



BÀI TỔNG QUAN

Tổng quan và phân tích cơ sở toán học của phương pháp hạt chuyển động bán ẩn cho dòng chảy không nén

A review and mathematical analysis of the moving particle semi-implicit method for incompressible flows

Nguyễn Hữu Phước¹, Phạm Văn Chiến^{2,*}

¹ Công ty TNHH Công nghệ Số SDE, Việt Nam

² Nhóm nghiên cứu AIT, Trường Đại học Giao thông vận tải Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam

THÔNG TIN BÀI BÁO

Ngày nhận bài: 23/02/2026

Ngày nhận bản sửa: 31/08/2026

Ngày chấp nhận đăng: 30/09/2026

Ngày xuất bản trực tuyến: 30/09/2026

TỪ KHÓA

Không chia lưới
Phương pháp hạt chuyển động bán ẩn
Mô phỏng dòng chảy không lưới
Mô phỏng đa pha
Ổn định năng lượng
Di chuyển của hạt

KEYWORDS

Mesh-free method
MPS
CFD Mesh-free
Multiphase flow simulation
Energy stability
Particle motion

TÓM TẮT

Các phương pháp động lực học chất lỏng (CFD) tính toán dựa trên chia lưới, như phương pháp phần tử hữu hạn (FEM) và thể tích hữu hạn (FVM), có nền tảng toán học vững chắc nhưng gặp khó khăn khi mô phỏng dòng chảy có mặt tự do biến dạng mạnh, phân tách giọt và tương tác đa pha do méo lưới. Phương pháp hạt chuyển động bán ẩn (MPS) là phương pháp không lưới dựa trên mô tả Lagrangian, cho phép xử lý biến dạng lớn và bề mặt tự do phức tạp. Mặc dù được ứng dụng rộng rãi trong mô phỏng sóng vỡ và tương tác chất lỏng-kết cấu, cơ sở toán học của các toán tử rời rạc trong MPS vẫn cần được hệ thống hóa. Bài báo phân tích nền tảng toán học của MPS, gồm toán tử gradient và Laplace rời rạc, phương trình Poisson áp suất, tính nhất quán dựa trên khai triển Taylor, cấu trúc phổ và tính tiêu tán năng lượng của hệ rời rạc. Kết quả làm rõ các tính chất toán học của MPS dưới các giả thiết về phân bố hạt và cấu trúc toán tử.

ABSTRACT

Computational fluid dynamics (CFD) methods based on mesh discretization, such as the finite element method (FEM) and finite volume method (FVM), have well-established mathematical foundations but face challenges in simulating flows with strongly deforming free surfaces, droplet breakup, and multiphase interactions due to mesh distortion. The Moving Particle Semi-Implicit (MPS) method is a meshfree approach based on a Lagrangian description, enabling the natural treatment of large deformations and complex free surfaces. Although MPS has been widely applied to the simulation of breaking waves and fluid-structure interactions, the mathematical foundations of its discrete operators still require systematic clarification. This paper analyzes the mathematical foundations of MPS, including discrete gradient and Laplacian operators, the pressure Poisson equation, consistency based on Taylor expansion, spectral properties, and energy dissipation of the discrete system. The results clarify the mathematical properties of MPS under assumptions concerning particle distribution and operator structure.

1. Giới thiệu

Trong mô phỏng động lực học chất lỏng, các phương pháp rời rạc hóa dựa trên chia lưới như phần tử hữu hạn và thể tích hữu hạn đã đạt được một nền tảng lý thuyết vững chắc về tính hội tụ và ổn định trong các không gian hàm chuẩn [1]. Những phương pháp này xây dựng nghiệm rời rạc thông qua phân hoạch miền hình học cố định và khai thác cấu trúc dạng yếu của phương trình Navier–Stokes.

Trong những năm gần đây, các nghiên cứu đã tiếp tục làm rõ cơ sở toán học và tính ổn định của các phương pháp hạt. Souto-Iglesias và cộng sự đã phân tích tính nhất quán của các toán tử gradient, phân kỳ và Laplace trong MPS, đồng thời chỉ ra những vấn đề liên quan đến tính nhất quán của phương trình Poisson áp suất [2]. Các nghiên cứu tổng quan gần đây cũng cho thấy độ chính xác, tính ổn định, điều kiện biên và sự

phân bố hạt vẫn là những vấn đề quan trọng trong sự phát triển của MPS [3], [4]. Bên cạnh đó, Imoto đã phân tích sự khác biệt về mặt toán học giữa các toán tử thủy động lực học hạt trơn SPH và MPS, qua đó làm rõ mối liên hệ giữa MPS với các xấp xỉ bình phương tối thiểu động [5]. Gần đây hơn, Miller và cộng sự đã phát triển một phép xấp xỉ toán tử Laplace nhất quán theo khai triển Taylor và đánh giá khả năng hội tụ đối với cả phân bố hạt đồng đều và nhiễu [2].

Tuy nhiên, khi áp dụng cho các bài toán có biến dạng hình học lớn, đặc biệt là dòng chảy mặt tự do, phân tách giọt hoặc vỡ sóng, cấu trúc lưới có thể bị méo nghiêm trọng. Việc duy trì chất lượng lưới trong các tình huống này đòi hỏi tái chia lưới hoặc kỹ thuật theo dõi mặt phân cách phức tạp, làm gia tăng chi phí tính toán và tiềm ẩn nguy cơ suy giảm ổn định số [6].

* Tác giả liên hệ: Phạm Văn Chiến. Email: chien.pham@ut.edu.vn

DOI: <https://doi.org/10.55228/j.uth.150513>

Trước những hạn chế đó, phương pháp MPS, do Koshizuka và Oka đề xuất năm 1996 [7] đã đưa ra một cách tiếp cận khác: thay vì rời rạc hóa miền hình học, phương pháp rời rạc hóa trực tiếp trường vật lý thông qua tập hợp các hạt chuyển động theo mô tả Lagrangian. Cấu trúc này cho phép xử lý tự nhiên các biến dạng lớn và mặt tự do mà không cần duy trì một lưới cố định. Các mở rộng tiếp theo đã chứng minh hiệu quả của MPS trong mô phỏng vỡ sóng, dao động chất lỏng trong bể chứa và nhiều ứng dụng kỹ thuật khác [8].

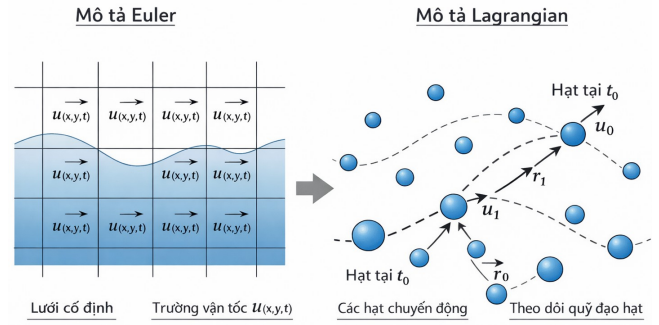
Trong nhóm các phương pháp hạt không chia lưới, MPS là một phương pháp được phát triển đặc biệt cho mô phỏng dòng chảy không nén dựa trên mô tả Lagrangian. Một đặc điểm quan trọng của MPS là các toán tử vi phân được xây dựng trực tiếp từ quan hệ tương tác giữa các hạt thông qua hàm trọng số, do đó không yêu cầu xây dựng lưới tính toán cố định. Đặc điểm này cho phép phương pháp xử lý tự nhiên các bài toán có biến dạng lớn, mặt tự do biến dạng mạnh và các hiện tượng tách hoặc hợp của miền chất lỏng. Tuy nhiên, khả năng này đi kèm với sự phụ thuộc đáng kể của độ chính xác và tính ổn định vào phân bố hạt, hàm trọng số và xử lý điều kiện biên.

Tuy nhiên, mặc dù thành công về mặt thực nghiệm, nền tảng lý thuyết của MPS vẫn chưa được phát triển tương xứng với các phương pháp chia lưới truyền thống. Câu hỏi trung tâm đặt ra là trong điều kiện nào toán tử vi phân rời rạc trong MPS hội tụ về toán tử liên tục? Tính ổn định của hệ rời rạc được bảo đảm bởi cơ chế toán học nào? Và cấu trúc phổ của toán tử Laplace rời rạc có phản ánh bản chất khuếch tán của hệ liên tục hay không?

Những nghiên cứu gần đây đã bắt đầu phân tích lại tính nhất quán của toán tử Laplace trong MPS thông qua khai triển Taylor và đánh giá sai số cục bộ [2]. Tuy nhiên, một bức tranh tổng thể kết nối giữa tính nhất quán, tiêu tán năng lượng, cấu trúc phổ và điều kiện ổn định vẫn chưa được hệ thống hóa một cách đầy đủ.

Phạm vi khảo cứu của bài báo tập trung vào nền tảng toán học của phương pháp MPS, bao gồm xây dựng các toán tử vi phân rời rạc, phương trình Poisson áp suất, tính nhất quán, ổn định số, cấu trúc phổ và tính chất năng lượng của hệ rời rạc. Các tài liệu được lựa chọn dựa trên mức độ liên quan trực tiếp đến MPS và các phương pháp hạt không chia lưới liên quan, ưu tiên các công trình nền tảng và các nghiên cứu có đóng góp trực tiếp cho việc phân tích toán học, tính chính xác và ổn định của phương pháp.

