

光滑粒子动力学核心算法与软件开发中的关键问题

刘谋斌, 邵家儒

(中国科学院力学研究所, 北京 100190)

摘要: 针对光滑粒子动力学(Smoothed Particle Hydrodynamics, SPH)软件开发中诸多关键性问题未得到解决、开发进程相对滞后的问题,从SPH的精度、粒子近似离散格式、粒子分布和大小、变形的自适应、时间积分步长的自适应及边界算法和耦合算法等方面,分析核心算法以及SPH软件开发中的关键问题,如高性能计算与SPH方法的并行实现、前处理与粒子生成、后处理与可视化等。根据不同问题提出几种可行的解决方案,为SPH软件开发提供参考。

关键词: 光滑粒子动力学; 核心算法; 软件开发

中图分类号: TB115.7 文献标志码: A

Core algorithms and key software development issues of smoothed particle hydrodynamics

LIU Moubin, SHAO Jiaru

(Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

Abstract: As the software development of Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) is relatively backwards due to many unresolved key issues, some key numerical aspects of SPH including accuracy, approximate discretization scheme of particle, particle distribution and size, adaptation of deformation, adaptation of time step, boundary algorithm and coupling algorithm are discussed. The core algorithm and some key issues in SPH software development are also analyzed, which include high performance computation and parallel implementation, pre-processing and particle generation, post-processing and visualization, and so on. Several feasible solution are proposed for different problems to provide some references for the SPH software development.

Key words: smoothed particle hydrodynamics; core algorithm; software development

0 引言

光滑粒子动力学(Smoothed Particle Hydrodynamics, SPH)^[1-2]方法是拉格朗日型无网格粒子方法。与传统的基于网格的数值方法(如有限元法、有限差分法和有限体积法等)不同,SPH用粒

子系统代表所模拟的连续介质(流体或固体),并且估算和近似控制介质运动的偏微分方程。各种宏观物理量(如密度、压力、速度和内能等)被定义在粒子中心,相关的物理量及其空间导数可通过邻近的、相互作用的粒子的物理量插值得到。SPH方法是纯粹的粒子方法,在计算过程中没有使用任何背景网

收稿日期: 2010-11-12 修回日期: 2010-12-17

基金项目: 国家自然科学基金(10942004)

作者简介: 刘谋斌(1970-)男,湖南洞口人,研究员,博士,研究方向为计算流体力学与工程应用,(E-mail)liumoubin@imech.ac.cn

格,避免网格畸变所引起的一些数值问题,可处理大变形问题。SPH 方法中粒子伴随介质的运动而以当地速度移动,不需要复杂的算法追踪或捕捉运动界面、移动边界等运动特征,特别适合处理具有自由表面、运动交界面的问题。由于 SPH 方法兼具欧拉方法和拉格朗日方法的优点,近年来已被成功应用到工程和科学的各个领域。SPH 方法的基本方法和应用参见文献 [3-4]。

随着 SPH 方法逐步走向成熟,越来越多的机构与研究人员开始研发与其相关的软件或求解器,用于数值仿真工程和科学中的各类问题。在 20 世纪 90 年代,美国能源部 Lawrence Livermore 与 Los Alamos 国家实验室的研究人员就开发出与 SPH 方法相关的软件,用于模拟武器的侵彻效能以及各种高速撞击效应(如空间碎片撞击飞行器和星体间的高速撞击等)。近年来,在美国能源部 SciDAC (Scientific Discovery through Advanced Computing) 计划的资助下,Idaho 与 Pacific Northwest 国家实验室的研究人员结合高性能计算技术开发粒子方法计算软件,用于模拟多尺度环境与地质流动问题,预计在环境工程(污水运输、核废料处理和生化流动等)与能源开采(CO₂ 封存,石油开采的水驱、气驱与化学驱以及油气水分离等)方面起到关键作用。^① 欧盟在 Marie-Curie 计划的支持下成立欧盟 SPH 创新联盟(European SPH Initiative),成员包括英国、法国和瑞士等 3 个国家的 5 所著名大学和研究机构,旨在结合学术界和工业界的力量,针对市场需求,发挥各方优势,开发与 SPH 相关的软件并将其商业化,用于模拟自由表面流动等工程中常见的问题。美国与欧盟的一些研究人员合作开发 SPH 的开源共享软件 SPHysics^②,已初步具备模拟海洋海岸工程领域自由表面流动的能力。一些商业软件(如 AutoDyn^③, LS-DYNA^④等)也开发了 SPH 求解器,引入部分 SPH 算法并针对 SPH 算法添加相应的前后处理模块,具备一定的 SPH 方法计算能力。

