

充分发展的 QDS 方法二阶格式及其应用

李晓鹏*, 程迪, 齐力, 李龙

(中国科学院力学研究所 高温气体动力学国家重点实验室, 北京 100190)

摘要:介绍了 QDS 方法 Euler 求解器的基本思路, 并从以下三个方面做了改进: (1) 在统计网格宏观量时, 考虑了相邻网格内流动量的梯度, 发展成了二阶格式, 使得在 QDS 算法中的粒子重构和网格宏观量统计都达到二阶格式, 由此为充分发展的二阶格式; (2) 在进行网格宏观量统计时, 提出将按网格进行宏观量统计修改为按粒子位置更新网格宏观量, 减少了对粒子进行遍历的次数, 大大提高了计算效率; (3) 在改进后的二阶格式中引进了斜率限制器, 比较了不同斜率限制器的效果。

关键词: QDS 方法; Euler 求解器; 充分发展的二阶格式; 计算效率; 斜率限制器

中图分类号: O24 **文献标志码:** A **doi:** 10.7511/jslx201304012

1 引言

Bird^[1]发展的 DSMC (Direct Simulation Monte Carlo) 方法, 采用了粒子自由运动和碰撞相解耦的方法, 在模拟 Kn 数较大的稀薄流动时取得了极大的成功。在接近连续区域, 由于碰撞对急剧增加, 采用 DSMC 进行模拟效率较低。1980 年, Pullin^[2]对处于碰撞对较多区域的粒子直接采用当地平衡态的 Maxwell 速度分布, 发展成了 EPSM (Equilibrium Particle Simulation Method) 方法。

然而, 不论是在 DSMC, 还是在 EPSM^[5,10]中, 都要进行大量的随机取样, 而且为了降低宏观量计算中的涨落, 还要进行多次重复计算, 这耗费大量的机时。为此, Albright^[3]在一个网格内采用较少的粒子, 发展了求解 Euler 方程的 QDSMC (Quiet Direct Simulation Monte Carlo) 方法。在 QDSMC 方法中, 通常在 DSMC 和 EPSM 中要通过大量粒子的随机运动逼近的速度分布函数被高精度的 Gauss-Hermite 插值^[12]所代替, 通过精心选取插值多项式的权重和零点, 避免了随机取样过程, 不仅使 QDSMC 算法有很高的精度和计算效率, 而且几乎没有任何统计噪声。

M R Smith^[4]考虑了粒子重构过程中单元格内的梯度, 将 QDSMC 方法推广到二阶, 并根据在

QDSMC 算法中没有随机取样这一特点, 将该方法重新命名为 QDS (Quiet Direct Simulation) 方法。

值得注意的是, M R Smith 仅在粒子重构过程中, 考虑了网格内流场量的梯度, 将 QDS 方法发展到二阶, 在统计网格宏观量时, 仍假设网格内流场量均匀分布, 这大大降低了 QDS 算法的求解精度。本文正是基于这一点, 考虑了在进行网格宏观量统计时网格内的梯度, 发展成了充分发展的二阶格式。此外, 采取了新的计算方案, 显著提高了计算效率。

2 数值方法

2.1 一阶精度的计算格式

标准正态分布 $N(0, 1)$, 可以通过下面的几率密度分布函数定义:

$$p(x) = e^{-x^2/2} / \sqrt{2\pi} \quad (1)$$

从气体动理论可知, 流场量 (质量、动量、能量) 是由速度分布函数求矩^[11]得到的, 那么自然的, 求矩的 Gauss 积分可以由 Hermite 插值多项式来逼近, 即

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (e^{-x^2/2} / \sqrt{2\pi}) f(x) dx \approx \sum_{j=1}^N (\omega_j / \sqrt{\pi}) f(\sqrt{2} q_j) \quad (2)$$

式中 ω_j 和 q_j 分别是 Gauss-Hermite 求积多项式的权重和零点, N 是项数。

一维情况下, 一阶的 QDS 方法可以通过下面

收稿日期: 2012-04-22; 修改稿收到日期: 2012-08-25.

