

DSMC 位置元方法中的表面元的程序标识及 分子表面反射确定论判据^{1), 2)}

樊 菁 彭世钰 刘宏立 沈 青

(中国科学院力学研究所, 北京 100080)

陈黎明

(清华大学工程力学系, 北京 100084)

摘要 在直接模拟 Monte-Carlo(DSMC) 方法的位置元方法中, 精确描述物面形状、准确判断分子是否与某一表面元相撞, 直接关系到气动力热的计算精度, 是该方法需要解决的关键问题. 为解决此问题, 给出了发展的 DSMC 方法在计算三维过渡领域的位置元方案的两个改进. 首先, 编制了一个对所有外形描述均可做到标识表面元及计算表面元面积等工作的通用程序, 并通过两个例子验证了该程序的快速性和有效性; 其次, 发展了分子表面反射确定论判据, 代替了原有的几率判据, 与圆球自由分子流准确解和过渡领域贴体网格 DSMC 结果进行比较, 证明了上述判据的有效性.

关键词 过渡领域流动, 位置元方法, 表面元程序标识, 分子表面反射确定论判据

引 言

直接模拟 Monte Carlo(DSMC) 方法是在计算机中追踪大量分子的运动、碰撞、内能变化及与壁面的相互作用等等, 在模拟中要保证计算机中所追踪的过程能够再现真实流动的过程. 在计算机中引入与流动中物理时间同步的时间(时钟), 同时记录分子的位置、速度及内能, 它们随时间因分子的运动、相互碰撞及与壁面的碰撞而改变. 模拟计算是一个非定常过程, 定常过程是作为这一过程的定常化后的状态而得到. 在分子初始位形(位置和速度)的布置, 有关分子碰撞和碰撞后果, 与物体表面的相互作用和后果等方面, 都要靠随机数的取样来决定. 这一方法由 Bird 提出, 后发展到模拟二维、三维的几何复杂的过渡领域问题, 并包含了流动中的复杂的物理化学过程(参见文献 [1]).

在求解过渡领域流动问题的众多方法中, 目前只有 DSMC 方法是可以模拟这一领域三维真实气体流动的方法. 最近的 DSMC 计算^[2] 已可以较准确地与航天飞机飞行数据相符; 该方法的强有力还从激波结构的细观水平的研究中得到了证明. DSMC 方法已被证明是开拓流体力学前沿研究的重要工具.

由于 DSMC 方法在模拟复杂过渡领域流场的成功, 编制 DSMC 方法的通用程序以模拟任意复杂外形绕流流场的任务提上了日程. 国际上解决这一任务的处理方法可以区分为两大类.

1999-01-25 收到第一稿, 1999-04-04 收到修改稿.

1) 国家自然科学基金资助项目(19772059).

2) 谨以本文纪念林同骥院士 80 寿辰. 本文作为沈青的报告“稀薄气体过渡领域三维绕流位置元算法新方案”的一部分, 在林同骥先生诞辰八十周年纪念学术报告会上宣读(1998 年 12 月 14 日).

一类是由 Bird 提出的位置元算法, 以相同尺寸的规则立方体为基本网格, 已在 NASA 用来模拟全尺寸航天飞机绕流的过渡领域流场^[2]. 另一类方法是利用非结构适体网格的方法, 流场的网格依近体处物形轮廓而延伸形成(参见文献[3]). 在第一类位置元算法中, 每个网格由若干亚网格构成, 每个亚网格又由一些位置元立方体构成, 而物体表面则由边界元(与物体表面相交的位置元)的表面代替. 整个流场中布满相同尺寸的规则立方体, 运动分子的位置可以由一个整数表示, 这个整数由简单的代数运算得到, 可以用来确定何时发生分子与物面的碰撞. Bird 的算法有很高的效率, 但是由于物体表面的描述不够精确, 而可能产生很大的计算误差. 模拟结果显示, 在直径为 1.6 m 的圆球高超声速自由分子绕流问题中, 当入射流条件为 $T_\infty = 500\text{ K}$, $V_\infty = 7500\text{ m/s}$, 壁面温度为 $T_w = 350\text{ K}$ 时, 位置元边长分别取 6 cm 和 9 cm 情况下, 算得阻力系数分别为 2.293 和 2.362, 与精确值 2.087 相比, 误差分别为 10% 和 18%. 利用另一类方法即适体网格的方法时, 物体表面得到较精确的描述, 阻力系数等计算可以得到明显的改善, 但此类方法在追踪分子的运动时却要考虑不同坐标区域间的交接和变换, 算法是复杂烦琐而费时的, 在处理分子运动时其计算时间约为位置元方法所需时间的 2~10 倍. 这样, 在国际上已有的两类 DSMC 通用算法中, 位置元方法效率高但描述物形不够精确, 非结构适体网格方法则提高了精度, 但效率有显著下降.