Trên cơ sở phạm vi khảo cứu trên, bài báo tập trung hệ thống hóa và phân tích nền tảng toán học của các toán tử rời rạc trong phương pháp MPS. Cụ thể, chúng tôi làm rõ: (i) cấu trúc rời rạc của toán tử Laplace; (ii) tính tiêu tán năng lượng của hệ; (iii) đặc trưng phổ và điều kiện ổn định theo bước thời gian; và (iv) sự khác biệt bản chất giữa rời rạc hóa dựa trên chia lưới và rời rạc hóa dựa trên tương tác hạt. Qua đó, bài báo góp phần củng cố nền tảng lý thuyết cho phương pháp không chia lưới trong mô phỏng dòng chảy không nén.



Hình 1. So sánh mô tả Euler (trái) và Lagrangian (phải)

2. Cơ sở lý thuyết MPS

2.1. Hệ phương trình Navier–Stokes cho dòng chảy không nén

Dòng chảy chất lỏng Newton không nén được mô tả bởi hệ phương trình Navier–Stokes dưới dạng Lagrangian [1], [9], [10].

$$\frac{Du}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla P + \nu \nabla^2 u + g \quad (1)$$

$$\nabla \cdot u = 0 \quad (2)$$

Trong đó: u là vectơ vận tốc, P là áp suất, ρ là mật độ, ν là độ nhớt động học, g là gia tốc trọng trường.

Đạo hàm vật chất được định nghĩa:

$$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u \cdot \nabla \quad (3)$$

Phương trình (1) biểu diễn bảo toàn động lượng, trong khi (2) thể hiện bảo toàn khối lượng trong điều kiện không nén.

Các phương pháp chia lưới như FEM và FVM giải trực tiếp hệ (1)–(2) trên lưới không gian cố định [6]. Tuy nhiên, đối với các bài toán mặt tự do hoặc phân mảnh chất lỏng, việc duy trì chất lượng lưới trở nên khó khăn [7].

2.2. Diễn giải Lagrangian và cơ sở của phương pháp hạt

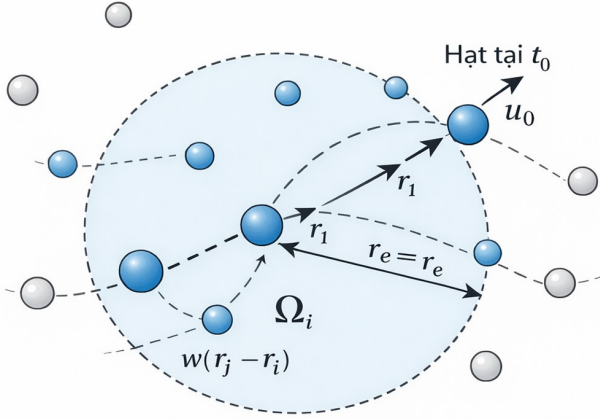
Trong mô tả Lagrangian, chuyển động của mỗi phần tử chất lỏng được theo dõi theo quỹ đạo:

$$\frac{Dr}{Dt} = u \quad (4)$$

Khác với mô tả Euler, thành phần đối lưu trong (3) được hấp thụ vào đạo hàm toàn phần. Điều này mang lại hai ưu điểm quan trọng: Một là không cần rời rạc hóa riêng biệt thành phần đối lưu. Hai là biên tự do được theo dõi tự nhiên theo chuyển động hạt.

Các phương pháp không lưới như SPH và MPS đều dựa trên mô tả này [8]. Tuy nhiên, MPS được thiết kế đặc biệt cho dòng chảy không nén.

Hình 1 trình bày hai khuôn khổ mô tả cơ bản của động lực học chất lỏng. Ở phía trái, mô tả Euler được thiết lập trên một lưới không gian cố định, trong đó các đại lượng trường như vận tốc $u(x,t)$ được xác định tại các điểm trong miền và biến thiên theo thời gian. Cách tiếp cận này gắn với quan sát tại các vị trí không gian cố định và là nền tảng của các phương pháp rời rạc hóa dựa trên chia lưới.



Hình 2. Minh họa miền ảnh hưởng và tương tác hạt trong phương pháp MPS

Ngược lại, phía phải minh họa mô tả Lagrangian, trong đó chuyển động của chất lỏng được biểu diễn thông qua quỹ đạo của các phần tử vật chất. Mỗi hạt mang theo thông tin về vị trí và vận tốc, và các đại lượng vật lý được cập nhật dọc theo quỹ đạo chuyển động. Khuôn khổ này cho phép mô tả trực tiếp sự biến dạng của miền chất lỏng và đặc biệt phù hợp với các bài toán có mặt tự do hoặc biến dạng hình học lớn.

Sự khác biệt giữa hai mô tả không chỉ mang tính hình học mà còn phản ánh hai cách rời rạc hóa khác nhau: một bên dựa trên trường xác định trong miền cố định, bên còn lại dựa trên tập hợp các phần tử chuyển động. Đây chính là cơ sở lý thuyết dẫn đến sự phát triển của các phương pháp không chia lưới như MPS.

2.3. Rời rạc hóa phương trình động lượng trong MPS

Phương pháp MPS do Koshizuka và Oka đề xuất [8], [11] sử dụng tập hạt $\{x_i\}_{i=1}^N$ để biểu diễn miền chất lỏng.

2.3.1. Xấp xỉ mật độ số hạt và cơ chế thực thi điều kiện không nén trong MPS

Trong phương pháp MPS, điều kiện không nén không được áp đặt trực tiếp thông qua toán tử phân kỳ như trong FEM hoặc FVM [1], mà được thực thi gián tiếp thông qua khái niệm mật độ số hạt do Koshizuka và Oka đề xuất [7]. Tại mỗi hạt i , mật độ số hạt được xác định bởi:

$$n_i = \sum_{j \neq i} w(|r_j - r_i|) \quad (5)$$

Trong đó $w(r)$ là hàm trọng số có hỗ trợ hữu hạn trong bán kính ảnh hưởng r_e [7], [8]. Hàm trọng số thường được chọn sao cho:

$$w(r) = \begin{cases} \frac{r_e}{r} - 1, & 0 < r < r_e \\ 0, & r \geq r_e \end{cases} \quad (6)$$

Đảm bảo tính cục bộ của tương tác và bảo toàn tính đẳng hướng.

Biểu thức (5) có thể được xem như một xấp xỉ rời rạc của tích phân thể tích cục bộ [12], [13]:

$$n_i \approx \int_{B(r_i, r_e)} w(|r - r_i|) dV \quad (7)$$

Do đó phản ánh mật độ hình học của hạt trong lân cận điểm đang xét. Trong trạng thái ban đầu, khi phân bố hạt là quasi-uniform [2], giá trị này đạt một hằng số tham chiếu n_0 . Đối với dòng chảy không nén, thể tích phần tử vật chất phải được bảo toàn, tương đương với việc mật độ hạt duy trì xấp xỉ n_0 trong suốt quá trình tính toán. Sai lệch $n_i - n_0$ vì vậy đóng vai trò như đại lượng đo biến dạng thể tích cục bộ và được sử dụng làm nguồn trong phương trình Poisson áp suất. Cơ chế này cho phép chuyển điều kiện $\nabla \cdot u = 0$ sang một ràng buộc đại số trên phân bố hạt, đồng thời duy trì tính nhất quán vật lý trong khuôn khổ Lagrangian hoàn toàn.

Trong nghiên cứu này, phân bố hạt gần đồng đều (quasi-uniform) được hiểu là trạng thái trong đó khoảng cách giữa các hạt lân cận không thay đổi đáng kể trong miền ảnh hưởng, với khoảng cách đặc trưng được sử dụng làm thang đo không gian của phép rời rạc hóa. Giả thiết này không yêu cầu các hạt phải nằm trên một mạng đều tuyệt đối, nhưng yêu cầu mức độ biến thiên khoảng cách lân cận đủ nhỏ để các mô-men hình học cần thiết của phân bố hạt được xấp xỉ ổn định.

2.3.2. Xấp xỉ toán tử Laplace trong phương pháp MPS

Trong phương trình Navier–Stokes (1), toán tử Laplace xuất hiện trong thành phần khuếch tán nhớt $\nu \nabla^2 u$. Đối với các phương pháp chia lưới, Laplacian được xây dựng từ ma trận sai phân hoặc phần tử hữu hạn trên lưới cố định [1]. Tuy nhiên, trong khuôn khổ không lưới của MPS, toán tử này được xấp xỉ thông qua tương tác cục bộ giữa các hạt lân cận, dựa trên giả thiết mô-men bậc hai của phân bố hạt [7], [8].

