

一种适用于复杂边界的粒子法数值积分 初始布置优化算法

刘启新, 孙中国, 段壮, 席光

(西安交通大学能源与动力工程学院, 710049, 西安)

摘要: 为提高粒子法研究中初场计算节点的空间分布质量, 包括计算域内部计算节点分布的各向同性和计算域边界附近计算节点对理论边界的贴体性, 提出了一种计算节点(即粒子)初场布置的优化方法。该方法借助网格控制求解域的边界, 采用粒子迁移模型使流体粒子自适应地发展为均匀各向同性的分布状态。为了将网格的信息耦合进粒子法的粒子迁移模型中, 在粒子迁移模型中引入了基于边界网格的数值积分算法。验证算例包括二维椭圆、二维转子泵、三维复杂腔体、三维球体等, 验证结果表明: 所提出的初场布置优化算法能够保证流体域内粒子的均匀各向同性分布, 并减小边界粒子与理论边界的偏差值, 降低边界粒子数密度的噪点; 在液滴模拟中, 优化初场布置后的圆度误差较传统初场布置减小了 78.6%。

关键词: 粒子法; 边界网格; 数值积分; 分布重构; 各向同性

中图分类号: TK421.4 **文献标志码:** A

DOI: 10.7652/xjtuxb202311007 **文章编号:** 0253-987X(2023)11-0072-10

An Initial Distribution Optimization Algorithm for Complex Boundaries Based on Numerical Integration for Particle Method

LIU Qixin, SUN Zhongguo, DUAN Zhuang, XI Guang

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

Abstract: To improve the quality of the spatial distribution of the initial field computational points in the particle method, including the isotropic distribution of inner particles within the computational domain as well as the fitting of the computational points near the boundaries of the computational domain to the theoretical boundaries, a method to optimize the initial distribution of computational points (namely particles) is proposed. The boundary meshes is applied to control the profiles of the computational domain. Additionally, the particle shifting model is applied to drive the particles to move spontaneously to form uniform isotropic distribution. In order to couple the mesh information with the particle shifting model used by the particle method, the numerical integration algorithm based on the boundary meshes is introduced into the particle shifting model. The validation cases include a two-dimensional ellipse, a two-dimensional rotor pump, a three-dimensional complex cavity, and a three-dimensional sphere. The results showed that by the proposed initial distribution optimization method, the uniform isotropic distribution of particles in the fluid domain can be ensured, the deviation of boundary particles from the theoretical boundary can be reduced, and the noise of the number density of boundary particles can be lowered. In the

收稿日期: 2023-03-07。 作者简介: 刘启新(1993—), 男, 博士生; 孙中国(通信作者), 男, 教授, 博士生导师。 基金项目: 国家自然科学基金资助项目(51922085)。

网络出版时间: 2023-06-01

网络出版地址: <https://kns.cnki.net/kcms2/detail/61.1069.T.20230531.1648.004.html>

droplet simulation, the roundness error after the initial distribution optimization reduces by 78.6% compared to the traditional initial distribution.

Keywords: particle methods; boundary meshes; numerical integration; rearrangement of particles; isotropic

无网格粒子法,如移动粒子半隐式(MPS)法^[1]和光滑粒子动力学(SPH)法^[2]是一类建立在拉格朗日框架下的计算流体动力学数值方法。相较于欧拉框架下的网格法,无网格粒子法在具有高度非线性、充分发展自由表面和大变形等特征的流动问题的研究上具有更大的优势。因此,这类方法在海洋工程^[3-4]、化工过程^[5-6]、核工程^[7-8],多相流^[9-10]等领域都已得到非常广泛应用。随着物理模型、数学算法的不断完善以及计算机计算能力的快速发展,无网格粒子法的应用正在向更广泛的领域扩展。

在前处理环节中,粒子法通常使用间距相等的计算节点离散空间中的连续计算域,这些计算节点被形象地表述为有统一固定体积的光滑粒子。离散代数方程对每一个粒子所携带的物理量信息(空间坐标、速度、压力、温度等)进行求解,该过程不需要粒子间具有明确的拓扑结构,只需要确定粒子间实时的位置关系。因此,相较于网格法,粒子法的前处理环节一直以来更为简单,无论是二维还是三维问题,都可以采用矩形阵列的初始粒子分布。

但是,随着粒子法在工业领域的日益发展,所要离散的流体域构型越来越复杂,在应对弯曲或倾斜壁面时,矩形阵列分布的粒子难以保证贴体均匀分布,而不均匀分布的粒子往往更容易引起数值振荡^[11]。因缺乏有效的前处理粒子布置方案,若想要得到贴体、均匀、各向同性的粒子分布,就需要基于拉格朗日粒子法的特性,按照进口边界条件使粒子流进系统,逐渐充满复杂流体域^[12-14]。这就相当于在计算时要经过完整的非定常启动过程,而这个过程对于数值研究通常不是必须的,这就增加了计算需要的资源消耗和研究周期。因此,需要为粒子法工业研究提出更规范的前处理方法。

目前,粒子布置法的研究主要关注粒子对固体边界构型的取样。李帝辰等^[15]提出了将二维问题降为一维问题的粒子构型法,该方法对复杂边界进行均匀的表面粒子分布之后再进行内部填充。Domínguez 等^[16]开发了一款名为 GenCase 的粒子法前处理软件,该软件通过网格三维模型的节点建立粒子的初场布置,能够实现各种复杂三维构型的粒子初场布置,但该软件不能保证边界粒子对光滑

曲面的贴体性。Akinci 等^[17]考虑了固体边界对流体粒子物理量的计算,使用单层粒子采样复杂固壁; Ihmsen 等^[18]针对粒子法的流固耦合问题提出了一种预测-修正的固体边界处理方法,在考虑固体边界的压力情况下计算,但 Akinci 和 Ihmsen 的研究内容并不涉及初始布置。倪国喜等^[19]和 Diehl 等^[20]基于 Voronoi 方法的网格重构法分别建立了二维和三维的均匀各向同性粒子初场布置算法;Zhu 等^[21]基于 level-set 方法构建了一种复杂固体壁面粒子离散的方案,但以上方法都需要引入全新的数值方法,一定程度上增加了粒子法求解器前处理模块编写的复杂度和难度。