SPH 软件开发中涉及一系列重要问题,包括 SPH 核心算法及软件开发中的一些关键问题。本文对 SPH 方法的核心算法和软件开发中的关键问题进行分析 and 讨论。核心算法包括 SPH 方法的精度和粒子近似离散格式,粒子分布、大小及变形的自适应,时间积分步长的自适应,边界算法与耦合算法;

软件开发中的关键问题包括高性能计算与 SPH 方法并行和实现,前处理与粒子生成,以及后处理与可视化等 3 个方面。

1 SPH 核心算法

1.1 粒子近似离散格式

SPH 方法的精度由核近似和粒子近似的不同格式决定,并受到多种因素的影响。传统的 SPH 计算不能精确重构线性函数甚至常数。这也是导致传统 SPH 方法粒子近似格式精度偏低的根本原因。随着 SPH 方法的不断发展和完善,各种粒子近似的格式不断涌现,这些改进格式大多着眼于恢复传统 SPH 方法粒子近似的非连续性,从而改善其计算精度。一些改进方案涉及逐点重构新的光滑函数,从而使其满足粒子近似的连续性条件。这些新的光滑函数(或权函数)可能在局部区域为负,也可能不满足对称性条件。这些改进方案大多基于弱形式,一般用于各类固体力学问题。另一类改进格式在保留传统的光滑函数(非负、对称、单调递减)的前提下,改造近似方式,这类改进格式大多基于强形式,一般用于各类流体动力学问题。

仅就粒子近似离散格式的精度而言,部分改进方案已能保证 2 阶精度,而这些方案在提高 SPH 精度的同时往往降低算法灵活性和稳定性。一个典型的问题是,各种粒子近似离散格式改进方案往往涉及局部(逐点支持域内)矩阵的求解。作为一种无网格粒子方法,SPH 粒子的分布往往具有高度不规则性,可能导致矩阵奇异,从而中断计算。解决方案包括调整光滑长度或粒子分布,从而去除矩阵奇异性,也可退化到 1 阶精度的改进方案或传统的 SPH 方法,但在局部区域的部分点上不能保证 2 阶精度。

1.2 粒子自适应

在 SPH 方法中,粒子随物质的运动而移动,是种典型的拉格朗日方法。初始粒子大小相等(假设支持域为圆形),但位置规则。计算过程中流动区域各部分压力和应力的差异导致粒子速度的差异,并进一步导致粒子不规则分布,粒子密度也可能发生较大变化,导致粒子大小不一。另外,物质运动和变形的各向异性也导致粒子在空间各个方向变形不一。粒子分布的不规则性、大小与变形的不一致性都

① 参见 <http://www.Scidac.Gov/> 以及 <http://subsurface.Pnl.Gov/>。

② 参见 http://wiki.Manchester.Ac.Uk/SPHysics/index.Php/main_page。

③ 参见 <http://top-pdf.com/AutoDyn-users-manual.html>。

④ 参见 <http://www.osc.edu/supercomputing/software/docs/lldyna/theory.pdf>。

会影响 SPH 方法的计算精度,因此合适的自适应算法在 SPH 方法软件开发中非常重要。

1.2.1 粒子分布自适应

当粒子无规则分布时,在局部区域可能出现粒子堆集或者稀疏的情形,影响传统 SPH 方法的精度。一个典型的例子是,在 SPH 方法模拟溃坝过程中波前撞击固体障碍时的粒子飞散和稀疏分布,见图 1。如果能使用某种粒子分布自适应方案,在粒子大小变化不大(支持域变化不大),粒子支持域内邻近粒子数大于某个给定值(粒子堆集)或小于另一给定值(粒子稀疏)时,对该区域的粒子重新进行分布,就可保证计算的精度。LASTIWKA 等^[5]已注意到 SPH 方法中粒子分布自适应的必要性并提出初步的自适应方案,但目前还没有比较完善的粒子分布自适应方案。



