

Voronoi 图在移动粒子半隐式法中的应用

周子棋, 孙一颀, 孙中国, 席光
(西安交通大学能源与动力工程学院, 710049, 西安)

摘要: 为了优化移动粒子半隐式法的空间拓扑关系相关算法, 将 Voronoi 图应用于移动粒子半隐式法(MPS)的邻居粒子搜索、表面粒子判定及粒子迁移 3 个关键环节。通过构建粒子 Voronoi 图并利用其拓扑关系层级进行邻居粒子搜索; 针对表面粒子识别问题, 提出了基于 Voronoi 图单元结构的判别方法; 结合 Lloyd 松弛法与格林-高斯公式, 推导出基于 Voronoi 图的粒子迁移方法。结果表明: 相较于传统全配对方法, 基于 Voronoi 图的粒子搜索可使效率提升 159 倍以上; 相较于传统数密度方法, 基于 Voronoi 图的粒子判断方法更准确, 计算效率是几何判别法的 43.3 倍; 相较于传统粒子迁移方式, 基于 Voronoi 图的粒子迁移能够有效减小系统扰动, 在保持自由液面的光滑性与无重叠特性的同时, 计算效率可达 6 倍以上。综上所述, Voronoi 图良好的空间分割特性在移动粒子半隐式法中具有良好的应用前景。

关键词: Voronoi 图; MPS 法; 表面粒子判定; 粒子迁移; 邻近粒子搜索

中图分类号: O242; TP301.6 **文献标志码:** A

DOI: 10.7652/xjtuxb202605011 **文章编号:** 0253-987X(2026)05-0111-09

Applications of Voronoi Diagram in the Moving Particle Semi-Implicit Method

ZHOU Ziqi, SUN Yijie, SUN Zhongguo, XI Guang

(School of Energy and Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

Abstract: To optimize the algorithms for establishing and analyzing spatial topology in the moving particle semi-implicit (MPS) method, the Voronoi diagram to three key components is applied: neighbor particle search, surface particle detection, and particle shifting. The specific approaches are as follows: a particle Voronoi diagram is constructed to facilitate neighbor particle search by leveraging its inherent topological relationships; a novel method based on Voronoi cell structure is proposed to address the challenge of surface particle detection; and a particle shifting scheme derived from the Voronoi diagram is developed by integrating the Lloyd relaxation algorithm with the Green-Gauss formula. The results demonstrate that: the Voronoi-based particle search achieves an efficiency improvement of over 159 times compared to the traditional all-pair search method; the Voronoi-based surface particle detection is more accurate than the conventional particle number density method and computes 43.3 times faster than the geometric method; furthermore, the Voronoi-based particle shifting effectively reduces system disturbance while

收稿日期: 2025-08-14。 作者简介: 周子棋(1996—), 男, 博士生; 孙中国(通信作者), 男, 教授, 博士生导师。 基金项目: 国家资助博士后研究人员计划项目(GZB20240596); 陕西省自然科学基金基础研究计划资助项目(2025JC-YBQN-574); 光合基金 A 类资助项目(202407014748)。

网络出版时间: 2025-11-19

网络出版地址: <https://link.cnki.net/urlid/61.1069.T.20251119.0919.002>

preserving the smoothness and non-overlapping characteristics of the free surface, also yielding a computational efficiency advantage exceeding 6 times compared to traditional shifting approaches. In conclusion, the proficient spatial partitioning properties of the Voronoi diagram present promising potential for its application within the MPS framework.

Keywords: Voronoi diagram; MPS method; surface particle detection; particle shifting; neighboring particles searching

光滑粒子流体动力学 (SPH)^[1-2] 和移动粒子半隐式法 (MPS)^[3-4] 属于拉格朗日无网格粒子方法。这类方法的计算域被离散为粒子, 这些粒子携带物理量进行移动, 不存在固定的拓扑关系, 粒子之间的作用采用核函数进行建模^[5]。SPH 和 MPS 较为相似^[6], 都具有处理运动边界^[7]、大变形^[8-9]、自由面破碎^[10]、非定常计算^[11-12]等优势。但是, 由于没有固定的拓扑关系, 每次计算完粒子的运动后都需要重新计算粒子之间的拓扑关系 (即邻居粒子或支持域内粒子) 才能推进下一步计算。因此, 计算效率是粒子方法的问题之一^[13]。支持域内粒子由于非定常运动导致分布不均, 因此需要粒子均匀分布的各类算子如梯度、散度、拉普拉斯算子等的误差增加, 计算精度和稳定性随之劣化^[14]; 粒子进行非定常运动时, 边界条件也需要实时计算, 尤其是自由面边界则需要每个时间步内重新判定^[15]。

Voronoi 图也称 Voronoi 剖分, 是一种基于空间划分的几何结构, 可以将二维或三维空间划分为互不重叠的子域, 高效地描述空间临近关系和局部适应复杂几何, 从而用于复杂几何下的高精度数值计算^[16-18]。由于这种特性, 在无网格方法中, Voronoi 图被用于估算粒子所占据的体积大小^[19], 并根据质心松弛算法, 得到均匀的粒子初始布置。在此基础上, 因为其良好的空间分割特性, 也用于在并行计算中进行动态的负载均衡^[20-22]。另外, 也有学者利用该图的拓扑结构改良 SPH 得到 Voronoi 粒子动力学方法 (VPH) 方法^[23], 或是结合 VPH 与 SPH 进行耦合计算^[24-25]。

