

改进的接触算法及其在光滑粒子流体动力学中的应用*

徐志宏, 汤文辉, 张若棋

(国防科技大学 理学院, 湖南 长沙 410073)

摘要: 采用以黎曼解描述粒子间相互作用的接触算法, 模拟一维情况下包含间断的流场。在弱间断的条件下, 采用弱波近似的黎曼解来描述粒子间的相互作用; 在强间断的条件下, 则引入非迭代黎曼解来描述粒子间的相互作用。并引入 Taylor 展开思想, 提高了接触算法在自由边界的计算精度。该算法无需引入人为粘性, 程序结构简洁。数值计算表明, 改进后的接触算法能很好地描述强间断, 并有效改善了原始接触算法在自由面的计算缺陷。

关键词: 光滑粒子方法; 弱波近似; 非迭代黎曼解; 间断

中图分类号: O413.1 文献标识码: A

A Modified Contact Algorithm for Smoothed Particle Hydrodynamics

XU Zhi-hong, TANG Wen-hui, ZHANG Ruo-qi

(College of Science, National Univ. of Defense Technology, Changsha 410073, China)

Abstract: A contact algorithm which describes the contact interaction between SPH particles by means of Riemann solution was used to calculate the discontinuity of the variables defining the one-dimension fluxes. A weak wave approximation of the Riemann solver was adopted to deal with the weak discontinuity, while the non-iterative Riemann solution was introduced in strong discontinuity. Furthermore Taylor series was used to improve the calculation accuracy on the free boundary. In this case, there was no need to use artificial viscosity for the numerical viscosity of the new SPH algorithm. Compared with the original algorithm, the simulation results show that the modified contact algorithm has a good description of strong discontinuity, and improvement in dealing with the free surface.

Key words: smooth particle hydrodynamic; weak wave approximation; non-iterative Riemann solution; discontinuity

光滑粒子流体动力学(SPH Smoothed particle hydrodynamics)是一种纯 Lagrange 粒子方法,它最初由 Lucy^[1]、Gingold^[2]等于 1977 年提出,并成功地应用于天体物理和冲击物理计算领域。与有限差分方法一样,SPH 方法模拟含有激波的流场时,也需要引入耗散项以光滑激波波阵面。Monaghan^[3]等导出了适用于 SPH 方法的人为粘性项。Godunov 方法^[4]以及其二阶 Godunov 格式^[5](MUSCL)三阶 Godunov 格式^[6](PPM)则通过用 Riemann 问题的精确解来计算穿过网格边界的流量,将耗散引入流体计算中。

2000 年 Parshikova^[7]基于 Godunov 方法的思想,将 Riemann 解引入光滑粒子法,提出了一种粒子间接触算法。在传统光滑粒子法中用中心粒子和近邻粒子的速度和应力的平均值来描述粒子间的相互作用,接触算法则用速度和应力在接触间断处的黎曼解分别代替速度和应力的平均值,即用黎曼解来描述参考粒子和近邻粒子之间的相互作用。该接触算法无需引入人为粘性项,能较好地描述流场中的间断,并有效地提高了接触界面处的计算精度。但是由于文献[7]通过采用弱波近似的 Godunov 格式来求解黎曼解,因此它在包含弱间断的流场计算中能得到令人满意的结果。处理强间断问题时,这种弱波近似的方法不再适用,本文将采用非迭代的黎曼解^[10]来描述粒子之间的相互作用。另外,与传统的光滑粒子法相似,在该接触算法中,由于自由边界处的粒子分布不对称,无法保证自由面的计算精度。1999 年,Chen^[8]等将 Taylor 展开思想用于核误差分析,提出了一种改进的光滑粒子方法(CSPM),能有效地提高自由面的计算精度。基于 CSPM 方法,本文将 Taylor 展开思想引入接触算法,可以直接将自由边界条

* 收稿日期: 2005-11-22

基金项目: 高等学校博士学科点专项科研项目(20059998005)

作者简介: 徐志宏(1977—),女,博士生。

件加载于边界粒子,并采用非迭代黎曼解来描述边界粒子与内部粒子间的相互作用。文章第三部分提供的算例表明,改进后的接触算法能很好地描述强间断,并有效改善了原始接触算法在自由面的计算缺陷。