图 1 在 SPH 方法模拟溃坝过程中波前撞击固体障碍时的粒子飞散和稀疏分布

Fig.1 Particle blowing away and sparse distribution when wave front impacting on the solid wall for a dam-breaking problem

1.2.2 粒子大小自适应

当粒子的密度变化较大时,粒子大小(所涉及的体积)也相应发生较大的变化。如果在 SPH 计算过程中使用恒定不变的光滑长度,得到的计算结果必然会产生误差。可根据各个粒子密度的变化情况改变粒子的光滑长度(变光滑长度),从而达到粒子大小的自适应。相关的变光滑长度算法在密度剧烈变化(如中高可压气体动力特性模拟、爆炸与冲击等)时尤其重要。

1.2.3 粒子变形自适应

在传统的 SPH 方法中,同一粒子在不同空间方向使用相同的光滑长度,每个粒子的支持域为圆形。如果粒子支持域在计算过程中保持圆形,这种各向同性的光滑函数在模拟大变形问题时能在整个区域中获得良好的计算结果,但不能在局部区域捕捉各向异性的材料变形。可考虑在不同的空间方向上使用不同的光滑长度,这样粒子的支持域就从圆形变为椭圆形。光滑长度随时间、空间、方向根据运动与变形自适应调整,从而精确模拟各向异性的变形。图 2 为弹体高速侵彻靶体过程中靶体穿透区域

的各向异性变形。^[6]椭圆(粒子支持域)的大小表示变形的程度,椭圆的方向展现物质各向异性的变形。可知,在侵彻方向变形较大(椭圆长轴),而与侵彻方向垂直的方向变形较小(椭圆短轴)。

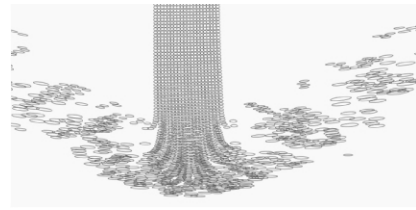


图 2 弹体高速侵彻靶体过程中靶体穿透区域各向异性变形

Fig.2 The anisotropic deformation in the penetrating region for a target penetrated by a high speed projectile

1.3 时间步长自适应

对于 SPH 运动方程的时间积分,可采用与其他显式流体力学方法时间积分格式类似的方法进行,如蛙跳法、预测校正法、龙格-库塔法以及 Verlet 法等。上述方法各有优缺点,在计算精度和计算时间上有所差异。因此,时间积分方法在 SPH 计算中也起着重要作用,可作为 SPH 计算软件的一个问题初始化选项供用户选择。在蛙跳法中,速度的计算点总是跨过位置的计算点进行计算,反之亦然,优点是占用的存储空间小,精度较好。预测校正法首先通过预测步进行粗略求解,然后通过校正步对求解进行修正,得到的精度比蛙跳法更高,但计算时间较蛙跳法长。龙格-库塔法能自动调整时间步长,并能减小估计误差,提高计算精度,但该方法调整后的时间步长往往大于由 CFL 条件估算的时间步长,需进行二次时间步长的估算,计算量大。Verlet 法是基于隐式欧拉法发展而来的一种数值积分方法,是目前数值积分计算中运行速度最快的方法之一,且该方法具有良好的稳定性。

在 SPH 计算过程中,时间步长直接影响到计算精度和计算时间,因此时间步长的自适应算法非常重要。根据 CFL 条件,在 SPH 计算过程中,时间步长与该时间步的最小光滑长度密切相关。可根据 SPH 方法的具体特点,考虑运动黏性、人工黏性以及外力的影响,结合 CFL 条件和经验参数,选用或导出相关的时间步长自适应公式。在具体计算中,可保守地取最小值作为时间步长,也可根据具体的问题选用合理的经验参数对时间步长进行自适应。

1.4 边界算法

在固壁边界处理方面,目前还没有公认较好的

通用方法. 已有的方法一般缺乏严格的精度分析, 并且很难兼顾计算的准确性、计算区域的复杂性以及计算过程中固壁边界和流动区域变化的灵活性. 一个比较合适的边界算法是使用 2 类虚粒子处理固定边界条件. 这样才能有效防止粒子穿透, 保证计算精度. 图 3 为流动区域、固体边界、流体实粒子以及 2 类虚粒子示意.