由于 Voronoi 图是基于位置点构建的拓扑关系, 因此, 将粒子方法中的粒子点代替位置点构建对应的 Voronoi 图是可行的。在这类拓扑关系下, 很容易可以通过任意 Voronoi 单元来访问其共线 (平分线) 或共面 (平分面) 单元, 这非常有利于开展其局部几何特征的分析。单元的形状和大小是被自身位置点和邻居位置点所定义出来的, 这和粒子方法中邻居粒子关系及其数密度等概念有契合的地方。例如, MPS 中, 反映局部粒子疏密程度的粒子数密度

可为邻居粒子进行核函数积分。不同的是, Voronoi 单元仅仅受其本身和其最近邻单元 (共线) 影响, 因此基于 Voronoi 的局部拓扑分析会比传统 SPH 和 MPS 在支持域范围内更加紧致, 更能反映粒子分布的局部特征。

在 Zhou 等^[26]的工作中, 将 Voronoi 图引入到 MPS 与任意欧拉拉格朗日有限体积法的耦合中。分析发现, 该图可以高效地分析局部拓扑关系, 有利于粒子类方法改善局部粒子分布不均、粒子类型判断错误等问题。在粒子法中, 邻居粒子搜索所得到的支持域也是基于局部几何所构建的, 因此也可以使用 Voronoi 图进行加速计算, 从而在构建一次 Voronoi 图后, MPS 无需再进行原始拓扑关系计算。综上, 本文主要将从邻居粒子搜索、表面粒子判断以及粒子迁移这 3 方面进行研究。

1 MPS 方法

移动粒子半隐式法最早由 Koshizuka 和 Oka 教授^[3]提出。该方法是一种典型的拉格朗日无网格方法, 基于粒子携带物理量模拟流动过程。通常来说, 粒子类无网格方法采用核函数对粒子间相互作用进行建模。在任意流体粒子点, 展开支持域, 利用支持域内流体粒子的物理变量, 计算其一阶和二阶导数, 从而完成控制方程的离散和求解。

移动粒子方法假设每个粒子表征流体微团, 类似流体质点的概念。基于配点法的思想将流体表征成携带物理量信息的离散粒子, 离散粒子概念符合连续介质模型。通过建立粒子间相互作用模型, 采用核函数作为权函数近似得到粒子自身物理量。不可压缩连续方程和动量方程分别如下

$$\frac{D\rho}{Dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1)$$

$$\rho \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{f} \quad (2)$$

式中: ρ 为流体密度; t 为时间; $\mathbf{u}$ 为流体速度矢量; p 为压力; $\mathbf{f}$ 为体积力; μ 为流体动力黏性系数; ∇^2 为 Laplace 算子; ∇ 为 Hamilton 算子。

核函数的概念来源于插值方法,是对离散点大量存在的空间某处进行插值所用的函数。对于 SPH 和 MPS 而言,核函数的作用类似,但也明显区别:SPH 模拟的是可压缩流体,单个粒子的密度由周围粒子的核函数积分所得;而在 MPS 中,核函数仅仅用于计算微分算子和部分插值计算。因此,MPS 的核函数相比 SPH 来说,降低了对核函数的选择要求^[27]。

对于 MPS 方法,核函数通常采用反比例函数。核函数作用权 $W(r)$ 形式为

$$W(r) = \begin{cases} \frac{r_c}{r} - 1, & r < r_c \\ 0, & r \geq r_c \end{cases} \quad (3)$$

式中: r 为粒子间距; r_c 为粒子影响半径。在 MPS 方法中,利用核函数计算一阶和二阶导数算子,公式分别为

$$\langle \nabla \varphi \rangle_i = \frac{d}{n^0} \sum_{j \neq i} \frac{\varphi_j - \varphi_i}{|\mathbf{r}_{ij}|^2} \mathbf{r}_{ij} w_{ij} \quad (4)$$

$$\langle \nabla^2 \varphi \rangle_i = \frac{2d}{\lambda n^0} \sum_{j \neq i} (\varphi_j - \varphi_i) w_{ij} \quad (5)$$

式中: φ 是任意标量; n^0 是粒子数密度常数,定义为在粒子均匀分布时的 $n^0 = \sum_{j \neq i} W(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|)$, $\mathbf{r}_i$ 和 $\mathbf{r}_j$ 分别是粒子 i, j 的位置矢量; λ 是近似系数; d 表示维度; 粒子之间是核函数贡献 $W(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|)$ 可简化为 w_{ij} 。

MPS 求解的压力泊松方程如下

$$\nabla^2 p_i^{k+1} = (1 - \gamma) \frac{\rho}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}_i^* + \gamma \frac{\rho}{\Delta t^2} \frac{n^0 - n_i^*}{n^0} \quad (6)$$

式中: Δt 为时间步长; $\mathbf{u}_i^*$ 和 n^* 为显式计算后的临时速度和粒子数密度; γ 为混合源项比例,一般取 0.02; p_i^{k+1} 表示粒子 i 在推进一个时间步长后的压力。

2 Voronoi 图介绍

Voronoi 图又称 Voronoi 剖分,由将空间分成凸单元的粒子集生成。在 Voronoi 中,空间被划分为若干子域,在这些子域中,它满足

$$V_i = \{x: \forall j \neq i, d(x, p_i) \leq d(x, p_j)\} \quad (7)$$

式中: V_i 表示给定 Voronoi 单元(即一个子域); $d(x, p_i)$ 表示从任意位置到 Voronoi 位置点的距离。

根据 Voronoi 图的定义,可以发现其具有一个重要性质:共边单元的位置点之间连线与该边垂直,由于这个特性,其在数值计算中也有重要应用。在数值计算中,Voronoi 图也可以看作是保证凸几何结构的多边形网格划分。

