arXiv:2305.05315v1 [physics.comp-ph] 9 May 2023

一种用于质量扩散的最优输运有限粒子法

A. PANDOLFI[1], L. STAINIER[2] 和 M. ORTIZ[3]

Abstract. 我们基于一种时间离散的增量变分原理，提出了一类用于质量传输问题的无速度有限粒子方法。该原理结合了熵与粒子传输成本，其中传输成本由Wasserstein度量衡量。随后，将增量泛函进一步进行空间离散，表示为有限粒子，即具有固定有限宽度空间分布的粒子，且每个粒子携带固定质量。粒子的运动由传输成本与熵最大化之间的竞争决定：前者旨在使粒子保持静止，后者则旨在使粒子扩散，从而提高系统的熵。我们展示了如何通过变分地最小化控制增量泛函，确定粒子的最优宽度。利用这一变分原理，我们推导出粒子宽度、粒子数量与区域尺寸之间的最优标度关系。我们还讨论了实现方面的问题，包括利用粒子空间分布的高斯衰减，并采用快速最近邻搜索，以加速扩散力的计算。我们通过一个向球体内注入质量的测试问题，展示了有限粒子法的稳健性和多功能性。测试结果表明，该方法在任意空间维度下均具有无网格特性，能够重新分布质量粒子并追踪其随时间的演化；仅凭距离函数，即可满足一般区域的通量边界条件；同时还具有稳健的收敛特性。

1. Introduction

粒子方法在固体力学和流体力学中已得到广泛认可，例如光滑粒子流体动力学方法（SPH） [1, 2],物质点法 [3], 再生核粒子法[4], 修正光滑粒子法 [5], 修正光滑粒子流体动力学方法 [6], 最优传输无网格法（OTM） [7, 8], 位错单极子法 [9, 10], 以及其他方法。尽管粒子方法最初的发展往往缺乏系统性，但近年来，人们日益认识到粒子方法与最优传输之间存在协同联系（背景介绍参见例如 [11, 12, 13]），因为最优传输理论为粒子方法的构建提供了适当的数学基础；而且，

反过来，粒子方法也为最优传输问题提供了一种自然的离散化方式。

Benamou 和 Brennier 对可压缩欧拉流动问题的重新表述，体现了流动问题的基本结构：用质量密度和速度场两个场来描述问题，并要求二者在满足连续性方程约束的条件下共同使作用量积分最小化。具体而言，问题的离散化需要为质量密度和速度场制定离散规则。在 OTM 方法 [7, 8], 中，质量密度被离散为点质量，即粒子；速度场则通过对节点值进行协调插值来离散。文献 [15, 16, 17]已确立 OTM 的收敛性质；此外，文献 [7, 18, 19, 20, 21], 等还介绍了其在固体和流体流动中的应用，包括塑性和碎裂。

Fedeli 等人 [22] 将 OTM 方法应用于对流扩散问题。Jordan、Kinderlehrer 和 Otto 在其开创性工作中阐明了扩散问题与最优传输之间的联系 [23, 24, 25]。在 Fedeli 等人 [22] 的方法中，保留了 OTM 的双场结构，其中质量密度通过点质量进行离散，而速度场（对于扩散问题而言，其本质上具有熵性）则通过保形插值表示。最优传输方法应用于对流扩散问题时，一个特别强大的性质是它们在几何上精确：所有对流和体积更新都由增量传输映射精确计算。与此相反，迎风格式和欧拉描述方法对体积约束的处理并不精确，计算成本高昂且容易出现不稳定性。事实上，最优传输的几何结构（相关背景可参见 [26, 13]）是其计算能力的一个主要来源。

与 OTM 的扩散双场表示不同，所谓的团块方法仅处理质量密度场，该场被离散为具有一定有限宽度 [27, 28] 的平滑质量粒子，或称团块。对于扩散问题，这些有限粒子方法的吸引力在于能够提出单场数值方案，从而大大简化问题。然而，它们也引发了一系列数值分析问题，例如方案是否具有一致的变分基础、边界条件的施加、粒子厚度的最优选择，以及方案的整体精度和收敛性。

在本文中，我们采用质量扩散的时间离散变分形式，如 [22], 所示；同时，为了构建一类无速度有限粒子方法，我们按照 [27, 28], 的做法，利用有限粒子（或称粒团）对质量密度进行离散。与狄拉克δ函数相比，采用具有有限宽度的粒子，其直接优势在于可以直接通过相对熵（或 Kullback-Leibler）泛函计算其熵（参见例如 [29]）。这与基于点质量的质量离散化形成对比；例如 [22], 所采用的方法，需要对熵泛函进行谨慎的改写，使其

成为弱形式。随后，有限粒子的运动是熵与迁移率相互竞争的结果：熵由 Kullback-Leibler 泛函给出，迁移率则由连续构型之间的 Wasserstein 距离表示（参见例如 [12]）。因此，熵促使粒子均匀分布于整个区域，而迁移率则阻碍粒子运动。

在第 3 节中，我们展示了这种竞争如何产生离散的欧拉—拉格朗日方程；结合适当的求积公式，这些方程可显式表示为粒子位置的函数。对于本文所考虑的有限粒子格式等方法，一个核心数值问题是如何高效地选择粒子宽度。在本研究中，我们以变分方式优化粒子宽度，即通过最小化决定粒子运动的同一个增量泛函来确定粒子宽度。我们证明，这一最优性准则得出的粒子宽度处于粒子间平均自由距离与区域尺度之间的中间范围，正如预期的那样。另一个关键问题是边界条件的表述。我们证明，通量边界条件可以通过向区域内注入粒子或从区域中移出粒子来方便地表述。我们还证明，零通量条件可以借助仅基于区域距离函数的屏障势来表述，这极大地方便了对一般区域的处理，例如通过 CAD 工具定义的区域。

第 4 节讨论了若干实现问题，包括如何高效计算粒子宽度，以及如何利用快速搜索加速计算成对相互作用力。当粒子数量增多时，这些问题便至关重要，必须谨慎处理，才能确保计算可行。第 5 节通过一个关于向球体中注入质量的测试问题，展示了该方法的适用范围和特性。将有限粒子注入区域，并追踪扩散驱动的粒子随时间演化的轨迹，包括注入结束后密度收敛至均匀稳态，这种能力相当令人瞩目。通过稳态下粒子的转动惯量，监测该方案的弱收敛性。该测试表明，随着粒子数量变化，该方案具有稳健的收敛性。

2. Problem definition

我们考虑如下对流扩散初边值问题

$$
\begin{aligned}
&(1a) \quad \partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho u) = \kappa \, \Delta \rho + \rho s, && \text{在 } \Omega \times [0,T], \\
&(1b) \quad \rho = g, && \text{在 } \Gamma_D \times [0,T], \\
&(1c) \quad (\kappa \nabla \rho - \rho u) \cdot n = f, && \text{在 } \Gamma_N \times [0,T], \\
&(1d) \quad \rho(x,0) = \rho_0(x), && \text{在 } \Omega,
\end{aligned}
$$

其中，ρ 是未知密度或浓度，ρ_0 是其初始值，u是给定的对流速度场，s是源密度，g 是指定的密度，f 是指定的外向质量通量，κ 是扩散系数，Ω 是 $\mathbb{R}^d$中的有界区域，$\Gamma = \partial\Omega$ 是 Ω 的边界，n 是边界处的外向单位法向量，Γ_D 是狄利克雷边界，Γ_N 是诺伊曼边界，且 $\Gamma_D \cap \Gamma_N = \emptyset$ 和 $\Gamma_D \cup \Gamma_N = \Gamma$。

问题 (1a) 可等价地重新表述为如下输运问题

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho v) = \rho s, \tag{2a}$$

$$\rho v = \rho u - \kappa \nabla \rho, \tag{2b}$$

其中，v 是由平流和扩散共同作用产生的速度场；式 (2a) 是欧拉连续介质力学中的连续性方程，式 (2b) 则是结合平流和扩散作用的迁移率定律。相应的拉格朗日表述为

$$\rho(\varphi(x,t),t) = \frac{\rho_0(x)}{\det \nabla \varphi(x,t)} \exp\Big(\int_0^t s(\varphi(x,\tau),\tau)\, d\tau \Big) \tag{3a}$$

$$\partial_t \varphi(x,t) = v(\varphi(x,t),t), \tag{3b}$$

其中，$\varphi : \Omega \times [0,T] \to \Omega$ 是输运映射。质量密度

$$\rho_0(x) \exp\Big(\int_0^t s(\varphi(x,\tau),\tau)\, d\tau \Big) \tag{4}$$

式 (3a) 中的质量密度表示物质点 x 处经源项添加或移除的质量调整后的初始质量密度。式 (3a) 表明，$\rho(x,\ t)$ 是式 (4) 经输运映射 $\varphi(\cdot,\ t)$ 推前所得，而式 (3b) 则将输运映射与粒子速度联系起来。

