

分类号: TM888

单位代码: 10335

密 级:

学 号: 21935006

浙江大学

硕士学位论文



中文论文题目: *****

英文论文题目: *****

申请人姓名: 袁淳

指导教师: 杨勋年

专业名称: 应用数学

研究方向: 物理模拟

所在学院: 数学科学学院

论文提交日期: 二〇一九年四月



论文作者签名: _____

指导教师签名: _____

论文评阅人 1:	陈某某	教授	XX 大学
评阅人 2:	张某某	教授	XX 大学
评阅人 3:	李某某	教授	XX 大学
评阅人 4:	吴某某	教授	XX 大学
评阅人 5:	杨某某	教授	XX 大学

答辩委员会主席:	郑某某	教授	浙江大学
委员 1:	郑某某	教授	浙江大学
委员 2:	刘某某	教授	浙江大学
委员 3:	程某某	教授	浙江大学
委员 4:	杨某某	教授	浙江大学
委员 5:	吴某某	教授	浙江大学

答辩日期: _____ 二〇一九年六月



Author's signature: _____

Supervisor's signature: _____

External Reviewers: _____
Moumou Chen Prof. XX University
_____ Moumou Zhang Prof. XX University
_____ Moumou Li Prof. XX University
_____ Moumou Wu Prof. XX University
_____ Moumou Yang Prof. XX University

Examining Committee Chairperson:
_____ Moumou Zheng Prof. Zhejiang University

Examining Committee Members:
_____ Moumou Zheng Prof. Zhejiang University
_____ Moumou Liu Prof. Zhejiang University
_____ Moumou Chen Prof. Zhejiang University
_____ Moumou Yang Prof. Zhejiang University
_____ Moumou Wu Prof. Zhejiang University

Date of oral defence: _____ June 2019 _____

浙江大学研究生学位论文独创性声明

本人声明所呈交的学位论文是本人在导师指导下进行的研究工作及取得的研究成果。除了文中特别加以标注和致谢的地方外，论文中不包含其他人已经发表或撰写过的研究成果，也不包含为获得 浙江大学 或其他教育机构的学位或证书而使用过的材料。与我一同工作的同志对本研究所做的任何贡献均已在论文中作了明确的说明并表示谢意。

学位论文作者签名：

签字日期： 年 月 日

学位论文版权使用授权书

本学位论文作者完全了解 浙江大学 有关保留、使用学位论文的规定，有权保留并向国家有关部门或机构送交本论文的复印件和磁盘，允许论文被查阅和借阅。本人授权 浙江大学 可以将学位论文的全部或部分内容编入有关数据库进行检索和传播，可以采用影印、缩印或扫描等复制手段保存、汇编学位论文。

（保密的学位论文在解密后适用本授权书）

学位论文作者签名：

导师签名：

签字日期： 年 月 日 签字日期： 年 月 日

致 谢

感谢我的爹，感谢我的妈，感谢那个亲爱的他。

摘 要

近年来,物质点法在物理仿真领域取得了巨大的进步,从电影行业,地球物理,化学模拟都带来了巨大的革新,展现出其强大的生命力。得益于其算法框架的包容性,多种物理现象能够同时在一个系统里求解,带来一些过去从未成功模拟过的结果。然而,物质点法相较于其他算法,在流体解算上面带来许多不真实的现象,尤其是在流体粘性和表面张力的部分。由于物质点法对于物质的表示形式是粒子,难以定义表面,这给表面张力的模拟带来了巨大的困难,同时因为物质点法本身对时间步长要求严格,为了得到和表面张力耦合稳定的结果,经常在方程中加入阻尼项以及使用隐式格式,而这更加剧了物质点法本身数值粘性,往往使最后的模拟结果不尽如人意。

本文研究了一种在物质点法框架下计算流体表面张力的方法,其主要思想是利用点云重构流体表面用于计算表面张力,同时改进了表面粒子和内部粒子插值格式以及表面张力项的离散格式,提高了辛积分的稳定性,其相比于纯隐式格式降低了数值耗散,缓解流体粘性問題。本文的主要工作如下:

(一)结合物质点法的计算流水线,提出了新的基于几何迭代法的流体表面重构方法。利用物质点法本身的数据结构,在不增大内存负担的情况下,做到高速并行,并在理论上证明了该迭代格式的收敛性。同时给出相应的法向估计算法,相比于直接通过梯度或者网格求解法向,计算效率更高。

(二)基于工作(一)改进了表面张力数值计算格式。通过采样重建得到的表面网格,获取表面积分粒子用于计算表面张力,并通过新的数值离散方式,给出的表面张力项易于实现。同时给出新的插值格式,让表面张力能够更快的传导到内部粒子,提高了辛积分格式的稳定性。

关键词: 物质点法; 流体模拟; 表面张力; 表面重构

Abstract

Since 2001, with the implementation of Basic Education Curriculum Reform, in our reform process, the policy of "many editions under one standard" makes our country's math education a deep-going transformation. So study textbooks become focal point in theory and practice math education. Internal research on American math education contains: studying for standards, the actual class local studies, lack of total and complete analyzing the American school math textbook.

Keywords: Education; Chinese; American; Mathematics in Primary School; Text-book

图目录

表 目 录

目 录

1 绪论

1.1 问题背景

1.2 相关工作

1.3 研究内容

1.4 本章小结

2 连续介质力学

2.1 引言

连续介质力学是本文构建控制方程的理论基础。基于连续介质力学，我们刻画流体以及流体表面，并从两个视角来描述物体运动，以此构建动力学方程。为了构建完整的控制方程，我们还需要给出本构模型，即形变与应力的关系，这里我们给出对应的流体的弱可压缩模型以及表面张力模型。

2.2 欧拉视角下的动力学

欧拉视角，即物理量的定义域为 \mathbb{R}^3 ，对物体的刻画由空间中的密度场给出。与拉格朗日视角的区别我们将在 2.3 小节中给出。

2.2.1 欧拉视角下的质量守恒定律

记 $\rho : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ 为空间中随时间变化的密度场， $v : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^3$ 为空间中随时间变化的速度场，此处默认向量为列向量。

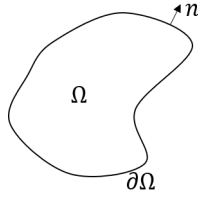


图 2.1 区域符号示例

现在考虑一个闭区域 Ω ， Ω 的边界记为 $\partial\Omega$ ，边界上的外法向记为 n ，同时假定 ρ 和 v 在 Ω 的一个开邻域内足够光滑。根据质量守恒，我们有 Ω 上质量的变化率为 $\partial\Omega$ 上质量的流出率和流入率之和。即

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \rho(x, t) dx &= - \int_{\partial\Omega} \rho v \cdot n ds \\ \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) dx &= - \int_{\partial\Omega} \text{div}(\rho v) dx \end{aligned}$$

如果 ρ 在 \mathbb{R}^3 上都能达到足够光滑，那么由 Ω 的任意性，可知

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) + \text{div}(\rho v) = 0 \quad (2.1)$$

2.2.2 欧拉视角下的动量守恒定律

现在考虑闭区域 Ω 上的动量变化。根据连续介质力学中的牛顿运动定律 [**]，闭区域 Ω 上的动量变化可以分为三部分，第一部分为物质流入流出 Ω 导致的动量变

化, 第二部分为作用在 Ω 边界上的力导致的动量变化, 第三部分为作用在 Ω 内部物质上的力 (一般为重力) 产生的作用变化。即

$$\frac{d}{dt}\Big|_{t=t_0} \int_{\Omega} \rho v dx = - \int_{\partial\Omega} \rho v (v \cdot n) ds + \int_{\partial\Omega} \sigma \cdot n ds + \int_{\Omega} \rho g dx \quad (2.2)$$

在 (2.2) 式中, g 为重力加速度, σ 为 Cauchy 应力 [**]。特别的, σ 是一个三阶对称矩阵, 其对称性来源于角动量守恒 [**], 我们将在 2.4 节中从另一个角度说明其对称性。

由于 (2.2) 式中 Ω 选择的任意性, 我们有

$$\frac{\partial}{\partial t}\Big|_{t=t_0} (\rho v) = -\operatorname{div}(\rho v^T v) + \operatorname{div}(\sigma) + \rho g \quad (2.3)$$

矩阵函数散度 div 定义如下:

$$\begin{aligned} \operatorname{div} : C^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R}^{3 \times 3}) &\rightarrow C^1(\mathbb{R}^3; \mathbb{R}^3) \\ \operatorname{div}(A)_i &:= \sum_j \partial_j A_{ij} \end{aligned}$$

(2.2) 式变形为

$$\frac{\partial}{\partial t}\Big|_{t=t_0} (\rho v) + \operatorname{div}(\rho v^T v) = \operatorname{div}(\sigma) + \rho g \quad (2.4)$$

