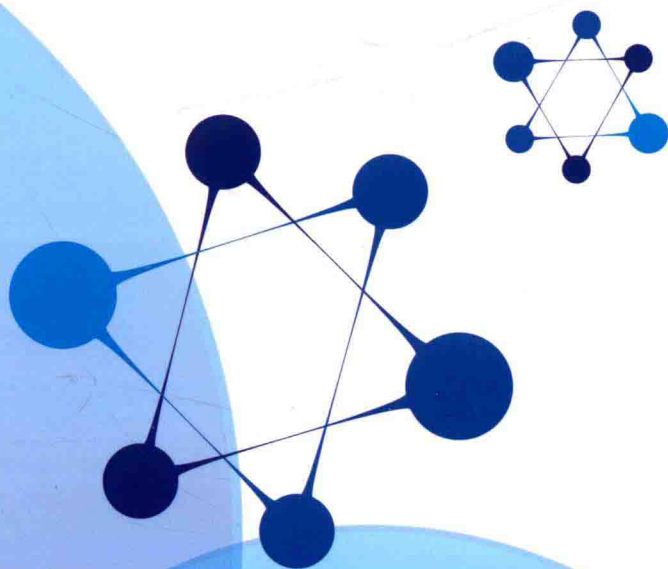


无网格粒子方法 及其在水波问题中的应用

郑 兴 段文洋 胡振红 著



HEUP 哈尔滨工程大学出版社

无网格粒子方法及其在水波问题中的应用

WUWANGGE LIZI FANGFA JI QI ZAI
SHUIBO WENTI ZHONG DE YINGYONG

郑 兴 段文洋 胡振红 著

内 容 简 介

本书采用无网格粒子方法对水波问题进行模拟研究。该方法采用拉格朗日观点对整个流场的水粒子进行模拟,能够方便地模拟破碎波浪和运动物体问题,是目前快速发展的流体力学新方法。本书基于弱可压缩假设介绍了求解水波问题的重要控制方程。针对核近似方法的特点,对不同类型核近似方法的精度和特点进行系统分析。对一些数值技巧开展了系统分析,为求解水波问题的模拟提供了强有力的支持。另外还对一些水波问题的模拟开展了系统研究,包括经典的水波问题及一些大变形的非连续自由表面的水波问题,为更加复杂的水波问题应用提供了重要基础。

本书是针对无网格粒子方法的初学者而编写,需要读者具备水动力学方法的基础知识,可作为高校教授无网格方法的教材,也可供初学者自学使用。

图书在版编目(CIP)数据

无网格粒子方法及其在水波问题中的应用 / 郑兴,
段文洋, 胡振红著. — 哈尔滨: 哈尔滨工程大学出版社,
2017.3

ISBN 978 - 7 - 5661 - 1474 - 7

I. ①无… II. ①郑… ②段… ③胡… III. ①波浪能 -
研究 IV. ①P743.2

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2017)第 050323 号

选题策划 史大伟
责任编辑 王洪菲
封面设计 博鑫设计

出版发行 哈尔滨工程大学出版社
社 址 哈尔滨市南岗区东大直街 124 号
邮政编码 150001
发行电话 0451 - 82519328
传 真 0451 - 82519699
经 销 新华书店
印 刷 北京中石油彩色印刷有限责任公司
开 本 787 mm × 1 092 mm 1/16
印 张 13
字 数 340 千字
版 次 2017 年 3 月第 1 版
印 次 2017 年 3 月第 1 次印刷
定 价 42.00 元

<http://www.hrbeupress.com>

E-mail: heupress@hrbeu.edu.cn



前 言

对于水波问题方面的研究,无网格粒子方法利用其无网格和拉格朗日特性,在一些经典流体力学方法无法解决的问题上,体现出良好的适应性,也促进了相关学科的发展,如破碎波浪、波浪雾化、大幅运动、多物体的耦合运动、流固耦合问题等。无网格粒子方法在水波问题应用方面存在计算量比较大的问题,计算精度还需要不断提高。随着计算条件的飞速发展,特别是 CPU 并行、GPU 并行、CPU 和 GPU 耦合技术的快速发展,为用无网格粒子方法解决实际工程问题提供了可能。随着研究无网格粒子方法的学者不断增多,研究领域不断扩展,一些改进的方法和可靠的数值技巧可以被很好地总结出来,方便大家交流和借鉴。

无网格粒子方法是一种快速发展的数值方法,目前也有几部优秀的著作,但是本书的重点是针对水波应用方面展开研究。本书尽量采用通俗易懂的语言,介绍无网格方法的发展、基本算法、状态方程和数值技巧。由于该方法还在快速发展,所以本书内容尽量覆盖近年来无网格方法研究的最新进展。

全书共分 7 章。第 1 章主要介绍无网格粒子方法发展的概况以及一些改进的无网格粒子方法。第 2 章主要介绍核近似方法及其一些改进方法,并对一些方法的精度进行分析。第 3 章主要针对水波问题模拟的特点,介绍无网格粒子形式的流体力学方程。第 4 章主要介绍无网格粒子方法的一些数值求解技巧。第 5 章主要采用 SPH 方法对经典的流体力学问题展开研究。第 6 章采用 SPH 方法对普通水波问题展开研究。第 7 章采用 SPH 方法对破碎波浪问题展开研究。

本书的部分研究内容得到了国家自然科学基金(51009034,51279041),总装预研基金(9140A14020712CB01158),中央高校基本科研业务费(HEUCDZ1202,HEUCF170104)等科研项目资助,在此深表感谢!感谢团队中金善勤博士、张宁波博士和郝红彬博士在相关领域做出的重要贡献。感谢团队中已经毕业和在读研究生为本书的出版付出的辛勤劳动!

