{\#n} - 2^{-1} \eta \partial V(\mathbf{q}_{\#n})/\partial \mathbf{q} - \eta^{-1} \lambda_{n-1} \mathbf{q}_{n-1}, \\ \partial S_{\#n}^{(4)}/\partial \mathbf{q}_n = 2\mathbf{M}^{(4)}(\mathbf{q}_{\#n}) \dot{\mathbf{q}}_{\#n} + \eta \mathbf{M}^{(4)}(\dot{\mathbf{q}}_{\#n}) \mathbf{q}_{\#n} - 2^{-1} \eta \partial V(\mathbf{q}_{\#n})/\partial \mathbf{q} - \eta^{-1} \lambda_n \mathbf{q}_n, \end{cases} \quad (33)$$

则状态变量为 $\mathbf{v}_n = \{\mathbf{q}_n^T \quad \mathbf{p}_n^T\}^T$. 按分析结构力学方法, 从 \mathbf{v}_{n-1} 可递推 \mathbf{v}_n , 该变换保辛, 但带有参

变量 λ_{n-1} . 确定 λ_{n-1} 要根据节点约束条件 $g(\mathbf{q}_n) = 0$. 对于 $i = 4$ 的情形, 实际上就是参考文献 [11] 中的保辛积分方法.

实际工程中, 给定的初始条件通常为 Euler 角 $(\varphi_0, \theta_0, \psi_0)$, 以及贴体坐标系下角速度矢量 $\boldsymbol{\omega}$ 等, 这些物理量与四元数之间的变换关系在一般的介绍四元数应用的书中便可找到^[14], 继而便可获得初始四元数 $\mathbf{q}_0, \dot{\mathbf{q}}_0$. 初始时刻的 \mathbf{p}_0 则由 Legendre 变换

$$\mathbf{p} = \partial L(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) / \partial \dot{\mathbf{q}} \quad (34)$$

确定. 得到初始时刻的状态变量 $\mathbf{v}_0 = \{\mathbf{q}_0^T \ \mathbf{p}_0^T\}^T$, 便可递推地求解出 $\mathbf{v}_n (n = 1, 2, \dots)$. 实际计算时, 根据式 (31), 区段作用量 $S_n^{(i)}$ 与 $S_{n+1}^{(i)}$ 均产生 \mathbf{p}_n , 两者相等从而可得到动力学方程:

$$-\partial S_{n+1}^{(i)} / \partial \mathbf{q}_n = \partial S_n^{(i)} / \partial \mathbf{q}_n, \quad i = 1, 2, 3, 4. \quad (35)$$

此式联立约束方程 $g(\mathbf{q}_{n+1}) = 0$ 便可迭代求解.

具体算法如下:

- 1) 初始时刻, 已知 $\mathbf{q}_0, \dot{\mathbf{q}}_0$, 根据式 (34) 计算 \mathbf{p}_0 ;
- 2) 联立方程 $\mathbf{p}_0 = -\partial S_1^{(i)} / \partial \mathbf{q}_0, g(\mathbf{q}_1) = 0$, 迭代求解 \mathbf{q}_1, λ_0 ;
- 3) 假设已求得 $\mathbf{q}_{n-1}, \mathbf{q}_n$, 则 $\mathbf{q}_{n+1}, \lambda_n$ 由式 (35) 加上非线性约束方程 $g(\mathbf{q}_{n+1}) = 0$ 迭代得到.

4 数值例题与讨论

本节将通过数值算例来展示本文提出的积分方法的精度和保守性质. 在下文的论述中, 将以缩写“QSV*i*”来表示本文提出的基于离散作用量的保辛积分方法. 其中最后一个字母“*i*”用于区分式 (31) 中的 4 种不同表达式. 例如对于式 (31) 中 $i = 1$ 的情况, 缩写将变为 QSV1.

