不可压流体的模拟、渲染和应用研究

摘 要

不可压流体

**关键词：**计算机图形学，拉式模拟，OpenGL，屏幕空间渲染，不可压流体，实时应用，CUDA

**The simulation, rendering and application of incompressible fluids**

**ABSTRACT**

**Key words：**computer graphics, Lagrangian simulation, OpenGL, screen-space rendering, incompressible fluids，real-time application， CUDA

目 录

[1 引 言 1](#_Toc402184259)

[1.1 研究背景 1](#_Toc402184260)

[1.2 流体模拟的研究现状与相关工作 1](#_Toc402184261)

[1.3 流体渲染的研究现状与相关工作 1](#_Toc402184264)

[1.4 本文所作的工作 1](#_Toc402184265)

[2 流体的PBF模拟方法 2](#_Toc402184266)

[2.1 Navier-Stokes方程组 2](#_Toc402184267)

[2.2 平滑粒子动力学模型 2](#_Toc402184268)

[2.3 求解不可压性的PBF方法 2](#_Toc402184268)

[2.3.1 流体位置的压强修正 2](#_Toc402184269)

[2.3.2 流体速度的涡度、粘度修正 2](#_Toc402184270)

[2.4 PBF方法的GPU并行化实现 2](#_Toc402184268)

[2.4.1 CUDA并行编程简介 2](#_Toc402184269)

[2.4.2 近邻粒子寻找算法 2](#_Toc402184269)

[2.4.3 实现管线细节 2](#_Toc402184269)

[3 流体的屏幕空间渲染 3](#_Toc402184272)

[4 结果和讨论 4](#_Toc402184280)

[5 结论和展望 6](#_Toc402184288)

[5.1 结论 6](#_Toc402184289)

[5.2 展望 6](#_Toc402184290)

[参考文献 7](#_Toc402184291)

[谢 辞 8](#_Toc402184292)

# 1 引 言

## 1.1 研究背景

计算流体力学（Computational Fluid Dynamics, CFD）是使用数值方法模拟流体运动的学科，流体模拟对象包括水流、火焰、烟雾、流动的沙粒等一系列自然现象和景观。航空航天、传播制造等领域对模拟的物理真实性有很高要求。与这些领域不同，计算机图形学中常常牺牲一定的物理准确性，以较小的计算量，追求视觉上的真实性。计算机游戏、医疗研究等交互性较强的应用，更是对流体的模拟和渲染提出了严格的实时性要求。由于传统的模拟方法计算量庞大，并行化程度低，不能很好满足实时性要求，流体模拟的实时化逐渐成为业界和学界研究的热点。

## 1.2 流体模拟的研究现状与相关工作

根据微分方程离散方式的不同，模拟方法通常可分为欧式法（Euler method）、拉式法（Lagrangian method）和混合方法（Hybrid method）三类。本世纪初Stam等人发表的两篇重要论文[1][2]，成为了欧式法的奠基之作。欧式法将空间分割为离散的格子（Grid），将流体的速度、压强、温度等物理参数记录在格子中。通过将NS方程进行有限差分，欧式法将微分方程求解转化为高阶线性方程的求解。针对欧式法均匀采样浪费空间，损失精度的问题，Losassao提出了八叉树[3]，Feldman[4]等人提出了非结构四面体网格（Unstructured tetrahedral meshes）的离散方法。然而，这些方法的实现十分复杂，同时精度通常逊于朴素的欧式方法。传统欧式法依旧存在过高内存要求、采样精度损失和数值耗散等一些问题[5]。2016年，Chern等人发表了论文《薛定谔的烟》[6]，提出使用为值域的波函数描述流体状态，并使用凝聚态物理中用于求解超流体的非线性薛定谔方程（Gross-Pitaevskii方程）作为流体的动力学方程，开发了一种没有数值耗散，同时可以高效求解其不可压性的欧式方法。这种方法在对烟雾的模拟上取得了突破性的效果。但对于需要渲染表面的水流等液体，目前并没有好的波函数表面重建方法。

拉式法将流体离散为固定数量，在约束下自由活动的粒子，由粒子记录流体状态的各个物理量。拉式法可追溯到20世纪70年代Gingold、Lucy等人在研究星际气体运动的工作[7][8]。Desbrun和Cani[9]最先把Gingold的平滑粒子流体动力学方法（Smoothed Particle Hydrodynamics, SPH）引入图形学中。随后，Müller的工作[10]展现了SPH在实时动画和交互应用中的前景。Solenthaler等人提出的预测校正不可压SPH（Predictive-corrective incompressible，SPH）第一次实现了满足不可压条件的拉式方法，将拉式方法推进了一大步，并在实时模拟领域得到了广泛的应用。随后Macklin等人的基于位置的流体（Position base fluids），又在同等精度下提高了模拟步长和稳定性，进一步提升了流体模拟的实时性。该方法是本文实现的重点。

混合方法是目前电影工业界常用的，精度最高的方法。混合方法使用欧式法求解不可压方程，欧式法精度高且易于处理流体边界；使用拉式法处理流体的对流（advection），即各物理量随着流体在速度场的转移，从而避免了欧式法的数值耗散。经典的混合方法包括八十年代流行至今的粒子元胞法（Particle-In-Cell, PIC）[11]，和隐式粒子流体法（FLuid Implicit Particle, FLIP）[12]。商业软件如Houdini，Realflow几乎都是使用FLIP方法。最近Jiang等人提出了仿射粒子元胞法（Affine Particle-In-Cell, APIC）[13]，其兼具了PIC的稳定性和FLIP低耗散的特点。其改进，Fu提出的多项式粒子元胞法（A polynomial particle-in-cell method）[14]，大幅减少了能量和旋量(vorticity)在数值计算中的损失。APIC被已经应用在迪士尼和皮克斯最新的电影中（如《海洋奇缘》）[15]。

## [1.3 流体渲染的研究现状与相关工作](#生成函数法及其优势)

## 1.4 本文所作的工作

本文针对不可压流体，实现了一种新的拉式（Lagrangian）实时模拟方法，称为基于位置的流体（Position based fluids）方法[16]。同时，本文实现了一种屏幕空间的拉式流体渲染方法，这种方法利用深度缓存（Depth buffer）还原粒子化表示的液体[17]，省去了传统方法中的重建步骤，表现出优秀的实时效果。