由于无网格粒子方法的核心涉及多个学科,且该计算方法发展迅猛,书中内容难免有疏漏。另外,由于著者学识有限,书中难免出现不妥之处,恳请读者及同行专家批评指正。

郑 兴

于哈尔滨工程大学

2016 年 12 月

目 录

第 1 章 无网格粒子方法的基本概况	1
1.1 研究水波问题的几种数值方法	1
1.2 发展无网格粒子方法的前景	5
1.3 一些改进的无网格方法简介	7
本章小结	21
参考文献	21
第 2 章 核近似和改进方法的精度分析	26
2.1 核近似和粒子近似	26
2.2 核函数的形式	28
2.3 核近似的离散精度分析	30
2.4 高精度核近似方法的提出和精度分析	43
2.5 K2_SPH 核近似方法	48
本章小结	67
参考文献	67
第 3 章 SPH 形式的流体力学控制方程	70
3.1 流体力学控制方程	70
3.2 SPH 形式的流体力学控制方程	72
3.3 其他辅助方程	74
3.4 湍流模型和离散方法	75
本章小结	82
参考文献	82
第 4 章 数值解法关键技术	84
4.1 时间步进方法	84
4.2 初始时刻粒子布置的调整方法	85
4.3 固壁边界处理方法	87
4.4 运动边界处理方法	87
4.5 自由表面边界处理方法	88
4.6 周期性边界处理方法	89
4.7 运动物体的处理方法	90
4.8 提高粒子分布均匀程度的处理方法	92
4.9 动态粒子处理方法	94
本章小结	95
参考文献	95

第 5 章 无网格粒子方法在经典流体力学问题中的模拟	98
5.1 Poiseuille 流动	98
5.2 Couette 流动	105
5.3 驻波问题模拟	108
本章小结	116
参考文献	117
第 6 章 无网格粒子方法在水波问题中的应用	118
6.1 推板造波问题模拟	118
6.2 液舱晃动问题模拟	125
本章小结	133
参考文献	133
第 7 章 无网格粒子方法在破碎波浪中的应用	134
7.1 溃坝流动数值模拟	134
7.2 涌浪发展全过程模拟	140
7.3 液舱大幅晃荡的模拟	147
7.4 孤立波与斜坡碰撞模拟	157
7.5 基于 $2D+t$ 方法的高速船兴波问题模拟	165
7.6 部分三维模拟结果展示	175
本章小结	179
参考文献	179
附录 A 动坐标下控制方程的转换关系	181
附录 B 任意直线外点的垂线和垂足计算公式	184
附录 C 二维弱可压缩 SPH 方法溃坝模拟 Fortran 程序	185

第 1 章 无网格粒子方法的基本概况

无网格粒子方法是一种快速发展的数值计算方法,与常规网格方法相比,其摆脱了网格划分和关联性,使得该类方法在处理大变形问题、不连续问题和破碎问题上具有优势。光滑粒子流体动力学(Smoothed Particle Hydrodynamics, SPH)方法是无网格粒子方法中的一种,也是最早出现的无网格粒子方法,诞生至今已有 30 多年,这期间该方法在理论和应用研究等方面都得到了快速发展,并逐渐成为相关领域研究的国际热点之一,受到国内外众多学者的关注。与传统模拟方法不同,SPH 方法的计算区域采用一群粒子(Particle)来离散,在宏观上流体不具有连续性假设,但是在微观上粒子比流体分子要大得多。SPH 方法在许多传统模拟方法难以胜任的领域,如强非线性波浪冲击、高速物体碰撞、裂纹发展破裂、水下爆炸等都可以进行有效的模拟,因此被用于多种复杂现象的机理研究,推动了相关学科的发展。SPH 方法不仅是一种数值模拟方法,而且是一种重要的科学研究手段,该方法完全从所模拟的流体结构特点出发,彻底摆脱一些流体力学假设和网格结构的束缚,具有良好的拓展性。此外,SPH 方法凭借优秀的并行特性,可以方便地实现大规模计算。可以预计,随着计算机技术的快速发展和该数值计算方法的不断完善,SPH 方法将会取得更多研究成果,在科学技术发展中发挥更重要的作用。

1.1 研究水波问题的几种数值方法

目前研究水波问题的数值方法可以分成解析方法、势流理论方法和计算流体动力学(Computational Fluid Dynamics, CFD)方法。

1.1.1 解析方法

解析方法通过对所模拟的现象进行简化,列出所满足的控制方法,通过初始条件和边界条件,找到所研究问题的解析表达式。该类方法在早期流体力学领域发挥了重要作用,尤其对一些简单形状物体流体力学现象的规律分析起到了重要作用。在 1954 年 MacCamy 和 Fuchs 就给出了平底直立圆柱的线性绕射解析解。此后人们采用二阶摄动理论对直立圆柱的绕射问题开展了大量研究工作,但是由于对自由表面的积分存在困难,大部分内容放在二阶波浪力的研究上,直到 1997 年 Eatock Taylor 和 Huang 采用半解析的方法推导得出真正意义上能够求解直立圆柱波浪爬升自由表面的二阶解析解,并对和频与差频问题的波浪爬升问题进行模拟。1999 年, Teng 和 Kato 采用二阶摄动理论分析了轴对称物体的绕射问题,给出了波浪爬升的波高分布。2003 年, Buldakov, Eatock Taylor 和 Taylor 采用二阶摄动理论计算波群在圆柱上的爬升问题,并且讨论了圆柱直径对波高的影响。2006 年, Mavrakos 和 Chatjigeorgiou 得到不同直径圆柱组合体二阶绕射解析解,并且对该类型圆柱的波浪爬升问题进行了计算和分析。2011 年, Chatjigeorgiou 推导出椭圆形柱体和两个圆柱共同作用的

二阶散射解析解,对波浪爬升的波形进行了对比研究。另外 Chatjigeorgiou 和 Molin 还对三阶的波浪爬升问题进行了研究。关于解析解的研究方法,国内也开展了很多研究工作。Teng 等采用解析解的方法研究带孔外墙和直立圆柱组合体的绕射问题。Ning 等采用解析解的方法研究了正交直墙前圆柱的绕射问题, Miao 等采用解析解的方法研究拱形防波堤的绕射问题。Jian 等采用线性理论研究考虑短峰波和流共同作用下直立圆柱的绕射问题,得到波浪爬升的解析解。Niu 等采用线性理论研究考虑冲刷坑影响的直立圆柱绕射问题。尽管解析解得到计算结果的效率高,但是由于所研究的物体形状比较简单,因此对于一些复杂物体的研究有限。

