

三维稀薄气体流动 DSMC 位置元新方案 混合网格算法的验证

刘宏立 樊菁 沈青

(中国科学院力学研究所,北京 100080)

摘要 本文发展了直接模拟蒙特卡罗(DSMC)方法位置元新方案混合网格算法,提出了新的表面元标识方法,可以直接、准确地标识并记录物面在表面元的分布情况。本文利用嵌入了该方法的位置元通用程序模拟了高超声速圆球绕流,给出了阻力系数随稀薄程度的变化曲线以及不同雷诺数下沿驻点线的流场密度分布;同时模拟了羽流冲击平板问题,给出了有背景压力下平板表面的压力、剪切力和热流分布。模拟结果与实验结果符合很好,验证了该方案在模拟三维稀薄气体流动时的有效性和精确性。

关键词 位置元新方案 表面元标识 混合网格算法 稀薄气体流动

1 引言

直接模拟蒙特卡罗(DSMC)方法^[1]是在计算机中追踪大量模拟分子的运动、碰撞、内能变化及与壁面的相互作用等等,这些模拟分子的位置坐标、速度分量以及内能都存储在计算机中,并且因分子的运动、分子与边界的碰撞以及分子之间的碰撞而随时间不断地改变。模拟过程中时间参数与真实流动中的物理时间等同,所有的计算都是非定常的,定常流状态可以作为非定常流的一个长时间的状态而得到。

在求解过渡领域流动问题的诸多方法中,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。网格方案是决定该方法模拟结果的有效性和精确性的重要因素。Bird 提出的位置元算法^[2,3]与无结构网格算法^[4]相比较,追踪分子的效率要高得多,但是往往不能准确地反映物体表面的真实情况。我们发展的位置元新方案^[5,6]采用混合网格算法,其追踪分子的效率与 Bird 位置元算法相当,同时使用无结构网格细致描述物体表面,保证了计算结果的高精度。

本文提出了新的表面元标识方法,具备有效性和通用性。利用嵌入了该方法的位置元通用程序,本文模拟了滑流区、过渡区和自由分子流区高超声速圆球绕流,并将阻力系数和密度分布的模拟结果与自由分子流准确解及实验数据^[7,8]进行比较;同时本文模拟了三维羽流冲击平板问题,将平板表面的压力分布、剪切力分布和热流分布的模拟结果与实验结果^[9,10]进行比较。计算结果与实验结果的良好符合证明了 DSMC 位置元新方案混合网格算法在模拟三维稀薄气体流动时是有效且精确的。

2 表面元标识

表面元标识是实现位置元新方案的基本步骤。它直接标识、记录物面在表面元的分布情况,并且很容易与分子表面反射确定论判据^[11]相结合,方便地嵌入基于位置元新方案的三维稀薄气流通用程序。表面元标识方法实现如下:

- 1) 沿流向将物体分为等间距的立面,以等角距平均分布每一个立面等值线上的点(定义为型值点);
- 2) 将相邻立面等值线上的型值点依次连接为三角形(定义为物面三角形),所有物面三角形之间不允许有任何重叠;
- 3) 将整个计算区域划分成均匀的矩形网格(定义为位置元);
- 4) 将物面三角形和位置元分别编号,当某一物面三角形与某一位置元满足以下条件时,称该物面三角形与该位置元关联:
 - a) 该位置元内部至少包含某一物面三角形的一个顶点;
 - b) 当条件 A 不被满足时,该位置元至少有一个面与某一物面三角形的至少一条边相交;
 - c) 当条件 A、B 均不被满足时,该位置元至少有一条棱与某一物面三角形相交;
- 5) 将满足 4) 中任一条件的位置元定义为表面元,并且记录与该表面元关联的三角形的编号和总数;
- 6) 应用分子表面反射确定论判据^[11]确定分子与表面元之间的碰撞。

3 计算模型

将本文建议的表面元标识方法嵌入我们的位置元通用软件^[12],采用变径刚球(VHS)模型^[13]描述分子间相互作用;按照 Larsen - Borgnakken 模型^[14]进行分子碰撞后的平动能、转动能和振动能分配,用奇异分布函数取样法^[15]处理振动分配函数的奇异性;利用随机取样频率法^[16]计算分子碰撞频率。

