

基于修正并行光滑粒子动力学方法三维变系数瞬态热传导问题的模拟

蒋涛 陈振超 任金莲 李刚

Simulation of three-dimensional transient heat conduction problem with variable coefficients based on the improved parallel smoothed particle hydrodynamics method

Jiang Tao Chen Zhen-Chao Ren Jin-Lian Li Gang

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), 66, 130201 (2017) DOI: 10.7498/aps.66.130201

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.130201>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2017/V66/I13>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

聚合物充模过程的基于高阶 Taylor 展开的改进光滑粒子动力学模拟

Simulation of polymer filling process by an improved smoothed particle hydrodynamics method based on higher-order Taylor expansion

物理学报.2016, 65(22): 220202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.220202>

强激光场中原子单电离的半经典方法

Semiclassical methods for strong field ionization of atoms

物理学报.2016, 65(22): 220203 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.220203>

美式回望期权定价问题的有限体积法

A finite volume method for pricing the American lookback option

物理学报.2015, 64(7): 070202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.070202>

弹性壳结构静力与动力分析的光滑粒子法

Static and dynamic analysis of elastic shell structures with smoothed particle method

物理学报.2013, 62(11): 110203 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.110203>

弹性力学的插值型重构核粒子法

Interpolating reproducing kernel particle method for elastic mechanics

物理学报.2012, 61(8): 080205 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.080205>

基于修正并行光滑粒子动力学方法三维变系数瞬态热传导问题的模拟*

蒋涛 陈振超 任金莲 李刚†

(扬州大学数学科学学院, 扬州 225002)

(2017年2月7日收到; 2017年4月10日收到修改稿)

为了解决传统光滑粒子动力学 (SPH) 方法求解三维变系数瞬态热传导方程时出现的精度低、稳定性差和计算效率低的问题, 本文首先基于 Taylor 展开思想拓展一阶对称 SPH 方法到三维热传导问题的模拟, 其次引入稳定化处理的迎风思想, 最后基于相邻粒子标记和 MPI 并行技术, 结合边界处理方法得到一种能够准确、高效地求解三维变系数瞬态热传导问题的修正并行 SPH 方法. 通过对带有 Dirichlet 和 Neumann 边界条件的常/变系数三维热传导方程进行模拟, 并与解析解进行对比, 对提出的方法的精度、收敛性及计算效率进行了分析; 随后, 运用提出的修正并行 SPH 方法对三维功能梯度材料中温度变化进行了模拟预测, 并与其他数值结果做对比, 准确地展现了功能梯度材料中温度变化过程.

关键词: 三维瞬态热传导, 光滑粒子动力学, 并行, 功能梯度材料

PACS: 02.60.-x, 02.70.-c, 44.10.+i

DOI: 10.7498/aps.66.130201

1 引言

三维变系数瞬态传热问题常见于均匀或非均匀材料^[1,2]的加工生产过程中, 其研究涉及复杂的结构形状、温度条件及变化的热传导率, 导致温度场的时间演化过程难以用解析手段精确地得到^[2-5]. 目前用于解决该问题的基于网格的数值方法有有限元法^[6]和有限差分法^[7]等, 然而在求解三维复杂区域问题时, 上述网格类方法的程序实现都较复杂. 近些年来, 无网格方法(或粒子方法)以其不依赖于网格的优势在传热问题的研究中得到了广泛应用, 如 lattice-Boltzmann^[8]方法和光滑粒子动力学(smoothed particle hydrodynamics, SPH)方法^[9]等. 但上述无网格方法对瞬态变系数热传导问题的研究还处于起步阶段, 对三维瞬态热传导问题的模拟在国际上尚不多见. SPH 方法是一种无网格纯粒子方法, 其在瞬态热传导问题上

的应用仍处于试探性研究阶段, 这与其在数值精度和稳定性方面的自身缺陷相关. SPH 方法的改进与瞬态传热问题的研究是国际上的两个热点领域^[10,11].

粒子方法模拟三维瞬态传热问题的主要优点在于: 易处理复杂区域、计算空间导数不依赖网格、易实现并行技术以提高计算效率等. 然而, SPH 方法在精度和稳定性方面的不足一直备受挑战. 针对此问题, 已经提出了一些改进方法^[12-17], 并被应用于瞬态热传导问题的研究, 但它们自身都存在一些缺陷(详见文献^[16, 17]), 使其推广应用存在诸多困难.

鉴于上述分析, 本文针对三维常系数或变系数瞬态热传导方程的特点, 为提高粒子方法模拟的精度及其稳定性, 首先将变系数瞬态热传导方程进行整理得到带有一阶导数(对流项)和二阶导数项(扩散项)的形式, 其次对有二阶导数的扩散项拓展应用文献^[17]中的一阶对称光滑粒子动力学(FO-

* 国土资源部公益性项目(批准号: 201411007-01)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: gli@yzu.edu.cn; rjl20081223@126.com

SSPH)方法进行离散处理,对一阶导数项采用兼有一阶对称修正SPH方法和稳定化“迎风”格式思想进行处理,随后运用基于MPI的并行技术来提高计算效率,提出了三维修正并行SPH(CPSPH-3D)方法.相对于传统SPH离散格式和已有改进SPH离散格式而言,CPSPH-3D离散格式具有较高精度和较好的数值稳定性,即本文提出的CPSPH-3D方法不仅具有已有改进SPH方法^[12-17]的优点,还改善了它们推广应用的一些缺陷.所有数值结果表明提出的CPSPH-3D方法能够准确、高效地求解带有混合边值条件的常或变系数三维瞬态热传导方程,并能成功地预测依赖时间变化边值条件下三维热传导问题中温度随时间变化的复杂趋势.

2 三维瞬态热传导问题

物质材料中传热现象常用瞬态热传导方程^[18]来描述,其三维坐标系下的控制方程为

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T) + f \quad (\text{in } \Omega), \quad (1)$$

其中, $T = T(x, y, z, t)$ 为温度, ρ 为材料密度(本文取1), $c = c(x, y, z)$ 为材料比热, $k = k(x, y, z)$ 为热传导率, $f = f(x, y, z, t)$ 为热源, Ω 为三维区域.值得注意的是当热传导率为与坐标轴相关的变系数时,方程(1)可化为

$$\rho c T_t = (k_x T_x + k_y T_y + k_z T_z) + k(T_{xx} + T_{yy} + T_{zz}) + f, \quad (2)$$

其中, $T_\beta \equiv \partial T / \partial \beta$ (β 可表为 t 或 x, y, z), $T_{\beta\beta} \equiv \partial^2 T / \partial \beta^2$. 方程(2)中出现了 T 关于坐标分量的二阶导数和一阶导数.

为封闭方程(1),施加初始条件 $T(x, y, z, 0) = T_0$ (in Ω), Dirichlet 边值条件 $T(x, y, z, t) = T_1, \partial \Gamma_D$, 和齐次 Neumann 边值条件 $\frac{\partial T(x, y, z, t)}{\partial \mathbf{n}} = 0, \partial \Gamma_N$, 其中 \mathbf{n} 为区域边界外单位法向量, $\partial \Gamma_D \cup \partial \Gamma_N = \partial \Omega$ 为区域边界.