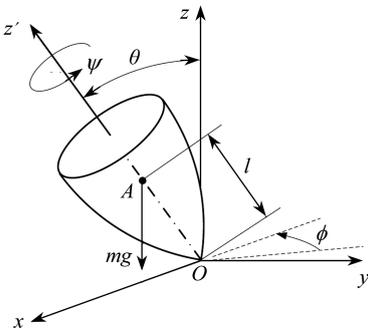


图 1 对称重陀螺

Fig.1 A symmetric heavy top

如图 1 所示, 考虑有一个固定点 O 的重陀螺的运动. 陀螺处于均匀重力场中, 重力加速度 $g = 9.81 \text{ m/s}^2$, 沿 z 轴向下. 质心距固定点距离为 l , 陀螺运动可由章动角 θ 、进动角 ϕ 以及自旋角 ψ 加以描述. 设贴体系原点与惯性系重合, 因此重力势能可以表示为

$$V(\mathbf{q}) = mgl \cos \theta = mgl(q_0^2 - q_1^2 - q_2^2 + q_3^2), \quad (36)$$

其中 m 为陀螺质量.

4.1 高速陀螺

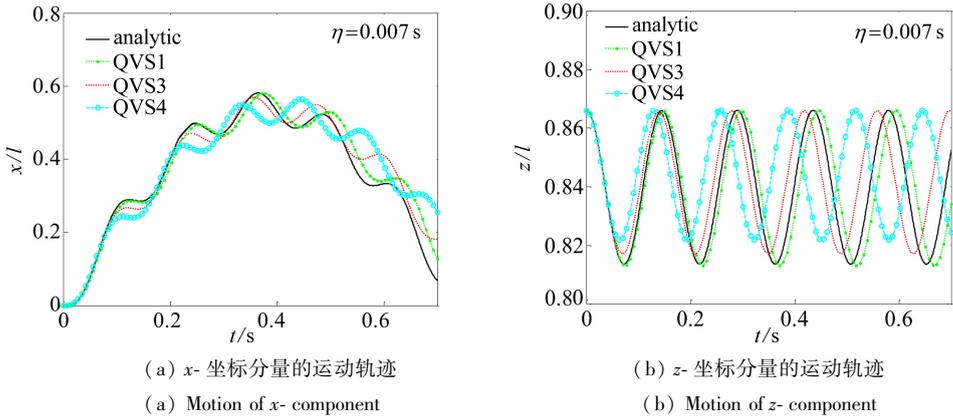
首先考虑高速陀螺, 在这种情况下, 沿 z' 轴旋转产生的动能大于势能的最大改变量. 设 $l = 0.04 \text{ m}, m = 1 \text{ kg}$, 转动惯量

$I_1 = I_2 = 0.002 \text{ kg} \cdot \text{m}^2, I_3 = 0.0008 \text{ kg} \cdot \text{m}^2$. 考虑如下初始条件:

$$\theta_0 = \pi/6 \text{ rad}, \boldsymbol{\omega}(0) = \{0 \ 0 \ 40\pi\}^T, \text{ rad/s}. \quad (37)$$

图 2 给出了对称重陀螺高速旋转下的运动轨迹, 并且展示了 4 种基于 4 种表达式的保辛积分与解析解的比较结果. 由于 $I_1 = I_2$, QVS1 与 QVS2 具有相同的形式. QVS4 实际上与参考文献 [11] 具有相同的格式. 如图所示, 引入恒等变换式 (17) 的 QVS1 与 QVS3 的精度均要优于 QVS4, 其中 QVS1 精度最高. 大量的数值算例显示, 对于高速旋转的对称重陀螺, $I_1 > I_3$ 时, QVS1 在 3 种格式中总是精度最高的; 当 $I_1 < I_3$ 时, QVS3 则是具有最高精度的格式. 同时, 引入恒等变换式 (17), 也使得 QVS1 与 QVS3 获得了较 QVS4 更大的迭代步长. 例如, 对于本例, 当 $\eta = 0.007 \text{ s}$, 在每一积分步迭代时, 3 种方法都迭代收敛; 当 $\eta = 0.01 \text{ s}$ 时, QVS4 便不能收敛到