2.3 拉格朗日视角下的动力学

在上一节中, 我们根据质量守恒和动量守恒得到了两个方程 (方程 (2.1) 与方程 (2.4)), 非常重要的一点是, 上述方程并没有使用任何有关自然状态-材料在不施加外力的静止状态-的信息。在之后的章节中, 我们将假定, $t = 0$ 是处于自然状态, 并且只考虑 $t \geq 0$ 的情况。

假定在自然状态下 ($t = 0$), 材料占据的空间为 $\Omega_0 \subset \mathbb{R}^3$, 此时也称 Ω_0 为参考构型。对于任意给定的 $t \in (0, +\infty)$, 此时材料占据的空间为 $\Omega_t \subset \mathbb{R}^3$, 相对于参考构型 Ω_0 , 称 Ω_t 为当前构型。

拉格朗日视角和欧拉视角的区别主要是函数的定义域。在上一节中, 我们所有函数的定义域都在 \mathbb{R}^3 上, 而本节我们将把视角限制在材料上, 例如对于任意时刻 t , 有 Ω_t 上的实值函数, $f(\cdot, t) : \Omega_t \rightarrow \mathbb{R}$ 。

2.3.1 形变映射, 形变梯度, 速度

为了描述材料相对于参考构型发生的形变, 我们引入形变映射

$$\phi : \Omega_0 \times [0, +\infty) \rightarrow \mathbb{R}^3$$

, 形变映射同时也给出了物体的运动轨迹。为了方便, 我们记 $\phi_t(x) = \phi(x, t)$, 实际上我们还假定 $\{\phi_t(x) : t \in \mathbb{R}\}$ 构成了一个单参数变换群, 并且关于 t 至少二阶光滑, 关于 X 至少有连续的一阶导数。

有了形变映射, 我们可以引入对局部形变的刻画, 即形变梯度 $F(X, t) := \frac{\partial \phi_t(X)}{\partial X}$ 。实际上, 形变梯度 $F(X, t)$ 还可以视为 X 处切空间的映射, 即

$$F(X, t) : T_X \Omega_0 \rightarrow T_x \Omega_t$$

对于任意的 $\partial_X \in T_X \Omega_0$, $\partial_x = F(X, t)[\partial_X] \in T_x \Omega_t$, 即形变梯度将 X 点的切向量 ∂_X 经过平移起始点, 旋转方向, 拉伸长度后得到 x 点的切向量 ∂_x , 如图 2.2 所示。

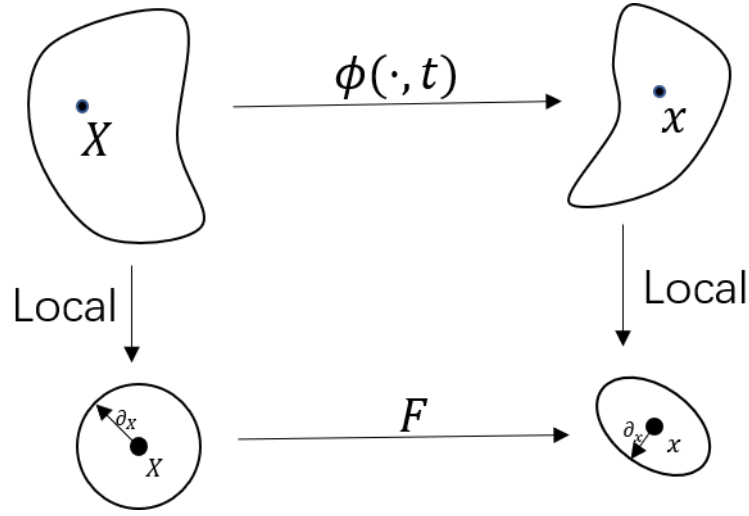


图 2.2 形变与形变梯度

同样的, 形变映射作为单参数变换群, 自然的导出速度的定义 $V(X, t) := \frac{\partial \phi_t(X)}{\partial t}$ 。值得注意的是, $V(X, t)$ 的定义域是在 Ω_0 上, 其值域是一个起始点在 Ω_t 上的一个三维列向量, 其与欧拉视角下定义的速度关系为 $V(X, t) = v(\phi_t(X), t)$, 如果记 $x = \phi_t(X)$, 则 $V(X, t) = v(x, t)$ 。

考察 F 关于时间的一阶导

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} F(X, t) &= \frac{d}{dt} \frac{\partial}{\partial X} \phi_t \\ &= \frac{\partial}{\partial X} \frac{d}{dt} \phi_t \\ &= \frac{\partial}{\partial X} V(X, t) \\ &= \frac{\partial v(\phi_t(X), t)}{\partial x} \frac{\partial \phi_t}{\partial X} \\ &= \frac{\partial v(x, t)}{\partial x} \frac{\partial \phi_t}{\partial X} \\ &= \nabla v \cdot F \end{aligned}$$

整理后我们得到 F 和 v 的关系

$$\dot{F} = \nabla v \cdot F \quad (2.5)$$

2.3.2 拉格朗日视角下的质量守恒

在引入了形变 ϕ_t 之后,很自然的有 $\hat{\Omega}_t = \{\phi_t(X) : X \in \hat{\Omega}_0 \subset \Omega_0\}$ (简记为 $\phi_t(\hat{\Omega}_0)$), 且 $\hat{\Omega}_t \subset \Omega_t$, 根据质量守恒, 形变不会影响质量, 即

$$\int_{\hat{\Omega}_0} \rho(x, 0) dx = \int_{\hat{\Omega}_t} \rho(x, t) dx = \int_{\phi_t(\hat{\Omega}_0)} \rho(x, t) dx$$

如果我们将 $\hat{\Omega}_t$ 的质量记为 $M[\hat{\Omega}_t]$, 则有 $\frac{d}{dt} M[\hat{\Omega}_t] = 0$ 。而

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\phi_t(\hat{\Omega}_0)} \rho(x, t) dx &= \frac{d}{dt} \int_{\hat{\Omega}_0} \rho(\phi_t(X), t) \det(F(X, t)) dX \\ &= \int_{\hat{\Omega}_0} \frac{d}{dt} [\rho(\phi_t(X), t) \det(F(X, t))] dX \\ &= 0 \end{aligned}$$

记 $R(X, t) := \rho(\phi_t(X), t)$, $J(X, t) := \det(F(X, t))$, 则根据 $\hat{\Omega}_0$ 的任意性, 有 $\frac{d}{dt} [R(X, t) J(X, t)] = 0$, 即

$$R(X, t) J(X, t) = R(X, 0) \quad (2.6)$$

(2.6) 式即为拉格朗日视角下的质量守恒方程。

2.3.3 拉格朗日视角下的动量守恒

在拉格朗日视角下, $\hat{\Omega}_0$ 的动量变化可以表示为作用在 $\hat{\Omega}_0$ 边界上的力以及作用在 $\hat{\Omega}_0$ 内部的力之和。即

$$\left. \frac{d}{dt} \right|_{t=t_0} \int_{\hat{\Omega}_0} R(X, 0) V(x, t) dX = \int_{\partial \hat{\Omega}_0} P \cdot N dS + \int_{\hat{\Omega}_0} R(X, 0) g dX \quad (2.7)$$

上式实际上对于任意的 $\hat{\Omega}_0$ 成立, 因此有以下

$$R(X, 0) \frac{\partial}{\partial t} V(X, t) = \text{DIV}(P) + Rg \quad (2.8)$$

此处 DIV 是 Ω_0 上的散度算子, 为了与 Ω_t 上进行区分记为大写。其中 P 是应力的另一种表述形式, 称为 **First Piola-Kirchhoff** 应力 $[**]$, 其满足 $\int_{\partial \hat{\Omega}_0} P \cdot N dS = \int_{\partial \hat{\Omega}_t} \sigma \cdot n ds$ 我们将在下一节本构关系中更详细的给出 P 的计算方式以及与 σ 的关系。

下面我们再次从拉格朗日视角推导欧拉视角下的动量守恒, 来证明两者的等价

性。

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\Big|_{t=t_0} \int_{\hat{\Omega}_0} R(X, 0) V(x, t) dX &= \frac{d}{dt}\Big|_{t=t_0} \int_{\hat{\Omega}_0} R(X, t) v(\phi_t(X), t) J(X, t) dX \\
&= \int_{\hat{\Omega}_0} \frac{d}{dt}\Big|_{t=t_0} [\rho(\phi_t(X), t) v(\phi_t(X), t) J(X, t)] dX \\
&= \int_{\hat{\Omega}_0} \frac{d}{dt}\Big|_{t=t_0} [\rho(\phi_t(X), t) v(\phi_t(X), t) J(X, t)] dX \\
&= \int_{\hat{\Omega}_0} v(\phi_{t_0}(X), t_0) \frac{d}{dt}\Big|_{t=t_0} [\rho(\phi_t(X), t) J(X, t)] \\
&\quad + \rho(\phi_{t_0}(X), t_0) J(X, t_0) \frac{d}{dt}\Big|_{t=t_0} v(\phi_{t_0}(X), t_0) dX \\
&= \int_{\hat{\Omega}_0} v(\phi_{t_0}(X), t_0) \frac{d}{dt}\Big|_{t=t_0} R(X, 0) \\
&\quad + \rho(\phi_{t_0}(X), t_0) J(X, t_0) \frac{d}{dt}\Big|_{t=t_0} v(\phi_t(X), t) dX \\
&= \int_{\hat{\Omega}_0} \rho(\phi_{t_0}(X), t_0) J(X, t_0) \frac{d}{dt}\Big|_{t=t_0} v(\phi_t(X), t) dX \\
&= \int_{\hat{\Omega}_{t_0}} \rho(x, t_0) \frac{d}{dt}\Big|_{t=t_0} v(\phi_{t,t_0}(x), t) dx
\end{aligned}$$