沈青等人^[4,5]发展了通用 DSMC 模拟的一种新的位置元方法, 它可以简捷地确定分子的位置, 同时在此方法中通过确定张于每个表面位置元立方体上的物形表面元, 使得物面的描述更加精确, 改善了气动力与传热计算的精度. 可以说, 这一方案兼具了以上两类通用程序的优点而克服了它们各自劣势的一面, 即它保留了原始位置元方法在追踪分子运动时高效率的优点, 同时较准确地描述了绕流物体的外形而能给出流场绕流及气动计算的足够精度的模拟结果.

分子在表面如何反射对于气体对物体产生的力和热的效应起着举足轻重的作用. 传统上采用的完全漫反射模型或由漫反射与镜面反射组合的 Maxwell 类型反射模型, 不能反映许多分子表面实验得到的成果. 在利用已有实验结果方面, 有所谓 HSN 模型的尝试(参见文献[6]), 而在利用表面反射的互易性原理提出反射模型并应用于 DSMC 模拟方面则发展了所谓 CLL 模型(参见文献[7, 8]). 具体在模拟中实现以上模型均需要针对具体的表面材质和表面状态并依赖实验的结果, 所以在本模拟中仍沿用完全漫反射模型. 由于分子入射(和反射)位置是影响反射效应的重要与基本的因素, 所以本文发展了分子表面反射的确定性判据, 实际上是准确地确定了分子在哪一表面元上反射.

在 DSMC 位置元算法通用程序中, 编制表面元标识的程序是个繁复的任务, 在过去的方案中是针对不同外形分别编制的(参见文献[4, 5]). 希望针对各种不同的外形表示方法能由一个通用程序来完成, 这是本文的又一内容.

这样, 本文中给出了我们发展的 DSMC 方法在计算三维过渡领域的位置元方案的两个改进. 首先分子从某一表面元上反射的几率判据由确定论判据代替, 再者就是编制了一个对所有外形描述均可做到标识表面元及计算表面元几何特性的通用程序. 在 2、3 节阐述这两方面的改进, 在第 4 节中给出一些模拟结果.

1 分子表面反射确定论判据

在 Bird 的位置元方案中, 认为当分子与位置元立方体的某一特定面相交时即发生分子与

表面间的碰撞. 然而, 正如引言所述, 当物体表面由位置元表面替代时, 会出现导致不能精确计算气动力与加热性质的偏差.

除此之外, 计算精度还受分子表面反射判据的影响. 我们以前所用的是几率判据^[3], 然后在文献 [4] 中通过允许分子掠过表面对其进行了修正. 上述两种判据在计算精度方面均有不同程度的改善. 但是当使用实型数记录分子位置并依赖于物体外形的精确描述时, 运动分子与物体表面的某一部分发生碰撞是确定的事件, 而几率判据只能近似地表述它. 并且在应用几率判据时, 还发现计算的精度依赖于位置元的尺度.

在一个时间步长内, 大量模拟分子中仅会有少部分与物体表面相碰, 因此一个更加精确的判定分子与表面碰撞是否发生的方法将在不会太大影响计算效率的前提下确保位置元算法的精度. 由于表面元的尺度很小, 在表面元内部的物体表面可以看作是一个平面, 称之为物形截面(见图 1). 利用解析几何, 很容易得到物形截面的法线方向 (α, β, γ) 及表面元几何中心到物形截面上的距离 d . 当分子与位置元立方体的某一表面相交时, 将要记录交点 (x_s, y_s, z_s) , 分子运动速度 (u, v, w) 及本次时间步长中的剩余时间 Δt_r . 由 (x_s, y_s, z_s) , (u, v, w) 及物体表面的几何参数, 很容易算出分子到达表面元各侧面所用的时间 $\Delta t_x, \Delta t_y, \Delta t_z$ 以及分子到达物形截面所用时间 Δt_w

$$\Delta t_w = \left| \frac{(x_s - x_c)\alpha + (y_s - y_c)\beta + (z_s - z_c)\gamma + d}{u \cdot \alpha + v \cdot \beta + w \cdot \gamma} \right|$$