3 三维修正并行SPH方法

针对三维变系数瞬态热传导问题的粒子方法模拟,直接拓展应用文献^[17]中提出的FO-SSPH方法时会出现数值振荡现象(见第4和5部分),这是因为本文考虑三维变系数瞬态热传导方程中占

有“对流”项(见(2)式),对模拟方法的稳定性和精度要求较高.为克服此问题,兼顾已提出的改进SPH方法^[17]有较高精度和有限差分迎风格式有较好稳定性的优点,同时为提高计算效率,本文针对三维变系数瞬态热传导问题的模拟提出CPSPH-3D方法.该方法的基本思想是:首先,将变系数瞬态热传导方程进行整理得到(3)式;其次,对于占有二阶导数“扩散”项,拓展应用文献^[17]中的改进SPH方法,对具有一阶导数的“对流”项,采用迎风稳定化的处理方式(比如(2)式中“ $k_x T_x$ ”系数“ k_x ”大于零时,运用改进SPH离散格式对“ i ”个粒子“ $(T_x)_i$ ”进行求解时形成的局部矩阵的需要支持域内所有相邻粒子“ j ”,之后为得到新时刻的“ $(T_x)_i$ ”只需位于“ i ”右端区域方向上的相邻粒子“ j ”对其进行粒子近似);最后,计算机模拟实现中采用基于MPI并行的C++程序来提高计算效率(详见下面3.1—3.3节).

本文模拟中,考虑(2)式中 $\rho = 1$ 的情况,于是(2)式变为

$$T_t = \underbrace{((k_x/c)T_x + (k_y/c)T_y + (k_z/c)T_z)}_{\text{“对流”项}} + \underbrace{(k/c)(T_{xx} + T_{yy} + T_{zz})}_{\text{“扩散”项}} + f/c, \quad (3)$$

其中,热传导与比热的比率为“ k/c ”.

通过数值模拟发现,当 k/c 比较小(如远小于1)时,方程本身具有较好的稳定性,直接推广文献^[17]中FO-SSPH方法到三维问题上可得到可靠数值结果(见第5部分);当 k/c 大于1时,随时间演化过程的模拟需要结合“对流”项稳定化的迎风格式处理思想才可得到较稳定可靠的数值结果(见第5部分).

3.1 CPSPH-3D 离散模型

传统SPH方法模拟应用中,先通过核函数进行积分插值^[19],其次在模拟域 Ω 中用有限个粒子表示并给每个粒子赋予密度、质量和温度等物理量,最后用粒子离散化方式近似表示核函数的积分形式.

模拟中,第 i 个粒子对物理量 T 及其一阶导数 ∇T 在空间位置 $\mathbf{x} = (x, y, z)$ 处的粒子近似为

$$(\nabla T)_i^\alpha = (\partial T / \partial x_i^\alpha)$$

$$= \sum_j (T_j - T_i) \frac{1}{pd_j} \nabla_i^\alpha W_{ij}, \quad (4)$$

其中, x_i^α 为第 i 个粒子在位置 \mathbf{x} 处的第 α 个分量; pd_j 为第 j 个粒子对应的密度数; $\nabla_i^\alpha W_{ij} = \partial W_{ij} / \partial x_i^\alpha = \partial W(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|, h) / \partial x_i^\alpha$; $W_{ij} = W(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|, h)$ 为核函数, 它一般满足正则化、对称性、紧致性和 Dirac 函数性质 [19]; h 为光滑长度, 本文一般取 $h \approx 1.1d_0$, d_0 为粒子初始间距. 本文取分段五次样条作为核函数 [19], 此时支持域半径为 $3h$.

依据 Taylor 展开思想和拓展文献 [17] 中的改进 SPH 方法, 可将 (4) 式修正为

$$(\nabla T)_i^\alpha = \sum_j^{n_j} (T_j - T_i) \frac{1}{pd_j} (\nabla_i^\alpha W_{ij})^C, \quad (5)$$

其中, n_j 为第 i 个粒子支持域内相邻粒子个数, 修正的核梯度 $(\nabla_i^\alpha W_{ij})^C$ 为

$$(\nabla_i W_{ij})^C = (\mathbf{A}^C)^{-1} \begin{pmatrix} (x_j - x_i)W_{ij} \\ (y_j - y_i)W_{ij} \\ (z_j - z_i)W_{ij} \end{pmatrix},$$

其中 \mathbf{A}^C 为对称矩阵,

$$\mathbf{A}^C = \sum_j \frac{W_{ij}}{pd_j} \begin{bmatrix} x_{ji}x_{ji} & y_{ji}x_{ji} & z_{ji}x_{ji} \\ x_{ji}y_{ji} & y_{ji}y_{ji} & z_{ji}y_{ji} \\ x_{ji}z_{ji} & y_{ji}z_{ji} & z_{ji}z_{ji} \end{bmatrix}_{3 \times 3},$$

$$x_{ji} = x_j - x_i, \quad y_{ji} = y_j - y_i, \quad z_{ji} = z_j - z_i.$$

格式 (5) 为文献 [17] 中一阶对称 SPH 离散格式直接推广而来, 其优点可参见该文献中的叙述.

对 (3) 式考虑一阶导数的迎风思想和上述修正格式 (5), 得到三维变系数瞬态热传导控制方程的 CPSPH-3D 离散格式为

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_i}{\partial t} &= (k_\alpha/c)_i \sum_j^{n_j(j>i)} \frac{1}{pd_j} (T_j^\alpha - T_i^\alpha) (\nabla_i^\alpha W_{ij})^C \\ &+ (k/c)_i \sum_j^{n_j} \frac{1}{pd_j} (q_j^\alpha - q_i^\alpha) (\nabla_i^\alpha W_{ij})^C \\ &+ (f/c)_i, \end{aligned} \quad (6)$$

其中 $(q)_i^\alpha = \sum_j^{n_j} (T_j - T_i) \frac{1}{pd_j} (\nabla_i^\alpha W_{ij})^C$, $n_j(j > i)$ 为第 i 个粒子支持域内右端位置相邻粒子个数 (“对流”项系数大于 1, 若小于 1 则 $n_j(j > i)$ 变为 n_j). 该离散格式在边界处满足函数梯度一阶相容性, 其在瞬态热传导问题模拟中的初边值条件处理可以根据方法特点进行有效处理 (详见 3.2 节).

为准确、高效地求解上述方程 (6), 时间积分格式采用具有较好稳定性和二阶精度的预估校正格式 (详见文献 [19]). 时间步长的选取对数值精度和稳定性有重要的影响, 在 SPH 方法的模拟中时间步长 dt 的选择通常需要满足下面的限制性条件 [12,14,19]:

$$dt \leq 0.1d_0^2/k. \quad (7)$$

本文提出的三维变系数瞬态热传导 CPSPH-3D 离散模型, 与文献 [17] 中离散模型有一定的区别, 且较 FO-SSPH 直接推广到三维的离散格式具有更好的稳定性. 由本文提出的修正 SPH 方法的构造过程可知, 它与 FO-SSPH 方法具有许多相似的优点, 因此提出的 CPSPH-3D 方法较其他改进的粒子方法的优点可参见文献 [17].

3.2 边界条件处理

在运用上述提出的离散格式对三维瞬态热传导问题进行模拟时, 初边值条件需要合适的处理. 对于初始条件和 Dirichlet 边值条件在模拟中可以准确的施加; 而对于齐次 Neumann 边值条件, 可以根据修正 SPH 方法求解一阶导数的离散方式 [17], 在利用相邻粒子近似表示一阶导数的循环语句最后, 使边界处粒子满足齐次 Neumann 边值条件. 除了上述初边值条件的处理, 对于边界粒子的质量或密度采用文献 [12] 中的处理手段. 本文在第 4 和第 5 部分通过模拟带混合边值条件的三维瞬态热传导问题 (见 4.2 节), 验证上述边界条件处理方式的有效性和可靠性.