考虑到目前算法耦合在粒子法工业应用中越发广泛,越来越多的工程问题开始采用粒子法和网格法相耦合的方式来研究复杂的流固耦合问题,如流体机械、过程装备、海洋船舶、核反应设备等问题,其中粒子法模拟流体部分,网格法模拟固体部分。因这些问题的流体计算域具有复杂的几何结构,因而亟需更合理、更高效的粒子初场布置方案。

基于以上,本文尝试借助网格边界,将基于该网格边界的数值积算法引入基于浓度梯度的粒子迁移模型中,建立起一套简洁、灵活的粒子初场布置的优化方法,使矩形阵列分布的初场粒子进行空间位置的自适应调整,以提高粒子分布的均匀各向同性和固体边界附近的流体粒子分布对该边界的贴体性。此外,粒子法中的自由表面粒子表征液体和外界大气环境的交界面,在压力计算中扮演着自由表面压力边界条件的重要角色。基于一般粒子法统一计算节点尺度的特点,原本仅有分子自由程尺度的气液交界面在粒子法中具有和粒子直径同等尺度的“厚度”。因此,要求计算域表面粒子分布光滑、连续,符合设定的自由边界,才能保证自由边界附近的压力计算的正确性。例如,液滴的初始布置的理想边界形状为圆或球体,驻波的初始边界的波形为三角函数曲线等。本文展示了所提算法在自由边界的初场布置上的应用,将初始固体表面(固-液交界面)和初始自由表面(气-液交界面)均定义为理论界面,所提方法可以有效提高初始布置中界面粒子分布的精度。

1 数值算法

1.1 移动粒子半隐式(MPS)法

本文以移动粒子半隐式(MPS)法为例,介绍本文提出的初始布置优化算法在粒子法中的应用。MPS法的控制方程为不可压缩NS方程,表示为

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1)$$

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

式中: $\mathbf{u}$ 为速度矢量; t 为时间; ρ 为密度; P 为压力; ν 为运动黏度; $\mathbf{g}$ 为重力加速度; $\mathbf{f}_s$ 为表面张力。

粒子间的相互作用模型是基于核函数的加权平均思想建立起来的,核函数为

$$w_{ij} = \begin{cases} \left(1 - \frac{|\mathbf{r}_{ij}|}{r_c}\right)^2, & |\mathbf{r}_{ij}| < r_c \\ 0, & |\mathbf{r}_{ij}| \geq r_c \end{cases} \quad (3)$$

$$r_c = 2.5l_0 \quad (4)$$

式中: $|\mathbf{r}_{ij}|$ 为*i*粒子和*j*粒子间的位置矢量的模; r_c 为影响域半径; l_0 为粒子间距离(或每一个粒子的直径)。

求解NS方程时的微分算子,包括梯度算子、散度算子和Laplace算子,如下式所示

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

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{u} \rangle_i = \frac{d}{n^0} \sum_{j \neq i} \left[\frac{\varphi_j - \varphi_i}{r_{ij}^2} x_{ij} w_{ij} \right] \quad (6)$$

$$\langle \nabla^2 \varphi \rangle_i = \frac{2d}{n^0 \lambda} \sum_{j \neq i} [(\varphi_j - \varphi) w_{ij}] \quad (7)$$

式中: d 表示维度; φ 代表压力、温度等物理量; n^0 表示初始粒子数密度,其定义如下

$$n^0 = \sum_{j \neq i} w_{ij} \quad (8)$$

关于MPS法的更细节的算法,可参考文献[1]。

1.2 粒子迁移模型

基于浓度梯度的粒子迁移模型最早由Lind等[22]提出,其目标是改善高精度粒子法中流体粒子因严格跟随迹线运动所产生的粒子分布不均的问题。无论是对于全显式求解的SPH法,还是半隐式求解的MPS法,粒子分布不均的问题都会破坏流场求解的稳定性,导致误差急速累积,致使计算在短时间内崩溃。因此,在粒子法向提高精度的目标不断发展的过程中,粒子迁移模型已逐渐成为求解过程中不可或缺的模式。

到目前为止,最广泛采用的粒子迁移模型依然遵循浓度梯度驱动粒子移动的思想,如式(9)所示[23]

$$\delta \mathbf{r}_i = -\frac{\alpha l_0^2 d}{n^0} \left[\sum_{j \neq i} w_{ij} (|\mathbf{r}_{ij}|) \frac{\mathbf{r}_{ij}}{|\mathbf{r}_{ij}|^2} \right] \quad (9)$$

式中: $\delta \mathbf{r}_i$ 表示*i*粒子的迁移矢量; w_{ij} 为核函数。

当流场中的粒子分布不均匀时,局部粒子周围会产生粒子数密度梯度,上述粒子迁移模型便可以驱使粒子从高粒子数密度区域向低粒子数密度区域移动,从而使粒子的分布回归均匀状态。本文将这一思想应用在初始布置中,通过粒子迁移模型作用下粒子会自发形成均匀的空间分布这一特点,对矩形阵列的初场粒子进行空间位置上的重构,以改善边界粒子分布的不连续性,提高对光滑连续边界的贴体性。

1.3 基于边界网格的数值积分粒子迁移模型

Zheng等[24]最早将基于面积微元的面积分算法引入到了EMPS法中,代替了原本的固体边界粒子,实现了EMPS法中的无穿透固体壁面边界条件。本文将面积分算法引入到粒子迁移模型中,建立理论边界及外场一定范围内的网格模型,即边界网格,如图1所示。通过对边界网格建立面积分算法,实现粒子的均匀分布。

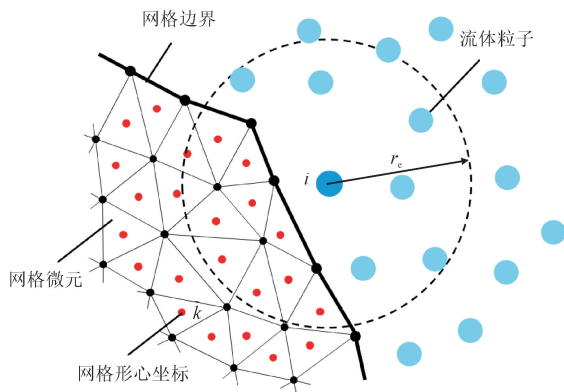


图1 流体粒子-边界网格示意图

Fig. 1 Schematic diagram of fluid particle-wall meshes

基于边界网格的粒子数密度计算公式如下

$$n^0 = \sum_{k \in f} w(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|) + \sum_{k \in m} w(|\mathbf{x}_k - \mathbf{r}_i|) \frac{\Delta A_k}{l_0^2} \quad (10)$$