其中 x_c, y_c, z_c 是所考虑表面元中心的坐标. 记 $\Delta t_x, \Delta t_y, \Delta t_z$ 三者中最小的为 Δt_s , 则分子反射的确定论判据是: 当且仅当

$$\Delta t_w \leq \Delta t_s, \quad \Delta t_w \leq \Delta t_r$$

时, 分子从表面元上反射.

2 表面元的程序标识

对于各种情况的物体外形表述, 编制表面元标识的程序在 DSMC 的位置元算法中都是十分费时的, 在以前是通过对于不同外形分别进行的, 是一个很复杂而费力的任务^[4,5]. 那么能否编写一个通用程序来完成所有的表面元标识呢? 计算包括表面元面积 (ΔS) 在内的许多参数不构成什么困难. 本文做了一个成功的尝试, 并得到了满意的结果. 此方法中, 表面元标识过程包括两步, 即表面元的寻找和必要几何参数的计算.

2.1 表面元的寻找

在这个通用程序中, 任何外形的初始描述都将进行以下重新安排: 首先沿流向将表面分成条带, 再将每个条带细分为小的平面三角形, 每个三角形由其顶点表述. 这样, 表面元立方体与物体表面的交截就可以很容易地作为一般情况下直线与三角形的交截处理. 事实上, 寻找表面元的过程就是确定这种交截的过程, 描述如下: (1) 确定某位置元是否落入“物形立方体”区域, 该区域定义为包含物体外形轮廓的最小长方体区域; (2) 确定该位置元的各条棱是否与构成物体的平面三角形相交; (3) 分别标出各交点并将表面位置元上所有交点连结.

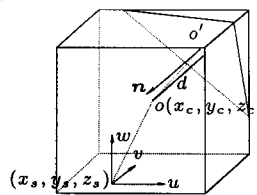


图 1 分子反射确定论判据图示

Fig.1 Illustration of molecular reflection deterministic criterion

2.2 必要几何参数的计算

所谓必要的几何参数包括: (1) 方向参数; (2) 物形截面面积; (3) 位置元中心到物形截面的距离; (4) 表面元位于物体外形之外的那部分体积, 也称“截断体积”. 这里, 参数 (1) 用于分子反射计算, 并与参数 (3) 一起确定分子在特定表面元上的反射, 参数 (2) 用于物体表面上各物理特征的分布计算, 参数 (4) 用于计算分子与物面之间的碰撞频率.

用上面所定出的那些交点构成一系列三角形, 它们构成了物形截面, 从中很容易计算得到方向参数.

为计算物形截面面积, 我们用加权平均法定义了物形截面的重心. 物形截面就可由该重心与方向参数确定. 此截面面积可用与文献 [5] 相同的方法得到. 位置元中心到物形截面的距离也很容易得出.

“截断体积”可以由数值积分得到. 在物形截面的法线方向上, 可以在有限距离内构成一系列物形截面, 这些截面将用于数值积分计算“截断体积”.

3 结果与讨论

3.1 表面元标识程序的应用

在图 2(球体) 和图 3(类 Hermes 宇宙飞行器外形) 中显示了表面元标识程序的一些应用. 它们都是用通用的标识程序完成的, 所有的例子都验证了该程序的快速性和有效性.