式 (3a) 和 (3b) 可视为共同定义了测度 $\rho\, dx$ 和输运映射 φ的演化。特别要指出的是，将这一表述扩展到测度时，需要将输运映射 φ 也作为问题的一个额外未知量。

3. Approximation

我们的目标是通过变分方法近似求解方程（1）：先进行时间离散化，再将质量密度空间离散化为粒子。为此，我们采用增量变分原理，为这些近似解提出最优性准则。

3.1. 分步法。我们首先将时间离散化为一系列离散时刻 $t_0,\ t_1,\ \ldots\ldots,\ t_k,\ t_{k+1}\ldots$并对相应的质量密度 $\rho_0,\ \rho_1,\ \ldots\ldots,\ \rho_k,\ \rho_{k+1}\ldots$进行近似。为此，我们利用式（1a）的可加结构，通过分步法 [22] 将增量更新分解为若干步骤。对流分步由纯对流方程控制。

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho u) = 0\,, \tag{5}$$

通过设置 $\kappa = 0$ 和 $s = 0$，该方法可由（2a）形式上直接推导得出，并且可以按照 [22]中所述的方法方便地精确求解。这种对平流的精确几何处理使粒子方法区别于迎风方法，并赋予其显著的优势和强大能力。源项分步

$$\partial_t \rho = \rho s\,, \tag{6}$$

同样可以进行精确处理，参见式（4）。因此，在本节余下部分，我们着重讨论纯扩散分步，即形式上去掉式（2a）中的平流项和源项后得到的步骤。有关对流步骤的更多细节及应用示例，见 [22]。

3.2. 扩散分步的变分表述。按照 [23, 24, 25, 22]，，我们通过 Jordan-Kinderlehrer-Otto（JKO）泛函来刻画密度的增量演化

$$F(\rho_{k+1}) = \frac{1}{2}\frac{d_W^2(\rho_k, \rho_{k+1})}{t_{k+1} - t_k} + \int_\Omega \kappa \rho_{k+1} \log\left(\frac{\rho_{k+1}}{\rho_\infty}\right) dx \to \inf!, \tag{7}$$

其中，d_W 为Wasserstein距离（例如参见 [22]的附录A），ρ_∞为参考密度。为明确起见，我们具体取 $\rho_\infty = M/|\Omega|$，其中 M 为系统在稳态下的总质量，$|\Omega|$ 为区域的体积。

可以验证，在平流为零的极限下，这一表述确实给出了迁移率定律（2b）的时间离散化。因此，经过直接计算（例如参见 [22]的附录A），可得欧拉-拉格朗日方程

$$\rho_{k+1}(x)\frac{x - \varphi_{k+1\to k}(x)}{t_{k+1} - t_k} = -\kappa \nabla \rho_{k+1}(x), \tag{8}$$

其中 $\varphi_{k+1\to k}$ 是增量输运映射，$\varphi_{k\to k+1} = \varphi_{k+1\to k}^{-1}$ 和 ρ_{k+1} 由 $\varphi_{k+1\to k}$ 通过几何上精确的推前运算得到

$$\rho_{k+1} \circ \varphi_{k\to k+1} = \rho_k / \det\left(\nabla \varphi_{k\to k+1}\right). \tag{9}$$

我们验证了 (8) 确实是 (2b) 的时间离散化。关于时间步的收敛性严格分析见 [23, 24]。

3.3. 空间离散化。从测度弱收敛的角度来看，通过将质量集中在有限个点 $\{x_p(t)\}_{p=1}^n$ 上来逼近 $\rho(x,\ t)$ 是很自然的做法，即令

$$\rho(x,t) \sim \sum_{p=1}^{n} m_p \delta(x - x_p(t)), \tag{10}$$

其中，δ 是狄拉克 δ 函数，m_p 是粒子 p所携带的质量。然而，对于这种形式的试探密度，泛函 (7) 未定义。在 [22], 中，我们通过将增量泛函 (7) 替换为一个参照 (2) 建立的替代弱形式来规避这一困难。在该弱形式中，质量密度以线性形式出现，因此可以用假设 (10)近似。

在本研究中，我们遵循 Carrillo等人 [27, 28] 的做法，不同的是，我们将粒子铺展开，或称“增厚”，使其具有有限宽度，具体宽度待定。相应的近似为

$$\rho(x,t) \sim \sum_{p=1}^{n} m_p \varphi_p(x - x_p(t), t), \tag{11}$$

其中，函数 $\varphi_p(x - x_p(t); t)$ 表示粒子 x_p 的随时间变化的分布。分布的形式 $\varphi_p(x - x_p(t)\ t)$ 可以在一类适当的函数中进行参数化，而对 t 的显式依赖则表示参数的时间依赖性。随后，将 试探解（11）代入泛函（7），并令所得离散泛函相对于所有自由度保持平稳，即可得到离散系统。

3.4. **高斯粒子分布**。我们具体选取如下形式的高斯粒子分布

$$\varphi_p(x - x_p(t), t) = \Big(\frac{\beta_p(t)}{\pi}\Big)^{d/2} \mathrm{e}^{-\beta_p(t)\|x - x_p(t)\|^2} := N(x - x_p(t), \beta_p(t)), \tag{12}$$

归一化为

$$\int_{\mathbb{R}^d} N(x - x_p(t), \beta_p(t))\, dx = 1. \tag{13}$$

我们注意到， $N(x-x_p(t)\ \beta_p(t))$ 的量纲为体积的倒数，质量为单位质量，其宽度由参数 $\beta_p(t)$ 设定。

3.5. **Wasserstein 距离**。粒子的高斯分布以及不存在质量重新分配，使得式（7）中的 Wasserstein 距离 $d_W^2(\rho_k,\ \rho_{k+1})$ 的计算十分直接。因此，对于质量恒定的粒子 $d_W^2(\rho_k,\ \rho_{k+1})$ 仅表示将所有粒子从初始位置运输到最终位置的总成本，即

$$d_W^2(\rho_k, \rho_{k+1}) \sim \sum_{p=1}^{n} d_W^2\big(m_p N_{p,k}(x), m_p N_{p,k+1}\big), \tag{14}$$

其中我们记作 $N_{p,\ k}(x) :=N(x-x_{p,\ k},\ \beta_{p,\ k})$， $N_{p,\ k+1}(x) :=N(x-x_{p,\ k+1},\ \beta_{p,\ k+1})$，并忽略有限区域对高斯分布尾部截断所产生的影响。高斯测度之间的 Wasserstein 距离已有显式表达式 [30, 31, 32, 33]，因此我们得到

$$d_W^2\big(m_p N_{p,k}(x), m_p N_{p,k+1}\big) \sim \Big(\|x_{p,k+1} - x_{p,k}\|^2 + |\beta_{p,k+1}^{-1/2} - \beta_{p,k}^{-1/2}|^2\Big)\, m_p. \tag{15}$$

我们注意到， $d_W^2(\rho_k,\ \rho_{k+1})$不仅量化了粒子在一个时间步内的位移程度，也量化了粒子宽度（若有）的变化。

3.6. 厄米求积。 选择高斯型剖面也便于通过数值求积计算积分。因此，对于形式如（11）和（12）的密度，我们有

$$\int_\Omega \kappa\rho_{k+1}\log\rho_{k+1}\,dx = \sum_{p=1}^n \int_\Omega \kappa\log\Big(\frac{\rho_{k+1}(x)}{\rho_\infty}\Big)\times \Big(\frac{\beta_{p,k+1}}{\pi}\Big)^{d/2}\exp\Big(-\beta_{p,k+1}\|x-x_{p,k+1}\|^2\Big)\,m_p\,dx. \tag{16}$$

积分中的高斯权函数表明，可以采用厄米特求积公式进行近似 [34]。一点求积公式尤其简单，其形式为

$$\int_\Omega \kappa\rho_{k+1}(x)\log\Big(\frac{\rho_{k+1}(x)}{\rho_\infty}\Big)\,dx \sim \sum_{p=1}^n \kappa\log\Big(\frac{\rho_{k+1}(x_{p,k+1})}{\rho_\infty}\Big)\,m_p. \tag{17}$$