3.3 粒子搜索并行技术

由文献 [19] 知, SPH 方法模拟应用中, 需要支持域内相邻粒子的确定, 为此会使得计算机模拟占有较大计算内存和 CPU 计算时间. 为提高相邻粒子搜索的计算效率, 文献 [19] 已经给出了一些粒子搜索技术, 其中基于背景网格的粒子搜索技术在流动问题模拟中具有广泛应用性.

在本文算例模拟中, 与自由表面流动问题的模拟不同的是粒子位置始终不变, 使其在粒子物理量信息更新前确定支持域内相邻粒子并进行标记. 为快速确定相邻粒子兼顾程序实施上简单易行, 本文未采用基于背景网格粒子标记方式, 而是考虑将所有粒子分配在多个 CPU 上同时进行相邻粒子搜索

且进行标记. 因此本文结合MPI并行技术对修正SPH方法进行编程实现, 主要体现在相邻粒子搜索标记和粒子物理量更新过程中采用多个CPU进行MPI并行计算以提高计算效率(见4.1节).

4 瞬态热传导问题 CPSPH-3D 模拟

本节通过几种不同情况下瞬态热传导问题的模拟, 对提出的修正并行SPH方法的精度、收敛性和计算效率的分析. 模拟中考虑了Dirichlet边值条件和Newmann边值条件^[1,2,18]情况下的三维瞬态常系数或变系数带源项热传导问题, 并通过与解析解做对比进一步体现了CPSPH-3D方法的准确性和高效性. 值得注意的是, 本节数值模拟中未能将修正并行SPH方法数值结果与传统并行SPH并行结果做对比. 根据文献^[10, 19]分析知, 传统SPH方法在三维区域情况下边界附近会出现比较严重的粒子缺陷问题, 从而导致数值模拟中在较短时间里会出现数值振荡问题. 在本节算例模拟中运用传统SPH方法时, 运行到约 $t = 0.01$ 时刻, 在区域部分位置就出现了较严重的数值伪振荡现象, 以致再继续运算的结果是不可接受的, 所以后续模拟中未展示传统SPH方法的数值结果. 另外, 为模拟结果分析的需要, 定义2-范数误差为

$$E_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^N (T_{n,i} - T_{a,i})^2} / \sqrt{\sum_{i=1}^N T_{a,i}^2}$$

其中 N 为三维区域上布置的总粒子数, $T_{n,i}$, $T_{a,i}$ 分别为第 i 个粒子的数值结果和解析解.

4.1 CPSPH-3D 方法的有效性分析

本小节主要基于Dirichlet边值条件下的常系数和变系数带源项两种情况的三维瞬态热传导问题^[20]进行了模拟, 并与解析解进行对比, 对CPSPH-3D方法的精度、收敛性和计算效率进行了分析.

4.1.1 三维常系数情况下的温度变化

考虑正方体区域 $\Omega : [0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$ 中的常系数非稳态热传导问题, 其方程和初边值条件分别为

$$T_t = T_{xx} + T_{yy} + T_{zz},$$

初值条件为

$$T(x, y, z, 0) = \sin(\pi x) + \sin(\pi y) + \sin(\pi z),$$

边值条件为

$$\begin{cases} T(0, y, z, t) = (\sin(\pi y) + \sin(\pi z)) e^{-\kappa\pi^2 t} \\ T(1, y, z, t) = (\sin(\pi y) + \sin(\pi z)) e^{-\kappa\pi^2 t} \\ T(x, 0, z, t) = (\sin(\pi x) + \sin(\pi z)) e^{-\kappa\pi^2 t} \\ T(x, 1, z, t) = (\sin(\pi x) + \sin(\pi z)) e^{-\kappa\pi^2 t} \\ T(x, y, 0, t) = (\sin(\pi x) + \sin(\pi y)) e^{-\kappa\pi^2 t} \\ T(x, y, 1, t) = (\sin(\pi x) + \sin(\pi y)) e^{-\kappa\pi^2 t} \end{cases}$$

参数 κ 取0.1, 对应的该问题的解析解为

$$T(x, y, z, t) = (\sin(\pi x) + \sin(\pi y) + \sin(\pi z)) e^{-\kappa\pi^2 t}.$$

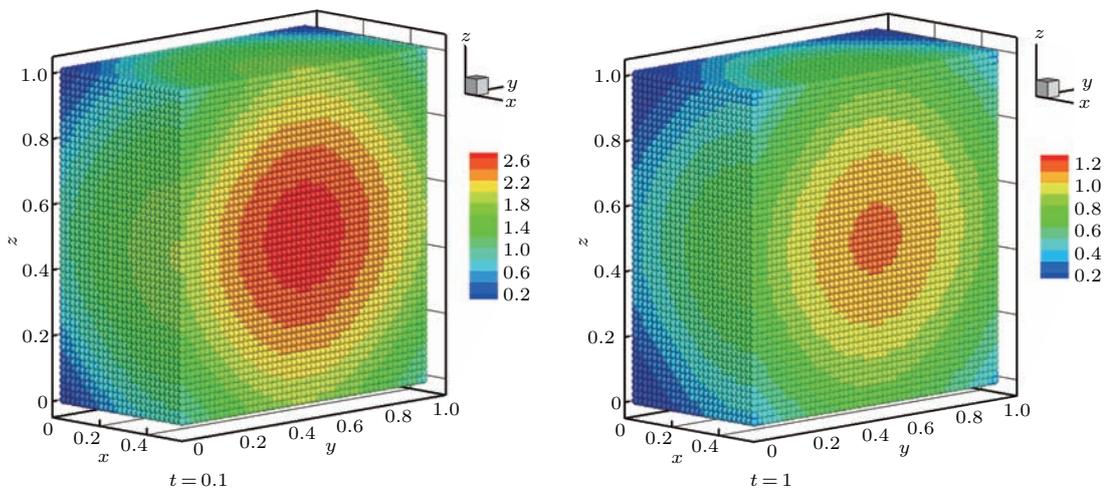


图1 (网刊彩色) 不同时刻里 $x = 0.5$ 截面处温度分布的三维云图

Fig. 1. (color online) The 3D temperature distribution at $x = 0.5$ section at different time.

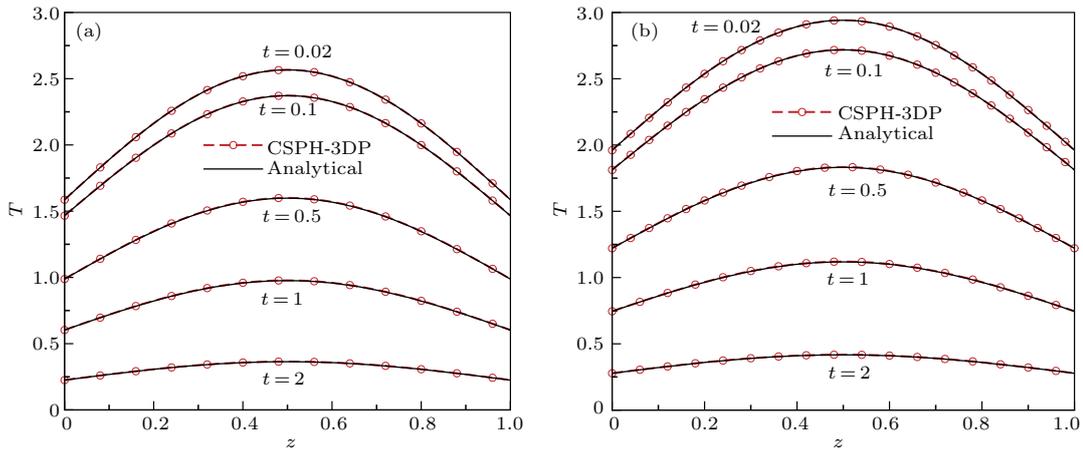


图2 (网刊彩色) 几个不同时刻、不同位置处沿 z 方向的温度变化曲线 (a) $x = 0.3, y = 0.3$; (b) $x = 0.5, y = 0.5$
 Fig. 2. (color online) The change curve of temperature along z -axis at different time: (a) $x = 0.3, y = 0.3$; (b) $x = 0.5, y = 0.5$.

