arXiv:2301.01666v1 [physics.flu-dyn] 4 Jan 2023

斯托克斯流中避免颗粒接触的屏障方法

Anna Broms[1*] 和 Anna-Karin Tornberg[1]

[1] 数学系 瑞典皇家理工学院 Lindstedtsv¨
agen 25，11428 斯德哥尔摩，瑞典

*电子邮箱：annabrom@kth.se，https://www.kth.se/profile/annabrom

2023年1月5日

关键词： 斯托克斯流、接触问题、刚性粒子、屏障方法

摘要

刚性粒子在斯托克斯流体中在物理上无法发生重叠，因为一层薄薄的流体始终将粒子对隔开；随着分离距离减小，这层流体会对粒子施加越来越强的排斥力。在数值计算中，即使对于中等规模的系统，解析这些润滑力的成本也高得难以承受。因此，在动态模拟中通常无法保证不会发生粒子碰撞和重叠，而这与求解斯托克斯方程所采用的方法无关。在本研究中，我们通过障碍能量来表示非重叠约束，该能量以粒子边界点之间的欧几里得距离为依据。给定前一时刻的无接触构型，我们通过在下一时间层强制障碍能量为零，求出任意接触粒子对之间排斥接触力的最小幅值，从而消除重叠。我们采用多斑块方法求解斯托克斯流中的迁移率问题，并将该方法应用于球体、杆和回旋镖形颗粒的悬浮体系，以此进行测试。在所有时刻均获得了无碰撞构型。我们还展示了接触力对背景流中一组杆的集体有序性的影响；这种背景流会自然地促进粒子相互作用。

亮点

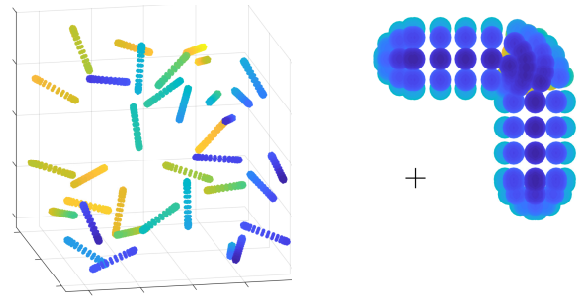
- 提出了一种策略，用于避免斯托克斯流中数值计算引入的粒子接触。
- 通过在每个时间步强制障碍能量为零，确保物体不会发生碰撞。
- 将接触力大小降至最低，以减小其对系统物理特性的影响。
- 接触力与接触距离满足离散互补性。
- 能够稳健地处理凸和非凸刚性粒子。

1 引言

我们提出了一种用于计算三维无界黏性流体中刚性粒子之间接触力的算法，仅在需要避免非物理粒子碰撞和重叠时才引入这些接触力。这类碰撞由难以避免的数值伪影引起；在考虑流体热涨落的随机环境中，布朗增量也可能导致碰撞。在这项工作中，我们考虑了完整的流体动力学相互作用，即系统中的所有粒子之间存在全局耦合。

我们采用一种经济且快速的技术来计算这些流体动力学相互作用：即所谓的刚性多斑块方法，[1, 2]对此有详细描述。需要注意的是，这只是众多斯托克斯流数值方法中的一种，而我们所开发的接触避免策略也可以与其他技术结合使用。多斑块方法的基本思想是用一组球体或“斑块”对刚体进行建模；这一方法已在大量研究中得到应用，参见例如 [3, 4, 5, 6, 7] 及其中的参考文献。每个斑块以成对方式与系统中的所有其他斑块发生流体动力学相互作用，而属于同一

粒子的斑块则通过施加在每个斑块中心的力，被约束为刚体运动，使得斑块所受的力之和等于作用在粒子上的合力和力矩。从数学角度看，这可以视为一种正则化单层边界积分公式，其中斑块半径为正则化参数。图1展示了多斑块几何构型的示例。对于每个时刻，我们求解斯托克斯迁移率问题，即给定施加在粒子上的外力和力矩（例如重力或某种静电力），计算由此产生的粒子平移和转动速度。在斯托克斯流态下，粒子的惯性通常可以忽略，因此可以利用计算得到的刚体速度更新粒子位置，并采用适当的时间推进格式；通过这种方式，可以动态研究粒子的构型。对于每种（轴对称）粒子类型，将正则化参数以及斑块相对于粒子真实表面的布置位置，作为一个小型离线优化问题的解来确定，即使粒子表面采用粗网格，对于彼此保持适度间距的粒子，也能获得较高精度的粒子速度 [2]。



（a）细长杆的悬浮液。

（b）多斑块回旋镖其质心用叉号标出。

图1：斯托克斯流体中的多斑点粒子。图中颜色表示深度。

然而，粒子彼此越接近，其相互作用就越难以准确解析。在多斑块框架中，对于接近接触的粒子，精度会下降；无论选择哪种斯托克斯求解器，这都是一个挑战。对近距离相互作用处理不足，可能是由于粒子网格空间分辨率不足导致的数值误差，也可能是移动粒子的时间推进格式产生的累积误差；在最坏情况下，这会导致非物理的粒子重叠。即使解析了近距离相互作用并采用自适应时间步进方案，仍可能出现另一种不理想的情况：随着时间步不断调整以适应近距离粒子所形成的刚性问题，以及随之增强的排斥力，自适应时间步长会变得越来越小，最终导致计算停滞。粒子之间的润滑力在物理上保证了不会发生碰撞，但只有采用对粒子表面进行高精度空间离散的高保真方法，才能解析这些力 [8]。因此，高精度的时间和空间离散都会带来巨大的计算成本，在浓悬浮液中尤其如此。若保持适中的表面网格分辨率，模拟成本会降低，但精度也会变差，因此亟需一种接触避免策略。

引入排斥接触力时，应确保系统的物理性质得以保留。接触力是系统中人为引入的，仅用于减轻数值误差带来的影响；对于彼此接近的粒子而言，这类数值误差同样是人为因素，且难以避免。因此，我们希望找到能使粒子保持分离的尽可能小的接触力。同时，我们也希望避免给系统引入刚性，并消除必须采用极小时间步长的风险。为了避免粒子重叠而施加强排斥势，往往会导致这种刚性；这种做法是接触求解算法的一种替代方案。此类势包括 Lennard-Jones势，或例如基于硬高斯重叠（HGO）的势；后者专为椭球体设计 [9] ，并在文献 [10][1]中针对杆进行了讨论。由于刚性问题，采用基于势函数的方法难以保证粒子不重叠，

[1]对于几何形状更一般的多斑点粒子，可以通过在构成该粒子的每个斑点上分别设置一个 HGO 势来构造势函数。

而且粒子还有可能变得“柔软” [11]。

粒子未浸没在流体中的接触问题已有更丰富的研究文献 [12, 13, 14, 15, 16] ，也有更多可用的基准测试。 [17]对接触动力学问题的技术进行了综述。计算机图形学领域也有大量相关研究 [18, 19], ；与本文最相关的是近期提出的增量势接触（IPC）方法。这是一种罚函数法，通过障碍能量 [20, 21, 22]对发生碰撞和重叠的构型施加惩罚。

为更好地处理斯托克斯流中的粒子碰撞，人们提出了不同的接触处理技术，例如 [23, 24, 25, 26, 27], 中的研究在接触点施加无滑移边界条件，约束发生碰撞的粒子在碰撞点以相同速度运动。
[28, 29, 30, 31, 32, 33], 倾向于采用互补性公式，其思路是针对接触力大小和某种分离度定义，求解一个非线性互补问题。随后，将这个难以求解的非线性问题近似为一个或一系列线性互补问题（线性互补问题），以便更轻松地求解。Yan 等人在其研究中提出了这一类方法中的一种 [29, 30, 32], ，其优点是易于应用于任何流体动力学求解器，并且基于满足牛顿第三定律的几何公式（每对粒子所受的力相互平衡）。不过，这种方法的一个缺点是无法保证每个时间步结束时的构型不重叠，因为求解单个线性互补问题并不意味着原始非线性问题也得到了解决。另一个缺点是无法处理非凸粒子。Lu 等人 [28, 34] 和 Bystricky 等人 [31]提出了另一种风格相近、用于斯托克斯流体的方法，其基础是所谓的时空干涉体积（STIV）。STIV 技术的灵感来自 Harmon 等人 [19] 在计算机图形学领域的研究。其总体思路是考虑斯托克斯方程的变分形式，并在得到一个候选时间步之后，计算接触粒子轨迹在时空中扫过的体积。如果体积为负，则粒子发生重叠。通过确定适当的排斥力，强制该体积为零，就会得到一个互补问题。采用 STIV 方法时，即使时间步长较大，也可通过求解一系列线性互补问题来避免碰撞；此外，还能检测到粒子在一个时间步内彼此穿过的情况，并据此修正相应的时间步。不过，每种 STIV 公式都与特定的斯托克斯求解器紧密关联，该方法不易应用于一般几何形状；而在三维情况下，必须高效地计算四维中的 STIV 体积 [34, 28]。另一个难点是，使用 STIV 时，接触力不会自动平衡，而且难以获得平衡力（不满足牛顿第三定律）。 [35]

我们选择通过对彼此距离过近的粒子施加排斥接触力来处理接触问题。该方法的主要特点是，所有接触力均依据牛顿第三定律保持平衡，并且可保证一系列时间步中的下一时间步不存在接触（事实上，通过构造可保证粒子之间具有最小分离距离）。本方法深受 Yan 等人工作的启发，体现在接触力的几何动机上；同时也受到 Zorin 及其合作者关于 IPC 的工作的启发，体现在不重叠约束的设置方式上。不过，我们并非像 IPC 中那样通过障碍能量对接触进行惩罚，而是用障碍能量表示大量不重叠约束及其关联接触力所满足的互补条件。在 IPC 的相关工作中，每个粒子的表面均采用四面体网格或三角形网格，并在所有边对以及点与三角形之间稳健地计算距离。在我们的工作中，粒子是刚性且光滑的，因此可以利用粒子表面的已知参数化来稳健地计算距离；对于定义粒子表面网格的一组点，我们不对每个表面网格节点与另一粒子之间距离低于某个阈值的情况进行处理，而是将相邻粒子上距离最近的接触点标记为参与碰撞处理。之所以可行，是因为在我们的公式中求解优化问题时，无需依赖距离的二阶导数，这与 IPC 不同；只需计算距离相对于粒子坐标的梯度即可。几何形状与约束的处理方式也不同于 Yan 等人的几何方法：后者只需确定一个接触点，或“重叠最严重的点”；而我们的做法更接近 STIV 技术，后者可以针对同一粒子接触对标记边界上的多个线段。这一特性尤其有利于处理非凸粒子几何形状，或表面近乎平行的情况；否则，计算出的接触力矩会对接触点的选择非常敏感。详情见第 2.1 节。与 IPC 相比，我们工作的另一处不同在于，粒子浸没在斯托克斯流体中，惯性可以忽略；在隐式时间步中，我们求解的是力的大小，而不是像 IPC 处理刚体时那样求解粒子坐标。因此，所得优化问题中的优化变量维数

会更小。保持粒子的刚性并非难题（无需施加额外约束，如文献所述）。我们利用斯托克斯方程的线性性质，为每个发生接触的时间步构造一个关于接触力大小的最小化问题并求解。请注意，我们并不像 IPC 那样最小化一个组合的加权能量形式。因此，在我们的公式中，无需调整任何参数来控制碰撞约束相对于系统总能量中其他部分最小化的重要性。

STIV 和 Yan 等人提出的几何方法所采用的时间推进格式都是显式的（以避免每个时间步都产生高昂的计算成本），且阶数较低 [36, 29, 30, 32]。假设排斥力在一个时间步内保持恒定；两类接触算法的基础版本都采用显式欧拉法。本研究的演示也将使用这一时间推进方法。选择这种方法的另一个动机是，在接触求解算法与布朗运动耦合的情形下，布朗运动由随机微分方程建模，此时很难获得时间精度高于一阶的方法。不过请注意，在确定性情形下应用接触规避时，并没有什么因素会妨碍采用更高阶的时间推进格式。最直接的思路是，对未参与任何接触的粒子采用更高阶的时间推进方法。对于在某个时间步中受到排斥力作用的粒子，采用高阶方法预计不会带来任何收益。

1.1 斯托克斯迁移率问题

在介绍优化问题之前，我们先说明一些预备知识。流体悬浮液中的每个三维粒子都可以用其中心坐标 $\boldsymbol{x}_i$ 和旋转四元数 $\boldsymbol{q}_i$来描述。我们将系统中所有 N 粒子的这些广义坐标收集到向量 $\boldsymbol{\mathcal{Q}}$ 中，使得

$$\boldsymbol{\mathcal{Q}} = \left[\boldsymbol{x}_1^T, \boldsymbol{q}_1^T, \boldsymbol{x}_2^T, \boldsymbol{q}_2^T, \ldots, \boldsymbol{x}_N^T, \boldsymbol{q}_N^T\right]^T. \tag{1}$$

令 $\boldsymbol{\mathcal{U}}$ 为系统中所有粒子的刚体速度组成的向量，其中 $\boldsymbol{u}_i \in \mathbb{R}^3$ 是粒子 i的平移速度， $\boldsymbol{\omega}_i \in \mathbb{R}^3$ 是其转动速度。类似地，令 $\boldsymbol{\mathcal{F}}_{\text{ext}}$ 为系统中所有粒子所受外加力 $\boldsymbol{f}_i \in \mathbb{R}^3$ 和力矩 $\boldsymbol{t}_i \in \mathbb{R}^3$ 组成的向量：

$$\boldsymbol{\mathcal{U}} = \begin{bmatrix}\boldsymbol{u}_1^T & \boldsymbol{\omega}_1^T & \boldsymbol{u}_2^T & \boldsymbol{\omega}_2^T & \ldots & \boldsymbol{u}_N^T & \boldsymbol{\omega}_N^T\end{bmatrix}^T, \quad \boldsymbol{\mathcal{F}}_{\text{ext}} = \begin{bmatrix}\boldsymbol{f}_1^T & \boldsymbol{t}_1^T & \boldsymbol{f}_2^T & \boldsymbol{t}_2^T & \ldots & \boldsymbol{f}_N^T & \boldsymbol{t}_N^T\end{bmatrix}^T. \tag{2}$$