式中: ΔA_k 表示网格微元*k*的面积,即图1中网格部分的每一个网格微元的面积; $\mathbf{x}_k$ 表示网格微元*k*的形心坐标,即图1中红色的节点坐标; f 为流体粒子; m 为图1中的网格。

目前广泛用于划分网格的商业软件,如ICEM、Gambit等,均可提供网格节点的坐标信息。需要说明两点:第一,该算法对网格法模拟中通常会关注的正交性等网格质量评价没有要求;第二,结构化矩形网格和非结构化网格都可以用于该算法。

图 2 所示为 3 种边界网格。本文通过计算流体域的粒子数密度,验证边界网格的粒子数密度计算公式的正确性。3 种边界网格分别为:①正方形粗边界网格,网格单元的边长与粒子间间距相等;②三角形边界网格,网格单元的直角边长与粒子间间距相等;③正方形细边界网格,网格单元的边长为粒子间间距的 1/2。计算结果显示,在使用 3 种边界网格时,计算得到的粒子数密度在整个计算域中的分布都是一致的,即内部粒子因其支撑域的完整性可以达到初始粒子数密度 n^0 , n^0 的值是核函数和维度的函数,本文中的 n^0 约为 2.48;而自由边界粒子支撑域内没有足够粒子,因此粒子数密度小于 n^0 。粒子数密度的计算证明了基于边界网格的核函数积分的正确性。

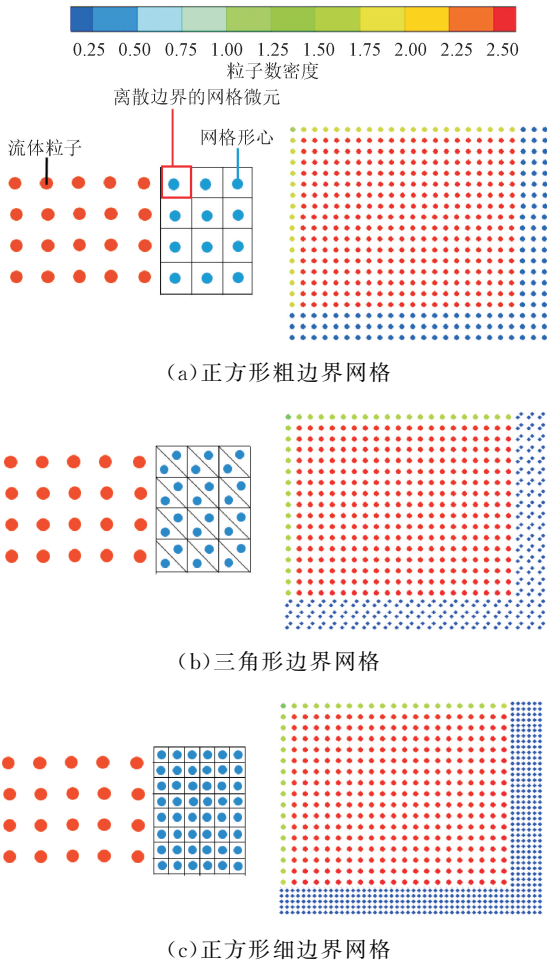


图 2 3 种边界网格下的流体粒子数密度

Fig. 2 The particle number density of the computational domain using three types of boundary meshes

1.4 基于边界网格的粒子迁移模型

基于以上结果,可以得到在使用边界网格时的粒子迁移模型,如式(11)所示。

$$\delta \mathbf{r}_i = A \sum_{j \neq i} w_{ij}(|\mathbf{r}_{ij}|) \frac{\mathbf{r}_{ij}}{|\mathbf{r}_{ij}|^2} + A \sum_{k \in m} w_{ik}(|\mathbf{r}_{ik}|) \frac{\mathbf{r}_{ik}}{|\mathbf{r}_{ik}|^2} \frac{\Delta A_k}{l_0^2} \quad (11)$$

式中:系数 A 是与维度 d 、粒子直径 l_0 、粒子数密度 n^0 有关的量,其计算公式如下

$$A = -\frac{\alpha l_0^2 d}{n^0} \quad (12)$$

i 粒子的迁移量分为两部分,第一部分是式(11)等号右端的第一项,代表粒子 i 影响域内的其他粒子对该粒子的迁移量所做出的贡献;第二部分是等号右端的第二项,代表边界网格对粒子 i 的迁移量做出的贡献。两部分贡献线性相加之后即为当前 i 粒子的空间迁移矢量值。

式(12)中的 α 值用以控制迁移矢量的模的大小,模量越大,单步内粒子移动的位置就越长。合适的 α 值可以同时保证粒子分布重构过程的高效和稳定性。

经过若干步的粒子迁移计算之后,流场中的粒子会自发向延粒子数密度梯度的反方向运动,最终发展为均匀各向同性的分布。这种分布也是不可压缩粒子法计算中节点的理想分布。

1.5 CFL 条件

本文所提出的算法不包含时间项,粒子重构过程中每一步的移动尺度由式(12)中的 α 控制。综合考虑粒子迁移过程能够稳定且高效地推进,需要动态地调整迁移模型中的系数 α ,其设定依据以下条件

$$|\delta \mathbf{r}_i|_{\max} \leq 0.1 l_0 \quad (13)$$

2 结果与讨论

2.1 二维粒子初场布置的重构及优化过程

以椭圆计算域为例,进行初始粒子分布的各向同性重构。椭圆形边界具有明确的函数表达,但难以使用圆形粒子布置的方法在极坐标下进行边界粒子逐个配点,此外,椭圆内部的粒子也难以进行均匀各向同性的逐个配点。