通过采用更高阶的求积公式可以获得更高的精度，但计算成本和复杂性也会随之增加。

3.7.离散问题。 结合前述近似，约化后的JKO泛函可写为

$$F(\rho_{k+1}) \sim \sum_{p=1}^n \frac{1}{2}\frac{\|x_{p,k+1}-x_{p,k}\|^2 + (\beta_{p,k+1}^{-1/2}-\beta_{p,k}^{-1/2})^2}{t_{k+1}-t_k}\,m_p + \sum_{p=1}^n \kappa\log\Big(\frac{\rho_{k+1}(x_{p,k+1})}{\rho_\infty}\Big)\,m_p \to \min! \tag{18}$$

with

$$\rho_{k+1}(x) := \sum_{p=1}^n \Big(\frac{\beta_{p,k+1}}{\pi}\Big)^{d/2}\,\mathrm{e}^{-\beta_{p,k+1}\|x-x_{p,k+1}\|^2}\,m_p. \tag{19}$$

我们注意到，增量变分原理（18）同时确定了粒子的更新位置及其最优宽度。相应的欧拉–拉格朗日方程为

$$\frac{\partial F}{\partial x_{r,k+1}} = 0, \qquad \frac{\partial F}{\partial \beta_{r,k+1}} = 0, \tag{20}$$

其计算结果为

$$m_r\frac{x_{r,k+1}-x_{r,k}}{t_{k+1}-t_k} + \frac{\partial}{\partial x_{r,k+1}}\sum_{p=1}^n \kappa\log\Big(\frac{\rho_{k+1}(x_{p,k+1})}{\rho_\infty}\Big)\,m_p = 0, \tag{21a}$$

$$-\frac{m_r}{2}\frac{\beta_{r,k+1}^{-1/2}-\beta_{r,k}^{-1/2}}{\beta_{r,k+1}^{3/2}(t_{k+1}-t_k)} + \frac{\partial}{\partial \beta_{r,k+1}}\sum_{p=1}^n \kappa\log\Big(\frac{\rho_{k+1}(x_{p,k+1})}{\rho_\infty}\Big)\,m_p = 0. \tag{21b}$$

我们注意到，这些方程表示对粒子位置和宽度进行的隐式前向欧拉更新。

3.8. 边界条件。在上述粒子表示中，可以很容易地实现诺伊曼边界条件（即通量边界条件）。因此，可以通过从区域边界注入粒子，使单位面积的质量输入率达到预定值，从而将预定的向内通量纳入计算。预定的向外通量可以通过移除穿过边界的粒子，或插入负质量粒子 [35], ，或结合这两种方式来实现，同样使单位面积的质量输入率达到预定值。

零通量条件可以通过屏障势来实现，即一个连续可微函数 $V(x)$，它在区域内（包括其边界）为零，并在远离区域时迅速增大。例如，在计算中我们选择

$$V(x) = \frac{C}{2}\mathrm{dist}^2(x,\Omega), \tag{22}$$

其中

$$\mathrm{dist}(x,\Omega) = \min\{\|x-y\| \,:\, y\in\Omega\} \tag{23}$$

是到 Ω 的距离函数，常数 C 需要校准。随后将增量问题 (18) 扩展为

$$F(\rho_{k+1}) + \sum_{p=1}^{n} V(x_p)\, m_p \to \min! \tag{24}$$

显然，屏障势的作用是对偏离区域的粒子 x_p 施加恢复性扩散力 $DV(x_p)$ m_p，使其返回区域内。

方便的是，距离函数 $d(x,\ \Omega)$ 是大多数计算机辅助设计 (CAD) 软件都提供的功能，这使得基于分析区域的 CAD模型实现有限粒子法更加便利。

针对具有狄利克雷边界条件的问题，已有研究提出了多种最优传输和JKO泛函的扩展，可应用于粒子方法 [36, 37, 38, 35]。一种实现狄利克雷边界条件的简单方法，是将位于狄利克雷边界上的粒子固定在所需的面质量密度上。然而，这类扩展超出了本文的讨论范围，因此不再赘述。

4. Numerical implementation

本节将讨论如何在不显著影响精度或收敛性的情况下，简化离散问题（21）并加快求解。

4.1. 扩散力的计算。 在厄米求积公式的精度范围内，可以推导出（21a）中扩散力的一个特定表达式。为此，我们写出

$$\begin{aligned}&\frac{\partial}{\partial x_{r,k+1}}\sum_{p=1}^{n}\kappa\log\Big(\frac{\rho_{k+1}(x_{p,k+1})}{\rho_\infty}\Big)\,m_p=\\&\sum_{p=1}^{n}\kappa\Big[\frac{\partial}{\partial x_{r,k+1}}\log\Big(\frac{\rho_{k+1}(x)}{\rho_\infty}\Big)\Big]_{x=x_{p,k+1}}m_p+\kappa\nabla\rho_{k+1}(x_{r,k+1})m_r,\end{aligned}\tag{25}$$

其中 $\rho_{k+1}(x)$ 如（19）所示。在单点厄米插值的精度范围内，有

$$\begin{aligned}&\sum_{p=1}^{n}\kappa\Big[\frac{\partial}{\partial x_{r,k+1}}\log\Big(\frac{\rho_{k+1}(x)}{\rho_\infty}\Big)\Big]_{x=x_{p,k+1}}m_p=\\&\sum_{p=1}^{n}\kappa\Big[\frac{1}{\rho_{k+1}(x)}\frac{\partial}{\partial x_{r,k+1}}\rho_{k+1}(x)\Big]_{x=x_{p,k+1}}m_p\sim\\&\int_\Omega\kappa\frac{\partial}{\partial x_{r,k+1}}\rho_{k+1}(x)\,dx=\frac{\partial}{\partial x_{r,k+1}}\int_\Omega\kappa\rho_{k+1}(x)\,dx\sim 0.\end{aligned}\tag{26}$$

在此近似下，（25）因此简化为如下特别简单的表达式

$$\frac{\partial}{\partial x_{r,k+1}}\sum_{p=1}^{n}\kappa\log\Big(\frac{\rho_{k+1}(x_{p,k+1})}{\rho_\infty}\Big)\,m_p\sim\kappa\nabla\rho_{k+1}(x_{r,k+1})\,m_r,\tag{27}$$

我们在所有计算中均采用该表达式。

4.2. 均匀粒子宽度。如果假定粒子的宽度均匀，即 $\beta_{r,\ k+1}=\beta_{k+1}$，则可以大大简化计算。将此假设代入（18），并令泛函关于 β_{k+1} 取驻值，（21b）可简化为单个方程

$$-\frac{M}{2}\frac{\beta_{k+1}^{-1/2}-\beta_k^{-1/2}}{\beta_{k+1}^{3/2}(t_{k+1}-t_k)}+\frac{\partial}{\partial\beta_{k+1}}\sum_{p=1}^{n}\kappa\log\Big(\frac{\rho_{k+1}(x_{p,k+1})}{\rho_\infty}\Big)\,m_p=0,\tag{28}$$

其中，$M=\sum_{r=1}^{n}m_r$ 表示系统的总质量，并且

$$\rho_{k+1}(x):=\sum_{p=1}^{n}\Big(\frac{\beta_{k+1}}{\pi}\Big)^{d/2}\mathrm{e}^{-\beta_{k+1}\|x-x_{p,k+1}\|^2}\,m_p.\tag{29}$$

代替（19）。利用（29）计算（28）中的导数，可得

$$\frac{\partial}{\partial\beta_{k+1}}\sum_{p=1}^{n}\kappa\log\Big(\frac{\rho_{k+1}(x_{p,k+1})}{\rho_\infty}\Big)\,m_p = M\kappa\frac{d}{2}\frac{1}{\beta_{k+1}} - \sum_{p=1}^{n}\kappa\Big(\frac{\sum_{q=1}^{n}\|x_{p,k+1}-x_{q,k+1}\|^2\,\mathrm{e}^{-\beta_{k+1}\|x_{p,k+1}-x_{q,k+1}\|^2}\,m_q}{\sum_{q=1}^{n}\mathrm{e}^{-\beta_{k+1}\|x_{p,k+1}-x_{q,k+1}\|^2}\,m_q}\Big)\,m_p. \tag{30}$$