现在，斯托克斯迁移率问题可以表述为

$$\boldsymbol{\mathcal{U}} = \boldsymbol{\mathcal{U}}_{\text{bg}} + \boldsymbol{\mathcal{U}}_{\text{Brownian}} + \boldsymbol{\mathcal{M}}\boldsymbol{\mathcal{F}}_{\text{ext}}, \tag{3}$$

其中 $\boldsymbol{\mathcal{M}}$ 是大小为 $6N \times 6N$的迁移率矩阵，每个 6×6 块对应一对特定粒子之间的相互作用。向量$\boldsymbol{\mathcal{U}}_{\text{bg}}$ 表示背景流对粒子速度的贡献；若考虑热涨落，则还会加入随机速度向量$\boldsymbol{\mathcal{U}}_{\text{Brownian}}$。请注意，在实现中，$\boldsymbol{\mathcal{M}}$ 仅作符号表示；$\boldsymbol{\mathcal{M}}\boldsymbol{\mathcal{F}}_{\text{ext}}$则表示：给定所有粒子的力和力矩并将其排列成 $\boldsymbol{\mathcal{F}}_{\text{ext}}$后，采用 [2], 中所述的多斑块方法求解带有无滑移边界条件的斯托克斯方程。

在不存在接触力时，$\boldsymbol{\mathcal{Q}}$ 与$\boldsymbol{\mathcal{U}}$ 中的速度之间的关系为

$$\dot{\boldsymbol{\mathcal{Q}}} = \boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{\mathcal{U}}, \tag{4}$$

其中， $\boldsymbol{\Psi}$ 为将速度与粒子位置和四元数相关联的几何相关矩阵。

当粒子发生接触时，通过接触力向量$\boldsymbol{\mathcal{F}}_c$的作用对速度进行修正，使得

$$\dot{\boldsymbol{\mathcal{Q}}} = \boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{\mathcal{U}} + \boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{\mathcal{M}}\boldsymbol{\mathcal{F}}_c, \tag{5}$$

with

$$\boldsymbol{\mathcal{F}}_c = \boldsymbol{\mathcal{D}}\boldsymbol{\lambda}. \tag{6}$$

矩阵 $\boldsymbol{\mathcal{D}} \in \mathbb{R}^{6N} \times \mathbb{R}^{N_c}$ 决定接触力和力矩的方向，并取决于粒子构型和几何形状；向量 $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^{N_c}$ 决定接触力大小，其中N_c 为处于接触状态的粒子对数量。理想情况下，我们希望确定接触力，使得如果

在时间步内粒子需要接触力才能保持分离，则该力应处于激活状态，且相应的力大小应为正。另一方面，如果粒子无需接触力即可保持分离，则接触力大小应为零，且接触力应处于非激活状态。因此，接触问题本质上是一个互补问题。同时，它也是一个非线性问题，因为下一时刻的距离会随着接触力的变化而非线性变化。

2 接触粒子的屏障方法

在实践中，不建议让粒子彼此靠得太近，以至于最终发生接触。这是因为所有用于斯托克斯流中粒子的数值求解器都存在局限性：如果粒子的分辨率不够高，几乎接触的粒子的计算精度就会受到影响。因此，我们将接触定义为：当近距离粒子表面两点之间的距离 d 小于设定的缓冲距离 $\hat{d}$时，即发生接触。参数 $\hat{d}$ 通常设置为确保多斑块方法[2]达到预先规定的可接受精度。我们希望找到接触力大小 $\boldsymbol{\lambda}$，使得在下一个时间步能够保证这一分离距离，即

$$d_i\left(\boldsymbol{\mathcal{Q}}_{t+\Delta t}(\boldsymbol{\lambda})\right) > \hat{d}, \quad \text{for all } i \text{ pairs of points on distinct particles,} \tag{7}$$

其中 d_i 非线性地依赖于$\boldsymbol{\mathcal{Q}}_{t+\Delta t}$，即下一时间步的粒子构型；每个接触对对应的相关 d_i 集合则在第 2.1 节中作了恰当定义。粒子间距与接触力大小的互补条件形式如下：

$$\lambda_k \max\left(0, \min_i\left\{d_i(\boldsymbol{\mathcal{Q}}_{t+\Delta t}) - \hat{d}\right\}\right) = 0, \quad i \text{ associated with particle contact pair } k \text{ and } \lambda_k \geq 0. \tag{8}$$

我们不会直接求解这个（经过修改的）非线性互补问题，而是建立一个接触优化问题，以满足式 (7) 中的所有约束，同时近似求解式 (8)。请注意，系统中粒子的数量和密集程度以及其几何形状，可能使式 (7) 中的约束数量非常庞大。本节将说明如何构建此类最小化问题，并讨论目标函数、约束以及接触力几何形状的建模选择。式 (7) 中的约束可以通过对示性函数 [37]求和并将其最小化来表示：

$$\min_{\boldsymbol{\lambda}\geq\mathbf{0}} \quad \sum_i I(d_i\left(\boldsymbol{\mathcal{Q}}_{t+\Delta t}(\boldsymbol{\lambda})\right) - \hat{d}), \quad \text{with } I(s) = \begin{cases} 0, & s \geq 0, \\ \infty, & s < 0. \end{cases} \tag{9}$$

然而，这种表示方式难以使用，因此我们用一个更平滑的形式替代 (9)。引入所谓的障碍函数 b：当距离 d 足够大时，其值为零；当距离小于设定阈值 d 时，其值则逐渐增大：

$$b(d, \hat{d}) = \begin{cases} -(d-\hat{d})^2 \ln\left(d/\hat{d}\right), & 0 < d < \hat{d}, \\ 0, & d \geq \hat{d}. \end{cases} \tag{10}$$

我们可以将 (7) 中所有的不重叠约束汇总为我们定义的障碍能量，其形式类似于 (9) 中指示函数的求和。无重叠构型是指这样一种构型：对 $t \in [t, t+\Delta t]$ 施加非负的接触力大小 $\boldsymbol{\lambda}$，使障碍能量最小

$$\min_{\boldsymbol{\lambda}\geq\mathbf{0}} \quad \sum_i b\left(d_i(\boldsymbol{\mathcal{Q}}_{t+\Delta t}), \hat{d}\right), \tag{11}$$

求和范围为所有处于接触状态的几何形状（对应于 (7) 中的所有约束）。在斯托克斯流体中，粒子坐标随时间按照以下规律演化

$$\dot{\boldsymbol{\mathcal{Q}}} = \boldsymbol{\Psi}\left(\boldsymbol{\mathcal{U}} + \boldsymbol{\mathcal{M}}\boldsymbol{\mathcal{D}}\boldsymbol{\lambda}\right). \tag{12}$$

[2]也可以考虑将 $\hat{d}$ 与我们用刚性粒子建模的物理粒子表面上的任意不均匀性联系起来。

如果对该方程进行时间离散化，就可以用先前已知的坐标向量表示$\boldsymbol{\mathcal{Q}}_{t+\Delta t}$。采用前向欧拉方法后，最小化问题变为

$$\begin{aligned} \min_{\boldsymbol{\lambda}\geq\mathbf{0}} \quad & \sum_i b\left(d_i(\boldsymbol{\mathcal{Q}}_{t+\Delta t}), \hat{d}\right), \\ \text{s.t.} \quad & \boldsymbol{\mathcal{Q}}_{t+\Delta t} = \boldsymbol{\mathcal{Q}}_t + \Delta t \boldsymbol{\Psi}\left(\boldsymbol{\mathcal{U}} + \boldsymbol{\mathcal{M}}\boldsymbol{\mathcal{D}}\boldsymbol{\lambda}\right). \end{aligned} \tag{13}$$

这是一个用于求解 $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^{N_c}$ 的约束最小化问题，即每对相接触的粒子对应一个标量接触力大小。不过需要注意，对于某些粒子构型，任意一个大小足够大的向量 $\boldsymbol{\lambda}$ 都能满足式 (13)。因此，我们需要通过惩罚较大的 $\boldsymbol{\lambda}$ 来约束解，一个自然的选择是

$$\min_{\boldsymbol{\lambda}\geq\mathbf{0}} \quad \|\boldsymbol{\lambda}\| + \alpha \sum_i b\left(d_i\left(\boldsymbol{\mathcal{Q}}_t + \Delta t \boldsymbol{\Psi}\left(\boldsymbol{\mathcal{U}} + \boldsymbol{\mathcal{M}}\boldsymbol{\mathcal{D}}\boldsymbol{\lambda}\right)\right), \hat{d}\right), \tag{14}$$

其中，α 是一个参数，我们需要对其进行设定，以平衡下一时间步障碍能量的最小化与接触力的最小化。参数 α 还用于对式 (8) 中接触力与接触距离（相对于缓冲区域）施加互补条件。换句话说，我们希望选取足够小的 λ_k，从而实现不重叠；但在力起作用的位置，施加接触力后，最小接触距离不应大于 d。

对于式 (14) 中范数的选择，我们有两种方案：对接触力大小采用 1-范数惩罚，$\sum_i \lambda_i$，会同等程度地惩罚所有接触处的力，而不只惩罚力的大小较大的情况。也可以选择范数 $\left(\boldsymbol{\lambda}^T\boldsymbol{\mathcal{D}}^T\boldsymbol{\mathcal{M}}\boldsymbol{\mathcal{D}}\boldsymbol{\lambda}\right)^{1/2}$，或其平方；它对应于接触力所导致的耗散能。我们的主要目标之一是尽量减小人工排斥力对系统的影响，因此，由引入的接触力产生的耗散能可以作为一个合理的目标函数。对于我们的斯托克斯求解器——刚性多斑块方法而言，已知当粒子彼此靠近并相互作用时，$\boldsymbol{\mathcal{M}}$ 的精度会大幅下降 [2]。因此，$\boldsymbol{\lambda}\boldsymbol{\mathcal{D}}^T\boldsymbol{\mathcal{M}}\boldsymbol{\mathcal{D}}\boldsymbol{\lambda}$ 是对真实耗散能的粗略近似，而且这一量存在较大误差。因此，我们将采用 $\sum_i \lambda_i$ 作为所选目标函数。关于这两种选择的数值比较，见第3.1.2节。

需要注意的是，对于一般应用而言，为式 (14) 中的 α 选择最佳取值并非易事，因为 $\boldsymbol{\lambda}$ 的大小和障碍能量都取决于接触粒子对的数量，以及未经修正的时间步会造成多大程度的重叠。合适的 α 水平也取决于求解问题 (14) 时选作停止准则的容差。这与 IPC 相关工作中最小化能量形式时遇到的问题类似：必须以自适应方式选择一个惩罚项，才能赋予障碍能量恰当的权重，参见 [20] 中的补充材料。在这里，我们希望避免此类超参数调优。然而，已知障碍能量在无重叠构型下恒为零。因此，问题 (14) 的最小化问题可改写为

$$\begin{aligned} \min_{\boldsymbol{\lambda}\geq\mathbf{0}} \quad & \sum_i \lambda_i, \\ \text{s.t.} \quad & \sum_i b\left(d_i\left(\boldsymbol{\mathcal{Q}}_t + \Delta t \boldsymbol{\Psi}\left(\boldsymbol{\mathcal{U}} + \boldsymbol{\mathcal{M}}\boldsymbol{\mathcal{D}}\boldsymbol{\lambda}\right)\right), \hat{d}\right) = 0, \end{aligned} \tag{15}$$

其中，在施加障碍能量为零这一约束的同时，最小化接触力大小。式 (15) 的形式比式 (14) 更简单，因为它减少了一个超参数；但由于增加了一个非线性等式约束，求解可能更具挑战性。请注意，式 (14) 和式 (15) 的拉格朗日函数相同，但在式 (15) 中，参数 α 是待求解的拉格朗日乘子，而非预先设定的参数。在本文余下部分，我们将采用式 (15) 的形式来确定接触力。

注释 1. 与 Zorin 等人关于 IPC 的研究不同，本文提出的公式中并未显式使用障碍能量本身的值，但它对于

1. 施加大量最小距离约束，因为我们只需在障碍能量为零时求出力的大小。这样做的好处是，无需显式处理大量约束，因此能够在每个发生接触的时间步中求解规模较小的优化问题。

2. 获取能纳入更多信息的接触力和力矩方向：利用障碍能量，根据距离对大量接触点对进行加权，从而得到合力和力矩（详见第 2.1 节）。

ˆ 同一组约束的另一种表述是 $\min_i d_i \geq d$。对于一大类优化方法——内点法——此类问题需要一个可行的初始猜测值，$\boldsymbol{\lambda} \geq \mathbf{0}$，使所有非重叠约束均成立。即使对于只包含少数粒子的系统，这也可能很难获得。因此，为了确保稳健性，有必要将式 (7) 中的非重叠约束改写为障碍能量。

2.1 定义接触距离和接触力

现在，我们聚焦于彼此靠近的两个粒子表面上各点之间的欧几里得接触距离 d_i。我们区分 d^{p} 和 d^{s}：其中 d^{p} 是粒子之间的最短距离，而 d^{s} 是两个粒子表面上一对点之间的最短距离。原则上，约束优化问题 (15) 中的 d_i 既可以表示 d_i^{p}，也可以表示 d_i^{s}。在实际计算中，我们利用已知的粒子参数化直接计算 d^{p}，而表面点间距离 d^{s} 则基于粒子表面的离散化来计算，粒子表面由一组点表示：对于一对粒子中足够接近接触的一个粒子表面上的每个节点，我们利用另一个粒子中心线的已知参数化，确定该中心线上距离最近的点。本文所考虑的粒子表面距粒子中心线均为一个半径，因此表面点间距离可以轻松计算。我们根据几何考量决定使用 d^{p} 还是 d^{s}：