4 结果与检验

4.1 高超声速圆球绕流

4.1.1 自由分子流

在位置元通用软件中^[12],将处理分子碰撞过程的子程序屏蔽,所模拟的即为自由分子流。自由分子流条件下,入射分子在圆球表面形成的压力和热流分布为^[1](见图 1)

$$\frac{2p_i}{\rho_\infty u_\infty^2} = \frac{s \cos\theta \exp(s^2 \cos^2\theta) + \sqrt{\pi} \{1 + \operatorname{erf}(s \cos\theta)\} (0.5 + s^2 \cos^2\theta)}{\sqrt{\pi} s^2} \quad (1)$$

$$\frac{2q_i}{\rho_\infty u_\infty^3} = \frac{(s^2 + 2) \exp(-s^2 \cos^2\theta) + \sqrt{\pi} s \cos\theta (s^2 + 2.5) \{1 + \operatorname{erf}(s \cos\theta)\}}{\sqrt{\pi} s^3} \quad (2)$$

其中 ρ_∞, u_∞ 为来流密度和速度; $s = u_\infty / c_m, c_m$ 是分子最可几热运动速度; θ 是物面法向和来

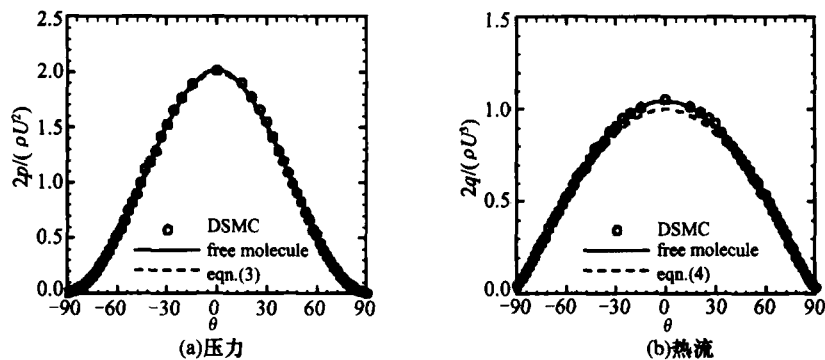


图1 圆球表面的压力及热流分布

流速的夹角, $\text{erf}(\dots)$ 为误差函数。超热力学条件下, $s \rightarrow \infty$, (3) 和 (4) 简化为余弦分布

$$\frac{p_i}{\rho_\infty U^2} = \cos^2 \theta \quad (3)$$

$$\frac{2q_i}{\rho_\infty U^3} = \cos \theta \quad (4)$$

图1给出了位置元算法得到的表面压力和热流分布与理论解(1)~(4)的比较。模拟的来流速度与分子热运动速度之比 s 略大于7。从图中可以看出, 模拟结果与自由分子流准确解(1)和(2)符合得很好。

4.1.2 阻力系数随稀薄程度的变化

Legge 和 Koppenwallner^[7] 测量了高超声速圆球绕流阻力系数随 Kn 的变化情况。为便于比较, 计算条件与实验相同^[7]: 圆球直径 $D = 0.04 \text{ m}$, 来流气体为氮气, $Ma_\infty = 9.0$, 驻点温度 $T_0 = 500 \text{ K}$ 。圆球表面假设为完全漫反射, 表面温度 $T_w = 500 \text{ K}$ 。 $Kn_\infty = \lambda_\infty / D$ 。计算所考虑的5种情况见表1。

定义圆球阻力系数 $C_D \equiv 2F_x / (\rho_\infty v_\infty^2 S)$, 其中 F_x 为阻力, $S = \pi D^2 / 4$ 为迎风面积。在自由分子流区 ($Kn > 100$), 阻力系数的准确解为^[1]

$$C_{D,FM} = \frac{2s^2 + 1}{\pi^{1/2}s^3} \exp(-s^2) + \frac{4s^4 + 4s^2 - 1}{2s^4} \text{erf}(s) + \frac{2(1-\epsilon)\pi^{1/2}}{3s} \left(\frac{T_w}{T_\infty}\right)^{1/2} \quad (5)$$

其中 ϵ 为物面分子漫反射和镜面反射之比, 对于完全漫反射表面, $\epsilon = 0$ 。在本文所考虑条件下, $C_{D,FM} = 2.685$ 。

表1 圆球绕流阻力系数计算所需来流条件

	$\rho_\infty (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})$	$\lambda_\infty (\text{m})$	Kn_∞	Re_∞
1	1.032×10^{-4}	4.0×10^{-4}	1.0×10^{-2}	1.360×10^3
2	1.032×10^{-5}	4.0×10^{-3}	1.0×10^{-1}	1.360×10^2
3	1.032×10^{-6}	4.0×10^{-2}	1.0×10^0	1.360×10^1
4	1.032×10^{-7}	4.0×10^{-1}	1.0×10^1	1.360×10^0
5	1.032×10^{-8}	4.0×10^0	1.0×10^2	1.360×10^{-1}