1 基于 Riemann 解的粒子间接触算法

在传统光滑粒子法中用中心粒子和近邻粒子的速度和应力的平均值来描述粒子间的相互作用。根据文献[7],设基本粒子*i*与每个位于 $2h$ (h 是光滑长度)范围内的粒子*j*交换动量和能量,这种粒子间相互作用方向沿两粒子*i*、*j*“球心”的连线。接触点 A_{ij} 处粒子间的相互作用与连续介质中的接触间断的处理相似,采用黎曼问题的声速近似求解 A_{ij} 处压强和速度。即假设任意一个“接触间断面”左右两边的各参数为 u_i, ρ_i, p_i 及 u_j, ρ_j, p_j ,该间断从初始间断面出发,各自以声速 c_i, c_j 向左右两边传播。在 A_{ij} 处的法向速度设为 u_{ij}^{*R} ,压强设为 p_{ij}^* ,于是有

$$u_{ij}^{*R} = \frac{u_j^R \rho_j c_j + u_i^R \rho_i c_i - p_j + p_i}{\rho_j c_j + \rho_i c_i} \quad (1)$$

$$p_{ij}^* = \frac{p_i \rho_j c_j + p_j \rho_i c_i - \rho_i c_i \rho_j c_j (u_j^R - u_i^R)}{\rho_j c_j + \rho_i c_i} \quad (2)$$

式中: $u^R = \mathbf{u} \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) / |\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|$, c 是流体声速。

利用下面的两个近似关系:

$$u_i^R + u_j^R \approx 2u_{ij}^{*R}, p_i + p_j \approx 2p_{ij}^* \quad (3)$$

可将黎曼解引入 SPH 方程:

$$\frac{d\rho_i}{dt} = -2 \sum_j \frac{m_j \rho_i}{\rho_j h} (u_i^R - u_{ij}^{*R}) W'_{ij} \quad (4)$$

$$\frac{du_i}{dt} = 2 \sum_j \frac{m_j p_{ij}^*}{\rho_j \rho_i h} W'_{ij} \frac{x_j - x_i}{|x_j - x_i|} \quad (5)$$

$$\frac{de_i}{dt} = -2 \sum_j \frac{m_j p_{ij}^*}{\rho_j \rho_i h} (u_i^R - u_{ij}^{*R}) W'_{ij} \quad (6)$$

该算法无需引入人为粘性就能抑制激波引起的数值振荡,并且能有效地解决传统 SPH 方法中接触界面处的不稳定问题。

2 改进的接触算法

在计算中,对于边界点*i*,因为影响域内的粒子分布不对称,计算精度无法保证。根据 Chen 等^[8]基于 Taylor 展开提出的光滑粒子插值方法(CSPM),将函数 $f(x)$ 在 x_i 点 Taylor 展开,等式两边同时乘以核函数 $W_i = W(x - x_i, h)$,并在解域 Ω 中积分有

$$\int_{\Omega} f(x) W_i dx = f_i \int_{\Omega} W_i dx + f_{ix} \int_{\Omega} (x - x_i) W_i dx + \frac{f_{ixx}}{2} \int_{\Omega} (x - x_i)^2 W_i dx + \dots \quad (7)$$

忽略(7)式中的导数项,得到 $f(x)$ 的核估计为

$$f_i = \int_{\Omega} f(x) W_i dx / \int_{\Omega} W_i dx \quad (8)$$

若用核函数的导数 $W_{i,x} = dW(x - x_i, h)/dx$ 代替(7)式中的 W_i ,并忽略二阶以上的导数,则可得到函数 $f(x)$ 一阶导数的核估计为

$$f_{ix} = \int_{\Omega} [f(x) - f_i] W_{i,x} dx / \int_{\Omega} (x - x_i) W_{i,x} dx \quad (9)$$

对于内点*i*,由于核函数的导数 $W_{i,x}$ 是奇函数,核函数同时满足:

$$\int_{\Omega} W_i dx = 1, \int_{\Omega} (x - x_i) W_i dx = 0, \int_{\Omega} (x - x_i)^2 W_i dx = 0$$

因此(8)(9)式的计算精度是二阶的。而对于边界点*i*,上述三个等式均不成立,所以(8)(9)式是一阶精度,并与 Randles^[11]提出的边界修正的核估计形式一致。