1. 如果粒子形状足够简单，例如球体或带有半球形端帽的轴对称杆，那么粒子间距离 d^{p} 可能是一个不错的选择。对于后一种情况，我们按照 [38, 39], 求解一个方程，以确定两条线段之间的最短距离，然后减去 $2R_{\mathrm{rod}}$，从而确定粒子间的最短距离，示意图见图2c。

2. 表面点间距离 d^{s}在两种情况下尤其有用：a.) 表面近乎平行时，难以定义单一接触点；b.) 对于非凸粒子。我们将把大部分注意力放在后一种情况上。

我们将接触力视为对试探时间步 $trial$ $\boldsymbol{\mathcal{Q}}^*_{t+\Delta t}$ 的（希望较小的）修正，即不考虑接触力时给出的时间步：

$$\boldsymbol{\mathcal{Q}}^*_{t+\Delta t} = \boldsymbol{\mathcal{Q}}_t + \Delta t \boldsymbol{\Psi} \boldsymbol{\mathcal{U}}. \tag{16}$$

令 $B_i(\boldsymbol{\mathcal{Q}}^*_{t+\Delta t}, \hat{}d_{\mathrm{try}})$ 为与粒子接触对 i 相关的修正屏障能量，该能量汇总了试探时间步中所有相关的粒子间距离；阈值 d_{try} 的选取使得 $d_{\mathrm{try}} > d(B_i(\boldsymbol{\mathcal{Q}}^*_{t+\Delta t}, \hat{}d_{\mathrm{try}})$ 等于式 (11) 中的总和，但此处针对单个粒子对，并采用修正后的阈值。接着，我们定义接触力势 接触力势，$\sum \lambda_i B_i(\boldsymbol{\mathcal{Q}}^*_{t+\Delta t}, \hat{}d_{\mathrm{try}})$，它是试探时间步$_i$中障碍能量的加权和，并令接触力等于该接触力势的梯度，即

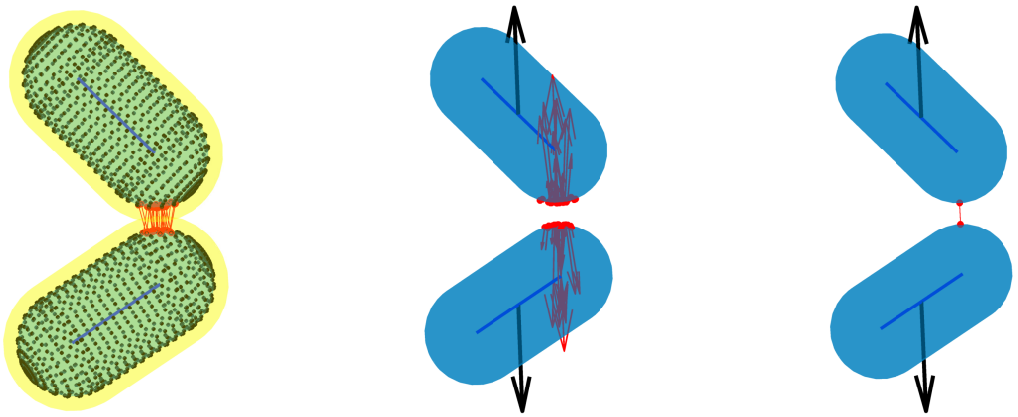
$$\boldsymbol{\mathcal{F}}_c = -\nabla_{\boldsymbol{\mathcal{Q}}^*_{t+\Delta t}} \left(\sum_i \lambda_i B_i \left(\boldsymbol{\mathcal{Q}}^*_{t+\Delta t}, \hat{d}_{\mathrm{try}} \right) \right). \tag{17}$$

如式 (5)–(6) 所述，接触力可写成 $\boldsymbol{\mathcal{F}}_c = \boldsymbol{\mathcal{D}} \boldsymbol{\lambda}$ 的形式。令 $\boldsymbol{B}$ 表示处于接触状态的 N_c 个粒子对的所有修正后的屏障能量组成的向量。表示接触力和力矩方向的稀疏矩阵 $\boldsymbol{\mathcal{D}} \in \mathbb{R}^{6N \times N_c}$ 取决于试探时间步中粒子的几何形状及其位置。由式 (17) 可知，$\boldsymbol{\mathcal{D}}$ 为

$$\boldsymbol{\mathcal{D}} = -\nabla_{\boldsymbol{\mathcal{Q}}^*_{t+\Delta t}} \boldsymbol{B}(\boldsymbol{\mathcal{Q}}^*_{t+\Delta t}, \hat{d}_{\mathrm{try}}). \tag{18}$$

矩阵的结构为

$$\boldsymbol{\mathcal{D}} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{D}_1 & \boldsymbol{D}_2 & \dots & \boldsymbol{D}_{N_c} \end{bmatrix}, \tag{19}$$



(a) 接触距离 d_{ik}^{s} 是指一个粒子上的每个表面网格节点（黑点）到另一个粒子上最近点的距离，且小于设定的阈值 d_{try} （缓冲区域以黄色表示）。最近点根据到另一个粒子中心线段（蓝线）的最短距离确定。网格节点与计算所得点组成的配对以红点标出，二者之间以红线连接，表示其间距。

(b) 接触力的对应方向表示了式（23）中的各项，并以红色箭头示意；箭头的长度与其对总力的贡献成比例。每条在（a）中标出的红色距离线 d_{ik}^{s} 都对应一个红色箭头。式（23）中作用于每个粒子的合成接触力方向用黑色粗箭头表示。

(c) 粒子间最短距离 d_i^{p} 由两表面最近点之间所画红线的长度给出，该长度根据两条中心线线段之间的最短距离计算，并减去 $2R_{\mathrm{rod}}$。作用于每个粒子的合成接触力方向用黑色粗箭头表示，其方向与接触点之间所画的法线相同。

图2：示意一对 i中两根彼此接近、即将接触的粗杆之间的两种接触距离 d_i^{p} 和 d_{ik}^{s}，以及作用于粒子的相应接触力方向。

其中， $\boldsymbol{D}_i$ 表示粒子 j 与 k之间的接触 i。一般而言， $\boldsymbol{D}_i$ 的形式为

$$\boldsymbol{D}_i = \left[0 \ \dots \ 0 \quad \frac{\hat{\boldsymbol{f}}_i^{cT}}{\|\hat{\boldsymbol{f}}_i^c\|} \quad \frac{\hat{\boldsymbol{t}}_{ij}^{c\ T}}{\|\hat{\boldsymbol{f}}_i^c\|} \quad 0 \ \dots \ 0 \quad -\frac{\hat{\boldsymbol{f}}_i^{cT}}{\|\hat{\boldsymbol{f}}_i^c\|} \quad \frac{\hat{\boldsymbol{t}}_{ik}^{c\ T}}{\|\hat{\boldsymbol{f}}_i^c\|} \quad 0 \ \dots \ 0\right]^T, \tag{20}$$

有关详细动机，请参见 [15] 。根据式 (20) 和关系式 $\boldsymbol{\mathcal{F}}_c = \boldsymbol{\mathcal{D}}\boldsymbol{\lambda}$，显然，粒子对 i 中作用于两个粒子的力大小相等（大小由 λ_i给出），仅符号相反，这是牛顿第三定律所致。在接触力势中，试探构型中彼此距离小于容差 d_{try} 的所有粒子或网格节点都会被标记，因为它们在校正时间步中可能 发生接触。设置 $\boldsymbol{\mathcal{D}}$ 时会考虑所有这些标记点，并据此确定接触力和力矩的方向。选择阈值 d_{try} 是为了设置一个缓冲范围，避免遗漏任何碰撞粒子，同时也决定了优化问题的维度，即碰撞粒子对的数量N_c。接触力势和式 (17) 中的力定义使得接触力相对于试探时间步的 d_{try} 具有互补性：只有当试探时间步的关联接触距离满足 $d_i(\boldsymbol{\mathcal{Q}}_{t+\Delta t}^*) < \hat{} d_{\mathrm{try}}$ 时，才允许在某一方向上存在非零接触力分量。

注释 2。 我们也可以选择在前一个无接触的时间步 $\hat{}$ 构造接触力势，其中 $\boldsymbol{\mathcal{Q}}_t$。请注意，这需要更大的 d_{try}，因为与仅由接触力引起的修正相比，粒子在一个完整时间步内预计会移动得更多。

备注 3。尽管这里将力和力矩写成障碍能量的梯度，但它并不是保守势的梯度，因为 $\boldsymbol{\lambda}$ 也隐式地依赖于 $\boldsymbol{\mathcal{Q}}_{t+\Delta t}^*$。

接下来，我们将比较两种确定接触力势并据此组装矩阵$\boldsymbol{\mathcal{D}}$的不同策略：一种只使用两个不同粒子上彼此最近的两个点，另一种则使用彼此足够接近的所有网格节点对。这些策略分别对应于在接触力势中使用 $d^{\mathrm{p}}(\boldsymbol{\mathcal{Q}}^*_{t+\Delta t})$ 或 $d^{\mathrm{s}}(\boldsymbol{\mathcal{Q}}^*_{t+\Delta t})$。图2也概述了两者之间的差异。

对于接触中的粒子对 i确定的接触力方向，对应于使用 d_i^{p}，我们识别出 $B_i(\boldsymbol{\mathcal{Q}}^*_{t+\Delta t},\ \hat{}d_{\mathrm{try}}) = b(d_i^p(\boldsymbol{\mathcal{Q}}^*_{t+\Delta t}),\ \hat{}d_{\mathrm{try}})$。令 $\boldsymbol{n}_i$ 为试探时间步中接触对内索引最低的粒子朝外的单位法向量（指向远离接触处的方向）。我们令

$$\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{f}}_i^c &= -\frac{\partial b(x,\hat{d}_{\mathrm{try}})}{\partial d_i}\Big|_{d_i^{\mathrm{p}}(\boldsymbol{\mathcal{Q}}^*_{t+\Delta t})}\boldsymbol{n}_i,\\
\hat{\boldsymbol{t}}_{ij}^c &= -\frac{\partial b(x,\hat{d}_{\mathrm{try}})}{\partial d_i}\Big|_{d_i^{\mathrm{p}}(\boldsymbol{\mathcal{Q}}^*_{t+\Delta t})}(\boldsymbol{n}_i\times\boldsymbol{s}_{ij})\\
\hat{\boldsymbol{t}}_{ik}^c &= \frac{\partial b(x,\hat{d}_{\mathrm{try}})}{\partial d_i}\Big|_{d_i^{\mathrm{p}}(\boldsymbol{\mathcal{Q}}^*_{t+\Delta t})}(\boldsymbol{n}_i\times\boldsymbol{s}_{ik}),
\end{aligned}\tag{21}$$

其中，$\boldsymbol{s}_{ij}$ 和 $\boldsymbol{s}_{ik}$ 是在全局参考系中，从每个粒子的中心指向接触点的向量。

我们也可以选择为接触中的所有$\boldsymbol{\mathcal{D}}$ 表面点对 构建，其中 d^{s} 是接触力势中使用的分离定义。令 l_j 为粒子 j上的一个网格节点的索引，l_k 为粒子 k 上的一个网格节点的索引，$\boldsymbol{r}_l$ 表示一个网格节点。然后，令 $\mathcal{C}_i$ 表示不同粒子上彼此距离不超过 d_{try} 的网格节点对集合。这里，修正屏障能量 $B_i(\boldsymbol{\mathcal{Q}}^*_{t+\Delta t},\ d_{\mathrm{try}})$表示接触对 i发生碰撞时涉及的所有网格节点的屏障能量，

$$B_i(\boldsymbol{\mathcal{Q}}^*_{t+\Delta t}) = \sum_{l\in\mathcal{C}_i} b\left(d_l^{\mathrm{s}}(\boldsymbol{\mathcal{Q}}^*_{t+\Delta t}),\hat{d}_{\mathrm{try}}\right).\tag{22}$$

根据式 (18)，这意味着力的方向由每对接近接触的网格节点对应的法向方向之和给出，并以相应的障碍函数导数加权。总之，$\boldsymbol{D}_i$ 的分量形式为

$$\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{f}}_i^c &= \sum_{(l_j,l_k)\in\mathcal{C}_i}\left(\frac{\partial b(x,\hat{d}_{\mathrm{try}})}{\partial x}\Big|_{x=\|\boldsymbol{r}_{l_j}-\boldsymbol{r}_{l_k}\|}\right)\frac{\boldsymbol{r}_{l_k}-\boldsymbol{r}_{l_j}}{\|\boldsymbol{r}_{l_j}-\boldsymbol{r}_{l_k}\|},\\
\hat{\boldsymbol{t}}_{ij}^c &= \sum_{(l_j,l_k)\in\mathcal{C}_i}\left(\frac{\partial b(x,\hat{d}_{\mathrm{try}})}{\partial x}\Big|_{x=\|\boldsymbol{r}_{l_j}-\boldsymbol{r}_{l_k}\|}\right)\left(\frac{(\boldsymbol{r}_{l_k}-\boldsymbol{r}_{l_j})}{\|\boldsymbol{r}_{l_j}-\boldsymbol{r}_{l_k}\|}\times(\boldsymbol{r}_{l_j}-\boldsymbol{x}_j)\right),\\
\hat{\boldsymbol{t}}_{ik}^c &= \sum_{(l_j,l_k)\in\mathcal{C}_i}\left(\frac{\partial b(x,\hat{d}_{\mathrm{try}})}{\partial x}\Big|_{x=\|\boldsymbol{r}_{l_j}-\boldsymbol{r}_{l_k}\|}\right)\left(\frac{(\boldsymbol{r}_{l_j}-\boldsymbol{r}_{l_k})}{\|\boldsymbol{r}_{l_j}-\boldsymbol{r}_{l_k}\|}\times(\boldsymbol{r}_{l_k}-\boldsymbol{x}_k)\right).
\end{aligned}\tag{23}$$