Cụ thể, với một đại lượng vô hướng ϕ , Laplacian tại hạt i được xác định bởi:

$$\nabla^2 \phi_i = \frac{2d}{\lambda n_0} \sum_{j \neq i} (\phi_j - \phi_i) w(|r_j - r_i|) \quad (8)$$

Trong đó d là số chiều không gian, n_0 là mật độ số hạt tham chiếu và hệ số chuẩn hóa:

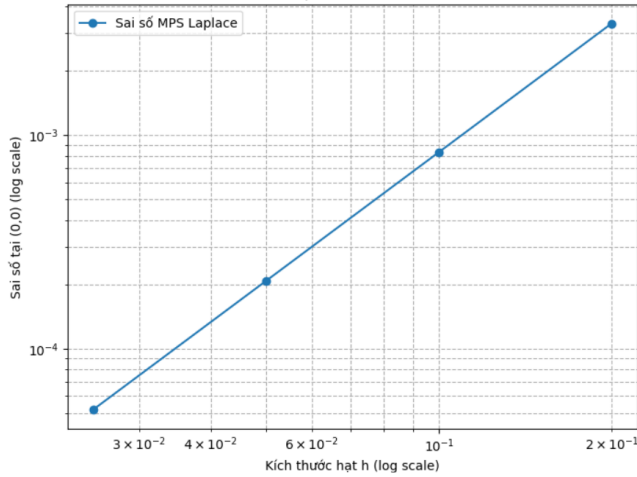
$$\lambda = \frac{\sum_{j \neq i} |r_j - r_i|^2 w_{ij}}{\sum_{j \neq i} w_{ij}} \quad (9)$$

Để bảo đảm tính đẳng hướng của toán tử, hàm trọng số được giả thiết phụ thuộc vào khoảng cách thay vì hướng tương đối giữa hai hạt. Khi kết hợp với phân bố hạt gần đồng đều, giả thiết này làm cho các mô-men bậc nhất theo các hướng đối xứng có xu hướng triệt tiêu, trong khi các moment bậc hai tạo ra thành phần tương ứng với toán tử Laplace. Đây là điều kiện quan trọng trong lập luận dựa trên khai triển Taylor được sử dụng ở mục 2.5.

Các phân tích tiếp theo được thực hiện dưới giả thiết phân bố hạt quasi-uniform trong miền khảo sát và hàm trọng số có tính đẳng hướng, đối xứng và không âm trong miền ảnh hưởng. Các giả thiết này bảo đảm các moment hình học cần thiết có tính chất đối xứng và cho phép đánh giá tính nhất quán của toán tử thông qua khai triển Taylor.

Bảng 1. Kiểm chứng số tính hội tụ của toán tử Laplace MPS đối với phân bố hạt đều

Khoảng cách hạt h	n_0	λ	$\nabla_h^2 \phi$	Giá trị chính xác	Sai số E_h	Bậc hội tụ p
0,200	2,24	0,0443	1,003338	1	$3,34 \times 10^{-3}$	2
0,100	2,24	0,0111	1,000834	1	$8,34 \times 10^{-4}$	2
0,050	2,24	0,0028	1,000208	1	$2,08 \times 10^{-4}$	2
0,025	2,24	0,0007	1,000052	1	$5,21 \times 10^{-5}$	2



Hình 3. Hội tụ của sai số toán tử Laplace MPS theo khoảng cách hạt

Để kiểm chứng tính nhất quán của toán tử Laplace, một bài toán kiểm chứng số được thực hiện với hàm giải tích tại điểm, trong đó giá trị chính xác của toán tử Laplace là. Phân bố hạt được thiết lập trên lưới vuông đều với bán kính ảnh hưởng. Toán tử Laplace rời rạc được tính theo (8), với hàm trọng số và hệ số chuẩn hóa được xác định theo (6) và (9). Khi khoảng cách hạt giảm từ xuống, sai số giảm từ xuống. Bậc hội tụ quan sát được xấp xỉ 2,0. Kết quả này xác nhận khả năng hội tụ của toán tử Laplace MPS đối với phân bố hạt đều và phù hợp với tính nhất quán được phân tích bằng khai triển Taylor.

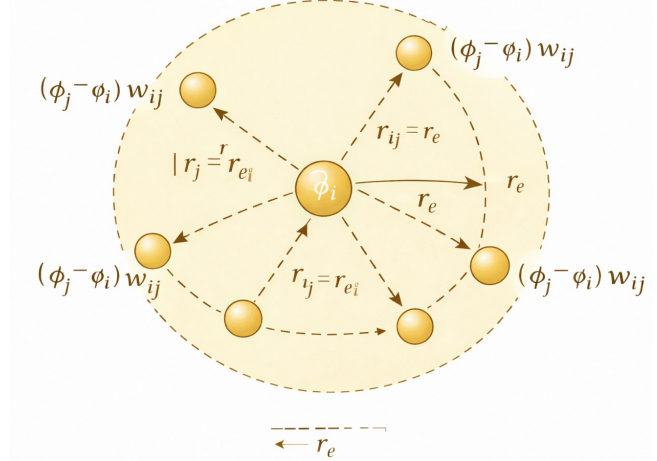
Hình 3 là mô tả minh chứng hội tụ của sai số toán tử Laplace MPS theo khoảng cách hạt. Đảm bảo tính đẳng hướng của xấp xỉ. Biểu thức (8) có thể được diễn giải như một xấp xỉ rời rạc của toán tử tích phân không cục bộ:

$$\nabla^2 \phi_i(r_i) \approx C \int_{B(r_i, r_e)} (\phi(r) - \phi(r_i)) w(|r - r_i|) dV \quad (10)$$

với C là hằng số chuẩn hóa. Phân tích Taylor cho thấy khi phân bố hạt quasi-uniform với khoảng cách đặc trưng h , sai số xấp xỉ đạt bậc $O(h)$ [12]. Điều này chứng minh tính nhất quán bậc một của toán tử Laplace trong MPS.

Về mặt vật lý, tổng $(\phi_j - \phi_i)$ thể hiện chênh lệch cục bộ giữa các hạt, trong khi hàm trọng số điều chỉnh mức độ ảnh hưởng theo khoảng cách. Cấu trúc đối xứng của biểu thức (8) cũng đảm bảo tính tiêu tán năng lượng của hệ rời rạc, góp phần duy trì ổn định số học [12].

Hình 4 biểu diễn cơ chế tương tác cục bộ giữa một hạt trung tâm i và các hạt lân cận trong phương pháp MPS. Vùng tròn bán kính r_e xác định miền ảnh hưởng, trong đó các hạt nằm trong phạm vi này sẽ tham gia vào quá trình xấp xỉ các toán tử vi phân.



Hình 4. Minh họa xấp xỉ toán tử Laplace rời rạc trong phương pháp MPS

Các vectơ r_{ij} thể hiện khoảng cách giữa hạt trung tâm và các hạt lân cận. Mỗi tương tác được gán một trọng số w_{ij} , phụ thuộc vào khoảng cách tương đối, và được sử dụng để tính toán các đại lượng như gradient và Laplace thông qua biểu thức dạng chênh lệch $(\phi_j - \phi_i)w_{ij}$.

Hình minh họa rõ ràng toán tử vi phân trong MPS không được xây dựng từ cấu trúc lưới hình học, mà từ tổng các tương tác có trọng số trong miền lân cận, qua đó hình thành một xấp xỉ rời rạc của toán tử liên tục.

2.4. Thuật toán dự đoán – hiệu chỉnh và phương trình Poisson áp suất trong MPS

Trong phương pháp MPS, hệ phương trình Navier–Stokes không nén được giải thông qua một lược đồ chiếu dạng Lagrangian, thường được gọi là thuật toán dự đoán – hiệu chỉnh [7], [8]. Mục tiêu của thuật toán này là tách việc tính vận tốc thành hai giai đoạn: Giai đoạn một là dự đoán vận tốc tạm thời dưới tác dụng của lực nhớt và ngoại lực; Giai đoạn hai là hiệu chỉnh vận tốc bằng trường áp suất để thỏa điều kiện không nén.

Xuất phát từ phương trình động lượng (1), bỏ qua tạm thời thành phần gradient áp suất, vận tốc trung gian tại bước $n + 1$ được xác định bởi:

$$u^* = u^n + \Delta t(v \nabla^2 u^n + g) \quad (11)$$

Trong đó toán tử Laplace được xấp xỉ theo công thức rời rạc (8). Do chưa xét đến áp suất, trường vận tốc trung gian u^* nói chung không thỏa mãn điều kiện không nén $\nabla \cdot u = 0$. Sai lệch này được phản ánh thông qua mật độ số hạt tạm thời n_i^* , được tính từ phân bố hạt sau bước dự đoán.

Để khôi phục điều kiện không nén, áp suất được xác định từ phương trình Poisson dạng rời rạc [8]:

$$\nabla^2 P^{(n+1)} = \frac{\rho}{\Delta t^2} \frac{n_0 - n_i^*}{n_0} \quad (12)$$

Trong đó n_0 là mật độ hạt tham chiếu ban đầu. Phương trình (12) xác định trường áp suất cần thiết để hiệu chỉnh vận tốc trung gian. Sau khi giải phương trình Poisson áp suất (12), vận tốc được cập nhật theo:

$$u^{(n+1)} = u^* - \frac{\Delta t}{\rho} \nabla P^{(n+1)} \quad (13)$$

Bước hiệu chỉnh này bảo đảm trường vận tốc sau hiệu chỉnh thỏa mãn điều kiện không nén trong phạm vi sai số của phép rời rạc hóa.

