在上一章中，我们看到了流体模拟的关键步骤是求解对流方程

数值形式为

给定速度场(在MAC网格上离散),时间步长和当前场量，得出在该持续时间内通过速度场对平流的结果的近似值.

这里需要重复：对流只能在无散度速度场内调用,即满足不可压缩性约束，同时也满足所需的边界条件.否则可能会导致特殊的artifact,例如流体及其动量的不守恒.

3.1 半拉格朗日对流

解决一个时间步长的明显方法是简单地写出PDE,例如在一维中:

然后用有限差分替换导数.例如,如果我们使用前向欧拉作为时间导数,而使用精确的中心差作为空间导数,则得到

重新排列各项,得到的直接公式

乍一看,这似乎还不错.但是这里潜伏着灾难性的问题!

首先,事实证明,对于空间导数的离散化而言,前向欧拉是无条件不稳定的:无论我们使多么小,它最终都会爆炸!(由中心差分产生的雅可比行列式的特征值是虚数,因此始终在稳定区域之外.不过不用担心:我们就会找到一种很快起作用的方法.)

即使我们用更稳定的时间积分技术代替前向欧拉,或者我们以某种方式确切地解决了PDE的时间部分,空间离散也会给我们带来很多麻烦.乍一看,原因尚不清楚:毕竟,这是对导数的相当准确的估计,并且一些花哨的分析可以表明,这种方案将完全保留问题的“能量”（2-范数）性质，就像确切的解决方案一样.但是，在一个简单的一维问题上进行尝试将立即显示出潜伏在这里的问题.还记得上一章关于标准中心差的零空间问题的讨论吗?好吧，它在这里也抬起了丑陋的头:解决方案的高频锯齿状分量,(在这里,频率是指空间中的频率,就好像您对函数执行了傅立叶变换一样,将其表示为不同空间频率的正弦或余弦波之和.高频分量对应于在短距离内变化的尖锐特征,而低频分量对应于平滑的大规模特征.)例如，错误地注册为具有零或接近零的空间导数,因此不会随时间向前发展-或至少移动的速度比它们应移动的速度慢得多.同时,低频分量得到精确处理,并以几乎正确的速度移动.因此,低频成分最终会与高频成分分离开来,您会出现各种奇怪的高频摆动和振荡,这种振荡不应该一直存在!

我们不会对简单的中心差分问题进行更严格的分析,但是请放心,这里有大量高性能的数值分析工具,不仅可以仔细地识别病症,还可以提供更复杂的有限差分公式来治愈空间导数.

相反，我们将首先采用一种称为半拉格朗日方法的差分,更简单且具有物理动机的方法. 拉格朗日一词应提醒您,对流方程在拉格朗日框架中是微不足道的,如果使用粒子系统方法,则当我们将粒子移动通过速度场时,它会自动求解.也就是说,要在空间某个点处获取的新值，理论上我们仅找到以结尾的粒子并查找其的值.

我们可以在网格上应用该推理,以得到由Stam [Sta99]引入图形的半拉格朗日方法. 我们想找出在给定网格点处的新值,并以拉格朗日方式进行计算,为了做到这点,我们需要找出以该网格点结束的粒子所拥有的的旧值.粒子在速度场中移动,我们知道它在哪里结束-因此要找到它在哪里开始，我们只需从网格点向后穿过速度场即可.我们可以从此起点获取旧值,它将是网格点上的的新值!但是,如果那个起点不在网格上怎么办?在这种情况下，我们只需从网格上的旧值内插的旧值,就可以了.

让我们通过公式慢慢地再次进行说明.我们正在查看的网格点在空间中的位置为.我们希望在这里找到的新值，我们将其称为.从对流的理解中我们知道，如果一个具有旧值的假设粒子以终止,当它在速度场中经过时间步长时,.所以问题是,我们如何找出?