1.1.2 势流理论方法

目前该类方法是模拟水波问题最重要的方法之一,势流理论方法对于水波问题的模拟可以分为频域理论和时域理论。目前频域线性理论已经非常成熟,并且发展成被广泛应用的商业软件,如 WAMIT, AQWA, MORA, HydroSTAR 和 SESAM 等。频域方法假定波浪场中的物理量随时间呈周期性变化,把时间因素和空间因素分离,使待求问题转化为对空间项的求解。使用频域理论对非线性问题进行研究的一个有效途径是采用摄动展开,把原非线性问题分解成一系列的各阶定解问题,将自由面边界条件和物面边界条件分别在静水面和平均物面上保留到摄动展开的二阶,这就产生了频域二阶理论。如果将这一过程延续下去,理论上可以逐阶得到更高阶次的解。频域理论的优点在于求解的是与时间无关的量,所以计算量相对较小,但是只适用于周期性的稳态问题,对瞬变或者强非线性问题不容易处理。随着人们不断深入的研究,基于频域的计算方法已经不能完全满足研究需要。时域分析方法则有很大的自由度,在处理瞬态问题、时历响应以及大幅振荡等问题上具有不可替代的优势。目前按照问题的需求,时域法也有不同层次的处理方法,如时域二阶理论、物面非线性理论和完全非线性理论等。时域问题从所采用的网格类型上还可以分为边界元方法 (Boundary Element Method, BEM) 和有限元方法 (Finite Element Method, FEM)。Büchmann 等采用时域二阶的边界元方法模拟了波浪和流共同作用的波浪爬升问题。Stansberg 和 Kristiansen 也采用二阶理论研究了重力式平台的波浪爬升问题。Bai 和 Eatock Taylor 采用全非线性的边界元方法模拟了规则波和聚焦波对直立圆柱的波浪爬升问题。另外 Bai 和 Eatock Taylor 采用全非线性的边界元方法模拟了考虑具有外飘结构圆柱的波浪爬升问题。最近, Bai, Feng 和 Eatock Taylor 采用全非线性的边界元方法模拟了两个圆柱和四个圆柱的波浪爬升问题,对多圆柱间近似共振现象 (near-trapping) 进行了详细分析。另外人们还采用有限元方法求解圆柱的波浪爬升问题。Ma, Wu 和 Eatock Taylor 采用全非线性的有限元方法求解直立圆柱的绕射问题。此外 Wang 和 Wu 还采用二阶和全非线性有限元方法模拟了多个圆柱情况的绕射问题,给出波浪爬升的自由表面波形。当入射波波幅与物体的特征尺度之比不是小量时,物面边界条件和自由面边界条件都必须在瞬时物面和自由面上得到满足。完全非线性理论在模拟波浪与物体的相互作用上可以得到相当高的精度,但是由于面元或网格的限制,在对包含翻转、破碎的复杂自由表面模拟时存在不足。

另外对于水波问题模拟还有一种基于 Boussinesq 方程的方法。该方法是根据所满足的边界条件,合并连续性方程和动量方程推导而来。利用 Boussinesq 方程可以模拟不规则波和非线性波的传播过程。目前有限差分方法是求解 Boussinesq 方程的主要方法,此外还可以采用有限元法、谱方法、非连续 Glerkin 法、有限体积法等。采用 Boussinesq 方程研究圆柱

的波浪爬升问题也取得了不少的研究成果。Liu 等采用改进的 Boussinesq 方程模拟直立圆柱的绕射问题,对波浪爬升现象进行了模拟。Fang 等采用 Boussinesq 方程对圆柱状岛礁的孤立波绕射问题进行了模拟,并且采用改进的自由表面捕捉方法对波浪爬升问题进行了计算。Ruhrman 等还采用高阶 Boussinesq 方法对直立平板的波浪爬升问题进行了模拟。当模拟较强非线性波浪的绕射问题时可采用 Boussinesq 方程,但是该类方法要求求解方程的自由表面必须是连续的。

1.1.3 CFD 方法

随着 CFD 方法理论研究的不断深入以及计算机硬件水平的不断提高,该类方法在波浪与物体的相互作用方面取得了较大进步。该类方法考虑黏性的影响,借助强大的自由表面捕捉方法,对波浪的翻转、破碎问题进行模拟。目前解决该类问题的数值计算方法很多,主要有如下几种。

1. 边界元方法(BEM)

BEM 只需要对边界面进行离散,对自由表面问题的模拟具有很好的适应性,因此在解决波浪与物体相互作用的势流理论中占据统治地位,此外在解决强非线性和极限流问题时同样可以得到较好的模拟结果。例如 Zhao 和 Faltinsen 采用该方法对物体入水问题进行了大量的研究。但是 BEM 对于入水问题的模拟局限于楔形体入水,如果入水物体存在曲面,会给计算带来很大的难度。此外当波浪翻转与底层流体接触后,BEM 方法的计算也同样困难,主要原因在于此时旋度产生,已不满足该流动的速度势。现在普遍的办法是剪掉波浪飞溅产生的射流使计算得以继续,但是这对物体上的压力分布和质量守恒存在一定影响。因此,使用 BEM 方法对于我们所关心的翻转和破碎问题进行完整描述还存在困难。

2. 有限差分方法(FDM)

有限差分方法(Finite Different Method, FDM)是计算机数值模拟最早采用的方法,至今仍被广泛运用。该方法将求解域划分为差分网格,用有限个网格节点代替连续的求解域。有限差分法以泰勒级数展开法为基础,把控制方程中的导数用网格节点上函数值的差商代替进行离散,建立以网格节点为未知数的代数方程组。该方法是一种直接将微分问题变为代数问题的近似数值解法,数学概念直观,表达简洁,是发展较早且比较成熟的数值计算方法。

有限差分法在进行数值离散时,往往要求网格线正交,在处理规则边界问题时比较方便,但是当边界不规则时,常采用线性插值来满足边界条件,需要在求解区域外增加虚拟网格点,这会影响结果精度和差分格式迭代的收敛性。因此,我们关心的复杂自由表面问题,需要一套复杂的自由表面捕捉方法,例如流体体积分法(Volume of Fluid, VOF)或水平集法(Level-Set, LS)等。

从差分的空间形式角度考虑,可分为中心格式和迎风格式。当考虑时间因子的影响时,差分格式可以分为显格式、隐格式和显隐交替格式。对于有限差分格式,从格式的精度角度划分,有一阶格式、二阶格式和高阶格式。目前常见的差分格式主要是上述几种形式的组合,不同的组合会形成不同类型的差分格式。有限差分方法主要适用于结构化网格。

3. 有限元方法(FEM)

