

项目公示信息

一、项目名称： 聚合物自由表面流的宏介观数值模拟研究

二、提名者及提名意见

提名单位：陕西省教育厅

提名意见：本项目围绕聚合物成型加工过程中自由表面流的宏介观数值模拟开展研究。针对光滑粒子流体动力学(SPH)方法在求解聚合物流动问题时面临的计算精度低、稳定性差、边界不易施加、粒子分布不均等问题，发展了一系列高精度、高稳定性的 SPH 方法，建立了耦合 SPH 和 Brownian 构型场方法的宏介观多尺度算法，实现了典型聚合物成型过程的 SPH 模拟及制品的性能预测和优化。本项目成果获得 2023 年度广东省力学学会自然科学一等奖，2024 年度陕西高等学校科学技术研究优秀成果二等奖。成果材料齐全、规范，无知识产权纠纷，人员排序无争议，符合陕西省科学技术奖提名条件。特提名为 2025 年度陕西省自然科学二等奖。

三、项目简介

聚合物流体在自然界和工业加工中普遍存在，准确预测聚合物流体复杂流变特性有着不可估量的工程应用价值。工业加工中的聚合物流动往往含有复杂的自由面，如聚合物加工成型、化妆品涂抹过程等。基于网格的数值方法在处理含有自由面的聚合物流动问题时会遇到很多困难，必须借助额外的界面追踪技术，实施过程较为繁琐。光滑粒子流体动力学(SPH)方法是一种无网格粒子法，它既保留拉格朗日方法描述物质界面准确的优势，又兼备欧拉方法易处理大变形的长处，因此适宜模拟含有自由面的聚合物流动问题。然而，SPH方法在求解聚合物流动问题时面临着计算精度低、稳定性差、边界不易施加、粒子分布不均等基本挑战。针对这些挑战，项目组在国家自然科学基金等的支持下，长期聚焦聚合物复杂流动的SPH建模与计算，取得了一系列具有重要学术价值和实际应用价值的研究成果。

主要科学发现与成果如下：

1. 提出了高精度、高稳定性的SPH方法。推导了求解聚合物流动

的SPH核梯度修正技术；建立了聚合物流动的人工应力模型，解决了传统SPH方法的张力不稳定性；提出了边界粒子和固壁外虚粒子相结合的增强型边界处理方法，突破了已有边界方法不易推广到三维、粒子易穿透边界的局限；发展了粒子最优微小迁移技术，攻克了SPH方法粒子分布不均的计算瓶颈。

2. 建立了耦合SPH和Brownian构型场方法的宏介观多尺度算法。在SPH方法框架下，推导了Brownian构型场的构型场演化方程，得到了珠簧模型的微观度量及其形态演化；通过动态可视化模拟，揭示了分子模型的拉伸和翻转机理，突破了传统SPH方法无法解释流体内部分子结构对聚合物流动影响的局限。

3. 实现了典型聚合物成型过程的SPH模拟及制品的性能预测和优化。研制了高效的三维SPH并程序，解决了三维数值模拟计算量大、耗时长的问题；建立了三维非等温聚合物流动问题的SPH模型，得到了更加符合物理机理的聚合物成型加工流动模型；开发了SPH计算模拟平台，解决了成型过程模拟涉及的复杂型腔和工艺参数优化问题，架起了模型、算法与应用之间的桥梁。

5篇代表性论文发表于Comput. Meth. Appl. Mech. Engrg.、Appl. Math. Model.、J. Non-Newtonian. Fluid Mech.等计算数学与力学领域权威期刊上，其中1篇论文入选ESI高被引论文(全球前1%)，Web of Science核心库他引177次。项目研究成果受到国内外学术界的广泛认同和高度评价，所发表论文被31个国家118所科研机构的286名学者在论文中正面评价与引用，其中包括国际著名流变学专家，Phan-Thien-Tanner粘弹性流体本构模型创立者、澳大利亚科学院院士Nhan Phan-Thien、中国科学院院士李静海、中国科学院院士申长雨、中国科学院院士胡海岩、Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics期刊主编、葡萄牙波尔图大学Fernando T. Pinho等著名学者课题组。项目第一完成人入选陕西省“高层次人才特殊支持计划”青年拔尖人才、陕西省科技新星和陕西省科协青年人才托举计划；第二完成人入选国家海外高层次人才引进计划青年项目。