图 2 给出了圆球绕流阻力系数随气体稀薄程度变化的曲线。可以看出,计算结果与实验值及自由分子流准确解均符合得很好。

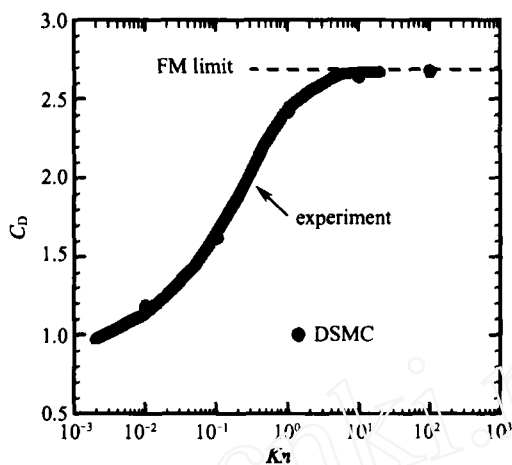


图 2 高超声速圆球绕流阻力系数随 Kn 的变化

4.1.3 圆球绕流沿驻点线密度分布

本文计算了高超声速圆球绕流沿驻点线的密度分布,计算条件与实验^[8]相同:气体成分为单组分氮气,来流马赫数 $Ma_\infty = 4.2$,驻点温度 $T_0 = 300K$,壁面温度 $T_w = T_0 = 300K$,壁面反射条件为完全漫反射,其他条件见表 2。

表 2 圆球绕流沿驻点线密度分布计算所需来流条件

	1	2	3
Re_∞	30	50	100
Ma_∞	4.2	4.38	4.38
$R(m)$	6.4×10^{-3}	6.4×10^{-3}	1.27×10^{-2}
$\lambda(m)$	1.325×10^{-3}	8.320×10^{-4}	8.320×10^{-4}

图 3 给出了雷诺数 $Re = 30, Re = 50, Re = 100$ 时圆球绕流沿驻点线的流场密度分布。可以看出,计算结果与实验值符合得很好。

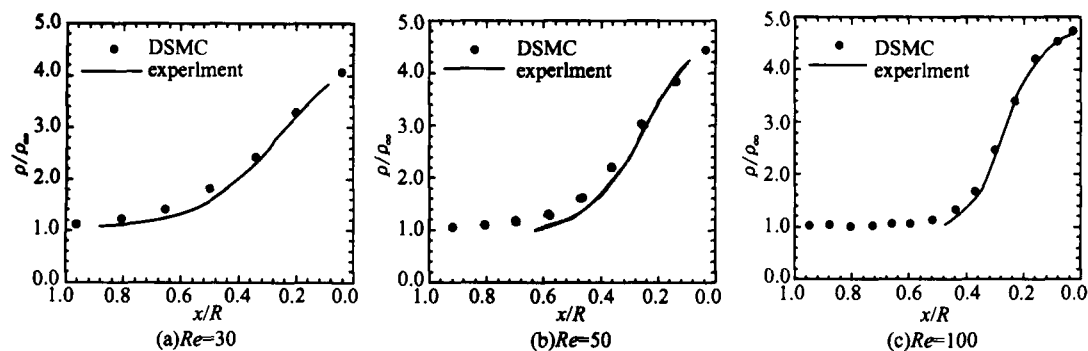


图 3 圆球绕流沿驻点线密度分布 DSMC 模拟与实验结果的比较

4.2 羽流冲击平板

本文模拟了羽流以不同角度冲击平板。图4中, L 为喷口中心到平板的距离, x 为喷口中心在平板上的横向投影距离, β 为入射角, r^* 为喷口半径。

压力和剪切力实验数据由 Legge^[9] 给出, 热流实验数据由 Doring^[10] 给出。根据实验条件, $p_0 = 1\ 000\ \text{Pa}$, $T_0 = T_w = 300\ \text{K}$, $r^* = 1\ \text{mm}$, $L = 40\ \text{mm}$ 。相应的出口速度为 $V_E = 323\ \text{m/s}$, 出口压力为 $p_E = 528.3\ \text{Pa}$, 出口温度为 $T_E = 252.2\ \text{K}$, 出口分子数密度为 $n_E = 1.53 \times 10^{23}\ \text{m}^{-3}$ 。平板表面假设为完全漫反射。