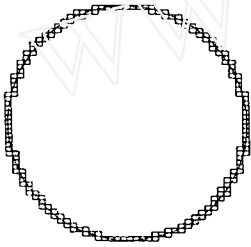


图 2 圆球表面元

Fig.2 Surface elements of a sphere

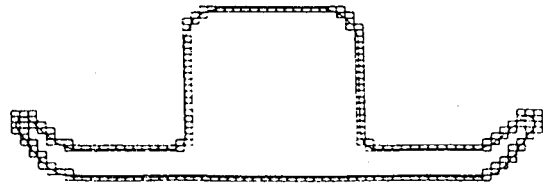


图 3 类 Hermes 模型近尾处表面元

Fig.3 Surface elements near the tail of quasi Hermes model

3.2 分子反射确定论判据的应用

(1) 自由分子圆球绕流 我们实现了自由分子圆球绕流中球面压力分布与热流量分布模拟结果与精确结果的比较. 精确解取自文献 [1] 中高超声速自由分子流结果. 计算中取了边长不同的位置元, 它们的边长分别为 0.031 m, 0.062 m, 0.093 m. 圆球直径 1.6 m. 入射流条件为: $V_\infty = 7500 \text{ m/s}$, $\rho_\infty = 8.23 \times 10^{-9} \text{ kg/s}$, $T_\infty = 500 \text{ K}$. 壁面温度 T_w 为 350 K. 我们计算的结果表明模拟结果与精确解符合得很好. 而且在引入确定论判据之后, 模拟结果对位置元边长的大小不再敏感.

(2) 过渡领域圆球绕流 在此计算中, 引入与文献 [9] 相同的来流条件, 同时采用了 $128 \times 128 \times 128$ 位置元系统的自适应网格结构 (见图 4) 及其它的数值算法 [10]. 图 5 显示了高度为 130 km, $M_\infty = 15.5$, $Re_\infty = 3.8$ 时的计算结果. 可以看出沿驻点线密度与温度分布的模拟结果与 Dogra 等人的结果 [9] 相一致. 值得一提的是 Dogra 的计算中用的是适体网格系统, 它会具有一些同非结构网格类似的困难.

(3) 过渡领域类 Hermes 模型绕流 此计算执行条件与文献 [5] 中的相同, $\rho_\infty = 7.96 \times$

10^{-6}kg/m^3 , $v_\infty = 7500\text{m/s}$, $T_\infty = 181\text{K}$, $T_n = 350\text{K}$. 但其模拟区域变为 $192 \times 192 \times 192$ 位置元系, 内部物形区位置元系大小为 $146 \times 30 \times 66$. 图 6 显示了模型表面的模拟热流量分布.

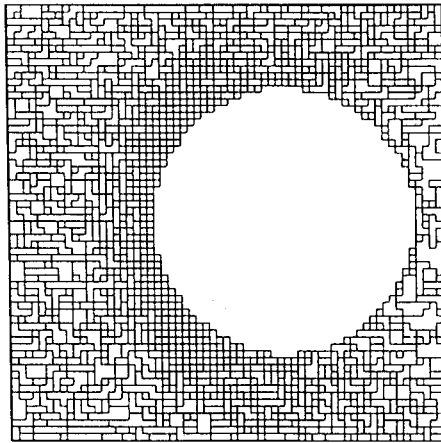


图 4 过渡领域圆球绕流自适应网格结构

Fig.4 Self-adapted grid structure around a sphere in transitional flow

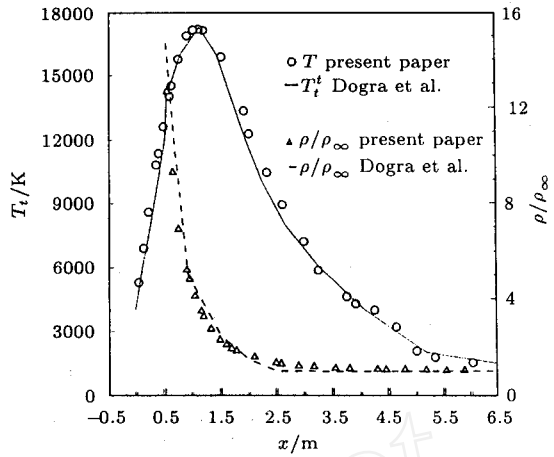


图 5 130 km 处沿圆球驻点线密度与温度分布

Fig.5 Density and temperature distributions along the stagnation line of a sphere at altitude of 130 km