在布置均匀各向同性的椭圆形粒子分布时,以预先建立的椭圆形网格为辅助计算节点,如图 3 所示。椭圆结构的长轴长度与短轴长度分别为 2 m 和 1 m,主网格尺寸为 0.02 m。网格域的宽度采取粒子的影响域半径 r_c ,其数据需要包含每一个网格微元 k 的形心 x_k 和面积 ΔA_k 。

之后,建立矩形阵列分布的流场节点,即流体粒

子,如图4(a)所示。粒子直径为0.1 m,粒子数为586。矩形阵列的粒子离散域的阶梯状非连续边界偏离了椭圆形边界。因此,需基于方程(11)对粒子的空间坐标进行调整,减小边界的离散误差,结果如图4(b)所示。

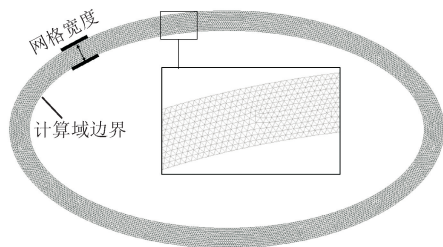
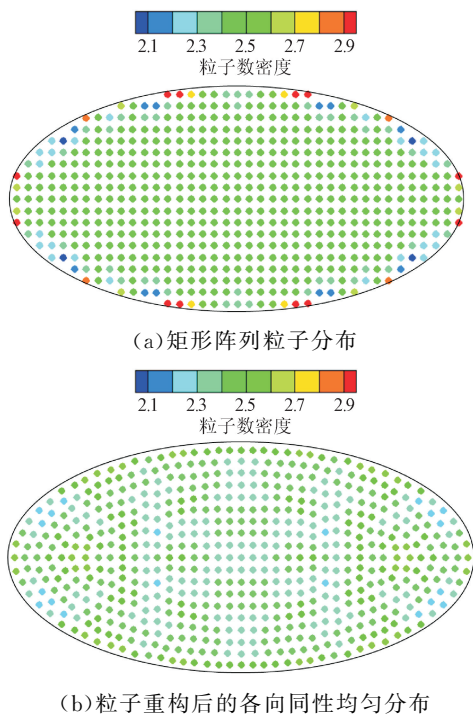


图3 椭圆形网格信息

Fig. 3 The information of the elliptic meshes



(b) 粒子重构后的各向同性均匀分布

图4 椭圆形计算域中的粒子分布的重构过程

Fig. 4 The process of the reconstruction of the particle distribution within the elliptic region

对重构过程前后两种粒子分布的离散误差进行量化对比,结果如图5所示。对比椭圆形计算域中的两种粒子分布的粒子数密度如图6所示,可以看出,重构后的粒子数密度更接近理论值。从以上两项定量对比可以看出,相比起阵列布置中的表面粒子,重构后的表面粒子与理论边界的偏差值和粒子数密度差整体降低,重构后的最大偏差较重构前大约减小了81%,粒子数密度减小了约60%,这表明重构后的表面粒子分布更加贴合理论边界。

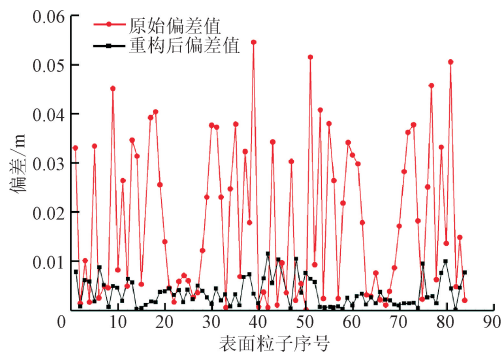


图5 椭圆形计算域重构过程前后表面粒子与理论边界的偏差

Fig. 5 The deviations between the surface particles and the theoretical boundary before and after the reconstruction in the elliptic domain

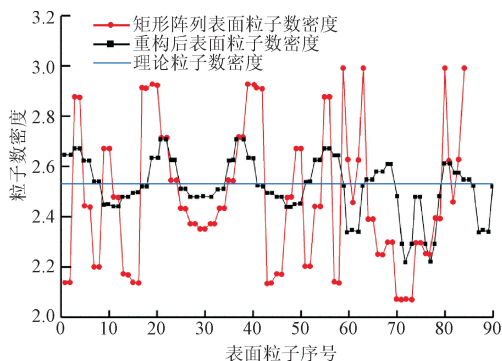


图6 椭圆计算域重构过程前后表面粒子的粒子数密度

Fig. 6 Particle number density of surface particles before and after the reconstruction in elliptic domain

将以上两种椭圆分布视为初始布置,将椭圆形边界视为自由表面,使用移动粒子半隐式法^[25],考察在保守力场中初始时刻的压力

$$P = -\Omega r^2 \quad (14)$$

计算域初始速度定义为

$$\begin{cases} u_0 = \delta(0)x \\ v_0 = -\delta(0)y \end{cases} \quad (15)$$

式中: Ω 和 $\delta(0)$ 为定义保守力场大小的两个常数,值分别为0.4和1.2。图7对两种粒子分布下的物理量场计算进行了对比,并对粒子所离散的物理量场进行连续化处理,直观地展示了理想的粒子分布对物理量场求解带来的改善效果。图7(a)中,呈阶梯状的阶跃边界粒子(压力为零粒子)所构成的自由边界会造成内部压力场求解失真,而图7(b)中的连续光滑边界则提供了更合理的自由表面压力边界条件,基本避免了粒子法自由边界“厚度”对计算造成的影响。