生成 Voronoi 图一般分为直接和间接方法两类:直接法,顾名思义即是直接从有限点集中生成

Voronoi 图;间接法则利用 Voronoi 图和德劳内(Delaunay)三角网格的对偶性质,先生成三角网格,再计算对偶关系得到(对偶关系见图 1)。本文采用的是直接方法中的扫描线算法^[28],其计算时间复杂度为 $O(N \lg N)$,其中 N 为参与计算的粒子个数。

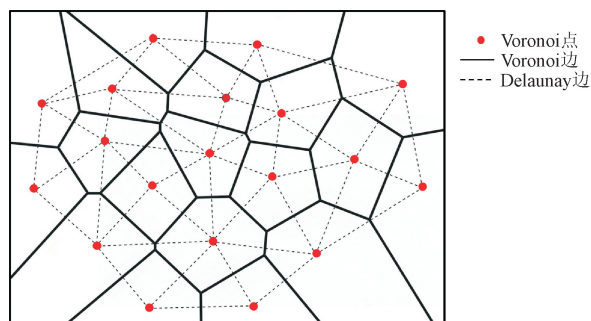


图 1 Voronoi 图示意图

Fig. 1 Schematic diagram of Voronoi diagram

3 Voronoi 图在 MPS 法中的应用

根据 Voronoi 图的性质,作者团队在之前的工作中开发了 IC-MP-MVM 求解器^[26],成功地模拟了两相流问题,研究将 MPS 方法也进行了 Voronoi 划分,从而和有限体积方法进行了耦合计算。然而,Voronoi 图不仅仅能进行计算域的拓扑连接,其本身的一些性质也可以用来优化 MPS 方法的计算。本文提出了以下 3 个 Voronoi 图的应用方案,分别为基于 Voronoi 的邻居粒子搜索、Voronoi 表面粒子判定以及 Voronoi 粒子迁移技术,分别对应方法基础、边界条件以及方案稳定性 3 个方面。

3.1 邻居粒子搜索

粒子方法如 SPH 和 MPS 等,多用均匀背景网格、哈希排序等方法来高效建立粒子与粒子之间的拓扑关系(即邻居粒子列表)。其最优时间复杂度可以是 $O(N)$,而 Voronoi 图的构造时间复杂度为 $O(N \lg N)$,因此直接采用 Voronoi 图进行邻居粒子搜索并不理想。

由于在 MPS 或者 SPH 方法中引入了 Voronoi 图进行粒子质量估计、粒子松弛、表面粒子判断、粒子迁移等操作均需要每步重新生成图。因此,在生成的过程中,已经付出了相应的计算量进行拓扑关系的构造,故而可以利用已构建的拓扑关系进行邻居粒子搜索,这样可以省略其他搜索方法来获得较好的计算效率并减少内存占用。

如图 2 所示,对于红色粒子,其邻居网格可以认为是 $L_1 \sim L_4$ 共 4 个层级。

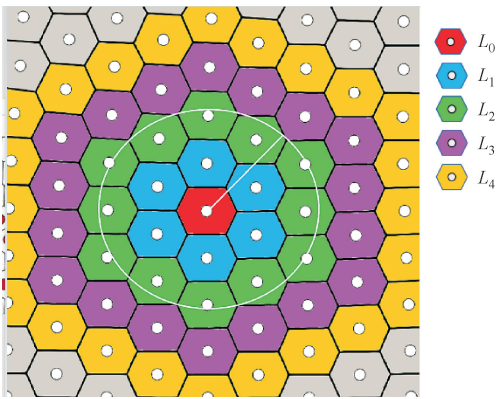


图 2 Voronoi 邻居粒子搜索层级示意图

Fig. 2 Schematic map of Voronoi based neighbor particle searching

为更好地说明该方法原理,定义对于任意网格,有函数 $NV(L_i)$ 表示获取第 i 层网格的所有邻居网格。对于目标网格自身的第一层邻居网格

$$L_1 = NV(U_0) \tag{8}$$

式中: U_0 表示起始搜索节点。对于第二层网格有

$$L_2 = \left(\bigcup_{U \in L_1} NV(U) \right) / \left(\bigcup_{i=0}^1 L_i \right) \tag{9}$$

式中: U 表示搜索节点。即搜索隶属于 L_1 层网格的所有邻居网格,并从中删去所有隶属于 L_1 本身的网格,从而得到 L_2 层网格集合。

由此可推任意层网格为

$$L_i = \left(\bigcup_{U \in L_{i-1}} NV(U) \right) / \left(\bigcup_{j=0}^{i-1} L_j \right) \tag{10}$$

在此基础上,执行邻居粒子搜索可以直接访问粒子 i 所在的 Voronoi 单元的 N 层(一般小于 3)邻居网格,即可得到一个完整的支持域。这部分的计算主要在于对于指针的重复性比较和内存寻址,计算开销较小,相比于构造 Voronoi 图来说可以忽略不计。

对于给定支持域,仅仅需要调用其部分层级的邻居网格列表即可得到相应的邻居粒子列表。为保证邻居粒子列表的可靠性,对于 $2.1l_0$ (l_0 为初始粒子间距)的支持域,通常选用 L_3 及以下的层级网格进行邻居粒子判定,即邻居网格列表为 $\bigcup_{j=1}^3 L_j$ 。