这里 $\phi_{t,t_0} = \phi_t \cdot \phi_{t_0}^{-1}$ ，带入 (2.6) 中就有

$$\int_{\hat{\Omega}_{t_0}} \rho(x, t_0) \frac{d}{dt}\Big|_{t=t_0} v(\phi_{t,t_0}(x), t) dx = \int_{\hat{\Omega}_{t_0}} \operatorname{div}(\sigma) dx + \int_{\hat{\Omega}_{t_0}} \rho g dx$$

这里由于 $\hat{\Omega}_{t_0}$ 为 Ω_t 内的任意闭区域，因此

$$\rho(x, t_0) \frac{d}{dt}\Big|_{t=t_0} v(\phi_{t,t_0}(x), t) = \operatorname{div}(\sigma) + \rho g$$

其中

$$\frac{d}{dt}\Big|_{t=t_0} v(\phi_{t,t_0}(x), t) = \frac{\partial}{\partial t}\Big|_{t=t_0} v(x, t) + \sum_i \frac{\partial \phi_{t,t_0}^i}{\partial t} \cdot \frac{\partial}{\partial x_i} v(x, t_0) = \frac{\partial}{\partial t}\Big|_{t=t_0} v(x, t) + v^T \nabla v$$

这里 ϕ_{t,t_0}^i 为 ϕ_{t,t_0} 的第 i 个分量。此处引入材料时间导数 $\frac{D}{Dt} f := \frac{\partial}{\partial t} f + v \nabla f$ ，将其代入上式中整理得

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = \operatorname{div}(\sigma) + \rho g \tag{2.9}$$

该方程实际与 (2.4) 式等价，由于其更简洁的表述形式，我们之后将称 (2.9) 式为欧拉视角下的动量守恒。

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \operatorname{div}(\rho v^T v) = \operatorname{div}(\sigma) + \rho g$$

可考察方程的左端项

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \operatorname{div}(\rho v^T v) &= \rho \frac{\partial}{\partial t} v + v \frac{\partial}{\partial t} \rho + \rho v^T \nabla v + v \operatorname{div}(\rho v) \\
 &= \rho \left(\frac{\partial}{\partial t} v + v^T \nabla v \right) + v \left(\frac{\partial}{\partial t} \rho + \operatorname{div}(\rho v) \right) \quad \text{第二项为质量守恒} \\
 &= \rho \frac{Dv}{Dt}
 \end{aligned}$$

带入即知, (2.4) 式是 (2.8) 式的展开。

2.4 本构关系

在前两节中, 我们在动量守恒方程中引入了应力项, 其决定了速度如何随着时间变化。本节我们将给出如何通过形变来给出应变张量, 其中应变张量和形变的函数关系被称为本构关系。事实上, 本构关系直接决定了我们模拟的物体会表现出何种特质。

流体被认为是一种不可压缩的物质, 用数学的语言就是说其形变梯度 F 满足 $\det(F) \equiv 1$, 然而在实践中, 为了更好的配合物质点法的使用, 我们从要求 $\det(F) \equiv 1$ 转变为使用形变能量密度来惩罚形变对体积的影响, $W(F) := \frac{\lambda}{2}(\det(F) - 1)^2$ 。可以发现, 对任意的 $F \in \mathbb{R}^3, U \in SO_3$, 始终有 $W(UF) = W(F)$, 该特性被称为旋转不变性, 根据诺特定理 [**], 如果能量密度是旋转不变的, 那么所得到的系统是角动量守恒的。

在有了能量密度函数, 我们推导能量密度变化量和形变梯度的变化量之间的关系

$$\begin{aligned}
 \delta W(F) &= \frac{\lambda}{2} \delta(\det(F) - 1)^2 \\
 &= \lambda(\det(F) - 1) \delta(\det(F) - 1) \\
 &= \lambda(\det(F) - 1) \delta(\det(F))
 \end{aligned}$$

为了计算 $\delta \det(F)$, 首先考察 $\left. \frac{d}{dt} \right|_{t=0} \det(F + tI)$, 由矩阵的特征多项式得

$$\det(F + \epsilon I) = \epsilon^n + \epsilon^{n-1} \operatorname{Tr}(F) + \dots + \det(F)$$

则等式两边同时除 ϵ^n 得

$$\det\left(\frac{1}{\epsilon} F + I\right) = 1 + \frac{1}{\epsilon} * \operatorname{Tr}(F) + \dots + \frac{1}{\epsilon^n} \det(F)$$

此时将 $t \neq 0$ 代入有

$$\det(tF + I) = 1 + t \operatorname{Tr}(F) + \dots + t^n \det(F)$$

同时验证 $t = 0$ 可知上式恒成立。因此 $\frac{d}{dt}\Big|_{t=0} \det(tF + I) = \text{tr}(F)$ ，现在对于任意的 t_0 以及 $\mathbb{R}^{3 \times 3}$ 中通过 $A(t_0)$ (假设 $A(t_0)$ 可逆) 的一条光滑路径 $A(t)$ ，我们有对应的通过 I 的路径 $A(t_0)^{-1}A(t)$ ，其对应的切向量为 $A(t_0)^{-1}\frac{d}{dt}\Big|_{t=t_0} A(t)$ ，则

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\Big|_{t=t_0} \det(A(t)) &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\det(A(t_0 + h)) - \det(A(t_0))}{h} \\ &= \det(A(t_0)) \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\det(A(t_0)^{-1}A(t_0 + h)) - 1}{h} \\ &= \det(A(t_0)) \text{tr}(A(t_0)^{-1} \frac{d}{dt}\Big|_{t=t_0} A(t)) \\ &= \det(A(t_0)) A(t_0)^{-T} : \frac{d}{dt}\Big|_{t=t_0} A(t) \end{aligned} \quad (2.10)$$

这里 $A : B := \sum_{i,j} A_{ij} B_{ij}$ 。

故 $\delta \det(F) = \det(F) F^{-T} : \delta F$ ，代入 $\delta W(F)$ 之中即有

$$\delta W(F) = \lambda(\det(F) - 1) \det(F) F^{-T} : \delta F$$

，其中 $P = \lambda(\det(F) - 1) \det(F) F^{-T}$ 被称为 **First Piola-Kirchhoff** 应力，其与 **Cauchy** 应力 σ 的关系 [**] 为

$$J\sigma = PF^T$$

我们将在本小节最后给出该关系式的证明，代入可知柯西应力 $\sigma = \lambda(\det(F) - 1)I$ 。

这里的 $W(F)$ 实际上只给出了物体的抗压缩性的性质，我们还需要给出表面张力的能量密度函数。根据 [**]，表面能实际和物体表面积成正比，表面张力为表面能的梯度。那么我们首先可以形变和表面能量的关系

$$S(\phi_t) = k \int_{\phi_t(\Omega_0)} ds \quad (2.11)$$

为了更好的计算其梯度，我们对 (2.10) 式做一些处理。此处引入一些微分流形的记号 [**]，记 f^* 为 f 导出的拉回映射， f_* 为推前映射， $ds, d\tilde{s}$ 分别为曲面 $\partial\Omega_{t_0}, \partial\Omega_t$ 上的面积二形式，其为空间体积形式 dv 内乘法向的结果，即 $ds(X, Y) = dv(n, X, Y)$ ，我们记 $ds = dv \odot n$ ， $\tilde{p} = \phi_{t_0, t}(p)$ ，则对任意的 $t \in [0, t_0)$ ， $\tilde{X}, \tilde{Y} \in T_{\tilde{p}}\Omega_t$ 有如下

$$\begin{aligned} (\phi_{t_0, t}^* ds)(\tilde{X}, \tilde{Y}) &= (\phi_{t_0, t}^*(dv \odot n))(\tilde{X}, \tilde{Y}) \\ &= ((\phi_{t_0, t}^* dv) \odot (\phi_{t_0, t}^* n))(\tilde{X}, \tilde{Y}) \\ &= \det(F(x; t_0, t)) dv(\langle F^{-1}(x; t_0, t)n, \tilde{n} \rangle \tilde{X}, \tilde{Y}) \\ &= \det(F(x; t_0, t)) \langle F^{-1}(x; t_0, t)n, \tilde{n} \rangle dv(\tilde{n}, \tilde{X}, \tilde{Y}) \\ &= \det(F(x; t_0, t)) \langle n, F^{-T}(x; t_0, t)\tilde{n} \rangle dv(\tilde{n}, \tilde{X}, \tilde{Y}) \end{aligned} \quad (2.12)$$

