**SPH**

摘要

均111

关键词：1111

**NUMERICAL SIMULATION OF HOMOGENEOUS**

**CHARGE COMPRESSION IGNITION COMBUSTION**

**FUELED WITH DIMETHYL ETHER**

**ABSTRACT**

11111

**Key words:** H1111

目 录

1. 绪论----------------------------------------------------------------------------------------------------1
   1. HCCI的数值模拟研究现状-----------------------------------------------------------------------1

1.1.1 HCCI数值模拟模型--------------------------------------------------------------------------1

-------------------------------------------------------------------

1.4 本章小结----------------------------------------------------------------------------------------------1

1. DME均质充量压燃着火的数值模拟方法------------------------------------------------------2

2.1 二级标题----------------------------------------------------------------------------------------------2

2.1.1 三级标题---------------------------------------------------------------------------------------2

-------------------------------------------------------------------

-------------------------------------------------------------------

第五章 结论----------------------------------------------------------------------------------------------------4

参考文献--------------------------------------------------------------------------------------------------------5

致谢--------------------------------------------------------------------------------------------------------------6

**第一章 绪论**

对于现实物理的理解和模拟对现实环境的探索和交互至关重要。随着计算机科学的发展，数值模拟方法已经和理论分析、物理实验一同成为了主要物理研究方式。相较于昂贵且困难的实验，数据模拟方法可以提供一种廉价、高效、安全的实验方法。数值模拟方法主要包括网格法（如有限元法）和无网格法（如光滑粒子动力学）。

在如何处理这类复杂问题上，通过数据驱动的方式，使用神经网络辅助已经成为了一种越发重要并有广大前景的方法。借助神经网络的物理表达方式的其中一种重要方向是基于拉格朗日的无网络表达方式（Lagrangian presentation）【1】。拉格朗日无网络方式基于粒子进行表达，在数值计算中占用举足轻重的地位，并且在刚体，可变形固体和流体等方面的数据模拟都有了出色的表现和充分的探索【2】。

在将机器学习方法引入物理模拟的过程中，现在主流的方法使用图结构来定义粒子之间的交互—两个粒子之间是否存在一条有向/无向的边确定两个粒子之间是否发生交互。因此主流的机器学习方式需要在每次更新粒子状态的同时，重新构建粒子之间的图结构，并将重新构建的图结构重新传输进入神经网络中。

但是这种做法会带来两个主要的问题。首先在粒子数量增多时如何从大量的粒子中正确提取粒子之间的关系会是一个具有挑战的问题。其次在图神经网络的构建中，粒子之间是否发生交互只有两个状态（发生交互—图节点之间有边相连，不发生交互—图节点之间无边相连），但是事实上粒子之间的交互程度不应该是一个离散的值而应当是一个连续的数值。

因此本文在使用图表示粒子之间关系的基础上，建立了一个自适应的图结构学习模块，将每次更新时重新计算图结构的步骤纳入神经网络中继续学习。由于粒子本身带有速度和动量，粒子之间的关系并不是一个独立时间片上的状态，为此本文在网络结构中加入了时间序列编码用来处理这一情况。

* 1. 研究现状

数值模拟主要包括网格法和无网格法。网格法在理论上非常完善，在实践中也有广泛的应用，相较于无网格法，网格法在计算精度和复杂情况下都有优势。但是在一些特殊情况下例如大变形、爆炸冲击、自由表面等问题上，网格法在处理上就会遇到问题，在此情况下，无网格方法的优势就体现了出来【4】。

1.1.1 SPH流体模拟模型

流体模拟无论在理解现实世界的物理现象还是在材料科学、工程中都有重要的地位和意义。其中一种重要的方法是光滑动力粒子Smoothed Particle Hydrodynamics （以下简称SPH)。SPH方法采用了基于拉格朗日视角来模拟流体粒子现象。SPH方法起源于基于粒子的天体物理学模型【3】，最早应用于模拟行星爆炸等天体物理问题。作为一种采用解偏微分方程的数值计算方法，SPH方法可以在不用绘制特殊网格的方法下更好地处理介质的扭曲和拉伸，包括一些真空的空洞；此外SPH方法在经过调整粒子和粒子之间的作用力方程后还可以更好地模拟更为复杂的物理现象。此后SPH算法在流体等现象中也有广泛的应用。然而天体物理学中所采用的可压缩性流体处理方法并不能直接应用于类似于水的非压缩流体。此后Muller对SPH方法进行了较大的改善，使其能够适用于流体【5】。SPH方法基于粒子在某一特定时刻的分布信息场的近似，使得算法具有较好的自适应性且粒子能够同时表示空间点和物质点两种属性。因此SPH算法在提出后就一直经历了快速的发展，并相继提出了多种衍生算法。SPH和其各种变种已经被广泛地应用在对现实复杂现象的物理建模和视觉展示上。通过采用不同的函数来构造近似函数后使用不同方法对连续场进行离散，SPH算法可以有非常丰富的变种类型。目前SPH算法仍然在多个计算力学领域有着广泛的应用。