# 2 流体的PBF模拟方法

一切计算机物理模拟都是对描述物理现象的物理方程的有限近似和数值求解。本节首先从流体的物理性质出发，导出准确描述流体运动的Navier-Stokes方程，然后介绍了本文使用的空间离散方法——平滑粒子动力学（Smoothed Particle Hydrodynamics，SPH）模型。平滑粒子动力学模型是拉式模拟的一种典型实现方法，但它本身不描述流体的运动规律。本节接着引入了Navier-Stokes方程的时间离散方法——“基于位置的流体 (Position Based Fluids, PBF)”方法。这种方法最突出贡献，是使用雅可比方法迭代修正不可压方程，从而以很小的代价、优越的强健性解决了流体不可压约束的问题。本节最后描述了使用CUDA的PBF方法并行实现。

## 2.1 Navier-Stokes方程组

**2.1.1 动量方程**

Navier-Stokes方程组是描述流体运动规律的方程组。本文研究的流体满足不可压条件和牛顿条件两个条件。后文将详细描述两个条件和它们的使用范围。从这两个条件出发，本节导出Navier-Stokes方程组的完整形式。

（图2-1(a), (b)，体积V，dV）

首先我们考虑空间中的一块流体区域，这块区域内的任意一点有密度、速度等物理量。设外力为，对这一块流体区域应用**牛顿第二定律**，有

注意（1）中研究的对象是一块固定的流体，含有固定的一些分子。由于流体会流动，区域是随时间变化的量。（1）式的左侧可以用**莱布尼茨法则**展开。莱布尼茨法能够将对积分的导数转化成对导数的积分，如下所示，是液体的任意一个物理量，是区域的边界，有

其中方程右侧 是应用了三维空间中的散度定理（高斯定律）。

莱布尼茨法则有一个显著的物理意义。方程左侧物理量在整块区域的变化，是右侧第一项区域内随时间变化，与右侧第二项体积变化叠加的结果。

将莱布尼茨法则应用到（1）左侧，可以得到

上式比较复杂，但实际上，我们可以利用质量守恒定律做简化。空间虽然会随时间发生变动，但我们考虑的其中的流体既不会增加也不会减少，因此有**质量守恒定律**

对质量守恒定律应用莱布尼茨法则，有

因为对任意的上面的等式都成立，必有，而这一项恰好出现在（3）中，因此可将（3）简化。将简化的（3）带回（1），得到牛顿定律导出的最终方程，文献中常称之为**动量方程**。

如果将（5）与牛顿第二定律方程的基本形式相比较，能够发现两者之间形式上的相似性：对应，同时中的正好是加速度的定义，而多出来的一项是“漂移“产生加速度。为了便于理解，考虑一个具体的例子：假设有一条河流，河面上每个位置的水流速度是固定的，但是不同位置的速度是不同的。当一个人泛舟而下时，假设船速与水流速度相等，他将会感受到船的加速度，这个加速度是因为船经过了速度不同的区域。中表征了速度变化的方向，而则表征了漂移的方向。

为了简化表示，定义**材料微分**运算符

利用（6）将（5）重写为（7）

现在考虑作用在体积上的外力，它们的存在使得液体的速度发生改变。首先容易想到，应包含有重力，其中是重力常数。除此之外，流体会还受到周围流体的挤压，产生压强力。对于有粘性的流体，还会因为与周围流体有流速差异受到粘性力。下面我们将逐项分析。

首先考虑压强力。压强仅在体积的表面对有贡献，因为内部的压强力将会互相抵消。对于流体，通常可以认为压强是各向同性的，即一点处的压强对四周任意方向施加的压强力大小是相同的，因此压强是一个标量。

（图1.(c)，片元压强）

对于表面上的任意一块小片元，设此处压强为，表面法向量为，由压强的定义容易知道。因此作用在整块体积上的压强力为

上式中的第二个等号应用了散度定理。

最后我们来考虑粘性力。理想的无粘性、不可压的液体被称为**欧拉液体，**又称为超流体。这种液体没有粘性力，在没有外力扰动的情况下，它的动能和旋度将始终保持不变——其中的液体漩涡一旦生成，永远也不会消失。超流体是真实存在的，已知的超流体包括超低温状态下的氦-3和氦-4液体[18]。在天体物理和高能物理中也有关于超流状态的物质的理论[19]。

最常见的流体，例如水和烟尘，都可被认为属于**牛顿流体**。通俗的讲，牛顿流体的特征是其粘性力正比于流速的变化速率。如下图所示，在流体的一个断层两端有不同的流速，则快的一端将会对慢的一端施加拖拽力。牛顿流体的这种性质使得不同位置的速度趋于相等，同时液体的能量发生损耗，最终达到静态平衡状态。

（图2-2. 断层上的粘性力）

流体速度的梯度表征空间不同方向上流速变化的强度和方向。在区域边界上任意一处片元，我们考虑粘性力对体积的作用。对垂直边界法向方向上的速度分量，根据牛顿第三定律，它受到的粘性力必有一等大反向的粘性力作用在另一片元上。而由于此方向上的速度必定是沿着平行方向变化，此反作用力没有离开表面，因此此力与其反作用力对体积没有影响。由此推理，对体积有影响的是切向流向的速度在法向方向变化产生的粘性力，因此此力正比于。应当注意到，在三维空间中，是一个3x3张量，则得到一个3维向量。在表面上对这个式子积分时，散度定理依然适用。因篇幅原因此处不做赘述。

在表面上对粘性力积分就得到了作用在整个体积上的粘性力，由如下公式给出

其中是**粘度因子**，或称**动态粘度（Dynamic viscosity）**。通常假设牛顿液体的动态粘度是固定的。在实际情况下，动态粘度会随着压强、温度甚至磁场发生变化。例如，低温状态下的蜂蜜比高温状态下的蜂蜜拥有大得多的粘度。然而，这不是本文研究的重点，因此我们假设一种流体的粘度始终是一个常数。

综合重力，压强力和粘性力，带入动量方程（5）中，我们导出完整的动量方程的积分形式和微分形式。模拟算法是作用在离散模型上的算法，更贴合方程的微分形式。我们将在2.3节中展开利用动量方程微分形式更行平滑粒子状态的方法。

**2.1.2 不可压条件**

在密度，重力常数，粘度都给定的情况下，动量方程（11）仍并不足以给出流体的一个解，因为流体的压强是一个随时间和位置变化的变量。向量方程（11）在x, y, z上给出三个标量方程，但速度和压强构成了4个未知量。因此要使方程确定必须要寻找一个额外条件，这个额外条件恰好是不可压条件。