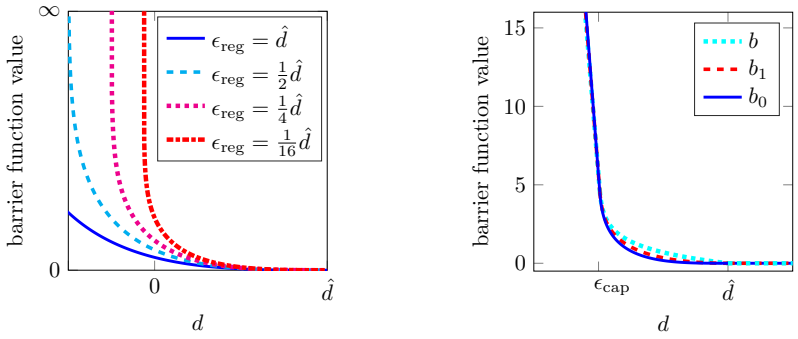
这意味着，如果相应的距离 $\hat{}\|\boldsymbol{r}_{l_j}-\boldsymbol{r}_{l_k}\|$ 较小，且相对于允许的最小距离 d 的重叠较大，则某一力方向 $\left(\boldsymbol{r}_{l_j}-\boldsymbol{r}_{l_k}\right)/\|\boldsymbol{r}_{l_j}-\boldsymbol{r}_{l_k}\|$ 的权重会更大。与 $\hat{}\,d$ 非常接近的距离对式 (23) 中表示力和力矩方向的求和仅有很小的贡献。

也可以考虑采用其他形式的障碍函数，将其定义为

$$b_0(d,\hat{d}) = \begin{cases}-\ln\left(d/\hat{d}\right), & 0<d<\hat{d},\\ 0, & d\geq\hat{d},\end{cases}\quad\text{or}\quad b_1(d,\hat{d}) = \begin{cases}(d-\hat{d})\ln\left(d/\hat{d}\right), & 0<d<\hat{d},\\ 0, & d\geq\hat{d},\end{cases}\tag{24}$$

分别具有正则性 C_0 和 C_1，并且也在 [20]中进行了讨论。我们选择（10）中的障碍函数 b，这是因为它在 $d=d$ 处平滑过渡（b 的正则性为 C_2），因此 b 非常适用于（15）中的优化问题，尤其适用于计算障碍函数的导数；求解（15）的任何迭代方法都必须进行这项计算。在确定试探时间步处的接触力方向时，我们没有这样的正则性要求，因此选择 C^0 函数 b^0；对于该函数，障碍函数导数在（23）中的权重为距离的倒数。

备注 4。注意，在迭代优化过程中，粒子可能不仅违反阈值 d，还可能发生重叠，之后才施加大小合适的接触力，因此 $d_i < 0$。自变量为负时，我们无法计算（10）中的障碍函数 b。一种解决方法是将 $d_i \to d_i + \epsilon_{\text{reg}}$ 和 $d \to d + \epsilon_{\text{reg}}$ 映射，其中 ϵ_{reg} 是待选参数。请注意，如果 ϵ_{reg} 选得较大，那么即使 d_i 相对于 d 较小，障碍函数的梯度也会较小，这可能影响求解优化问题（15）的性能。还要注意，在布朗情形下，如果使用较大的时间步长，我们可能需要选择较大的 ϵ_{reg}（具体取决于产生外力和力矩的保守势的排斥作用有多强）。另一种避免较大的 ϵ_{reg} 的方法，是将所有 $d_i < \epsilon_{\text{cap}}$ 线性映射，使障碍函数在 $d_i = \epsilon_{\text{cap}}$ 处的值为 C^1，并将其扩展为线性函数；通常选择 ϵ_{cap} 为 d 的一小部分，例如 $\epsilon_{\text{cap}} = 10^{-2} d$。图 3b 展示了这种扩展。（10）和（24）中的三种备选障碍函数及其正则化如图 3 所示。在第 3 节的数值实验中，我们采用了 ϵ_{reg} 策略，因为数值观察发现，采用这种选择时，求解优化问题所需的迭代次数较少；这是因为 b 的梯度较小，因而更容易处理。



(a) 障碍函数的修改 (b) 障碍函数的另一种修改 b，其中允许负的粒子间距 b，及其变体 b_0 和 b_1，对应于大小为 ϵ_{reg} 的最大重叠。粒子发生重叠时，$d < \epsilon_{\text{cap}}$ 会映射为线性延拓，并在 $d = \epsilon_{\text{cap}}$ 处具有 C^1 正则性。

图 3：式 (10) 和 (24) 中定义的障碍函数是示性函数的光滑近似。此处对障碍函数进行了修改，使其在负的粒子间距下也有定义，因为在试探时间步中，以及优化方法的迭代过程中，在找到大小合适的接触力之前，粒子可能会发生重叠。

2.2 与互补性表述的联系

为了与文献中的互补技术进行比较（例如 [28, 29, 30, 31, 32, 33], ），累积的非重叠约束 $\sum B_i(\boldsymbol{\lambda}) = 0$ 也可以等价地表示为一个互补问题，其中涉及每个接触对的障碍能量 $_i$ 及相应的接触力大小：

$$\mathbf{0} \le -\boldsymbol{B}(\boldsymbol{\mathcal{Q}}^*_{t+\Delta t} + \Delta t \boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{\mathcal{M}}\boldsymbol{\mathcal{D}}\boldsymbol{\lambda}, \hat{d}) \perp \boldsymbol{\lambda} \ge \mathbf{0}. \tag{25}$$

（尽管障碍函数 b 从不取负值）。式（25）中的问题可以通过先在试探时间步处进行线性化来求解，从而得到

$$\mathbf{0} \le -\boldsymbol{B}(\boldsymbol{\mathcal{Q}}^*_{t+\Delta t}, \hat{d}) + \left(\nabla^T_{\boldsymbol{\mathcal{Q}}^*_{t+\Delta t}} \boldsymbol{B}\left(\boldsymbol{\mathcal{Q}}^*_{t+\Delta t}, \hat{d}\right) \Delta t \boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{\mathcal{M}} \nabla_{\boldsymbol{\mathcal{Q}}^*_{t+\Delta t}} \boldsymbol{B}\left(\boldsymbol{\mathcal{Q}}^*_{t+\Delta t}, \hat{d}_{\text{try}}\right)\right) \boldsymbol{\lambda} \perp \boldsymbol{\lambda} \ge \mathbf{0} \tag{26}$$

并可像 [40] 中那样采用线性互补问题的技术。为保证原始非线性问题 (25) 有解，必须求解一系列形式如 (26) 的线性问题，每次都更新试探时间步 $\boldsymbol{\mathcal{Q}}^*_{t+\Delta t}$，其中包含由累积接触力计算出的已有位置更新。

若每个接触对中每个粒子仅有一个点参与接触，则方程 (25) 可化简为 Yan 等人 [29, 30, 32] 提出的形式，因此

$$\mathbf{0} \leq \boldsymbol{d}^p(\boldsymbol{\mathcal{Q}}^*_{t+\Delta t}(\boldsymbol{\lambda})) - \hat{d} \perp \boldsymbol{\lambda} \geq \mathbf{0}. \tag{27}$$

唯一的区别在于，我们将接触力视为对 $t+\Delta t$ 处试探时间步的修正，并围绕$\boldsymbol{\mathcal{Q}}^*_{t+\Delta t}$ 进行线性化，而不是像 [29, 30, 32]中那样围绕前一个坐标向量$\boldsymbol{\mathcal{Q}}_t$进行线性化。在$\boldsymbol{\mathcal{Q}}_t$处，构型中不存在接触。然而，在$\boldsymbol{\mathcal{Q}}^*_{t+\Delta t}$处，这一点并无保证；这可能会影响优化问题的收敛速度，因为初始猜测很可能不可行。与 Yan 等人的工作不同，本文通过计算满足 $\sum B_i(\boldsymbol{\lambda}) = 0$ 的解向量 $\boldsymbol{\lambda}$，来求解式（25）中的非线性互补问题，而不是考虑线性化的$_i$

问题。请注意，无法严格求解式（25），因为构型可能满足 $\hat{}\boldsymbol{B}(\boldsymbol{\mathcal{Q}}^*_{t+\Delta t} + \Delta t \boldsymbol{\Psi}\boldsymbol{\mathcal{M}}\boldsymbol{\mathcal{D}}\boldsymbol{\lambda}, d) = \mathbf{0}$ 和 $\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{0}$，因此我们允许互补条件存在一定的松弛。关于本文提出的非线性障碍法与求解式（26）形式的线性互补问题的方法之间更全面的比较，我们留待后续工作进行讨论，相关内容见 [28, 29, 30, 31, 32, 33]。

$\hat{}\hat{}$**注 5**。 选择 $d_{\text{try}} = d$ 后，可以采用二次规划问题（QPs）的方法求解 (26)（(26) 中 LCP 的矩阵是对称半正定的 [29]），例如 [41, 42]。然而，$\hat{}$ 若在试探时间步中将缓冲区域设得如此之小（这意味着选择 d_{try} 的值尽可能接近自然选择 d），则可能会漏掉修正时间步中的潜在接触，导致需要依次求解很长一串线性互补问题，才能最终收敛到非线性互补问题的解。另一方面，若将 d 增大至自然选择 d_{try} 的大小，使两个参数相等，那么修正时间步中每个粒子周围的缓冲区域就会非常大，由此产生的接触力将严重影响悬浮液的物理行为。

若将接触力引起的耗散能选作目标函数，则非线性优化问题（15）中的拉格朗日函数形式与 Yan 等人的研究类似，其中考虑了如下形式的二次规划问题（QP）：

$$\min_{\boldsymbol{\lambda} \geq \mathbf{0}} \quad \boldsymbol{\lambda}^T \boldsymbol{\mathcal{D}}^T \boldsymbol{\mathcal{M}} \boldsymbol{\mathcal{D}} \boldsymbol{\lambda} + \boldsymbol{G}^T \boldsymbol{\lambda}, \tag{28}$$

其中， $\boldsymbol{G}$ 为指定向量。对于该二次规划问题，关于已知时间步 $\boldsymbol{\mathcal{Q}}_t$ 处接触距离和力的大小 $\boldsymbol{\lambda}$的一阶最优性条件构成一个线性互补问题（LCP）。本文的不同之处在于，我们不考虑线性化的互补问题，而且式（15）中拉格朗日函数的第二项是非线性的，对应于非线性约束。求解该问题更加困难，但与 Yan 等人的研究相比，我们能够保证无重叠。

2.3 求解策略

问题（15）使用 MATLAB 中内置的约束最小化求解器 fmincon 求解，该求解器采用内点法。在此问题以及任何其他可用于求解该问题的迭代方法中，每次计算障碍能量都需要进行一次完整的斯托克斯求解，其计算量相当于不进行接触处理时执行一个时间步。因此，大量此类迭代会带来难以承受的计算开销，故应尽可能减少迭代次数。迭代次数由一组必须谨慎设定的参数决定。时间步长 Δt 根据问题中计算所得刚体速度的典型大小预先设定；这些速度取决于背景流的类型以及施加的力和力矩的大小，从而使粒子在每个时间步中的空间位移幅度适当。为展示该方法的稳健性，我们将改变阈值 d；该阈值决定粒子间允许的最小距离，以及新时间步中障碍能量的非零贡献。在一般应用中，我们建议将 d 选为粒子半径的一部分，例如 $\hat{}d = 10^{-2}R$。对于其余参数，我们采用以下经验规则：

- 最小化接触力大小的停止准则，

$$\max_i |\lambda_i^{k+1} - \lambda_i^k| < 10^{-2} \|\boldsymbol{\lambda}\|_\infty. \tag{29}$$

- 阈值 $d_{\text{尝试}}$ 确定所有 可能被分配接触力的 N_c 粒子对以及 这些粒子对的接触力和力矩方向在矩阵$\boldsymbol{\mathcal{D}}$中的组装方式：对于给定的杆和ˆ回旋镖 Δt，我们在每个时间步中自适应地设置 $d_{\text{尝试}}$ 为

$$\hat{d}_{\text{try}} = \hat{d} + \Delta t \max_{i=1,\dots,N} \left(\boldsymbol{u}_i + (L/2)\boldsymbol{v}_i \times \boldsymbol{\omega}_i \right), \tag{30}$$

其中，括号内的表达式是粒子的端点速度， $\boldsymbol{v}_i$ 表示沿粒子 i 轴线方向的单位方向， L 表示粒子长度。对于球体，我们取

$$\hat{d}_{\text{try}} = \hat{d} + \Delta t \max_{i=1,\dots,N} \boldsymbol{u}_i. \tag{31}$$

- 障碍函数的正则化参数 ϵ_{reg} 为 $\epsilon_{\text{reg}} = d_{\text{try}}$。

结果见第 3 节。我们将在第3.1.2节具体考察这些参数选择的影响。

3 数值结果

我们针对球体、杆和回旋镖进行了数值实验。由于时间离散中的微小误差或接触力中的微小差异，都可能在足够长的时间后导致粒子轨迹截然不同，因此很难动态研究接触算法的性能。目前尚无适用于多粒子系统的标准基准测试。为此，我们重点关注两类不同的测试：

1. 考察接触求解策略能否找到维持允许距离 d的接触力大小。这是对互补条件的测试：该条件指出，当且仅当接触处于“激活”状态时，才应施加非零力。测试针对这样的几何构型进行：粒子从无接触构型出发，在外力作用下相互靠近并发生接触。