与实验对应, 计算中引入了背景压力。在计算压力和剪切力时, 背景压力为 $p_b = 0.045\ \text{Pa}$; 在计算热流时, 背景压力为 $p_b = 0.090\ \text{Pa}$ 。

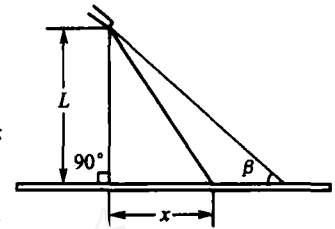


图4 羽流冲击平板示意图

图5~图7显示了 $\beta = 90^\circ$, $\beta = 45^\circ$ 及 $\beta = 0^\circ$ 时被冲击平板表面压力、剪切力及热流分布的模拟结果和实验结果。 $\beta = 0^\circ$ 时压力及剪切力的实验数据对应的驻点压力为 $p_0 = 4\ 000\ \text{Pa}$ 。从图中可以看出, 压力与剪切力的计算结果与实验结果符合很好; 热流分布的计算值与实验值均有一些涨落, 但两者趋势相同。

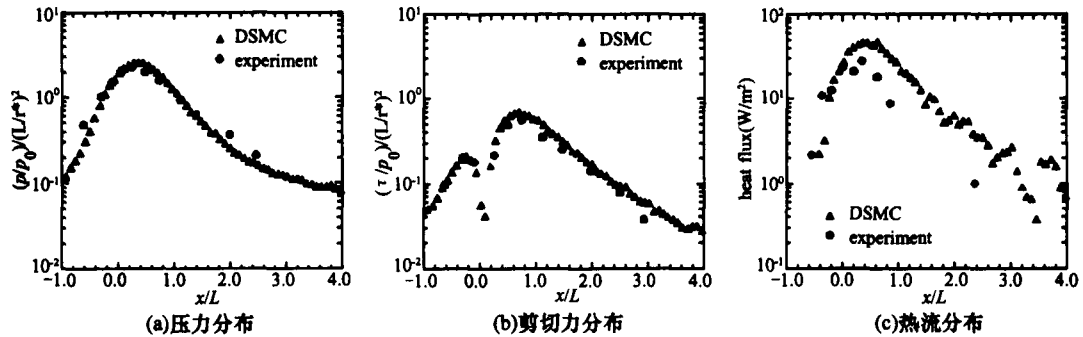


图5 羽流冲击平板时平板表面的物理量分布模拟结果与实验结果的比较($\beta = 90^\circ$)

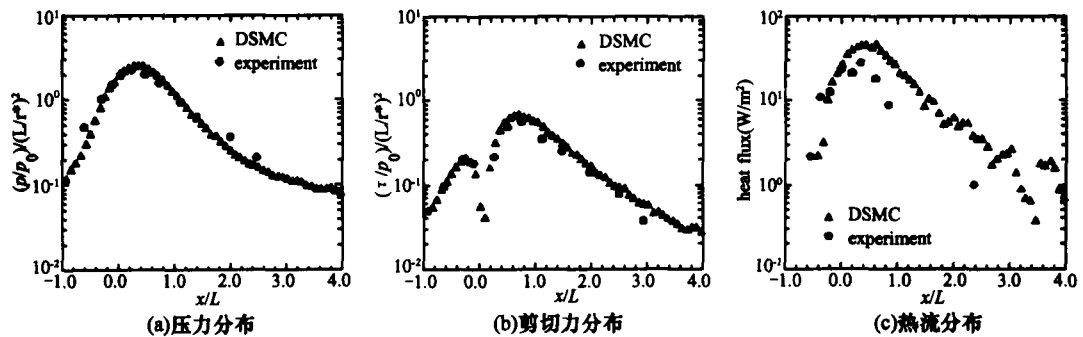


图6 羽流冲击平板时平板表面的物理量分布模拟结果与实验结果的比较($\beta = 45^\circ$)