单核 Voronoi 加速效果和并行加速效果如表 1 和表 2 所示。

表 1 单核处理器下 Voronoi 搜索用时对比

Table 1 Voronoi searching time cost comparison with single CPU core

粒子数	全配对时间/ms	Voronoi 搜索(仅搜索)		Voronoi 搜索(包含构造)	
		时间/ms	加速比	时间/ms	加速比
50 000	250	16	15.62	47	5.31
100 000	4 031	63	63.98	156	25.84
200 000	106 859	265	403.2	672	159.01

表 2 Voronoi 搜索并行计算用时

Table 2 Voronoi searching parallel computing time comparison

线程数	全配对法时间/ms	Voronoi 搜索时间/ms
1	106 859	265
2	66 187	131
4	28 860	70
8	14 094	37

表 1 和表 2 表明:相比于传统全配对搜索,加速效果十分明显。在 20 万粒子数的情况下,仅搜索部分效率提升至 403.2 倍,如果将 Voronoi 构造包含在内,也有 159.01 倍的提升。另外,该方法的并行效率也较好,在给定线程区间可以看作是线性效率提升。

本文并未引入并行 Voronoi 图生成技术,因此没有测试包含构造在内的并行加速效果。但据相关文献^[29]说明,分区并行的效率较高,在超过 512 个分

区时的强扩展性可达 57%。因此,并行构造 Voronoi 图不会拖累整体计算效率,本方法可以推广至大规模计算。

3.2 表面粒子判定

由于 MPS 方法是全拉格朗日方法,自由面直接表示为若干流体粒子。由自由面的性质可知,粒子压力应该保持为 0,从而使得计算满足自由面边界条件。与此同时,压力泊松方程组的系数矩阵在自由面粒子上表现为多个零项,简化了该大型稀疏系数矩阵的求解。以上两点为表面粒子判定的意义。准确的表面粒子判定不仅可以准确还原物理过程,而且可以避免方程求解存在错误^[30-31]。

经典的表面粒子判定方法根据表面粒子位于流体区域边界上这一性质进行。由于表面粒子的支持域内只有部分区域存在粒子,其计算出的粒子数密度将会小于流体内部粒子的所保持的粒子数密度常数 n^0 。利用这一性质,可以构造判别式来区分内部

粒子和表面粒子,如下式

$$\langle n \rangle_i^* < \beta n^0 \quad (11)$$

式中: β 为表面粒子判定常数。根据上文的分析, β 应为一个 0 ~ 1 之间的常数, 本文取 $\beta = 0.95$ 。当被判别粒子满足该表达式时, 即被认为是表面粒子。

然而, 该判别式的准确性完全取决于 β 的合适取值。由于在 MPS 计算中, 流体粒子的剧烈运动使个别粒子在某一时刻的数密度会满足判别式, 导致被误判成表面粒子, 从而严重影响了计算的稳定性和压力计算的准确性。对于多相 MPS 计算, 由于相界面需要压力插值, 误判的内部流体粒子常常会引起巨大的压力振荡, 这使得多相 MPS 计算中对于表面粒子判定的要求更为严苛。通常来说, 基于几何方法的表面粒子判定更为准确, 如 Shibata 等的光照法^[32]。

本文基于 Voronoi 图的单元信息, 计算其形心 s_i 与位置点 p_i 的距离 r_c 为

$$r_c = |p_i - s_i| \quad (12)$$

如图 3 所示, 3 类粒子的判断依据如下:

- (1) 内部粒子, 应满足单元封闭和 $r_c \leq \gamma_{\text{spd}} l_0$ (γ_{spd} 为经验参数);
- (2) 表面粒子, 应满足单元不封闭或 $r_c > \gamma_{\text{spd}} l_0$;
- (3) 次表面粒子, 应满足其单元与表面粒子单元相邻。

对于一般情况, γ_{spd} 取 0.1。

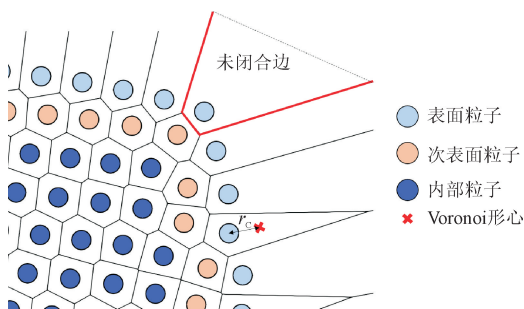


图 3 Voronoi 表面粒子判定方法

Fig. 3 Voronoi based surface particle detection method

不同方法的判定效果对比见图 4, 其准确性与光照法类似, 优于原始判定方法。在此基础上, 对比了光照法和本文方法对于单个算例(7 200 个粒子)的计算用时, 取 100 次计算后的累计时间: 光照法^[32]需要 2 859 ms, 而 Voronoi 判别法用时为 63 ms, 其效率大约是光照法的 43.3 倍。