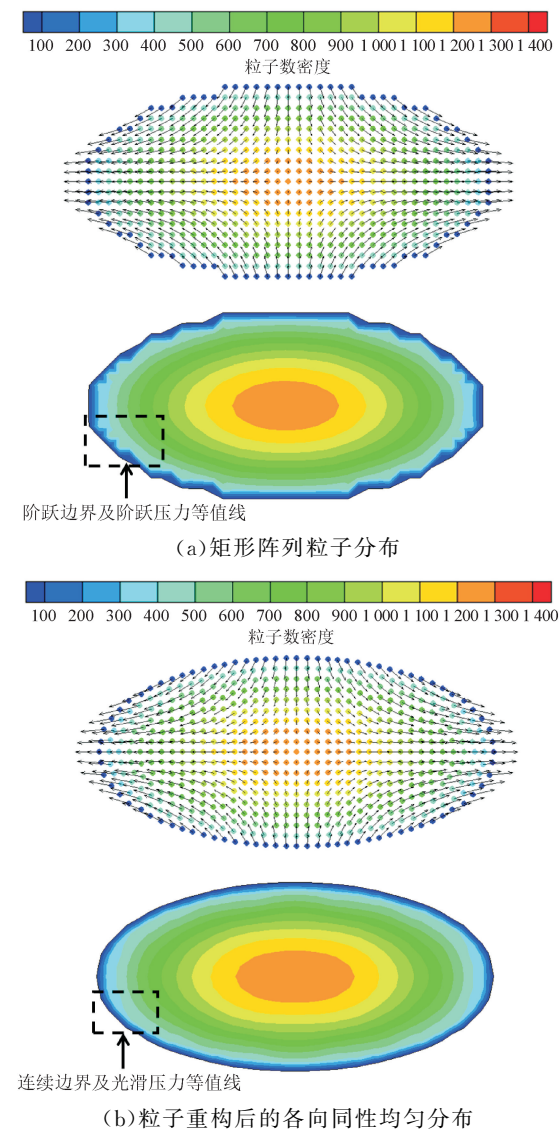


图 7 保守力场中的椭圆计算域的压力分布

Fig. 7 The pressure field of the oval computational domain under the conservative force field

2.2 二维转子泵内流场的粒子初始布置

二维转子泵转子与转子之间、转子和泵腔间的啮合使泵腔内空间结构复杂,尤其在啮合点附近的狭缝区域,粒子难以用配点法进行手动布置。

图 8 展示了转子泵固体部件的网格结构,网格形态均为三角形,网格主尺寸约为 5 m。粒子的初场布置如图 9(a)所示,其中,粒子直径为 2.5 m,粒子数为 7 574。

由图 9(a)的放大图可以看到,矩形阵列的粒子难以均匀地填充其啮合点附近的狭缝,同时,固壁边界附近的粒子因粒子在空间位置中的截断导致当地粒子分布与网格的拓扑结构缺乏连续性,因此会产生较严重的粒子数密度噪点。图 9(b)是经过了粒子分

布重构之后的结果。从局部放大图中可以看到,经过自适应调整后的粒子分布保证了均匀各向同性,与固体边界之间具有更好的贴体性和空间连续性,并且更符合啮合点附近不断收缩的区域形状。

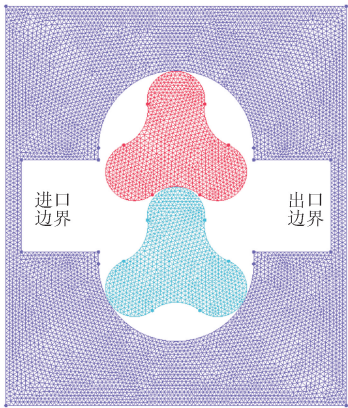


图 8 转子泵网格

Fig. 8 The rotor pump grid

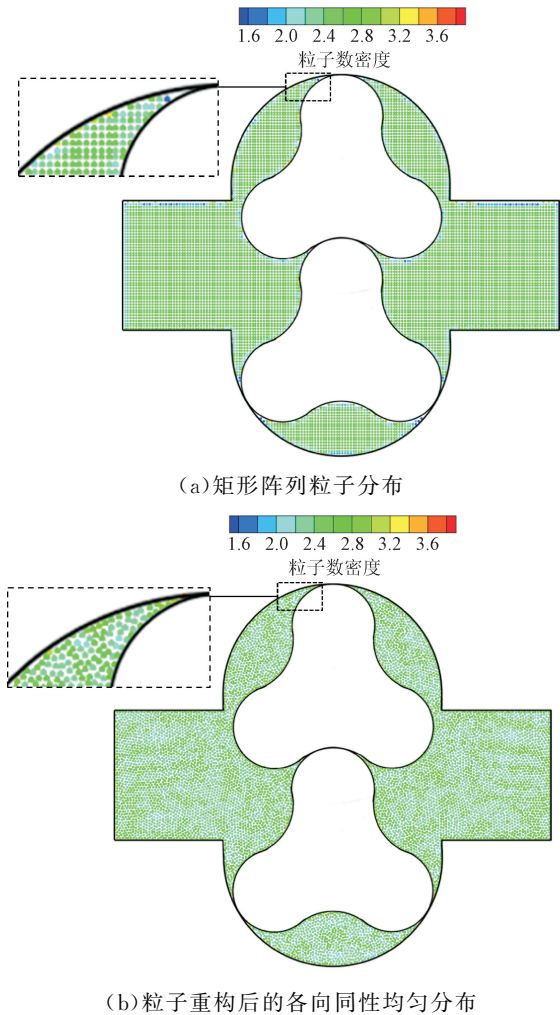


图 9 转子泵流域中的粒子阵列分布及重构结果

Fig. 9 The result of the reconstruction of the particle distribution in rotor grid

图10同样对比了重构前后表面粒子的粒子数密度。可以看出,重构后的固壁边界附近的粒子数密度在坐标系中的分布更加集中,且更加接近理论粒子数密度,数据波动更小,方差更低。

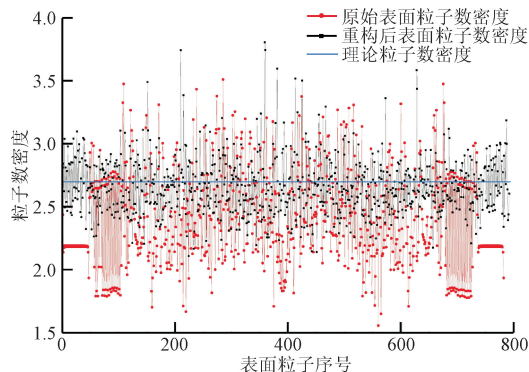


图10 转子泵重构前后表面粒子的粒子数密度

Fig. 10 Particle number density of surface particles before and after the reconstruction of particle distribution in the rotor pump