如果假设粒子宽度始终处于稳态，还可以进一步简化。在这一假设下，(30) 可进一步化为代数方程

$$M\frac{d}{2}\frac{1}{\beta_{k+1}} = \sum_{p=1}^{n}\Big(\frac{\sum_{q=1}^{n}\|x_{p,k+1}-x_{q,k+1}\|^2\,\mathrm{e}^{-\beta_{k+1}\|x_{p,k+1}-x_{q,k+1}\|^2}\,m_q}{\sum_{q=1}^{n}\mathrm{e}^{-\beta_{k+1}\|x_{p,k+1}-x_{q,k+1}\|^2}\,m_q}\Big)\,m_p, \tag{31}$$

该方程给出了粒子的瞬时宽度与其位置之间的函数关系。

4.3. 稳态下的最优粒子宽度。 假设在稳态下，质量密度达到常数值 $\rho_\infty = M/|\Omega|$，其中 M为总质量， $|\Omega|$为区域的体积，且假设该区域有限。进一步假设，用一组宽度均匀的 n粒子来近似这一稳态，

$$\rho(x) := \sum_{p=1}^{n}\Big(\frac{\beta}{\pi}\Big)^{d/2}\mathrm{e}^{-\beta\|x-x_p\|^2}\,m_p, \tag{32}$$

如(19)所示。相应的相对熵为

$$F_\infty(\beta) = \int_\Omega \kappa\rho(x)\log\Big(\frac{\rho(x)}{\rho_\infty}\Big)\,dx, \tag{33}$$

需要对 β进行最小化。为此，我们将(33)改写为

$$F_\infty(\beta) = \int_{\mathbb{R}^d}\kappa\rho(x)\log\Big(\frac{\rho(x)}{\rho_\infty}\Big)\,dx - \int_{\mathbb{R}^d\setminus\Omega}\kappa\rho(x)\log\Big(\frac{\rho(x)}{\rho_\infty}\Big)\,dx, \tag{34}$$

并依次估计各项。我们注意到，在公式（34）的第一项中，允许有限粒子的尾部延伸到区域之外，这一点已在求积公式（17）中默认。随后，公式（34）的第二项对由此产生的质量泄漏进行修正。

对于较大的 β，泄漏质量被限制在区域边界 $\partial\Omega$ 附近厚度为$1/\sqrt{\beta}$ 的狭窄层内。因此，对于足够规则的区域，

$$\int_{\mathbb{R}^d\setminus\Omega}\kappa\rho(x)\log\Big(\frac{\rho(x)}{\rho_\infty}\Big)\,dx \sim -\kappa\rho_\infty|\partial\Omega|\beta^{-1/2}, \tag{35}$$

其中 $|\partial\Omega|$ 是区域边界的面积。我们注意到，随着 $\beta \to +\infty$，质量泄漏的影响如预期般趋于消失。为估计（34）式的第一项，我们将区域 Ω 划分为 n 个体积为$|\Omega|/n$的子区域，每个子区域包含一个粒子。同样，对于足够大的 β，在包含粒子 x_p 的区域内有 $\log(\rho(x)) \sim -\beta\|x-x_p\|^2$，于是我们计算

$$\int_{\mathbb{R}^d} \kappa\rho(x)\log\Big(\frac{\rho(x)}{\rho_\infty}\Big)\,dx \sim -\kappa\rho_\infty|\Omega|\beta\Big(\frac{|\Omega|}{n}\Big)^{2/d}. \tag{36}$$

将这些估计代入 (34) 并进行最小化，可得

$$\beta \sim \Big(\frac{|\partial\Omega|}{|\Omega|^{(d+2)/d}}\Big)^{2/3} N^{4/3d}, \tag{37}$$

除一个待校准的乘法常数外。在 (37) 中，第一个因子为 R^{-2}，其中 R 是区域的有效半径。第二个因子给出了粒子宽度相对于粒子数量的精确缩放关系 $\beta^{-1/2} \sim N^{-2/3d}$。值得注意的是，最优粒子尺寸处于一个中间尺度，介于粒子邻域的尺寸（$|\Omega|/n$）$^{1/d}$ 与区域 $|\Omega|^{1/d}$的尺寸之间。

4.4. 局部邻域搜索。 直接计算扩散力 (27) 是一个 $O(n^2)$ 操作；当 n 较大时，它会成为主要的计算瓶颈。注意到，由于粒子轮廓呈高斯衰减，在计算 $\nabla\rho_{k+1}(x_{r,k+1})$ 时，求和式 (19) 中距离$x_{r,k+1}$远大于 $1/\sqrt{\beta_{r,k+1}}$ 的点$x_{p,k+1}$ 对求和的贡献微乎其微，因此可以将求和范围限制在$x_{r,k+1}$ 的局部邻域内，尺度为$1/\sqrt{\beta_{r,k+1}}$，而不会显著损失精度。

这种方法中限制速度的步骤，是计算过程中随着粒子相对移动而不断变化时，搜索局部邻域的操作。人们已开发出许多技术来解决局部邻域问题。一种方法是采用空间划分算法，并应用分支定界方法[39] 。这类方法的早期实例包括 k-d 树 [40, 41] 和k-均值 [42]算法，以及它们的许多变体。精确方法的一个缺点是无法保证对数级搜索时间 [43, 44]。值得一提的是，对于许多应用而言，以牺牲准确性换取效率的近似最近邻（ANN）算法 [45, 46], 已经足够。近期研究则聚焦于基于邻近图的方法 [47, 48], ，这类方法非常适用于图像识别、计算语言学、产品推荐等领域中出现的高维问题。

搜索算法的最佳选择取决于数据相关属性，例如维度、数据集大小、相关性、密度分布等，以及性能指标，例如查询时间、准确度、查询工作量、构建时间和内存使用量。在本研究中，我们采用一种简单的临时算法，该算法基于将计算

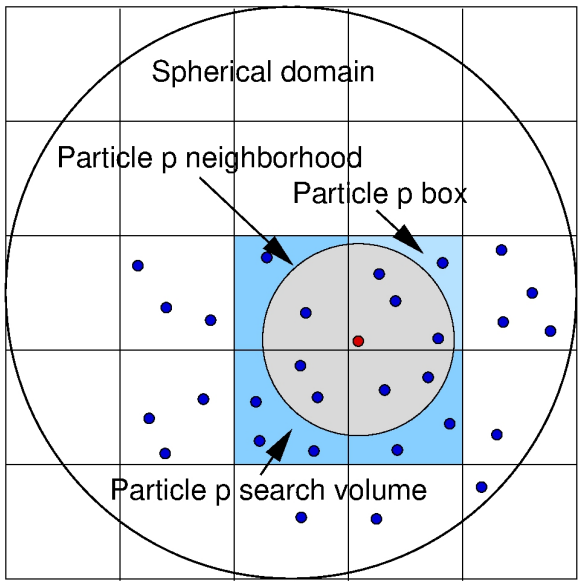


FIGURE 1. 搜索算法示意图，以注入球体问题为例。球形区域被划分为大小相同的立方单元（即盒子），并根据每个粒子的当前位置将其分配到相应的单元中。单元连通性数组列出每个单元中包含的粒子。对于每个粒子，另一个最近邻数组记录位于半径为 $\sim 1/\sqrt{\beta}$ 的球形邻域内的粒子。每个时间步中，每个粒子仅与其邻域内的粒子相互作用。最近邻数组会定期更新，更新时仅搜索与每个粒子的邻域相交的单元。

区域划分为立方单元（或盒子）的一层规则子区域划分，如图 1 所示。为简便起见，我们考虑 β 均匀且恒定的情形，例如采用估计值 (37)。在这种情况下，单元的尺寸取为 $1/\sqrt{\beta}$的倍数，具体倍数通过数值方法校准。因此，该算法需要两个连通数组。初始化时，以及任何粒子因规定通量而进入区域时，都会根据其坐标将粒子分配到特定单元。每个粒子都配有与之相互作用的粒子的连通列表，每个单元则配有其中所含粒子的列表。在共享内存平台上，这些数组可以方便地实现为 C++ STL 容器。算法会在每个时间步按需将粒子移至其他单元，以使单元数组保持最新状态。相比之下，粒子连通列表仅在经过规定数量的时间步后才更新。更新时，只搜索与查询粒子的球形邻域相交的单元中所包含的粒子。