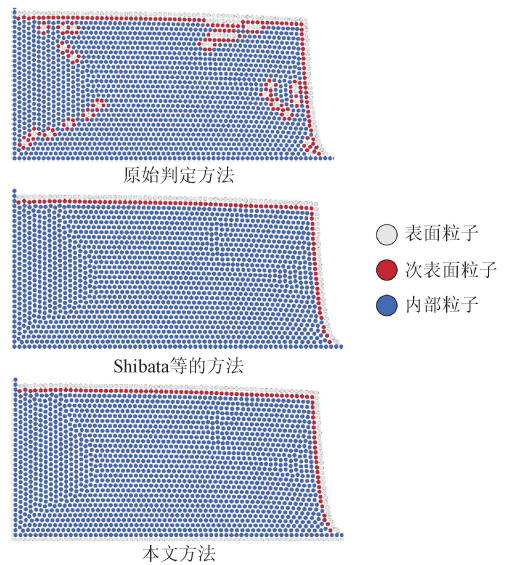


图 4 不同表面粒子判定方法对比

Fig. 4 Comparison of different surface particle detection methods

3.3 粒子迁移

在 SPH 和 MPS 中, 常使用粒子迁移(PS)来提高粒子分布均匀性从而达到恢复算子精度和提高计算稳定性的作用。粒子迁移模型基于菲克第一定律, 将高浓度粒子转移到低浓度粒子区域, 以达到整体的均匀性。菲克第一定律表示为

$$\mathbf{J} = -D \nabla C \quad (13)$$

式中: $\mathbf{J}$ 为通量; ∇C 为浓度梯度; D 为扩散系数。将其应用到迁移中, 可得

$$\delta \mathbf{r}_i = -C_{\text{shift}} d_0^2 \nabla C_i \quad (14)$$

式中: $\delta \mathbf{r}_i$ 为目标粒子的位移量; C_{shift} 为迁移系数; d_0 为迁移距离参数。对于某一粒子的浓度 C_i 和浓度梯度 ∇C_i 分别为

$$C_i = \frac{1}{n_0} \sum_{i \neq j} w_{ij} \quad (15)$$

$$\nabla C_i = \frac{1}{n_0} \sum_{i \neq j} \nabla w_{ij} \quad (16)$$

在实际计算中, 由于粒子在自由面附近的支持域被截断, 导致粒子在法向量方向具有较大的浓度梯度, 产生远离内部流体的较大位移, 从而影响计算的稳定性。故而, 在此基础上, 针对表面和次表面粒子等支持域不完整的粒子, 修正的迁移公式^[15]为

$$\delta \mathbf{r}_i = -C_{\text{shift}} d_0^2 (\mathbf{I} - \mathbf{n}_i \otimes \mathbf{n}_i) \cdot \nabla C_i \quad (17)$$

式中: $\mathbf{n}_i$ 为粒子法向量; $\mathbf{I}$ 为单位矩阵。经过该式修正, 表面粒子和次表面粒子仅在自由面切向存在位移, 故保持了自由面计算的稳定性。

基于非克定律的浓度梯度粒子迁移方法需要一个相对完整的支持域来得到正确的迁移方向和适当的迁移量。矛盾的是:粒子迁移的目的是改善粒子分布不均,然而粒子分布不均又会导致不准确的粒子迁移。在粒子分布不均程度较轻微的时候,粒子迁移是有效的。当粒子分布较为畸形,难以保证支持域完整性的时候,粒子迁移也无法纠正该问题。因此,本文利用 Voronoi 自身的性质,提出了新的粒子迁移方法,以下称为 VPS(Voronoi particle shifting)。

基于该方法,本文假定:Voronoi 位置点在质心处时是各向同性的(即最优粒子分布情况)。由于单元形状只跟最邻居粒子有关,因此 Voronoi 单元的形状很大程度上反映了粒子在局部空间的均匀性。将 Voronoi 位置点移动到形心处,得到的整体单元分布具有较规则的形态^[33]。对于核函数来说,周围支持域采样点分布也更加规则,具有较好的各向同性。

参照 PS 的方法,有

$$\delta \mathbf{r}_i = C_{\text{shift}}(\mathbf{p}_i - \mathbf{s}_i) \quad (18)$$

式中: $\mathbf{p}_i$ 和 $\mathbf{s}_i$ 分别为 Voronoi 的位置点以及形心位置。式(18)可以看作是在每个时间步执行一次 Lloyd 松弛^[33]。

VPS 对于单个粒子及其支持域来说,保证了粒子自身处于支持域各向同性最优的位置。然而对于整体的粒子分布均匀性来说是无法保证的。因此,本文进一步提出了基于局部邻居粒子的粒子迁移方法,以下称为 NCVPS(neighbored cells Voronoi particle shifting)。同样地,借助 Voronoi 单元获得了粒子的局部拓扑关系。利用格林高斯公式,其位置梯度可以是

$$\nabla \mathbf{r} = \frac{1}{S} \sum_j A_{ij} \mathbf{r}_{ij} \quad (19)$$

式中: S 为单元对应的面积或体积; A_{ij} 为单元公共线长度或面积; $\mathbf{r}_{ij}$ 为邻居单元的相对位置矢量。

在此基础上,辅以特征尺寸(粒子直径 l_0)和自由参数 C_{shift} (取 0.01)可得

$$\partial \mathbf{r} = \frac{C_{\text{shift}} l_0}{S} \sum_j A_{ij} \mathbf{r}_{ij} \quad (20)$$

该方法具有较强的物理含义:首先,NCVPS 是基于精确的几何信息而非 PS 的函数插值得到的;以相邻粒子间的交界面作为量化局部相互作用的自然权重,并引入网格单元面积作为内在的归一化参数,从而构建一个表征粒子分布稀疏程度的无量纲指标;对于一个分布均匀的局部粒子集合,式(20)都