2.3 三维复杂空间中的粒子初场布置

本节继续考察本研究所提出的粒子初始布置重构算法在复杂三维计算域中的应用。如图11所示,在由立方体外边界和五角星内边界组合而成的复杂结构空腔中,需要流体粒子均匀充满该空腔。为便于展示,图中以三维实心粒子表示流体粒子与网格微元的形心坐标,并隐藏网格在Z方向上表面的形心坐标。同样使用网格将固体部分离散,流体粒子被均匀地阵列在空腔中。算例中,粒子直径为0.01 m,网格主尺寸为0.007 m,粒子数为28 784。

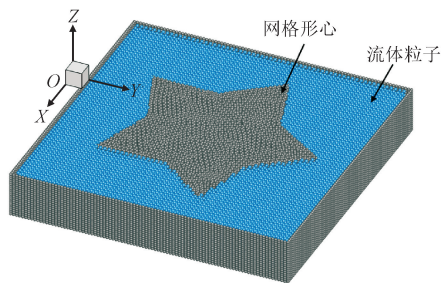


图11 复杂形状腔体的初始粒子布置和网格形心

Fig. 11 Initial particle distribution and surrounding mesh center of a complex cavity

均匀化前后的粒子分布如图12所示,可以看出,矩阵阵列的粒子在五角星的斜边上形成的阶梯状不连续分布在重构后得以改善,更加贴合倾斜直边。同时,在五角星的尖角处,粒子环绕尖角的分布也更加合理。这种锐角结构中的粒子分布在粒子法

的布置中属于较为困难的例子,而本文提出的重构方案,使这种特殊结构的粒子布置得到了很好的处理。此外,从物理场云图可以看出,整场的粒子数密度在重构后也更加均匀,这有助于有效抑制计算初始时刻的压力振荡,保证了计算的稳定性。

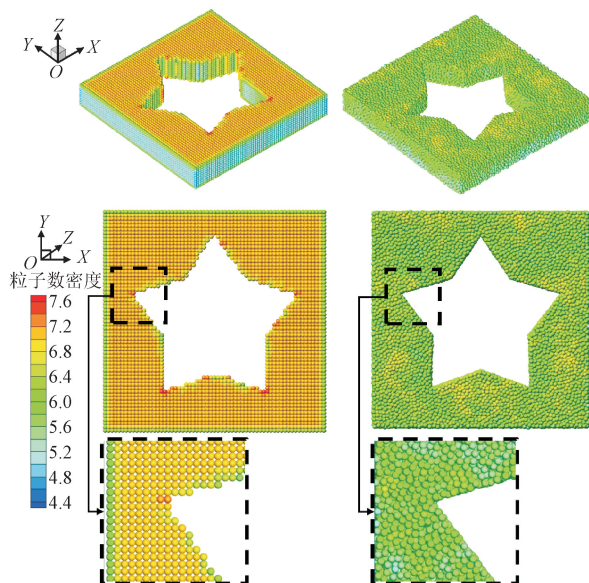


图12 三维复杂腔体中的粒子分布的重构过程

Fig. 12 The process of the reconstruction of the particle distribution within a three-dimensional complex cavity

量化对比了重构前和重构后边界附近的粒子数密度,结果如图13所示。重构后的粒子数密度更集中地分布于理论粒子数密度的区域,最大误差相较于重构前减小了约51%,反映了更均匀的粒子数密度,能够有效提高粒子法的水动力学模拟质量。

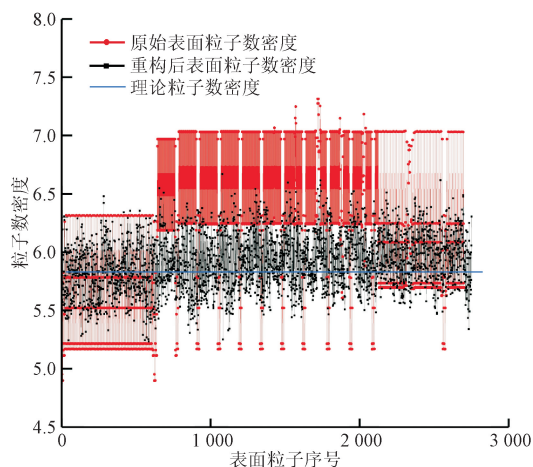


图13 复杂三维构型重构前后表面粒子的粒子数密度

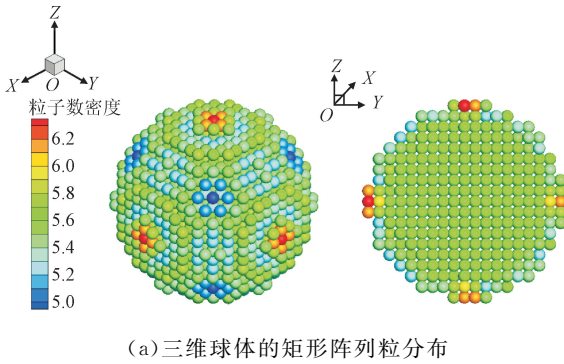
Fig. 13 Particle number density of surface particles before and after the reconstruction of particle distribution in the complex 3D geometry

2.4 三维球体液滴的粒子初始布置及浸润计算

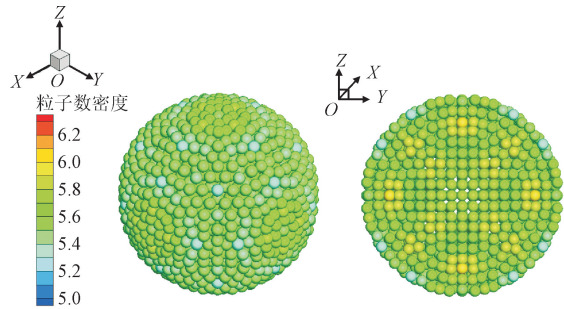
2.4.1 三维液滴的初始布置

三维球体是液滴动力学问题的研究中广泛存在的基本结构,然而其离散粒子的初场布置很难还原球体表面。就作者所知,目前广泛采用的三维液滴初场布置方案依然采用截取球心的半径范围内均匀阵列布置的流体粒子。当研究复杂的液滴动力学问题时,如单液滴浸润固体壁面、多液滴间的聚并和碰撞等,在这种不理想的分布下,阶跃、不连续的自由表面会造成表面曲率和法向量的严重误差,进而影响表面张力和压力的正确计算,导致表面近表面粒子的压力振荡,引起计算误差,或在液滴表面产生非物理的流动;此外,液滴内部的各向异性分布也会造成非物理的压力噪点,致使液滴形态的模拟受到影响。因此,光滑、连续的二维圆形或三维球体表面粒子分布对提高液滴动力学研究的严谨性和规范性具有重要意义。