Cấu trúc này tương đương với phương pháp chiếu trong CFD cổ điển [10], nhưng được xây dựng hoàn toàn trên nền tảng hạt. Về mặt toán học, thuật toán dự đoán – hiệu chỉnh đảm bảo rằng vận tốc sau hiệu chỉnh thỏa điều kiện không nén ở mức rời rạc, đồng thời duy trì tính tiêu tán năng lượng của hệ. Tính ổn định của lược đồ phụ thuộc vào điều kiện bước thời gian và tính chất của toán tử Laplace rời rạc, đặc biệt là tính đối xứng và đẳng hướng của hàm trọng số [2].

2.5. Phân tích Taylor và tính nhất quán của toán tử Laplace rời rạc

Để đánh giá mức độ chính xác của toán tử Laplace trong MPS, cần xuất phát từ khai triển Taylor của một hàm trơn $\phi(r)$ tại lân cận điểm r_i . Với một hạt lân cận j , ta có:

$$\begin{aligned} \phi(r_j) &= \phi(r_i) + \nabla \phi(r_i) \cdot (r_j - r_i) \\ &+ \frac{1}{2} (r_j - r_i)^T H_\phi(r_i) (r_j - r_i) + O(h^3) \end{aligned} \quad (14)$$

Trong đó H_ϕ là ma trận Hessian và h là khoảng cách đặc trưng giữa các hạt. Trừ hai vế cho $\phi(r_i)$ và thế vào biểu thức rời rạc của Laplacian (8), ta thu được tổng các thành phần bậc nhất và bậc hai. Do phân bố hạt được giả thiết quasi-uniform và hàm trọng số có tính đối xứng xuyên tâm, các hạng bậc nhất triệt tiêu khi lấy tổng trên miền ảnh hưởng. Thành phần bậc hai còn lại tỷ lệ với vết của ma trận Hessian, tức là $\nabla^2 \phi$. Kết quả (15) cho thấy sai số của toán tử Laplace rời rạc phụ thuộc vào khoảng cách đặc trưng giữa các hạt. Dưới giả thiết phân bố hạt gần đồng đều và hàm trọng số thỏa các điều kiện đối xứng cần thiết, sai số giảm khi khoảng cách hạt giảm, cho thấy tính nhất quán của toán tử Laplace MPS trong cấu hình khảo sát. Kết quả phân tích này được kiểm chứng thêm bằng thí nghiệm số trình bày ở Bảng 1 và Hình 3:

$$\nabla^2 \phi_i^{\text{MPS}} = \nabla^2 \phi(r_i) + O(h) \quad (15)$$

Điều này có nghĩa rằng khi khoảng cách hạt giảm một nửa, sai số xấp xỉ giảm xấp xỉ một nửa theo cùng tỷ lệ. Nói cách khác, độ lớn của sai số hội tụ tuyến tính về không khi mật độ hạt tăng lên và $h \rightarrow 0$.

Do đó, dưới giả thiết phân bố hạt quasi-uniform và hàm trọng số có tính đẳng hướng, toán tử Laplace rời rạc trong MPS là một xấp xỉ nhất quán bậc một của toán tử Laplace cổ điển. Sự hội tụ bậc một này được hiểu theo nghĩa sai số cục bộ tại từng hạt thỏa:

$$|\nabla^2 \phi_i^{\text{MPS}} - \nabla^2 \phi(r_i)| \leq Ch \quad (16)$$

Với C là hằng số độc lập với h nhưng phụ thuộc vào chuẩn trơn của hàm ϕ . Điều này đảm bảo tính nhất quán của lược đồ rời rạc, là điều kiện tiên quyết để thiết lập các định lý hội tụ toàn cục khi kết hợp với phân tích ổn định.

Kết quả này cho thấy toán tử Laplace trong MPS không chỉ xuất phát từ trực giác vật lý về tương tác cục bộ giữa các hạt, mà còn có cơ sở giải tích rõ ràng dựa trên khai triển Taylor [2]. Tuy nhiên, tính nhất quán này chỉ được bảo đảm khi phân bố hạt duy trì tính quasi-uniform và hàm trọng số thỏa các điều kiện đẳng hướng cần thiết nhằm loại bỏ các hạng bậc nhất trong khai triển.

Khi các giả thiết này không còn được thỏa mãn, các thành phần bậc nhất trong khai triển Taylor không triệt tiêu hoàn toàn, dẫn đến sai số nhất quán tăng và có thể làm giảm bậc hội tụ của toán tử. Đặc biệt, sự phân bố hạt không đồng đều hoặc bị nhiễu loạn có thể làm thay đổi các mô-men hình học cục bộ, trong khi hàm trọng số không đẳng hướng có thể tạo ra sai số phụ thuộc hướng. Do đó, kết quả về tính nhất quán bậc một trong phân tích này chỉ có hiệu lực dưới các giả thiết về phân bố hạt và cấu trúc hàm trọng số đã nêu.

Cơ chế hội tụ của toán tử Laplace rời rạc có thể được minh họa thông qua mô hình đối xứng đơn giản trong một và hai chiều (Hình 5). Trong trường hợp phân bố điểm đối xứng, các thành phần bậc nhất trong khai triển Taylor triệt tiêu, chỉ còn lại thành phần bậc hai tương ứng với Laplacian. Điều này giải thích vì sao tính đẳng hướng của phân bố hạt là điều kiện then chốt để đảm bảo tính nhất quán của phương pháp.

2.6. Tính ổn định năng lượng của hệ rời rạc

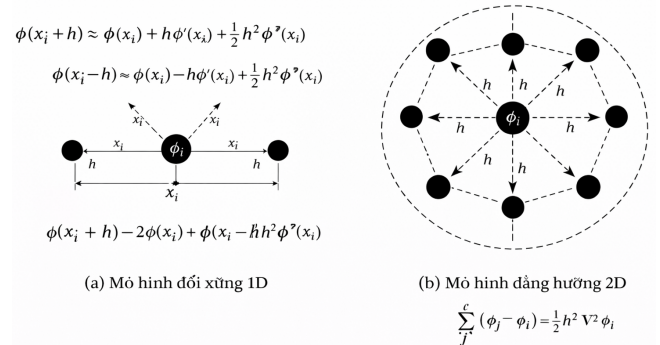
Tính ổn định của phương pháp MPS có thể được phân tích thông qua năng lượng động học rời rạc của hệ hạt. Tương tự cách tiếp cận trong phân tích phương trình Navier–Stokes liên tục [10], ta định nghĩa năng lượng rời rạc tại thời điểm t bởi:

$$E(t) = \frac{1}{2} \sum_i |u_i|^2 V_i \quad (17)$$

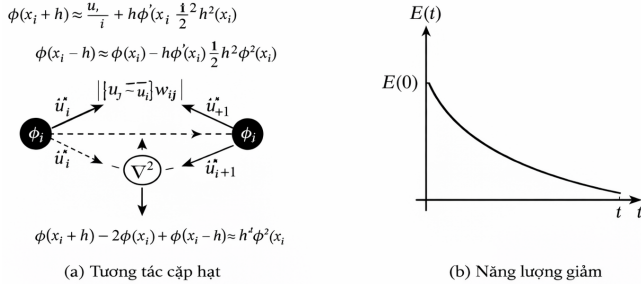
Trong đó V_i là thể tích tương đương của hạt.

Xuất phát từ phương trình động lượng dạng rời rạc trong MPS [7], [8]:

$$\frac{du_i}{dt} = \nu \nabla^2 u_i + g - \frac{1}{\rho} \nabla P_i \quad (18)$$



Hình 5. Minh họa tính đẳng hướng và cơ chế triệt tiêu thành phần bậc nhất trong xấp xỉ Laplacian rời rạc



Hình 6. Minh họa cơ chế tiêu tán năng lượng của toán tử Laplace rời rạc trong MPS

Và chỉ xét thành phần khuếch tán nhất (bỏ qua ngoại lực và áp suất vì không sinh hay tiêu tán năng lượng toàn cục), thay toán tử Laplace rời rạc (8) vào (17), sau đó nhân vô hướng với u_i và lấy tổng theo i , ta thu được:

$$\frac{dE}{dt} = v \sum_i u_i \cdot \nabla^2 u_i \quad (19)$$

Sử dụng tính đối xứng của hàm trọng số và hoán đổi chỉ số i, j , biểu thức trên có thể biến đổi về dạng:

$$\frac{dE}{dt} = -v \sum_{i,j} |u_j - u_i|^2 w_{ij} \leq 0 \quad (20)$$

Kết quả (20) cho thấy năng lượng rời rạc không tăng theo thời gian. Do đó, hàm $E(t)$ đóng vai trò như một hàm Lyapunov cho hệ động lực rời rạc:

- $E(t) \geq 0$,
- $\frac{dE}{dt} \leq 0$,
- $\frac{dE}{dt} = 0$ khi và chỉ khi vận tốc đồng nhất cục bộ

Theo nghĩa này, hệ rời rạc là ổn định theo Lyapunov đối với nhiễu nhỏ của trường vận tốc, miễn là toán tử Laplace bảo toàn tính đối xứng và hàm trọng số dương xác định. Điều này cho thấy hệ rời rạc có tính tiêu tán năng lượng tự nhiên, tương tự cơ chế khuếch tán nhất trong hệ liên tục [2]. Kết quả này đặc biệt quan trọng vì nó đảm bảo rằng nghiệm số không phát triển dao động không vật lý theo thời gian, miễn là bước thời gian thỏa điều kiện ổn định thích hợp.