基金项目: 国家自然科学基金重大研究计划重点支持 (91016005);

国家自然科学基金创新群体 (10621202) 资助项目.

作者简介: 李晓鹏* (1987-), 男, 博士生

(E-mail: lxpyfy@163.com).

三个步骤实现^[3]:

(1) 粒子重构:时间步开始,重构网格单元 i 内的 J 个粒子,第 $j=1, \dots, J$ 个粒子的质量、速度和内能分别表示为

$$\begin{aligned} m_{ij} &= \rho_i \Delta x \omega_j / \sqrt{\pi}, \quad v_{ij} = u_i + \sqrt{2\sigma_{vi}^2} q_j \\ \epsilon_{ij} &= [(\xi - \Omega)/2] \sigma_{vi}^2 \end{aligned} \quad (3)$$

式中 Δx 是网格间距, ρ_i , u_i 和 σ_{vi}^2 分别是网格单元 i 处的密度、速度和速度方差, $\sigma_{vi}^2 = RT$, ξ 是总的自由度数, Ω 是模拟的平动自由度数(一维情况下, $\Omega=1$)。

(2) 扩散:网格 i 内粒子位置经过一个时间步长后进行更新:

$$x_{ij}(x + \Delta t) = x_i + v_{ij} \Delta t \quad (4)$$

(3) 网格宏观量统计:假设网格单元 i 内的通量(质量 m_i 、动量 P_i 、能量 E_i) 成均匀分布,那么网格单元 i 处的宏观量可以根据网格中心附近的粒子的质量 m_p 、速度 v_p 、内能 ϵ_p 进行更新:

$$\begin{aligned} m_i &= \sum_p m_p \omega_{pi}, \quad P_i = \sum_p m_p v_p \omega_{pi} \\ E_i &= \sum_p m_p \omega_{pi} \left(\frac{1}{2} v_p^2 + \epsilon_p \right) \end{aligned} \quad (5)$$

由此可以计算网格单元 i 处的密度、速度、温度和压力。 ω_{pi} 为权重系数,假设粒子在相邻网格单元之间均匀分布,可由下式确定:

$$\omega_{pi} = \begin{cases} (x_p - x_{i-1})/\Delta x, & x_{i-1} < x_p \leq x_i \\ (x_{i+1} - x_p)/\Delta x, & x_i < x_p \leq x_{i+1} \end{cases} \quad (6)$$

2.2 二阶精度的计算格式

M R Smith^[4]在对粒子进行重构时,考虑了网格内流动量的梯度,得到式(3)的二阶形式为

$$m_{ij}|_{-\Delta x_{pi,j}} = [\{\bar{\rho}_i - (d\rho/dx)\Delta x_{pi,j}\}/\sqrt{\pi}] \Delta x \omega_j \quad (7)$$

式中 $\Delta x_{pi,j}$ 为网格单元 i 内第 j 个粒子距离网格中心的距离,代表了粒子偏离网格中心后所处当地位置的宏观特性。斜率 $d\rho/dx$ 可根据 MINMOD 限制器^[7]求解。

2.3 充分发展的二阶格式

在传统的 QDS 方法^[3,4,6]中,进行网格宏观量统计时,都是假设粒子所携带的物理量在网格内均匀分布,如图 1 所示。粒子位于网格 $i-1$ 中心与网格 i 中心之间,且距网格 $i-1$ 中心的距离为 x_{pl} 。按照方程(5)计算,网格 i 的权重 $\omega_{pi} = x_{pl}/\Delta x$, 统计的结果为图 1 中竖线表示的阴影部分,此即为传统的 QDS 方法的结果。