该算例模拟中采用 $51 \times 51 \times 51$ (132651) 个均匀粒子, 时间步长为 $dt = 10^{-4}$. 值得注意的是, 该算例为常系数情况, 热传导方程中只有二阶导数项. 为展示该算例中正方体区域里温度随时间的变化情况, 图1给出了温度分布的三维云图. 通过图1可以看出, 区域中心处温度最高, 边界附近温度较低, 随时间延长区域上的温度逐渐降低. 为体现数值模拟的准确性, 图2给出了数值结果与解析解的对比曲线图. 由图2可以看出, 几个不同时刻数值结果与解析解符合, 表明随时间延长由数值模拟得到的温度分布是可靠的; 不同截面上温度随时间演化趋势一样且具有对称性; 每个二维截面上中心处温度降低速度比边界处降低的快.

为了考察给出的三维修正SPH方法模拟瞬态热传导问题的精度和收敛性, 图3给出了数值结果与解析解之间的2-范数误差变化曲线图 (N_x 表示为沿 x 方向上粒子数). 通过图3和表1可知: 1) 不同时刻 E_2 范数误差值随粒子数增加而减小(见图3), 表明提出的方法具有较好的收敛

性; 2) 中心位置处绝对误差值随粒子间距减小而减小(见表1), 且近似为粒子间距平方的常数倍; 3) CPSPH-3D 数值方法模拟常系数三维瞬态热传导问题具有较好的二阶精度.

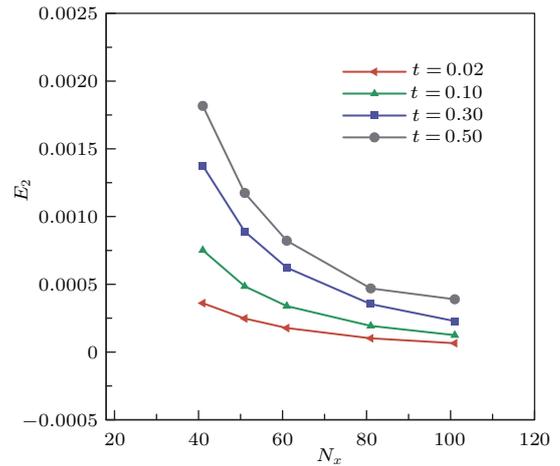


图3 (网刊彩色) 几个不同时刻 E_2 误差范数随粒子数增加的变化曲线
 Fig. 3. (color online) The change curve of E_2 error norm with the increase of particle number at different time.

表1 中心位置 ($x = 0.5, y = 0.5, z = 0.5$) 处数值解与解析解之间绝对误差 (Δe)

Table 1. The absolute error (Δe) between the numerical solutions and analytical solutions at the central position ($x = 0.5, y = 0.5, z = 0.5$).

粒子数	粒子等间距	$\Delta e(t = 0.02)$	$\Delta e(t = 0.1)$	$\Delta e(t = 0.3)$	$\Delta e(t = 0.5)$
$41 \times 41 \times 41$	0.025	0.00023	0.00105	0.00281	0.00382
$51 \times 51 \times 51$	0.02	0.00015	0.00067	0.00181	0.00246
$61 \times 61 \times 61$	0.0167	0.00010	0.00047	0.00126	0.00172
$81 \times 81 \times 81$	0.0125	0.00006	0.00026	0.00071	0.00097
$101 \times 101 \times 101$	0.01	0.00004	0.00017	0.00045	0.00063

表2 粒子数为 $81 \times 81 \times 81$ 时不同 CPU 数下不同计算步数的消耗时间 (s)

Table 2. The computing time (s) of different calculated steps with different CPU number at particle number $81 \times 81 \times 81$.

CPU 数	$num = 1$	$num = 10$	$num = 1000$	$num = 5000$	$num = 10000$
1	3182.18	3800.48	71813.23	346612.23	690110.98
2	1597.04	1907.45	36034.90	174016.30	346395.75
12	274.47	327.65	6188.25	29876.12	59512.62
24	150.46	180.64	3519.69	17008.96	33886.75
36	100.83	121.22	2382.21	13746.11	25178.36
60	58.39	69.96	1357.11	6562.89	13076.92

表3 不同粒子数、不同 CPU 数下步数为 $num = 10000$ 时平均消耗时间 (s)

Table 3. The average computing time of calculated step $num = 10000$ with different CPU number at different particle number.

CPU 数粒子数	1	2	12	24	36	60
$61 \times 61 \times 61$	28.963	14.491	2.499	1.276	0.946	0.545
$81 \times 81 \times 81$	68.670	34.491	5.910	3.353	2.267	1.285
$101 \times 101 \times 101$	110.985	55.476	9.761	5.375	3.342	2.164

表2给出了不同CPU数下计算效率的比较 (“ num ”表示计算更新步数), 计算结果说明随CPU数的增加计算效率得到逐步提高. 为了体现对三维问题模拟进行并行算法的必要性, 对其模拟过程的计算效率进行了分析. 图1和图2中用132651个粒子进行并行计算模拟, 采用了36个CPU, 运行到 $t = 0.1$ 时(1000步) CPU消耗时间约520.8 s, 运行到 $t = 1$ 时(10000步) CPU消耗时间约5158.2 s (约1.4 h). 若仅用2个CPU时, 运行到 $t = 1$ CPU消耗时间约91806.6 s (约25.5 h). 由此可以看出使用多个CPU并行计算极大地减少了计算机模拟时间, 能够很好地提高计算效率. 为了得到更好的数值结果, 需要增加模拟的粒子数, 若CPU个数不变, 计算机模拟时间大幅增加. 这主要由两个原因导致: 一是粒子数的增加使每一个计算更新步的CPU消耗时间增加; 二是粒子数增加将导致时间步长变小, 计算得到同一时间的数值结果时需要的模拟时间成倍地增加(比如用1030301($100 \times 100 \times 100$)个粒子, 时间步长取为 $dt = 10^{-6}$, 采用168个CPU运行到 $t = 1$ 时需要计算机模拟时间约190 h). 上述分析进一步表明对三维瞬态热传导问题采用粒子方法模拟时进行并行计算提高计算效率是非常必

要的.

为更好地展示在不同粒子数下、不同CPU数情况下并行计算的效率, 表3给出了不同粒子数、不同CPU数下步数为 $num = 10000$ 时的平均消耗时间(从计算第2步开始算起). 由表3可以看出, 当CPU数不变时, 随粒子数的增加计算量也会不断增加, 且粒子数增加比率与计算量增加比率并不成线性正比关系. 同时, 也可以看出在同一粒子数下, 随CPU数的增加, 计算效率不断提高, 但计算效率的提高比率与CPU数增加比率也不成线性正比关系. 这是因为计算机模拟过程中, CPU的消耗时间受编程语言算法、高性能设备及网络通讯等因素的影响, 使其在随粒子数或CPU数增加情况下的计算效率变化情况不成线性比例关系.