会得到趋于 0 的值,任何的不均匀性在通过式(20)计算都会指向一个需要修正的方向。相比于传统的 PS,其优势在于无需完整核函数采样,并且适用区域更加紧致(仅目标粒子和最邻居粒子);相比于 VPS,其优势在于计算量较小(无需形心计算过程),且过程较为平滑,避免了形心位置和粒子本身差异过大导致的位置跳跃。

同样地,在自由表面时消除法向分量,以稳定自由表面计算问题,公式为

$$\delta \mathbf{r}'_i = \delta \mathbf{r} \cdot (\mathbf{I} - \mathbf{n}_i \otimes \mathbf{n}_i) \quad (21)$$

无论是哪种 PS 技术,都需要对新的位置处插值得到新的物理量,公式为

$$\varphi'_i = \varphi_i + \nabla \varphi_i \cdot \delta \mathbf{r}_{ij} \quad (22)$$

式中: φ_i 、 φ'_i 分别为迁移前、后的物理量。

静水算例是一个用于测试算法稳定性和动量守恒性质的经典算例,具体为:在 $0.5 \text{ m} \times 1.0 \text{ m}$ 的水池有 0.5 m 深的水,初始时刻时并不直接赋予压力,相当于 0.5 m 高度的水在初始表压为 0 的情况下,通过 MPS 方法计算形成正确的静水压力场。通过统计其所有粒子的总动能,可以分析不同 PS 方法对于整个计算的额外扰动效果。定义总动能 E_k 为

$$E_k = \sum_i \frac{1}{2} m_i u^2 \quad (23)$$

式中: m_i 和 u 分别是粒子 i 的质量、速度矢量的模。

在经过长时间计算后, E_k 应尽可能趋于 0。图 5 为在到达静水状态时的粒子和压力分布,可以看到 3 种方法都具有良好的粒子分布和压力分布。图 6 展示 3 种方法下总动能的衰减曲线。相比于 OPS 方法,VPS 和 NCVPS 方法都可以使系统总动能降低到更低水平。这说明了 VPS 和 NCVPS 方法在动态稳定过程中对系统的扰动更小。对比静水压力与精确解的平均误差,OPS 方法为 1.27%、VPS 方法为 1.23%、NCVPS 方法为 1.19%。无论何种 PS 方法,其静水压力误差均较小,没有明显差距。

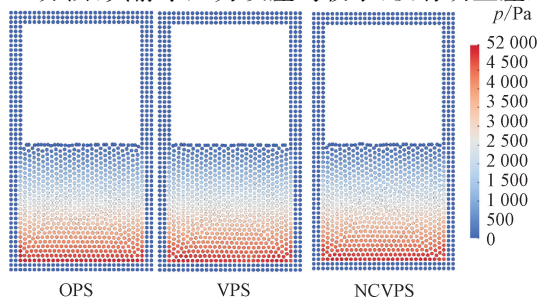


图5 不同粒子迁移方法在静水算例中粒子分布和压力

Fig. 5 Particles and pressure distribution for different particle shifting methods in hydrostatic cases

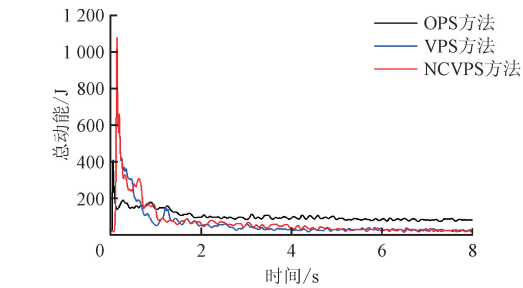


图 6 不同粒子迁移方法在静水算例中总动能衰减曲线
Fig.6 Total kinetic energy decay curves for different particle shifting methods in hydrostatic cases

对于具有自由面大变形的动态计算来说, NCVPS 和 VPS 相比于 OPS,有助于在多相流求解时提高计算的稳定性。图 7 为两相溃坝算例,在使用修正矩阵的情况下,采用不同粒子迁移方法计算到时间为 0.4 s 的粒子分布情况。由于修正矩阵方法对粒子分布十分敏感,因此不采用的情况下,计算迅速发散。仅仅对内部粒子使用 PS 的情况下,虽然能保证计算稳定进行,但是可以观察到不平滑的自由表面。使用 OPS 方法则可以改善自由表面。使用 VPS 方法的结果和 OPS 类似,存在和 OPS 类

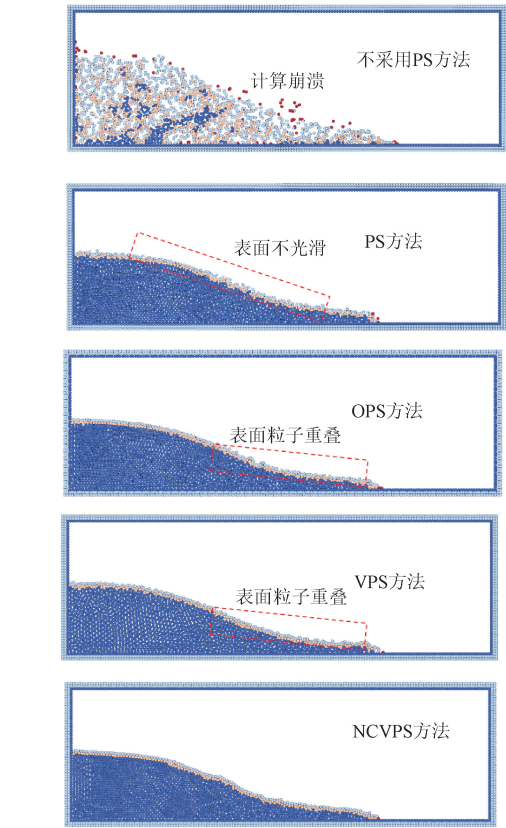


图 7 不同粒子迁移方法在溃坝算例中的粒子分布
Fig.7 Particle distribution in the dam break case using different particle shifting methods