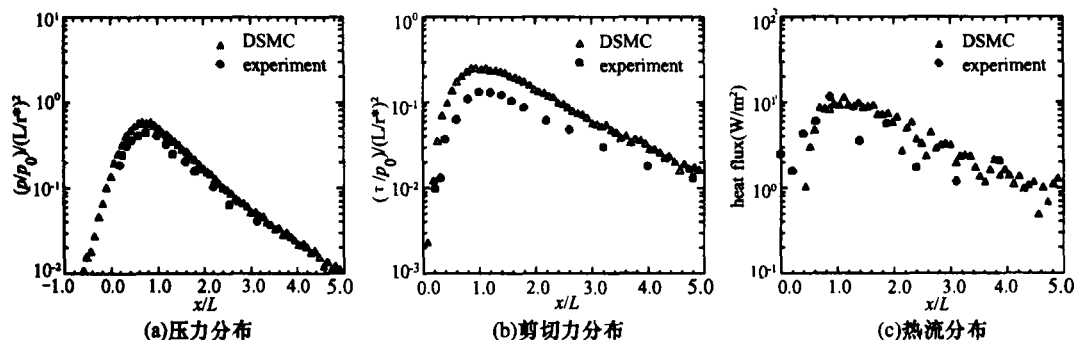


图7 羽流冲击平板时平板表面的物理量分布模拟结果与实验结果的比较($\beta=0^\circ$)

5 结论

上述算例证明,基于位置元新方案编制的三维稀薄气流通用程序在嵌入了本文提出的新的表面元标识模块后,适用于自由分子流和过渡领域流动,可以有效地保证气动力、热的计算精度,并且不会影响位置元方法的计算效率,是一种模拟三维稀薄气体流动的有效方法。

致 谢

本项工作得到国家自然科学基金委(19889209)和中国科学院“百人计划”项目的支持。

参 考 文 献

- 1 Bird GA. Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows. Clarendon Press, Oxford, 1994
- 2 Bird GA. Application of the DSMC method to the full shuttle geometry. AIAA paper 90 - 1692, 1990
- 3 Bird GA. AIAA Paper 90 - 0147, 1990
- 4 Dietrich S, Boyd ID. Scalar and Parallel Optimized Implementation of the Direct Simulation Monte Carlo Method. Journal of Computational Physics, 1996, 126: 328 - 342
- 5 Shen C, Fan J, Hu ZH, Xu XY. A new version of position element algorithm of DSMC calculation of three-dimensional transitional flows. Rarefied Gas Dynamics, edited by C. Shen, 1997: 162 - 167
- 6 沈青,樊菁,胡振华,徐晓燕. 过渡领域三维绕流直接统计模拟的新算法. 空气动力学学报, 1996, 14 (3):467 - 475
- 7 Legge H, Koppenwallner G.. Sphere Drag Measurements in a Free Jet and a Hypersonic Low Density Tunnel. Rarefied Gas Dynamics, edited by D. Dini, 1970, 1: 481 - 488
- 8 Russell DA.. Density Disturbance ahead of a Sphere in Rarefied Supersonic Flow. Physics of Fluids, 1968, 8: 1679 - 1685
- 9 Legge H.. Plume Impingement Forces on Inclined Flat Plates. Rarefied Gas Dynamics 17, ed. by Alfred E. Beylich, 1991: 955 - 962
- 10 S. Doring. Experimental Plume Impingement Heat Transfer on Inclined Flat Plates. DLR. German

- Aerospace Research Center, TRIB 222 - 90 A 36, Germany, 1990
- 11 樊菁,刘宏立,沈青,陈黎明.直接统计模拟位置元算法中的分子表面反射的确定论判据.空气动力学学报,2000,18(2):180-187
 - 12 樊菁,沈青.DSMC方法过渡区三维气动力热计算通用软件.863技术总结报告,1998
 - 13 G. A. Bird. Monte-Carlo Simulation in an Engineering Context. in *Rarefied Gas Dynamics* 12, 1981: 239-255
 - 14 C. Borgnakke, P. S. Larsen. Statistical Collision Model for Monte Carlo Simulation of Polyatomic Gas Mixture. *J. Comput. Phys.*, 1975, 18: 405-420
 - 15 沈青,吴万泉,胡振华,徐晓燕.均匀气体中内自由度激发松弛与离解反应的直接统计模拟.空气动力学学报,1991,9(1):1-7
 - 16 樊菁.直接模拟蒙特卡罗方法中的一个新算法——随机取样频率法及过渡领域圆柱非平衡绕流数值模拟.中国科学院力学研究所硕士研究生学位论文,1992

www.cnki.net