4.1.2 三维变系数带源项情况下的温度变化

本小节为了考察CPSPH-3D方法模拟三维瞬态热传导问题的稳定性, 对三维变系数情况下温度变化(金字塔形温度分布)特点进行了模拟分析. 考虑一边长为1 m的正方形(区域为 $[1, 2] \times [1, 2] \times [1, 2]$), 其中热传导系数 $k(\mathbf{x}) = x_1 + x_2 + x_3$ (W/(m \cdot °C))、热源 $f(x, t) = -8(x_1 + x_2 + x_3) + 10 \cos(10t)$ (W/m 3)、密度 $\rho = 1$ kg/m 3 、比

热 $c = 1 \text{ J}/(\text{kg}\cdot^\circ\text{C})$. 初始温度 $T_0 = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 (^\circ\text{C})$, 边界条件为:

$$\begin{cases} T(1, x_2, x_3, t) = 1 + x_2^2 + x_3^2 + \sin(10t), \\ T(2, x_2, x_3, t) = 4 + x_2^2 + x_3^2 + \sin(10t), \\ T(x_1, 1, x_3, t) = 1 + x_1^2 + x_3^2 + \sin(10t), \\ T(x_1, 2, x_3, t) = 4 + x_1^2 + x_3^2 + \sin(10t), \\ T(x_1, x_2, 1, t) = 1 + x_1^2 + x_2^2 + \sin(10t), \\ T(x_1, x_2, 2, t) = 4 + x_1^2 + x_2^2 + \sin(10t). \end{cases}$$

该问题解析解为 $T(x, t) = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + \sin(10t) (^\circ\text{C})$.

该算例中温度分布像金字塔形(见图4), 且随时间成周期性变化, 变化最小的正周期为 $0.2\pi (\approx 0.62)$, 对应为均匀物质材料. 由于热传导方程中的变系数大于1且与粒子位置有关, 使得方程整理后得到的一阶导数项系数大于1, 模拟中需要采用有迎风处理思想的CPSPH-3D方法, 若是仅连续应用一阶对称修正SPH方法^[17]对该算例进行模拟, 随时间延长数值结果会出现数值不稳定现象以致最后模拟被迫终止.

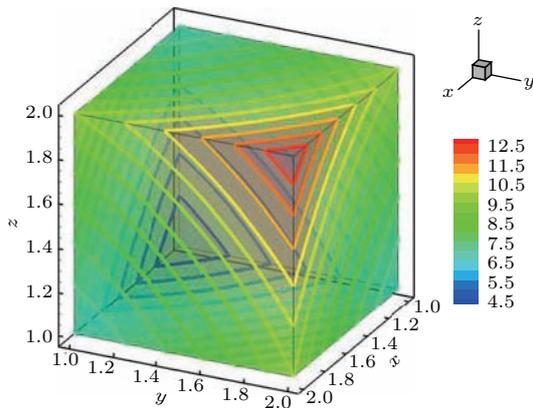


图4 (网刊彩色) $t = 0.16$ 时刻三维区域上的温度分布情况
Fig. 4. (color online) The 3D temperature distribution at $t = 0.16$.

图4给出了三维区域上温度分布情况, 由此可以看出温度分布沿着二维截面对角线或者体对角线方向上从(1, 1, 1)到(2, 2, 2)逐渐升高, 且沿不同截面上温度变化趋势一致.

为体现提出的方法数值模拟的准确性及收敛性, 图5给出了两种对角线(沿 $x = 1.5$ 处 y - z 截面对角线 l_1 ; 沿点(1, 1, 1)到点(2, 2, 2)体对角线 l_2)上温度变化曲线, 图6给出了 E_2 范数误差的变化曲线. 由图5和图6可知: 1) 不同对角线上不同时刻

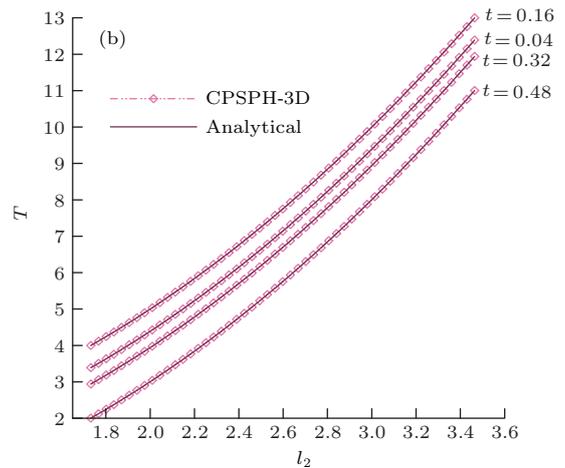
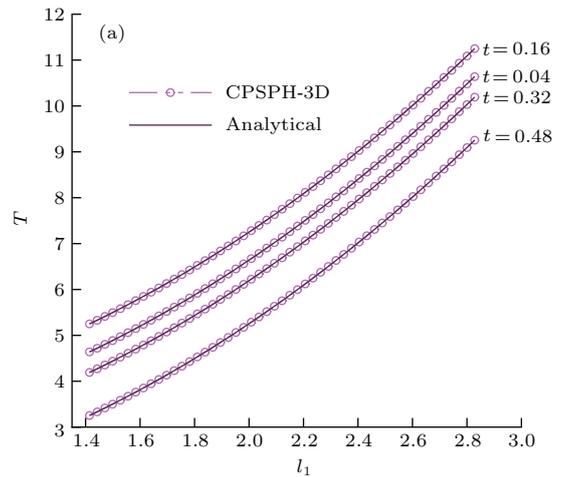


图5 (网刊彩色) 几个不同时刻沿两种对角线上的温度变化曲线 (a) 沿对角线 l_1 ; (b) 沿对角线 l_2 .

Fig. 5. (color online) The change curve of temperature along different diagonal line at different time: (a) Diagonal line l_1 ; (b) diagonal line l_2 .

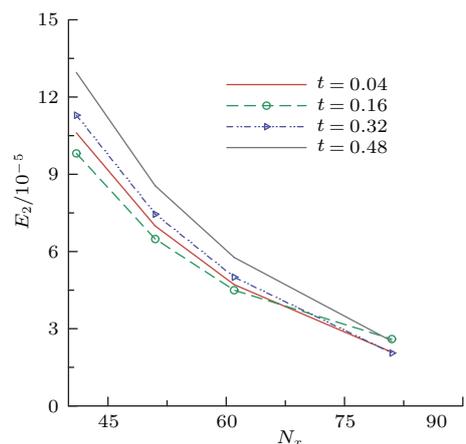


图6 (网刊彩色) 几个不同时刻 E_2 误差范数随粒子数增加的变化曲线

Fig. 6. (color online) The change curve of E_2 error norm with the increase of particle number at different time.

的数值结果与解析解均符合; 2) CPSPH-3D方法中给出迎风思想是有效可靠的, 其模拟变系数瞬态热传导问题具有较好的稳定性和可靠性; 3) 图6展示了数值结果随时间演化都有较好的收敛性, 从而表明CPSPH-3D数值方法模拟变系数瞬态热传导问题具有较好的收敛性.

4.2 基于Newmann边界问题的求解

为进一步体现CPSPH-3D方法模拟复杂三维瞬态热传导问题的能力, 本节主要考虑了复杂区域上基于Newmann边值条件的三维瞬态热传导问题^[1,2]. 模拟中将CPSPH-3D的数值结果与准确解做对比, 体现了该方法求解粒子均匀分布和非均匀分布两种情况下基于Newmann边值条件瞬态热传导问题的可靠性, 以及本文提出的Newmann边值条件处理的有效性.