正确的结果了。



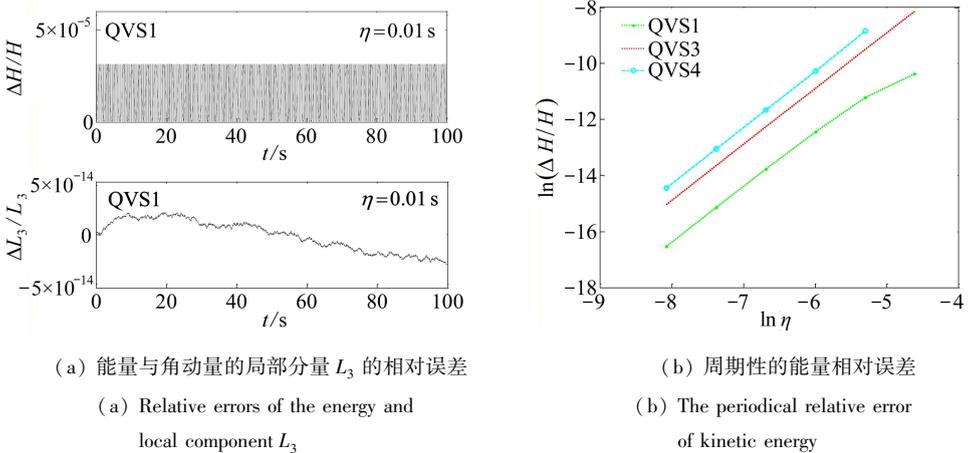
(a) x - 坐标分量的运动轨迹
(a) Motion of x - component

(b) z - 坐标分量的运动轨迹
(b) Motion of z - component

图2 高速对称陀螺质心运动:保辛积分4种表达形式数值结果与解析解的对比

Fig.2 The mass center motion of a fast symmetric top: comparison between the analytical solution and the numerical results of the 4 formulations of symplectic integration

对于此算例,总能量与局部坐标系的角动量 L_3 均是守恒量.图 3(a)展示了步长 $\eta = 0.01$ s 时 QVS1 的能量以及角动量 L_3 的长时间误差.如图所示,在 100 s 的时间内,能量的相对误差维持 10^{-5} 量级的周期震荡,而局部角动量分量 L_3 则保持了 10^{-14} 量级的相对误差.图 3(b)显示了能量误差随时间步长的变化规律.其中, QVS1 展示了远高于其它两种格式的能量精度.图 3(b)同样显示了算法的 2 阶精度性质.图 4 给出了 QVS1 与能量-动量差分^[8-9]的比较结果.对于高速旋转陀螺, QVS1 的精度大大优于相同步长下的能量-动量差分格式.此外,在时间步 $\eta = 0.01$ s 计算 72 步数值解, QVS1 耗费 2.65 s 的计算时间,而相比之下 QEM 则耗费了 12.01 s 的时间.



(a) 能量与角动量的局部分量 L_3 的相对误差
(a) Relative errors of the energy and local component L_3

(b) 周期性的能量相对误差
(b) The periodical relative error of kinetic energy

图3 高速对称陀螺质心运动:关于保辛积分4种表达形式的不变量误差

Fig.3 The mass center motion of a fast symmetric top: errors of invariants with respect to the 4 formulations of symplectic integration

考虑 $I_1 \neq I_2$ 的情形,将上述算例中的主转动惯量 I_2 改为 $I_2 = 0.0016 \text{ kg} \cdot \text{m}^2$,其它参数不变,采用同样的初始条件进行数值模拟.图 5 给出质心沿 z 轴分量随时间变化的数值结果,步长取 $\eta = 0.007$ s.本例显示, QVS2 的精度最高.

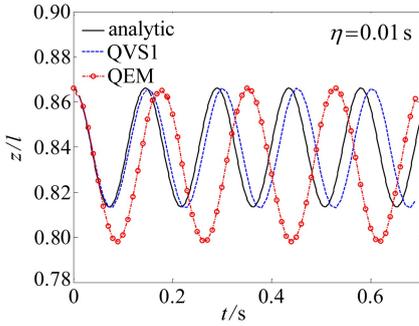


图4 高速对称陀螺质心运动:解析解与QVS1以及能量-动量差分数值结果比较

Fig.4 The mass center motion of a fast symmetric top: comparison between the analytical solution and the numerical results of QVS1 and the energy-momentum scheme

