

* 研究简讯 *

SPH 方法在溃坝流动模拟中的应用

张 健 陆利蓬 刘恩洲

北京航空航天大学 能源与动力工程学院, 北京 100083

摘要 光滑粒子(smoothed particle hydrodynamics, SPH)方法是一种新近发展的可用于流动模拟的无网格数值方法,理论上能够适应任意变形,在模拟流体流动的剧烈变形时有显著的优势。但是流动的初始、边界条件和一些计算参数的选取都会对计算结果产生较大的影响。作者基于 SPH 方法的基本原理,全面考虑了各种定解条件的设置,独立发展了一套用于模拟不可压自由表面流动的 SPH2D 程序,并应用于溃坝流动的模拟之中。SPH 模拟结果与 Harlow 和 Welch 经典的 MAC(marker and cell)结果非常吻合,验证了方法的准确性,为 SPH 方法的进一步发展和广泛应用奠定了一定的基础。

关键词 SPH 方法 溃坝流动 人工拟压缩方法

自由表面流动现象广泛存在于日常生活和工业生产之中,几乎有流动的地方就存在着自由表面流动现象。模拟和追踪自由表面的轨迹和流动的演化,是研究和解决这类问题的关键。

最早处理自由表面问题的有效方法,是 Harlow 等提出的格子(cell-type)类方法^[1],通过追踪网格中布置的标记点或质点来指示流体的流动范围,然后在此基础上定出自由表面位置。依据这一原理,为了能够较为准确的计算自由表面位置,标记点的设置除了必须接近均匀分配之外,每个网格内标记点的密度也不能太小,因此需要大量的内存存贮标记点,对计算设备的硬件要求比较高。

为改善格子类方法的性能,尤其是克服需要使用大量内存存贮标记点的缺点,Hirt 等^[2]提出了 VOF(volume-of-fluid)方法。在 VOF 方法的构架中,每个网格仅需要一个 VOF 函数值来标记它的状态,该值在 0 到 1 之间变化:值为 1 时表示网格内充满流体;值为 0 时表示网格内没有流体;值在 0~1 之间,并且最少有一个相邻的网格的 VOF 值为 0 时,则说明此网格包含自由表面。再进一步对

网格作插值计算就能确定出自由表面在网格内的位置。与格子类方法相比,VOF 函数值需要再求解一个相应的偏微分方程才能获得^[3]。但由于 VOF 函数在自由表面上并不连续,因此为了能够准确地确定自由表面位置和保证守恒律,需要高精度的偏微分方程离散格式。

SPH(smoothed particle hydrodynamics)方法,顾名思义,是一种无网格的粒子方法。其特点表现在计算空间导数时不需要使用网格离散,而是被插值核函数中的解析微分式子代替,从而可以避免高维网格差分法中的网格缠结和扭曲等最令人头疼的问题;另一个突出的优势表现在对缺乏对称性和内含真空的三维系统的计算特别有效^[4]。由于天体物理中的问题大多属于非对称的三维问题,因此 SPH 在天体物理中应用得非常广泛^[5]。经过近二十年的发展、改进和完善,SPH 现已发展成为比较成熟的计算高维天体物理问题的有效方法了。

这几种方法各具特色,不能一概而论其优劣。当然,一般来讲,在计算的准确性相当时,人们还是倾向于计算上简便快捷的方法。因此,虽然 SPH

2006-01-09 收稿,2006-03-21 收修改稿

E-mail: zhjian@sjp.buaa.edu.cn or buaazhjian@163.com

方法在流体动力学领域中应用的时间较晚, 但当 Monaghan^[6]首次将 SPH 方法应用于自由表面流动的模拟之后, SPH 方法在计算和存贮上的便捷还是立即引起了众多流体研究者的兴趣^[7-12], 这种“无网格”方法在流动模拟中的应用也成为一热点。

本文基于 SPH 方法的基本原理, 结合相关研究者的工作, 发展了一套模拟自由表面流动的 SPH2D 程序, 并用来计算溃坝流动, 所得结果与经典的 MAC 结果符合很好。