上式中 $F(x; t_0, t) = \frac{\partial \phi_{t_0, t}(x)}{\partial x}$, \tilde{n} 为 $T_p \Omega_t$ 单位法向, $\langle \cdot, \cdot \rangle$ 为空间内积, 容易验证 $F^{-T}(x; t_0, t)\tilde{n}$ 与 $T_p \Omega_0$ 垂直, 故 $\langle n, F^{-T}(x; t_0, t)\tilde{n} \rangle = \|F^{-T}(x; t_0, t)\tilde{n}\|$, 即 $\|F^{-T}(x; t_0, t)\tilde{n}\|n = F^{-T}(x; t_0, t)\tilde{n}$, 那么有

$$(\phi_{t_0, t}^* ds) = \det(F(x; t_0, t)) \|F^{-T}(x; t_0, t)\tilde{n}\| d\tilde{s}$$

则代入表面能表达式有

$$\begin{aligned} S(\phi_{t_0}) &= k \int_{\Omega_{t_0}} ds \\ &= k \int_{\phi_{t_0, t}(\Omega_t)} ds \\ &= k \int_{\Omega_t} \phi_{t_0, t}^* ds \\ &= k \int_{\Omega_t} \det(F(x; t_0, t)) \|F^{-T}(x; t_0, t)\tilde{n}\| d\tilde{s} \end{aligned}$$

至此, 我们得到表面能的另一个表达形式

$$S(\phi_{t_0}) = k \int_{\Omega_t} \det(F(x; t_0, t)) \|F^{-T}(x; t_0, t)\tilde{n}\| d\tilde{s} \quad (2.13)$$

(2.21) 式将是表面张力离散化的基础。

最后, 我们给出 $J\sigma = PF^T$ 的证明,

$$\begin{aligned} \int_{\partial \hat{\Omega}_t} \sigma \cdot n ds &= \int_{\phi_t(\partial \hat{\Omega}_0)} \sigma \cdot n ds \\ &= \int_{\partial \hat{\Omega}_0} \phi_t^*(\sigma \cdot n)(\phi_t^* ds) \\ &= \int_{\partial \hat{\Omega}_0} \sigma \cdot n J \|F^{-T} N\| dS \\ &= \int_{\partial \hat{\Omega}_0} \sigma F^{-T} \cdot F^T n J \|F^{-T} N\| dS \\ &= \int_{\partial \hat{\Omega}_0} J \|F^{-T} N\| \sigma F^{-T} \cdot \frac{1}{\|F^{-T} N\|} N dS \\ &= \int_{\partial \hat{\Omega}_0} J \sigma F^{-T} \cdot N dS \end{aligned}$$

而 $\int_{\partial \hat{\Omega}_0} P \cdot N dS = \int_{\partial \hat{\Omega}_t} \sigma \cdot n ds$, 因此 $\int_{\partial \hat{\Omega}_0} J \sigma F^{-T} \cdot N dS = \int_{\partial \hat{\Omega}_0} P \cdot N dS$, 由于上式对任意 $\partial \hat{\Omega}_0$ 成立, 则 $J \sigma F^{-T} = P$ 得 $J \sigma = PF^T$ 。

2.5 本章小结

本章基于连续介质力学得到了一系列的控制方程

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) + \operatorname{div}(\rho v) = 0 \quad \text{欧拉视角下的质量守恒方程}$$

$$R(X, t)J(X, t) = R(X, 0) \quad \text{拉格朗日视角下的质量守恒方程}$$

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = \operatorname{div}(\sigma) + \rho g \quad \text{欧拉视角下的动量守恒方程}$$

$$R(X, 0) \frac{\partial}{\partial t} V(X, t) = \operatorname{DIV}(P) + Rg \quad \text{拉格朗日视角下的质量守恒方程}$$

以上四个方程分别从两种视角分别等价的刻画了质量守恒和动量守恒，这两种视角也会在物质点法离散化的过程中体现出来。其次，我们还给出了形变梯度与速度的关系

$$\dot{F} = \nabla v \cdot F$$

该方程将会在物质点法如何获得下一时刻的形变梯度中起到关键作用。最后，我们给出了弱可压缩能量 $W(F) = \lambda(J - 1)^2$ 来刻画流体的特性，该能量也给出了 **First Piola-Kirchhoff** 应力和 **Cauchy** 应力的计算方式。其次我们给出了表面能的计算方法

$$S(\phi_{t_0}) = k \int_{\Omega_{t_1}} \det(F(x; t_0, t_1)) \|F^{-T}(x; t_0, t_1) \tilde{n}\| d\tilde{s}$$

该计算形式下，积分域不随着 ϕ_{t_0} 变化而变化，为我们离散计算以及变分都带来了便利，而表面张力将由表面能变分获得，这一步我们将在离散化的过程中来计算。

3 表面重建

3.1 引言

为了计算表面张力，我们需要一种能够从点云中获取表面和表面法向的方法。本文使用的方法是使用粒子水平集方法[**]获得一个粗糙的一阶连续隐式曲面，并使用 **MarchingCube**[**] 算法重构表面网格。然而该网格的质量只能做到一阶连续，计算得到的法向在面片之间并不连续，难以应用在表面张力所需的法向计算。本文在该网格上进行泊松圆盘采样，然后结合已经存在的 **IPIA** 算法，提出一种新的快速重建算法以此获得一个二阶光滑的隐式曲面，然后基于该隐式曲面来计算表面点云的法向。

3.2 粒子水平集方法

记 \mathcal{V} 为点云集合， $v \in \mathcal{V}$ 为粒子，记 $d(x, v) \in \mathbb{R}$ 为空间上 x 的点到粒子 v 的距离，则 $\mathcal{S}(v) = \{x \in \mathbb{R}^3 : d(x, v) = r\}$ 为半径为 r ，圆心在 v 的球，如图??左所示，蓝色圆圈为二位情况的 $\mathcal{S}(v)$ 。

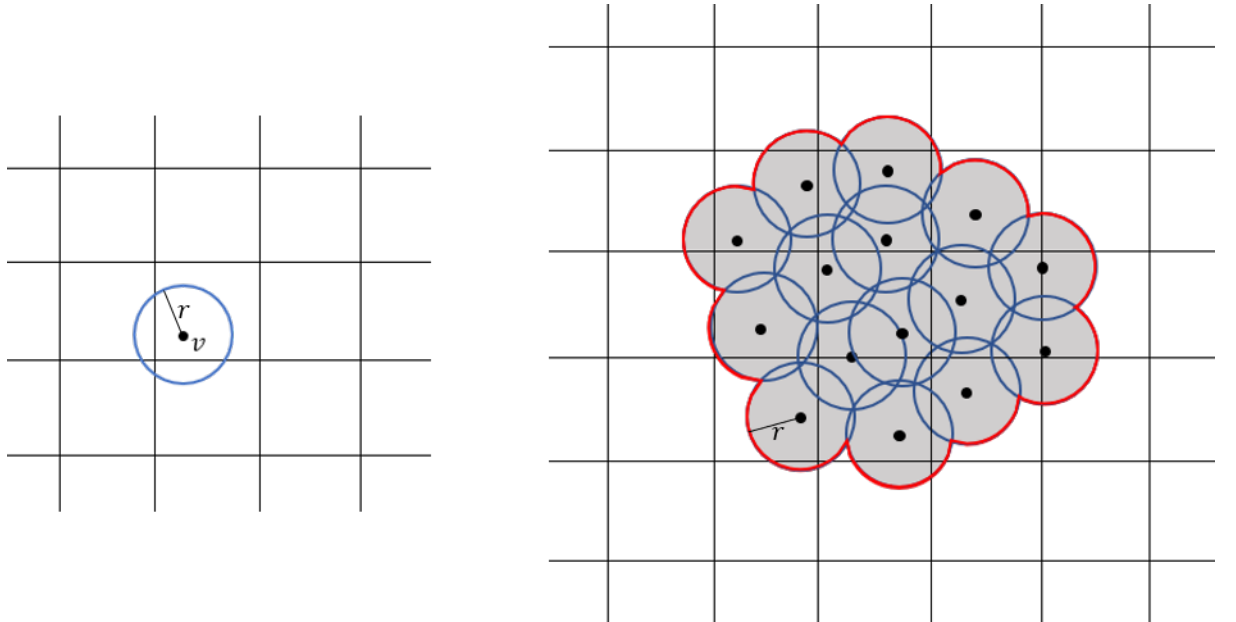


图 3.1 二维情况 $\mathcal{S}(v)$ (左) 与 $\mathcal{S}(\mathcal{V})$ (右)