目前,在绝大多数研究三维液滴动力学特性的粒子法模拟中,液滴的初始布置都采用图 14(a)的布置方案。在这种初始分布下的液滴形态的模拟会因液滴内部分布在同一平面内的粒子沿平面方向的挤压而失真,而经过优化的各向同性粒子分布在计算过程中能够保持更合理的形态,如图 14(b)所示。



(a) 三维球体的矩形阵列粒分布



(b) 三维球体的均匀各向同性粒子分布

图 14 三维球体中的粒子分布的重构过程

Fig. 14 The process of the reconstruction of the particle distribution within a three-dimensional sphere

2.4.2 三维液滴的浸润计算

图 15 展示了两种粒子分布下 5、25 ms 的浸润过程。5 ms 时,液滴在固液界面张力的作用下开始浸润固壁。未重构的液滴在计算初期,其表面粒子因沿自由表面法向的表面张力和压力梯度之间的相互作用而发生非物理的振荡,因此其自由表面比起重构后的初始布置更加粗糙。此外,未重构的粒子内因粒子各向异性分布,内部同一平面内的粒子沿平面方向的挤压,破坏液滴模拟过程中的液滴圆度。在 25 ms 时,原始均匀阵列的液体形态已明显失真,呈现出近四边形,而优化后的各向同性初始分布的液滴形态更符合实际。

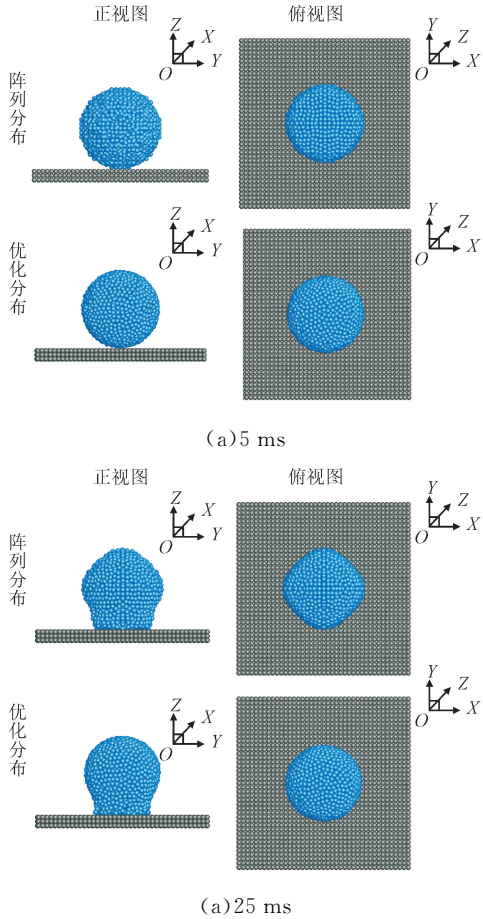


图 15 传统阵列初场布置和优化初始布置的三维液滴的浸润过程

Fig. 15 Wetting process of a 3D droplet of original initial particle distribution and reconstituted initial particle distribution

量化的圆度对比见图 16。其中,圆度由 XY 平面内液滴最大截面的外切圆直径 l_o 与内切圆直径 l_i 之比表示。图中,以原始矩形阵列分布的粒子作为初场布置,液滴在浸润过程中,XY 平面内的最大截面

的圆度在理论圆度($l_o/l_i = 1$)附近存在较大波动,而基于重构后的初场布置计算得到的结果更接近理论圆度,最大偏差较未重构时减小了约78.6%。该形态学上的改善对于提高小韦伯数液滴动力学问题的粒子法模拟精度具有重要意义。

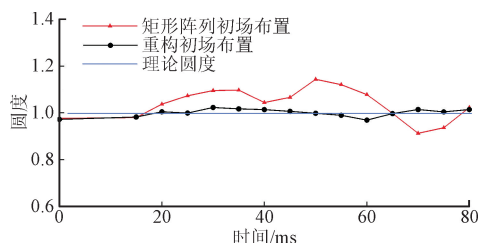


图16 传统阵列初始布置和优化初始布置下浸润过程的圆度对比

Fig. 16 The comparison of roundness during the wetting process between the original initial particle distribution and the reconstituted initial particle distribution

3 结 论

考虑到粒子法在复杂工程问题中越来越广泛的应用,为了优化具有复杂边界的粒子初场布置,本文将粒子法中广泛采用的粒子迁移模型与粒子法离散模型的数值积分形式相结合,建立起一种面向粒子法求解器前处理过程中粒子分布重构的方法。该方法通过粒子迁移模型,使矩形阵列排布的粒子通过自适应运动,距离设定边界(固壁或自由表面)最近的粒子形成更贴合边界的粒子分布,而边界附近的粒子也能保证密度均匀、各向同性的分布。

通过二维椭圆形计算域、转子泵泵腔、三维复杂腔体、三维球体等初始布置,验证了算法在含有曲线面、狭缝、锐角等形状的边界中具有通用性和有效性。重构后的表面粒子所表示的计算域边界与理论边界的偏差值比未重构时减小约81%,且重构后的表面粒子数的噪点更低,整体更接近理论值,其中,二维情况下误差可减小约60%,三维情况下误差可减小51%。在液滴浸润算例中,重构后的三维液滴避免了各向异性粒子分布导致的形态失真问题,因此在浸润过程中圆度与理论值符合程度较高,比未重构时误差减小约78.6%,得到了准确的液滴形态。

参考文献:

[1] KOSHIZUKA S, OKA Y. Moving-particle semi-implicit method for fragmentation of incompressible fluid [J]. Nuclear Science and Engineering, 1996,

123(3): 421-434.