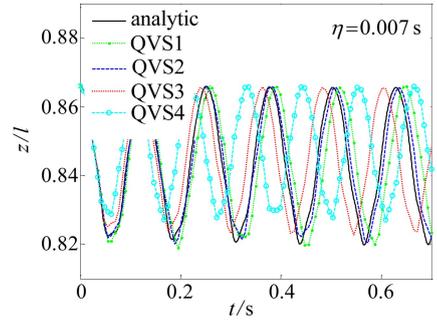
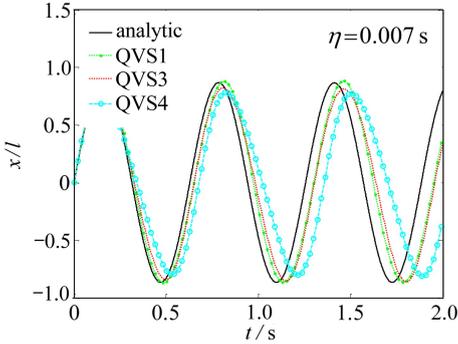


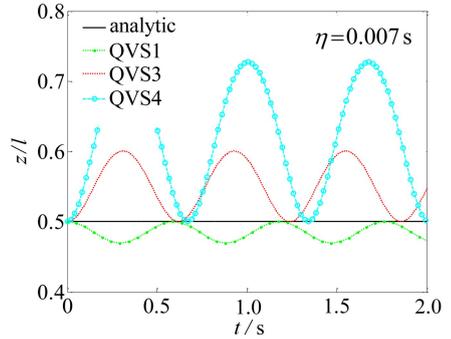
图5 不对称高速陀螺质心运动:保辛积分4种表达式数值结果与参考解z-坐标分量的对比

Fig.5 The mass center motion of a fast asymmetric top: comparison of z- component between the reference solution and the numerical results of the 4 formulations of symplectic integration



(a) x- 坐标分量的运动轨迹

(a) Motion of x- component



(b) z- 坐标分量的运动轨迹

(b) Motion of z- component

图6 稳态进动陀螺质心运动:保辛积分4种表达式数值结果与解析解的对比

Fig.6 The mass center motion of a steady precessing top: comparison between the analytical solution and the numerical results of the 4 formulations of symplectic integration

4.2 陀螺稳态进动

考虑一个圆锥陀螺,高 $h = 0.1 \text{ m}$, $l = (3/4)h$, 半径 $r = h/2$, 圆锥陀螺的质量为 $m = \rho\pi^2 h/3$, 其中密度为 $\rho = 2700 \text{ kg/m}^3$. 这样, 相对于参考点 O 的主转动惯量为

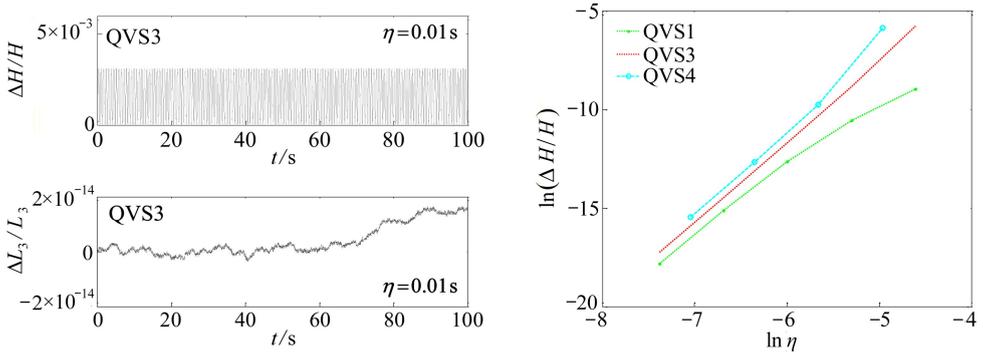
$$I_1 = I_2 = 3m(r^2/4 + h^2)/5, \quad I_3 = 3mr^2/10. \quad (38)$$