动量方程（11）和不可压条件（12）统称为Navier-Stokes方程组。

不可压条件是密度为常数和物质守恒的必然结果。不可压条件的物理意义是，对一块我们确定的体积，其中含有固定的流体分子，无论体积的形状怎么变化，它的**大小**都不会发生改变。考虑一段时间内体积的变化量与其表面处液体流速的关系

第一个等号是因为质量守恒=0，第二个等号参看图1(b)，第三个等号应用了散度定理。因为对任意上式都成立，所以有不可压条件（12）。

不可压条件在实际中并不能被严格满足。例如，气体可以被显著地压缩；液体的不可压性较好，但仍能被压缩，否则声音无法在水中传播。对计算机图形学中的模拟应用而言，不可压性几乎不会对视觉真实性造成影响，同时它极大的简化了Navier-Stokes方程组的形式，使得计算机科学家得以设计出相对简单、计算代价较小的模拟算法，因此几乎被所有模拟软件所采用。

## 2.2 平滑粒子动力学模型

平滑粒子动力学（Smoothed Particle Hydrodynamics, SPH）模型是流体模拟中一种典型拉式离散方法。Desbrun和Cani[9]最先把Gingold的平滑粒子流体动力学方法（Smoothed Particle Hydrodynamics, SPH）引入图形学中。随后，Müller的工作[10]展现了SPH在实时动画和交互应用中的前景。SPH将液体离散为固定数量的粒子。在最常见的情形中，每个粒子有一个统一的质量，支配空间中一块固定大小的球形区域。粒子携带着速度、密度、压力等流体参数，在Navier-Stokes方程组的支配下运动。（TODO：关于点云、溅射、图）

2.2.1 平滑核

平滑核规定了一个粒子对周围空间的影响范围和分布。平滑核是一个以原点径向对称的标量函数，其分布应当类似高斯分布[20]，但通常支撑集是有限的，并将支撑集的半径记为。本文中使用的核函数需要满足如下的条件，

1. 归一性条件，在支撑集上。
2. 高阶矩等于零， 。
3. 支撑集有限，对于某个有。  
   这个条件使得计算空间某点的物理量时仅用考虑距离在范围内的粒子。本文针对这个特性设计了模拟加速数据结构，将在后文展开。
4. 非负性，**。**
5. 光滑可微分， SPH计算中大量涉及平滑核上的微分。
6. 应能良好地避免聚集，下文将会对此展开描述。

(图2-3，典型的核函数)

光滑核的选取对SPH的稳定性、准确性和速度都会造成很大的影响。本文中使用了Müller在2003[10]提出的Poly6核和Spiky核，它们具有不同的性质，分别用于PBF算法的密度估计和梯度计算。Poly6核的定义如下

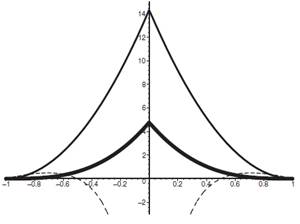
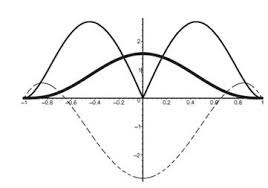
Poly6核的梯度为

Poly6核的梯度仅含有的二次项，避免了计算向量长度时耗时的根号。同时应该注意到，Poly6的梯度在靠近原点处逐渐消失。由于核函数的梯度常常用来计算粒子间的排斥力（例如，压强力），消失的梯度将会导致距离很近粒子之间无法排斥，发生聚集（Clustering）。在模拟过程中，当两个粒子一旦进入精度无法分辨的重合状态，将没有其他作用力能将它们分开，从而造成严重的体积损失现象。这显然背离了理想的模拟结果。

作为替代，我们使用Spiky核用于计算核函数的梯度。Spiky核的定义如下

Spiky核的梯度为

注意到Spiky函数是一个向量函数，且在处函数值的长度达到最大。



（图2-4，h=1 ）

2.2.2 SPH流体参数

定义核函数后，空间中任意位置的一个物理量可通过对整个空间中粒子的核函数求和近似得到。

通过定义（16）可以注意到，一个粒子中心的物理量并不等于这个粒子携带的物理量。因为其他位置的粒子也会对这个位置有所贡献。

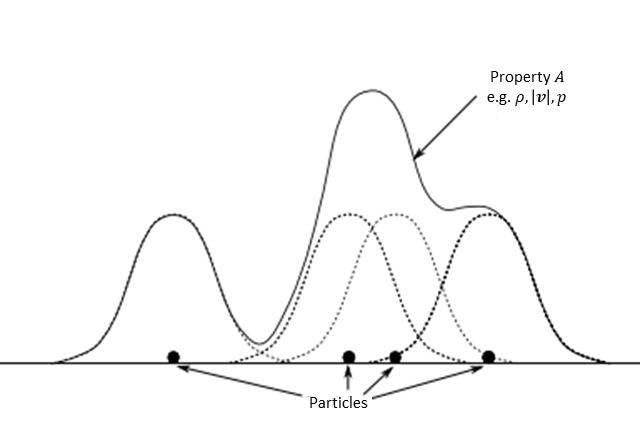


图2.5 空间离散粒子还原空间连续物理量

因为模拟的物理量离散地记录在粒子上，我们通常不关心任意位置的物理量，而只关心粒子中心处地物理量。以下给出密度和压强的计算公式。若没有特别说明，速度等其他物理量都可以用类似方法算出。

粒子位置的密度为

其中。SPH模拟常常还需要计算物理量的梯度。式（17）为书写方便定义在上，但所有其他粒子的位置都是密度的隐含自变量。因此式（17）的梯度分为关于的梯度和关于的梯度。

根据热力学中的状态方程(Equation of State, EOS)，流体的密度和压强满足一些特定的关系。例如在完全气体假设，有，其中是一个跟气体比热容有关的绝热因子，是每单位质量的气体内能[21]。对于液体，计算机图形学通常使用可压性更弱的Tait方程。Tait方程有如下的形式