Hình 6 minh họa trực quan cơ chế tiêu tán năng lượng của toán tử Laplace rời rạc trong phương pháp MPS. Ở **Hình 6a** hai hạt lân cận i và j có vận tốc khác nhau. Thành phần $(u_j - u_i)w_{ij}$ trong biểu thức Laplacian đóng vai trò như một cơ chế khuếch tán cục bộ, làm giảm chênh lệch vận tốc giữa các hạt. Khi vận tốc được cập nhật theo phương trình động lượng, sự khác biệt này dần bị “làm mịn”, phản ánh đúng bản chất vật lý của hiện tượng khuếch tán nhất trong hệ liên tục. **Hình 6b** thể hiện hệ quả ở mức toàn cục: năng lượng động học rời rạc theo biểu thức (17) giảm đơn điệu theo thời gian. Điều này xuất phát trực tiếp từ hệ thức (20).

Sự kết hợp giữa hai panel cho thấy mối liên hệ giữa cơ chế vi mô (tương tác cặp hạt) và hệ quả vĩ mô (giảm năng lượng toàn cục), qua đó củng cố cơ sở toán học của tính ổn định trong phương pháp MPS.

Mặc dù tính tiêu tán năng lượng đảm bảo ổn định liên tục theo thời gian, khi rời rạc hóa theo bước thời gian hữu hạn Δt , cần đảm bảo điều kiện ổn định kiểu khuếch tán. Từ phân tích

phổ của toán tử Laplace rời rạc [2], trị riêng lớn nhất của ma trận khuếch tán có bậc:

$$\lambda_{\max} \sim O\left(\frac{1}{h^2}\right) \quad (21)$$

Do đó, với lược đồ thời gian tường minh, điều kiện ổn định xấp xỉ:

$$\Delta t \leq C \frac{h^2}{v} \quad (22)$$

Trong đó C là hằng số phụ thuộc vào lựa chọn hàm trọng số và số chiều không gian. Điều kiện này tương tự điều kiện CFL khuếch tán trong phương pháp sai phân hữu hạn [9], [10], [14].

Như vậy, tính ổn định của MPS được đảm bảo ở hai mức: Ổn định năng lượng (Lyapunov) [15], [16] ở mức liên tục và ổn định rời rạc phụ thuộc bước thời gian ở mức tính toán.

2.7. So sánh bản chất toán học giữa MPS và các phương pháp chia lưới

Từ góc nhìn giải tích, sự khác biệt cốt lõi giữa phương pháp MPS và các phương pháp chia lưới truyền thống nằm ở cách rời rạc hóa toán tử vi phân. Trong các FEM hoặc FDM, toán tử Laplace được xây dựng thông qua xấp xỉ đạo hàm trên một cấu trúc lưới cố định, và tính hội tụ được chứng minh dựa trên không gian Sobolev cùng các định lý tương thích như điều kiện cực tiểu – cực đại (inf–sup) cho bài toán không nén [17], [18], [19], [20]. Cụ thể, nghiệm rời rạc u_h thỏa ước lượng sai số dạng:

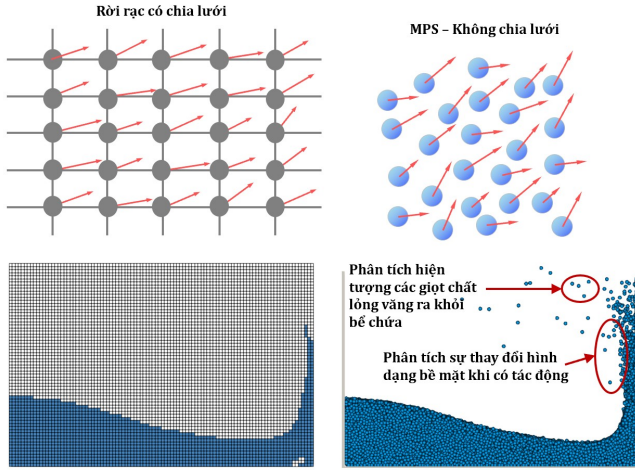
$$\|u - u_h\|_{H^1(\Omega)} \leq Ch^k \quad (23)$$

Với k phụ thuộc vào bậc xấp xỉ của không gian phần tử.

Ngược lại, trong MPS không tồn tại lưới hình học. Toán tử Laplace rời rạc (8) được xây dựng từ tổng tương tác cục bộ giữa các hạt trong bán kính ảnh hưởng hữu hạn. Về bản chất, cấu trúc này tương đương với một xấp xỉ của toán tử tích phân không cục bộ, tương tự các phương pháp không chia lưới khác như SPH hoặc RBF-FD [2], [21]. Khi mật độ hạt tăng và khoảng cách đặc trưng $h \rightarrow 0$, toán tử rời rạc hội tụ về Laplacian cổ điển theo nghĩa nhất quán cục bộ (15). Tuy nhiên, khác với FEM, độ chính xác và tính ổn định của MPS phụ thuộc trực tiếp vào tính đồng nhất của phân bố hạt và tính đẳng hướng của hàm trọng số.

Về phương diện ổn định, phương pháp phần tử hữu hạn bảo đảm tính ổn định thông qua các tính chất toán học của dạng song tuyến tính, cụ thể là tính xác định dương và tính bị chặn của dạng yếu tương ứng [17], [18]. Những tính chất này cho phép thiết lập các ước lượng năng lượng và chứng minh hội tụ trong các không gian hàm thích hợp.

Trong khi đó, đối với phương pháp MPS, tính ổn định không xuất phát từ dạng yếu trên miền chia lưới, mà từ cấu trúc đối xứng của các tương tác cục bộ giữa các hạt. Do hàm trọng số luôn không âm và các tương tác được xây dựng theo dạng chênh lệch $(u_j - u_i)$, toán tử Laplace rời rạc dẫn đến biểu thức tiêu tán năng lượng như trong (20). Tính chất này đảm bảo rằng hệ rời rạc không sinh thêm năng lượng theo thời gian, miễn là phân bố hạt duy trì tính đều tương đối.



Hình 7. So sánh phương pháp chia lưới và phương pháp MPS trong mô phỏng dòng chảy mặt tự do

Do đó, có thể xem MPS như một phương pháp rời rạc hóa dựa trên mạng liên kết giữa các hạt lân cận, trong đó các hệ số tương tác giữa các cặp hạt đóng vai trò tương tự như ma trận Laplace trong lý thuyết đồ thị [22], [23], [24], [25]. Cấu trúc này phản ánh sự phụ thuộc lẫn nhau giữa các hạt thông qua quan hệ lân cận hình học, thay vì thông qua lưới phân tử cố định như trong phương pháp truyền thống.

Hình 7 minh họa sự khác biệt về bản chất rời rạc hóa giữa phương pháp chia lưới truyền thống và phương pháp MPS không chia lưới.

Ngược lại, với phương pháp MPS không chia lưới, miền chất lỏng được biểu diễn bởi tập hợp các hạt di chuyển theo mô tả Lagrangian. Không tồn tại cấu trúc lưới cố định; thay vào đó, các hạt tương tác với nhau trong phạm vi lân cận thông qua hàm trọng số. Cách tiếp cận này cho phép mô phỏng tự nhiên hiện tượng các giọt chất lỏng văng ra khỏi bể chứa và sự biến đổi mạnh mẽ của bề mặt tự do mà không cần xử lý tái chia lưới.

Hình minh họa cho thấy ưu thế của phương pháp không chia lưới trong các bài toán có biến dạng lớn, phân mảnh chất lỏng và tương tác mặt tự do phức tạp, vốn là những trường hợp gây khó khăn cho các phương pháp dựa trên lưới cố định.

Từ Bảng 2 có thể nhận thấy rằng hai cách tiếp cận rời rạc hóa dựa trên những nguyên lý toán học khác nhau. Phương pháp chia lưới xây dựng lời giải trên một cấu trúc hình học cố định và dựa vào khung lý thuyết dạng yếu đã được phát triển hoàn chỉnh, trong khi phương pháp MPS dựa trên tương tác cục bộ giữa các hạt và tính chất hình học của phân bố điểm. Sự khác biệt này không chỉ mang tính kỹ thuật mà còn phản ánh hai triết lý rời rạc hóa khác nhau: một bên dựa trên phân hoạch miền liên tục, bên còn lại dựa trên quan hệ lân cận giữa các điểm rời rạc. Do đó, việc lựa chọn phương pháp phụ thuộc vào đặc trưng bài toán, đặc biệt là mức độ biến dạng hình học và yêu cầu ổn định trong mô phỏng các hiện tượng mặt tự do phức tạp.