1.1.2 SPH机器学习研究

随着机器学习方法的兴起，越来越多的机器学习方法和流体模拟结合在一起。以朗格朗日为视角的粒子流已经被证实适合和机器学习结合在一起。Ladicky首先证明流体计算可以使用回归森林（Regression Forests）进行学习【6】。卷积神经网路（CNN）也曾经被添加到计算中用于加速压力部分的计算【7】。此后在对拉格朗日视角的图表示的通用化物理模拟（包括刚体和可变性物体）也有了一系列的成果。Battaglia采用了一种交互网络，将图作为模型的输入，基于对象和关系，使用深度学习网络来预测复杂系统中对象的交互，在处理几十个对象在数千个时间步长上取得了较好的结果【8】。Alvaro实现了一个基于图神经网络的模型，通过归纳偏置，可以对处于以对象和关系为中心的体系学习到一个准确的前向模型并且有着良好的泛化性【9】。此外也有大量直接将图标是的神经网络直接应用于流体模拟的例子【10】【11】。本文与以上的工作都有着共同的出发点的思想—通过使用可微神经网络对拉格朗日流体进行建模，并使用图的方式对粒子关系进行建模。

第二章 **Basics**

2.1 SPH算法

本文所采用的SPH算法基于2003年Matthias Muller提出的针对流体的SPH算法【5】。

2.1.1 光滑粒子动力学（Smoothed Particle Hydrodynamics）

光滑粒子动力学（Smoothed Particle Hydrodynamics）首先由Lucy和Gingold提出用于解决天体物理的模拟问题。但是这一方法也可以应用于任意形式的流体模拟。

SPH方法本质上是一种粒子系统的插值算法，通过插值来处理离散化的粒子场量。在计算某个物理量时，SPH方法通过对一个小的邻近区域的粒子使用辐射对称的光滑核进行采样插值。例如某个物理量A在局部r范围内的粒子插值得到：

其中表示所有的粒子（空间内所有正在模拟的粒子或一个小的邻近区域的粒子）；表示我们需要插值计算的物理量；表示粒子的体积；表示此处的插值方程。

在SPH方法下，我们使用的是光滑核（Smoothing Kernel）进行插值。因此上述方程也可以写为：

在此基础上再对积分进行离散化，就可以得到SPH方法的基本公式：

在插值中使用到的方程即为半径距离为的光滑核,为粒子之间的距离。在SPH方法中光滑核的选取可以是任意的，但是应该满足以下条件。

1. 光滑核是对称的。。
2. 光滑核是归一化的。。

在满足以上两个条件的前提下，SPH算法的插值具有二阶精度。

注意该公式在【5】中被写作：

这是因为在流体中粒子的体积被写作质量比作密度。也就是。

以下讨论均以公式2-4为基础进行讨论。

例如我们在推导密度时，可以利用公式2-4：

在大多数流体方程中，我们不仅需要考虑对场量进行插值计算，还需要对场量的导数进行计算。类似地，基于公式2-4，场量的导数可以如下计算：

二阶导数如下：

SPH方法可以保有基本的物理条件（如能量守恒），但是SPH算法也有自身的问题无法保证所有的条件（如力的对称性）。

2.1.2 对流体用粒子视角进行建模

在对等温流体（isothermal fluids）的建模中，网格方法使用欧拉视角，用速度场、密度场和压力场描述流体。物理量的更新基于以下两个公式：

将质量展开，公式2-8可以改写为

公式2-9可以保证质量守恒。

另一个公式为Navier-Stokes公式【12】，用于保证动量守恒：

公式2-10为一个针对不可压缩流体的简单的Navier-Stokes公式形式。其中为外力场，在大多数情况（包括本文），其表示重力场；表示流体的黏度，为一个常量系数。

无网格方法（粒子方法）使用拉格朗日视角。以上两个公式（公式2-9、公式2-10）可以被大幅度简化。某个粒子的加速度可以如下表示：

其中表示粒子的速度，表示粒子收到的力。公式2-11已经基本阐明了SPH计算的方法，接下来我们只需要解释该公式的计算细节。

2.1.3 压力计算（Pressure）

基于公式2-4，压力场可以表示为：

公式2-12是由公式2-4直接推导而来，但是由于SPH算法本身并不能保证力的对称性，公式2-12亦不能保证压力的对称性。因此在本文实现的SPH算法中对压力的计算进行了调整在插值中引入算数平均：