记 $d(x, \mathcal{V}) := \min\{d(x, v) : v \in \mathcal{V}\}$ ，则 $\mathcal{S}(\mathcal{V}) = \{x \in \mathbb{R}^3 : d(x, \mathcal{V}) = r\}$ 为点云的外延边界。

如图??右所示，红色的外延边界为所求 $\mathcal{S}(\mathcal{V})$ 。该红色边界初步确定了该点云的

边界，灰色部分界定了物体内部。下一步我们将从利用红色边界和背景网格提取出一个粗糙的网格。

3.3 水平集网格提取

Marching cube 通常用于三维标量场的水平集的可视化，本文使用 Marching cube 算法来获取水平集的三角网格，在本文中我们的水平集为 $\mathcal{S}(\mathcal{V}) = \{x \in \mathbb{R}^3 : d(x, \mathcal{V}) = r\}$ 。

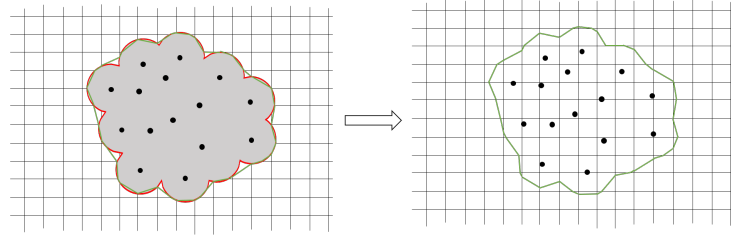


图 3.2 二维点云轮廓提取图示

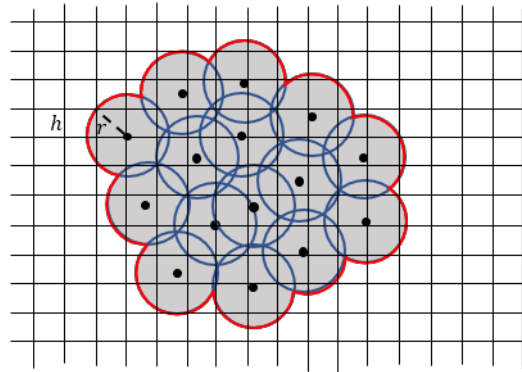


图 3.3 二维情况的 r 与 h 的关系

本小节我们的目标只是提取出一个大致的点云的表面轮廓，如图??所示。我们首先将空间离散化成一个个均匀的立方体，我们称之为背景网格，并对每一个正方体格点放置一个标志符，默认为 0，此处记立方体宽度为 h ，为了保证球能够覆盖到一个足够大的面积，此处我们选择 $r = \sqrt{3}h$ ，二维情况为 $r = \sqrt{2}h$ ，具体如图??所示。本文为了节省内存，具体实现使用了八叉树数据结构。之后对每一个粒子操作，将粒子周围的格点做标记，如果格点距离该粒子半径不超过 r ，则将格点标记为 1，如此下来，所有的正方体格点都被标记为两种状态。之后我们对正方体按格点状态进行分类，由于每个格点有两种状态，每个正方体有 8 个格点，如此一来便有 $2^8 = 256$ 种状态，在合并旋转和对称的情况后，可以简化成 15 种，可以分类成如图??所示。之后我们再将网格顶点位置调整到合适的位置，并建立三角网格数据结构。具体的算法描述见 Algorithm ??。

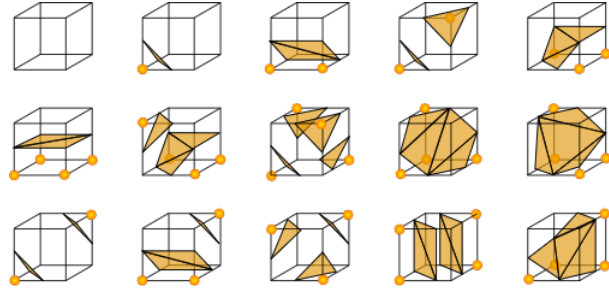


图 3.4 Marching cube 列表

Algorithm 1 Marching cube**Input:** 点云集合 \mathcal{V} , 立方体宽度 h **Output:** 三角网格位置集合 V , 面片集合 F

- 1: 准备空间网格数据结构 (八叉树), 并记 \mathcal{G} 为格点集合, \mathcal{E} 为立方体的边集合, \mathcal{C} 为立方体集合
- 2: $state(g) \in \{0, 1\}$ 为格点 $g \in \mathcal{G}$ 的状态, 初始化为 0
- 3: $P(e) \in \mathbb{R}^3$ 为边 $e \in \mathcal{E}$ 上的一个顶点
- 4: $r = \sqrt{3}h$
- 5: **for** $v \in \mathcal{V}$ **do**
- 6: **for** $g \in \{g \in \mathcal{G} : \|g - v\| < r\}$ **do**
- 7: $state(g)$ 标记为 1
- 8: **end for**
- 9: **end for**
- 10: **for** $e \in \{e \in \mathcal{E} : e \text{ 两端格点状态相异}\}$ **do**
- 11: 取 e 状态为 1 的顶点记为 g_1 , 状态为 0 的记为 g_0
- 12: 申请栈空间 p_{stack}
- 13: **for** $v \in \{v \in \mathcal{V} : \|g_1 - v\| < r\}$ **do**
- 14: 计算 $\mathcal{S}(v)$ 与 e 的交点并压入 p_{stack} 中
- 15: **end for**
- 16: 在 p_{stack} 中选取离 g_0 最近的点, 并赋值给 $P(e)$, 同时将 $P(e)$ 压入 V 中
- 17: **end for**
- 18: **for** $c \in \mathcal{C}$ **do**
- 19: 匹配 c 所对应的 Marching cube 列表中的状态
- 20: 构造相应的三角面表 f_s , 顶点选为对应 $P(e)$ 在 V 中得索引
- 21: 将 f_s 其压入 F 中
- 22: **end for**

在这里补点三维图，说明网格质量不行，只能一阶连续，法向不连续

从实验结果的图中可以发现，Marching cube 算法确实提取出了一个点云的边界轮廓，但是轮廓只能做到一阶连续，法向明显不连续，同时其三角网格质量无法无法保证，甚至可以明显看出在一些尖锐地方，网格质量极差，上述的问题给我们计算表面张力带来了很大的阻碍。

3.4 LSIPIA

为了解决法向不连续的问题以及网格质量差的问题，我们使用二阶连续的隐式曲面来逼近三角网格，因此隐式曲面的法向一阶连续。

3.4.1 隐式曲面的渐进迭代逼近

我们首先给出隐式曲面重建问题，给定一个无序点集 $\mathcal{V} = \{v_i = (v_i^1, v_i^2, v_i^3)\}_{i=1}^n$ 以及点上的单位法向量 $\mathcal{N} = \{n_i = (n_i^1, n_i^2, n_i^3)\}_{i=1}^n$ ，寻找一个函数 $f(x^1, x^2, x^3)$ 使得 $f(x^1, x^2, x^3)$ 的 0 水平集拟合该组无序点集 \mathcal{V} 。以数学的表达形式即为

$$\min_f \sum_{i=1}^n f(v_i^1, v_i^2, v_i^3)^2 \quad (3.1)$$

为了让问题可解，我们选择 f 为有限个张量积 B-样条基函数的线性组合，即

$$f(x^1, x^2, x^3) = \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} \sum_{k=1}^{N_z} C_{ijk} B_i(x^1) B_j(x^2) B_k(x^3)$$

这里我们选择二阶 B-样条基函数，其中二阶标准 B-样条函数

$$B(x) = \begin{cases} \frac{3}{4} - |x|^2 & 0 \leq |x| < \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2}(\frac{3}{2} - |x|)^2 & \frac{1}{2} \leq |x| < \frac{3}{2} \\ 0 & \frac{3}{2} \leq |x| \end{cases}$$

如图??所示，这里 $B_i(x) := B(\frac{1}{h}(x - x_i))$ ，这里的 x_i 本文选取为空间立方体网格格点坐标的一个分量， h 为立方体宽度。则最小化问题 (3.2) 转化成

$$\min_{C_{ijk}} E(C_{111}, C_{112}, \dots, C_{N_x N_y N_z}) := \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n f(v_i^1, v_i^2, v_i^3)^2 \quad (3.2)$$

