

295-303

第14卷 第3期
1996年9月空气动力学学报
ACTA AERODYNAMICA SINICAVol.14, No.3
Sep., 1996

过渡领域三维绕流直接统计模拟位置元法的一种新方案*

沈青 樊菁

中国科学院力学研究所, 北京(邮政编码 100080)

胡振华[√] 徐晓燕

航天工业总公司207研究所, 北京(邮政编码 100074)

V211.3

⑧ **摘要** 本文发展了 DSMC 方法计算三维绕流位置元方法的新方案, 其总体方案和实施细节都是在分析和探索的基础上由我们自己提出的, 特别还解决了除气动力、矩总体量以外的气动加热和压力分布等局部分布量的计算所提出的新问题。对于表面位置元的标识、分子的进入及与表面碰撞的判断、网格初始划分与调整、分布量计算对模拟过程及信息存贮所提的特殊要求等进行了分析和讨论, 并通过与准确结果的比较证明了采用的方案和技术的有效性。

关键词 位置元方法, 直接模拟 Monte Carlo 方法, 过渡区三维流动。

航天器

引言

已发展的航天器——包括飞船、航天飞机——和将发展的航天器 AOTV、NASP、HERMES、HOPE、HOTOL、SANGER 及天地往返运输系统, 越来越多时间在过渡领域飞行, 在其中利用气动力并进行机动飞行。了解飞行器在过渡领域的气动力、热变得越来越重要。这一领域的实验手段尚不完备, 尤其没有能够模拟非平衡效应的高焓设备。计算或数值模拟气动力、热变得十分重要。

国际上用 DSMC 方法已求解了 AFE^[1-3]、相交钝楔^[4]、有攻角平板^[5]、三角翼^[6,7]、发动机尾流^[8]、圆球^[9]以及全尺寸航天飞机^[10]等外形。有的用专用程序, 有的用四面体为亚网格的通用程序, 而文献(8)、(10)则发展了位置元概念的通用程序。这种程序(F2、F3)比上一代通用程序(G2、G3)速度约快 6~10 倍, 效率达到了近乎特殊程序的水平。用它求解航天飞机整机的气动力, 所得的升阻比在过渡领域与飞行实验相符, 证明了方法的有效。但文献没有涉及技术细节, 软件也是保密的, 而且只是计算气动力、矩等整体效应。而我们则面临除气动力、矩外还有气动热及压力等分布量的计算, 这对计算方法提出了新的要求, 本文发展了改型的位置元方法, 提出了总体方案和实施细节, 不同于原型,

*国家自然科学基金资助项目。

本文于1994年12月18日收到, 1995年6月5日收到修改稿。

特别解决了分布量的计算问题。

本文对位置元的直接模拟统计方法的一些关键技术进行了探讨。实现位置元法的直接模拟,并给出分布量的计算方法,要克服一些技术难点,如表面位置元的标识,网格的初始划分与自适应调整,分布量计算对分子与表面碰撞的判定及对表面存贮信息的特殊要求等。本文对位置元方法的总体方案和方法实现的细节进行详细介绍和讨论,并通过与已有准确结果的比较,证明采用的方案和技术的有效性。

一、位置元方法的一种新方案

DSMC 方法^[1]的网格仅用来对宏观量取样,并从中选择可能的碰撞对,分子的准确位置对最终取样结果和碰撞效应无本质影响。这就导致了引入直角格栅系表征分子和物面的位置的想法,这样可以建立高效通用程序。格栅的尺度决定了分子位置的分辨率和物体边界被确定的精度,通过在代表边界的表面元中存贮物体表面的法向方向余弦等,物面仍表现为光滑的。

位置元方法将流场空间细分为规则正方体的两个层次的网格,即亚网格和位置元。位置元是最细小的划分,纪录分子的位置和表面形状,它决定了分子位置的分辨率。粗一级的划分,是亚网格,每个立方体亚网格中包含 $4 \times 4 \times 4$ 或更多的位置元。亚网格和位置元在空间的位置就决定了它们的自然编号。网格在近物体区由位置元构成,在非近体区由亚网格构成,是流场量取样求平均的单位,亚网格是选取碰撞对的空间范围,位置元是三维空间的像素点系。

为了标记绕流物体几何物形, Bird^[10]列举了‘连续空集长度编码’和‘亚网格及位置元依与物面距离分级,两种方案,但均无实施细节。我们采用了类似前者的、标记出包含物体的一排位置元中最前和最后的元素位置的方法,同时标记出所有与物面相交的位置元并给出几何参量。这保证迅速判断分子与表面的相交,并考虑了计算表面分布量的特殊需要。