然而,相对于 DSMC 方法中通过采用大量粒子进行统计平均,在 QDS 方法中采用极少的粒子,每一个粒子代表了大量的模拟粒子,若仍然假设粒子所携带的物理量成均匀分布会大大降低统计精度。因此,有必要考虑网格间的梯度。对于统计网格 i 上质量的情况,粒子所处位置如图 1 所示。此时,网格内的密度呈线性分布:

$$\rho = s^- x + b \quad (8)$$

式中 s^- 为网格单元 i 与 $i-1$ 之间的斜率。将原点放在粒子所在的位置,网格间通量守恒,则有

$$m_p = \int_{-x_{pl}}^{\Delta x - x_{pl}} \rho(x) dx = \int_{-x_{pl}}^{\Delta x - x_{pl}} (s^- x + b) dx$$

可求得 b , 那么位于 x_{pl} 粒子分配到网格 i 上的质量为

$$m_{pi} = \int_{\Delta x - 2x_{pl}}^{\Delta x - x_{pl}} \rho(x) dx = \omega_{pi} m_p + \frac{1}{2} s^- (\Delta x - x_{pl}) x_{pl}$$

对上式作简单的分析。上式第二项 $\frac{1}{2} s^- (\Delta x - x_{pl}) x_{pl}$ 表示由于网格单元内的梯度造成的附加项,在图 1 中,代表着由横线表示的阴影部分。由此可见,由于这一项的存在,增加了相邻网格间物理量的梯度,从而使计算格式有更好的分辨率。当粒子位于网格 i 与网格 $i+1$ 中心之间时,同理可得

$$m_{pi} = \omega_{pi} m_p - \frac{1}{2} s^+ (\Delta x - x_{pr}) x_{pr}$$

式中 s^+ 为网格单元 i 与 $i+1$ 之间的斜率, $x_{pr} = x_{i+1} - x_p$ 。由此得到式(5)的二阶形式为

$$m_i = \begin{cases} \sum [m_p \omega_{pi} + \frac{1}{2} s^- (\Delta x - x_{pl}) x_{pl}] & x_{i-1} < x_p \leq x_i \\ \sum [m_p \omega_{pi} - \frac{1}{2} s^+ (\Delta x - x_{pr}) x_{pr}] & x_i < x_p \leq x_{i+1} \end{cases} \quad (9)$$

在实际应用中,为了避免网格单元间梯度过大造成的震荡,一般引入斜率限制器^[7],即在 s^- 和 s^+ 前面乘以斜率限制器。动量和能量统计可以通过类似的方法计算。

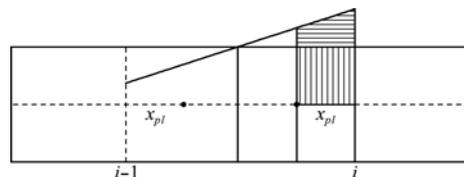


图 1 网格点上宏观物理量统计示意图

Fig. 1 Schematic showing the way to update the grid properties from the individual particle

2.4 提高计算效率

2.1~2.3 节都是对网格进行遍历,在每一个网格处,再对全部的粒子进行遍历。如果总的模拟粒子数量为 N ,总的网格数目为 M ,那么在一个时间步内需要对粒子进行遍历的次数是 $M \times N$ 。而这其中大部分的遍历是重复和无用的。对一维问题而已,如图 1 所示,其实只要将粒子 $j=1,2,3,\dots,N$ 的质量、动量、能量向粒子所处位置的左右两个网格分配即可。令粒子 j 的坐标为 x_p ,且该粒子位于网格单元 $i-1$ 与网格单元 i 之间,那么 j 粒子分配到两个网格单元上的质量分别为

$$\begin{cases} m_{i-1,j} = m_j \omega_j, & i > 1 \\ m_{i,j} = m_j(1.0 - \omega_j), & i < M \end{cases}$$