四、客观评价

【重要科学发现点 1 的评价】

(1) 亚太计算力学协会荣誉主席、美国辛辛那提大学 Guirong Liu 教授课题组在论文 *International Journal of Impact Engineering*, 2018, 122: 451-471(代表性引文 1)中评价：“简化的人工应力表达式不仅可以很好地缓解拉伸失稳，而且避免了三维笛卡尔坐标系的旋转[53]，所以我们使用了它”。这里的[53]为代表性论文 1。

(2) 中国科学院院士、发展中国家科学院院士、北京理工大学胡海岩院士课题组在论文 *Nonlinear Dynamics*, 2014, 75(4): 653-671 中评价：“最近，Xu 等[64]使用 SPH 方法研究了含复杂自由面的三维非牛顿流体动力学行为”。这里的[64]为代表性论文 1。

(3) 中国科学院院士、第三世界科学院院士、瑞士工程院外籍院士、英国皇家工程院外籍院士、澳大利亚技术科学与工程院外籍院士李静海院士课题组在论文 *Microfluidics and Nanofluidics*, 2013, 15: 481-490、*科学通报*, 58(15): 1414-1421 和 *化工学报*, 2014, 65(4): 1145-1161 中多次正面引用代表性论文 1 的研究成果，肯定了本项目在发展非牛顿流体 SPH 数值方法方面的相关工作。

(4) 加拿大水动力学首席科学家、蒙特利尔综合理工大学 Ahmad Shakibaeinia 教授课题组在论文 *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2020, 150:119377 (代表性引文 2)中多处引用并大篇幅报道代表性论文 2 的研究成果，他们评论：“通过与解析解和 Xu 等[82]结果的对比,验证了 KDF-ISPH 模型的准确性……”；“方程(A4)由 Xu 等[82]原创性地(originally)提出，称之为核梯度的混合对称修正……”。这里的[82]为代表性论文 2。

(5) 中国地质大学靳孟贵教授课题组在论文 *Advances in Water Resources*, 2021, 156: 104043 (代表性引文 3)中评价：“仿照(following) Xu 和 Deng (2016)，本文将一阶偏导乘到 Eq. (12)两边，并在支持域内作积分……”。这里的 Xu 和 Deng (2016)为代表性论文 2。

(6) 哈尔滨工程大学张阿漫教授课题组在论文 *Journal of Hydrodynamic s, Ser. B*, 2017, 29(2): 187-216 中评价：“Xu 等[96]提出

的 SPH 核梯度修正矩阵是对称的，可节省存储空间(save storage requirement)”。这里的[96]为代表性论文 2。

【重要科学发现点 2 的评价】

(1) 计算流变学专家、西班牙马德里理工大学 Juan Luis Prieto 教授在 Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2016, 307: 164-192(代表性引文 4)和论文 Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, 2015, 226: 16 - 31; 2016, 227: 90 - 99 中多次评价:“布朗构型场(BCF)方法最近分别被 Bajaj 等[43]和 Xu 等[44]在 ALE 和 SPH 方法中耦合使用”。这里的[44]为代表性论文 3。

(2) 土耳其安卡拉怀特大学 Serife Akkoyun 博士在 Engineering Science and Technology, an International Journal, 2021, 24: 620 - 630 (代表性引文 5)中评价:“Xu et al. [28]和 Xu and Yu [29]将 FENE 珠簧模型引入到 SPH 方法中，能够有效地描述粘弹性流体大分子链的运动”。这里的[29]为代表性论文 3。

(3) 德国斯图加特大学 Manuel Hopp-Hirschler 教授课题组在论文 The European Physical Journal Special Topics, 2019, 227: 1501-1514 中评价:“使用多尺度 SPH 方法可实现得到粘弹性流体实验时间尺度的有效解[11]”。这里的[11]为代表性论文 3。