Xét trong nhóm các phương pháp hạt không chia lưới, SPH và MPS đều sử dụng mô tả Lagrangian và biểu diễn chất lưu bằng tập hợp các hạt tương tác trong miền lân cận. Tuy nhiên, hai phương pháp có cách xây dựng toán tử và cơ chế xử lý áp suất khác nhau. SPH xây dựng các đại lượng vi phân thông

qua xấp xỉ hạt dựa trên hàm nhân, trong khi MPS xây dựng các toán tử rời rạc từ tổng tương tác có trọng số giữa các hạt và sử dụng mật độ số hạt làm đại lượng ràng buộc cho dòng chảy không nén. MPS do đó phù hợp với các bài toán dòng chảy không nén có biến dạng lớn và mặt tự do phức tạp. Tuy nhiên, độ chính xác và ổn định của MPS phụ thuộc đáng kể vào phân bố hạt, hàm trọng số và cách xử lý vùng biên. Các phương pháp hạt nói chung có ưu thế trong việc xử lý biến dạng hình học lớn nhưng thường có chi phí tính toán cao và yêu cầu kiểm soát phân bố hạt chặt chẽ hơn so với các phương pháp chia lưới trong các bài toán có hình học cố định. Vì vậy, việc lựa chọn phương pháp phụ thuộc vào đặc điểm bài toán, yêu cầu về mặt tự do, độ biến dạng hình học và tiêu chí ổn định số.

Nhìn chung, ưu thế đặc trưng của MPS nằm ở khả năng mô tả trực tiếp chuyển động của các hạt và xử lý các mặt tự do biến dạng lớn mà không cần tái chia lưới. Tuy nhiên, ưu thế này đi kèm với sự phụ thuộc của độ chính xác và tính ổn định vào phân bố hạt, bán kính ảnh hưởng và cấu trúc của hàm trọng số. Do đó, các kết quả về tính nhất quán và ổn định được trình bày trong bài báo chỉ có giá trị dưới các giả thiết tương ứng về phân bố hạt và toán tử rời rạc.

2.8. Phân tích phổ của toán tử Laplace rời rạc và hệ quả đối với ổn định số

Để hiểu sâu hơn bản chất ổn định và điều kiện hội tụ của phương pháp MPS, bỏ qua hệ số chuẩn dương $\frac{2d}{\lambda n_0}$, xét toán tử tương đương về cấu trúc phổ của toán tử Laplace rời rạc. Như đã trình bày ở (8), với một đại lượng vô hướng ϕ , toán tử Laplace rời rạc tại hạt i có dạng:

$$(L_h \phi)_i = \sum_{j \in N(i)} w_{ij} (\phi_j - \phi_i) \quad (24)$$

Trong đó $w_{ij} \geq 0$ là trọng số tương tác giữa các hạt lân cận. Biểu thức (24) có thể được viết lại dưới dạng ma trận:

$$L_h = W - D \quad (25)$$

Với:

$$D_{ii} = \sum_j w_{ij} \quad (26)$$

$$W_{ij} = w_{ij} \quad (27)$$

Do $w_{ij} = w_{ji}$ và $w_{ij} \geq 0$, ma trận L_h là ma trận đối xứng thực. Xét tích vô hướng trong không gian hữu hạn chiều, với vectơ $\phi = (\phi_1, \dots, \phi_N)^T$, ta có:

$$\phi^T L_h \phi = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} w_{ij} (\phi_i - \phi_j)^2 \leq 0 \quad (28)$$

Từ (28), ta có $\phi^T L_h \phi \leq 0$ với mọi ϕ , do đó L_h là ma trận bán xác định âm. Hệ quả là tất cả các trị riêng của L_h đều không dương, trong đó trị riêng lớn nhất bằng 0 và tương ứng với không gian nghiệm gồm các vectơ hằng.

Bảng 2. So sánh phương pháp chia lưới và phương pháp MPS trong mô phỏng dòng chảy

Các tiêu chí	Phương pháp chia lưới (FEM/FVM)	Phương pháp MPS (không chia lưới)
Cấu trúc rời rạc hóa	Miền chia thành phần tử hoặc ô lưới cố định [17], [19]	Miền biểu diễn bằng tập hạt di chuyển [7], [8], [11], [26]
Mô tả chuyển động	Mô tả Euler trên lưới cố định [19]	Mô tả Lagrangian theo quỹ đạo hạt [7], [26]
Xây dựng toán tử Laplace	Từ dạng yếu hoặc sai phân trên lưới [17]	Tổng các chênh lệch có trọng số giữa các hạt lân cận [2], [7]
Điều kiện không nén	Áp đặt thông qua dạng yếu và điều kiện tương thích của không gian xấp xỉ [19]	Thực thi thông qua mật độ số hạt và phương trình Poisson áp suất [7], [8]
Xử lý mặt tự do	Cần kỹ thuật theo dõi bề mặt phân cách riêng biệt [19]	Tự nhiên do hạt chuyển động cùng dòng chảy [8]
Phản ứng khi biến dạng lớn	Có thể xuất hiện méo lưới, cần tái chia lưới [17]	Không phát sinh méo lưới do không tồn tại cấu trúc lưới cố định [7]
Cơ sở ổn định	Dựa trên tính xác định dương và tính bị chặn của dạng song tuyến tính [17], [19]	Tự nhiên do hạt chuyển động cùng dòng chảy [8]
Phụ thuộc hình học	Phụ thuộc chất lượng và cấu trúc của lưới [17]	Phụ thuộc mức độ phân bố đều của các hạt [8]
Phân tích hội tụ	Đã có khung lý thuyết đầy đủ trong các không gian hàm Sobolev [17], [19]	Phụ thuộc mức độ phân bố đều của các hạt [8]
Cấu trúc đại số	Ma trận thưa thu được từ rời rạc hóa miền [17]	Ma trận hệ số tương đương Laplace trọng số của mạng lân cận giữa các hạt [8], [22], [27]

Cấu trúc phổ này tương tự toán tử Laplace liên tục trong miền bị chặn với điều kiện biên thích hợp [17], [28]. Khi khoảng cách hạt giảm và các giả thiết về phân bố hạt gần đồng đều cùng tính đối xứng của hàm trọng số được duy trì, cấu trúc phổ của toán tử Laplace rời rạc có xu hướng tiệm cận cấu trúc phổ của toán tử Laplace liên tục. Trong phạm vi bài báo này, nhận xét trên được sử dụng để diễn giải cấu trúc phổ và tính ổn định của toán tử MPS; chứng minh hội tụ phổ đầy đủ không thuộc phạm vi của nghiên cứu.

Từ quan điểm ổn định số, xét phương trình khuếch tán rời rạc dạng:

$$\frac{du}{dt} = -\nu L_h u \quad (29)$$

Nghiệm của hệ vi phân tuyến tính này có dạng:

$$u(t) = \exp(-\nu L_h t) u(0) \quad (30)$$

Vì các trị riêng của L_h không âm, các hệ số mũ $\exp(-\nu \lambda_k t)$ đều không vượt quá 1 và suy giảm theo thời gian nếu $\lambda_k > 0$. Điều này xác nhận rằng toán tử Laplace rời rạc sinh ra một bán nhóm co, phản ánh bản chất khuếch tán của hệ và cho thấy tính chất khuếch tán của hệ thông qua sự suy giảm của các mode theo thời gian.

Khi rời rạc hóa theo thời gian bằng công thức sai phân tiến, trong đó giá trị tại bước mới được tính trực tiếp từ giá trị đã biết ở bước trước:

$$u^{n+1} = u^n - \Delta t \nu L_h u^n \quad (31)$$

điều kiện ổn định tuyến tính yêu cầu:

$$\Delta t \leq \frac{2}{\nu \lambda_{\max}} \quad (32)$$

Trong đó $\lambda_{\max}$ là trị riêng lớn nhất của L_h . Do phân tích cận trên phổ cho thấy $\lambda_{\max} \sim O(h^{-2})$, ta thu được điều kiện bước thời gian dạng:

$$\Delta t \leq C \frac{h^2}{\nu} \quad (33)$$

Phù hợp với đặc trưng khuếch tán của bài toán liên tục [17]. Như vậy, phân tích phổ không chỉ làm rõ nguồn gốc của tính tiêu tán năng lượng mà còn cung cấp cơ sở định lượng cho việc lựa chọn bước thời gian tính toán.

Tổng hợp lại, toán tử Laplace rời rạc trong MPS có cấu trúc đại số bảo toàn tính đối xứng và bán xác định dương, đảm bảo: Không sinh thêm năng lượng trong hệ, có phổ không âm, sinh ra động học khuếch tán ổn định và hội tụ về toán tử Laplace liên tục khi mật độ hạt tăng.

Những tính chất này cũng cơ sở toán học của phương pháp MPS trong khuôn khổ rời rạc hóa dựa trên tương tác cục bộ giữa các hạt.

3. Khoảng trống lý thuyết và hướng phát triển

Mặc dù phương pháp MPS đã được ứng dụng rộng rãi trong mô phỏng dòng chảy mặt tự do, vỡ sóng, phân tách giọt và tương tác chất lỏng – kết cấu, nền tảng lý thuyết toán học của phương pháp này vẫn chưa đạt đến mức hoàn chỉnh như các phương pháp chia lưới truyền thống. Những khoảng trống này không làm giảm giá trị thực tiễn của MPS, nhưng đặt ra yêu cầu phát triển một khung phân tích chặt chẽ hơn nhằm bảo đảm tính tin cậy trong các ứng dụng quy mô lớn và các bài toán phức tạp.