动量和能量通量可以通过类似的方法获得。

按照粒子的位置进行网格宏观量的更新,在一个时间步长内需要遍历的次数即为总的粒子数目 N ,由此可以大大提高计算效率,计算结果如图 5 所示。

3 数值验证

3.1 一维激波管

激波管问题中包含激波、接触间断,又包含膨

胀波,流动结构十分复杂,可以充分验证前面发展的充分发展的二阶格式的有效性。

计算中的一些参数取值:气体比热比取 1.4,初始时,膜片置于 $x=0.5$,左边密度为 1.0,压力为 1.0;右边密度为 0.125,压力为 0.1, $t=0$ 时膜片破裂。图 2 给出了 $t=0.25$,网格数目为 1000,粒子重构时每一网格单元内粒子数目为 5 的相关计算结果。从图 2 可以看出,如果只考虑粒子重构时网格单元间的梯度,由此构造的二阶格式(MR Smith 的解),相比于一阶格式,其精度的提高是十分有限的,仅仅在对膨胀波头部的描述上稍好于一阶格式。但是,在 QDS 第三步中,即统计网格宏观量时,考虑网格单元内的流场量梯度,由此发展的充分发展的二阶格式,在膨胀波描述、接触间断内,以及激波的位置捕捉上,都有较大的提高,是真正的二阶格式。这也说明,QDS 方法精度的提高,在于统计网格宏观量时采取高精度的计算方法。

图 3 给出了采用本文发展的二阶格式,对方程 (9)采用不同的斜率限制器得到的计算结果。从图 3 可以看出,斜率限制器对计算结果的影响很小,这几种斜率限制器都可以精细的描述激波管内

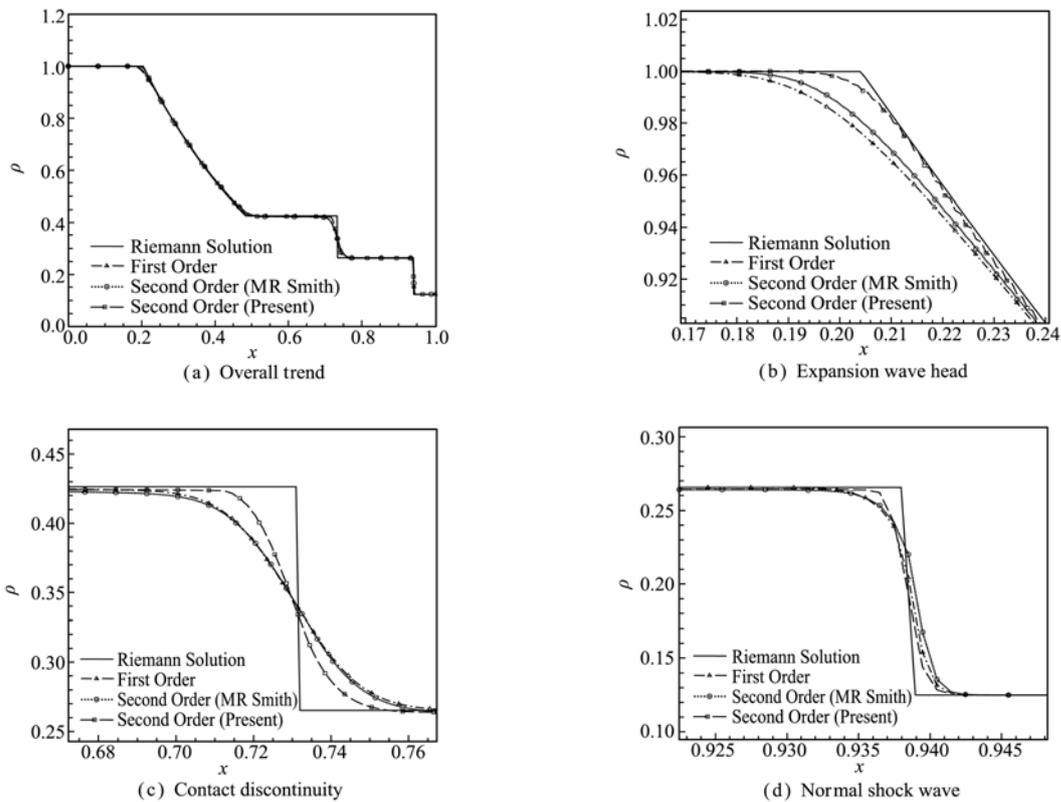


图 2 激波管内的密度分布:一阶格式、MR Smith 的二阶格式、本文的二阶格式与 Riemann 解的对比
 Fig.2 Shock tube density profile as generated by QDS compared to the Riemann solution