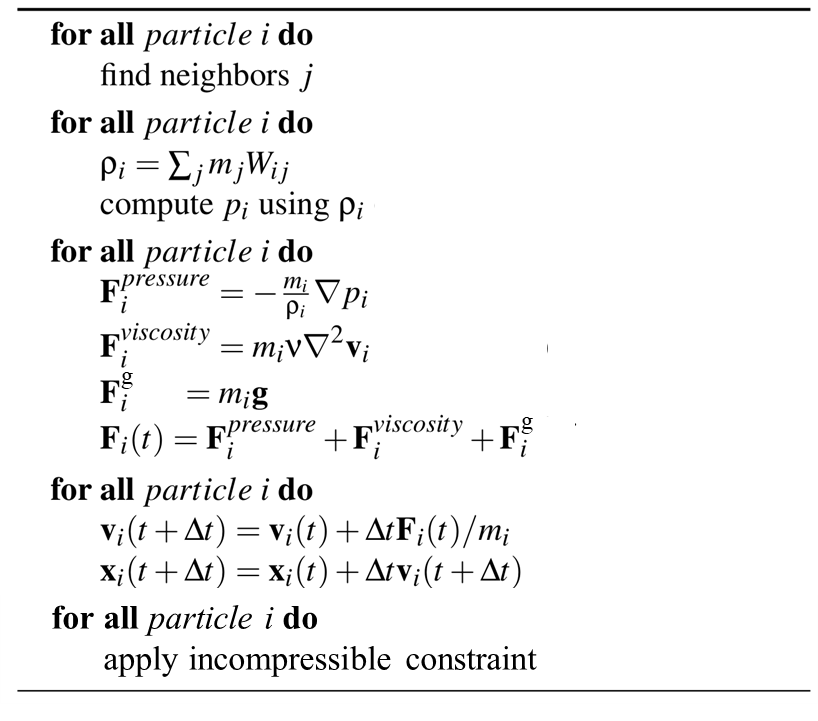
密度导出的压强是许多SPH方法中计算压强力的核心。但本文实现中使用的方法没有直接应用到密度导出的压强，因此不再做展开。

2.2.3 SPH流体模拟框架

SPH拉式法的一个优势是，粒子物理量的材料微分就是粒子的加速度，不需要处理材料微分的展开形式。实际上，考虑对时间的导数，其中是粒子位置，注意到也是时间的函数，有

恰好是材料导数。

这个结论结合上一节中提到的状态方程导出压强的方法，我们给出SPH流体框架的一般形式，这个形式的SPH框架以力为改变流体状态的媒介，计算出压强力，粘性力和重力，直接利用动量方程更新速度，最后根据不可压条件修正粒子速度和位置。



算法1.

这个方法没有给出具体的不可压修正方法。实际上，它的原始并没有不可压性修正过程，能给出不真实但可信的模拟结果。这个框架广泛出现在包括[10]等早期具有广泛影响力的文献中，是游戏等实时液体模拟应用中的标准方法。作为真实液体模拟的关键因素，本文的重点之一，正是不可压性的求解过程。

2.2.4 SPH流体的特征和缺陷

SPH相比流体模拟的欧式方法具有许多优势，包括

1. 没有模拟边界。欧式离散方法将空间分割为网格，由于计算能力限制，网格的空间尺度和分辨率之间具有不可调和的矛盾。而SPH中粒子的数量始终固定。  
   （在本文和许多SPH的变种的实现中，为加速粒子邻居搜索引入了空间分割数据结构，使得本条失效）
2. 数值耗散小。欧式方法的数值耗散问题会使得没有粘度流体表现出有粘度流体的效果，能自动收敛到平衡状态。反之，SPH通常需要额外引入粘性力使流体收敛。
3. 分辨率与密度近似正比。高密度区域因为流体聚集，需要更高的分辨率保证模拟精度。文献中有自适应分辨率的欧式方法，但由于实现复杂，计算代价大，未得到广泛应用。而SPH方法在高密度区域通常有更多地粒子，从而保证模拟效果。
4. 避免了欧式方法对没有流体的空间的不必要的计算。
5. 易于处理边界条件。

SPH方法同时存在一些难以解决的问题，包括

1. 难以捕捉旋度较强的流体效果。正因如此，SPH通常用来模拟旋度效果较弱、体积联通成块的的液体。
2. 需要修正不可压性。不可压方程是欧式方法求解的必要条件，因此能自动保证不可压性，而拉式方法的不可压性求解直到近几年才有突破性进展。
3. 密度有下限。因此不能很好捕捉低密度下的流体效果。

2.3 求解不可压性的PBF方法

本文的模拟部分的主要工作是*基于位置的流体*（Position Based Fluids，PBF）在GPU上的并行实现。PBF方法是Macklin等人在2013年SIGGRAPH图形学会议上发表的一种求解SPH流体不可压性的方法[16]。BPF最显著的特点，是以直接以粒子位置分布为不可压性求解的目标。与之相比，预测-修正SPH方法（Preditctive-correcive SPH，PCISPH）等传统的SPH方法则是形式化地引入压强力以预测粒子速度和位置。BPF方式是Müller提出的基于位置的动力学（Position Based Dynamics，PBD）方法的一种推广。在PBF方法发表之前，PBD已经被成功地运用在了包括布料、弹簧、刚体等一系列图形学物理模拟的领域中[22]。BPF方法避免了PCISPH等方法中压强的累积，在较长的时间步长下表现出优越的鲁棒性。但其不可压性求解过程采用了Jacobi方法实现并行，收敛速度较慢，因此需要更多的迭代次数以到达期望的不可压性效果，整体性能表现与PCISPH相似[23]。

本节将从理论角度出发，叙述PBF方法的主要过程。

2.3.1 流体位置的压强修正

PBF方法是一种基于流体状态方程的方法（Equation of State, EOS）。在2.2.2节公式（18）中我们提到，密度可以用于导出压强，压强进而可以用于计算压强力，再利用动量公式积分更新粒子速度。PBF方法观察到密度状态方程隐含了一个平衡条件，而这个平衡条件可以用于位置的更新。对粒子定义为EOS约束

其中是液体的静止密度。当液体平衡时，必有。这等价于对一块固定的液体，平衡时的体积保持不变，这是2.1.2节不可压条件（12）的直接推论。下文将展开PBF中粒子位置的迭代方法，通过对公式（19）求解，经过有限次数的迭代后必然能满足。

为了通过EOS方程（19）更新位置，首先注意到是粒子位置的函数，因此也是粒子位置的函数，设粒子个数为，有

其中是邻居算子，表示在以位置为中心，核半径为大小的区域内的粒子的集合。为计算方便我们假设粒子质量都为1千克，即。我们期望经过一个粒子位置修正后，每个粒子的EOS约束能被满足，即

可应用梯度下降法，让与在处的梯度平行，设学习率。一种朴素的方法是，设定为某个预设值，迭代更新粒子位置，直到方程(22)达到某个精度阈值。这种方法在实际中并不可行，因为的预设值无法准确估计。静态的学习率也可能导致收敛速度缓慢。