5. Example: Mass injection into a sphere

我们通过一个测试案例来展示前文所定义的有限粒子方法的性质。该案例研究的是质量经由球形区域表面上的一个小孔口注入其中的情形。

5.1. 问题定义。 我们考虑一个半径为 R、初始为空的球形区域，质量以恒定质量通量 f 通过北极处面积为 A 的小孔口注入其中，注入时间间隔为 $[0, T_0]$。随后，粒子自由扩散，最终充满整个区域，并达到均匀的稳态密度 $\rho_\infty = M/|\Omega|$。注入总质量 $M = fAT_0$ 被分为 n 个质量相等的粒子 $m = M/n$，每隔 T_0/n 便插入一个粒子，插入位置位于北极下方、距边界 d 处。因此，粒子的注入速度为 $v = d/(T_0/n)$。问题数据（无量纲单位）汇总于表1。为分析该方法的性能和收敛性质，我们考虑总扩散时间 $T > T_0$，并将粒子数设为从最少125个到最多128000个。计算中使用的参数列于表1。

R	M	κ	T	T_0	v
1	200	1	120	25	1

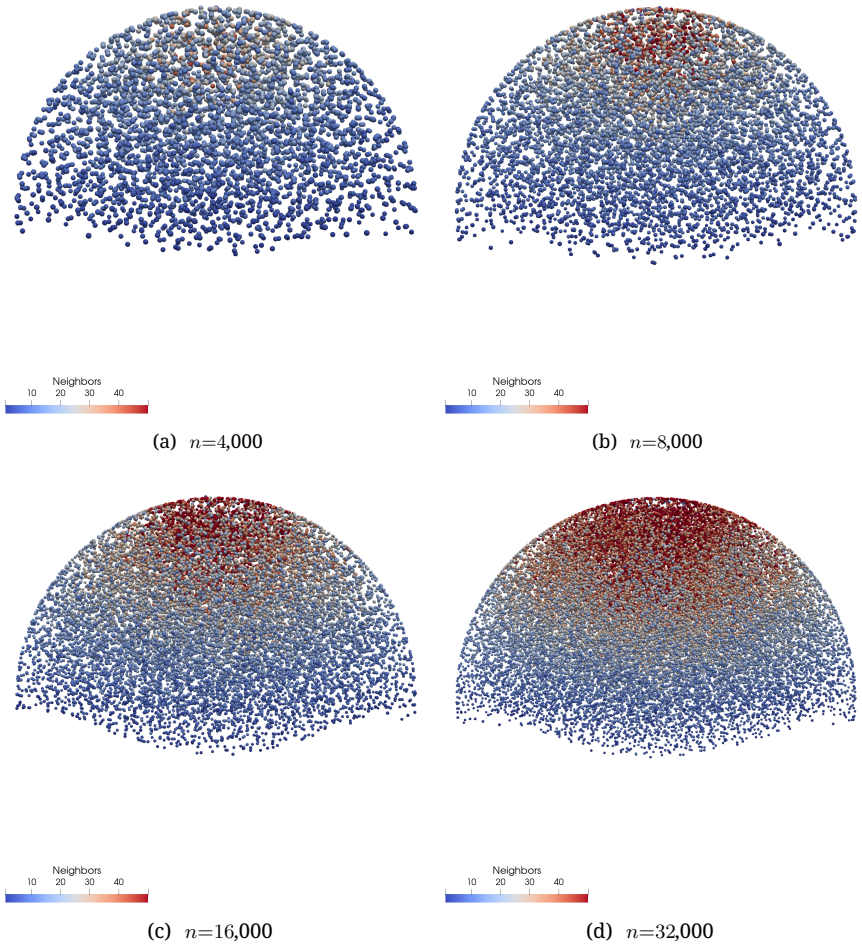
Table 1. 球体注入测试计算中使用的参数。

对于小型系统，离散增量问题 (21) 采用串行四阶龙格–库塔格式（RK4）求解，$n \le 8,000$；对于大型系统，则在 1 至 32 个处理器核心上采用前向欧拉的并行实现。扩散力按照 (27) 计算。为简便起见，假设所有粒子的粒子宽度$1/\sqrt{\beta}$ 相同且不随时间变化，其数值由标度关系 (37) 给出，并根据粒子数标定为 $\beta = 10\, n^{4/9}/R^2$。随后采用第 4.4 节所述的细分格式，并使用容差 0.01 来加速计算。

由于计算采用显式形式，稳定时间步受到扩散 CFL 条件 $\Delta t \sim \Delta x^2/\kappa$ 的限制，其中我们取$\Delta x \sim (|\Omega|/n)^{1/d}$ 作为粒子间距的估计值。方便的是，稳定时间步始终小于注入时间步长。此外，我们通过屏障势 (22) 在球体表面施加零通量边界条件，并取不会降低稳定时间步的最大常数C。

5.2. 粒子流可视化。 注入期间及注入后的粒子分布演化通过一系列连续快照进行可视化。图 2 显示了在注入时间 T_0 结束时，四种不同取值下粒子中心的三维分布

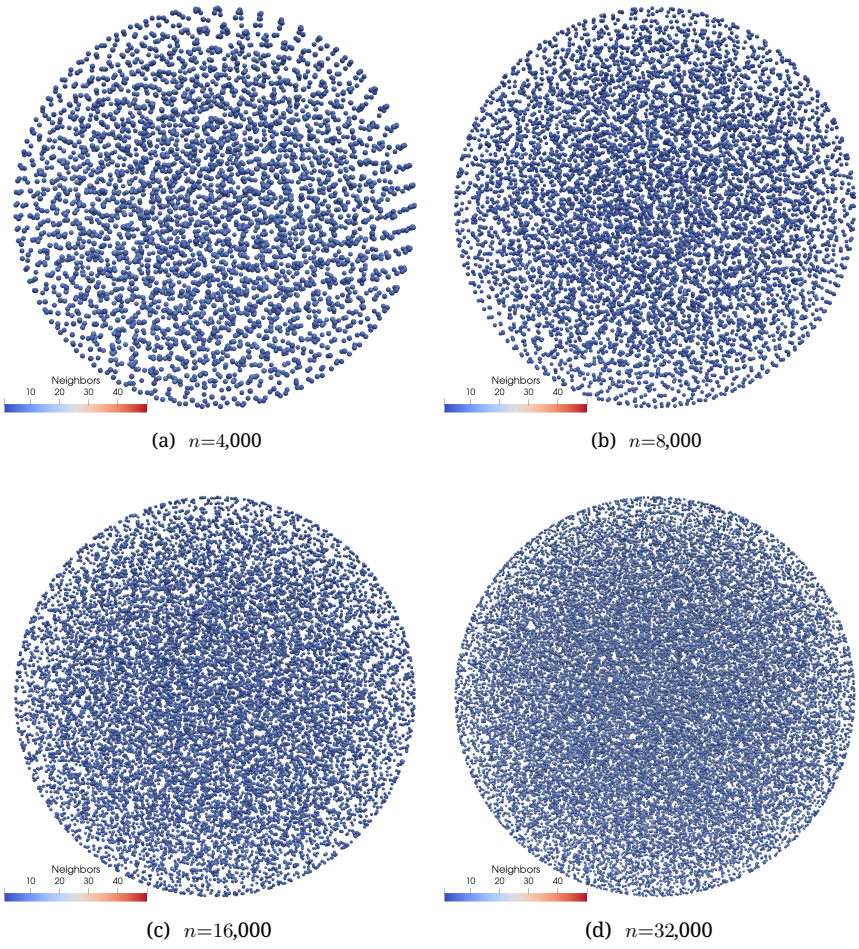
n。每个粒子都根据其 $1/\sqrt{\beta}$-邻域中包含的粒子数量着色，其大小则与实际质量m相关。粒子分布的特点是短程无序（或随机性）与长程有序（或光滑性）并存，从图中可以明显看出整体趋于收敛的趋势。根据最优标度，粒子宽度随粒子数量的增加而次线性增长，粒子邻域的大小也相应增大；当 $n = 32,000$ 时，邻域中的粒子数量达到约 50 个。变分原理对于阐明这些复杂权衡的价值非同寻常。



(a) n=4,000 (b) n=8,000

(c) n=16,000 (d) n=32,000

FIGURE 2. 注入阶段结束时粒子中心三维分布的可视化 T_0，展示不同粒子数量的情况。分析采用一个恒定的 β，并通过最优标度关系使其与粒子数量 n相对应。每个粒子的颜色表示其邻域内的粒子数量。粒子的大小与其质量 $m = M/n$相关。