有限元方法的基础是变分原理和加权余量法,其基本求解思想是将计算域划分成有限个互不重叠的单元,在每个单元内,选择一些合适的节点作为求解函数的插值点,把微分方

程的变量改写成由各变量或其导数节点值与所选用插值函数组成的线性表达式,借助于变分原理或加权余量法,对微分方程离散求解。采用不同权函数和不同形式的插值函数,可构成不同有限元方法。有限元方法最早应用于结构力学,后来应用于流体力学。在有限元方法中,把计算域离散剖分为有限个互不重叠且相互连接的单元,在每个单元内选择基函数,用单元基函数的线性组合来逼近单元中的真解,整个计算域上总体的基函数可以看成由每个单元基函数组成的,则整个计算域内的解可以看作由所有单元上的近似解构成。有限元方法也分为多种计算格式,从权函数的选择来划分,有配置法、最小二乘法和伽辽金法;从计算单元网格的形状来划分,有三角形网格、四边形网格和多边形网格;从插值函数的精度来划分,又分为线性插值函数和高次插值函数等。在求解自由表面问题时,由于自由表面的变化会导致整个网格系统的变形,从而影响计算精度。目前为克服网格发生大变形而采用的有效办法是对网格重新划分,但会严重影响计算效率,并且对翻转和破碎问题很难进行处理。

4. 有限体积法(FVM)

有限体积法(Finite Volume Method, FVM)的基本思路是将计算区域划分为一系列不重复的控制体积,使每个网格点周围有一个控制体积。将待解的微分方程对每一个控制体积积分,得出一组离散方程。由于离散方程要求因变量的积分守恒对任意一组控制体积都满足,所以对整个计算区域也自然能够满足。有一些离散方法,如有限差分法,仅当网格极其细密时,离散方程才满足积分守恒,而有限体积法在粗网格情况下,也会显示出准确的积分守恒性。与有限差分方法一样, FVM 在处理自由表面流动问题时,需要一套复杂的自由表面捕捉方法,而且捕捉方法的形式是影响自由表面的精确程度的主要因素。

以上方法在解决水波问题中有如下应用。Matsumoto 等采用基于二阶绕射理论的 WAMIT 软件和 CFD 软件 ComFLOW 对大型半潜式平台的波浪爬升和气隙问题进行对比研究。研究表明,当波陡较小时,线性理论的计算结果与实验结果可以较好地相吻合;当波陡较大时,二阶绕射理论和 CFD 的计算结果明显优于线性理论,但是与实验结果相比仍然偏小。此外, Lin 和 Li 采用有限差分方法结合大涡模型计算波浪和流共同作用下,方形柱状物体的波浪爬升问题。Mo, Jensen 和 Liu 用有限体积方法结合大涡模型,自由表面采用 VOF 方法捕捉,模拟了斜坡上孤立波在直立圆柱上的爬升问题。国内上海交通大学单铁兵也采用 ComFLOW 模拟单个圆柱、四个圆柱和半潜式平台的波浪爬升问题,并且与实验结果进行对比分析,得到一些重要的研究成果。另外 Cao 和 Wan 在 OpenFOAM 的基础上开发出新的 CFD 软件,对直立圆柱的波浪爬升问题进行了细致研究。虽然 CFD 方法在模拟圆柱的波浪爬升上体现出良好的适应性,但是在模拟破碎波问题上,自由表面的精细程度会受到自由表面处网格尺寸的限制,另外气液混合的交界面会随着自由表面复杂程度的增加而逐渐变得不清晰,还会因为对流项计算精度的影响而增加数值结果的耗散。因此,目前的 CFD 方法中,无论是 VOF 方法还是 LS 方法,对复杂自由表面破碎波问题的模拟仍是具有挑战性的研究课题。

1.2 发展无网格粒子方法的前景

1.2.1 无网格数值方法的基本应用

针对波浪的爬升、翻转、破碎现象,一类称为无网格的计算方法引起人们的广泛关注。与传统 CFD 方法相比,无网格法的求解不依赖网格,整个系统的计算建立在一群离散的点上,各个点可以自由运动,特别适合分析大变形和不连续的自由表面问题。近十年来,无网格方法在流体力学领域得到了快速发展,在船舶与海洋工程领域被广泛应用的无网格方法主要有光滑粒子流体动力学方法(SPH)、移动粒子半隐式方法(MPS)和无网格局部 Petrov - Galerkin 法(MLPG_R)等。其中,SPH 方法是最早出现而且应用最为广泛的一种无网格方法,这种方法最初在天体物理学领域中用来模拟三维无界空间中天体的演化。光滑粒子流体动力学纯粹以流体质点为研究对象,属于 Lagrange 方法。在 SPH 方法中研究的对象是流体微团,它是空间区域内若干流体质点的集合,能够表示自身区域内的一些物理参数,如位置、质量、密度、压强、动量和动能等。区域变量的计算可直接由周围粒子的相关信息积分得到,靠得越近的粒子对中心粒子的影响越大,但是超过影响域的粒子对中心粒子不产生影响。

Monaghan 首次将 SPH 方法应用于破碎波问题的研究,并对一系列考虑自由表面的水波问题进行了模拟,例如溃坝问题、气穴问题、造波问题,同时给出了破碎波问题的边界处理方法,以及压力与密度的显式关系。最近,SPH 基本算法也得到了快速发展,出现了考虑黏性项影响的 δ -SPH、基于黎曼解的 SPH、改进的完全不可压缩 SPH 等。这些 SPH 方法能够对压力不稳的问题进行改进,促进了 SPH 方法在海洋工程领域更加广泛的应用。例如,Rudman 等采用 SPH 方法模拟恶劣海况下 TLP 平台波浪爬升问题,Barreiro 等采用 SPH 方法模拟波浪对海岸建筑的拍击,Marrone 等采用 SPH 方法模拟三维的船首兴波问题,Valdez - Balderas 等采用并行的 SPH 方法模拟多个圆柱的波浪爬升问题。采用并行技术后,SPH 方法能够研究的问题更加复杂,更加贴近实际应用。目前国内也开展了很多关于无网格方法的研究工作,例如 Chen 等采用两相流的 SPH 方法对 Rayleigh - Taylor 不稳定性问题和溃坝问题进行了模拟,Yang 等采用改进张力不稳定性 SPH 方法对黏性液滴变化过程进行了模拟,Zhang 等采用 MPS 方法对液舱晃荡问题进行了模拟,Gong 等采用改进的 SPH 方法对楔形体入水碰击问题进行了模拟,Ren 等采用弱可压缩性的 SPH 方法对波浪中浮体运动问题进行了模拟,Ren 等采用改进的 SPH 方法对波浪与孔隙结构防波堤的相互作用问题进行了模拟,Liu 等采用不可压缩的 SPH 方法对波浪与不同类型防波堤的相互作用进行了模拟,Zheng 等采用改进的 SPH 方法模拟水槽中的造波问题。