1 数值方案

1.1 SPH 原理

SPH 是一种完全无网格的 Lagrange 方法, 流体的流动使用跟随流动的粒子运动来描述。在 SPH 方法中, 某一粒子上的任一宏观变量都可以表示为计算域内除此粒子之外的所有粒子上该变量的积分插值:

$$f_a = \int_D f_b W_{ab}(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b, h) d\mathbf{r}_b, \quad (1)$$

(1) 式中, D 代表整个计算域, 下标 a, b 标记粒子, \mathbf{r}_a 是粒子 a 的位置矢径, W_{ab} 为插值核函数, 通常采用如下形式,

$$W_{ab}(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b, h) = \frac{1}{h^\sigma} Z\left(\frac{|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|}{h}\right), \quad (2)$$

h 为核光滑长度, σ 是物理空间维数。插值核函数具有下列特性:

$$\int_D W_{ab}(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b) d\mathbf{r}_b = 1; \quad (3)$$

$$\lim_{h \rightarrow 0} W_{ab}(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b, h) = \delta(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b),$$

(3) 式中 δ 表示 Dirac Delta 函数。本文使用的插值函数 W_{ab} 中, 函数 Z 的具体形式将在第 2 节给出。

将(1)式离散可以得到

$$f_a = \sum_b f_b W_{ab}(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b, h) \Delta V_b, \quad (4)$$

将微元体积 ΔV_b 用微元质量 m_b 和密度 ρ 表示, (4) 式可以写为

$$f_a = \sum_b \frac{m_b}{\rho_b} f_b W_{ab}. \quad (5)$$

利用核函数的可微性, 粒子 a 的任一变量对空间坐标的导数可以通过对(5)式两边求梯度得到

$$\nabla_a f_a = \sum_b \frac{m_b}{\rho_b} f_b \nabla_a W_{ab}, \quad (6)$$

(6) 式中, ∇_a 表示对粒子 a 的空间坐标求梯度。利用这种变化, 可以将变量的空间导数转化为对插值核函数求导, 无需在空间网格上离散导数, 从而实现空间的“无网格”化。

1.2 SPH 方法的控制方程

Lagrange 形式的 N-S 方程可以表示为

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{u}, \quad (7)$$

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{F}, \quad (8)$$

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (9)$$

$\frac{d}{dt}$ 为全导数, p 为动力学压强, $\nu = \mu/\rho$, μ 为动力学粘性系数, \mathbf{F} 在本文中取为重力加速度。利用(5), (6)式, 可以得到核插值离散后的 N-S 方程如下:

$$\frac{d\rho_a}{dt} = \sum_b m_b (\mathbf{u}_a - \mathbf{u}_b) \cdot \nabla_a W_{ab}, \quad (10)$$

$$\frac{d\mathbf{u}_a}{dt} = -\sum_b m_b \left(\frac{p_a}{\rho_a^2} + \frac{p_b}{\rho_b^2} \right) \nabla_a W_{ab} + \sum_b \frac{m_b (\mu_a + \mu_b)}{(\rho_a + \rho_b)^2} \frac{(\mathbf{u}_a - \mathbf{u}_b)}{|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|^2} (\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b) \cdot \nabla_a W_{ab} + \mathbf{F}, \quad (11)$$

对于不可压流动, 本文采用了 Monaghan 建议的人工拟压缩方法^[6], 压强 p 通过流体的状态方程^[13]求解:

$$p = B \left(\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^\gamma - 1 \right), \quad (12)$$

B 为常数, 与流动的初始状态有关, 此处 B 应为压强量纲, 本文取

$$B = \frac{\rho_0 C^2}{\gamma}, \quad (13)$$

ρ_0 为流体初始密度; 对于水, 一般取系数 $\gamma=7$; C 为人工音速, 本文选取总体流动的最大速度值的 10 倍为人工音速值, 即

$$C = \sqrt{200gH}, \quad (14)$$

H 为水面高度. 有关人工拟压缩方法的详细介绍, 可以参见文献[6, 7].

粒子的位移变化为

$$\frac{dr_a}{dt} = u_a. \quad (15)$$

方程(10), (11), (12), (15)组成了基于 SPH 方法离散化的 N-S 方程组, 再加入下列各种定解条件就可以组成完整的迭代方程组.