算例1 考虑方形区域 $[0, \pi] \times [0, \pi] \times [0, \pi]$ 上Newmann边界条件的变系数非稳态热传导问题^[1], 对应方程和初边值条件为

$$T_t = T_{xx} + T_{yy} + T_{zz},$$

初值条件

$$T(x, y, z, 0) = 1 + 2 \cos(x) \cos(y) \cos(z),$$

Newmann边界条件

$$\begin{aligned} T_{,x}|_{x=0} = T_{,x}|_{x=\pi} = T_{,y}|_{y=0} = T_{,y}|_{y=\pi} \\ = T_{,z}|_{z=0} = T_{,z}|_{z=\pi} = 0. \end{aligned}$$

对应的解析解为

$$T(x, y, z, t) = 1 + 2e^{-3t} \cos(x) \cos(y) \cos(z).$$

图7给出了三维区域上温度分布. 根据方程的特点可知, 随时间演化温度值逐渐降低且沿截面对角线上的值是一致的. 为考察CPSPH-3D方法模拟基于Neumann边界条件的三维瞬态热传导问题的可靠性, 图8给出了不同位置处的温度变化曲线, 图9给出了 E_2 范数误差的变化曲线. 图8和图9体现了CPSPH-3D方法模拟基于Neumann边界条件的问题是准确有效的, 且随时间演化也具有较好的收敛性; 不同位置值处的温度分布趋势一致, 但温度值不同.

算例2 为了进一步体现CPSPH-3D方法在非均匀粒子分布情况下也能对带有混合边值的瞬态热传导问题进行准确的模拟, 考虑文献^[2]中圆柱形区域上的瞬态热传导问题, 其区域参数与文

献^[2]一致, 对应方程和混合边值条件为

$$T_t = (k/c)(T_{xx} + T_{yy} + T_{zz}),$$

初值条件

$$T(x, y, z, 0) = 0,$$

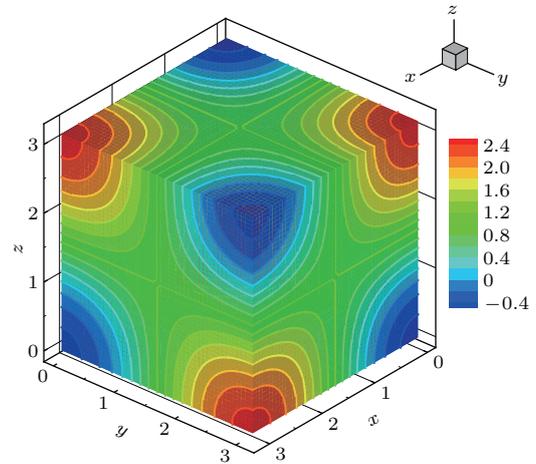


图7 (网刊彩色) $t = 0.1$ 时刻三维区域上温度分布
Fig. 7. (color online) The 3D temperature distribution at $t = 0.1$.

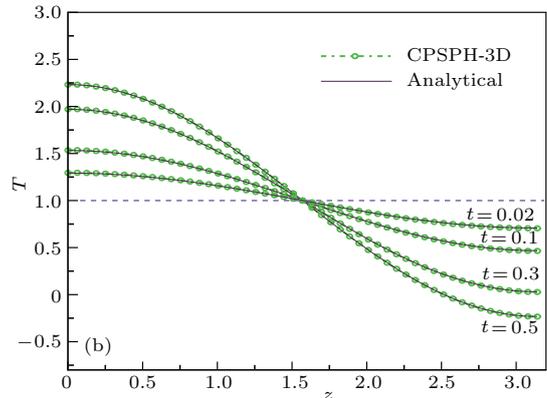
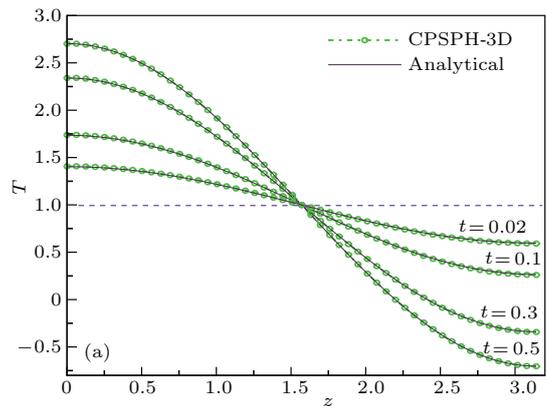


图8 (网刊彩色) 几个时刻不同位置处的温度变化曲线
(a) $x = 9\pi/10, y = 9\pi/10$; (b) $x = \pi/5, y = \pi/5$
Fig. 8. (color online) The change curve of temperature at different time: (a) $x = 9\pi/10, y = 9\pi/10$; (b) $x = \pi/5, y = \pi/5$.

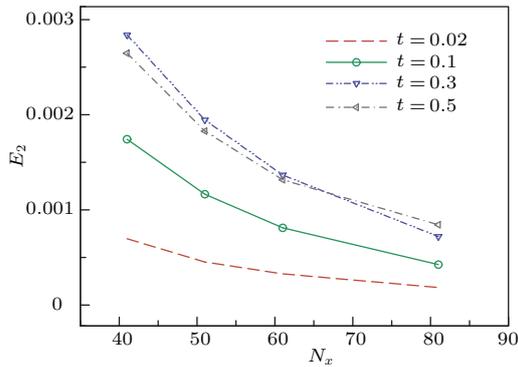


图9 (网刊彩色) 几个不同时刻 E_2 误差范数随粒子数增加的变化曲线

Fig. 9. (color online) The change curve of E_2 error norm with the increase of particle number at different time.

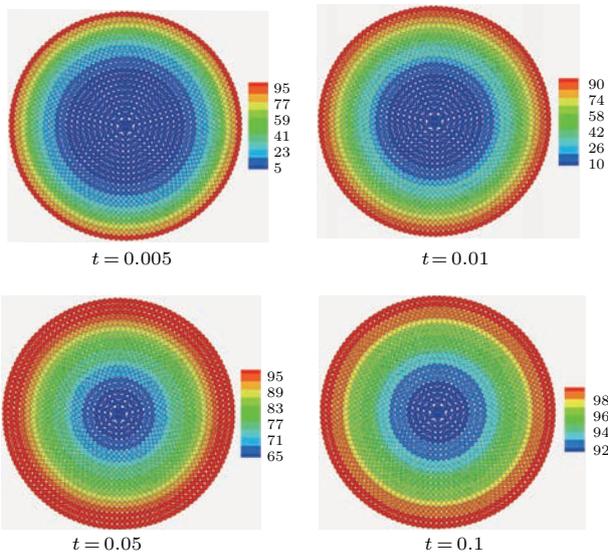


图10 (网刊彩色) 圆柱形区域下 $z = 1$ (沿 z 方向中心位置) 处 $x-y$ 截面上温度分布

Fig. 10. (color online) The temperature distribution under the cylindrical area along $x-y$ section at $z = 1$ (central position along the z -axis).

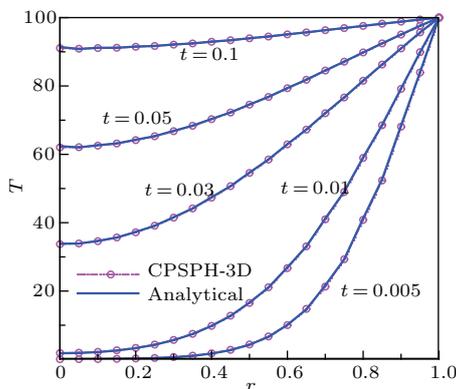


图11 (网刊彩图) 圆柱形区域下沿 $z = 1$ 处截面极坐标方向上的温度变化

Fig. 11. (color online) The change curve of temperature under the cylindrical polar coordinate direction along the $z = 1$ section.