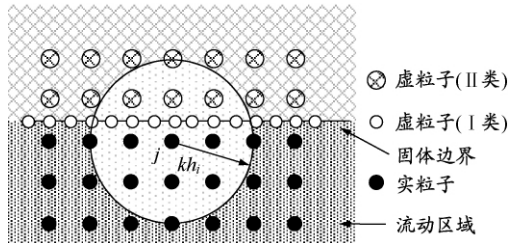


图 3 流动区域、固体边界、流体实粒子以及 2 类虚粒子示意

Fig. 3 Illustration of the flow region, solid boundary, fluid particles and two types of virtual particles

I 类虚粒子设置在固定边界上. 当流体实粒子趋近 I 类虚粒子时, I 类虚粒子对临近的实粒子施加一个排斥力, 以防止内部实粒子非物理性地穿透固体边界. 排斥力可采用不同的方式. II 类虚粒子分布在边界的固体区域内. 对于简单形状的固体壁面, II 类虚粒子通常由沿固体壁面对流体粒子进行反射或者镜面映射得到. 这些虚粒子的标量参数 (如密度) 一般设置为与对应的实粒子标量参数一致, 或者根据实粒子对应的参数进行位置加权计算得到 (如压力). 而虚粒子的矢量参数 (如速度) 如果设置为与对应的实粒子的矢量参数大小相同, 方向相反, 即可模拟无滑移边界条件. 鉴于 SPH 光滑函数具有紧支性, 只有距离固体边界 kh 内的实粒子需进行反射或映射, 从而构造对应的虚粒子, 因此 II 类虚粒子一般只有几层.

I 类虚粒子对流体粒子 i 施加排斥力从而防止流体粒子 i 穿透固体边界, 但这类虚粒子一般不参与流体粒子 i 的粒子近似过程; 而 II 类虚粒子参与流体粒子 i 的粒子近似过程, 弥补边界不足, 从而提高边界近似的精度. II 类虚粒子有不同的实现方式, 可以固定 (一旦生成, 位置不变, 只参与实粒子的近似过程), 也可自适应变动 (生成的虚粒子不但参与实粒子的粒子近似, 也随介质的运动而自适应移动并调整所涉及的物理参数). 一般自适应形式的边界虚粒子能得到更好的计算结果, 但往往需要复杂的算法和较长的计算时间, 对于复杂边界尤其如此. 对于这样的情形, 可能的方式之一是, 先在计算区域的规则格栅内放置指定粒子数密度 (number

density) 的粒子, 通过运行 SPH 计算使整个系统达到平衡状态, 然后冻结并标志固体边界区域内的粒子, 生成 II 类虚粒子. 图 4 为复杂流动区域 (多孔介质孔隙) 障碍区域 II 类虚粒子生成示意.

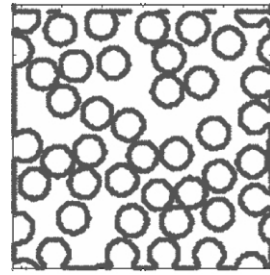


图 4 复杂流动区域 (多孔介质孔隙) 的障碍区域中 II 类虚粒子生成示意

Fig. 4 Generation of virtual particles II in obstacle region of complex flow regions (pore fractures of porous media)

1.5 耦合算法

目前, SPH 方法的应用范围日趋广泛. 重要的研究趋势之一是: 针对特定的问题耦合, SPH 方法与其他计算方法在不同的计算区域、不同的研究对象、不同的物理问题或不同的时空尺度使用不同的计算方法, 从而充分发挥各自的优点. 这些耦合算法包括与网格方法耦合、与离散元方法耦合、与其他粒子方法的耦合以及多物理场耦合等.