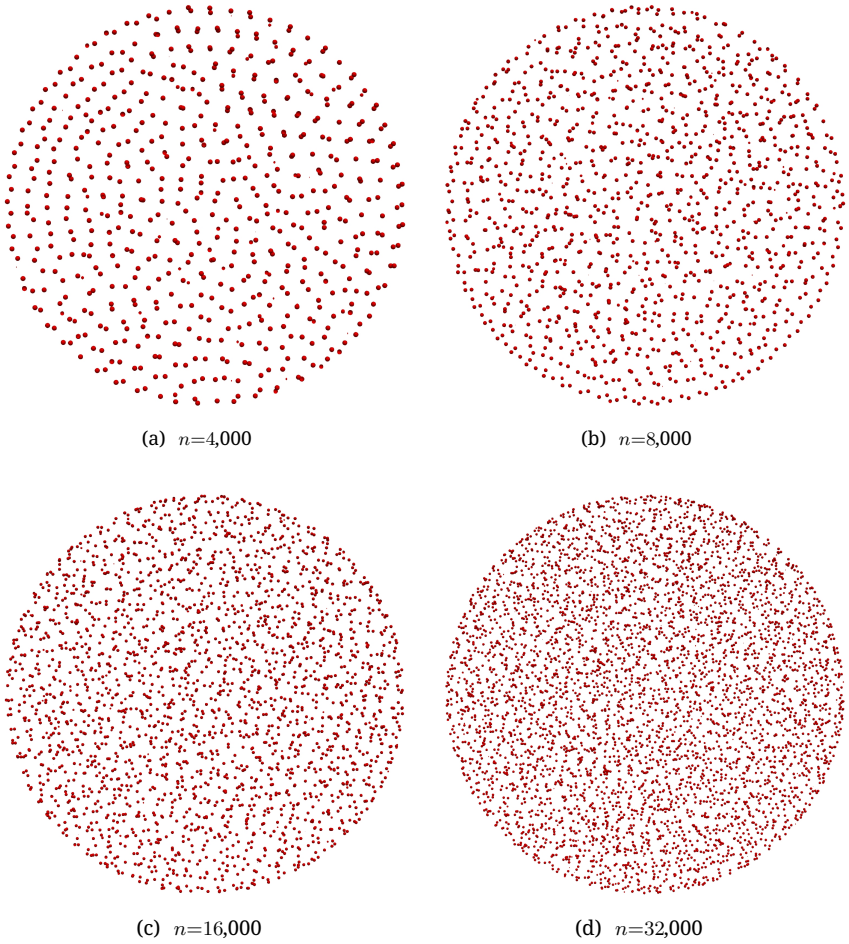


(a) n=4,000 (b) n=8,000

(c) n=16,000 (d) n=32,000

FIGURE 3. 模拟时间 T结束时不同粒子数量下粒子中心的三维分布可视化。分析采用一个常数值 β，该值通过最优标度关系与粒子数量 n挂钩。每个粒子的颜色表示其邻域内的粒子数量。粒子的大小与其质量 $m = M/n$有关。

图3展示了在模拟时间结束时，不同 n 值对应的粒子中心相同分布 T。我们回顾一下，扩散问题的最慢弛豫时间按 $R^2/\kappa = 1$ 的尺度变化。因此，在 $T = 120$ 时，我们可以预期系统已达到稳态。事实上，图中清晰呈现出看似均匀的稳态密度，正如预期。图4从另一个角度展现了该系统，印证了稳态密度的均匀性：图中描绘了球体的一个子午截面，其形状为宽度 0.2 的圆盘。有限粒子格式长期稳定的表现再次令人瞩目。

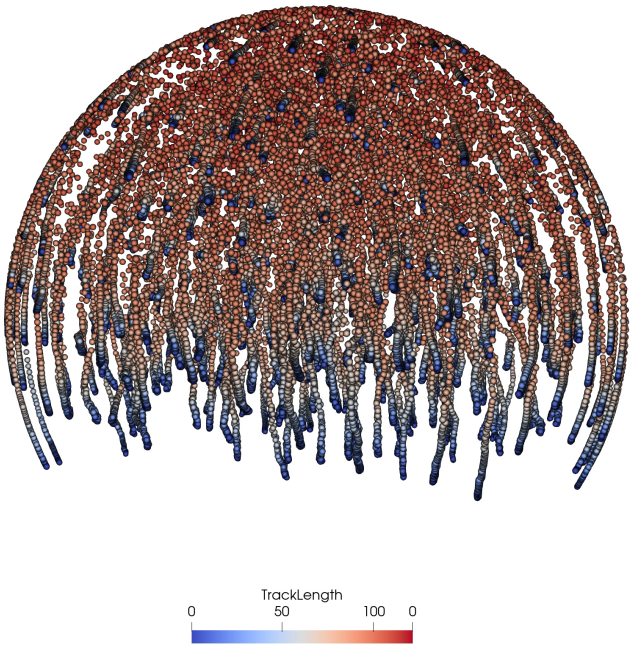


(a) n=4,000 (b) n=8,000

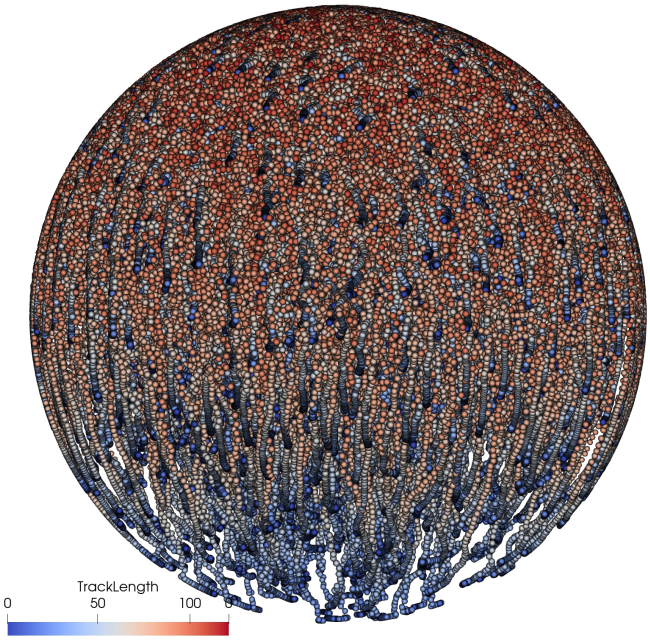
(c) n=16,000 (d) n=32,000

FIGURE 4. 分析结束时不同粒子数量 $C_3 = 10$ 对应的粒子分布可视化图像。图中显示了位于球体最大直径处、厚度为 0.2 的子午面圆盘状切片内的所有粒子。四种情况下粒子的大小相同，但对应的质量不同。

另一种能让人感受到粒子运动的可视化方式，是模拟流动的长曝光图像，展示粒子流带或路径。图5仅展示了 $n = 1,000$ 和 $4,000$ 个粒子对应的流带，因为粒子数量更多时画面会过于杂乱。值得注意的是，从图中可以看到粒子如何从注入点向外扩散，并逐渐充满球体。尤其是，最外侧的粒子沿着与区域球面相切的轨迹运动，这是屏障势所强制的，从而满足零通量边界条件。



(a) n=1000



(b) n=4000

FIGURE 5. 显示粒子流带或路径的流动长曝光图像。注入后，粒子充满区域，并沿着与该区域球面相切的轨迹运动，这符合零通量边界条件。

5.3. 收敛性分析。 我们通过计算稳态下分布的极惯性矩，来评估该方法的（弱）收敛性，

$$J_G = \frac{3}{5} M R^2 \,, \qquad M = \frac{4}{3}\pi R^3 \rho_\infty \,. \tag{38}$$

粒子离散化得到的近似值为

$$J_G = \sum_{p=1}^{n} J_p \,, \tag{39}$$

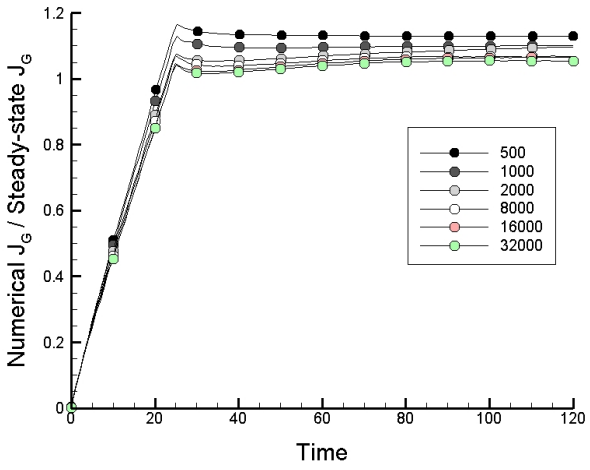
其中

$$J_p = m_p \int_\Omega r^2 N(x - x_p; \beta)\, dx = m_p \Big(r_p^2 + \frac{2}{3\beta} \Big) \tag{40}$$