对于陀螺稳态进动问题, 运动过程中不产生章动. 假设进动速率为 $\dot{\phi} = 10 \text{ rad/s}$, 在此基础上可给定初始条件

$$\theta_0 = \pi/3 \text{ rad}, \quad \boldsymbol{\omega}(0) = \{0 \quad \dot{\phi} \sin \theta_0 \quad \dot{\psi} + \dot{\phi} \cos \theta_0\}^T, \text{ rad/s}. \quad (39)$$

图6给出了对称重陀螺高速旋转下的运动轨迹, 并且展示了4种基于4种表达式的保辛积分与解析解的比较结果. 对于陀螺稳态进动问题, 真实情况应没有章动. 然而近期的研究^[8-9]显示, 基于四元数的能量-动量守恒积分算法具有非常严重的章动误差. 从图6(b)可以看出, QVS4同样展示出来很大的章动误差. 而经过恒等变换的QVS1与QVS3的章动误差则有不同程度的减小. 这表明恒等变换对减小陀螺稳态进动章动误差起到了关键作用. 比较图6(a)中沿

x 坐标的分量,对于数值计算来说,QVS1 所显示的章动误差处于合理的范围内,同高速旋转陀螺相同,当 $I_1 > I_3$ 时,QVS1 精度最高;当 $I_1 < I_3$ 时,QVS3 精度最高.图 7 给出了陀螺稳态进动问题守恒量的精度.图 7(a) 显示,当步长取 $\eta = 0.01$ s 时, QVS3 的能量相对误差在 10^{-3} 的量级作周期性震荡,而局部角动量 L_3 则在 100 s 的模拟时间内展现了 10^{-14} 量级的相对误差.这暗示了本文所示保辛算法的动量守恒性质.图 7(b) 显示了能量误差随时间步长的变化规律.从图中可以看出,对于本算例,QVS1 的能量精度最高,并且随着时间步长的增长,这种精度上的差距愈发明显.图 8 显示,对于陀螺稳态进动问题,能量-动量差格式(QEM)相较于 QVS1 展现了严重的章动误差.



(a) 能量与角动量的局部分量 L_3 的相对误差

(b) 周期性的能量相对误差

(a) Relative errors of the energy and local component L_3

(b) The periodical relative error of kinetic energy

图 7 稳态进动陀螺质心运动:关于保辛积分 4 种表达形式的不变量误差

Fig.7 The mass center motion of a steady precessing top: errors of invariants with respect to the 4 formulations of symplectic integration

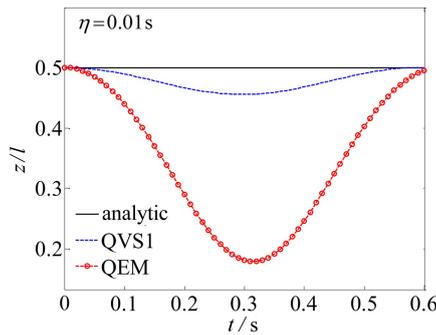


图 8 稳态进动陀螺质心运动:解析解与 QVS1 以及能量-动量差分数值结果比较

Fig.8 The mass center motion of a steady precessing top: comparison between the analytical solution and the numerical results of QVS1 and the energy-momentum scheme

5 结 论

本文根据刚体动力学的四元数表示,提出了一种数值积分方法.算法将离散的作用量函数引入动力学数值积分,并结合祖冲之方法论,在积分点处严格满足约束条件,进而采用离散系统的变分原理代替差分近似构造数值积分格式.由于应用了分析结构力学的基本理论,算法自动保辛,并且将四元数时间导数与角速度之间的恒等变换引入作用量函数,避免了四元数质量

矩阵的奇异性,在此基础上可以得到4种形式的保辛积分.数值算例显示,引入变换的3种保辛积分精度大大高于原始的积分格式,并且可以获得更大的收敛半径.此外,改进的积分算法同时也避免了四元数类算法模拟陀螺稳态进动时严重的章动误差.

本文仅对恒等变换以及改进形式的保辛积分进行了初步探讨.关于恒等变换的性质以及基于此变换的数值积分格式在不同条件下的精度特质的研究有待深入展开.