1.2.2 数值计算条件的极大改善

由于粒子方法存在粒子的邻域搜索和复杂的核近似过程,使得粒子方法的计算效率较传统的数值方法低一些,所以这也是阻碍粒子方法快速发展的一个关键性问题。幸运的是,计算机技术的快速发展,特别是多核向众核的发展中,在不大幅提高 CPU 计算频率的情

况下,通过大规模的并行计算技术能够极大地提高计算效率。目前并行技术主要包括如下两种类型。

1. CPU 多核技术的提高

并行计算是指同时使用多种计算资源解决计算问题的过程,是提高计算机系统计算速度和处理能力的一种有效手段。它的基本思想是用多个处理器来协同求解同一问题,即将被求解的问题分解成若干个部分,各部分均由一个独立的处理机来计算。并行计算系统既可以是专门设计的、含有多个处理器的超级计算机,也可以是以某种方式互连的若干台独立计算机构成的集群。通过并行计算集群完成数据的处理,再将处理的结果返回给用户。并行计算机是通过网络将各个处理机或处理器连接起来的,一般来说有以下两种方式:处理单元间有着固定连接的一类网络,在程序执行期间,这种点到点的链接保持不变;典型的静态网络有一维线性阵列、二维网孔、树连接、超立方网络、立方环、洗牌交换网、蝶形网络等。其实,计算机最早就是从超级计算开始的,无论是第一台机械计算机,还是第一台电子计算机 Eniac,都是做科学计算和军事用途的。

早期,超级计算机都是昂贵的高级产品,处理器是专门设计的,芯片组是配套的,甚至每根连接线都是定制的,成本极高。随着 PC 和网络的发展,人们发现追求强大的计算能力可以不那么昂贵。于是,人们开始尝试用大批量生产的 PC 或者工作站来攒超级计算机。若干台 PC 或者工作站通过网络连接起来,把任务分给这些机器并行,然后返回,其计算能力丝毫不弱于昂贵的专用超级计算机,于是传统的超级计算机开始没落。

这个时代出现了很多平民化的超级计算机,譬如用浩鑫 HTPC 准系统凑起来的超级计算机,把一个学校的 MAC 电脑凑起来的超级计算机等,这些看似玩具的东西一度占据了 TOP500 超级计算机排行榜,甚至谷歌自己用的服务器也是用这种办法攒出来的。在这个过程中,人们发现,限制超级计算机能力的是功耗,人们不能堆积太多的处理器是因为功率和发热限制,性能功耗比甚至比性能本身更重要。于是,IBM 开发出蓝色基因,不追求单个核心的高性能,而是降低功耗,攒更多数量的处理器来提升性能。但由于单独开发这种处理器在批量和成本上无法与通用的 PC 处理器相比,因此并没有推行。亿亿级超级计算机的能耗成为研究人员关注的焦点,IBM 公司深度计算部门的副总裁戴夫·特瑞克在超级计算机大会上表示,Jaguar 超级计算机耗能 7 MW。一台只配置中央处理器处理核心的亿亿级超级计算机耗能约 20 GW,这相当于一个中等规模的原子能核工厂的耗能,因此降低能耗是研究人员考虑的要点。

目前,美国军方授权研制新一代超级计算机的厂商也需要研制出一种全新的节能芯片,以减少超级计算机的能耗,此外,也有公司考虑使用将加速器与中央处理器相结合的混合方式来达到降低能耗的目的。使用加速器是实现亿亿级计算机可行性战略的关键所在,应用软件可以利用加速器来首先迈过亿亿级计算的门槛。另外,亿亿级超级计算机系统的核心处理器数量为 1 000 万~1 亿。运行这么多核心的系统可能会频繁出现故障,因此必须采取更加灵活有效的方式来重新设计解决这些问题的应用工具。美国军方正在着力研发全新的计算架构和编程模式,以解决传统计算架构遭遇的能源使用问题和计算扩展限制问题。新超级计算机系统比现有系统能效高 100~1 000 倍,而且性能更高,相应的软件编程也比现有的超级计算机系统更容易实现。有研究人员提出,让超级计算机的设计尽可能简单是关键,目前的很多超级计算机设计都很简单,如 IBM 公司的“红杉”超级计算机的大小只有一个上网本的一半,而且没有暴露在外面的电线。

2. GPU 的快速发展

图形处理器(Graphics Processing Unit, GPU)是显卡的“大脑”, GPU 决定了该显卡的档次和大部分性能,同时 GPU 也是 2D 显卡和 3D 显卡的区别依据。2D 显示芯片在处理 3D 图像与特效时主要依赖 CPU 的处理能力,称为软加速。3D 显示芯片是把三维图像和特效处理功能集中在显示芯片内,也就是“硬件加速”功能。显示芯片一般是显卡上最大的芯片(也是引脚最多的)。时下市场上的显卡大多采用 NVIDIA 和 AMD-ATI 两家公司的图形处理芯片。

现在, GPU 不再局限于 3D 图形处理, GPU 通用计算技术的发展引起业界广泛的关注, 事实证明在浮点运算、并行计算等计算方面, GPU 可以提供的性能是 CPU 的几十甚至上百倍, 如此强悍的“新星”难免会让 CPU 厂商老大英特尔为未来而紧张, NVIDIA 和英特尔经常为 CPU 和 GPU 谁更重要而展开口水战。GPU 通用计算方面的标准目前有 Open CL, CUDA, ATI STREAM。其中, 开放运算语言(Open Computing Language, Open CL)是第一个以面向异构系统通用为目的的并行编程的开放式、免费标准, 也是一个统一的编程环境, 便于软件开发人员为高性能计算服务器、桌面计算系统和手持设备编写高效轻便的代码, 广泛适用于多核心处理器(CPU)、图形处理器(GPU)、Cell 类型架构以及数字信号处理器(DSP)等并行处理器, 在游戏、娱乐、科研、医疗等领域有广阔的发展前景, AMD-ATI, NVIDIA 时下的产品都支持 Open CL。