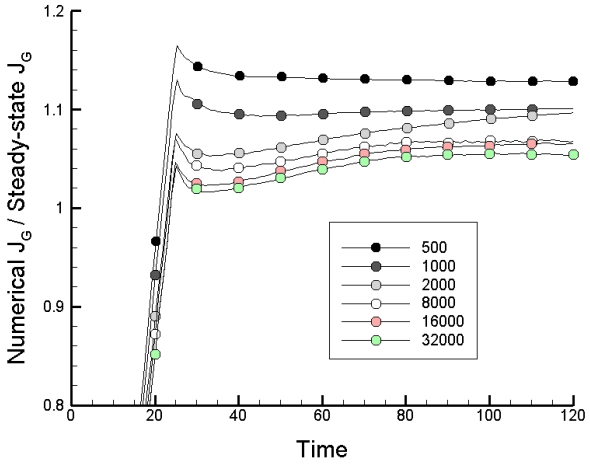
并记作 $r_p = \|x_p\|$。

图 6 展示了数值极惯性矩相对于稳态值（38）归一化后的时间演化随粒子数的变化。图中清晰地呈现了初始注入阶段以及随后的扩散阶段。在注入阶段结束时，极惯性矩超过稳态值；随后在较长时间内从上方收敛至稳态，这与预期一致。图中还清晰地显示，随着粒子数增加，时间演化以及长时间下的稳态值均呈现出趋于收敛的总体趋势。

图 7 绘出了稳态时数值极惯性矩的相对误差随粒子数量变化的关系。对于粒子中心随机服从泊松分布的情形，该误差有效地量化了有限粒子离散化的空间精度，其中也包括边界处粒子尾部轮廓的截断。如预期所示（例如，参见[49, 17]），图中显示出明显的收敛趋势，收敛速率为 $1/4$。

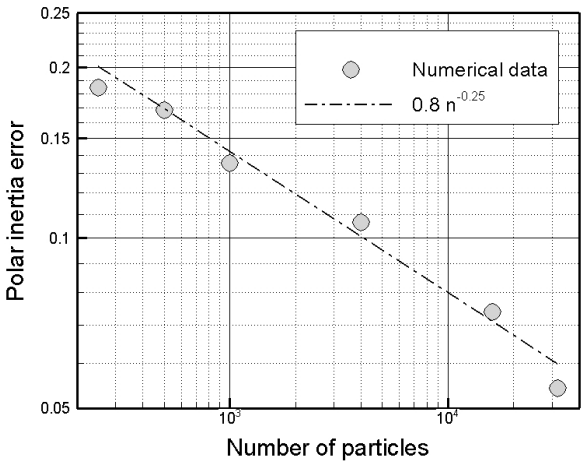


(a)

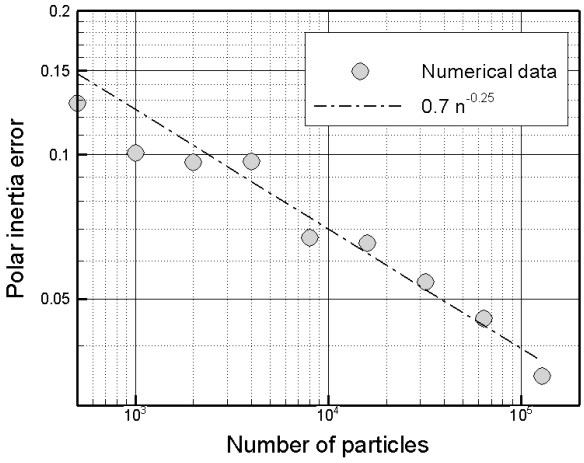


(b)

FIGURE 6. 对于不同粒子数量，归一化至稳态值后的极惯性矩数值随时间的演化。(a) 完整变化历程。(b) 达到稳态条件的详细过程。



(a) 龙格-库塔



(b) 前向欧拉

FIGURE 7. 极惯性矩相对误差随粒子数量及线性回归的变化关系。a) 采用龙格-库塔积分的串行计算结果。b) 采用前向欧拉积分的并行计算结果，处理器核心数量逐渐增加。两种情况下推断得到的收敛阶均为 $1/4$ 。

6. Summary and concluding remarks

我们基于时间离散增量变分原理，构建了一类用于质量传输问题的有限粒子方法，该原理结合了熵与粒子传输的代价，后者通过Wasserstein度量进行衡量。随后，将增量泛函进一步进行空间离散化，得到有限粒子，即由具有固定有限宽度的空间分布表征、且每个粒子携带固定质量的粒子。粒子的运动由传输代价与熵最大化之间的竞争所支配：传输代价旨在使粒子保持不动，而熵最大化则旨在使粒子扩散，从而增加系统的熵。不同于其他基于最优传输、旨在处理可变形体的粒子方案 [7, 22, 20, 19], ，该方法不涉及速度场，即完全依赖粒子表示，不需要额外定义速度场，因此具有显著优势。

制定有限粒子方法时，一个关键问题是如何最优地选择粒子宽度。我们已展示，如何通过最小化控制性的增量泛函，以变分方式确定粒子的最优宽度。这样，增量泛函不仅决定粒子的运动，也决定其轮廓的演化。运用这一扩展的变分原理，我们尤其推导出了粒子宽度、粒子数量与区域尺寸之间的最优标度关系。研究发现，最优粒子宽度介于粒子间距与区域尺寸之间，其指数由理论精确确定。

我们还讨论了各种实现问题，包括利用粒子轮廓的高斯衰减特性，并采用快速最近邻搜索来加速扩散力的计算。我们展示了一个简单的区域细分方案如何大幅加快扩散力的计算——这是主要的计算瓶颈；在该方案中，粒子邻域大小和单元尺寸均小于最优粒子轮廓宽度。此方案也使得研究大型粒子系统成为可能。

最后，我们通过一个关于向球体内注入质量的测试问题，展示了有限粒子方法的鲁棒性和多功能性。测试结果表明，该方法在任意空间维度下均具有无网格特性，能够重新分布质量粒子并追踪其随时间的演化；仅凭距离函数即可满足一般区域的通量边界条件；同时还具有稳健的收敛特性。

最后需要指出的是，本文提出的有限粒子法及其他类似方法并不局限于质量传输，原则上也可应用于其他标量输运问题。然而，狄利克雷边界条件对质量传输而言多少有些不适用，但在热传导等其他输运问题中却发挥着核心作用。

为求简洁，本文未考虑狄利克雷边界条件，但如何高效实现这类条件仍值得深入探讨。此外，尽管本文采用的简单单层细分格式足以用于考察该方法的收敛性质，其他快速搜索算法也值得探索，包括分层 k-均值、近似最近邻（ANN）算法以及基于图的方法。这些扩展与改进，以及其他可能的方向，都值得作为后续研究课题。

Acknowledgements

AP 感谢意大利国家高等数学研究所“Francesco Severi”（INDAM）下属意大利物理与数学国家组（GNFM）提供的支持。MO 衷心感谢德国研究联合会（DFG）通过重点计划（SPP）2311 提供的支持。

References

[1] L. B. Lucy。用于检验裂变假说的数值方法。*Astronomical Journal* 82 1013 1024, 1977, : –。[2] J. J Monaghan。粒子方法为何有效。*SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing* 3 4 422 433, 1982, （）: –。[3] D. Sulsky、Z. Chen 和 H. L. Schreyer。用于历史相关材料的粒子方法。*Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 118 179 186, , : –。[4] W. K. 1994 Liu、S. Jun 和 Y. F. Zhang。再生核粒子法。*International Journal for Numerical Methods in Fluids* 20 8 9 1081 1106, 1995, (–) : –。[5] J. K. Chen、J. E. Beraun 和 C. J. Jih。光滑粒子流体动力学方法中拉伸不稳定性的改进。*Computational Mechanics*，23(4):279–287，1999年。[6] G. M. Zhang 和 R. C. Batra。修正光滑粒子流体动力学方法及其在瞬态问题中的应用。*Computational mechanics* 34 2 137 146, , （）: –。[7] B. 2004 Li、F. Habbal 和 M. Ortiz。用于流体流动和塑性流动的最优传输无网格近似格式。*International Journal for Numerical Methods in Engineering* 83 12 1541 1579, 2010, （）: –。[8] C. Weißenfels 和 P. Wriggers。最优传输无网格近似格式的稳定化算法。*Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 329 421 443, 2018, : –。[9] A. Deffo、M. P. Ariza 和 M. Ortiz。用于三维位错动力学的无线单极子方法。*Journal of the Mechanics and Physics of Solids*，122:566–589，2019年。[10] M. P. Ariza 和 M. Ortiz。用于位错动力学的半离散无线单极子方法。*Extreme Mechanics Letters*，45:101267，2021年。[11] L. C. Evans。*Partial differential equations and Monge-Kantorovich mass transfer*。《数学当前进展》。International Press：美国马萨诸塞州剑桥，1997年。[12] C. Villani。*Topics in Optimal Transportation Theory* 58 *Graduate Studies*, 第卷。美国数学学会，美国罗得岛州普罗维登斯，2003年。*in Mathematics*