参考文献(References):

- [1] Goldstein H, Poole Jr C P, Safko J L. *Classical Mechanics*[M]. 3rd ed. Boston: Addison Wesley, 2002.
- [2] Mclachlan R I, Scovel C. Equivariant constrained symplectic integration[J]. *Journal of Non-linear Science*, 1995, **5**(3): 233-256.
- [3] Hairer E, Lubich C, Wanner G. *Geometric Numerical Integration: Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations*[M]. Springer, 2006.
- [4] Wendlandt J M, Marsden J E. Mechanical integrators derived from a discrete variational principle[J]. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 1997, **106**(3): 223-246.
- [5] Simo J C, Wong K K. Unconditionally stable algorithms for rigid body dynamics that exactly preserve energy and momentum[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 1991, **31**(1): 19-52.
- [6] Lens E V, Cardona A, Geradin M. Energy preserving time integration for constrained multi-body systems[J]. *Multibody System Dynamics*, 2004, **11**(1): 41-61.
- [7] Betsch P, Steinmann P. Constrained integration of rigid body dynamics[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2001, **191**(3): 467-488.
- [8] Betsch P, Siebert R. Rigid body dynamics in terms of quaternions: Hamiltonian formulation and conserving numerical integration[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2009, **79**(4): 444-473.
- [9] Nielsen M B, Krenk S. Conservative integration of rigid body motion by quaternion parameters with implicit constraints[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2012, **92**(8): 734-752.
- [10] Krenk S, Nielsen M B. Conservative rigid body dynamics by convected base vectors with implicit constraints[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2014, **269**: 437-453.
- [11] 徐小明, 钟万颢. 刚体动力学的四元数表示及保辛积分[J]. *应用数学和力学*, 2014, **35**(1): 1-11. (XU Xiao-ming, ZHONG Wan-xie. Symplectic integration of rigid body motion by quaternion parameters[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2014, **35**(1): 1-11. (in Chinese))
- [12] 钟万颢. 应用力学的辛数学方法[M]. 北京: 高等教育出版社, 2006. (ZHONG Wan-xie. *Symplectic Method in Applied Mechanics*[M]. Beijing: Higher Education Press, 2006. (in Chinese))
- [13] 钟万颢, 高强, 彭海军. 经典力学——辛讲[M]. 大连: 大连理工大学出版社, 2013. (ZHONG Wan-xie, GAO Qiang, PENG Hai-jun. *Classical Mechanics—Its Symplectic Description*[M]. Dalian: Dalian University of Technology Press, 2013. (in Chinese))
- [14] 程国采. 四元数法及其应用[M]. 长沙: 国防科技大学出版社, 1991. (CHENG Guo-cai. *The Method of Quaternion and Its Application*[M]. Changsha: National University of Defence Technology Press, 1991. (in Chinese))

An Improved Symplectic Integration for Rigid Body Dynamics in Terms of Unit Quaternions

XU Xiao-ming, ZHONG Wan-xie

(*State Key Laboratory of Structural Analysis for Industrial Equipment (Dalian University of Technology)*; *Department of Engineering Mechanics, Dalian University of Technology, Dalian, Liaoning 116024, P.R.China*)

(Contributed by ZHONG Wan-xie, M. AMM Editorial Board)

Abstract: An identity transformation between the time derivative of quaternions and angular velocity was introduced into the kinetic energy term, according to the theory of quaternion-based rigid body dynamics. This proposed approach yielded a non-singular mass matrix. Combined with the analytical structural mechanics, a new symplectic integration scheme with 4 formulations, was proposed. In practice, the discrete variational principle of the action function was employed to replace the relevant quaternion differential equations for the proposed method. Correspondingly, the unit length constraint was met explicitly by means of the algebraic constraint at the integration grid points. The numerical results show that the new scheme avoids the severe periodical nutation errors for the special cases of steady precession of a gyro top, which is a puzzling phenomenon in recent researches. In addition, the new scheme presents an impressive improvement of accuracy for the general cases as well.

Key words: analytical structural mechanics; unit quaternion; rigid body dynamics; symplectic integration; identity transformation; heavy top

Foundation item: The National Natural Science Foundation of China (General Program) (11472067)