Thứ nhất, vấn đề hội tụ toàn cục của nghiệm rời rạc về nghiệm liên tục vẫn chưa được chứng minh đầy đủ trong khuôn khổ không gian hàm chuẩn. Phần lớn các kết quả hiện tại dừng lại ở phân tích tính nhất quán cục bộ của toán tử Laplace hoặc ước lượng sai số bậc một dưới giả thiết phân bố hạt tương đối đồng đều. Tuy nhiên, một định lý hội tụ toàn cục, bao gồm sự tồn tại nghiệm rời rạc, tính duy nhất và ước lượng sai số trong chuẩn năng lượng hoặc chuẩn L^2 , vẫn là một bài toán mở.

Thứ hai, ảnh hưởng của sự phân bố không đều của hạt đến ổn định và sai số vẫn chưa được mô tả định lượng một cách hệ thống. Trong thực tế tính toán, phân bố hạt có thể bị biến dạng đáng kể do chuyển động dòng chảy. Khi đó, các giả thiết về tính đẳng hướng cục bộ và khoảng cách đặc trưng gần như đồng nhất không còn được bảo đảm. Cần xây dựng các tiêu chí định lượng để đánh giá mức độ lệch chuẩn của phân bố hạt và tác động của nó đến phổ của toán tử rời rạc.

Thứ ba, việc nâng cao bậc chính xác của toán tử vi phân trong MPS còn hạn chế. Phương pháp hiện tại chủ yếu đạt bậc chính xác tuyến tính theo khoảng cách hạt. Các hướng phát triển có thể bao gồm điều chỉnh mô men bậc cao, xây dựng trọng số thích nghi hoặc kết hợp với các phương pháp nội suy

có cơ sở giải tích rõ ràng hơn. Tuy nhiên, bất kỳ cải tiến nào cũng phải đồng thời duy trì tính đối xứng và tính tiêu tán năng lượng của hệ.

Thứ tư, khung phân tích hiện nay chủ yếu áp dụng cho dòng chảy một pha không nén. Đối với các bài toán đa pha, có mặt phân cách chuyển động hoặc tương tác với vật thể biến dạng, cấu trúc toán học của hệ trở nên phức tạp hơn đáng kể. Khi đó, việc duy trì ổn định năng lượng và tính bảo toàn khối lượng ở mức rời rạc là một thách thức đáng kể.

Cuối cùng, từ góc độ tính toán hiệu năng cao, việc mở rộng MPS cho các bài toán quy mô lớn với hàng triệu hạt đòi hỏi phân tích sâu hơn về cấu trúc ma trận hệ số, tính điều kiện của hệ phương trình Poisson và khả năng hội tụ của các thuật toán lặp. Đây là hướng nghiên cứu kết nối giữa phân tích số và khoa học tính toán.

4. Kết luận và kiến nghị

Bài báo đã trình bày một cách hệ thống cơ sở toán học của phương pháp MPS trong mô phỏng dòng chảy không nén, với trọng tâm là cấu trúc rời rạc hóa các toán tử vi phân và các tính chất ổn định của hệ. Thay vì tiếp cận phương pháp MPS như một công cụ tính toán thuần túy dựa trên trực giác vật lý, nghiên cứu này đã phân tích phương pháp dưới góc nhìn giải tích, làm rõ mối liên hệ giữa khai triển Taylor, cấu trúc đại số của toán tử Laplace rời rạc và các hệ quả phổ.

Kết quả phân tích cho thấy toán tử Laplace trong MPS có thể được diễn giải như một ma trận bán xác định dương, với phổ không âm và cấu trúc tương tự toán tử khuếch tán trong hệ liên tục. Từ đó, tính tiêu tán năng lượng của hệ rời rạc được thiết lập thông qua biểu thức năng lượng động học, chứng minh rằng phương pháp không sinh thêm năng lượng trong quá trình tính toán. Đồng thời, phân tích phổ đã cung cấp cơ sở định lượng cho điều kiện lựa chọn bước thời gian, phản ánh mối quan hệ giữa khoảng cách đặc trưng của hạt và độ ổn định của lược đồ thời gian.

Bên cạnh đó, bài báo đã chỉ ra sự khác biệt bản chất giữa rời rạc hóa dựa trên chia lưới và rời rạc hóa dựa trên tương tác cục bộ giữa các hạt. Nếu như phương pháp chia lưới dựa trên khung lý thuyết dạng yếu trong không gian hàm Sobolev, thì MPS hình thành cấu trúc đại số từ mạng lân cận hình học giữa các hạt. Cách tiếp cận này mang lại ưu thế trong các bài toán biến dạng lớn và mặt tự do, nhưng đồng thời đặt ra những yêu cầu cao hơn về kiểm soát phân bố hạt và phân tích hội tụ.

Tuy nhiên, nghiên cứu cũng thừa nhận rằng nền tảng lý thuyết của MPS vẫn còn những khoảng trống quan trọng. Đặc biệt, việc thiết lập một định lý hội tụ toàn cục trong chuẩn năng lượng, đánh giá ảnh hưởng định lượng của phân bố hạt không đều, cũng như xây dựng các toán tử bậc cao nhưng vẫn bảo toàn tính tiêu tán năng lượng là những hướng nghiên cứu cần được tiếp tục phát triển. Ngoài ra, đối với các bài toán đa pha và tương tác chất lỏng – kết cấu, cấu trúc toán học của hệ trở nên phức tạp hơn và đòi hỏi phân tích sâu hơn về tính ổn định và bảo toàn.

Từ góc độ ứng dụng, việc củng cố cơ sở lý thuyết cho MPS không chỉ mang ý nghĩa học thuật mà còn có ý nghĩa thực tiễn quan trọng. Trong bối cảnh mô phỏng công nghiệp với quy mô lớn và yêu cầu độ tin cậy cao, một phương pháp tính toán chỉ thực sự bền vững khi được bảo đảm bởi nền tảng phân

tích số vững chắc. Do đó, sự kết hợp giữa phân tích giải tích, kiểm chứng số và phát triển thuật toán hiệu quả cao sẽ là định hướng then chốt cho các nghiên cứu tiếp theo.

Tóm lại, bài báo đã góp phần làm rõ cơ sở toán học của phương pháp MPS, từ tính nhất quán, cấu trúc phổ đến tiêu tán năng lượng, qua đó đặt nền móng cho việc phát triển một khung lý thuyết hoàn chỉnh hơn trong tương lai. Việc tiếp tục nghiên cứu theo hướng hội tụ toàn cục, nâng cao bậc chính xác và mở rộng sang các bài toán đa vật lý sẽ là bước tiến quan trọng nhằm khẳng định vị thế của phương pháp không chia lưới trong lĩnh vực mô phỏng động lực học chất lỏng.

Bên cạnh những kết quả đạt được, nghiên cứu này vẫn tồn tại một số hạn chế cần được nhìn nhận một cách khách quan. Trước hết, các phân tích được trình bày chủ yếu tập trung vào toán tử Laplace rời rạc và cấu trúc năng lượng của hệ khuếch tán, trong khi phần tương tác áp suất và tính không nén mới chỉ được xem xét ở mức cấu trúc đại số mà chưa thiết lập đầy đủ ước lượng sai số trong chuẩn năng lượng. Do đó, mối liên hệ giữa nghiệm rời rạc và nghiệm yếu của hệ Navier–Stokes liên tục vẫn chưa được chứng minh toàn diện.

Thứ hai, các lập luận về hội tụ được xây dựng dưới giả thiết phân bố hạt tương đối đồng đều và hàm trọng số đẳng hướng. Trong thực tế mô phỏng, đặc biệt với các bài toán biến dạng mạnh hoặc tương tác phức tạp, phân bố hạt có thể mất tính đồng đều đáng kể. Ảnh hưởng định lượng của hiện tượng này đến phổ của toán tử rời rạc và điều kiện ổn định chưa được đánh giá đầy đủ trong khuôn khổ nghiên cứu hiện tại.

Thứ ba, bài báo chưa khảo sát chi tiết vấn đề điều kiện biên phức tạp và tương tác với vật thể biến dạng, vốn có thể làm thay đổi cấu trúc ma trận hệ số và tính chất phổ của hệ. Đối với các bài toán đa pha hoặc có sức căng bề mặt, cấu trúc phi tuyến mạnh của hệ phương trình sẽ đặt ra thách thức lớn hơn cho việc thiết lập ước lượng năng lượng.

Từ những hạn chế trên, các hướng nghiên cứu tiếp theo có thể tập trung vào bốn phương diện chính. Thứ nhất, xây dựng một định lý hội tụ toàn cục cho hệ MPS trong chuẩn năng lượng hoặc chuẩn L^2 , bao gồm sự tồn tại và duy nhất của nghiệm rời rạc. Thứ hai, phát triển các tiêu chí định lượng để đo mức độ lệch chuẩn của phân bố hạt và thiết lập mối liên hệ giữa mức độ không đồng đều này với sai số và phổ trị riêng của hệ. Thứ ba, nghiên cứu các toán tử bậc cao hoặc phương pháp hiệu chỉnh mô men nhằm nâng cao độ chính xác không gian mà vẫn duy trì tính tiêu tán năng lượng. Cuối cùng, mở rộng phân tích sang các bài toán đa vật lý, trong đó cần kết hợp giữa phân tích giải tích, mô phỏng số và các thuật toán giải hệ tuyến tính hiệu quả cao.