将(8)和(9)式写成求和的形式,代入质量、动量、能量守恒方程,并利用关系式(3)引入黎曼解,可以得到新的 SPH 离散方程为

$$\frac{d\rho_i}{dt} = -2\rho_i \left[\sum_{j=1}^n m_j (u_{ij}^{*R} - u_i) W'_{ij}/\rho_j \right] / \left[\left(\sum_{j=1}^n m_j (x_j - x_i) W'_{ij}/\rho_j \right) \right] \quad (10)$$

$$\frac{du_i}{dt} = -2 \left[\sum_{j=1}^n m_j (p_{ij}^* - p_i) W'_{ij}/\rho_j \right] / \left[\rho_i \sum_{j=1}^n m_j (x_j - x_i) W'_{ij}/\rho_j \right] \quad (11)$$

$$\frac{de_i}{dt} = -2p_i \left[\sum_{j=1}^n m_j (u_{ij}^{*R} - u_i) W'_{ij}/\rho_j \right] / \left[\rho_i \sum_{j=1}^n m_j (x_j - x_i) W'_{ij}/\rho_j \right] \quad (12)$$

其中 ρ 是密度, u 是速度, p 是压强, m 是质量, e 是比内能。

在不出现强间断的条件下,采用弱波近似的 Riemann 解(1)(2),可以得到令人满意的结果。对于强间断的情况,弱波近似则不再适用,我们采用非迭代的黎曼解^[10]:

$$\rho_i A_i |u_{ij}^* - u_{\min}^*| (u_{ij}^* - u_{\min}^*) + \rho_j A_j |u_{ij}^* - u_{\max}^*| (u_{ij}^* - u_{\max}^*) + p_i^* - p_j^* = 0 \quad (13)$$

$$p_{ij}^* = \frac{1}{2} (p_i^* + p_j^*) + \frac{1}{2} \rho_i A_i |u_{ij}^* - u_{\min}^*| (u_{ij}^* - u_{\min}^*) - \frac{1}{2} \rho_j A_j |u_{ij}^* - u_{\max}^*| (u_{ij}^* - u_{\max}^*) \quad (14)$$

其中:

$$u_{\min}^* = u_i - c_i/2A_i, \quad u_{\max}^* = u_j + c_j/2A_j$$

$$p_s^* = p_s - \frac{1}{4} \rho_s c_s^2 / A_s (s = i, j), \quad A_s = (\gamma_s + 1) / \mathcal{A} (s = i, j)$$

3 算例

计算中采用气体的状态方程为: $p = (\gamma - 1)\rho e$, 其中 γ 为气体绝热指数。采用的光滑核为 B 样条函数:

$$W_{ij} = \begin{cases} (1 - 1.5\phi^2 + 0.75\phi^3)/\beta & \text{for } 0 \leq \phi < 1, \\ 0.25(2 - \phi)^3/\beta & \text{for } 1 \leq \phi < 2, \\ 0 & \text{for } 2 \leq \phi, \end{cases}$$

式中 $\phi = |x_i - x_j|/h$, 对一维问题 $\beta = 1.5h$ 。其中光滑长度: $h_{ij} = 0.5(D_i + D_j)$, D_i, D_j 分别为粒子 i, j 的直径。

3.1 两端为自由面的激波管问题

初始参数分布如下:

$$0 \leq r(\text{cm}) \leq 0.05, \quad p = 3\text{GPa}, \quad \rho = 1.5\text{g/cm}^3, \quad \gamma = 3;$$

$$0.05 \leq r(\text{cm}) \leq 1, \quad p = 1\text{GPa}, \quad \rho = 1.2\text{g/cm}^3, \quad \gamma = 3。$$

初始时刻沿 x 方向将两种气体分别等间距散成 500 个和 400 个粒子。 $t = 0.005\mu\text{s}$ 时的计算结果如图 1 所示。其中圆点代表粒子间接触算法的计算结果,空心三角代表新 SPH 方法的计算结果。从图中可以看出前者在接触界面处有很好的计算精度,但自由边界处压强、密度、内能的计算结果有明显的反跳。新算法则不仅在接触界面处有更好的计算精度,在自由边界处的计算也有明显的优势。

3.2 强激波间断(Wall shock)

Wall shock 是典型的强激波间断问题。初始参数分布如下:

$$0 \leq r(\text{cm}) \leq 0.05, \quad p = 0.5\text{GPa}, \quad \rho = 1.0\text{g/cm}^3, \quad u = 1\text{cm}/\mu\text{s}, \quad \gamma = 1.4;$$

$$0.05 \leq r(\text{cm}) \leq 0.1, \quad p = 0.5\text{GPa}, \quad \rho = 1.0\text{g/cm}^3, \quad u = -1\text{cm}/\mu\text{s}, \quad \gamma = 1.4。$$