对于以拉格朗视角的SPH方法而言，粒子本身所保有的性质只有自身的位置（position），压力经由周边的粒子插值得到。如果所有的粒子压力都要通过周边的粒子压力插值得到，这将无法计算。因此在实际计算某个粒子处的压力值时，SPH算法先对该粒子的数值进行估计，之后再进行插值计算。

压力的计算基于理想气体方程：

其中为流体的静止密度，在SPH算法中为需要手动调整的超参数。其本身仅仅为了是的SPH算法的数值计算更加稳定，对压力梯度的计算没有影响【13】。

2.1.4 黏度计算（Viscosity）

SPH方法中黏度的计算同样基于公式2-4得到：

类似于公式2-13，公式2-15也经过调整以保证力的对称性。

2.1.5 外力（External Forces）

SPH算法中的外力包括重力和其他外部施加的力。这些力都会被直接施加到粒子上。在本文中所使用的力包括重力和在粒子接触到边界时受到的反弹力。

2.1.6 光滑核（Smoothing Kernels）

在2.1.2、2.1.3、2.1.4中均使用了光滑核W来进行插值。W的选择在满足2.1.1中的要求时可以是任意的（甚至不需要完全满足），在SPH方法中很多时候使用高斯方程。光滑核的选择对于SPH方法是至关重要的，直接关系到SPH方法是否稳定、准确但在本文中，为了使计算更加稳定，使用三种不同的光滑核来应对不同的情况。

其中用于计算流体的密度。用于计算流体的压力。用于计算流体的黏度。

需要特别提到的是，在公式2-13中实际使用到的为的一阶导数：

在公式2-15中实际使用到的为的二阶导数：

SPH方法的光滑核选择主要是为了能够适应流体的物理特性。如若使用计算流体的压力，则会出现在时梯度趋近于0，然而在流体力学中某一点的压力应当主要取决于该点附近小范围内的粒子，因此光滑核需要经过设计以解决这一问题。

2.2 机器学习方法

2.2.1 神经网络

深度学习是机器学习的重要分支之一，是一种基于神经网络架构，数据驱动进行特征学习的算法。深度学习主要使用人工神经网络（Artificial Neural Networks），最早的神经网络由McCulloch和Pitts提出用模仿人类的大脑行为方式来解决复杂问题【16】。

一个神经网络由众多人工神经元组成，人工神经元是采用了生物神经元的概念的可以执行计算任务的电路。数据通过输入层进入神经网络然后进入人工神经元（hidden layer）中，在此中进行计算并得到结果。总体上神经网络可以处理结构化的数据，产出特定的结果。

神经网络分为有监督学习，无监督学习和强化学习，在本节中只考虑本文使用到的有监督学习网络。

经由神经网络，计算机可以直接学习数据特征，并进行预测而不用进行知道数据的统计结果【17】。神经网络使用表示学习（aka 特征学习），将输入特征映射到输出。映射过程中使用的是多层连接神经元。每个神经元都是一个数学计算单元，可以以特定的方式处理输入数据。神经网络所学习到的特征被保存在神经元的weight中。当输入信息在神经网络各层中传递过后，基于样本的标签和使用者定义的损失函数，我们可以计算神经网络对于此样本的error。损失函数一般基于具体的模型，是一种重要的方法来评估模型的效果并引导训练的目标。

2.2.2 图神经网络（GNN）

数据驱动的神经网络模型在流体模拟中已经取得了较好的成果，其可以对一个复杂动态系统进行降阶的方式得到显著的效果提升【15】。神经网络非常善于处理适合被离散化的、规则的网格数据，但是在拉格朗日视角下的SPH方法中，粒子并不能被表示为结构化的基于网格的数据，粒子之间的关系是动态变化的。对于这不规则的数据，一般使用图结构表达，图结构的表示更能够粒子的特征和粒子之间的潜在的互动。图数据的复杂性在传统的机器学习算法中是特别困难的。图结构本身就是不规则的，图的节点可能是无序的、大小可变的，图中的阶段的邻居可能是不确定的。因此很多特殊操作（例如卷积）在欧式空间能容易实现，却在非欧空间的图域上难以实现。此外机器学习中一个重要的核心假设，实例（节点）之间相互独立，在图数据中不能使用（图各个节点都会通过各种方式连接）【18】。