Dirichlet 边界条件

$$T(r, t) = 100, \quad r = 1 (r \text{ 为极坐标}),$$

Newmann 边界条件

$$T_{,z}|_{z=0} = T_{,z}|_{z=2} = 0.$$

为了与解析解和文献中相关结果做对比, 模拟中取 $k/c = 5$. 为更好体现提出的 CPSPH-3D 方法模拟复杂区域上的温度传播问题, 针对该圆柱形区域算例模拟中采用了圆形方式非均匀粒子分布排列. 图 10 给出了 CPSPH-3D 方法得到 $x-y$ 截面上温度分布结果, 圆柱形区域上温度受边界持续高温的影响, 沿水平方向从外往里温度逐渐升高. 为体现在粒子分布非均匀情况下提出的方法模拟基于混合边界条件瞬态热传导问题的准确性, 图 11 给出了沿 $z = 1$ 处截面极坐标方向上温度变化曲线. 图 11 表明了提出的 CPSPH-3D 方法模拟混合边界条件的三维瞬态热传导问题是准确的, 且在非均匀粒子分布情况下也是稳定可靠的.

5 梯度功能材料中三维热传导问题模拟

为了进一步展示 CPSPH-3D 方法的优越性, 本节针对非均匀梯度功能材料的传热过程进行了数值模拟预测, 并与其他数值结果做对比, 其对应的方程为带有混合边值条件的变系数瞬态热传导方程^[2](无解析解). 通过该算例的模拟可以较好地展示 CPSPH-3D 方法预测基于混合边值变系数下非均匀材料上温度分布随时间演化情况的可靠性.

考虑区域 $[0, 1] \times [0, 1] \times [0, 1]$, 带有与时间有关混合边值条件的变系数瞬态热传导方程为

$$c(x, y, z)T_t = \nabla \cdot (k(x, y, z)\nabla T),$$

初值条件 $T(x, y, z, 0) = 0$,

Dirichlet 边界条件

$$T(x, y, 1, t) = 10t,$$

Newmann 边界条件

$$T_{,x}|_{x=0} = T_{,x}|_{x=1} = T_{,y}|_{y=0} = T_{,y}|_{y=1} = T_{,z}|_{z=0} = 0.$$

为体现 CPSPH-3D 方法的稳定性和可靠性, 并与文献中数值结果做对比, 选取 $c(x, y, z) = 1e^{3z}$, $k(x, y, z) = 5e^{3z}$, 对应 $k/c = 5$.

图 12 给出了三维功能梯度材料上温度分布。通过图 12 可知, 非均匀材料上温度分布出现梯度变化趋势, 随时间延长整体区域上温度值均逐渐变大。

值得注意的是, 模拟中发现, 当 k/c 取较小的值 0.1 时, 不采用迎风思想处理方式, 仅拓展应用

文献 [17] 中 FO-SSPH 方法就可以得到较准确的结果, 可是当 k/c 取 5 时再仅使用拓展 FO-SSPH 方法会出现数值不稳定现象, 若采用带有迎风思想处理方式的 CPSPH-3D 方法就会得到较可靠的结果 (见图 13 和 14)。

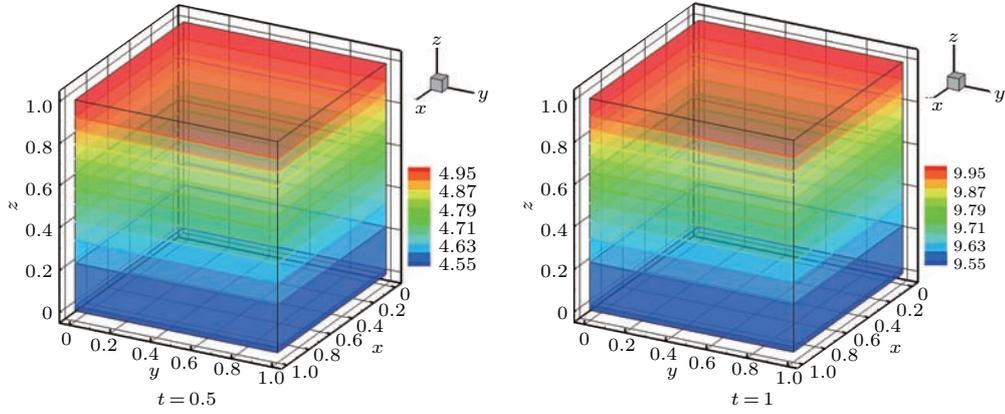


图 12 (网刊彩色) 不同时刻下三维功能梯度材料上温度分布 ($k/c = 5$)

Fig. 12. (color online) The temperature distribution on the 3D functional gradient materials at different time ($k/c = 5$).

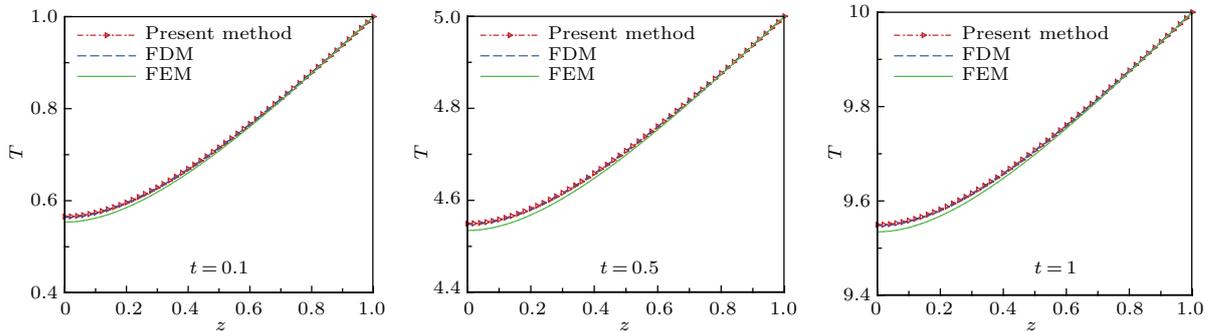


图 13 (网刊彩色) 几个不同时刻温度沿 z 轴变化曲线 ($x = y = 0.5$ 截面上)

Fig. 13. (color online) The change curve of temperature along the z-axis at different time ($x = y = 0.5$).

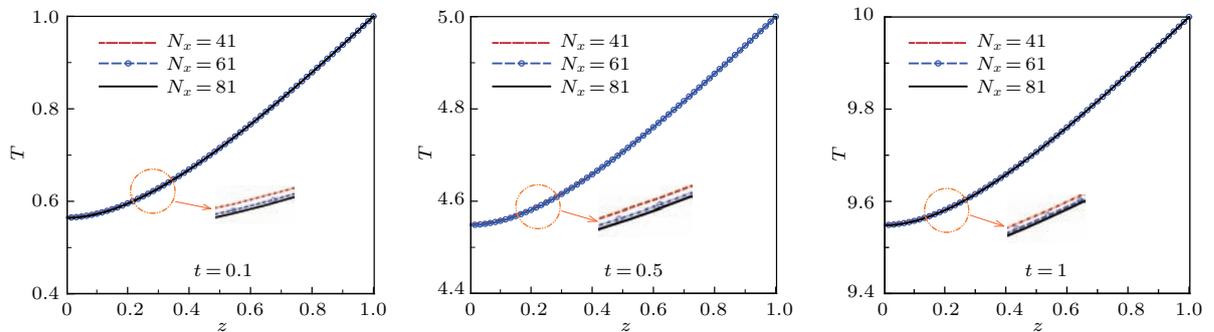


图 14 (网刊彩色) 几个不同时刻温度随粒子数增加的变化 ($x = y = 0.5$ 截面上温度沿 z 轴)

Fig. 14. (color online) The change curve of temperature with the increase of particle number at different time ($x = y = 0.5$, along the z-axis).