这里 C_{ijk} 张量积 B-样条系数。

我们记三变量 B-样条基函数为 $B_{ijk}(x^1, x^2, x^3) = B_i(x^1) B_j(x^2) B_k(x^3)$ ，则上述

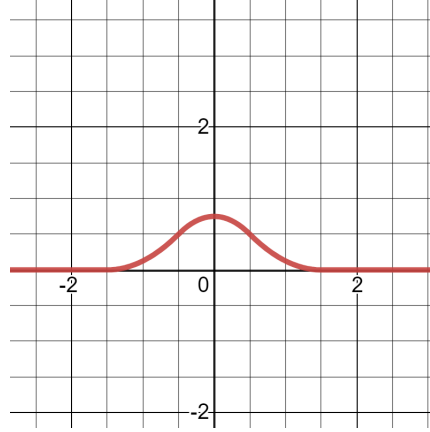


图 3.5 二次标准 B-样条基函数

问题变为

$$\begin{aligned}
 \min_{C_{ijk}} E(C_{111}, C_{112}, \dots, C_{N_x N_y N_z}) &:= \frac{1}{2} \sum_{r=1}^n \left(\sum_{ijk} C_{ijk} B_{ijk}(v_r^1, v_r^2, v_r^3) \right)^2 \\
 \Leftrightarrow \delta E(\{C_{ijk}\}) &= 0 \\
 \Leftrightarrow \delta \left(\frac{1}{2} \sum_{r=1}^n \left(\sum_{ijk} C_{ijk} B_{ijk}(v_r^1, v_r^2, v_r^3) \right)^2 \right) &= 0 \\
 \Leftrightarrow \sum_{r=1}^n \sum_{ijk} \sum_{uvw} C_{ijk} B_{ijk}(v_r^1, v_r^2, v_r^3) B_{uvw}(v_r^1, v_r^2, v_r^3) \delta C_{uvw} &= 0 \\
 \Leftrightarrow \sum_{r=1}^n \sum_{ijk} C_{ijk} B_{ijk}(v_r^1, v_r^2, v_r^3) B_{uvw}(v_r^1, v_r^2, v_r^3) &= 0
 \end{aligned} \tag{3.3}$$

我们将 $\{B_{111}, B_{112}, \dots, B_{11N_z}, \dots, B_{1N_y1}, \dots, B_{N_x N_y N_z}\}$ 以字典序排列，这样我们可配置如下矩阵

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} B_{111}(v_1^1, v_1^2, v_1^3) & B_{112}(v_1^1, v_1^2, v_1^3) & \dots & B_{N_x N_y N_z}(v_1^1, v_1^2, v_1^3) \\ B_{111}(v_2^1, v_2^2, v_2^3) & B_{112}(v_2^1, v_2^2, v_2^3) & \dots & B_{N_x N_y N_z}(v_2^1, v_2^2, v_2^3) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ B_{111}(v_r^1, v_r^2, v_r^3) & B_{112}(v_r^1, v_r^2, v_r^3) & \dots & B_{N_x N_y N_z}(v_r^1, v_r^2, v_r^3) \end{bmatrix}$$

同样对于 $\{C_{111}, \dots, C_{N_x N_y N_z}\}$ 我们有

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} C_{111} \\ \vdots \\ C_{N_x N_y N_z} \end{bmatrix}$$

代入 (3.3) 最后一个式子中，我们可以得到一个紧凑的形式

$$\mathbf{B}^T \mathbf{B} \mathbf{C} = 0$$

然而，在实践中以上线性系统并非有唯一解，并且有平凡解 ($\mathbf{C} = 0$)。为了避免陷入平凡解，我们添加法向扰动。我们利用本小节开头提到的每一点上的法向信息 \mathcal{N} ，我们利用法向取一些偏移点 $\mathcal{Q} = \{q_i = v_i + \epsilon n_i : v_i \in \mathcal{V}, n_i \in \mathcal{N}\}$ 。然后尽可能要求 $f(q_i) = \epsilon, i = 1, 2, 3, \dots n$ 。据此我们修改 (3.3) 中的优化问题，

$$\begin{aligned} \min_{C_{ijk}} E(C_{111}, C_{112}, \dots, C_{N_x N_y N_z}) &:= \frac{1}{2} \sum_{r=1}^n [(\sum_{ijk} C_{ijk} B_{ijk}(v_r^1, v_r^2, v_r^3))^2 + (\epsilon - \sum_{ijk} C_{ijk} B_{ijk}(q_r^1, q_r^2, q_r^3))^2] \\ \Leftrightarrow \sum_{r=1}^n (\sum_{ijk} C_{ijk} B_{ijk}(v_r^1, v_r^2, v_r^3) B_{uvw}(v_r^1, v_r^2, v_r^3) - (\epsilon - \sum_{ijk} C_{ijk} B_{ijk}(q_r^1, q_r^2, q_r^3)) B_{uvw}(q_r^1, q_r^2, q_r^3)) \end{aligned} \quad (3.4)$$

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} B_{111}(v_1^1, v_1^2, v_1^3) & B_{112}(v_1^1, v_1^2, v_1^3) & \dots & B_{N_x N_y N_z}(v_1^1, v_1^2, v_1^3) \\ B_{111}(v_2^1, v_2^2, v_2^3) & B_{112}(v_2^1, v_2^2, v_2^3) & \dots & B_{N_x N_y N_z}(v_2^1, v_2^2, v_2^3) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ B_{111}(v_r^1, v_r^2, v_r^3) & B_{112}(v_r^1, v_r^2, v_r^3) & \dots & B_{N_x N_y N_z}(v_r^1, v_r^2, v_r^3) \\ B_{111}(q_1^1, q_1^2, q_1^3) & B_{112}(q_1^1, q_1^2, q_1^3) & \dots & B_{N_x N_y N_z}(q_1^1, q_1^2, q_1^3) \\ B_{111}(q_2^1, q_2^2, q_2^3) & B_{112}(q_2^1, q_2^2, q_2^3) & \dots & B_{N_x N_y N_z}(q_2^1, q_2^2, q_2^3) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ B_{111}(q_r^1, q_r^2, q_r^3) & B_{112}(q_r^1, q_r^2, q_r^3) & \dots & B_{N_x N_y N_z}(q_r^1, q_r^2, q_r^3) \end{bmatrix}$$

如果再记

$$\mathbf{b} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \epsilon \\ \vdots \\ \epsilon \end{bmatrix}$$

其中 \mathbf{b} 的前 n 项为 0，后 n 项为 ϵ 。则 (3.4) 式可以写成紧凑的形式

$$\mathbf{B}^T(\mathbf{b} - \mathbf{B}\mathbf{C}) = 0 \quad (3.5)$$

求解该线性系统，我们使用迭代法求解，与 IPIA[**] 不同，我们的迭代格式为

$$\mathbf{C}^{\alpha+1} = \mathbf{C}^\alpha + \Lambda \mathbf{B}^T(\mathbf{b} - \mathbf{B}\mathbf{C}^\alpha), \alpha = 0, 1, 2, \dots \quad (3.6)$$

这里 Λ 为

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{\sum_{r=1}^n B_{111}(v_r) + B_{111}(q_r)} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sum_{r=1}^n B_{112}(v_r) + B_{112}(q_r)} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \frac{1}{\sum_{r=1}^n B_{N_x N_y N_z}(v_r) + B_{N_x N_y N_z}(q_r)} \end{bmatrix} \quad (3.7)$$

这里 $B_{ijk}(x) = B_{ijk}(x^1, x^2, x^3)$, 并假设 Λ 可逆 (即 $\forall ijk, \sum_{r=1}^n B_{ijk}(v_r) + B_{ijk}(q_r) \neq 0$), 否则认为有某个节点 ijk 满足 $\sum_{r=1}^n B_{ijk}(v_r) + B_{ijk}(q_r) = 0$, 由于 \mathbf{B} -样条基函数非负, 则 $B_{ijk}(v_r) = B_{ijk}(q_r) = 0$, 我们可以去掉该节点, 同时去掉对应的 \mathbf{B} 和 \mathbf{C} 对应的行, 其并不影响点云附近的隐式曲面构建。所以我们不妨假定 Λ 可逆。有关收敛性的证明, 详见 [**]。本迭代格式相较于 IPIA 格式最大的优势就是内存占用少, 可高度并行, 我们从 **Algorithm ??** 来分析这一点。

我们可以发现 **Algorithm ??** 在第 4 行, 第 15 行, 第 22 行对应的循环可高度并行。同时需要的额外内存为储存在每个格点 \mathcal{G} 上的 C_{ijk} , λ_{ijk} , Δ_{ijk} 。而这一点, 我们将在下一节中说明里所需的额外内存可以借用物质点法中的数据结构完成, 也就是说 **LSPIA** 的优势为可复用物质点法的数据结构, 同时可以高度并行。

[***** 补充实验数据 *****]