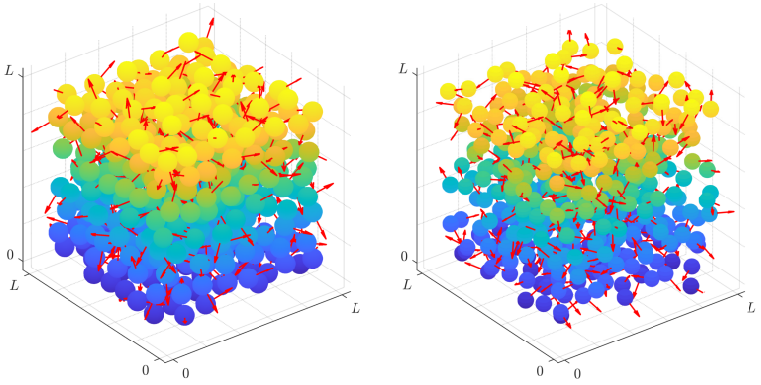
2. 考察在能够自然增强粒子相互作用的背景流中保持对称性的能力，以量化不同 d 和 Δt选项的影响。

在一些示例中，我们会夸大 Δt 和/或力的大小以及背景流的大小，以触发接触求解算法，从而展示其稳健性。

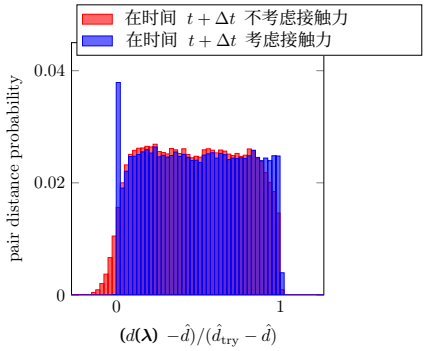
3.1 球体

3.1.1 球体的随机悬浮体系

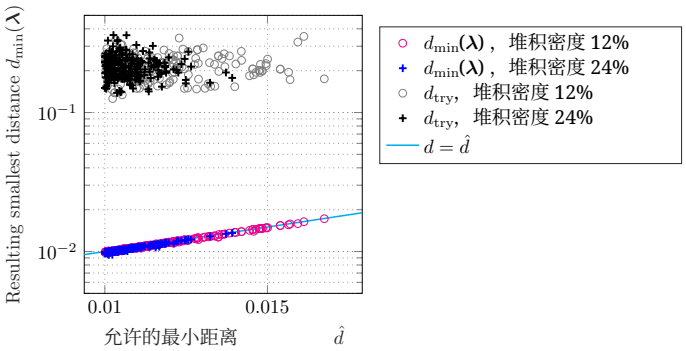
我们对立方体中随机分布的 500 个互不重叠的单位球体构型进行实验，立方体边长为 L。图4a 和图4b 分别展示了堆积密度为 24% 和 12% 时的几何形状。在每种密度下的 200 个构型中， d设为最小分离距离。随后，为球体分配从球面上均匀采样的外力，并进行缩放，使得 $\|\boldsymbol{f}_i\| = 100$。采用一个满足 $\Delta t = 0.01$ 的试探时间步；对于距离过近的球体，在粒子层级计算接触力，其中d_i 由 d_i^{p} 确定。在所有经过修正的粒子对中，报告下一时间层级的最小距离ˆ与 d 的关系，如图4d 所示。图4c 和图4e 展示了时间步内被标记为可能发生接触的粒子在施加接触力前后的归一化距离ˆ，分别相对于 d_{try} 和 d 进行缩放。总之，这些力不会人为地将粒子网络推开，而是大致维持粒子间距；对于距离过近的粒子对，则通过施加接触力来避免“重叠”。

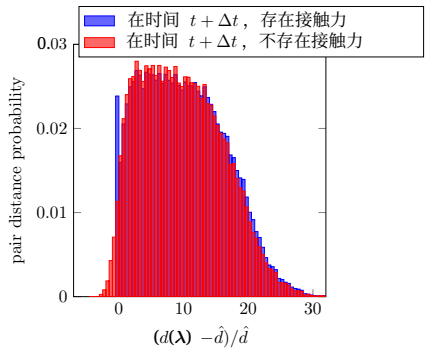


(a) 堆积密度为 24% 的构型示例，其中箭头表示随机采样得到、推动粒子彼此靠近的外力。(b) 同 (a)，但堆积密度为 12%。



(c) 施加接触力前后N_c 接触对的粒子间距；统计数据取自堆积密度为 24% 的 200 个构型。关于 d_{try} 相对于 d的大小，见图 (d)。





(d) 施加接触力时的最小距离 $d_{\min}(\boldsymbol{\lambda})$，相对于设定距离 d ；较密和较粗的构型均列于其中。每个构型还显示了相应的 d_{try} ，以确定哪些 N_c 粒子对被标记为参与接触力优化。(e) 同 (c)，但距离相对于 d 缩放，而非相对于 d_{try}。

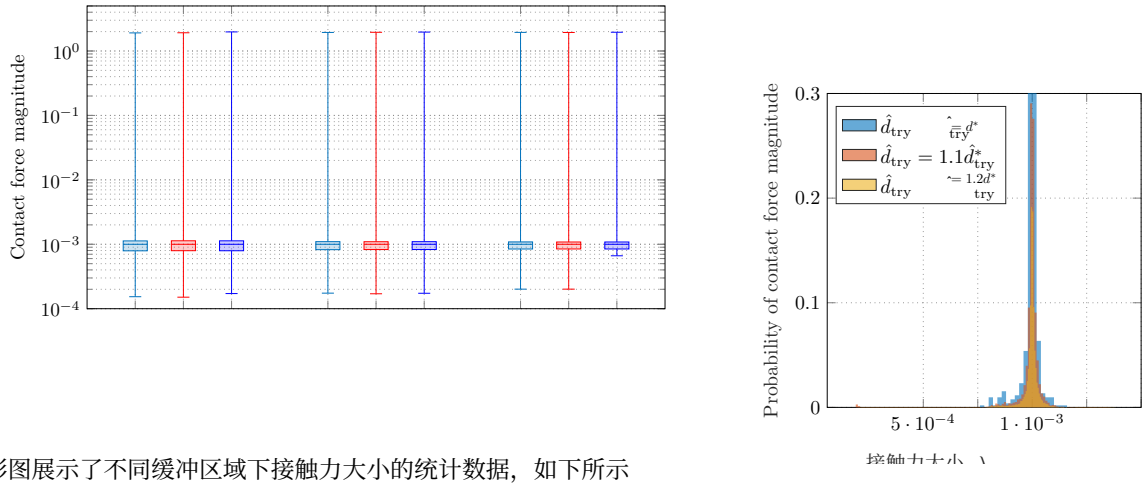
ˆ 图4：对于立方体中随机放置的 500 个球体，所有违反 d 的粒子对都会计算接触力；其中堆积密度分别为 24% 和 12%。球体受到方向从单位球面上随机抽取且满足 $\|\boldsymbol{f}_i\| = 100$ 的外力作用，并采用一个满足 $\Delta t = 0.01$的时间步ˆ。在试探时间步中，若粒子间距离小于 d，则认为粒子发生接触；这里，对每个随机构型，该值取前一无接触时间步的最小分离距离。施加接触力后，最小分离距离 d 得到维持；此外，接触力不会大幅改变最近粒子之间的粒子间距，这意味着这些力不会不必要地过大。

3.1.2 超参数稳健性测试

ˆ 我们对致密悬浮体系进行了与第3.1.1节相同的测试，但改变了两个参数： d_{try}，它决定试探时间步中每个粒子周围的缓冲区域，以及在该时间步内被标记为可能发生接触的粒子对数量；另一个参数是接触力优化中的停止准则 TOL，当 $\max_i \ |\lambda_i^{k+1} - \lambda_i^k| < \text{TOL}\|\boldsymbol{\lambda}\|_\infty$ 时，迭代优化方法将停止。实验

在 ˆ $d_{\text{try}} \in \{\hat{d}^*_{\text{try}}, 1.1\,\hat{d}^*_{\text{try}}, 1.2\,\hat{d}^*_{\text{try}}\}$ 下重复，其中 ˆ d^*_{try} 定义于式（31），且 TOL $\in \{10^{-2}, 5\cdot10^{-3}, 5\cdot10^{-6}\}$。观察图5a中的统计数据可知，对于所有测试的超参数组合，只有 $\boldsymbol{\lambda}$ 中对应于若不进行接触力修正就会发生重叠的粒子对的元素被赋予较大的接触力，其余接触力大小均较小。只要 TOL 足够小，其取值对计算所得接触力大小的影响就极小。可以预期，采用限制更严格的 TOL 会减少不可忽略的接触力数量，但另一方面，求解式（15）所需的迭代次数会增加。然而，实际上 TOL 对接触力大小的影响非常小，见图5a。图5b中的直方图 ˆ ˆ 仅显示被标记为 $d_{\text{try}} > d^*_{\text{try}}$ 、但未被标记为 ˆ ˆ ˆ$d_{\text{try}} = d^*_{\text{try}}$ 的粒子对的接触力大小。即使采用较大的 d_{try}，在时间步内被标记的粒子对更多，我们仍发现，采用较大缓冲区域计算出的所有额外接触力大小都很小。表1列出了在 200 个构型中，任意粒子的接触力三个分量的均方偏差和最大相对差，相对于采用 ˆ $d_{\text{try}} = \hat{d}^*_{\text{try}}$ 且 TOL $= 5\cdot10^{-6}$ 的设置所得结果。

我们以讨论目标函数的选择来结束本节。如果我们在 TOL $= 5\cdot10^{-6}$ and ˆ $d_{\text{try}} \in \{\hat{d}^*_{\text{try}}, 1.1\,\hat{d}^*_{\text{try}}, 1.2\,\hat{d}^*_{\text{try}}\}$ 的条件下重复实验，但将目标函数改为近似耗散能 $\boldsymbol{\lambda}^T\boldsymbol{\mathcal{D}}^T\boldsymbol{\mathcal{M}}\boldsymbol{\mathcal{D}}\boldsymbol{\lambda}$，那么对于较大的 ˆ d_{try}，被额外标记的粒子对将被赋予较大的接触力大小，相较于选择 1-范数目标函数而言。这些粒子对的力大小见图6，并可与图5b进行比较。



(a) 柱形图展示了不同缓冲区域下接触力大小的统计数据，如下所示 ˆd_{try} and 停止准则 $\max_i \ |\lambda_i^{k+1} - \lambda_i^k| <$ 容差$\|\boldsymbol{\lambda}\|_\infty$。须线显示相对于 $\|\boldsymbol{f}_i\|$ 的接触力大小的最小值和最大值；箱体上边缘表示力大小最高的 2.5%，下边缘表示最低的 1%，箱体内的线表示中位数。(b) 对于 ˆ $d_{\text{try}} >$ ˆd^*_{try} 未被标记为与 ˆ $d_{\text{try}} =$ ˆd^*_{try} 发生碰撞的接触对，其接触力大小的直方图。所有力大小都很小。

图 5：与外力相比，几乎所有接触力的大小都很小，这意味着只有实际违反设定的允许最小距离 d的粒子对才会被赋予显著的接触力，即使有更多粒子对被标记为参与接触优化。对于每种超参数组合，均统计了 200 个堆积密度为 24% 的球体随机构型中所有被标记接触的情况。所有超参数组合都呈现出相同的现象。

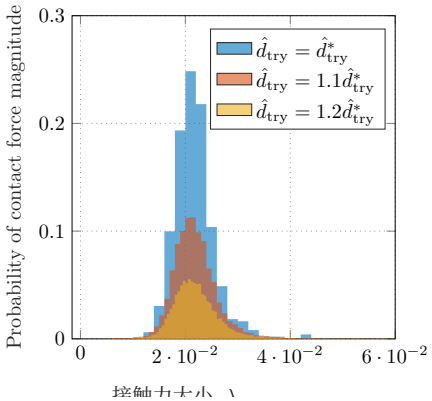
(a) **接触力的均方差**

$\hat{d}_{\text{try}}$ / 容差	$1 \cdot 10^{-2}$	$5 \cdot 10^{-3}$	$5 \cdot 10^{-6}$
$\hat{d}^*_{\text{try}}$	$2.45 \cdot 10^{-6}$	$6.63 \cdot 10^{-7}$	参考值
$1.1\hat{d}^*_{\text{try}}$	$3.76 \cdot 10^{-3}$	$9.60 \cdot 10^{-6}$	$8.84 \cdot 10^{-6}$
$1.2\hat{d}^*_{\text{try}}$	$3.86 \cdot 10^{-3}$	$1.03 \cdot 10^{-5}$	$9.72 \cdot 10^{-6}$

(b)**接触力的最大（相对）差值**

$\hat{d}_{\text{try}}$ / 容差	$1 \cdot 10^{-2}$	$5 \cdot 10^{-3}$	$5 \cdot 10^{-6}$
$\hat{d}^*_{\text{try}}$	0.14	0.14	参考值
$1.1\hat{d}^*_{\text{try}}$	0.15	0.16	0.16
$1.2\hat{d}^*_{\text{try}}$	0.16	0.17	0.17

ˆ 表1：在 200 个随机构型中的所有球体上，对接触力的三个分量计算得到的接触力相对于参考值的均方偏差和最大差值，其中 $d_{\text{try}} = \hat{}d^*_{\text{try}}$ and 容差 $= 5 \cdot 10^{-6}$ with 不同的超参数组合 (ˆd_{try}, 容差)。