1.2.1 初始条件 流体粒子的初始参考密度设为 $\rho_0 = 1 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$, 各个粒子的质量相等, 为 $M(\text{kg})$, 在方程(5)中, 若令 $f_a = \rho_a$, 则粒子 a 的密度可以表示为

$$\rho_a = M \sum_b W_{ab}, \quad (16)$$

取 $\rho_a = \rho_0$, 则得到粒子质量的表达

$$M = \frac{\rho_0}{\sum_b W_{ab}}, \quad (17)$$

根据质量守恒原理, 在计算过程中 M 始终为一常量.

初始时刻, 流体粒子处于静力平衡状态, 静态压力与重力平衡, 按照人工拟压缩原理, 流体粒子密度会随深度不同产生微小变化^[6],

$$\rho = \rho_0 \left(1 + \frac{\rho_0 g (H - y)}{B} \right)^{\frac{1}{7}}, \quad (18)$$

y 是粒子所在的水位高度. 相应的压强变化可由状态方程(12)求出.

1.2.2 壁面边界条件 通常, 固体壁面由粒子表示. 壁面粒子平衡流体粒子的内部压力并防止它们向壁面渗透, 同时还要降低对壁面附近流体粒子真

实运动的干扰. 本文采用了固定壁面粒子的做法, 壁面粒子按照初始设置排列, 在壁面下设置多排虚元粒子. 虚元粒子的总厚度依赖于核光滑长度 h , 本文中 $h=0.8l_0$, 为保证足够的精度, 虚元粒子设置为 4 排. 壁面粒子和虚元粒子都参与流动的压力和密度计算, 壁面粒子直接由控制方程求解, 虚元粒子的密度和压力随时与固壁法向方向的壁面粒子保持一致. 壁面采用滑移边界, 设置壁面粒子和虚元粒子位移为零, 无需再迭代计算它们的位移, 可以降低部分计算量.

1.2.3 自由表面边界条件 施加自由表面边界条件, 实质是要判断出处于自由表面的粒子. 由于本文采用的是拟压缩的方法, 在流动内部的粒子处于弱压缩状态, 而处于自由表面的粒子受压较小或不受压, 因此可以采用 Koshizuka 等^[14]的方法, 若

$$\rho_i < \beta \rho_0, \quad (19)$$

i 为自由表面粒子, 其中 β 为小于 1 的参数. 当计算过程稳定时, β 在 0.8~0.99 之间取值对计算结果影响不大^[14]. 本文中取 $\beta=0.99$. 对自由表面粒子, 其压强应等于大气压, 即

$$p_i = p_0. \quad (20)$$

2 溃坝流动的计算

溃坝流动是一种典型的自由表面流动, 包含了水体与壁面的物理作用产生的水花飞溅、融合, 自由表面变形, 干湿界面变化等多种复杂现象. 完整地模拟这些复杂现象是非常困难的, 以往的 SPH 方法在追踪自由表面问题上已经取得了很大的进步, 但是对于水体与壁面间相互作用而产生的水花飞溅、融合以及近壁面流动等现象还未能准确地模拟. 本文的方法是完整模拟这些复杂现象的一种初步尝试.

本文的插值核函数采用了三次样条函数, 具体形式如下:

$$Z(s) = \frac{10}{7\pi} \begin{cases} 1 - \frac{3}{2}s^2 + \frac{3}{4}s^3, & 0 \leq s < 1; \\ (2-s)^3/4, & 1 \leq s < 2; \\ 0, & s \geq 2. \end{cases} \quad (21)$$

为满足时间步积分的稳定性(CFL)条件, 时间步长应当满足

$$\Delta t \leq 0.25 \frac{h}{C}, \quad (22)$$

本文中, 取步长 Δt 为常数. 计算参数在表 1 中列出. 本文计算了包括水体、壁面以及虚元粒子在内的共 920 个粒子, 由于壁面和虚元粒子无需迭代计算位移, 因此实际的计算量还会略有减小, 在单机上运行时, 大约每分钟可以迭代 200 步, 计算成本较低, 易于实现.