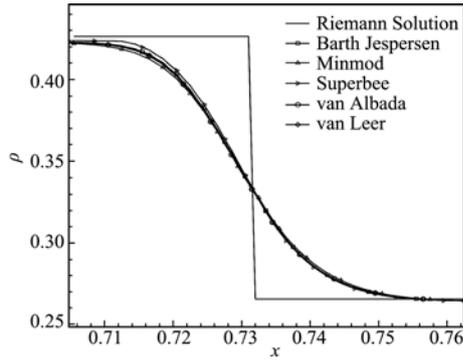


图3 激波管内的密度分布:不同斜率限制器的结果
Fig.3 Shock tube density profile as generated by QDS (second-order) with different slope limiters

的流动状况。但其中,MINMOD 斜率限制器依旧保持了耗散相对较大的特点,而 Superbee 斜率限制器则具有更好的间断分辨能力,对激波位置的描述更加优秀。

3.2 二维方钝头绕流

将 QDS 算法向二维推广是显而易见的,此时模拟的平动自由度 $\Omega = 2$, 每一个网格内的粒子数目为 $J \times J$ 。图 4 给出了来流马赫数 3.0 时方钝头绕流的压力云图,由于问题的对称性,只计算了上半部分。从图 4 可以看出,QDS 算法可以清晰的捕捉到方钝头前的脱体激波,在激波后,压力迅速升高。此外,在方钝头绕流的对称线上近似是正激波,可以将 QDS 算法得到的数值解与正激波理论解相比较。表 1 给出了相关的结果。在表 1 中,波

前压力,也即自由来流压力为 1.0, P_2 为激波后的压力, ϵ 为波后和波前的压力比, τ 为根据正激波关系式得到的计算值, Φ 为 ϵ 与 τ 的相对误差。由表 1 可知,对于不同的来流马赫数,根据一阶格式得到的计算结果与正激波理论解相差在 5% 左右,本文发展的二阶格式进一步提高了计算精度,将误差控制在 3% 左右。

图 5 给出了本文改进后的算法在计算效率方面的表现。一维激波管采用了 1000 个网格,计算了 1000 个时间步;二维方钝头采用了 50×200 网格,计算了 100 个时间步。从图 5 可以看出,本文提出的新方案使得计算效率大为提高,特别是对于二维流动,网格数目较多,问题更为复杂,计算效率提高的意义是显著的。

3.3 前台阶流动

对于更加复杂的前台阶流动,如图 6 所示。采用本文构造的二阶格式,网格划分为 100×400 , 每网格 5×5 个粒子,得到了流场密度云图的时间演变。从图 6 可以看出,本文发展的二阶格式很好的捕捉到脱体激波、激波在壁面上的反射,以及激波相互作用形成的驻激波,体现出了良好的细节刻画能力,流场解也相当的平滑。此外,在计算中 QDS 方法也表现出极高的计算稳定性,体现了 QDS 算法在处理复杂流动问题中的能力。

表 1 不同来流马赫数下,一阶格式和本文发展的二阶格式计算结果对比
Tab.1 Results comparison between the first and second order scheme of QDS method with different Ma number

Ma		3.0	4.0	5.0	6.0	7.0	8.0
	τ	10.33	18.50	29.00	41.83	57.00	74.50
一阶格式	P_2	10.08	17.42	27.52	39.78	54.47	71.48
	Φ	-2.42%	-5.84%	-5.10%	-4.90%	-4.44%	-4.05%
二阶格式	P_2	10.25	18.10	28.07	40.85	55.91	72.67
	Φ	-0.77%	-2.16%	-3.21%	-2.34%	-1.91%	-2.46%