实际上可以利用方程（22）的一次微分展开估计**。**注意到方程(22)可微，有一次近似

以为未知数的方程含有n个标量方程和n个标量未知数，是一个适定性问题。由线性代数知识可知，若可逆，则方程有确定解。但是由于的维度是，在实际中通常大于，而最好的的矩阵求逆算法复杂度高达，完全无法承受，因此也不能通过直接求解估计**。**

作为方程（23）的近似解法，我们考虑高阶线性方程组的Jacobi雅可比迭代法[24]。Jacobi迭代法每步使用上次迭代的近似解求解下一个近似解，且每次只求解一个未知量，n个未知量的求解互不干扰。使用Jacobi迭代法的更新公式为

同时这里给出的公式。

根据和的相同和不同，又有两种形式

公式（24）的分母位置可能为零，这会导致运算出现NaN错误。一种情况是没有邻居的孤立粒子，这种情况下分子其实也为零，可以通过判断是否为0避免NaN。还有一种情况是当粒子的邻居位于核半径的边缘，这时Spiky核的给出的梯度将会很小，而由于梯度处在分子位置，将会导致结果很大，产生严重的误差。表现在模拟结果上，则是粒子在远离邻居的过程中会突然受到一股“弹射”的力。这与物理世界是严重相悖的。因此有必要对公式（24）做修正。我们统称这个问题为孤立粒子问题。

PCISPH也存在孤立粒子的问题。PCISPH算法在出现孤立粒子时，假想地在粒子周围填充一定地邻居，保证梯度和不为零。在此我们参照[16]中的办法，直接在分母处引入一个（相对梯度和）小的常数。在我们的最终实现中取。这个值在数值上并不小，但相对于Spiky梯度和来说是小的。修正后的计算公式为

公式（25）对粒子仅根据和更新其位置。换句话说，仅根据粒子本身的信息，而没有将它的邻居的更新量一并考虑。为了使得更新公式满足牛顿第三定律，对公式（25）略作修改，不仅考虑粒子本身，也考虑邻居粒子的更新量。这个技巧在SPH模拟中被广泛的使用。改进的粒子位置更新公式为

在实际的求解中，因为计算能力的限制，不可能迭代过多，仅要求能满足视觉真实性即可。我们的实现中每帧设定迭代4次，更多的迭代次数对改善模拟结果帮助不大。

除了上文中提到的参数，我们在实现中设定的其他常数参数包括核半径，静止密度，重力，模拟时间步长（近似120Hz)。

2.3.2 流体速度的表面张力修正

2.1节中给出的Navier-Stokes方程描述了**连续流体**的物理规律，但没有给出流体的边界条件。液体的表面张力性质，就是一种典型的边界条件。在液体-气体的表面处的液体分子，受到单侧其他液体分子的分子间作用力的作用（范德华力或氢键等），产生了一个法向的表面张力。而内部分子由于四周被其他分子包围，则没有表面张力。小水珠在表面张力的作用下，表面呈弧形。

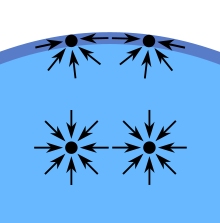
 

图. 表面张力形成原理

仿照表面张力的形成原理，可以在SPH中通过通过引入分子间作用力实现表面张力的效果，论文[25]等称这个力为“虚拟压强”（Artificial pressure）。与真正的压强力不同，它不是通过压强计算得到的，而是通过直接估计粒子和邻居的距离得到的，不具有物理真实性，但是经验中能够得到良好的模拟效果。

在很多SPH方法中，虚拟压强可以防止粒子出现聚合现象[26][27][28]。边界粒子密度被低估是粒子聚合线性的主要原因。孤立的一个或者一簇粒子由于周围没有邻居粒子，通常处于密度达不到静止密度的状态，因此动量方程会使得它们聚集成很小的一簇。在PBF中这个问题更加明显。没有引入虚拟压强的情况下，两个孤立粒子在某个时刻靠近会进入几乎重叠的状态，它们的相对位置保持不变。若它们有丝毫的位置偏离，立即会有很高的吸引力使它们回归近似重叠的静止状态。根据静止密度的不同，三个及以上粒子也可能会进入这种状态，造成**体积坍缩**（Loss of volume）。

为了应对体积坍缩的问题，[16]中引入了最早在[25]中提出的虚拟压强方法。这种方法根据两个粒子的距离和一个理想最小距离的比例对距离太近的粒子施加惩罚性的压强力。对粒子和粒子，令虚拟压强系数为

并且将这个力直接作用在粒子的位置更新上。注意到，此处的力不是牛顿力学意义上的力，而是促使流体状态改变的一种因子。加入虚拟压强修正的公式（29）变为

在实现中我们取。

2.3.3 流体的粘度修正

为了还原动量方程中的粘性力，我们引入对粒子速度引入一个由相对速度引起的粘度修正。粘度修正是Navier-Stokes方程中粘性力的近似。

公式（32）还原了牛顿流体粘性力公式（9）的两个主要性质，一是粘性力大小于正比于粒子相对速度，二是在一微小面元上粘性力大小正比于积分面积。第一条性质来源于分子处的粒子速度差；第二条性质来源于分母处的密度和，在粒子质量固定的假设下，流体微元表面积随密度增大而减小。严格的来讲，微元表面积与密度和满足（因为面积正比于二次直径，体积正比于三次直径）.但此处简单的使用密度的倒数，可以避免代价很大的指数运算，同时也能提供较为真实的模拟效果。

SPH的粘度修正对于维持液体的运动一致性具有非常重要的作用。它使得相邻的粒子倾向于成簇运动，同时耗散流体动能，使得流体最终进入平衡状态。没有或过小的粘度修正时，流体粒子可能会在数值误差的作用下产生抖动。

公式（32）在分母位置引入的密度和是对[16]粘度修正公式的一个改进。这个改进是在多次实验中得到启发的。在视觉上，未考虑密度的粘度修正会导致液体表现出区域性的粘度分歧。