(1) 与网格方法耦合. SPH 与有限元法的耦合大多见于含能材料高速变形与失效领域, 在大变形区域应用 SPH, 而在小变形区域应用 FEM. SPH 与有限差分法 (Finite Difference Method, FDM) 和有限体积法 (Finite Volume Method, FVM) 等欧拉网格方法的结合在水动力学等领域有较好的前景, 主流区域应用 FDM 和 FVM, 涉及空化、碎波等复杂现象的局部区域应用 SPH. 另外, 也有改进的算法在背景网格上使用拉格朗日粒子, 通过粒子的运动追踪自由表面、运动界面或大变形等特征, 背景网格处理整体计算区域, 粒子与背景网格之间通过合适的方法进行数据交换. 背景网格可以固定 (欧拉网格), 也可以随物质运动 (拉格朗日网格).

(2) 与离散元方法耦合. 模拟流体流动与固体粒子的复杂相互作用, 如化学工程中颗粒的合成、环境工程中山体滑坡和泥石流等.

(3) 与其他粒子方法耦合. SPH 与分子动力学 (Molecular Dynamics, MD) 和耗散粒子动力学 (Dissipative Particle Dynamics, DPD) 具有共同的特点, 都是拉格朗日型粒子动力学方法.^[7] 能将 SPH, DPD 和 MD 桥联起来, 从微观 (MD) 到介观 (DPD)

乃至宏观 (SPH) 进行多尺度计算, 包括微纳米流动、小尺度环境与地质流动问题、生物与化学工程中的多尺度流动问题等。

(4) 多物理场耦合. 在 SPH 方法中引入电、磁、化学反应、相变等多种物理与化学过程, 开展微流体复杂流动现象的数值模拟。

2 SPH 软件开发中的关键问题

2.1 高性能计算与 SPH 方法并行实现

在光滑粒子动力学方法数值模拟过程中需计算粒子对间的相互作用, 与网格/单元数目相当的网格方法相比, SPH 方法计算时间较长. 如在串行 SPH 模型中, 使用数十万个粒子模拟一个简单的三维溃坝问题, 常需几天的计算时间. 如果在实际工程中粒子数目达到千万甚至数亿量级, 传统的基于串行算法的软件在内存和计算时间方面将受到极大限制. 因此, 如何有效提高计算能力和计算效率已成为包括 SPH 在内的粒子方法软件开发的重点, 而相应的高性能计算技术 (包括硬件和软件) 也逐渐成为计算工程科学 (computational engineering science) 的热点。

根据不同的架构, 高性能计算机大致可分为内存共享式系统 (shared memory system) 和分布式系统 (distributed memory system) 以及近期比较流行的 GPU (Graphic Processing Unit) 系统. 在 SPH 方法提出后, 已有许多不同的并行计算技术被用于提高 SPH 的计算性能, 使其运行在包括内存共享式和分布式的计算机系统中^[3], 而基于分布式系统应用 MPI (Message Passing Interface) 编写 SPH 并行代码已逐渐成为 SPH 计算机仿真效率提高的主要手段. 但在分布式并行系统中, 并程序的一个重要步骤是在多处理机中使用不同的方法均分计算资源或分解串行程序. 在 SPH 程序中, 可通过粒子的分解、所模拟问题域的分解以及功能模块的计算分解等实现串行程序的并行分解.^[3]

近年来, GPU 通用计算技术发展很快, 已不再局限于 3D 图像处理, 正向浮点运算及并行计算等方面延伸. GPU 可提供数十倍乃至上百倍于 CPU 的性能. GPU 的片段着色器可看作并行处理器, GPU 根据计算域的大小对线程进行初始化来运行计算内核 (GPU 片段着色器上运行的程序), 计算内核对输入缓存的数据进行分析运算, 最终将计算结果导入到输出缓存中. 应用 GPU 系统改编粒子方法计算软

件并进行高性能计算已有成功的案例: 中国科学院过程工程研究所建造的 Mole-9.7 在 GPU 上完成单精度千万亿次分子动力学模拟^[8]. 国内外也有在 GPU 系统上运行 SPH 程序的报道, 在计算效率方面取得不同程度的提高, 然而在 GPU 系统上实现粒子搜索算法、周期边界、虚实粒子耦合等算法方面还需进一步的工作。