初始时刻沿 x 方向将两种气体分别等间距散成 500 个粒子。 $t = 0.01\mu\text{s}$ 时的计算结果如图 2 所示,其中实线代表解析解,圆点代表数值解。可以看到压强、速度、密度的波形均与解析解符合得较好。

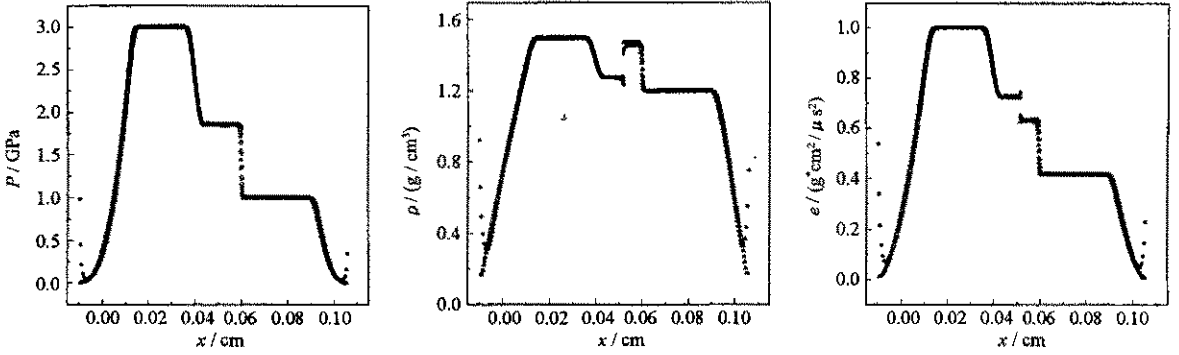


图1 两种 SPH 方法在计算激波管问题中的比较

Fig.1 Comparison of Godunov SPH and new SPH method in shock tube problem

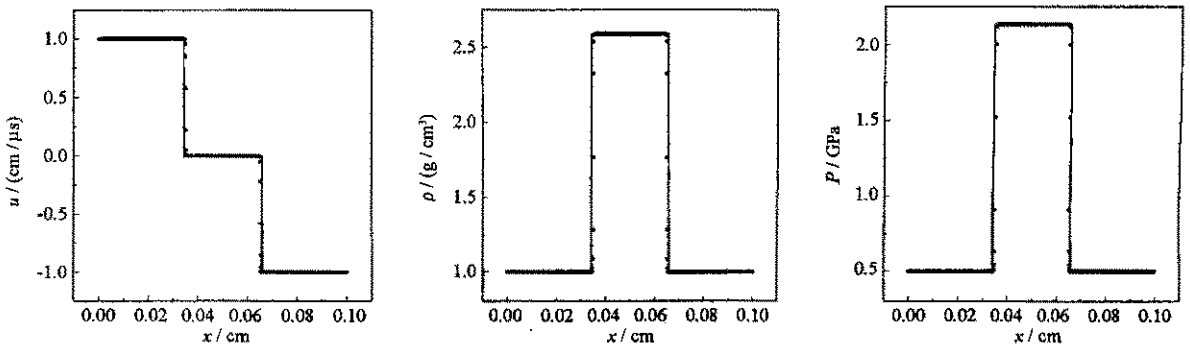


图2 用改进的接触算法计算 wall shock 问题得到的流体参数分布曲线

Fig.2 Flow parameters distributions in wall shock computed by modified contact algorithm

3.3 强稀疏间断(Sjögreen test)

Sjögreen test 是典型的强稀疏间断问题。初始参数分布如下：

$$0 \leq (x/\text{cm}) \leq 0.05, \quad p = 0.4\text{GPa}, \quad \rho = 1.0\text{g/cm}^3, \quad u = -2\text{cm}/\mu\text{s}, \quad \gamma = 1.4;$$

$$0.05 \leq (x/\text{cm}) \leq 0.1, \quad p = 0.4\text{GPa}, \quad \rho = 1.0\text{g/cm}^3, \quad u = 2\text{cm}/\mu\text{s}, \quad \gamma = 1.4.$$

初始时刻沿 x 方向将两种气体分别等间距离散成 500 个粒子。 $t = 0.015\mu\text{s}$ 时的计算结果如图 3 所示,与文献 [12] 提供的结果符合得很好。