对于国内用户来说, 实现个人桌面超级运算不再是梦想。方正科技推出的旗舰机型美仑 3400 2800, 提供强大的图形处理与高性能计算解决方案, 采用英特尔“至强”处理器, 搭载 NVIDIA Tesla GPU, 实现高性能的 GPU 超级运算, 从而将工作站变身为桌面型超级计算机, 满足了专业用户的高性能计算需求。对于国内用户来说, GPU 并不陌生, 但可能对于 GPU 计算这一新兴运算方式还不熟悉。简单来说, GPU 计算即使用 GPU 来执行通用科学与工程计算。目前的 CPU 一般只集成了 4 个内核, 而 GPU 已经拥有数以百计的内核, 在高密度并行计算方面 GPU 拥有得天独厚的优势。方正科技推出的高性能计算工作站, 使用 CPU + GPU 的异构计算模型, 应用程序的顺序部分在 CPU 上运行, 而计算密集型部分则由 GPU 来分担。这样, 系统计算能力得到淋漓尽致的发挥, 应用程序的运行速度能够提升 1~2 个数量级。

这些计算机硬件的飞速发展, 为无网格方法的应用提供了理想的计算环境, 使得计算效率不再是影响数值方法快速发展的瓶颈。

1.3 一些改进的无网格方法简介

除了计算机硬件性能的不断提高, 无网格 SPH 方法本身也得到了很大的改进, 从弱可压缩 SPH 方法, 发展到完全不可压缩 SPH 方法、黎曼解 SPH 方法和 δ -SPH 方法。接下来就对这些 SPH 方法进行简单介绍, 细节方面在后面的章节中进行详细介绍。

1.3.1 弱可压缩 SPH 方法

压力求解方法的改进主要是将具有弱可压缩性的压力求解方法变成更加烦琐的完全不可压缩求解方法。传统 SPH 方法对流场的压力和密度可显式求解, 即

$$p = B \left[\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^\gamma - 1 \right] \quad \text{或} \quad p = c_0^2 (\rho - \rho_0) \quad (1-1)$$

其中, $B = \frac{c_0^2 \rho}{\gamma}$; ρ_0 为初始密度; γ 为与流体类型有关的常数, 当流体为水时 $\gamma = 7$, 当流体为空气时 $\gamma = 1.4$; c_0 为液体中传播的声速, 但是当 c_0 取实际声速时, 所需的时间步长会非常小而无法实现计算。传统的 SPH 方法假设流体的可压缩性约为 1%, 此时 $c_0 = 10v_{\max}$, $v_{\max}$ 为流场中流体的最大速度幅值。由于该方法计算的压力 p 与密度 ρ 的关系密切, ρ 计算产生的误差会被放大并传递到压力 p 上, 使计算得到的压力值存在很多干扰信号, 给整个系统计算结果的精度和稳定性造成影响。

1.3.2 完全不可压缩 SPH 方法

针对传统 SPH 方法显式压力计算方法的缺点, Cummins 和 Rudman 首先提出不可压缩的 SPH 压力计算方法。Shao 采用这种不可压缩 SPH 方法对波浪爬升问题进行了模拟。不可压缩 SPH 方法的核心内容是采用压力的预测校正方法代替显式的压力计算方法。这种压力的预测校正两步法在传统网格方法中已经普遍被采用。下面对两步法的计算过程进行简单介绍。

第一步, 计算在 $t = n$ 时, 速度预测量 $\mathbf{u}^*$

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u}^n + [\nabla \cdot (\nu_E \nabla \mathbf{u}^n) + \mathbf{F}] \Delta t \quad (1-2)$$

其中, $\nabla \cdot (\nu_E \nabla \mathbf{u}^n)$ 和 $\mathbf{F}$ 分别表示黏性项和重力项。

第二步, 对预测速度进行修正

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^*}{\Delta t} = -\frac{1}{\rho} \nabla p^{n+1} \quad (1-3)$$

由不可压缩流体需满足的条件得到

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^{n+1} = 0 \quad (1-4)$$

对式(1-3)两边取散度得到

$$\nabla \cdot \frac{\mathbf{u}^{n+1} - \mathbf{u}^*}{\Delta t} = \nabla \cdot \left(-\frac{1}{\rho} \nabla p^{n+1} \right) \quad (1-5)$$

化简得到

$$\nabla^2 p^{n+1} = \frac{\rho}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^* \quad (1-6)$$

根据二阶导数的化简方法

$$\nabla \cdot (\nu_E \nabla \mathbf{u})_a \approx \sum_{b=1}^N m_b \left(\frac{\rho_a \nu_{E,a} + \rho_b \nu_{E,b}}{\rho_a \rho_b} \frac{\mathbf{r}_{ab} \cdot \nabla_a \mathbf{W}_{ab}}{r_{ab}^2 + \eta^2} \right) \mathbf{u}_{ab} \quad (1-7)$$

得到式(1-6)左端的离散格式为

$$\begin{aligned} \nabla^2 p^{n+1} &= \sum_{b=1}^N m_b \left(\frac{\rho_a + \rho_b}{\rho_a \rho_b} \frac{\mathbf{r}_{ab} \cdot \nabla_a \mathbf{W}_{ab}}{r_{ab}^2 + \eta^2} \right) p_{ab} \\ &= p_a \sum_{b=1}^N m_b \frac{\rho_a + \rho_b}{\rho_a \rho_b} \frac{\mathbf{r}_{ab} \cdot \nabla_a \mathbf{W}_{ab}}{r_{ab}^2 + \eta^2} - \sum_{b=1}^N m_b \frac{\rho_a + \rho_b}{\rho_a \rho_b} \frac{\mathbf{r}_{ab} \cdot \nabla_a \mathbf{W}_{ab}}{r_{ab}^2 + \eta^2} p_b \end{aligned} \quad (1-8)$$

式(1-6)右端的离散格式为

$$\frac{\rho}{\Delta t} \nabla \cdot \mathbf{u}^* = \frac{\rho_a}{\Delta t} \sum_{b=1}^N \frac{m_b}{\rho_b} (\mathbf{u}_b^* - \mathbf{u}_a^*) \cdot \nabla_a \mathbf{W}_{ab} \quad (1-9)$$