2.2.3 循环神经网络（GRU）

2.2.4快速傅里叶变换（fft）

1. **Model**

3.1 SPH

在本文中SPH方法的实现基本与在2.1章节中实现的方法相同。本文中的SPH方法在Unity2022平台中实现。Unity使用C#脚本控制逻辑，并可以实时地渲染计算结果。基于Unity自身的设计特性，本文使用Unity中ComputeShader进行SPH方法中粒子状态的更新。

SPH方法在处理容器的边界问题和与刚体的碰撞问题有多种解决方法【14】，其中常用的方法有镜像粒子法（在边界处镜像布置粒子）和虚拟粒子法（在边界布置多层虚拟粒子，实际中使用较多），容易造成穿透，如果想要保证不会发生穿透需要布置的粒子足够密集，同时保证计算的步长足够小，这对于图神经网络而言计算过于复杂，故本文中SPH方法中使用硬边界处理，粒子在接触到容器边缘后会直接反弹。

3.2 FluidGNN

在本文中，考虑了多元时间序列的预测问题。我们的网络可以同时接受多个粒子时序特征的输入，并将它们视为多个并行的互相影响的事件。我们的网络目标是为了能够在特定的时序窗口期内学习该系统的时间间和事件间的相关性。本文所采用的FluidGNN网络，其同时考虑了多个时间序列，并对其建模形成图节点，并尝试在其中对每个事件之间的交互进行建模形成图边。在大多数SPH算法中使用的图神经网络都忽略了时间序列之间的相关性，同时需要假设图关系的先验知识，而获得图关系先验的方法往往是独立于神经网络之外的，因此神经网络损失了大量重要的信息。

在频域实现的卷积神经网络往往需要先验的图邻接矩阵。在本文中尝试将获得图邻接矩阵的方法纳入神经网络之中，采取一种类似自我注意的机制来捕捉节点特征之间的关系。此图邻接矩阵将直接被纳入图神经网络中，在一定程度上，它表示节点之间的特征关系。

模型主要分为3个模块：相关矩阵模块（Correlation Block），图模块（GNN Block），残差模块（Residual Block）。

相关矩阵模块中时间序列会被 输入到门控循环单元（GRU）中来学习不同序列之间的时间表示，因此此GRU的使用和传统的GRU使用略为不同，GRU单元的每个隐藏状态（hidden state）其实是每个时间序列在时间上的聚合信息。我们仅仅使用最后一个隐藏状态来进行后续计算。类似于自注意力机制，我们基于GRU最后一个隐藏状态计算可学习的Q、K注意力矩阵。注意力矩阵本身计算了不同序列之间隐藏状态的相关性，注意力分数可以在后续构建的图中作为节点之间的边。注意力矩阵在经过对称化后即成为了邻接矩阵。

此后，我们计算归一化后的拉普拉斯距离：，其中为邻接矩阵行求和得到的对角矩阵。之后基于拉普拉斯矩阵，我们可以用切比雪夫多项式用以计算近似的正交图谱表示。

图模块中将输入为图结构，其中图的节点为网络的输入，图的边为相关矩阵模块中经过切比雪夫多项式近似得到的正交图谱矩阵，图的节点关系都将被投影到正交图谱上。在图卷积网络中到此为止，我们就可以在此频谱上实现图卷积滤波器。到此处为止，图模块的内容和基本的图卷积网络完全一致。但是由于我们的网络使用了时序的输入，图卷积的傅立叶变换仅仅能捕获序列之间的关系，序列内时序的关系并没有被考虑在内【19】。我们使用一种简单的方式来解决。通过使用离散傅立叶变换将单个序列的时域表示转化为频域表示。在频域中我们使用线性变换用于聚合时序的信息。此后变换后的特征会经过逆变换再次从频域表示映射回时域表示。在此基础上即可以类似传统图卷积网络一样，继续进行图卷积。

1. **实验设计**

4.1 数据集收集

数据集基于SPH方法中计算的结果。在此前的SPH和图神经网络结合的研究中，输入通常为粒子当前的位置、粒子当前的速度、边界的位置。在本文中由于采用了时序的网络，因此粒子的速度可以通过时序的粒子位置得到，因此不会作为输入。同时，由于本文没有实现虚拟粒子法处理SPH方法的边界问题，因此也不需要输入边界的位置。由SPH理论上，粒子密度可以通过根据粒子的位置和周围粒子的密度插值得到，但是由于粒子密度收到初始值的影响，因此神经网络不能清晰地得到粒子的密度。因此粒子密度也被作为输入进行神经网络中。