在网格划分的二维图式中,有“直角多级亚网格及自适应贴体网格”图式,是采用极小的直角亚网格系,物面由其与亚网格的交点所表征^[12]。对于三维情况, Bird 称“由于表面与三维网格相交各种可能的复杂性,很难将这一图式推广”。为了较准确地描述表面,他用将网格均分为八部分,而只将包括表面的部分再细分为 $1/8$ 的方法,这样做很繁复,也未解决表面通量的计算问题。我们则采用了准确定义出表面与位置元立方体的所有交点,并计算出表面位置元上所张的表面面积 ΔS 的方案。 ΔS 的给出除了计算表面通量必需外,还将此面积用为判定运动分子究竟在何表面元实现反射的基础,从而改进了分布量计算的精度。

二、方法的实现

1. 网格、亚网格与位置元

将流场分为均匀的亚网格和位置元系,例如分为 $32 \times 32 \times 32$ 个立方体亚网格(也可分为,如 $128 \times 64 \times 64, \dots$)每个亚网格细分为 $4 \times 4 \times 4 = 64$ 个立方体位置元,其边长为 Δl ,即流场为 $128 \times 128 \times 128$ 位置元所覆盖。每个模拟分子的位置由 $I_X(N)$ 、 $I_Y(N)$ 、

IZE(N) 所确定, N 为模拟分子数。PG(I,N), $I=1,2,3$, 记录分子的三个速度分量, $I=4,5$ 记录分子的内能。网格或由数个亚网格(在远离物面及背风处), 或由数个位置元(在靠近物体表面处)组成, 是进行流场量取样平均的单元, 而碰撞的分子对则从同一亚网格中选取, 或优先从同一亚网格再考虑从相邻亚网格选取。位置元记录分子的位置, 其大小即决定了分子位置的分辨率。网格自适应的原则是, 各网格中包含近似相同的分子数, 而组成网格的亚网格或位置元的组合方向沿最小的密度梯度进行。

2. 表面位置元的标识与寻找

利用给定表面几何在 x, y, z 坐标系中的解析表达, 或从用离散方法给出的表面几何表达出发, 在所有 y, z 方向的编号为 IY、IZ 的位置元中, 求出与表面相交的前方(负 x 方向)的最外位置元, 将其记为 IX1(IY, IZ), 类似记与表面相交的后方(正 x 方向)的最外位置元为 IX2(IY, IZ)。如该 IY = const, IZ = const 列中无与表面相交的位置元, 则记 IX1(IY, IZ) = 1024(或更大数), IX2(IY, IZ) = -1。IX1、IX2 用来判定分子是否与表面相交, 当分子在一个 Δt 时刻的终了时位置为 IXE(IY, IZ), 而 IX1 ≤ IXE ≤ IX2 时, 即应认为该分子在此前已与表面碰撞, 用第 6 节中的方法求在何表面元处碰撞, 并计算对表面的力、热作用和反射。此外, 还应在该列(IY, IZ = const)元素中寻找其上可以定出与表面相交的 x 值的表面元, 将其中离 IX1 最近的记为 IX3, 类似, 相对 IX2, 定出 IX4。并相应地定出下方(负 y 方向)最外表面元 IY1, 上方(正 y 方向)最外表面元 IY2, 右方(负 z 方向)最外表面元 IZ1, 左方最外表面元 IZ2, 以及 IY3, IY4, IZ3, IZ4(与 IX3, IX4 类似)。实践表明这些表面元素包括了所有的与表面相交的位置元。以上的表面元的标记法以圆球为例用较大的网格(位置元)示意于图 1 中。布置多层表面元系, 保证了将所有与物体相交的位置元统计在内, 使各表面元所包含的表面积求和后得到总面积, 并进一步保证局部分布量的正确计算; 同时在使用 Bresenham 方法计算分子运动过程中与表面的碰撞时, 保证不发生分子漏网到物体中而未被记录为碰撞的情况。

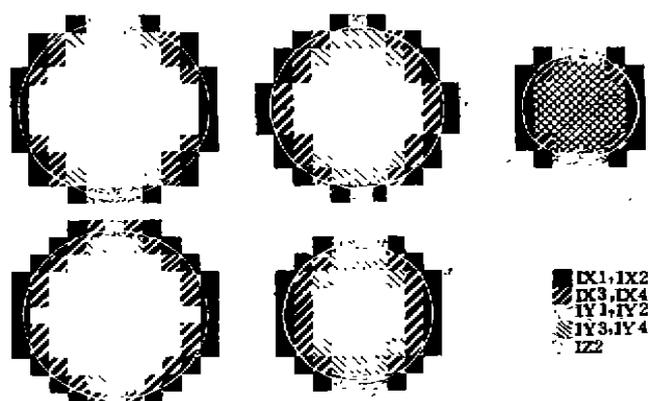


图 1 圆球 $z = \text{const}$ 截面上的表面元

Fig. 1 Surface elements on sections with constant z of a sphere

3. 表面元的方向参量

物体表面虽用间断的立方体表面元素所表现, 但每个表面元均记有表面法线 n 的方向余弦, 及切面中两个互相垂直的方向 (τ, b) 的方向余弦, 以用来计算分子的反射, 这样表面对分子的反射仍表现出光滑的特征。对于壁温为 T_w 表面的完全漫反射, 反射分子在 (n, τ, b) 方向上的速度分量如下确定