考虑到不可压缩性,可得 $\rho_a = \rho_b = \rho$ 。将式(1-8)和式(1-9)代入式(1-6)可以得到整个粒子系统关于压力 p 的矩阵

$$\begin{bmatrix} \sum_{b=1}^{N_1} m_b \frac{2}{\rho} \frac{\mathbf{r}_{1b} \cdot \nabla W_{1b}}{r_{1b}^2 + \eta^2} & -m_2 \frac{2}{\rho} \frac{\mathbf{r}_{12} \cdot \nabla W_{1b}}{r_{12}^2 + \eta^2} & -m_3 \frac{2}{\rho} \frac{\mathbf{r}_{13} \cdot \nabla W_{1b}}{r_{13}^2 + \eta^2} & \cdots & 0 \\ -m_1 \frac{2}{\rho} \frac{\mathbf{r}_{21} \cdot \nabla W_{21}}{r_{21}^2 + \eta^2} & \sum_{b=1}^{N_2} m_b \frac{2}{\rho} \frac{\mathbf{r}_{2b} \cdot \nabla W_{2b}}{r_{2b}^2 + \eta^2} & -m_3 \frac{2}{\rho} \frac{\mathbf{r}_{23} \cdot \nabla W_{23}}{r_{23}^2 + \eta^2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & -m_{n-2} \frac{2}{\rho} \frac{\mathbf{r}_{n(n-2)} \cdot \nabla W_{n(n-2)}}{r_{n(n-2)}^2 + \eta^2} & -m_{n-1} \frac{2}{\rho} \frac{\mathbf{r}_{n(n-1)} \cdot \nabla W_{n(n-1)}}{r_{n(n-1)}^2 + \eta^2} & \cdots & \sum_{b=1}^{N_n} m_b \frac{2}{\rho} \frac{\mathbf{r}_{nb} \cdot \nabla W_{nb}}{r_{nb}^2 + \eta^2} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} P_1 \\ P_2 \\ \vdots \\ P_n \end{bmatrix} = \frac{1}{\Delta t} \begin{bmatrix} \sum_{b=1}^{N_1} m_b (\mathbf{u}_b^* - \mathbf{u}_1^*) \cdot \nabla W_{1b} \\ \sum_{b=1}^{N_2} m_b (\mathbf{u}_b^* - \mathbf{u}_2^*) \cdot \nabla W_{2b} \\ \vdots \\ \sum_{b=1}^{N_n} m_b (\mathbf{u}_b^* - \mathbf{u}_n^*) \cdot \nabla W_{nb} \end{bmatrix} \quad (1-10)$$

得到 $t = n + 1$ 时刻各点压力 p 后,再根据式(1-3)求得整个流场的速度分布。通过计算结果比较,不可压缩 SPH 方法的计算精度有所改进,内部点的压力振动可以得到一定程度的控制,但是该方法需要求解整个粒子系统的压力矩阵,当进行较大规模计算时效率会明显降低,而且该方法需要对自由表面粒子进行搜索和定义,在进行复杂自由表面计算时,结果稳定性不高,边界附近粒子处理需要一些数值技巧。

1.3.3 黎曼解 SPH 方法

1. Riemann - SPH 发展概况

在 20 世纪 90 年代,基于黎曼解的可压缩气体动力学方程在模拟超声速气体流动问题方面取得了显著成绩。研究人员利用基于黎曼解的欧拉方程成功对冲击管问题、爆炸波问题进行了精确模拟。将 SPH 方法与黎曼解相结合能极大地提高 SPH 方法的生命力。为了进一步拓展基于黎曼解的 SPH 计算方法在求解连续介质动力学问题中的应用,研究人员对其进行了大量研究。

SPH 对复杂物理问题具有良好的适应性,虽然其对多数的流体问题不能得出精确的黎曼解,但是其拉格朗日特性及其在求解 Roberts 问题时表现出的良好稳定性证明了 SPH 方法在求解强非线性流体问题时拥有巨大优势。Monaghan 通过对 SPH 方法和黎曼解的分析,侧重于扩散修正项,将其与黎曼解相结合,用一种特殊的能量方程代替传统 SPH 方法控制方程中的内能方程,并将其运用于对爆炸波等问题的求解,验证了该控制方程的优异性能。Inutsuka 结合研究人员的成果,基于黎曼解对 SPH 控制方程进行重构,运用重构后的控制方程对气体的剧烈冲击问题进行了模拟,并研究了可变光滑长度对数值模拟结果的影响,得到了较好的数值结果。Molteni 和 Antuono 等结合黎曼解的思想对能量方程和连续性方程进行重构,并采用二阶的状态方程对二维及三维溃坝问题进行了研究,得到了良好的计算结果。下面将对 Monaghan 等结合黎曼解的 SPH 控制方程及其推导过程进行介绍。

2. Riemann - SPH 控制方程

对于无黏、弱可压缩流体,其控制方程可写成

$$\begin{cases} \frac{D\rho}{Dt} = -\rho \nabla \cdot \mathbf{u} \\ \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\frac{\nabla p}{\rho} + \mathbf{f} \\ p = F(\rho, e) \\ \frac{De}{Dt} = -\frac{p}{\rho} \nabla \cdot \mathbf{u} \end{cases} \quad (1-11)$$

其中, ρ 为流体密度; $\mathbf{u}$ 为流场速度; p 为压力; $\mathbf{f}$ 为作用在流体上的外力; e 为内能。由上式中的连续性方程和能量方程可以看出 $e = e(\rho)$, 因此, 方程的第三式可写成 $p = F(\rho)$ 形式, 可见, 压力只和密度相关, 流体为正压流体。由于在自由表面处压力保持不变, 因此在自由表面处的密度为常量, 同时可知自由表面为一条无熵曲线。在之后的论述中称之为 ρ_0 和 e_0 。

在 SPH 方法中, 利用核近似, 可以通过支持域内核函数来近似求得场函数及其偏导数值。

$$\langle f \rangle(\mathbf{r}) = \int_{\Omega} f(\mathbf{r}^*) W(\mathbf{r} - \mathbf{r}^*, h) dV^* \quad (1-12)$$

$$\langle \nabla f \rangle(\mathbf{r}) = \int_{\Omega} f(\mathbf{r}^*) \nabla W(\mathbf{r} - \mathbf{r}^*, h) dV^* + \int_{\partial\Omega} f(\mathbf{r}^*) \mathbf{n}^* W(\mathbf{r} - \mathbf{r}^*, h) dV^* \quad (1-13)$$