在Unity中，在SPH算法每次更新前，所有粒子位置、所有粒子的当前密度被记录；在SPH算法更新后，再次收集所有粒子位置、所有粒子密度。所有的数据紧密排列，以二进制格式、float32精度保存。

4.2 训练过程

数据集被划分为50%、30%、20%作为训练集、验证集和测试集。在训练中模型结构进行了多次微调，特别是对残差模块的调整，并尽量尝试在残差模块和图神经模块中得到一个平衡。神经网络的训练过程以均方根误差（RMSE）作为评价标准。然而在SPH方法中，RMSE并不是一个好的评价标准，因此模型结果将会嵌入SPH方法，SPH方法实际渲染出的结构也是重要的评价标准。

4.3 训练结果

**第五章 结论**

（正文内容）

参考文献

[1] Jeremy Morton, Antony Jameson, Mykel J Kochenderfer, and Freddie Witherden. Deep dynamical

modeling and control of unsteady fluid flows. In Advances in Neural Information Processing

Systems, 2018.

【2】Yunzhu Li, Jiajun Wu, Russ Tedrake, Joshua B. Tenenbaum, and Antonio Torralba. Learning particle

dynamics for manipulating rigid bodies, deformable objects, and fluids. In ICLR, 2019.

【3】Robert A Gingold and Joseph J Monaghan. Smoothed particle hydrodynamics: Theory and application to non-spherical stars. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 181(3),

【4】朱曼琳。三种无网格法的对比研究[D]。

吉林大学,2020.DOI:10.27162/d.cnki.gjlin.2020.002433.

【5】Matthias Muller, David Charypar, and Markus Gross. Particle-based fluid simulation for interactive applications. In Symposium on Computer Animation, 2003.

【6】L’ubor Ladicky, SoHyeon Jeong, Barbara Solenthaler, Marc Pollefeys, and Markus Gross. Data- ´

driven fluid simulations using regression forests. ACM Trans. Graph., 34(6), 2015.

【7】Jonathan Tompson, Kristofer Schlachter, Pablo Sprechmann, and Ken Perlin. Accelerating Eulerian

fluid simulation with convolutional networks. In ICML, 2017

【8】Peter W. Battaglia, Razvan Pascanu, Matthew Lai, Danilo Rezende, and Koray Kavukcuoglu. Interaction networks for learning about objects, relations and physics. In Advances in Neural Information Processing Systems, 2016.

【9】Alvaro Sanchez-Gonzalez, Nicolas Heess, Jost Tobias Springenberg, Josh Merel, Martin A. Riedmiller, Raia Hadsell, and Peter W. Battaglia. Graph networks as learnable physics engines for

inference and control. In ICML, 2018.【10】Damian Mrowca, Chengxu Zhuang, Elias Wang, Nick Haber, Li F Fei-Fei, Josh Tenenbaum, and

Daniel L Yamins. Flexible neural representation for physics prediction. In Advances in Neural

Information Processing Systems, 2018

【11】Yunzhu Li, Jiajun Wu, Russ Tedrake, Joshua B. Tenenbaum, and Antonio Torralba. Learning particle

dynamics for manipulating rigid bodies, deformable objects, and fluids. In ICLR, 2019.【12】D. Pnueli and C. Gutfinger. Fluid Mechanics. Cambridge

Univ. Press, NY, 1992

【13】M. Desbrun and M. P. Cani. Smoothed particles: A new

paradigm for animating highly deformable bodies. In

Computer Animation and Simulation ’96 (Proceedings of

EG Workshop on Animation and Simulation), pages 61–76.

Springer-Verlag, Aug 1996.

【14】郑坤,孙昭晨,张志明,周丰,赵西增.SPH数值模拟中边界处理方法及对比分析[J].水运工程,2009,(08):23-27

【15】Wiewel Steffen, Becher Moritz, Thuerey Nils. Latent-space physics: Towards learning the temporal evolution of fluid flow. 2018, CoRR. arXiv:

1802.10123.

【16】McCulloch W S, Pitts W. A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity[J]. The bulletin of mathematical biophysics, 1943, 5(4): 115-133.

【17】De Veaux R D, Ungar L H. A brief introduction to neural networks[J]. Unpublished: http://www. cis. upenn. edu/∼ ungar/papers/nnet-intro. ps, 1997.

【18】Wu Z, Pan S, Chen F, et al. A comprehensive survey on graph neural networks[J]. IEEE transactions on neural networks and learning systems, 2020, 32(1): 4-24.

【19】Yuen K C, Chung S, Balsebre P, et al. Stock Price Prediction with StemGNN and Dynamic Time Warping[J]. 2021.

致谢

（正文内容）