SPH 程序高性能计算首先需要计算机系统具有良好的计算能力. 这方面我国高性能计算机发展快速, 目前“天河-1”已成为全球运行速度最快的超级计算机. “天河-1”超级计算机由 6 144 个 CPU 和 5 120 个 GPU 装在 103 个机柜上组成, 其实测运算速度可达 2 570 万亿次/s.^① 数万乃至几十万节点组成的高性能并行计算机速度从十万亿次、百万亿次到千万亿次, 甚至万万亿次规模, 为海量并行提供可能. CPU 加 GPU 且平衡共享信息与数据通信消耗, 从而实现高性能并行方案, 这是未来高性能计算机发展的趋势。

与高性能计算硬件飞速发展情况相反, 高性能计算管理软件的发展相对滞后, 应用软件的高性能并行技术开发和应用严重不足. 对于 SPH 等拉格朗日型粒子方法, 一般的节点信息传递技术未必合适. 如果针对问题域进行并行分解, 根据处理器的数目 (节点数目), 计算区域可被分成一定数量的子域, 每个处理器与一个子域关联, 并负责该子域的计算. 与网格方法的并行相比, SPH 方法的固有特点为并行实现及效率带来一系列挑战: 首先, 各大小相等的子域内 SPH 粒子数未必相等. 即使初始时刻粒子数相近, 随着计算的进行, 一方面在某些区域内可能出现粒子的堆集与飞散情况, 另一方面自由表面与边界的移动都可能导致各子域内粒子数产生差别. 如果某处理器负责的子域内粒子数量较多, 耗费的计算时间必然较长, 从而在整体上影响并行计算的时间. 其次, 任一子域内邻近边界的 SPH 粒子 (计算粒子) 都与相邻子域内的邻近粒子相互作用, 而相邻子域内邻近粒子的信息都必须传递到该计算粒子所在的处理器中. 另外, SPH 方法的拉格朗日性质决定了在不同的时间步各子域所包含的粒子序号可能不同, 相应地, 相邻子域内的邻近粒子也因此发生变化. 如何快捷、有效地更新各子域内的粒子信息以及传递相关的相邻子域内的邻近粒子信息, 对 SPH 并行计算整体效率有非常重要的影响. 仅靠增加处理器数目 (相应增加计算子域数目) 未必能减少各子

① 参见 <http://baike.baidu.com/view/2932264.htm>.

域内的粒子数,即未必能减少某些处理器耗费的计算时间.另一方面,各处理器间的通信耗费反而可能大幅提高,从而抵消处理器数量增加导致的计算时间减少,以致整体计算时间变化不大.SPH 等粒子方法并行计算的可扩展性(计算时间或效率随节点数变化的关系)是并行实现的一个关键,需要在 SPH 算法的各个方面结合高性能计算机通信及管理软件加以实现.

2.2 前处理与粒子生成

FVM 与有限元法等网格方法经过多年的发展已具备比较成熟的网格自动生成和再划分等计算前处理技术,出现一系列比较优秀的前处理软件,如 HyperMesh, GRIDGEN 及 ICEMCFD 等.但目前这些软件还不能用于构建粒子模型以适应 SPH 计算的需要,因此根据 SPH 方法的特点开发相应的前处理算法和软件是 SPH 软件开发中的一个关键问题.所开发前处理软件需能够实现一定的功能:(1)能对复杂的模型进行清理和优化,构建出能正确反映实体特性的简化模型;(2)自带粒子生成工具,可快速实现复杂模型的粒子填充;(3)能实时添加多种类型的载荷、定义材料及多种边界.另外,前处理软件应具有连接主流绘图软件及实体造型软件的无缝接口,这样可方便地建立模型并对模型作相应的优化处理.

网格生成和自适应的各种技术也能用于 SPH 方法中初始粒子的生成.因此,可先对计算域生成网格,然后将质量等参数集中在各网格/单元的中心/质心上,从而得到 SPH 粒子,见图 5 和 6.其中,四面体网格作为 SPH 初始粒子参与 SPH 计算所得到的粒子大小与分布可能不规则,对改进的 SPH 方法精度影响不大,对传统的 SPH 方法精度有一定影响.