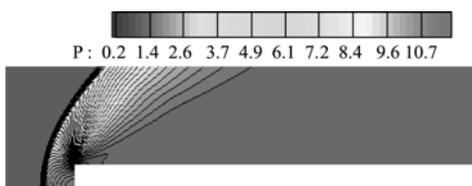


图4 采用二阶格式计算的自由来流 Ma 为 3.0 时二维方钝头绕流的压力云图
Fig.4 Contours of pressure obtained by second-order QDS for Ma 3.0 flow over a square blunt

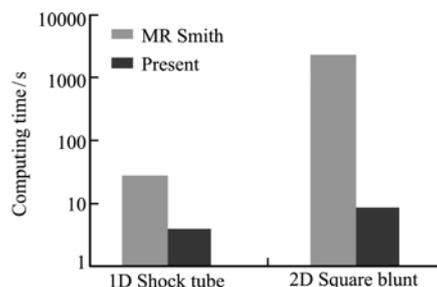


图5 计算时间比较(单位:s)
Fig.5 Computing efficiency compare (unit:s)

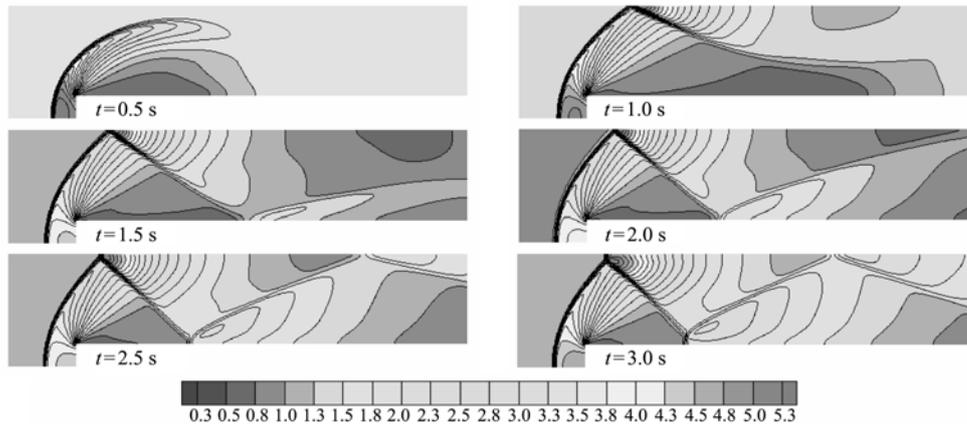


图6 二阶格式得到的来流马赫数为3.0时前台阶流动密度云图的时间演变

Fig. 6 Contours of density obtained by second-order QDS for Mach 3.0 flow over a forward facing step

4 结 论

以上分析,可以得到以下结论。

(1) 本文成功的构造了基于网格宏观量统计的二阶格式,相比已有的基于粒子重构过程的二阶格式,精度有很大的提高,是充分发展的二阶格式。

(2) 新的计算方案可以减少对粒子进行遍历的次数,大大提高了计算效率,特别是对于网格数目较多或者二维、三维的计算,其机时的节省是相当可观的。

(3) 斜率限制器对二阶格式影响较小,但采用Superbee斜率限制器有助于提高分辨率。

(4) 本文构造的充分发展的二阶格式体现出了在处理复杂流动问题上的适用性,有很强的流场细节刻画能力。

参考文献(References):