第一步是找出这个虚构粒子的起点,我们将其称为.粒子根据简单的常微分方程运动

经过时间后在停止. 如果现在向后倒退时间，则可以从反向运行到粒子的起点-即，找到粒子从“开始”反向通过速度场抵达的地方.图(3.1)说明了该路径.估算最简单方法是在时间上向后使用一步“前向”欧拉:

在这里，我们使用在网格点处估算的速度通过流场后退一步.事实证明,欧拉有时是足够的,但是使用稍微更复杂的技术(例如更高阶的Runge-Kutta方法)可以获得明显更好的结果.请参阅附录A以查看时间积分方法.特别是,至少建议使用二阶Runge-Kutta方法作为最低要求,例如

在这里,采取了半步法,以获得一个中间位置,该位置近似于粒子沿着轨迹的一半位置. 在此中间位置从网格内插速度场,速度值最终用于获得.使用三阶方法可以获得更好的结果,尤其是在涡旋和其他旋转流动要素周围.附录中给出的RK3方案是最佳默认方案.取决于的大小（请参阅本章后面的内容）,将轨迹跟踪分成较小的子步以提高精度甚至是明智的.

现在我们知道了虚拟粒子的起始位置.接下来,我们必须找出旧值.很可能不在网格上，因此我们没有确切的值，但是通过在附近的网格点处对进行插值可以得到一个很好的近似值.通常使用三线性（二维双线性）插值,尽管这会带来严重的精度损失，我们将在本章结尾处进行修正.

将其放到公式中，我们的基本半拉格朗日公式是假设粒子跟踪算法已追溯到位置（通常使用上述RK2），

请注意，我描述的粒子纯粹是假设的。 在计算机中实际上没有创建任何粒子：我们仅使用拉格朗日粒子从概念上计算出欧拉对流步骤的更新公式。 由于我们几乎使用拉格朗日方法进行欧拉计算，因此称为半拉格朗日方法.

为了完整起见,在一维情况下让我们再次使用线性插值法对半拉格朗日运算进行说明. 对于网格点,粒子可追溯到.假设它位于区间中,令是该点在此区间的比例,则线性插值为.所以我们的更新是

在实践中，我们将需要平流速度场,还可能需要平流其他变量,例如烟雾密度或温度.通常,附加变量存储在网格单元中心,但是速度分量存储在上一章中讨论的交错网格位置.在这些情况下,我们将需要使用上一章结尾给出的适当平均速度来估计粒子轨迹.

3.2 边界条件

如果虚拟粒子的起点在流体内部,则进行插值是没有问题的.但是,如果估计的起点恰好在流体边界之外会发生什么,该怎么办?这可能是因为流体从域的外部流入(粒子是“新”流体),也可能是由于数值误差(粒子的真实轨迹实际上停留在流体内部，但是我们的前向欧拉或Runge-Kutta步骤引入了误差将我们带到了外面).

这实际上是边界条件的问题.在第一种情况下,当我们有流体从外部流入时,我们应该知道流入的流体量:这是正确说明问题的一部分.例如,如果我们说流体以特定的速度和温度流过畴的一侧的光栅,则其起始点结束于畴的那一侧的任何粒子都应具有速度和温度.

在第二种情况下,由于数值误差,我们只是有一个在流体边界外偏离的粒子轨迹,合适的策略是从边界上最近的点外推量-这是我们最好的选择,真实的轨迹(应该留在流体内部)会上升.有时外推很容易:如果我们最接近的边界具有指定的流体速度,则只需使用该速度即可.例如,为了模拟露天烟雾,我们可以在模拟域之外假设风速恒定(也许为零).

比较棘手的情况是,先验量未知,但必须从已知流体区域进行数值推断.我们很快将在第4章中对此推断进行更详细的说明.现在,让我们继续寻找流体区域边界上的最近点,并从存储在该区域附近的网格中的流体值中进行插值.特别是,这是我们需要做的事情:当我们的起点最终位于一个固体物体内部时,需要找到速度值;如果我们最终在自由空间中,则需要进行自由表面流动（水）.

通常,在固体边界处获取的流体速度与固体速度不同.正如我们前面所讨论的,流体速度的法向分量最好等于固体速度的法向分量,但是除了粘性流之外,切向分量可以完全不同.因此,我们通常在边界处插值流体速度,而不仅仅是获取固体速度.但是,对于特定的粘性流(或者至少是我们想要表现为粘性和粘性的流固耦合),我们确实可以采用仅使用固体速度的捷径.