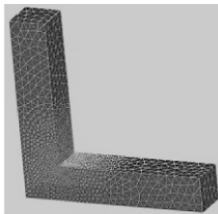


图 5 计算区域生成四面体网格

Fig. 5 Generation of tetrahedron mesh in the computational domain

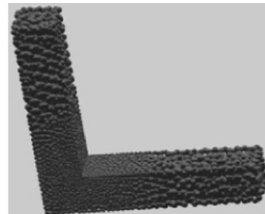


图 6 四面体网格的质心集中物性参数

Fig. 6 Mass centres material properties of tetrahedron mesh

可使用堆集模型 (packing model), 根据具体问题在计算域内堆集大小相等的粒子 (见图 7). 该模型适用于比较简单的计算区域, 如果计算区域比较

复杂, 在某些部分可能出现空缺. 另一种更简化的模型则是用规则 (大小相等紧密排列) 的正方体填充计算区域, 这种模型在计算区域内部产生的初始粒子都规则 (大小及位置) 分布, 但在边界区域会产生凸起或凹陷, 可通过增加正方体数量 (加密网格) 缓解, 见图 8.

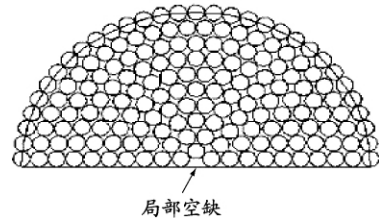


图 7 SPH 方法粒子初始化的堆集模型

Fig. 7 An accumulation model for the particle initialization of the SPH method

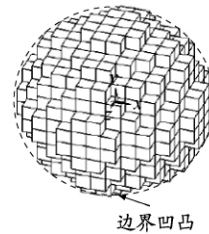


图 8 SPH 方法粒子初始化的正方体填充模型

Fig. 8 A filling-in model for the particle initialization of the SPH method

在 SPH 数值模拟过程中, 边界条件处理的好坏会对模拟结果产生直接影响. 软件中既要考虑到所有的常用边界模型, 又要为复杂边界条件的施加提供相应接口, 可让用户根据实际情况将其编制的边界程序直接应用于所开发的软件中, 二者的兼容性必须得到保证. 软件的材料库中必须包含尽可能多的材料模型 (如刚体、弹塑性体、炸药及各种牛顿或非牛顿流体等) 及材料特性 (如应力应变失效准则、状态方程等), 方便技术人员随时调用. 这些材料模型使用统一的格式进行数据库式管理, 允许用户添加、修改或删除数据库中的材料, 从而构建一个内容丰富、可控性强的智能材料库.

通过以上的处理可得到模型的一系列初始文件 (前端输入文件), 所得数据需利用数据库技术进行规则化处理, 并划分为分块组织的数据文件, 提高通信效率. 同时, 前端输出文件需能够转换为其他工程计算或图形处理所需的文件形式, 增强其通用性.

2.3 后处理与可视化

后处理要求能够用静态图形表征数值模拟中不同时间历程的粒子场变量 (如位置、速度、密度和压强等). 同时, 模拟过程中场变量的变化 (如模型变

形、压力场变形等)也需用动态方式进行描述.由于粒子法与网格法的本质不同,已成熟地应用于网格法的后处理模式并不能很好地对大量粒子进行处理,该缺点在等值线和云图的处理方面尤为突出.

已有学者应用三角型网格的思想绘制等值线:选取某相邻的3个粒子,用尽可能等边的三角形连接,以该三角形的每条边为基础向外扩展构造新的三角形,在向外扩展的过程中三角形不能中断、交叉,从而根据粒子的坐标建立一个完整的、不规则的三角形网.在三角形网的每条边上设置插值点,通过插值计算获得各个等值点并按照开或闭等值线的原则找到起始与终止点,从而连接成等值线.为能清晰地描述等值线的数值,应该在等值线上尽可能地寻找光滑的、有足够空间可进行标注的区域标注等值线的数值,并用合适的方法对等值线进行拟合.