表 1 计算参数列表

水面高度 H/m	水柱宽度 L/m	流体粒子 数	粒子初始 间隔 l_0/m	动力学粘 性系数 $\mu/(N \cdot s \cdot m^{-2})$	时间步长 $\Delta t/s$
0.1	0.1	20×20	0.005	1×10^{-3}	0.00005

图 1 为溃坝流动的 SPH 模拟结果. 横、纵坐标分别代表流向和法向距离. 本文采用无量纲时间 $T_n = T \sqrt{\frac{H}{g}}$ 记录流动过程. 在 $T_n = 0$ 时刻水体右侧挡板瞬间撤掉, 此时水体右下角处具有最大的流向压力梯度, 水流从此处涌出, 造成整个水体右侧水面下降, 水体上表面向右略有倾斜. 随着坝内水流的不断流走, 水体上表面逐渐下降, 同时与地面和左壁面发生碰撞, 会有水体的反弹和水花飞溅及融合现象出现, 造成近壁面处自由表面的一些剧烈变化, 这些现象在图 1 中都有所表现, 在 $T_n = 1.5$ 和 2.0 的图中更为明显. 同时, 作者也将 Harlow 等经典的 MAC(marker and cell)结果^[1]与本文的 SPH 模拟结果做了对比, 结果非常吻合. 可见, SPH 方法用于溃坝流动的模拟也是非常准确的, 并且在近壁面处的一些剧烈变形的分辨上, 体现出了这种无网格法的更好的适应性.

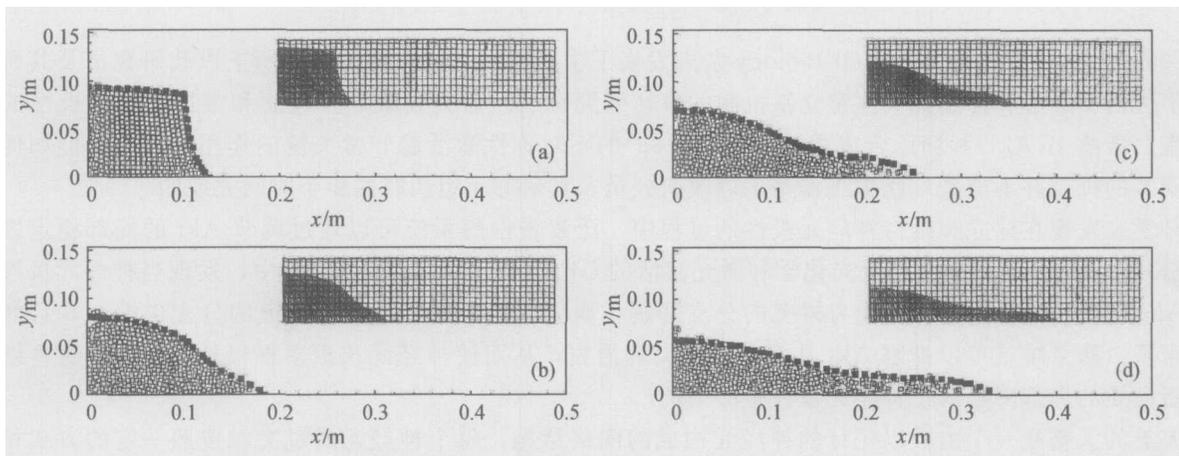


图 1 溃坝流动的 SPH2D 程序模拟结果

按照无量纲时间排列: (a) $T_n = 0.5$, (b) $T_n = 1.0$, (c) $T_n = 1.5$, (d) $T_n = 2.0$. 各图中左上角的小图是 Harlow 和 Welch 的 MAC(marker and cell)结果^[1], 其自由表面轮廓线在图中用实心方块表示, 与本文的 SPH 模拟结果非常吻合

3 结束语

本文发展了一套模拟不可压自由表面流动的 SPH2D 程序, 全面考虑了初始条件、壁面边界和自由表面条件的设置, 并应用于溃坝流动的模拟. 计算结果显示, 本文的方法可以比较完整地计算出水体与壁面间相互作用而产生的水花飞溅、融合, 水流反弹, 自由表面变化以及近壁面处水流的剧烈变形等多种复杂的物理现象, 并且表现出了经济的

计算成本和准确的计算结果, 有望在工程实际中得到广泛应用.