(4) 美国威斯康星大学麦迪逊分校 Wenxiao Pan 教授课题组在论文 Journal of Computational Physics, 2017, 334: 125 - 144、Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2017, 324: 278-299 和 2019, 347: 402-424 中多次引用代表性论文 3 的研究成果，肯定了该项目在粘弹性流体 SPH 多尺度算法方面所做出的贡献。

【重要科学发现点 3 的评价】

(1) 代表性论文 4 中带芯圆盘成型过程的 SPH 模拟结果已成为相关领域的经典，相关结果已被作为“基准解”引用。例如，伊朗马什哈德菲尔多西大学 Mohammad Passandideh-Fard 教授课题组在论文 International Journal of Multiphase Flow, 2018, 101: 11-23(代表性引文 6)和墨西哥科学院 Jörg Kuhnert 博士课题组在论文 Computational

Particle Mechanics, 2019, 6(3): 411-425 中均多次正面评价并大篇幅报道带芯圆盘成型过程的 SPH 结果，他们利用该项目 SPH 结果验证了他们 LBM 和 GFDM 方法的有效性。

(2) 中国科学院院士、大连理工大学申长雨院士课题组在论文 Macromolecular Theory and Simulations, 2022, 31(1): 2100029(代表性引文 7)和 Polymers, 2022, 14(20): 4334 中多次正面评价代表性论文 5: “Xu and Yu [38]提出了模拟 F 和 N 型腔非等温成型过程的修正 SPH 算法”; “在 Xu 等[8, 38]的基础上，本文使用了由边界粒子和虚粒子两类粒子组成的边界处理方法”。这里的[38]为代表性论文 5。

(3) 国际著名流变学专家，Phan-Thien-Tanner 粘弹性流体本构模型创立者、澳大利亚科学院院士、欧洲科学院院士、东盟工程院院士、新加坡国立大学 Nhan Phan-Thien 院士课题组在论文 Journal of Computational Physics, 2022, 463: 111312 中评价: “该方法在模拟一些工业过程如 3D 打印过程[16-18]和注塑成型过程[54-57]有很大的潜力(great potential)”。这里的[56]和[57]为代表性论文 4 和 5。

(4) 葡萄牙米尼奥大学 Célio Fernandes 教授课题组在论文 Engineering Computations, 2021, 38(2): 762-778(代表性引文 8)中评价: “The works of Xu and Yu (2019, 2017)首次(for the first time)证实了利用 SPH 方法研究非等温注塑成型问题的可行性”。

(5) 华中科技大学周华民教授课题组在论文 Engineering Computations, 2019, 36(4): 1101-1120 中评价: “最近, Xu and Yu (2017)提出了一种鲁棒的 SPH 方法用于模拟三维注塑成型问题”。这里的 Xu and Yu (2017)为代表性论文 4。

五、代表性论文专著目录（限 5 条）

序号	论文专著名称	刊名	作者	年卷页码	发表时间	通讯作者	第一作者	国内作者	SCI 他引次数	知识产权是否归国内所有
1	SPH simulations of three-dimensional non-Newtonian free surface flows	Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering	Xiaoyang Xu, Jie Ouyang, Binxin Yang, Zhijun Liu	2013 年 256 卷 101-116 页	2013-04-01	Jie Ouyang	Xiaoyang Xu	许晓阳 欧阳洁 杨斌鑫 刘治军	60	是
2	An improved weakly compressible SPH method for simulating free surface flows of viscous and viscoelastic fluids	Computer Physics Communications	Xiaoyang Xu, Xiao-Long Deng	2016 年 201 卷 43-62 页	2016-04-01	Xiaoyang Xu, Xiao-Long Deng	Xiaoyang Xu	许晓阳 邓小龙	59	是
3	A multiscale SPH method for simulating transient viscoelastic flows using bead-spring chain model	Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics	Xiaoyang Xu, Peng Yu	2016 年 229 卷 27 - 42 页	2016-03-01	Xiaoyang Xu	Xiaoyang Xu	许晓阳 余鹏	15	是