在实现中我们取。

2.3.4 流体的涡度修正

TODO

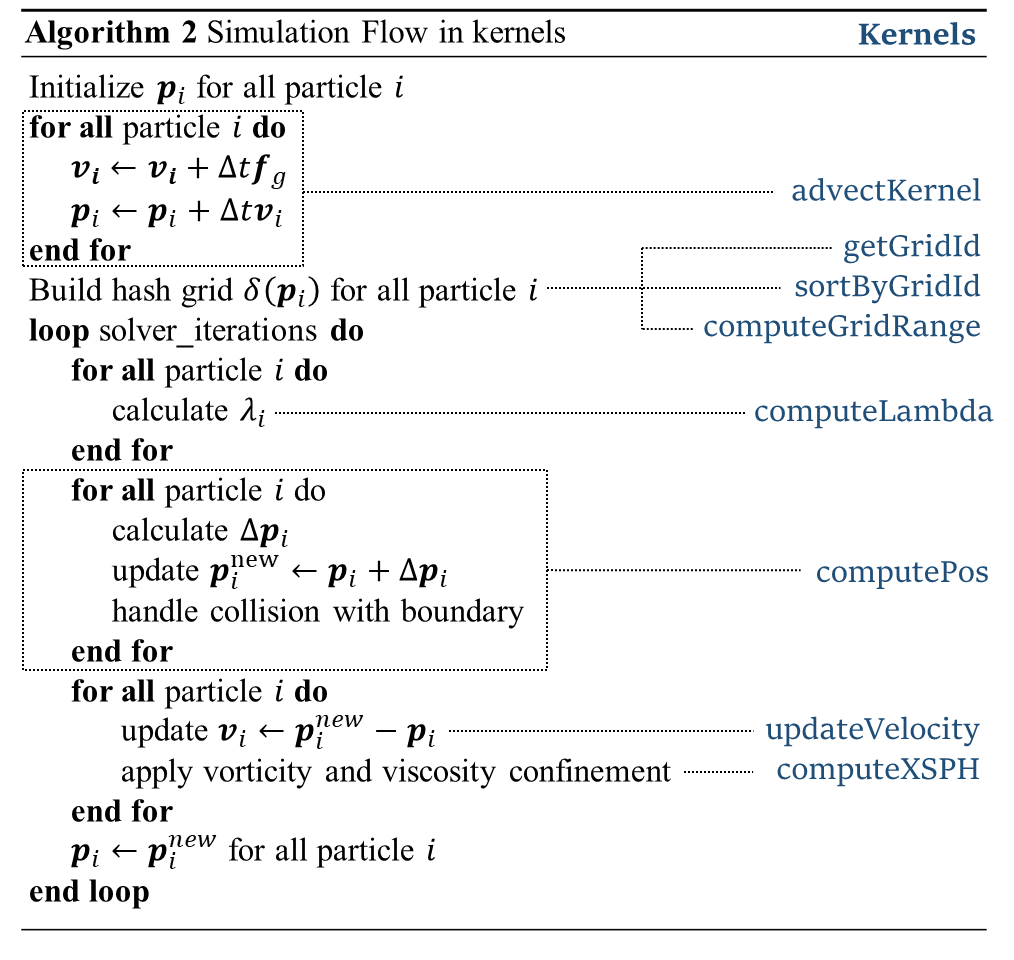
## 2.4 PBF方法的GPU并行化实现

本节叙述 PBF 方法的 GPU 并行化算法的流程、设计与实现。我们首先概述 PBF 方法的算法流程，指出 PBF 高度适合并行化计算的特征，并对邻居查找、迭代方式、边界处理等几个关键设计做简要说明。2.4.2节介绍通用GPU 计算（General Purpose GPU, GPGPU）和本文使用的Nvidia CUDA 并行语言。2.4.3节介绍本文使用的哈希网格邻居查找算法，2.4.4节介绍本文使用的GPU 基数排序，2.4.5节对算法管线的实现细节做进一步说明。

2.4.1 实现管线概述

本文的PBF 算法的伪代码如算法2中所示。右侧是实现中伪代码对应的CUDA 核函数。核函数是通用GPU 计算的计算单元，2.4.2节将会对这个概念进行说明。

生成初始粒子后，PBF 方法以一帧为单位，从上一帧状态出发，模拟得出下一帧状态，并以此反复循环。在一帧的模拟中，粒子首先使用蛙跳积分法（Leapfrog integration）交替更新速度和位置。这个步骤被形象的称为流体对流（advection）。根据更新后的粒子位置建立用于邻居查找的哈希网格数据结构[29]。之后，根据公式（31）迭代地使用Jacobi 方法对粒子位置进行修正。最后，对粒子的速度进行粘度修正和涡度修正。



算法2. PBF模拟算法流程

下面对算法中使用的几个关键设计做进一步说明。

**蛙跳积分法**：我们首先使用欧拉积分，更新重力引起的粒子速度变化。再使用欧拉积分更新新速度下的粒子位置。这种两步积分方法称为蛙跳积分法（Leapfrog integration）[30]。蛙跳积分法是一个二阶积分方法，它的引入总误差正比于时间步长的平方，能给出相比欧拉方法等一阶方法更小的误差。

**邻居查找：**SPH 方法的粒子核半径是有限的，两个中心距离大于的粒子对互相没有作用，因此产生了粒子邻居的概念。记是中心位置在的粒子的邻居几何，任意邻居到的距离不超过。在利用公式（16）计算粒子的物理量时，仅需要考虑粒子的邻居即可。SPH 方法的粒子数量通常在量级，一个核直径内的粒子数量通常小于量级，因此预先计算好粒子的邻居，能极大的减小位置核速度修正的计算量。

计算粒子邻居的代价较为高昂，我们的算法每一帧仅计算一次邻居。注意到，位置修正有多次迭代。第一次迭代后，预计算好的邻居就不能精确反应真实的邻居状态了。更具体的考虑一个粒子的邻居，有的邻居将退出邻居集合，其他的粒子可能加入邻居集合。总体来看预计算邻居集合在第一次迭代后是真实邻居集合的子集，或者说是真实邻居集合的一个低估（Underestimate）。

在PCISPH方法中，低估的邻居集合会导致错误的压强，甚至会产生负压强。如果邻居集合不能得到及时更新，错误的压强将会累计，导致不真实的模拟结果。因此PCISPH每一轮迭代都需要重新计算邻居。PBF则没有压强累计的过程。相反，低估的邻居只会减弱位置修正的幅度。反应在结果中产生一种类似粘性力的流体阻尼（damping）效果，因此具有较好的鲁棒性。