参 考 文 献

- 1 Harlow F H, Welch F J. Numerical calculations of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *Phys Fluids*, 1965, 8: 2182—2189
- 2 Hirt C W, Nichols B D. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *J Comput Phys*, 1981, 39: 201—225

- 3 陈大宏, 李 炜. 自由表面流动数值模拟方法的探讨. 水动力学研究与进展, A辑, 2001, 16: 216—224
- 4 张锁春. 光滑质点流体动力学 (SPH) 方法综述. 计算物理, 1996, 13: 385—397
- 5 Monaghan J J. Smoothed particle hydrodynamics. *Annu Rev Astron Astrophys*, 1992, 30: 543—574
- 6 Monaghan J J. Simulating free surface flows with SPH. *J Comput Phys*, 1994, 110: 399—406
- 7 Morris J P, Fox P J, Zhu Y. Modeling low Reynolds number incompressible flows using SPH. *J Comput Phys*, 1997, 136: 214—226
- 8 汤文辉, 毛益明. SPH 数值模拟中固壁边界的一种处理方法. 国防科技大学学报, 2001, 23: 54—57
- 9 Shao S D, Lo E Y M. Incompressible SPH method for simulating Newtonian and non-Newtonian flows with a free surface. *Advances in Water Resources*, 2003, 26: 787—800
- 10 Colagrossi A, Landrini M. Numerical simulation of interfacial flows by smoothed particle hydrodynamics. *J Comput Phys*, 2003, 191: 448—475
- 11 李梅娥, 周进雄. 不可压流体自由表面流动的 SPH 数值模拟. 机械工程学报, 2004, 40: 5—9
- 12 Issa R, Lee E S, Violeau D, et al. Incompressible separated flows simulations with the smoothed particle hydrodynamics gridless method. *Int J Numer Meth Fluids*, 2005, 47: 1101—1106
- 13 Batchelor G K. *An Introduction to Fluid Dynamics*. Cambridge, UK: Cambridge Univ Press, 1967
- 14 Koshizuka S, Oka Y. Moving-particle semi-implicit method for fragmentation of incompressible fluid. *Nuclear Science and Engineering*, 1996, 123: 421—434

我国科学家发现神经元极性建立新机制

2006年7月31日出版的 *Cell Biology* 杂志发表了中国科学院神经科学研究所王以政研究员及其研究小组关于蛋白质降解和神经元极性建立新机制的最新研究成果。研究发现, 在建立和维持神经元极性的过程中, 蛋白激酶 B(Akt)和糖原合成激酶-3 β (GSK-3 β)的不对称性激活起非常关键的作用, 但是它们如何在局部被调节的机制并不清楚。此项工作是王以政研究员及其研究小组历时两年半时间完成的。

科学家发现在建立和维持神经元极性的过程中, 泛素蛋白酶系统可以通过调节 Akt 的局部稳定性来调节 GSK-3 β 信号通路。在免疫荧光化学和激光激活的 GFP 融合的 Akt 蛋白实验中, 发现当神经元极性建立时, Akt 选择性地在那些将要成为树突的分支降解, 而保留在那些将要成为轴突的分支尖端, 并且如果抑制泛素蛋白酶系统就可以抑制 Akt 从多数突起尖端消失, 从而使神经元长出多根很长的轴突。这些结果证明了蛋白质的局部降解对于神经元极性是必须的。

人类的大脑是一个由数以亿计的神经元构成的网络结构, 每个神经元通过突触按照一定的方式相互连接, 彼此调节, 从而控制从呼吸、心跳到感觉、认知各个层次的生理活动。神经元的形态和功能千差万别, 但都有一个共同的特征, 就是有一根细长的轴突和多根复杂的树突, 神经元这种特殊形态的形成过程称为神经元极性建立。这种极性形态是神经系统构成功能网络的基础。