4	Modeling and simulation of injection molding process of polymer melt by a robust SPH method	Applied Mathematical Modelling	Xiaoyang Xu, Peng Yu	2017 年 48 卷 384 - 409 页	2017-08-01	Xiaoyang Xu, Peng Yu	Xiaoyang Xu	许晓阳 余鹏	23	是
5	Extension of SPH to simulate non-isothermal free surface flows during the injection molding process	Applied Mathematical Modelling	Xiaoyang Xu, Peng Yu	2019 年 73 卷 715 - 731 页	2019-09-01	Xiaoyang Xu	Xiaoyang Xu	许晓阳 余鹏	20	是

六、主要完成人情况

姓名	排名	行政职务	技术职称	工作单位	完成单位	对本项目贡献
1	许晓阳	无	教授	西安科技大学	西安科技大学	项目负责人。提出了模拟聚合物自由表面流的一系列改进 SPH 方法，解决了传统 SPH 方法计算精度低、数值稳定性差、边界不易处理和粒子空间分布不均的问题；建立了 SPH 和布朗构型场方法相耦合的多尺度算法，实现了聚合物自由表面流的宏观与微观信息的耦合计算；研制了高效的三维 SPH 并程序，开展了典型成型过程的大规模 SPH 模拟及制品性能的预测和优化，架起了模型、算法与应用之间的桥梁。相关成果见代表性论文 1，2，3，4 和 5。
2	余鹏	无	研究员	南方科技大学	南方科技大学	项目主要参与人。提出了基于珠簧链模型的 SPH 宏观多尺度算法，发展了高效稳定求解构型场演化方程的半隐预估二次校正算法，克服了珠簧哑铃模型描述聚物流体相对比较粗糙和不能模拟较宽时间尺度流动问题的缺陷；建立了三维非等温聚合物流动问题的 SPH 模型，展现了聚合物熔体注入、流动和冷却的传热传质过程，探明了聚合物成型加工过程的传热传质耦合机理。相关成果见代表性论文 3，4 和 5。

七、主要完成单位情况

1.西安科技大学

项目第一完成人许晓阳是西安科技大学教师，在项目实施过程中，本单位给予项目主持人及其合作成员在科研用房、仪器设备及配套设施等软硬件方面全面支持和相应服务和指导，为项目的顺利实施起到了关键性作用。提出了模拟粘弹性流体的改进光滑粒子动力学 (SPH) 方法。提出了边界粒子和虚拟粒子相联合的增强型边界处理技术，以灵活地处理复杂边界。通过在宏观尺度上采用 SPH 方法求解质量和动量守恒方程，在微观尺度上采用珠簧模型求解聚合物偏应力，建立了基于珠簧模型的 SPH 多尺度算法。研制了高效的三维 SPH 并程序，解决了三维数值模拟计算量大、耗时长的问题;开展了带芯圆盘、F 型腔、N 型腔、餐叉、门把手等典型成型过程的 SPH 模拟，展现了聚合物熔体注入、流动和冷却的传热传质过程，得到了更贴近物理机理的聚合物成型加工模型，探明了聚合物成型加工过程的传热

传质耦合机理。

2.南方科技大学

项目第二完成人余鹏是南方科技大学教师，在项目实施过程中，本单位国家双一流学科和实验室为该成果的顺利实施提供了坚实的学术和科研基础，同时也提供了必要的设备保障和技术支持。提出了基于珠簧链模型的 SPH 多尺度算法，推导了珠簧链模型的构型场演化方程，发展了高效稳定求解构型场演化方程的半隐预估二次校正格式，克服了珠簧哑铃模型描述粘弹性流体相对比较粗糙和不能模拟较宽时间尺度流动问题的缺陷；建立了非等温粘弹性流动问题的 SPH 模型，展现了聚合物熔体注入、流动和冷却的传热传质过程，突破了已有加工模型存在的经验简化局限。

八、完成人合作关系说明

完成人合作关系情况汇总表

序号	合作方式	合作者/项目排名	合作时间	合作成果名称
1	论文合著	许晓阳/1 余鹏/2	2009-至今	(1) A multiscale SPH method for simulating transient viscoelastic flows using bead-spring chain model; 对应主要论文专著 3。 (2) Modeling and simulation of injection molding process of polymer melt by a robust SPH method; 对应主要论文专著 4。 (3) Extension of SPH to simulate non-isothermal free surface flows during the injection molding process; 对应主要论文专著 5。