[13] S. Daneri 和 G. Savar`e。梯度流与最优传输讲义。载于 *Optimal Transportation: Theory and Applications*，第100–144页。剑桥大学出版社，2014年。[14] J.-D. Benamou 和 Y. Brenier。Monge-Kantorovich质量传输问题的一种计算流体力学解法。*Numerische Mathematik* 84 3 375 393, , （）：–。2000

[15] A. Bompadre、B. Schmidt 和 M. Ortiz。无网格近似格式的收敛性分析。*SIAM Journal of Numerical Analysis*，50(3):1344–1366，2012年。[16] A. Bompadre、L. E. Perotti、C. J. Cyron 和 M. Ortiz。任意阶且具任意光滑性的收敛无网格近似格式。*Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 221 222 83 103, 2012 ，–：–。

[17] B. Schmidt。拉格朗日动力学中的无限粒子极限与最优传输无网格方法的收敛性。*Multiscale Modeling & Simulation*，12:265–289，2014年。[18] B. Li、A. Pandolfi 和 M. Ortiz。金属动态碎裂的物质点侵蚀模拟。*Mechanics of Materials*，80:288–297，2015年。[19] H. Wessels、c. Weißenfels 和 P. Wriggers。采用稳定化最优传输无网格方法进行增材制造中的金属颗粒熔合分析。*Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*，339:91–114，2018年。[20] P. Navas、S. L´opez-Querol、R. C. Yu 和 M. Pastor。大变形状态下岩土工程问题中的最优传输无网格方法。*International Journal for Numerical Methods in Engineering* 115 10 1217 1240, 2018 ，（）：–。

[21] H. Wang、H. Liao、Z. Fan、J. Fan、L. Stainier、X. Li 和 B. Li。用于极端动态热机械条件下材料的热最优传输无网格（HOTM）方法。*Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*，364 112958，2020年：。[22] L. Fedeli、A. Pandolfi 和 M. Ortiz。由最优传输理论推导出的用于对流扩散问题的几何精确时间积分无网格格式及其与粒子方法的联系。*International Journal for Numerical Methods in Engineering* 112 9 1175 1193, 2017 ，（）：–。

[23] R. Jordan、D. Kinderlehrer 和 F. Otto。自由能与福克-普朗克方程。*Physica D*，107(2–4):265–271，1997年。[24] R. Jordan、D. Kinderlehrer 和 F. Otto。福克-普朗克方程的变分表述。*SIAM Journal on Mathematical Analysis*，29(1):1–17，1998年。[25] R. Jordan、D. Kinderlehrer 和 F. Otto。福克-普朗克方程的动力学。*Phase Transitions - B*，69(3):271–288，1999年。[26] W. Gangbo 和 McCann R. J.。最优传输几何。*Acta Mathematica* 177 2 113 161, 1996 ，（）：–。

[27] J. A. Carrillo、Y. Huang、F. S. Patacchini 和 G. Wolansky。梯度流粒子方法的数值研究。*Kinetic and Related Models*，10(3):613–641，2017年。[28] J. A. Carrillo、K. Craig 和 F. S. Patacchini。用于扩散的斑块方法。*Calculus of Variations and Partial Differential Equations* 58 2 2019 ，（），。

[29] F. J. Pinski、G. Simpson、A. M. Stuart 和 H. Weber。无限维空间上概率测度的Kullback–Leibler近似。*SIAM Journal on Mathematical Analysis* 47 6 4091 4122, 2015 ，（）：–。

[30] D. C. Dowson 和 B. V. Landau。多元正态分布之间的Fr´echet距离。*Journal of Multivariate Analysis*，12(3):450–455，1982年。[31] I. Olkin 和 F. Pukelsheim。具有给定离散矩阵的两个随机向量之间的距离。*Linear Algebra and its Applications*，48:257–263，1982年。[32] C. R. Givens 和 R. M. Shortt。概率分布的一类Wasserstein度量。*Michigan Mathematical Journal*，31(2):231–240，1984年。[33] M. Knott 和 C. S. Smith。关于分布的最优映射。*Journal of Optimization Theory and Applications* 43 1 39 49, 1984 ，（）：–。

[34] F. B. Hildebrand。 *Introduction to Numerical Analysis: Second Edition*。多佛数学丛书。多佛出版社，2013年。[35] A. Profeta 和 K.-T. Sturm。通过最优传输和度量测度空间的粘合，实现具有狄利克雷边界条件的热流。 *Calculus of Variations and Partial Differential Equations* 59 117, 2020 , : 。

[36] A. Figalli 和 N. Gigli。非负测度之间的一种新的运输距离及其在具有狄利克雷边界条件的梯度流中的应用。 *Journal de Mathématiques Pures et Appliquées* 94 2 107 130, 2010 , ( ) : –。

[37] S. Dweik 和 F. Santambrogio。通过对称化技术，估计边界上具有狄利克雷区域的传输密度的可和性。 *ESAIM: Control Optimisation and Calculus of Variations* 24 3 1167 1180, 2018 , ( ) : –。

[38] S. Dweik。具有边界代价的最优传输及传输密度的可和性估计。 *Journal of Convex Analysis*, 25(1):135–160，2018年。[39] A. H. Land 和 A. G. Doig。一种求解离散规划问题的自动方法。载于 *50 Years of Integer Programming 1958-2008*，第105–132页。施普林格，2010年。[40] J. L. Bentley。用于关联搜索的多维二叉搜索树。*Communications of the ACM*，18(9):509–517，1975年。[41] J. H. Friedman、J. L. Bentley 和 R. A. Finkel。一种以对数期望时间寻找最佳匹配的算法。 *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*，3 3 209( ): –226，1977年。[42] K. Fukunaga 和 P. M. Narendra。一种用于计算k近邻的分支定界算法。 *IEEE transactions on computers*，100(7):750–753，1975年。[43] J. K. Uhlmann。利用度量树满足一般邻近性／相似性查询。*Information processing letters*，40(4):175–179，1991年。[44] R. F. Sproull。对k维树中最近邻搜索的改进。 *Algorithmica* 6 1 6 579 589, 1991 , (-) : –。

[45] M. Muja 和 D. Lowe。FLANN——近似最近邻快速库用户手册。 *Computer Science Department University of British Columbia Vancouver BC Canada* 5 2009 , , , 。

[46] M. Muja 和 D. G. Lowe。适用于高维数据的可扩展最近邻算法。 *IEEE transactions on pattern analysis and machine intelligence*，36(11):2227–2240，2014年。[47] W. Li、Y. Zhang、Y. Sun、W. Wang、M. Li、W. Zhang 和 X. Lin。高维数据上的近似最近邻搜索——实验、分析与改进。 *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*，32(8):1475–1488，2019年。[48] F. Groh、L. Ruppert、P. Wieschollek 和 H. P. A. Lensch。GGNN：基于图的GPU最近邻搜索。 *IEEE Transactions on Big Data*，9(1):267–279，2022年。[49] M. Huesmann 和 K.-T. Sturm。从勒贝格到泊松的最优传输。 *The Annals of Probability* 41 4 2426 247, 12 2013 , ( ) : –。

[1]Politecnico di Milano, Civil and Environmental Engineering Department, 20133 Milano, Italy, [2]Institut de Recherche en Génie Civil et Mécanique(GeM), Ecole Centrale de Nantes, 4321 Nantes cedex 3, France, [3]California Institute of Technology, Engineering and Applied Science Division, PasadenaCA, 91125, USA

Email address: anna.pandolfi@polimi.it, laurent.stainier@ec-nantes.fr, ortiz@caltech.e du