根据不同需要可选择不同的粒子法云图处理方式.最简单的方式是根据粒子变量(如速度、压力和温度等)的大小,采用对应的颜色在粒子上进行填充,调整合适的粒子大小使粒子之间没有空隙,从而累加成云图.当粒子数足够多时,这种方法获得的压力场比较光滑,但如果粒子数少,用这种方法获得的云图就相当粗糙.另一种方法是基于上述等值线绘制的思想,根据需要绘制相应条数的等值线,用与场变量数值对应的颜色填充2条等值线间空间.由于等值线经过拟合,因而充分光滑,然而由于粒子法的特性,在粒子飞散的区域(如溃坝中水体与固壁碰撞后粒子变得杂乱无章)等值线很难绘制.因此,在未来的软件开发中应综合考虑这2种方法的优劣,在绘制过程中根据粒子分布划分为不同区域,在连续部分用等值线法进行填充,在粒子飞散区域用直

接填充颜色的方法,这样就可得到高质量的云图.当粒子数很多时,绘制图形的时间就会增加,为使图形显示流畅,可使用双缓冲区技术,同时也可根据实际需要舍弃其中的部分粒子,这样在显示图形的同时,内存中的另一张图已开始构建,从而提高效率.

3 结论

随着 SPH 方法逐步走向成熟,对其进行软件开发是未来的发展方向.本文对 SPH 方法的核心算法及其在软件开发中的关键技术进行分析和讨论.粒子近似的离散格式、粒子自适应、时间步长自适应、边界算法与耦合算法等核心算法一方面直接关系到 SPH 方法的精度和计算效率,另一方面影响 SPH 方法在不同领域的推广和应用.对相关核心算法的现状进行综合评述,分析和讨论各种核心算法的发展趋势、可行的解决方案及使用范围,在此基础上给出相应的建议以便开发设计后续计算软件.

与网格方法相比,SPH 等粒子方法需搜索邻近的粒子并计算其相互作用,所耗费的计算时间较长.因此,对于工程问题,高效、可扩展的 SPH 并行计算方案非常重要,需要在 SPH 算法的各个方面(粒子搜索算法、周期边界、固体边界和虚实粒子耦合等)结合高性能计算机通信及管理软件加以实现.另外,作为一种拉格朗日型无网格粒子方法,SPH 在前、后处理和可视化等方面都具有与网格方法不同的特点,一方面需满足 SPH 数值计算的要求,另一方面需做好软件与常用建模软件的无缝接口,能起到事半功倍的效果.最后,在 SPH 软件开发中,用户界面接口及软件的容错性也都是非常重要的课题,需特别关注.

参考文献:

- [1] GINGOLD R A, MONAGHAN J J. Smoothed particle hydrodynamics-theory and application to non-spherical stars[J]. Mon Not Royal Astron Soc, 1977, 181(11): 375-389.
- [2] LUCY L B. A numerical approach to the testing of the fission hypothesis[J]. Astron J, 1977, 82(12): 1013-1024.
- [3] LIU Guirong, LIU Moubin. Smoothed particle hydrodynamics: a meshfree particle method[M]. Singapore: World Sci Publishing Co., 2003.
- [4] LIU Moubin, LIU Guirong. Smoothed particle hydrodynamics (SPH): an overview and recent developments[J]. Arch Comput Methods Eng, 2010, 17(1): 25-76.
- [5] LASTIWKA M, QUINLAN N, BASA M. Adaptive particle distribution for smoothed particle hydrodynamics[J]. Int J Numer Methods Fluids, 2005, 47(10): 1403-1409.
- [6] LIU Moubin, LIU Guirong, LAM K Y. Adaptive smoothed particle hydrodynamics for high strain hydrodynamics with material strength[J]. Shock Waves, 2006, 15(1): 21-29.
- [7] HOOGERBRUGGE P J, KOELMAN J M V A. Simulating microscopic hydrodynamic phenomena with dissipative particle dynamics[J]. Europhysics Lett, 1992, 19(3): 155-160.
- [8] 多相复杂系统国家重点实验室多尺度离散模拟项目组. 基于 GPU 的多尺度离散模拟并行计算[M]. 北京: 科学出版社, 2009: 5.

(编辑 于杰)