**Jacobi方法：**在2.3.1节中我们已经介绍过Jacobi 方法，并给出了使用Jacobi方法修正粒子位置的公式。Jacobi方法是经典的线性方程组定常迭代求解法，属于同类型的解法还有Gauss-Seidel法和超松驰(Successive over-relaxation， SOR)法等[24]。Jacobi方法相比其他迭代法的优势在于它非常适合并行化。Jacobi方法中，每个变量每轮迭代仅依赖上一轮迭代中所有变量的结果。与之相对的，Gauss-Seidel迭代法中，每个变量在一轮迭代中有前后依赖的关系，因此只能串行化处理。考虑到SPH粒子的数量高达，若能讲针对每个粒子，的计算和速度修正做并行化处理，将会给性能带来巨大的提升。现代Nvidia GPU有上千个CUDA计算核单元，能够提供很好的并行加速效果。因此本文选择了使用Nvidia CUDA实现PBF的并行版本。（Future works: A chebyshev semi-iterative approach for accelerating projective and position-based dynamics）

**边界处理：**SPH中的边界处理主要指粒子与刚体边界的碰撞。除此之外，有的文献针对2.3.2节中提到的边界粒子密度被低估问题，提出了边界虚拟粒子等方法[31]补偿边界密度。最初我们的实现在刚体边界上有粒子抖动的问题，因此引入了[31]中的方法。在我们加入了粘性力后，粒子抖动现象消失。经试验，边界密度补偿对模拟结果改善不大，因此我们最终仅引入了刚体边界碰撞这一种边界条件。

我们的刚体边界是与坐标轴对齐的一个立方体，流体被限制在立方体内运动。粒子位置在不可压修正迭代的过程中，如果超出了立方体边界，则会被投影到最近的立方体表面的内侧，且保持与边界保持一个很小的距离。实现中我们取。这个形式的边界处理可以看作是粒子与刚体边界发生了完全非弹性碰撞。这个处理似乎不符合真实世界中水与刚体表面碰撞产生的飞溅的效果。然而，考虑一簇粒子与刚体发生的碰撞：首先发生碰撞的粒子将贴紧刚体表面，并不再沿法向方向移动； 后来的粒子与先发生碰撞的粒子距离缩小，产生很高的密度，进而会在不可压修正的迭代中被反向排斥。这十分符合物理世界中的现象——少量水滴碰撞后粘滞在刚体表面，水量丰富后才会发生反弹。

注意到算法在流体对流和邻居查找步骤中是不做边界限制的。粒子对流后可能超出边界。下一节我们会提到，用于哈希网格对立方体空间做均等的分割，要求粒子处在边界内。此时我们把越界的粒子归在投影后的网格内，但不做位置上的更新。

我们的边界形式比较简单。若要处理流体与任意形状的刚体碰撞，有两种流行的方法。一种是将刚体离散成带符号的距离场（Signed Distance Field）[5]，使用体素记录具体场函数。位置修正时，利用查询距离场得到的粒子所在处的距离值，将处于刚体内部的粒子投影到粒子边界上。另一种PBF方法特有的做法，则是将刚体离散成粒子，在PBD的框架内处理粒子间约束[32]。这种方法更容易实现流体和刚体之间的双路交互（Two-way coupling），实现刚体在流体冲击下移动的效果。

2.4.2 CUDA并行计算

# 3 实验部分

## 3.1 仪器和试剂

### 3.1.1 仪器

798-MPT全自动电位滴定仪（瑞士万通）；

氢离子选择性复合电极（瑞士万通）；

……。

### 3.1.2 试剂

氢氧化钠（A.R.）；

邻苯二甲酸氢钾（容量基准试剂）；

氯化钾（A.R.）；

……。

## 3.2 溶液的配制及标定

表3.1 氢氧化钠溶液浓度标定

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| 编号 | 邻苯二甲酸氢钾质量/g | NaOH溶液体积/mL | NaOH溶液浓度/（mol·L-1） |
| 1 | 0.1118 | 5.91 | 0.0926 |
| 2 | 0.1028 | 5.42 | 0.0929 |
| 3 | 0.1124 | 5.91 | 0.0932 |

### 

### 3.2.2 氯化钾离子强度调节剂的配制

……。

## 3.3 实验步骤

……。

# 4 结果和讨论

## 4.1 多元酸体系的结果和讨论

### 4.1.1 直接计算法

……。

### 4.1.2 半整数法

A. 半整数法的求解过程

a. 可以直接得到半整数的情况



从表4.1可见，当为0.5和1.5时的pH分别是5.32和2.74，即……。



b. 无法直接得到半整数的情况



在用半整数生成函数法直接求解时，会遇到这样的问题……。表4.4列出了滴定过程中乙二酸溶液的各主要物理量的部分数据。从表4.4可见，……。

……

……。

表4.4 草酸的部分数据列表

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| *V*/mL | *E*/mV | pH | [H+]/（mol·L-1） |  |
| …… | …… | …… | …… | …… |
|  |  |  |  |  |
| 1.00 | 2.62×102 | 2.22 | 6.07×10-3 | 1.14 |
| 1.50 | 2.60×102 | 2.27 | 5.42×10-3 | 1.10 |
|  |  |  |  |  |
| …… | …… | …… | …… | …… |

续表4.4

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| *V*/mL | *E*/mV | pH | [H+]/（mol·L-1） |  |
| …… | …… | …… | …… | …… |
| …… | …… | …… | …… | …… |
| …… | …… | …… | …… | …… |



图4.1 乙二酸 ≥1.15数据段曲线及其拟合曲线（实线--实际曲线，虚线--拟合曲线）



针对这种情况，可以采用多项式拟合的方法求解。以乙二酸为例，在Excel中，选取1.28<<1.15之间的数据，以为横坐标，pH为纵坐标，做-pH曲线（见图4.1），并添加趋势线，选择相关系数*R*2最接近1的多项式作为拟合方程，……。



B. 半整数法的计算结果

利用半整数生成函数法，对各种多元酸三次平行实验数据分别进行处理，并求平均值，结果见……。

C. 半整数法计算结果的讨论

……。

### 4.1.3 分段拟合法

……。

## 4.2 氨基酸合铜体系的结果和讨论

……。

## 4.3 关于计算方法的讨论

## 4.4 关于其他问题的讨论

# 5 结论和展望

## 5.1 结论

（1）生成函数法可以分为直接计算生成函数法、分段拟合生成函数法及半整数生成函数法。这三种方法有如下特点：①……；②……；③……。

（2）本文运用三种不同生成函数法，测定了多元酸和氨基酸合铜配合物的稳定常数，得到了……。

（3）三种生成函数法中无论哪一种方法，对待测酸或配合物稳定常数的大小均有一定的要求，如……。

……。

## 5.2 展望

（1）生成函数法理论可靠，计算方便，但……。

（2）在生成函数法的应用中，还有以下问题有待研究和解决：①……；②……。

……。

# 插图索引

图2.5

# 参考文献

[1] J. Stam, “Stable fluids,” in *Proceedings of the 26th annual conference on Computer graphics and interactive techniques - SIGGRAPH ’99*, 1999, pp. 121–128.