其中, $W(\mathbf{r} - \mathbf{r}^*, h)$ 为核函数值; $\partial\Omega$ 为 Ω 的表面; $\mathbf{n}^*$ 为垂直于支持域表面的垂直法向量。再进行粒子近似, 于是方程(1-11)可离散成

$$\begin{cases} \frac{D\rho_i}{Dt} = -\rho_i \sum_j (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i) \cdot \nabla_i W(\mathbf{r}_{ij}) dV_j \\ \frac{D\mathbf{u}_i}{Dt} = -\frac{1}{\rho_i} \sum_j (p_i + p_j) \cdot \nabla_i W(\mathbf{r}_{ij}) dV_j + \mathbf{f}_i \\ p_i = c_0^2(\rho_i - \rho_0) \\ \frac{De_i}{Dt} = -\frac{p_i}{\rho_i} \sum_j (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i) \cdot \nabla_i W(\mathbf{r}_{ij}) dV_j \\ \frac{D\mathbf{r}_i}{Dt} = \mathbf{u}_i \end{cases} \quad (1-14)$$

式(1-14)即为离散形式的传统 SPH 方法控制方程, 其中, 下标 i, j 为粒子编号, j 粒子为 i 粒子支持域内的邻近粒子。对黎曼解的 SPH 方法, 这里介绍三种方法。

(1) Monaghan 控制方程

为进一步提高 SPH 方法在求解非连续问题的计算精度, 以及在控制方程中存在数值耗散情况下, 使系统更好地满足能量守恒, Monaghan 通过对 SPH 方法扩散修正项进行研究, 将其与黎曼解相结合, 改进了 SPH 动量方程, 并提出了一种特殊的能量方程来取代传统的内能方程。下面将对其方法进行简要介绍。

若考虑黏性项, 对于传统 SPH 方法, i 粒子点的动量方程、能量方程及连续性方程可表示为

$$\frac{D\mathbf{u}_i}{Dt} = \sum_j m_j \left(\frac{p_i}{\rho_i^2} + \frac{p_j}{\rho_j^2} + \Pi_{ij} \right) \cdot \nabla_i W(\mathbf{r}_{ij}) + \mathbf{f}_i \quad (1-15)$$

$$\frac{De_i}{Dt} = -\frac{p_i}{\rho_i^2} \sum_j m_j (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i) \cdot \nabla_i W(\mathbf{r}_{ij}) - \frac{1}{2} \sum_j m_j \Pi_{ij} (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i) \cdot \nabla_i W(\mathbf{r}_{ij}) \quad (1-16)$$

$$\frac{D\rho_i}{Dt} = - \sum_j m_j (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i) \cdot \nabla_i W(\mathbf{r}_{ij}) \quad (1-17)$$

其中, Π_{ij} 为由于黏性作用产生的剪切和扩张项。Monaghan 将其定义为

$$\Pi_{ij} = \begin{cases} -\alpha \frac{h\mathbf{u}_{ij} \cdot \mathbf{r}_{ij}}{\bar{\rho}_{ij} |\mathbf{r}_{ij}|^2} \left(\bar{c}_{ij} - 2 \frac{h\mathbf{u}_{ij} \cdot \mathbf{r}_{ij}}{|\mathbf{r}_{ij}|^2} \right), & \mathbf{u}_{ij} \cdot \mathbf{r}_{ij} < 0 \\ 0, & \mathbf{u}_{ij} \cdot \mathbf{r}_{ij} \geq 0 \end{cases} \quad (1-18)$$

式中, c 为声速; $\bar{c}_{ij} = (c_i + c_j)/2$; $\bar{\rho}_{ij} = (\rho_i + \rho_j)/2$; α 为常量, 其大小的选取随实际情况变化而改变, 一般为 $0 \sim 1.0$ 。从式(1-15)和式(1-16)可以看出, 系统的总能量是守恒的, 即

$$E = \sum_i m_i \left(\frac{1}{2} \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_i + e_i \right) \quad (1-19)$$

为了使 SPH 方程看起来更适合应用于黎曼问题, 我们用单位质量的能量方程代替传统的内能方程。定义符号 $\hat{e}$ 为单位质量的能量

$$\hat{e} = \frac{1}{2} u^2 + e \quad (1-20)$$

在无黏性耗散时有

$$\frac{D\hat{e}}{Dt} = - \frac{1}{\rho} \nabla \cdot p\mathbf{u} \quad (1-21)$$

若加入黏性耗散, 则

$$\frac{D\hat{e}}{Dt} = - \sum_j m_j \left(\frac{p_i \mathbf{u}_j}{\rho_i^2} + \frac{p_j \mathbf{u}_i}{\rho_j^2} + \Omega_{ij} \right) \cdot \nabla_i W(\mathbf{r}_{ij}) \quad (1-22)$$

式中, Ω_{ij} 为耗散项, 类似于 Π_{ij} , 同样满足一个粒子对中 i 粒子和 j 粒子的对称性。于是系统总能量的表达式变为

$$E = \sum_i m_i \hat{e}_i \quad (1-23)$$

显然, 我们对连续性方程没有进行任何修正, 只是对动量方程和能量进行了讨论, 下面将结合黎曼解对 Π_{ij} 和 Ω_{ij} 的形式进行研究。

结合 Marti 等所用方法, 从最简单的欧拉方程出发:

$$\frac{\partial s}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} = 0 \quad (1-24)$$

一个最简单的数值求解方法为

$$s_j^{n+1} = s_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\tilde{f}(s_j, s_{j-1}) - \tilde{f}(s_{j-1}, s_j)) \quad (1-25)$$

Marti 定义数值通量为

$$\tilde{f}(s_L, s_R) = \frac{1}{2} (f_L + f_R - \sum_{i=1}^3 |\tilde{\lambda}_i| \Delta \tilde{\omega} e_i) \quad (1-26)$$

式中, 下标 L 和 R 分别代表黎曼问题交界处左右两端; λ_i, e_i 分别为雅克比矩阵 A 的特征值和特征向量。

$$A = \frac{\partial f(s)}{\partial s} \quad (1-27)$$

式(1-26)中, $\tilde{\lambda}_i$ 表示特征值从左至右的平均值, 而 $\Delta \omega$ 表示变量在交界处的阶跃大小, 可定义为