3.3 时间步长

任何数值方法的主要问题是它是否稳定:它(或我们造成的任何数值误差)会爆炸吗?幸运的是,上述的半拉格朗日方法是无条件稳定的:无论有多大,我们都不会爆炸.很容易理解为什么:无论粒子起点到哪里,我们都会从旧的值进行插值以获得新的值.线性/双线性/三线性插值始终会产生介于我们要插值的值之间的值:我们无法创建比上一个时间步长已经存在的更大或更小的值.因此,仍然是有界的.这确实非常吸引人:我们可以完全根据精度与速度的权衡曲线选择时间步长.如果不管仿真的准确性如何都希望以实时速率运行,则可以选择等于帧持续时间.

在实践中,如果我们对时间步长太过激进,该方法可能会产生一些奇怪的结果.Foster和Fekiw[FF01]的一个很好的经验法则是限制,以使追踪到的轨迹最远为一定数量的网格单元宽度,例如五个:

其中是对流体中最大速度的估计.这可以与当前存储在网格上的最大速度一样简单. 更为可靠的估算考虑了在一段时间内重力(或其他诸如浮力等物体力)加速度g可能引起的速度.在这种情况下,

不幸的是,这个估计值取决于(我们试图找到),但是如果我们用不等式(3.2)的上限代替,我们得到

对求解并简单的取上限值,得到

即使初始速度为零,这也具有始终为正的优势,因此我们避免了不等式(3.2)除以零.

在某些情况下,这种时间的步长仍然会存在伪影:避免在一个较小的时间步长上运行整个模拟的费用的一种可能的补救方法是仅通过几个小子步骤跟踪半拉格朗日平流中使用的轨迹.如果将每个子步长限制为,即每个子步骤仅大致遍历一个网格,几乎没有机会出现问题.请注意，该子步骤限制可以局部采用:在流体的快速移动区域中,与在慢速移动区域中相比,可以使用更多的子步骤.

3.3.1 CFL条件(本节是可选内容，时间有限，因此跳过)

3.4 扩散

请注意,在半拉格朗日对流的插值步骤中,我们采用前一时间步长的值的加权平均值.也就是说,对于每个平流步骤,我们都在进行平均运算.平均趋于使尖锐特征平滑或模糊,从而使它们**扩散[diffusing]**或**消散[dissipating]**.在信号处理术语中,我们有一个低通滤波器.单个模糊步骤几乎是无害的,但是如果我们每个步骤都重复模糊,您可以想象会出现问题.

让我们尝试从物理上了解这种平滑行为.我们将使用一种称为修改后的PDE的技术.解决方程式数值误差的常见问题是,我们的解决方案会受到真实解的干扰——我们只是近似地解决问题.我们现在使用的方法（有时也称为向后错误分析）取而代之的是，我们认为自己正在解决问题，只是解决的问题与我们刚开始解决的问题并不完全相同，即,这个问题已经以某种方式被干扰了.通常以这种方式解释错误并理解对所解决问题的干扰非常有用.

为了使我们的分析尽可能简单,我们将以恒定速度解决一维对流问题:

我们将假设,即粒子轨迹的跨度小于网格单元的大小——该分析也很容易扩展到较大的时间步长.在这种情况下,轨迹的起点最终落到区间为的网格点上.在点上对和作线性插值得到

重新整理得到

实际上,这恰恰是时间上前向欧拉方案和空间的单侧有限差.在回想一下的泰勒级数:

将其代入公式（3.5）并进行抵消，得到

直到出现二阶截断错误，我们可以看到这是前向欧拉在时间上应用于修改后的PDE:

这是对流方程,带有一个额外的类似粘性项,系数为!(回想一下Navier Stokes的动量方程,粘度表现为速度的拉普拉斯算子,在一个维度上只是二阶导数.)也就是说,当我们使用简单的半拉格朗日方法尝试求解不具有粘性的对流方程时,我们的结果看起来像我们正在模拟具有粘度的流体.这就是**数值扩散**(或数值黏度或数值耗散,在此情况下它们都表示相同的意思).

幸运的是,当时,数值耗散系数变为零,因此我们在极限中得到了正确的答案. 但是,在计算机图形学中，我们没有足够的耐心或资源来使很小:我们希望看到尽可能大的好看的结果!