ˆ ˆ 图6：对于使用目标函数 $\boldsymbol{\lambda}^T\boldsymbol{\mathcal{D}}\boldsymbol{\mathcal{M}}\boldsymbol{\mathcal{D}}\boldsymbol{\lambda}$ 和严格停止准则容差 $= 5 \cdot 10^{-6}$ 时，未标记为发生碰撞的接触对中接触力大小的直方图 $d_{\text{try}} > d^*_{\text{try}}$ not flagged for collision with ˆ $d_{\text{try}} = \hat{}d^*_{\text{try}}$。许多这些额外接触力的大小并不小，而这本应是预期的结果，因此我们得出结论：这种目标函数的选择不如 $\sum_i \lambda_i$ 稳健。

3.2 杆

3.2.1 几何考量

考虑由中央圆柱部分和两端半球形端帽构成的杆。按照文献[2]所述，采用匹配策略设定多斑点网格，使单个粒子的迁移率系数相匹配。杆的表面上每一点到其中心线段的距离均为一个半径，因此，粒子间距离d_i^{p} 可通过计算两条线段之间的最短距离并减去$2R_{\text{rod}}$来确定，见 [38, 39]。表面节点间距离 d_{ik}^{s} 的确定方法是：计算属于粒子 1 上采样网格的每个源网格节点到粒子 2 线段的最短距离。在粒子 2 上引入一个新的目标表面节点，其位置为最短距离向量与粒子表面的交点。将此源/目标节点对加入表面点列表，用于构成式（23）中矩阵 $\boldsymbol{\mathcal{D}}$ 的元素。对两粒子上采样表面中所有足够接近另一粒子的点重复此过程。最后，将按 d_i^{p} 定义的最近接触点加入列表，以免低估粒子间的最近距离；对于所有网格节点对 k, $d_{ik}^{\text{s}} \leq d_i^{\text{p}}$，也采用同样的处理。

3.2.2 杆链

研究长度为 $L_{\text{rod}} = 0.5$ 、半径为 $R_{\text{rod}} = L_{\text{rod}}/20$ 的杆链。对于每条链，均从第一卦限随机选取一个单位方向向量 $\boldsymbol{t} \in \mathbb{R}^3$ 和旋转角度 (θ, ϕ)。链的构造方式是：将第一根杆放置在原点，其朝向与 z轴重合。

后续杆通过以下方式由前一根杆得到：先将粒子旋转（θ, ϕ），再在前一粒子的坐标系中将中心坐标平移 $\beta(d)\boldsymbol{t}$，其中常数 $\beta(d)$决定平移的幅度，使得一对粒子之间的最小距离为 d。图7a展示了几种几何形状示例。

给每条链中的每根杆施加一个沿指向下一个粒子的方向的力，因此，如果不施加接触力，下一时间步就会发生碰撞（d 被违反）。随后，使用接触力对施加于链构型的一组给定力进行修正。图7b报告了施加接触力后所得粒子间距离 d（$\boldsymbol{\lambda}$）的统计数据，并将其与大范围的 d 对应的 d 进行了比较。请注意，最大的d 并不代表动态模拟中的实际选择，而是用来展示该方法的稳健性；此外，d_{try} 的选择取决于 Δt，因此不会沿着 d的曲线变化。将d（$\boldsymbol{\lambda}$）与参考距离 d进行比较，可以得出结论：对于几乎所有链中的几乎所有粒子，均满足允许的最小距离 d。图7c展示了所有链在接触发生前后 $\left(d\left(\boldsymbol{\lambda}\right) - \hat{d}\right) / \hat{d}$的统计数据。图7d中的直方图显示了在固定 d 下，任意链中任意杆上可能出现的接触力大小；该大小是相对于触发接触规避算法的外力大小而言的。接触力的大小与外力相当。

为保证可复现性，时间步长设为 $\Delta t = 0.05$，力的大小设为 $\|\boldsymbol{f}_i\| = 2\hat{d}^{1/3}$（选择这一特定值是为了在测试所考虑的整个 d 范围内促成碰撞）。

3.2.3 双轴压缩流中的杆

考虑一个由 30 根杆组成的二维网格，杆长为 $L_{\mathrm{rod}} = 2$、半径为 $R_{\mathrm{rod}} = L_{\mathrm{rod}}/4$，排列方式如图 8a-8b 所示，并受到图中所示的背景双轴压缩流 $\boldsymbol{\mathcal{U}}_{\mathrm{bg}}$ 作用，其表达式为

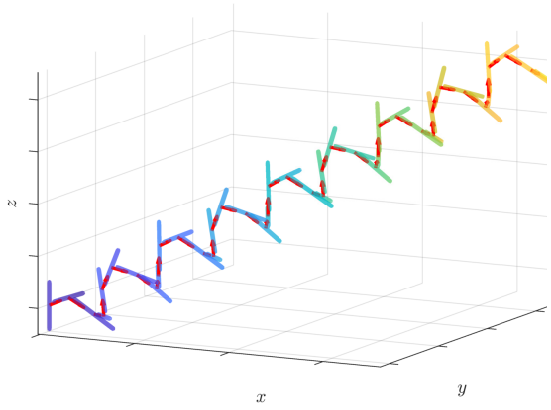
$$\boldsymbol{\mathcal{U}}_{\mathrm{bg}} = \left[(\boldsymbol{E}\boldsymbol{x}_1)^T, \boldsymbol{0}, (\boldsymbol{E}\boldsymbol{x}_2)^T, \boldsymbol{0}, \ldots, (\boldsymbol{E}\boldsymbol{x}_n)^T, \boldsymbol{0}\right]^T \quad \text{with } \boldsymbol{E} = \begin{bmatrix} \dot{\gamma} & 0 & 0 \\ 0 & -\dot{\gamma}/2 & 0 \\ 0 & 0 & -\dot{\gamma}/2 \end{bmatrix},\ \gamma = 1. \tag{32}$$

我们选择不同的允许的最小距离 d 和一组分级的时间步长 Δt，并在每次采用一组超参数设置（d, Δt）的情况下，使用前向欧拉法对系统动力学进行离散化。每当时间步结束时，d 这一允许的最小距离被违反，就会根据 d_{try}，针对试探时间步中被认为足够接近接触的粒子计算接触力。由于背景流具有收缩性质，接触规避算法几乎会在每个时间步触发，见表 2。图 8c 显示了所有粒子每个时间步的坐标位置变化，直至粒子开始沿 x 轴发散（背景流沿该方向发散），此时停止模拟。接触力不会导致粒子轨迹出现剧烈跳变，绝大多数坐标更新都非常接近于零。表 2 表明，在一长串时间步中，接触力都能稳健地计算出来。图 8e 显示了粒子沿 x 轴的最大偏差随时间的变化。较小的时间步长所产生的偏差略小于较大时间步长所产生的偏差。但请注意，对于所有超参数设置，粒子都保持在 yz 平面内。

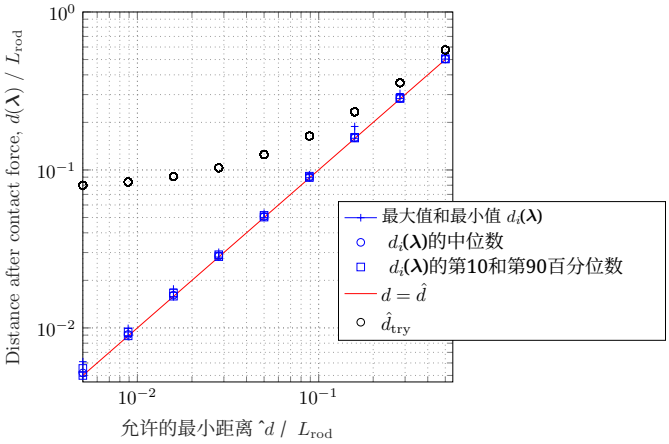
如果保留问题的所有对称性，粒子不仅应保持在同一平面内，还应保持与 z 轴对齐。可用昂萨格序参量 S 对这种对齐程度进行量化，其定义为 [43]

$$S = \frac{1}{N}\sum_{i}^{N}\left\{3/2\left(\boldsymbol{e}_z \cdot \boldsymbol{u}_i\right)^2 - 1/2\right\}. \tag{33}$$

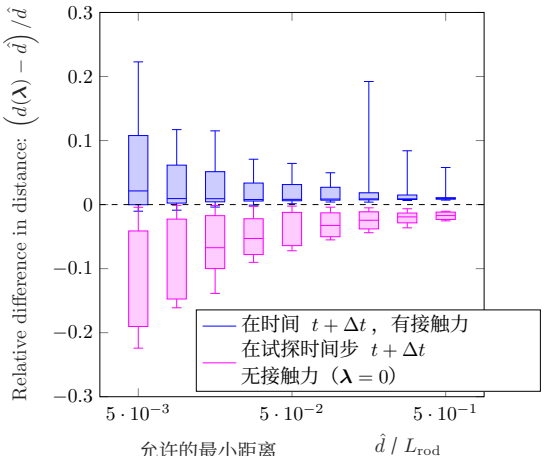
如果 $S = 1$，粒子将与 z 轴完全对齐；如果 $S = -1/2$，粒子则全部垂直于 z 轴。在图 8d 中，我们展示了参数 d 取两个不同值时的序参量。我们预计在整个模拟过程中，序参量都为 $S(t) = 1$，但数值结果表明，这一情况只在某个时刻之前成立；之后，部分粒子的排列被打破，$S(t)$ 随之减小。改变 $\hat{d}$ 和 Δt 的取值，序参量也呈现相同的定性行为：粒子最初呈对称排列，背景流也是对称的；随后，粒子先在竖直方向开始接触，之后在竖直和水平方向均发生接触。由于接触力并非完全对称，粒子的排列被打破。不过，对于所有 $(d, \Delta t)$，序参量的这种偏离都要经过大量的时间步长才会发生，因此我们可以得出结论：接触处理是稳健的。

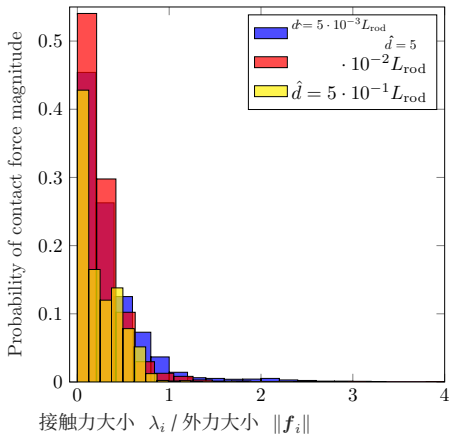


(a) 杆链示例：每对相邻杆之间具有相同的相对平移和旋转，因此每对杆之间的粒子间距 d 相等。红色箭头表示指向下一个粒子中心的外力，这些外力会有意在下一个时间步引发碰撞。粒子颜色表示其在悬浮液中的深度。



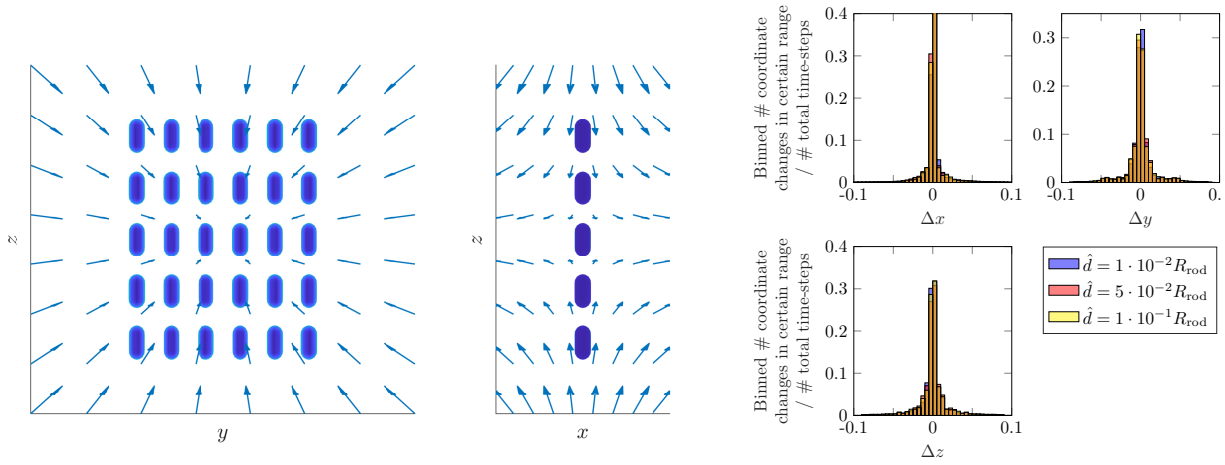
(b) 每种 d下，从 100 条杆链中的所有杆收集统计数据得到的计算距离 $d(\boldsymbol{\lambda})$ 分布，并与参考最小允许距离$\hat{}d$进行比较。对于每个$\hat{}d$，还标出了相应的距离 d_{try}；若粒子间距小于该距离，则会将粒子标记为属于碰撞算法的处理范围。