Đóng góp của tác giả

Nguyễn Hữu Phước: Thu thập và quản lý dữ liệu, phát triển phần mềm, thực hiện nghiên cứu, trực quan hóa kết quả, phản hồi ý kiến phản biện, biên soạn bản thảo gốc. Phạm Văn Chiến: Đề xuất ý tưởng nghiên cứu, xây dựng phương pháp, phân tích hình thức, thực hiện nghiên cứu, thẩm định kết quả, trực quan hóa, hướng dẫn chuyên môn, phản hồi ý kiến phản biện, biên tập và hoàn thiện bản thảo. Tất cả các tác giả đã đọc và thống nhất với phiên bản cuối cùng của bài báo được công bố.

Xung đột lợi ích

Các tác giả cam kết rằng không tồn tại bất kỳ xung đột lợi ích tiềm ẩn nào phát sinh từ nghiên cứu này và bài báo chưa từng được công

bổ trước đó.

Chia sẻ dữ liệu

Dữ liệu của nghiên cứu sẽ được cung cấp theo yêu cầu hợp lý.

Lời cảm ơn

Các tác giả xin chân thành cảm ơn Công ty TNHH Công Nghệ Số SDE và Trường Đại học Giao thông Vận tải Thành phố Hồ Chí Minh đã tạo điều kiện thuận lợi cho quá trình thực hiện nghiên cứu.

Author information

Nguyen Huu Phuoc, SDE Digital Technology Company Limited, Vietnam

Pham Van Chien*, AIT Research Group, Ho Chi Minh City University of Transport, Vietnam

*Corresponding author: chien.pham@ut.edu.vn

Tài liệu tham khảo

- [1] K. J. Bathe, *Finite Element Procedures*. 1996.
- [2] S. Miller, E. Renzi, and M. Discacciati, “Taylor consistent discretisation of the Laplace operator in the Moving Particle Semi-implicit method,” *J. Comput. Appl. Math.*, vol. 475, 2026, doi: [10.1016/j.cam.2025.117000](https://doi.org/10.1016/j.cam.2025.117000).
- [3] G. Li *et al.*, “A review on MPS method developments and applications in nuclear engineering,” *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, vol. 367, p. 113166, Aug. 2020, doi: [10.1016/J.CMA.2020.113166](https://doi.org/10.1016/J.CMA.2020.113166).
- [4] F. Xie, W. Zhao, and D. Wan, “Overview of Moving Particle Semi-implicit Techniques for Hydrodynamic Problems in Ocean Engineering,” 2022. doi: [10.1007/s11804-022-00284-9](https://doi.org/10.1007/s11804-022-00284-9).
- [5] Y. Imoto, “Difference between smoothed particle hydrodynamics and moving particle semi-implicit operators,” *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, vol. 395, p. 115012, May 2022, doi: [10.1016/J.CMA.2022.115012](https://doi.org/10.1016/J.CMA.2022.115012).
- [6] C. W. Hirt and B. D. Nichols, “Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries,” *J. Comput. Phys.*, vol. 39, no. 1, 1981, doi: [10.1016/0021-9991\(81\)90145-5](https://doi.org/10.1016/0021-9991(81)90145-5).
- [7] S. Koshizuka and Y. Oka, “Moving-particle semi-implicit method for fragmentation of incompressible fluid,” *Nuclear Science and Engineering*, vol. 123, no. 3, 1996, doi: [10.13182/NSE96-A24205](https://doi.org/10.13182/NSE96-A24205).
- [8] S. Koshizuka, A. Nobe, and Y. Oka, “Numerical analysis of breaking waves using the moving particle semi-implicit method,” *Int. J. Numer. Methods Fluids*, vol. 26, no. 7, 1998, doi: [10.1002/\(sici\)1097-0363\(19980415\)26:7<751::aid-fld671>3.0.co;2-c](https://doi.org/10.1002/(sici)1097-0363(19980415)26:7<751::aid-fld671>3.0.co;2-c).
- [9] K. Wiratama, S. Roberts, and K. Duru, “Weak imposition of boundary conditions for the gauge formulation of the incompressible Navier–Stokes equations,” *ANZIAM Journal*, vol. 62, 2022, doi: [10.21914/anziamj.v62.16117](https://doi.org/10.21914/anziamj.v62.16117).
- [10] R. Temam, “Navier-Stokes equations: theory and numerical analysis,” 1978, doi: [10.1115/1.3424338](https://doi.org/10.1115/1.3424338).
- [11] M. Kondo and S. Koshizuka, “Improvement of stability in moving particle semi-implicit method,” *Int. J. Numer. Methods Fluids*, vol. 65, no. 6, 2011, doi: [10.1002/fld.2207](https://doi.org/10.1002/fld.2207).
- [12] J. J. Monaghan, “Smoothed particle hydrodynamics,” *Reports on Progress in Physics*, vol. 68, 2005, doi: [10.1088/0034-4885/68/8/R01](https://doi.org/10.1088/0034-4885/68/8/R01).
- [13] M. Bagheri, M. Mohammadi, and M. Riazzi, “A review of smoothed particle hydrodynamics,” 2024. doi: [10.1007/s40571-023-00679-7](https://doi.org/10.1007/s40571-023-00679-7).
- [14] T. Zou, Q. Yan, T. Sui, Z. Zhao, J. Li, and Y. An, “Key Parameters and Experimental Study of High-Speed Rotating Meshing Gear Injection Lubrication Based on Moving Particle Semi-Implicit Method,” *Lubricants*, vol. 11, no. 9, 2023, doi: [10.3390/lubricants11090366](https://doi.org/10.3390/lubricants11090366).
- [15] A. M. Lyapunov, “The general problem of the stability of motion,” *Int. J. Control*, vol. 55, no. 3, 1992, doi: [10.1080/00207179208934253](https://doi.org/10.1080/00207179208934253).
- [16] R. Hill, “Stability by Liapunov’s direct method with applications,” *J. Mech. Phys. Solids*, vol. 10, no. 4, 1962, doi: [10.1016/0022-5096\(62\)90008-x](https://doi.org/10.1016/0022-5096(62)90008-x).
- [17] S. C. Brenner and R. L. Scott, *The mathematical theory of finite element methods; Texts in applied mathematics ; 15*. 2008.
- [18] A. Bonito, C. Canuto, R. H. Nochetto, and A. Veiser, “Adaptive finite element methods,” *Acta Numerica*, vol. 33, 2024, doi: [10.1017/S0962492924000011](https://doi.org/10.1017/S0962492924000011).
- [19] V. Girault and P.-A. Raviart, “Finite Element Methods for Navier-Stokes Equations,” *Annu. Rev. Fluid Mech.*, vol. 5, 1992.
- [20] L. Balazi Atchy Nillama, J. Yang, and L. Yang, “An explicit stabilised finite element method for Navier-Stokes-Brinkman equations,” *J. Comput. Phys.*, vol. 457, 2022, doi: [10.1016/j.jcp.2022.111033](https://doi.org/10.1016/j.jcp.2022.111033).
- [21] G. R. Liu and M. B. Liu, *Smoothed Particle Hydrodynamics – A Meshfree Particle Method*. 2010. doi: [10.1142/9789812564405](https://doi.org/10.1142/9789812564405).
- [22] H. Yamada, “Geary’s c and Spectral Graph Theory: A Complement,” *Mathematics*, vol. 11, no. 20, 2023, doi: [10.3390/math11204228](https://doi.org/10.3390/math11204228).
- [23] B. Mohar, “The Laplacian Spectrum of Graphs,” in *Graph Theory, Combinatorics, and Applications*, 1991.
- [24] K. C. Das, “The Laplacian spectrum of a graph,” *Computers and Mathematics with Applications*, vol. 48, no. 5–6, 2004, doi: [10.1016/j.camwa.2004.05.005](https://doi.org/10.1016/j.camwa.2004.05.005).
- [25] S. Banerjee and S. Ganguly, “On Laplacian and distance Laplacian spectra of generalized fan graph and a new graph class,” *International Journal of Mathematics and Computer in Engineering*, vol. 3, no. 2, 2025, doi: [10.2478/ijmce-2025-0021](https://doi.org/10.2478/ijmce-2025-0021).
- [26] X. J. Pan, H. X. Zhang, and Y. T. Lu, “Numerical simulation of viscous liquid sloshing by moving-particle semi-implicit method,” *Journal of Marine Science and Application*, vol. 7, no. 3, 2008, doi: [10.1007/s11804-008-7047-3](https://doi.org/10.1007/s11804-008-7047-3).
- [27] D. K. Hammond, P. Vanderghenst, and R. Gribonval, “Wavelets on graphs via spectral graph theory,” *Appl. Comput. Harmon. Anal.*, vol. 30, no. 2, 2011, doi: [10.1016/j.acha.2010.04.005](https://doi.org/10.1016/j.acha.2010.04.005).
- [28] O. Sano, *Partial Differential Equations*. 2023. doi: [10.1142/8498](https://doi.org/10.1142/8498).