- [2] GINGOLD R A, MONAGHAN J J. Smoothed particle hydrodynamics: theory and application to non-spherical stars [J]. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 1977, 181(3): 375-389.
- [3] SHIBATA K, KOSHIZUKA S, SAKAI M, et al. Transparent boundary condition for simulating nonlinear water waves by a particle method [J]. Ocean Engineering, 2011, 38(16): 1839-1848.
- [4] SHIBATA K, KOSHIZUKA S. Numerical analysis of shipping water impact on a deck using a particle method [J]. Ocean Engineering, 2007, 34(3/4): 585-593.
- [5] SAKAI Mikio, SHIGETO Yusuke, SUN Xiaosong, et al. Lagrangian-Lagrangian modeling for a solid-liquid flow in a cylindrical tank [J]. Chemical Engineering Journal, 2012, 15: 663-672.
- [6] LIU Qixin, SUN Zhongguo, SUN Yijie, et al. Numerical investigation of liquid dispersion by hydrophobic/hydrophilic mesh packing using particle method [J]. Chemical Engineering Science, 2019, 202: 447-461.
- [7] LI Gen, LIU Ming, DUAN Guangtao, et al. Numerical investigation of erosion and heat transfer characteristics of molten jet impinging onto solid plate with MPS-LES method [J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2016, 99: 44-52.
- [8] LI Gen, OKA Y, FURUYA M. Experimental and numerical study of stratification and solidification/melting behaviors [J]. Nuclear Engineering and Design, 2014, 272: 109-117.
- [9] DUAN Guangtao, KOSHIZUKA S, YAMAJI A, et al. An accurate and stable multiphase moving particle semi-implicit method based on a corrective matrix for all particle interaction models [J]. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 2018, 115(10): 1287-1314.
- [10] DUAN Guangtao, CHEN Bin, ZHANG Ximin, et al. A multiphase MPS solver for modeling multi-fluid interaction with free surface and its application in oil spill [J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2017, 320: 133-161.
- [11] 刘谋斌, 常建忠. 耗散粒子动力学处理复杂固体壁面的一种有效方法 [J]. 物理学报, 2010, 59(11): 7556-7563.
- LIU Moubin, CHANG Jianzhong. A new boundary treatment algorithm for dissipative particle dynamics [J]. Acta Physica Sinica, 2010, 59(11): 7556-7563.
- [12] 王锋, 孙中国, 刘启新, 等. Y型微混合器内流场移动粒子半隐式法数值分析 [J]. 西安交通大学学报,

- 2021, 55(5): 162-170.
- WANG Feng, SUN Zhongguo, LIU Qixin, et al. Numerical analysis of the flow field in a Y-type micromixer using moving particle semi-implicit method [J]. Journal of Xi'an Jiaotong University, 2021, 55(5): 162-170.
- [13] WANG Feng, SUN Zhongguo, SUN Yijie, et al. Simulation of a centrifugal pump based on a Lagrangian particle solver [J]. Journal of Fluids Engineering, 2022, 144(6): 061105.
- [14] SUN Zhongguo, XI Guang, CHEN Xi. A numerical study of stir mixing of liquids with particle method [J]. Chemical Engineering Science, 2009, 64(2): 341-350.
- [15] 李帝辰, 席光, 孙中国. 无网格粒子法中复杂二维形状的均布离散方法 [J]. 西安交通大学学报, 2013, 47(11): 120-126.
- LI Dichen, XI Guang, SUN Zhongguo. Uniform discretization of 2-dimensional complex geometrical area for meshless particle method [J]. Journal of Xi'an Jiaotong University, 2013, 47(11): 120-126.
- [16] DOMÍNGUEZ J M, CRESPO A J C, BARREIRO A, et al. Development of a new pre-processing tool for SPH models with complex geometries [EB/OL]. (2011-06-01) [2023-02-01]. https://www.researchgate.net/publication/268216542_Development_of_a_new_pre-processing_tool_for_SPH_models_with_complex_geometries.
- [17] AKINCI N, IHMSEN M, AKINCI G, et al. Versatile rigid-fluid coupling for incompressible SPH [J]. ACM Transactions on Graphics, 2012, 31(4): 62.
- [18] IHMSEN M, AKINCI N, GISSLER M, et al. Boundary handling and adaptive time-stepping for PCISPH [C]//Workshop in Virtual Reality Interactions and Physical Simulation "VRIPHYS" (2010). Eindhoven, Netherlands: The Eurographics Association, 2010: 79-88.
- [19] 倪国喜, 王瑞利, 林忠, 等. 任意区域上的粒子均匀分布方法 [J]. 计算力学学报, 2007, 24(4): 408-413.
- NI Guoxi, WANG Ruili, LIN Zhong, et al. Equi-distribution of particles in arbitrary domain [J]. Chinese Journal of Computational Mechanics, 2007, 24(4): 408-413.
- [20] DIEHL S, ROCKEFELLER G, FRYER C L, et al. Generating optimal initial conditions for smoothed particle hydrodynamics simulations [J]. Publications of the Astronomical Society of Australia, 2015, 32: e048.
- [21] ZHU Yujie, ZHANG Chi, YU Yongchuan, et al. A CAD-compatible body-fitted particle generator for arbitrarily complex geometry and its application to wave-structure interaction [J]. Journal of Hydrodynamics, 2021, 33(2): 195-206.
- [22] LIND S J, XU R, STANSBY P K, et al. Incompressible smoothed particle hydrodynamics for free-surface flows: a generalised diffusion-based algorithm for stability and validations for impulsive flows and propagating waves [J]. Journal of Computational Physics, 2012, 231(4): 1499-1523.
- [23] ZHANG Xin, HE Zhixia, WANG Qian, et al. Effect of fuel temperature on cavitation flow inside vertical multi-hole nozzles and spray characteristics with different nozzle geometries [J]. Experimental Thermal and Fluid Science, 2018, 91: 374-387.
- [24] ZHENG Zumei, DUAN Guangtao, MITSUME N, et al. A novel ghost cell boundary model for the explicit moving particle simulation method in two dimensions [J]. Computational Mechanics, 2020, 66(1): 87-102.
- [25] TAMAI T, KOSHIZUKA S. Least squares moving particle semi-implicit method: An arbitrary high order accurate meshfree Lagrangian approach for incompressible flow with free surfaces [J]. Computational Particle Mechanics, 2014, 1(3): 277-305.

(编辑 亢列梅)