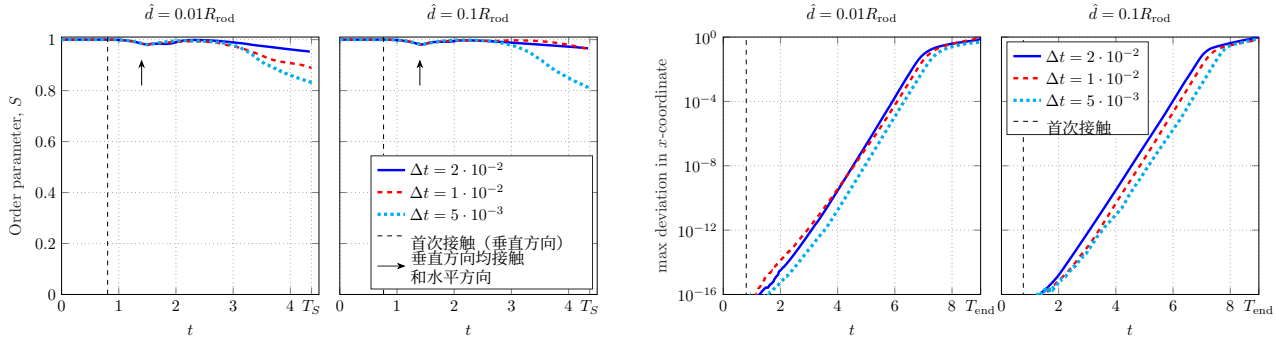


(c) 柱形表示在试探时间步中不施加接触力以及施加接触力时，针对每种$\hat{}d$选择，计算距离 $d(\boldsymbol{\lambda})$ 相对于$\hat{}d$ 的相对差值。
(d) 接触力的大小相对于外力 $\|\boldsymbol{f}_i\|$的大小。所有计算得到的接触力均与 $\|\boldsymbol{f}_i\|$ 大小相当或更小。须线表示相对距离差值的最小值和最大值，箱体边缘表示相对差值的第10和第90百分位数，箱体中心线表示中位数。

图 7：通过施加朝向链中下一个粒子的外加力，迫使由 40 根杆组成的链发生接触。通过找出接触力的最佳大小，可以保持最小分离距离 $\hat{}\hat{}d$ 。对于每个 d，都使用 100 条随机生成的链重复实验。



（a）t 时刻的初始粒子几何形状该。(b) xz-平面内的初始粒子几何形状。箭头表示流动方向。(c) 使用较大的时间步长 $\Delta t = 0.02$ 时，每个时间步的粒子坐标变化分箱结果。接触力不会导致粒子轨迹发生剧烈跳变，所有坐标变化都很小。



(d) 如式 (33) 所定义的序参量 S，使用不同的时间步长以及两种不同的最小允许距离 $\hat{d}$ 选择。(e) x 坐标上的最大偏差：尽管接触算法处于活动状态的时间步数量很多，当所有粒子与 z 轴对齐时，$S = 1$。经过有限时间后，粒子的排列会被打破。采用最大的 Δt 时，粒子会长时间停留在 yz 平面内。所用时间步数量见表 2。使用 $\hat{d} = 0.01 R_{\rm rod}$ 时，这种情况约在 100 个时间步后、于 $t \approx 3$ 发生。

图 8：受双轴压缩流影响的 30 根杆组成的网格。每当违反允许的最小距离 d 时，都会稳健地计算接触力$\hat{}$。构型的对称性遭到破坏，但这种情况是在经过大量时间步长后才发生的。尽管背景流将粒子推向彼此，情况颇具挑战性，粒子仍能在原始二维网格中保持相对较长时间。

时间步 Δt 为 $\Delta t^* = 0.02$的分数	接触时间步长数 $\hat{d} = 0.01 R_{\rm rod}$ $T_{\rm end} = 9$ ($T_S = 4.36$)	接触时间步长数 $\hat{d} = 0.1 R_{\rm rod}$ $T_{\rm end}$ (T_S)	总步数 $T_{\rm end}$ (T_S)
Δt^*	410（178）	412（180）	450（218）
$\Delta t^*/2$	819（357）	824 (362)	900 (436)
$\Delta t^*/4$	1639 (715)	1647 (723)	1800 (872)

表 2：双轴压缩流中的杆：对于不同的时间步长 Δt，接触算法触发的时间步数，以及总步数；其中 T_S 显示图 8d 中序参量 S 的时间截至于 $T_{\rm end}$，而粒子沿 x 轴开始发散的时间（背景流在该方向上发散）。

3.3 回旋镖

3.3.1 几何考量

我们考虑图1b所示类型的回旋镖粒子。这种回旋镖是按照第3.2.1节所述，将长径比为 $L_{\mathrm{rod}}/R_{\mathrm{rod}} = 8$ 、半径为 $R_{\mathrm{rod}} = 0.5$ 的杆分成两段相等的部分制成的，每段都由一个圆柱部分和一端的半球形端帽组成。将其中一段半杆竖直放置，另一段水平放置，使两部分切割面的角相互接触。以该点为中心旋转一个圆，将两段杆连接成一个粒子。中心坐标 $\boldsymbol{x}$ 定义为该粒子的质心。

对于障碍能量以及$\boldsymbol{\mathcal{D}}$中接触力和力矩的方向，由于粒子几何形状为非凸，因此采用基于表面节点间距离的接触距离 d^{s}。为此，考虑每个粒子的中心曲线，该曲线由两条线段和一段连接两条线段的四分之一圆构成。对于粒子 1 离散表面上的每个点，我们都可以轻松计算其到粒子 2 中心曲线的最短距离，再减去一个粒子半径，得到表面之间的最短距离。随后，将相应的源/目标表面点对添加到用于构造式（23）中矩阵$\boldsymbol{\mathcal{D}}$ 的表面节点列表中。对粒子对中的两个粒子交换编号后，重复这一过程。

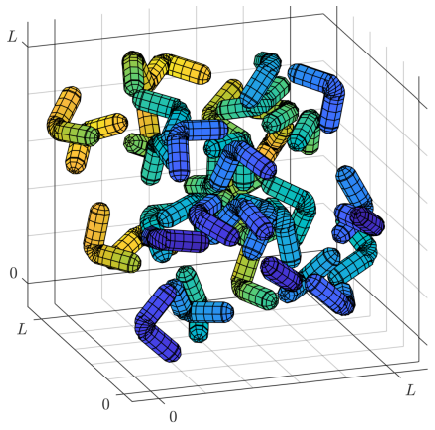
3.3.2 回旋镖的随机悬浮体系

考虑在边长为 $L = 12$ 的立方体中随机放置 40 个回旋镖构成的系统，如图9a所示。回旋镖依次生成，其中心坐标$\boldsymbol{x}$ 和四元数 $\boldsymbol{q}$ 均匀采样，并确保其与任何其他粒子的距离大于 $\delta = 10^{-2}$。我们进行与第3.1节中球体相同类型的测试：对于每个生成的、包含 40 个回旋镖的构型，计算最小分离距离ˆ，并将 d 设为该距离。随后，为回旋镖随机赋予从一个球体中采样的力和力矩，其中 $\|\boldsymbol{\mathcal{F}}_{\mathrm{ext}}\| = 100$ ；因此，在 $\Delta t = 0.01$的试探时间步中，某些粒子会违反表面节点间距离约束。对于这些粒子对，计算校正接触力。在所有被标记为可能需要赋予接触力的粒子对中，报告施加接触力后时刻 $t + \Delta t$ 的最小距离与 d 的关系，如图9b所示；图9c则报告所有被标记粒子对在施加接触力校正前后的距离。由此可见，接触力不会不必要地将粒子推得过远ˆ ˆ（注意，参数 d_{try} 相对于 d 取值较大，以免漏掉任何碰撞）。尽管粒子形状为非凸ˆ，且粒子可能陷入锁定构型，但对于全部 200 个构型中的所有回旋镖，都可以保持 d 。

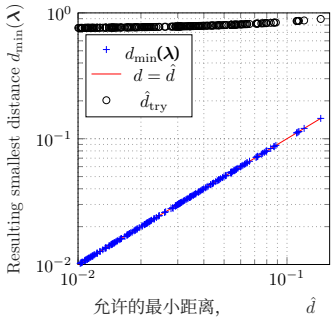
4 对计算成本的讨论

尽管包含接触的每个时间步的成本有所增加，但采用本文提出的接触规避算法仍可在计算成本方面获得很大收益，因为与不包含接触力的模拟所允许的时间步相比，动力学模拟可以采用大得多的时间步——本文数值实验中使用的所有时间步长都非常大，但接触算法仍然具有稳健性。

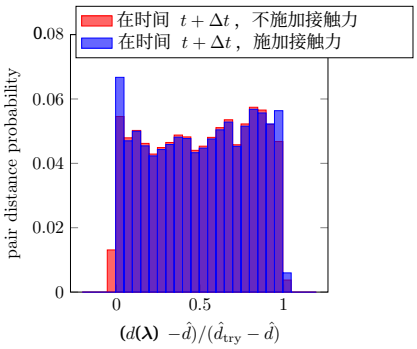
求取最优接触力大小的主要成本在于，需要确定矩阵向量乘积 $\boldsymbol{\mathcal{M}}\boldsymbol{\mathcal{D}}$ ，以计算障碍能量关于接触力大小向量的梯度；而该梯度是使用内点法求解式（15）中的优化问题所必需的。每个发生接触的时间步都必须计算并存储一次矩阵矩阵乘积$\boldsymbol{\mathcal{M}}\boldsymbol{\mathcal{D}}$ ，因为$\boldsymbol{\mathcal{M}}$ 取决于$\boldsymbol{\mathcal{Q}}_t$ ，而$\boldsymbol{\mathcal{D}}$ 取决于$\boldsymbol{\mathcal{Q}}^*_{t+\Delta t}$ （不依赖于 $\boldsymbol{\lambda}$）。对于多斑块方法，如果粒子总数较少，迁移率矩阵很容易显式计算。对于较大的粒子系统，计算$\boldsymbol{\mathcal{M}}\boldsymbol{\mathcal{D}}$ 相当于求解 N_c 个斯托克斯迁移率问题，其成本由ˆ确定， d_{try} 将决定 N_c，当然这也取决于系统中的粒子密度。每次计算接触力的作用$\boldsymbol{\mathcal{M}}\boldsymbol{\mathcal{D}}\boldsymbol{\lambda}$时，也必须求解一个斯托克斯迁移率问题，该作用会进入障碍能量。此类求解的次数取决于使用内点法求解优化问题（15）的迭代次数；而迭代次数又取决于粒子类型、时间步长以及若干超参数，详见第2.3节：需要做出的选择包括



(a) 一个示例构型，颜色表示悬浮液中的深度。



(b) 施加接触力后，所有最小距离均满足最小允许距离 $\hat{d}$。对于每个构型，还显示了相应的 $\hat{d}_{\text{try}}$，它决定了哪些 N_c 粒子对被标记为参与接触力优化。



(c) 施加接触力前后，N_c接触对之间的距离；统计数据取自全部 200 个构型。注意，d_{try} 相对于 d较大，见 (b)。

图 9：对 200 个随机构型中的 40 个回旋镖进行接触规避。

例如，如何对障碍函数进行正则化，即如何处理边界之间的负距离，以及在求解式（15）中的最小接触力大小时选择何种停止准则。根据本文的数值实验，预计迁移率求解$\boldsymbol{\mathcal{MD}\lambda}$ 至少在 10–20 次的范围内。如果停止准则非常严格，迭代次数会更多；如果不那么严格，则迭代次数会更少。通过选择略大于$\boldsymbol{\mathcal{M}}$精度要求的缓冲区域 d，或许可以采用不那么严格的准则。我们可以将迭代次数与 Yan 及其合作者关于线性互补问题技术的文献报告进行比较，同时强调迭代次数会因具体设置而异：Yan 等人报告称，对于和中的球体，每个时间步需要额外进行 ≈ 20 次斯托克斯求解；对于中的稀悬浮胶囊体，需要 5–10 次迭代；而 $\mathcal{O}(1000)$ 时则接近随机密堆积极限。

本文考虑的受约束最小化问题与一阶内点法相结合，相较于二阶方法也有优势，例如基于牛顿法并应用于非受约束 IPC公式的方法 [20]。与 IPC公式不同，我们不依赖距离相对于粒子坐标的二阶导数，也避免了在优化问题中迭代更新解向量时求解大型线性方程组——斯托克斯迁移率问题除外。该问题的 IPC公式中，线性方程组的矩阵是 $\boldsymbol{\mathcal{M}}$ 的函数，同时也取决于外力和力矩的梯度，以及距离相对于粒子中心坐标和四元数的海森矩阵。对于一般情形，该矩阵的结构无法先验地简单分析，并且必须将该矩阵投影到非负矩阵锥上，才能使牛顿法收敛。此外，与斯托克斯迁移率问题（对某个向量 $\boldsymbol{\mathcal{F}}$ 应用 $\boldsymbol{\mathcal{MF}}$）不同，这里无法应用快速矩阵-向量计算技术 [1]。鉴于这些困难，当前公式与一阶方法（例如内点法）相结合，在超大型粒子系统中尤为有利；在此类系统中，我们既不希望显式计算 $\boldsymbol{\mathcal{M}}$，也不希望反复求解一个作为 $\boldsymbol{\mathcal{M}}^3$ 非平凡函数的大型线性方程组。

5 结论

我们提出了一种优化过程，以保证无界斯托克斯流体中三维粒子的构型不发生重叠。该方法基于障碍函数形式，将不重叠约束改写为障碍能量，并将其约束为在不重叠构型下取零。

[3]对于规模较大的粒子系统，可以考虑采用 SNOPT 软件包 [44] 提供的稀疏非线性优化器来求解问题。不过，计算二阶导数时必须谨慎。

我们针对球体、带半球形端帽的杆状粒子和回旋镖给出了数值示例。这些数值示例展示了接触力算法在致密粒子悬浮体系中的表现：外力或背景流有意将粒子推挤到一起。在所有示例中，所提出方法的突出特性^是能够维持设定的最小分离距离 d。在试探时间步中，$\boldsymbol{\lambda}$ 与修正障碍能量（参数为 d_{try}）之间实现了离散互补性^。我们通过数值结果^表明，该方法对于不同的 d、粒子形状和流动情形均具有鲁棒性。在本研究中，我们有意选择外力大小、背景流和时间步长，使粒子彼此过于靠近；而在实际模拟中，接触发生的频率会较低^，且 d 应当较小。该方法的优势包括形式简单、能够处理非凸粒子、具有无碰撞保证，以及接触力对系统的影响最小，因为这些力彼此平衡且其大小得到最小化。正如本文所做的那样，通过显式求解力的大小，可以省去惩罚参数，否则就必须仔细调节该参数。此外，与采用增量势接触（IPC）[20]那样隐式求解所有粒子坐标相比，优化问题的规模要小得多（至少对于拥挤程度适中的系统而言）。