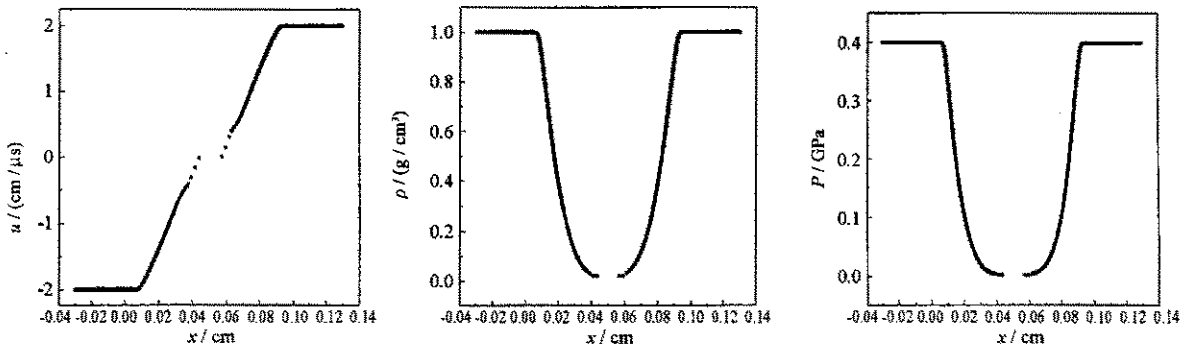


图3 用改进的接触方法计算 Sjögreen 问题得到的流体参数分布曲线

Fig.3 Flow parameters distributions in Sjögreen test computed by modified contact algorithm

4 结论

采用改进的粒子间接触算法开展了包含强间断的一维流场的数值计算,结果表明:

(1)在基于 Riemann 解的粒子间接触算法中引入非迭代黎曼解,拓展了该算法使用范围,增强了算法适用性。

(2)在接触算法中引入 Taylor 展开,可以直接加载自由边界条件,通过用非迭代黎曼解来描述边界粒子和内部粒子的相互作用,改进的接触算法不仅继承了原始算法在接触界面精度高的计算优势,并且能有效地改善自由面的计算精度。

(3)对包含弱间断的一维流场,用非迭代黎曼解得到的计算结果的精度比声速近似黎曼解计算得到的精度更高,但要消耗更多的计算量。

参考文献:

- [1] Lucy L B. A Numerical Approach to The Testing of The Fission Hypothesis [J]. *Astronomical J*, 1977 88 : 1013.
- [2] Gingold R A, Monaghan J J. Smoothed Particle Hydrodynamics : Theory and Application to Non-spherical Stars [J]. *Monthly Notices R Astronomy Soc*, 1977, 181 : 375.
- [3] Monaghan J J, Gingold R A. Shock Simulation by The Particle Method SPH [J]. *J Comput Phys*, 1983 52 : 374.
- [4] Godunov S K. A Difference Scheme for Numerical Computation of Discontinuous Solutions of Fluid Dynamic [J]. *Mat. Sb.*, 1959 47 : 271.
- [5] Van Leer B. Towards the Ultimate Conservation Difference Scheme. V. A Second-Order Sequel to Godunov 's Method [J]. *J Comput Phys*, 1979, 32 : 101.
- [6] Colella P, Woodward P. Piecewise Parabolic Method (PPM) for Gas-Dynamical Simulations [J]. *J Comput Phys*, 1984, 54 : 174.
- [7] Parshikov A N, Medin S A, Loukashenko I I, et al. Improvements In SPH Method By Means of Interparticle Contact Algorithm and Analysis of Perforation Tests at Moderate Projectile Velocities [J]. *Int J Impact Engng*, 2000 24 : 779.
- [8] Chen J K, Beraun J E, Jih C J. An Improvement for Tensile Instability in Smoothed Particle Hydrodynamics [J]. *Computational Mechanics*, 1999, 23 : 279.
- [9] 张刚明,王肖钧,胡秀章,等.光滑粒子法中的一种新的核函数 [J]. *爆炸与冲击*, 2003, 23 : 219.
- [10] Dukowicz J K. A General, Non-Iterative Riemann Solver for Godunov 's Method [J]. *J Comput Phys*, 1985, 61 : 119.
- [11] Randles P W, Libersky L D. Smoothed Particle Hydrodynamics : Some Recent Improvements and applications [J]. *Comput Methods Appl Mech Engrg*, 1996, 61 : 375.
- [12] Monaghan J J. SPH and Riemann Solvers [J]. *J Comput Phys*, 1997, 136 : 298.