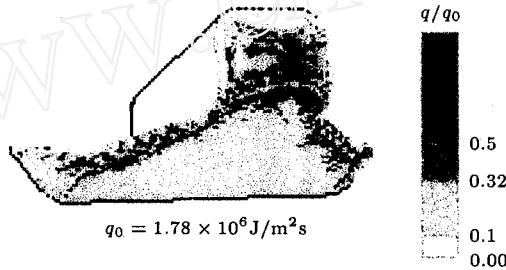


图 6 类 Hermes 模型表面模拟热流量分布

Fig.6 Simulated heat flux distribution on the body surface of model quasi Hermes space plane

基于以上所给的结果, 可以认为本文所提出的两处改进在改善我们位置元方案的效率和精度上有令人满意的结果, 并将有助于位置元算法在工程计算中的普及应用.

参 考 文 献

- 1 Bird GA. Molecular Gas Dynamics and Direct Simulation of Gas Flows. Oxford: Clarendon Press, 1994
- 2 Bird GA. Application of the DSMC method to the full shuttle geometry. AIAA Paper 90-1692. 1990
- 3 Laux M, Fasoulas S, Messerschmid EW. Development of a DSMC code on planar unstructured grids with automatic grid adaptation. AIAA Paper 96-2053. 1996
- 4 沈青, 樊菁, 胡振华, 徐晓燕. 过渡领域三维绕流直接统计模拟位置元法的一种新方案. 空气动力学报, 1996, 14(3): 295~303
- 5 Shen C, Fan J, Hu Z, Xu X. A new versions of position element algorithm of DSMC in calculation of 3D transitional flows. In: Shen C ed. Rarefied Gas Dynamics 20. Beijing: Peking University Press, 1997. 162~167
- 6 Hurlbut FC. Gas surface interactions: recent observations and interpretations. In: Shen C, ed. Rarefied Gas Dynamics 20. Beijing: Peking University Press, 1997. 355~367

- 7 Cercignani C, Lampis M. Kinetic models for gas-surface interactions. *Transport Theory and Statistical Physics*, 1971, 1: 101~114
- 8 Lord RG. Some extensions to the Cercignani-Lampis gas-surface scattering kernel. *Phys Fluids*, 1991, A3: 706~710
- 9 Dogra VK, Wilmoth RG, Moss JN. Aerothermodynamics of a 1.6 m-diameter sphere in hypersonic rarefied flow. AIAA Paper 91-0773. 1991
- 10 樊菁, 沈青, 刘宏立, 陈黎明. 直接统计模拟位置元方法中的分子表面反射确定论判据. 空气动力学报, 待发表

PROGRAM MARKING OF SURFACE ELEMENTS AND THE DETERMINATION OF MOLECULAR SURFACE REFLECTION IN POSITION ELEMENT ALGORITHM OF DSMC METHOD ^{1),2)}

Fan Jing Peng Shiliu Liu Hongli Shen Ching
(*Institute of Mechanics, CAS, Beijing 100080, China*)

Chen Liming

(*Department of Engineering Mechanics, Tsinghua University, Beijing 100084, China*)

Abstract In the position element algorithm of DSMC, the crucial questions to be solved are the exact description of body surface configuration and precise determination whether a molecule comes into collision with a certain surface element. Those issues are directly related to the accuracy in calculation of aerodynamic force and heating. In order to solve these questions, two innovations concerning the improvement of our position element version in the calculation of three-dimension transitional flow by the DSMC method are given in this paper. First a general program is compiled which accomplishes all the work of marking the surface elements and calculating the element surface areas and other surface characteristics for any presentation of the body configuration, with two examples verifying its speediness and validity. Then, the deterministic criterion for a molecule to reflect on a certain surface element, instead of a probabilistic one, is developed. The validity of above-mentioned criterion is checked by comparison with the accurate solution of free molecule flow around a sphere and the results of DSMC calculation by using the body fitted grids in transitional flow.

Key words transitional flows, position element algorithm, program marking of surface elements, deterministic of molecular surface reflection

Received 25 January 1999, revised 4 April 1999.

1) The project supported by the National Natural Science Foundation of China.

2) In memory of academician Lin Tongji's 80 anniversary. This paper as a part of Shen Chin's report "New version of position element algorithm of calculation of 3-D transitional flow of rarefied gases" was presented at the academic session in commemoration of Lin Tangji's 80 anniversary