未来的工作有两个方向：

1. 迁移率矩阵作用的近似：迁移率矩阵 $\boldsymbol{\mathcal{M}}$ 中，悬浮液里的所有粒子之间存在全局耦合。鉴于近距离相互作用占主导，一种方案是构造对 $\boldsymbol{\mathcal{M}}$ 作用的近似，仅基于所有相互接触的粒子对来计算矩阵-向量乘法 $\boldsymbol{\mathcal{M}}\boldsymbol{\mathcal{F}}$，而不是应用全局迁移率矩阵。然而，使用这种近似确定的、可避免碰撞的接触力，并不一定能通过 $\boldsymbol{\mathcal{M}}$ 得到无重叠构型。一种解决方法是为允许的最小距离设置一个小缓冲区，使得 $d \to d(1+\delta)$；或者将近似得到的接触力大小解向量作为初始猜测，再使用完整的迁移率矩阵进行迭代。类似地，也可以考虑分离的粒子簇，在局部计算接触力。

2. 连续接触力势：本文考虑的是接触力势的离散版本，其计算依据是粒子表面上彼此足够接近的所有点。也可以考虑为两个接触粒子定义连续势，其中试探时间步的障碍能量表示为粒子表面上接触附近区域的积分。第 3.2.3 节双轴压缩流实验中观察到的接触力不对称性有两种解释：首先，粒子上的离散表面网格会导致看似相近的相对旋转和粒子间距离，在不同碰撞粒子对中产生不同的障碍能量——这取决于粒子绕自身轴线旋转的角度，可能会有不同数量的网格节点被标记为发生碰撞。此外，当粒子接近平行时，粒子间最短距离 d^{p} 对微小的方向差异十分敏感。连续接触力势的一个潜在优点是能够更好地保持对称性。我们将这一方法留待未来研究，并从二维情形开始。

最后，我们简要说明优化算法：本研究使用 Matlab 内置的优化过程 fmincon，采用经过高度调优的内点法，求解接触力大小向量$\boldsymbol{\lambda}$的优化问题。可以直接使用 MATLAB 中的标准求解器，是该方法的一大优势。只要达到零障碍能量，即表明粒子之间已充分分离，我们便满足于可能的局部最优解。

致谢

作者感谢 Anders Forsgren 就优化算法的选择进行讨论，感谢 Georg Stadler 探讨设置非重叠约束的其他方法，并感谢 Mattias Sandberg 对本文所提供数值示例提出的建设性意见。我们感谢瑞典研究理事会的支持：资助编号 2019-05206，以及研究环境资助 INTERFACE（生物材料），编号 2016-06119。

参考值

[1] F. B. Usabiaga, B. Kallemov, B. Delmotte, A. P. S. Bhalla, A. Donev, and B. E. Griffith, 《被动和主动刚性粒子悬浮液的流体动力学：刚性多斑块方法》，应用数学与计算科学通讯，第 11 卷，第 2 期，2016 doi: 10.2140/camcos.2016.11.217[2] A. Broms, M. Sandberg, and A.-K. Tornberg, 《用于斯托克斯迁移率问题的局部校正多斑块方法及其流体动力学匹配网格》，2022 doi: 10.48550/ARXIV.2207.11210[3] S. Delong, F. Balboa Usabiaga, and A. Donev, 《受限刚体的布朗动力学》，《化学物理杂志》，第 143 卷，第 14 期，2015 doi: 10.1063/1.4932062[4] B. Sprinkle, F. Balboa Usabiaga, N. A. Patankar, and A. Donev, 《受限刚性粒子悬浮液的大规模布朗动力学》，《化学物理杂志》，第 147 卷，第 24 期，2017 doi: 10.1063/1.5003833[5] Q. Brosseau, F. B. Usabiaga, E. Lushi, Y. Wu, L. Ristroph, J. Zhang, M. Ward, and M. J. Shelley, 《利用非对称金铂泳动杆揭示流趋性与流体动力驱动之间的关系》，《物理评论快报》，第 123 卷，第 17 期，第 178004 页，2019 doi: 10.1103/PhysRevLett.123.178004[6] Q. Brosseau, F. B. Usabiaga, E. Lushi, Y. Wu, L. Ristroph, M. D. Ward, M. J. Shelley, and J. Zhang, 《受重力驱动沿壁面向上运动的金属微型游泳体》，《软物质》，第 17 卷，第 27 期，第 6597–6602 页，2021 doi: 10.1039/d1sm00554e[7] A. M. Fiore and J. W. Swan, 《快速斯托克斯动力学》，《流体力学杂志》，第 878 卷，第 544–597 页，2019 doi: 10.1017/jfm.2019.640[8] L. af Klinteberg and A. K. Tornberg, 《斯托克斯粒子悬浮液的快速埃瓦尔德求和》，《国际数值方法：流体》，第 76 卷，第 10 期，第 669–698 页，2014 doi: 10.1002/fld.3953[9] B. J. Berne and P. Pechukas, 《分子相互作用的高斯模型势》，《化学物理杂志》，第 56 卷，第 8 期，第 4195–4205 页，1972 doi: 10.1063/1.1677837[10] S. Varga and G. Jackson, 《静电手性各向异性分子流体的螺距研究：平均场理论与模拟》，《分子物理学》，第 104 卷，第 22-24 期，第 3681–3691 页，2006 doi: 10.1080/00268970601058556[11] Y. G. Tao, W. K. Den Otter, J. T. Padding, J. K. Dhont, and W. J. Briels, 《细长刚性杆的自转与集体转动扩散系数的布朗动力学模拟》，《化学物理杂志》，第 122 卷，第 24 期，2005 doi: 10.1063/1.1940031[12] D. Baraff, 《计算不可穿透刚体接触力时的问题》，《算法学》，第 10 卷，第 2-4 期，第 292–352 页，1993 doi: 10.1007/BF01891843[13] Anitescu, Cremer, and Potra, 《构建三维接触动力学问题》，《结构与机器力学》，第 24 卷，第 4 期，第 405–437 页，1996 doi: 10.1080/08905459608905271[14] A. Tasora and M. Anitescu, 《求解含接触、摩擦和关节的大型刚体问题的快速非线性互补问题求解器》，多体动力学，第 45–55 页，2008 doi: 10.1007/978-1-4020-8829-2 3[15] A. Tasora, D. Negrut, and M. Anitescu, 《图形处理器上的大规模并行多体动力学与摩擦接触》，《机械工程师学会会刊》*K* 部分：多体动力学杂志，第 222 卷，第 4 期，第 315–326 页，2008 doi: 10.1243/14644193JMBD154[16] M. Tur, F. J. Fuenmayor, and P. Wriggers, 《采用拉格朗日乘子的适用于大变形的 mortar 摩擦接触公式》，《计算方法与应用力学工程》，第 198 卷，第 37-40 期，第 2860–2873 页，2009 doi: 10.1016/j.cma.2009.04.007[17] P. Wriggers, 《计算接触力学，第二版，施普林格》，2006。ISBN 9783540326083 doi: 10.1007/978-3-540-32609-0

[18] J. M. Snyder，“用于无互穿放置曲面的交互式工具”，*ACM SIGGRAPH* 计算机图形学会议论文集，第 209–218 页，1995年 doi: 10.1145/218380.218444[19] D. Harmon、D. Panozzo、O. Sorkine 和 D. Zorin，“干涉感知几何建模”，*ACM* 图形学汇刊，第 30 卷，第 6 期，第 1 页，2011年 doi: 10.1145/2070781.2024171[20] M. Li、Z. Ferguson、T. Schneider、T. Langlois、D. Zorin、D. Panozzo、C. Jiang 和 D. M. Kaufman，“增量势接触：无交叉且无反转的大变形动力学”，*ACM* 图形学汇刊，第 39 卷，第 4 期，2020年 doi: 10.1145/3386569.3392425[21] Z. Ferguson、M. Li、T. Schneider、F. Gil-Ureta、T. Langlois、C. Jiang、D. Zorin、D. M. Kaufman 和 D. Panozzo，“无交叉刚体动力学”，*ACM* 图形学汇刊，第 40 卷，第 4 期，第 1–16 页，2021年 doi: 10.1145/3476576.3476773[22] M. Li、D. M. Kaufman 和 C. Jiang，“余维增量势接触”，*ACM* 图形学汇刊，第 40 卷，第 4 期，2021年 doi: 10.1145/3450626.3459767[23] S. Yamamoto 和 T. Matsuoka，“流场中刚性和柔性纤维动态模拟方法”，《化学物理杂志》，第 98 卷，第 1 期，第 644–650 页，1993年 doi: 10.1063/1.464607[24] ——，“剪切流中纤维悬浮液的动态模拟”，《化学物理杂志》，第 102 卷，第 5 期，第 2254–2260 页，1995年 doi: 10.1063/1.468746[25] D. Das 和 D. Saintillan，“球形颗粒在 Quincke 旋转下的电流体动力学相互作用”，《物理评论 *E*》，第 87 卷，第 4 期，第 1–14 页，2013年 doi: 10.1103/PhysRevE.87.043014[26] B. Delmotte、E. Climent 和 F. Plourabou´e，“低雷诺数下应用于柔性纤维和主动丝状体的珠子模型通用表述”，计算物理学杂志，第 286 卷，第 14–37 页，2015年 doi: 10.1016/j.jcp.2015.01.026[27]E. Corona、L. Greengard、M. Rachh 和 S. Veerapaneni，“三维斯托克斯流中刚体的积分方程表述”，计算物理学杂志，第 332 卷，第 504–519 页，2017年 doi: 10.1016/j.jcp.2016.12.018[28] L. Lu，“用于大规模直接血流模拟的并行接触感知算法”，博士学位论文，纽约大学库朗数学科学研究所，2019年。[29] W. Yan、H. Zhang 和 M. J. Shelley，“主动球柱体集合中的碰撞应力计算：快速通用几何方法的应用”，《化学物理杂志》，第 150 卷，第 6 期，2019年 doi: 10.1063/1.5080433[30]W. Yan、E. Corona、D. Malhotra、S. Veerapaneni 和 M. Shelley，“颗粒斯托克斯悬浮液的可扩展计算平台”，计算物理学杂志，第 416 卷，第 109524 页，2020年 doi: 10.1016/j.jcp.2020.109524[31] L. Bystricky、S. Shanbhag 和 B. Quaife，“致密刚性颗粒悬浮液的稳定无接触时间步进”，《国际数值方法：流体》，第 92 卷，第 2 期，第 94–113 页，2020年 doi: 10.1002/fld.4774[32] W. Yan、S. Ansari、A. Lamson、M. A. Glaser、R. Blackwell、M. D. Betterton 和 M. Shelley，“迈向马达驱动细胞骨架集合的细胞尺度模拟”，*eLife*，第 11 期，第 e74160 页，2022年 doi: 10.7554/eLife.74160[33] R. Kohl、E. Corona、V. Cheruvu 和 S. Veerapaneni，“用于模拟斯托克斯流中杰纳斯颗粒悬浮液的快速准确求解器”，第 1–24 页，2021年 doi: 10.48550/arXiv.2104.14068[34] L. Lu、M. J. Morse、A. Rahimian、G. Stadler 和 D. Zorin，“血管网络中真实体积分数红细胞流的可扩展模拟”，国际高性能计算、网络、存储与分析会议，2019年 doi: 10.1145/3295500.3356203[35] L. Bystricky，“利用边界积分方程对刚性颗粒悬浮液进行无接触模拟”，博士学位论文，佛罗里达州立大学。ISBN 9780438447769，2018年。

[36] L. Lu、A. Rahimian 和 D. Zorin，“颗粒斯托克斯悬浮液的接触感知模拟”，计算物理学杂志，第 347 卷，第 160–182 页，2017年 doi: 10.1016/j.jcp.2017.06.039[37] S. Boyd 和 L. Vandenberghe，凸优化，2009年 doi: 10.1142/9789814412520 0010[38] V. J. Lumelsky，“线段间距离的快速计算”，信息处理快报，第 21 卷，第 2 期，第 55–61 页，1985 doi: 10.1016/0020-0190(85)90032-8[39]Ondrej，“两条线段之间的最短距离快速计算（n 维）”，MATLAB Central 文件交换平台，检索于2022年5月4日，https://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/49502-fast-shortest-distance-between-two-line-segments-in-n-dimensions.[40] A. Fischer，“一种特殊的牛顿型优化方法”，优化，第 24 卷，第 3-4 期，第 269–284 页，1992 doi: 10.1080/02331939208843795[41]Y. H. Dai 和 R. Fletcher，“用于大规模盒约束二次规划的投影 Barzilai-Borwein 方法”，数值数学，第 100 卷，第 1 期，第 21–47 页，2005年 doi: 10.1007/s00211-004-0569-y[42] R. Fletcher，“论 Barzilai-Borwein 方法”，载于优化与控制及其应用，L. Qi、K. Teo 和 X. Yang 编。马萨诸塞州波士顿：Springer 美国，2005年 doi: 10.1007/b104943。ISBN 978-0-387-24255-2，第 235–256 页。[43] H. Doi、K. Z. Takahashi、K. Tagashira、J. ichi Fukuda 和 T. Aoyagi，“机器学习辅助分析液晶聚合物的复杂局部结构”，《科学报告》，第 9 卷，第 1 期，第 1–12 页，2019年 doi: 10.1038/s41598-019-51238-1[44] P. E. Gill、W. Murray 和 M. A. Saunders，“SNOPT：一种用于大规模约束优化的序列二次规划算法”，《*SIAM* 评论》，第 47 卷，第 1 期，第 99–131 页，2005年 doi: 10.1137/S0036144504446096