那有多糟？ 这取决于我们要模拟的内容。 如果我们要模拟已经具有足够自然耗散的粘性流体，那么几乎不会注意到额外的数值耗散-更重要的是，看起来像真实耗散。 但是，大多数情况下，我们试图模拟几乎不粘稠的流体，这是一个严重的烦恼，它使我们的流动中有趣的特征（如小涡旋）保持平滑。 尽管这对速度不利，但在第8章中，我们将看到对于其他流体变量可能更糟。

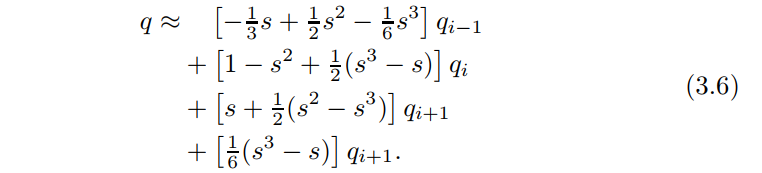
3.5 减少数值扩散

有许多方法可以解决数值扩散问题.我们将介绍一种解决目前提出的半拉格朗日方法的特别简单且有效的策略.正如我们在上一节中所看到的那样,问题主要在于线性插值（被平流的量;线性插值所跟踪的速度场不是主要原因,而是可以按原样使用）引起的过度平均.因此,自然而然的下一步是使用更尖锐的插值.例如,Fedkiw等人[FSJ01]建议使用特殊限制的Catmull-Rom插值形式;我们将使用更准确,扩散更少的插值技术以进一步发展.

追溯速度场是半拉格朗日平流的昂贵部分，尤其是将浮点计算与整数算术和相关的内存查找（查找网格点）以及不规则的内存读取（实际上是查找速度和 要插值的字段）。 一旦完成所有这些操作，我们还可以使用额外的值层（可能也已在高速缓存中获取）进行更多的计算，以获得更好的结果。

在一维度，我们使用三次插值进行此操作.如果我们要估算网格点和1之间处的值,则线性插值为

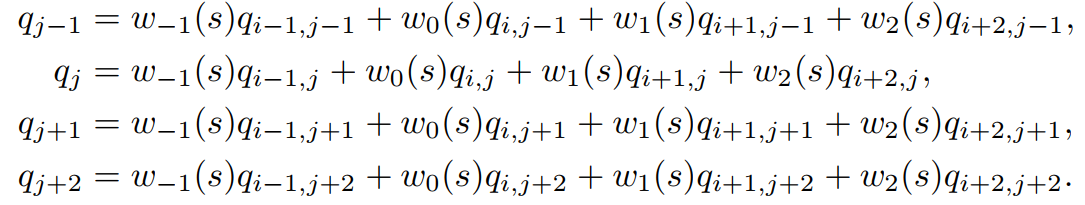
这是通过和的线性多项式的值.显然,插值对线性多项式是精确的.它也与泰勒级数的第一项的平滑函数匹配,但是留下了二次余项.相反,我们可以使用通过的三次多项式，包括位于任一侧的额外数据点,使用以下公式:



你可以再次检查是否是三次多项式;它还与泰勒级数的第三项平滑匹配,留下了更加精细的死结余项.这比线性差值要精确两个数量级.

图（3.2）显示了三次插值可以产生的差异。 这是一个具有恒定速度的纯对流示例，因此，理想情况下，函数的原始轮廓应保持不变。 但是，在左侧，线性插值迅速将初始的尖锐三角形脉冲扩散到平滑的驼峰； 右侧的三次插值也会逐渐使形状变平滑，但会使其变得更加锐利和更长。

在二维或三维中,我们可以将三次插值扩展为双三次或三次三次,就像线性插值一样,逐维度进行.例如,在二维中,我们可以首先沿x轴插值数据（使用，,...来表示上述公式（3.6）中的加权系数）:



然后,我们可以沿y轴在这些结果之间进行插值:

可以很容易地得出,先沿y轴然后沿x轴进行插值可以得到相同的答案.

三次插值的一个奇怪之处是它可以“下冲”或“上冲”数据.加权系数和的总和为1,但也不都是非负的,因此内插值不仅仅是数据点的加权平均值:它可以小于或大于数据.在图（3.2）中,您应该能够看到它略微低于零,尽管初始数据都是非负的.从理论上讲,对于某些非线性方程（除了对流以外的其它项），这会增加不稳定的风险，但在实践中，对于本书所讨论的流体求解器，这似乎不是问题。要意识到的最大实际问题是，您认为应该始终为非负数，例如烟雾模拟中的烟尘浓度，在平流步骤之后可能最终变为负数：如果这可能引起问题， 只需将任何负值钳制为零即可。