- [1] G A Bird, *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows* [M]. Oxford: Clarendon Press, 1994.
- [2] D I Pullin, Direct simulation methods for compressible ideal gas flow [J]. *J. Comput. Phys.*, 1980, **34**(2): 231-244.
- [3] B J Albright, D S Lemons, M E Jones, et al. Quiet direct simulation of Eulerian fluids [J]. *Phys. Rev. E*, 2002, **65**(5): 055302-1.
- [4] M R Smith, H M Cave, Wu J S, et al. An improved quiet direct simulation method for eulerian fluids using a second-order scheme[J]. *J. Comput. Phys.*, 2009, **228**(6): 2213-2224.
- [5] M N Macrossan. Some Developments of the Equilibrium Particle Simulation Method for the Direct Simulation of Compressible Flows[R]. NASA Contractor Report, 1995: 198175.
- [6] W Peter. Quiet direct simulation monte carlo with random time steps[J]. *J. Comput. Phys.*, 2007, **221**(1): 1-8.
- [7] Marsha Berger, Michael J Aftosmis, Murman Scott M Murman. Analysis of slope limiters on irregular grids [A]. Reno: 43rd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit[C], 2005: AIAA 2005-0490.
- [8] Wang W L, Iain D Boyd. Hybrid DSMC-CFD simulations of hypersonic flow over sharp and blunted bodies[A]. Orlando: 36th AIAA Thermophysics Conference[C], 2003: AIAA 2003-3644.
- [9] Fan J, Shen C. Statistical simulation of low-speed rarefied gas flows[J]. *J. Comput. Phys.*, 2001, **167**(2): 393-412.
- [10] 陈伟芳, 吴明巧, 任 兵. DSMC/EPSC混合算法研究[J]. *计算力学学报*, 2003, **20**(3): 273-278. (CHEN Wei-fang, WU Ming-qiao, Ren Bing. On study of hybrid DSMC/EPSC method[J]. *J. Comput. Mechanics*, 2003, **20**(3): 273-278. (in Chinese))
- [11] 沈 青. 稀薄气体动力学[M]. 北京: 国防工业出版社, 2003. (SHEN Qing. *Rarefied Gas Dynamics* [M]. Beijing: National Defense Industry Press, 2003. (in Chinese))
- [12] 数学手册编写组. 数学手册[M]. 北京: 高等教育出版社, 2004. (Compiling Group of Handbook of Mathematics. *Handbook of Mathematics* [M]. Beijing: Higher Education Press, 2004. (in Chinese))

A fully improved second order scheme for QDS method and its application

LI Xiao-peng*, CHENG Di, QI Li, LI Long

(State Key Laboratory of High-temperature Gas Dynamics, Institute of Mechanics,

Chinese Academy of Science, Beijing 100190, China)

Abstract: The QDS (Quiet Direct Simulation) method for Euler fluid is introduced. As the most important part, the current method extends the previous Euler solver developed by Albright and M. R. Smith mainly by three aspects: (1) The gradients (density, temperature, velocity) are calculated when updating the grid properties of mass, momentum and energy from the individual particle at the third step in the QDS method, hence a fully improved second order scheme. (2) A kind of new process for updating the grid properties from the individual particle is developed, which cut down the times for the most part to seek the total particles, thus improving the computing efficiency signally. (3) Several slope limiters are employed in the second scheme and their performances are tested.

Key words: QDS method; Euler solver; a fully improved second order scheme; computing efficiency; slope limiters

~~~~~  
(上接第 531 页)

## Modeling and analyzing of rubber layers for laminated rubber bearings: cracking mechanism and experiment

CHEN Shi-cai<sup>\*1,2</sup>, YAN Wei-ming<sup>1,2</sup>, ZHANG Zhi-qian<sup>1</sup>, CHEN Yan-jiang<sup>1,2</sup>

(1. Beijing Key Laboratory of Earthquake Engineering and Structural Retrofit,  
Beijing University of Technology, Beijing 100124, China;

2. The Key Laboratory of Urban Security and Disaster Engineering, Ministry of Education,  
Beijing University of Technology, Beijing 100124, China)

**Abstract:** In order to investigate the tension performance and failure mechanism of laminated rubber bearings under tensile loading, The developed tension model and the stress and deform expressions developed for the tensile rubber layer are used to analyze the tension performance, the influence of the shape factor on the stress distributions and deform rules is discussed especially for the deformed shapers of the free edges of the rubber layer. Based on the theory results of the model, the theory of cracking energy is applied to analyze the distributions of cracking energy density and gradient direction. The crack initiation, crack propagation direction and failure mechanism of the rubber layers are investigated. Finally, the test on the laminated rubber bearings under tensile loading is carried out and the results show that the crack energy method is feasible and reasonable for analyzing failure mechanism of the tensile rubber layer.

**Key words:** Laminated rubber bearing; tension property; cracking energy; failure mechanism