3.4.2 快速法向计算

在完成 **Algorithm ??** 之后, 我们获得了一个二阶连续的隐式曲面。即

$$f(x) = \sum_{ijk} C_{ijk} B_{ijk}(x) \quad (3.8)$$

获取法向我们可以直接计算其梯度 ∇f , 我们首先分析计算一个点上的梯度所需要的代价。首先根据张量积 \mathbf{B} -样条函数的定义 $B_{ijk}(x) = B_i(x^1) * B_j(x^2) * B_k(x^3)$, 如果选取的为二次样条, 则在二维情况下其能够覆盖到点 x 的基函数如图??, 所以能够覆盖到点 x 的坐标个数为 $I = \{ij : i = i_0 + k, j = i_0 + l, \text{其中 } k, l \in \{0, 1, 2\}\}$ 。

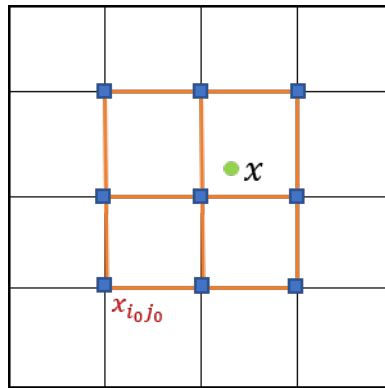


图 3.6 蓝色正方形为其紧支集能够覆盖 x 的自由度, $x_{i_0 j_0}$ 为左下角格点坐标

Algorithm 2 LSIPIA**Input:** 点云位置 \mathcal{V} , 点云法向 \mathcal{N} , 背景网格格点集合 \mathcal{G} , 指定迭代次数 $LoopTimes$ **Output:** 隐式曲面 $f(x) = \sum_{ijk} C_{ijk} B_{ijk}(x)$, 即输出参数值 C_{ijk}

```

1: 初始化  $\forall ijk, C_{ijk} = 0$ 
2: 初始化  $\forall ijk, \lambda_{ijk} = 0$ 
3: 初始化偏移量  $\epsilon$ 
4: for  $r \in \#\mathcal{V}$  do
5:   预计算下标为  $I = \{ijk : v_r \in \text{supp}(B_{ijk})\}$  的张量积 B-样条函数, 储存为  $B_{ijk}(v_r)$ 
6:   for  $ijk \in I$  do
7:      $\lambda_{ijk} \leftarrow \lambda_{ijk} + B_{ijk}(v_r)$ 
8:   end for
9:    $v_{\epsilon r} \leftarrow v_r + \epsilon n_r$ 
10:  预计算下标为  $I_\epsilon = \{ijk : v_{\epsilon r} \in \text{supp}(B_{ijk})\}$  的张量积 B-样条函数, 储存为  $B_{ijk}(v_{\epsilon r})$ 
11:  for  $ijk \in I_\epsilon$  do
12:     $\lambda_{ijk} \leftarrow \lambda_{ijk} + B_{ijk}(v_{\epsilon r})$ 
13:  end for
14: end for
15: for  $ijk \in \mathcal{G}$  do
16:  if  $\lambda_{ijk} \neq 0$  then
17:     $\lambda_{ijk} \leftarrow \frac{1}{\lambda_{ijk}}$ 
18:  end if
19: end for
20: 初始化  $\forall ijk, \Delta_{ijk} = 0$ 
21: for  $i = 1, \dots, LoopTimes$  do
22:  for  $r \in \#\mathcal{V}$  do
23:    预计算下标为  $I = \{ijk : v_r \in \text{supp}(B_{ijk})\}$  的张量积 B-样条函数, 储存为  $B_{ijk}(v_r)$ 
24:     $res = 0$ 
25:    for  $ijk \in I$  do
26:       $res \leftarrow res + B_{ijk}(v_r)$ 
27:    end for
28:     $\delta_r = 0 - res$ 
29:    for  $ijk \in I$  do
30:       $\Delta_{ijk} \leftarrow \Delta_{ijk} + \delta_r \cdot B_{ijk}(v_r)$ 
31:      重置  $\Delta_{ijk}$  为 0
32:    end for
33:  end for
34: end for

```

而

$$\begin{aligned}
\nabla f &= \sum_{ijk} C_{ijk} \nabla B_{ijk}(x) \\
&= \sum_{ijk} C_{ijk} \nabla (B_i(x^1) B_j(x^2) B_k(x^3)) \\
&= \sum_{ijk} C_{ijk} (\partial_1 B_i(x^1) \cdot B_j(x^2) B_k(x^3), B_i(x^1) \partial_2 B_j(x^2) \cdot B_k(x^3), B_i(x^1) B_j(x^2) \partial_3 B_k(x^3))
\end{aligned} \tag{3.9}$$

可以发现要计算 x 点的梯度 ∇f , 我们需要计算的有 $B_i(x^r), \partial_r B_i(x^r), i \in \{0, 1, 2\}, r \in \{1, 2, 3\}$, 其中样条阶数越高, 计算 $\partial_r B_i(x^r)$ 代价越大, 并且 $\partial_r B_i(x^r)$ 为分段函数, 故在不同的 r 之间不可能做到单指令多数数据流并行, 同样在拼装 $\nabla B_{ijk}(x)$ 时每一个维度需要单独的计算。基于这些缺点, 我们提出另一个近似法向的计算方法。这里我们使用移动加权最小二乘来逼近格点系数, 我们将会看到在格点张量积 **B**-样条基下, 移动加权最小二乘将有惊人的简单形式。

我们寻求的近似目标函数为

$$f_y(x; c) = f(y) + c^T(x - y) \tag{3.10}$$

能量函数设计如下

$$E_y(c) = \frac{1}{2} \sum_{ijk} B_{ijk}(y) (f_y(x_{ijk}; c) - C_{ijk})^2 \tag{3.11}$$

对上式取极小我们得到

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{\partial}{\partial c} E_y(c) \\
&= \frac{\partial}{\partial c} \frac{1}{2} \sum_{ijk} B_{ijk}(y) (f(y) + c^T(x_{ijk} - y) - C_{ijk})^2 \\
&= \sum_{ijk} B_{ijk}(y) (f(y) + c^T(x_{ijk} - y) - C_{ijk})(x_{ijk} - y)^T \\
&= \sum_{ijk} B_{ijk}(y) (f(y) - C_{ijk})(x_{ijk} - y)^T + c^T \sum_{ijk} B_{ijk}(y) (x_{ijk} - y)(x_{ijk} - y)^T
\end{aligned} \tag{3.12}$$

则

$$\sum_{ijk} B_{ijk}(y) (C_{ijk} - f(y))(x_{ijk} - y) = [\sum_{ijk} B_{ijk}(y) (x_{ijk} - y)(x_{ijk} - y)^T] c$$

当然我们要计算 c 我们得到如下式子

$$c = [\sum_{ijk} B_{ijk}(y) (x_{ijk} - y)(x_{ijk} - y)^T]^{-1} \cdot \sum_{ijk} B_{ijk}(y) (C_{ijk} - f(y))(x_{ijk} - y) \tag{3.13}$$

这里 (3.12) 式要成立的条件为 $[\sum_{ijk} B_{ijk}(y)(x_{ijk} - y)(x_{ijk} - y)^T]$ 可逆, 我们接下来证明该矩阵可逆。

此处我们记 $A = \sum_{ijk} B_{ijk}(y)(x_{ijk} - y)(x_{ijk} - y)^T$ 。首先我们计算 A 的非对角项即 $A_{uv}, u \neq v$ 其中 $u, v \in \{1, 2, 3\}$, 这里再记 $w \in \{1, 2, 3\}$ 且 $w \notin \{u, v\}$ 。即

$$\begin{aligned}
 A_{uv} &= \sum_{i_1 i_2 i_3} B_{i_1 i_2 i_3}(y)(x_{i_1 i_2 i_3}^u - y^u)(x_{i_1 i_2 i_3}^v - y^v) \\
 &= \sum_{i_u i_v i_w} B_{i_u}(y^u) B_{i_v}(y^v) B_{i_w}(y^w)(x_{i_u i_v i_w}^u - y^u)(x_{i_u i_v i_w}^v - y^v) \\
 &= \sum_{i_w} B_{i_w}(y^w) \left(\sum_{i_u} B_{i_u}(y^u)(x_{i_u i_v i_w}^u - y^u) \right) \left(\sum_{i_v} B_{i_v}(y^v)(x_{i_u i_v i_w}^v - y^v) \right) \\
 &= \sum_{i_w} B_{i_w}(y^w) \left(\sum_{i_u} B_{i_u}(y^u) x_{i_u i_v i_w}^u - y^u \sum_{i_u} B_{i_u}(y^u) \right) \left(\sum_{i_v} B_{i_v}(y^v) x_{i_u i_v i_w}^v - y^v \sum_{i_v} B_{i_v}(y^v) \right)
 \end{aligned} \tag{3.14}$$