似的自由表面粒子重叠现象。在使用 NCVPS 的情况,自由表面平滑且没有粒子重叠。

在此基础上,NCVPS 还有计算量较小的优势。如图 8 所示,本文测试了在 100 个粒子上执行 10 000 次不同 PS 方法的计算用时,VPS 和 NCVPS 方法相比于传统 OPS 方法减少了 84.6%~86.8%的计算时长,获得了 6 倍以上的效率提升。

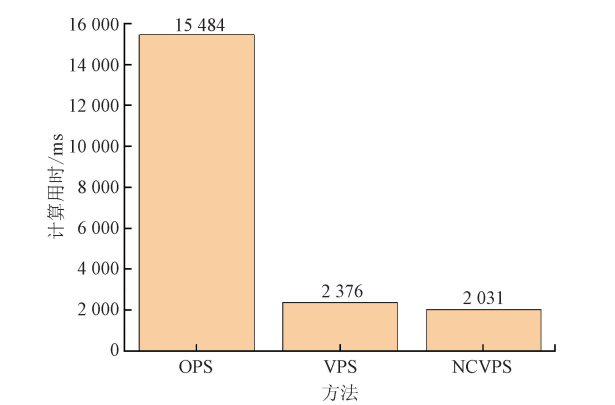


图 8 不同粒子迁移方法计算用时对比
Fig.8 Comparison of computation time for different particle shifting methods

无论何种 PS 方法,都可以帮助 MPS 方法维持稳定计算。不同 PS 方法的特征对比如表 3 所示,3 种方法从原理上是完全不同的,其所利用到的拓扑关系或支持域也较大区别;VPS 和 NCVPS 相比于传统 PS 方法具有更小支持域和更高的计算效率。

表 3 不同 PS 方法特征对比			
Table 3 Characteristics comparison of different PS methods			
方法	迁移量计算	支持域范围	计算量
OPS	浓度梯度	完整搜索域	两次核积分(大)
VPS	自身形心位置差	仅自身	形心计算(小)
NCVPS	邻居粒子位置梯度	自身和最邻近	梯度计算(小)

4 结 论

本文将 Voronoi 图引入到移动粒子半隐式法中,通过数值实验,可以得到以下结论。

(1)构造了 Voronoi 图后进行邻居粒子搜索有较高的计算效率和并行扩展能力,其效率较原始方法提升 159 倍以上。

(2)基于 Voronoi 的表面粒子具有准确性强和计算效率高的优势,在同样的准确性下,计算效率是几何判别法的 43.3 倍。

(3)基于 Voronoi 的 VPS 和 NCVPS 方法可以替代原始 PS 或 OPS 方法。在减少系统扰动并改善表面粒子重叠现象的同时,VPS 和 NCVPS 方法的计算成本更低(约为 OPS 计算用时的 1/6)。

本文的 3 种方法也可以用于其他粒子类方法,如 SPH、离散单元法(DEM)等,来获得更好的计算稳定性和效率。本文的 3 个方法从原理上可以直接推广到三维计算,但考虑到三维 Voronoi 图的生成计算量和稳定性问题,还需进一步研究以证明三维推广的价值。

参考文献:

- [1] LUCY L B. A numerical approach to the testing of the fission hypothesis [J]. The Astronomical Journal, 1977, 82: 1013-1024.
- [2] GINGOLD R A, MONAGHAN J J. Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars [J]. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 1977, 181(3): 375-389.
- [3] KOSHIZUKA S, OKA Y. Moving-particle semi-implicit method for fragmentation of incompressible fluid [J]. Nuclear Science and Engineering, 1996, 123(3): 421-434.
- [4] KOSHIZUKA S, NOBE A, OKA Y. Numerical analysis of breaking waves using the moving particle semi-implicit method [J]. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 1998, 26(7): 751-769.
- [5] COLAGROSSI A, LANDRINI M. Numerical simulation of interfacial flows by smoothed particle hydrodynamics [J]. Journal of Computational Physics, 2003, 191(2): 448-475.
- [6] DUAN Guangtao, YAMAJI A, SAKAI M. An incompressible-compressible Lagrangian particle method for bubble flows with a sharp density jump and boiling phase change [J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2020, 372: 113425.
- [7] SUN Zhongguo, XI Guang, CHEN Xi. Mechanism study of deformation and mass transfer for binary droplet collisions with particle method [J]. Physics of Fluids, 2009, 21(3): 032106.
- [8] ADAMI S, HU X Y, ADAMS N A. A transport-velocity formulation for smoothed particle hydrodynamics [J]. Journal of Computational Physics, 2013, 241: 292-307.
- [9] ZHANG Chi, HU X Y, ADAMS N A. A generalized transport-velocity formulation for smoothed particle hydrodynamics [J]. Journal of Computational Physics, 2017, 337: 216-232.
- [10] JANDAGHIAN M, SHAKIBAEINIA A. An enhanced weakly-compressible MPS method for free-surface flows [J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2020, 360: 112771.
- [11] SUN Yijie, XI Guang, SUN Zhongguo. A generic smoothed wall boundary in multi-resolution particle method for fluid-structure interaction problem [J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2021, 378: 113726.
- [12] SUN Yijie, XI Guang, SUN Zhongguo. A fully Lagrangian method for fluid-structure interaction problems with deformable floating structure [J]. Journal of Fluids and Structures, 2019, 90: 379-395.
- [13] 张帅,解利军,郑耀. 基于移动粒子半隐式法的表面张力模拟 [J]. 计算力学学报, 2011, 28(3): 345-349.
- [13] ZHANG Shuai, XIE Lijun, ZHENG Yao. Simulation of surface tension force using moving particle semi-implicit method [J]. Chinese Journal of Computational Mechanics, 2011, 28(3): 345-349.
- [14] GOU Wenjin, ZHANG Shuai, ZHENG Yao. Implementation of the moving particle semi-implicit method for free-surface flows on GPU clusters [J]. Computer Physics Communications, 2019, 244: 13-24.
- [15] KHAYYER A, GOTOH H. Enhancement of stability and accuracy of the moving particle semi-implicit method [J]. Journal of Computational Physics, 2011, 230(8): 3093-3118.
- [16] MUÑOZ D J, SPRINGEL V, MARCUS R, et al. Multidimensional, compressible viscous flow on a moving Voronoi mesh [J]. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 2013, 428(1): 254-279.
- [17] GABURRO E. A unified framework for the solution of hyperbolic PDE systems using high order direct arbitrary-Lagrangian-Eulerian schemes on moving unstructured meshes with topology change [J]. Archives of Computational Methods in Engineering, 2021, 28(3): 1249-1321.
- [18] CHARTRAND C, PEROT J B. A method for generating moving, orthogonal, area preserving polygonal meshes [J]. Journal of Computational Physics, 2022, 454: 110940.
- [19] ZHOU J X, WEN J B, ZHANG H Y, et al. A nodal integration and post-processing technique based on Voronoi diagram for Galerkin meshless methods [J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2003, 192(35/36): 3831-3843.
- [20] FU Lin, HU Xiangyu, ADAMS N A. A physics-mo-

- tivated centroidal voronoi particle domain decomposition method [J]. *Journal of Computational Physics*, 2017, 335: 718-735.
- [21] EGOROVA M S, DYACHKOV S A, PARSHIKOV A N, et al. Parallel SPH modeling using dynamic domain decomposition and load balancing displacement of Voronoi subdomains [J]. *Computer Physics Communications*, 2019, 234: 112-125.
- [22] JI Zhe, FU Lin, HU X Y, et al. A Lagrangian inertial centroidal Voronoi particle method for dynamic load balancing in particle-based simulations [J]. *Computer Physics Communications*, 2019, 239: 53-63.
- [23] HEB S, SPRINGEL V. Particle hydrodynamics with tessellation techniques [J]. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 2010, 406(4): 2289-2311.
- [24] FERNANDEZ-GUTIERREZ D, SOUTO-IGLESIAS A, ZOHDI T I. A hybrid Lagrangian Voronoi-SPH scheme [J]. *Computational Particle Mechanics*, 2018, 5(3): 345-354.
- [25] FERNÁNDEZ-GUTIÉRREZ D, ZOHDI T I. Delta Voronoi smoothed particle hydrodynamics, δ -VSPH [J]. *Journal of Computational Physics*, 2020, 401: 109000.
- [26] ZHOU Ziqi, HAN Peidong, SUN Yijie, et al. Incompressible-compressible moving particle and moving Voronoi mesh method for multiphase flow [J]. *Journal of Computational Physics*, 2025, 537: 114062.
- [27] 张凯, 孙中国, 席光. 移动粒子半隐式法核函数特征对压力求解稳定性的影响 [J]. *西安交通大学学报*, 2019, 53(9): 1-6.
- ZHANG Kai, SUN Zhongguo, XI Guang. Influence of the kernel function characteristics on the stability of pressure solution of moving particle semi-implicit method [J]. *Journal of Xi'an Jiaotong University*, 2019, 53(9): 1-6.
- [28] FORTUNE S. A sweepline algorithm for Voronoi diagrams [J]. *Algorithmica*, 1987, 2(1): 153-174.
- [29] WU Guoqing, TIAN Hongyun, LU Guo, et al. ParVoro++: a scalable parallel algorithm for constructing 3D Voronoi tessellations based on kd-tree decomposition [J]. *Parallel Computing*, 2023, 115: 102995.
- [30] HAN Peidong, LIU Qixin, ZHANG Kai, et al. Enhanced Dirichlet boundary condition in MPS method for free-surface flow with negative pressure [J]. *Computers & Fluids*, 2023, 256: 105820.
- [31] 韩沛东, 刘启新, 周子棋, 等. 负压梯度下自由面流动模拟的无网格粒子法 Dirichlet 边界条件 [J]. *西安交通大学学报*, 2022, 56(8): 141-148.
- HAN Peidong, LIU Qixin, ZHOU Ziqi, et al. Dirichlet boundary conditions in meshless particle methods for free-surface flow simulation under negative pressure gradient [J]. *Journal of Xi'an Jiaotong University*, 2022, 56(8): 141-148.
- [32] SHIBATA K, MASAIE I, KONDO M, et al. Improved pressure calculation for the moving particle semi-implicit method [J]. *Computational Particle Mechanics*, 2015, 2(1): 91-108.
- [33] LLOYD S. Least squares quantization in PCM [J]. *IEEE Transactions on Information Theory*, 1982, 28(2): 129-137.

(编辑 亢列梅)