为考察模拟结果的可靠性,图13给出了三个不同时刻 $x = y = 0.5$ 截面上温度沿 z 轴的变化曲线,图14给出了粒子加密情况下的温度变化曲线.由图13和图14可以看出:1) 随时间演化 CPSPH-3D 结果与 FDM 结果符合(见图13),且与 FEM 结果也很接近,表明本文给出的方法模拟混合边值变系数下瞬态热传导问题是稳定可靠的;2) 本文提出的方法得到的随时间演化数值结果均有较好的收敛性(见图14).上述结果表明,本文提出的 CPSPH-3D 方法具有较好的稳定性和可靠性,为模拟带有混合边值变系数下瞬态热传导问题提供了一种有效的数值模拟方法.

6 结 论

为解决粒子法模拟三维瞬态变系数热传导问题容易出现精度低、稳定性差和计算效率低的问题,本文提出了 CPSPH-3D 方法,该方法兼顾已有改进的 SPH 方法高精度和迎风思想稳定性好的优点,并结合了 MPI 并行技术.数值模拟中,考虑了三维方形或圆柱形区域下的常系数或变系数带有混合边值条件瞬态热传导问题,并与解析解或其他数值结果做对比,对提出方法的精度、稳定性和计算效率及收敛性进行了分析,得到如下结论:

1) CPSPH-3D 方法较传统 SPH 方法及其他改进 SPH 方法模拟三维瞬态热传导问题具有更好的稳定性,且在粒子分布均匀或非均匀情况均具有较高的精度;

2) CPSPH-3D 方法结合相邻粒子确定的 MPI 并行技术在粒子数加密情况下通过增加 CPU 个数可以较好地提高计算效率;

3) 三维瞬态热传导 CPSPH-3D 方法能够准确、有效地预测变系数带有混合边值条件热传导问题中温度随时间演化过程,且提出的方法较网格类方法具有较好的普适性.

目前未有文献结合 MPI 并行技术和修正 SPH 方法对变系数混合边值条件下三维瞬态热传导问题进行模拟,本文针对三维变系数瞬态热传导问题

给出的 CPSPH-3D 方法较传统 SPH 方法和已有改进 SPH 方法具有自身的优点,较网格类方法更具灵活性和推广应用性,为均匀或非均匀材料上传热现象的预测提供了一种可靠、高效的粒子方法.

参考文献

- [1] Zhang Z, Wang J F, Cheng Y M, Liew K M 2013 *Sci. China* **56** 1568
- [2] Sutradhar A, Paulino G H, Gray J J 2002 *Engin. Anal. Bound. Elements* **26** 119
- [3] Wang J F, Sun F X, Cheng R J 2010 *Chin. Phys. B* **19** 060201
- [4] Zhang J Q, Niea L, Zhang X Y, Chen R Y 2014 *Eur. Phys. J. B* **87** 285
- [5] Nie L R, Yu L L, Zheng Z G, Shu C Z 2013 *Phys. Rev. E* **87** 062142
- [6] Lewis R W, Nithiarasu P, Seetharamu K N 2004 *Fundamentals of the Finite Element Method for Heat and Fluid Flow* (Chichester: John Wiley)
- [7] Akil J H 2008 *J. Computat. Appl. Math.* **220** 335
- [8] Zhong C W, Xie J F, Zhuo C S, Xiong S W, Yin D C 2009 *Chin. Phys. B* **18** 4083
- [9] Gingold R A, Monaghan J J 1977 *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **181** 375
- [10] Liu M B, Liu G R 2010 *Arch. Computat. Methods Engin.* **17** 25
- [11] Jeong J H, Jhon M S, Halow J S, Osdol J V 2003 *Comput. Phys. Commun.* **153** 71
- [12] Chen J K, Beraun J E, Carney T C 1999 *Int. J. Num. Meth. Eng.* **46** 231
- [13] Zhang G M, Batra R C 2004 *Comp. Mech.* **34** 137
- [14] Bonet J, Lok T S L 1999 *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* **180** 97
- [15] Liu M B, Chang J Z 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 3654 (in Chinese) [刘谋斌, 常建忠 2010 物理学报 **59** 3654]
- [16] Liu M B, Liu G R 2006 *Appl. Num. Math.* **56** 19
- [17] Jiang T, Ouyang J, Li X J, Zhang L, Ren J L 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 090206 (in Chinese) [蒋涛, 欧阳洁, 栗雪娟, 张林, 任金莲 2011 物理学报 **60** 090206]
- [18] Holman J P 2002 *Heat Transfer* (9th Ed.) (Singapore: McGraw-Hill)
- [19] Liu G R, Liu M B 2003 *Smoothed Particle Hydrodynamics: A Mesh-free Particle Method* (Singapore: World Scientific)
- [20] Young D L, Tsai C C, Murugesan K, Fan C M, Chen C 2004 *Engin. Anal. Bound. Elements* **28** 1463

Simulation of three-dimensional transient heat conduction problem with variable coefficients based on the improved parallel smoothed particle hydrodynamics method*

Jiang Tao Chen Zhen-Chao Ren Jin-Lian Li Gang[†]

(School of Mathematical Sciences, Yangzhou University, Yangzhou 225002, China)

(Received 7 February 2017; revised manuscript received 10 April 2017)

Abstract

In this work, an improved parallel SPH method is proposed to accurately solve the three-dimensional (3D) transient heat conduction equation with variable coefficients. The improvements are described as follows. Firstly, the first-order symmetric smoothed particle hydrodynamics (SPH) method is extended to the simulating of the 3D problem based on Taylor expansion. Secondly, the concept of stabilized up-wind technique is introduced into the convection term. Thirdly, the MPI parallel technique based on the neighboring particle mark method is introduced into the above improved SPH method, and named the corrected parallel SPH method for 3D problems (CPSPH-3D). Subsequently, the accuracy, convergence and the computational efficiency of the proposed CPSPH-3D method are tested by simulating the 3D transient heat conduction problems with constant/variable coefficient, and compared with the analytical solution. Meanwhile, the capacity of the proposed CPSPH-3D for solving the 3D heat conduction problems with the Dirichlet and Neumann boundaries is illustrated, in which the change of temperature with time under the complex cylindrical area is also considered. The numerical results show that: 1) the proposed CPSPH-3D method has the better stability, higher accuracy and computational efficiency than the conventional SPH method no matter whether the particle distribution is uniform; 2) the calculating time can be well reduced by increasing the number of CPUs when the particle number is refined in the simulations of CPSPH-3D. Finally, the temperature variation in the 3D functionally gradient material is predicted by the corrected parallel SPH method, and compared with the other numerical results. The process of temperature variation in the functionally gradient material can be shown accurately.

Keywords: 3D transient heat conduction, SPH method, parallel, functionally gradient materials

PACS: 02.60.-x, 02.70.-c, 44.10.+i

DOI: [10.7498/aps.66.130201](https://doi.org/10.7498/aps.66.130201)

* Project supported by the Special Fund for Public Welfare Research of Ministry of Land and Resources of China (Grant No. 201411007-01).

† Corresponding author. E-mail: gli@yzu.edu.cn; rjl20081223@126.com