这里我们注意到 **B**-样条基函数的单位分解性 $\sum_i B_i(x) = 1$ 以及线性还原性 $\sum_i x_i B_i(x) = x$, 帶入到 (3.13) 式中我们有

$$\sum_{i_w} B_{i_w}(y^w) \left(\sum_{i_u} B_{i_u}(y^u) x_{i_u i_v i_w}^u - y^u \sum_{i_u} B_{i_u}(y^u) \right) \left(\sum_{i_v} B_{i_v}(y^v) x_{i_u i_v i_w}^v - y^v \sum_{i_v} B_{i_v}(y^v) \right) = 0$$

因此 $u \neq v$ 时 $A_{uv} = 0$, 即 A 为对角阵。

接下来考察 $u = v$ 时 A_{uv} 的值, 而

$$\begin{aligned}
 A_{uu} &= \sum_{i_1 i_2 i_3} B_{i_1 i_2 i_3}(y)(x_{i_1 i_2 i_3}^u - y^u)^2 \\
 &= \sum_{i_u i_v i_w} B_{i_u}(y^u) B_{i_v}(y^v) B_{i_w}(y^w)(x_{i_u i_v i_w}^u - y^u)^2 \\
 &= \sum_{i_u} B_{i_u}(y^u)(x_{i_u i_v i_w}^u - y^u)^2 \sum_{i_v} B_{i_v}(y^v) \sum_{i_w} B_{i_w}(y^w) \\
 &= \sum_{i_u} B_{i_u}(y^u)(x_{i_u i_v i_w}^u - y^u)^2
 \end{aligned} \tag{3.15}$$

我们将说明 $\sum_{i_u} B_{i_u}(y^u)(x_{i_u i_v i_w}^u - y^u)$ 恒为常数。这里我们注意到均匀 n 阶 **B**-样条导数公式为 $\frac{d}{dy} B_i^n(y) = B_i^{n-1}(y + \frac{1}{2}) - B_i^{n-1}(y - \frac{1}{2})$, 此处假定样条阶数为 n , 同时再记

$B_{i_u}(y^u)$ 为 $B_{i_u}^n(y^u)$, 现在考察 $\sum_{i_u} B_{i_u}(y^u)(x_{i_1 i_2 i_3}^u - y^u)$ 导数

$$\begin{aligned}
& \frac{d}{dy^u} \sum_{i_u} B_{i_u}^n(y^u)(x_{i_1 i_2 i_3}^u - y^u)^2 \\
&= \sum_{i_u} \frac{d}{dy^u} B_{i_u}^n(y^u)(x_{i_1 i_2 i_3}^u - y^u)^2 \\
&= \sum_{i_u} \left[\frac{d}{dy^u} B_{i_u}^n(y^u) \right] (x_{i_1 i_2 i_3}^u - y^u)^2 + B_{i_u}^n(y^u) \frac{d}{dy^u} [(x_{i_1 i_2 i_3}^u - y^u)^2] \\
&= \sum_{i_u} \left[\frac{d}{dy^u} B_{i_u}^n(y^u) \right] (x_{i_1 i_2 i_3}^u - y^u)^2 + 2B_{i_u}^n(y^u)(y^u - x_{i_1 i_2 i_3}^u) \\
&= \sum_{i_u} \left[\frac{d}{dy^u} B_{i_u}^n(y^u) \right] (x_{i_1 i_2 i_3}^u - y^u)^2 \\
&= \sum_{i_u} (B_{i_u}^{n-1}(y^u + \frac{h}{2}) - B_{i_u}^{n-1}(y^u - \frac{h}{2}))(x_{i_1 i_2 i_3}^u - y^u)^2 \\
&= \sum_{i_u} B_{i_u}^{n-1}(y^u + \frac{h}{2})(y^u - x_{i_1 i_2 i_3}^u)^2 - \sum_{i_u} B_{i_u}^{n-1}(y^u - \frac{h}{2})(y^u - x_{i_1 i_2 i_3}^u)^2 \\
&= \sum_{i_u} B_{i_u}^{n-1}(y^u + \frac{h}{2})(y^u + \frac{h}{2} - x_{i_1 i_2 i_3}^u - \frac{h}{2})^2 - \sum_{i_u} B_{i_u}^{n-1}(y^u - \frac{h}{2})(y^u - \frac{h}{2} - x_{i_1 i_2 i_3}^u + \frac{h}{2})^2 \\
&= \sum_{i_u} B_{i_u}^{n-1}(y^u + \frac{h}{2})[(y^u + \frac{h}{2} - x_{i_1 i_2 i_3}^u)^2 + \frac{h^2}{4} - h(y^u + \frac{h}{2} - x_{i_1 i_2 i_3}^u)] \\
&\quad - \sum_{i_u} B_{i_u}^{n-1}(y^u - \frac{h}{2})[(y^u - \frac{h}{2} - x_{i_1 i_2 i_3}^u)^2 + \frac{h^2}{4} + h(y^u - \frac{h}{2} - x_{i_1 i_2 i_3}^u)] \\
&= \{ [\sum_{i_u} B_{i_u}^{n-1}(y^u + \frac{h}{2})(y^u + \frac{h}{2} - x_{i_1 i_2 i_3}^u)^2] + \frac{h^2}{4} - h \sum_{i_u} B_{i_u}^{n-1}(y^u + \frac{h}{2})(y^u + \frac{h}{2} - x_{i_1 i_2 i_3}^u) \} \\
&\quad - \{ [\sum_{i_u} B_{i_u}^{n-1}(y^u - \frac{h}{2})(y^u - \frac{h}{2} - x_{i_1 i_2 i_3}^u)^2] + \frac{h^2}{4} - h \sum_{i_u} B_{i_u}^{n-1}(y^u - \frac{h}{2})(y^u - \frac{h}{2} - x_{i_1 i_2 i_3}^u) \} \\
&= \{ [\sum_{i_u} B_{i_u}^{n-1}(a)(a - x_{i_1 i_2 i_3}^u)^2] - h \sum_{i_u} B_{i_u}^{n-1}(a)(a - x_{i_1 i_2 i_3}^u) \} \\
&\quad - \{ [\sum_{i_u} B_{i_u}^{n-1}(a - h)(a - h - x_{i_1 i_2 i_3}^u)^2] - h \sum_{i_u} B_{i_u}^{n-1}(a - h)(a - h - x_{i_1 i_2 i_3}^u) \} \\
&= \sum_{i_u} B_{i_u}^{n-1}(a)(a - x_{i_1 i_2 i_3}^u)^2 - \sum_{i_u} B_{i_u}^{n-1}(a - h)(a - h - x_{i_1 i_2 i_3}^u)^2 \\
&= 0
\end{aligned} \tag{3.16}$$

从式 (3.15) 的推导中可以看出, 其导数恒为 0, 因此 $A_{uu} = \sum_{i_u} B_{i_u}^n(y^u)(x_{i_1 i_2 i_3}^u - y^u)^2$ 恒为常数。事实上, 在本文中, B 样条阶数为 2, 可以计算得到 $A_{uu} = \frac{h^2}{4}$, 因

此 $A = \frac{h^2}{4}I$, 代入到 (3.12) 式中我们有如下

$$c = \frac{4}{h^2} \sum_{ijk} B_{ijk}(y)(C_{ijk} - f(y))(x_{ijk} - y) \quad (3.17)$$

$$f_y(x; c) = f(y) + \frac{4}{h^2} \sum_{ijk} B_{ijk}(y)(C_{ijk} - f(y))(x_{ijk} - y)^T(x - y) \quad (3.18)$$

故近似法向选取为 $n = \frac{c}{\|c\|}$ 。可以发现, 在计算 c 时, 我们只要计算 $B_i(x^r), i \in \{0, 1, 2\}$

4 数值方法

4.1 离散控制方程

4.2 计算流水线

5 总结与展望

5.1 本文工作总结

5.2 未来工作展望

参考文献

- [1] Ernest P . The philosophy of mathematics education by Paul Ernest[J]. Social Epistemology.
- [2] Bishop A J. Mathematical enculturation: a cultural perspective on mathematics education[J]. Journal for Research in Mathematics Education, 1988, 20(4):195.

作者简历

张某某，男，19XX 年，汉族，浙江杭州人。20XX 年考入浙江大学数学科学学院（信息与计算科学专业），20XX 年本科毕业，获得理学学士学位。20XX 年进入浙江大学数学科学学院计算数学专业研究生学习至今。

1. 工作经历

- 20XX-20XX 年，在 XX 公司 XX 部门 XX 岗位
- 20XX-20XX 年，在 XX 公司 XX 部门 XX 岗位

2. 参与的项目

- 20XX-20XX 年，参与 XXXX 项目
- 20XX-20XX 年，负责 XXXX 项目

3. 攻读学位期间发表的论文

- 猪八戒, 猪悟能, 天蓬元帅, 等. 论流体食物的持久保存 [D]. 硕士学位论文. 北京: 广寒宫大学, 2005