[2] R. Fedkiw, J. Stam, and H. W. Jensen, “Visual simulation of smoke,” in *Proceedings of the 28th annual conference on Computer graphics and interactive techniques - SIGGRAPH ’01*, 2001, pp. 15–22.

[3] F. Losasso, F. Gibou, and R. Fedkiw, “Simulating water and smoke with an octree data structure,” in *ACM SIGGRAPH 2004 Papers on - SIGGRAPH ’04*, 2004, vol. 23, no. 3, p. 457.

[4] B. E. Feldman, J. F. O’Brien, B. M. Klingner, and T. G. Goktekin, “Fluids in deforming meshes,” in *Proceedings of the 2005 ACM SIGGRAPH/Eurographics symposium on Computer animation - SCA ’05*, 2005, p. 255.

[5] R. Bridson, *Fluid Simulation for Computer Graphics*. A K Peters, 2007.

[6] A. Chern, F. Knöppel, U. Pinkall, P. Schröder, and S. Weißmann, “Schrödinger’s smoke,” *ACM Trans. Graph.*, vol. 35, no. 4, pp. 1–13, Jul. 2016.

[7] R. A. Gingold and J. J. Monaghan, “Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars,” *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, vol. 181, no. 3, pp. 375–389, Dec. 1977.

[8] L. B. Lucy, “A numerical approach to the testing of the fission hypothesis,” *Astron. J.*, vol. 82, p. 1013, Dec. 1977.

[9] M. Desbrun and M.-P. Gascuel, “Smoothed Particles: A new paradigm for animating highly deformable bodies,” Springer, Vienna, 1996, pp. 61–76.

[10] M. Müller, D. Charypar, and M. Gross, “Particle-Based Fluid Simulation for Interactive Applications,” *Proc. 2003 ACM SIGGRAPH/Eurographics Symp. Comput. Animat.*, no. 5, pp. 154–159, 2003.

[11] F. H. Harlow, “The particle-in-cell method for numerical solution of problems in fluid dynamics,” in *Proceedings of Symposia in Applied Mathematics*, 1963.

[12] J. U. Brackbill and H. M. Ruppel, “FLIP: A method for adaptively zoned, particle-in-cell calculations of fluid flows in two dimensions,” *J. Comput. Phys.*, vol. 65, no. 2, pp. 314–343, Aug. 1986.

[13] C. Jiang, C. Schroeder, A. Selle, J. Teran, and A. Stomakhin, “The affine particle-in-cell method,” *ACM Trans. Graph.*, vol. 34, no. 4, p. 51:1-51:10, Jul. 2015.

[14] C. Fu, Q. Guo, T. Gast, C. Jiang, and J. Teran, “A polynomial particle-in-cell method,” *ACM Trans. Graph.*, vol. 36, no. 6, pp. 1–12, Nov. 2017.

[15] Stuart Wolpert, “UCLA mathematicians bring ocean to life for Disney’s ‘Moana’ | UCLA,” 2017. [Online]. Available: http://newsroom.ucla.edu/stories/ucla-mathematicians-help-bring-the-ocean-to-life-for-disneys-hit-movie-moana. [Accessed: 14-Mar-2018].

[16] M. Macklin and M. Müller, “Position based fluids,” *ACM Trans. Graph.*, vol. 32, no. 4, p. 1, Jul. 2013.

[17] W. J. van der Laan, S. Green, and M. Sainz, “Screen space fluid rendering with curvature flow,” in *Proceedings of the 2009 symposium on Interactive 3D graphics and games - I3D ’09*, 2009, p. 91.

[18] J. F. Annett, “Superconductivity, Superfluids and Condensates,” *Oxford Master Ser.*, no. May, p. 140, 2004.

[19] N. Prize and N. Prize, “Bose-Einstein Condensation in Alkali Gases 1.,” *Physics (College. Park. Md).*, pp. 1–14, 2001.

[20] J. J. Monaghan, “Smoothed Particle Hydrodynamics,” *Annu. Rev. Astron. Astrophys.*, vol. 30, no. 1, pp. 543–574, 1992.

[21] J. Anderson Jr, *Fundamentals of Aerodynamics*, vol. Third Edit. 1985.

[22] J. Bender, M. Müller, and M. Macklin, “A Survey on Position Based Dynamics, 2017,” *Tutor. Proc. Eurographics*, 2017.

[23] M. Ihmsen, J. Orthmann, B. Solenthaler, A. Kolb, and M. Teschner, “SPH Fluids in Computer Graphics,” *Eurographics*, no. 2, pp. 21–42, 2014.

[24] 同济大学计算数学教研室, *现代数值计算（第2版）*, Second Edi. Beijing: 人民邮电出版社, 2014.

[25] J. J. Monaghan, “SPH without a Tensile Instability,” *J. Comput. Phys.*, vol. 159, no. 2, pp. 290–311, 2000.

[26] S. Clavet, P. Beaudoin, and P. Poulin, “Particle-based viscoelastic fluid simulation,” *Proc. 2005 ACM …*, p. 219, 2005.

[27] I. Alduán and M. A. Otaduy, “SPH granular flow with friction and cohesion,” in *Proceedings of the 2011 ACM SIGGRAPH/Eurographics Symposium on Computer Animation - SCA ’11*, 2011, p. 25.

[28] N. Bell, Y. Yu, and P. J. Mucha, “Particle-based simulation of granular materials,” in *Proceedings of the 2005 ACM SIGGRAPH/Eurographics symposium on Computer animation - SCA ’05*, 2005, p. 77.

[29] S. Green, “Particle Simulation using CUDA,” *cse.uaa.alaska.edu*, no. September, pp. 1–12, 2013.

[30] T. Tajima, “Plasma physics via computer simulation,” *Comput. Phys. Commun.*, vol. 42, no. 1, pp. 151–152, 1986.

[31] H. Schechter and R. Bridson, “Ghost SPH for animating water,” *ACM Trans. Graph.*, vol. 31, no. 4, pp. 1–8, Jul. 2012.

[32] M. Macklin, M. Müller, N. Chentanez, and T.-Y. Kim, “Unified particle physics for real-time applications,” *ACM Trans. Graph.*, vol. 33, no. 4, pp. 1–12, Jul. 2014.

# 谢 辞

正文内容