$$\begin{aligned} V_n &= v_{nw} \sqrt{-\ln(\text{ran}f)}, \\ V_\tau &= B \cos A, \quad V_b = B \sin A, \\ B &= v_{nw} \sqrt{-\ln(\text{ran}f)}, \quad A = 2\pi \text{ran}f, \quad v_{nw} = \sqrt{2kT_w/m} \end{aligned} \quad (1)$$

$\text{ran}f$ 为在 $[0, 1]$ 间均布的随机数, 选取 τ 为 x, y 平面中与 $n(\alpha, \beta, \gamma)$ 垂直的单位向量, 其方向余弦记为 $(\alpha_A, \beta_B, 0)$, 容易求出(参见图2)

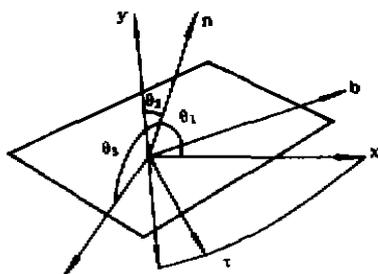


图2 物体表面法向 n 及辅助方向 τ, b 示意图
Fig. 2 Schematic diagram of surface normal direction n and auxiliary directions τ and b

$$\begin{aligned} (\alpha_A, \beta_B, 0) &= \left(-\beta / \sqrt{\alpha^2 + \beta^2}, \right. \\ &\quad \left. \alpha / \sqrt{\alpha^2 + \beta^2}, 0 \right) \end{aligned} \quad (2)$$

将 b 选为 $n \times \tau$ 可得其方向余弦 (ϕ, ψ, χ)

$$\begin{aligned} (\phi, \psi, \chi) &= (-\gamma \beta_B, \gamma \alpha_A, \\ &\quad \beta_B \alpha - \alpha_A \beta) \end{aligned} \quad (3)$$

这样很容易写出完全漫反射分子在 x, y, z 方向的速度分量

$$\begin{cases} v_x = v_n \alpha + v_\tau \alpha_A + v_b \phi \\ v_y = v_n \beta + v_\tau \beta_A + v_b \psi \\ v_z = v_n \gamma + v_b \chi \end{cases} \quad (4)$$

4. 表面元面积 ΔS 的计算

对于每个表面元均计算出物体表面在其上所张的面积之值, 其目的, 一为提供传热与压力计算所需的能量流和动量流所通过的单位面积, 一为提供判定粒子究竟在哪一表面元反射的概率判据基础。具体的计算方法是定出物体表面与位置元各菱线的实际交点(一般为3~6点)用该表面元所张面积包含的三角形平面面积之和近似为该表面元之 ΔS (见图3)。

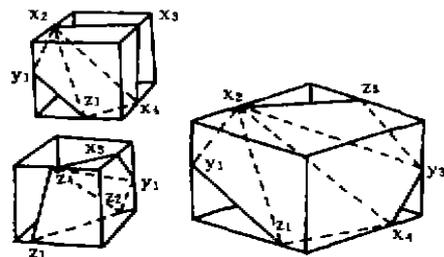


图3 表面元素上所张物体面积 ΔS 及计算示意
Fig. 3 Illustration of surface areas ΔS stretched on surface elements and their calculation

5. 分子的进入

除了考虑有攻角情况还考虑有侧滑角的情况, 即分子可能从流场的三个侧面进入。当来流方向与进入表面法向成 θ 角时, 进入分子的数字流为^[11, 12]

$$N_i = n \sqrt{\frac{kT}{2\pi m}} \{ e^{-(S \cos \theta)^2} + \sqrt{\pi} (S \cos \theta) [1 + \operatorname{erf}(S \cos \theta)] \} \quad (5)$$

其中, n 为来流数密度, k 为 Boltzmann 常数, m 是分子质量, $S = v / \sqrt{2kT/m}$, U 、 T 为来流速度与温度。进入分子的法向速度分量按如下(归一化了的)分布取样

$$f\left(\frac{v_n}{u_n}\right) = \frac{2(u_n/v_n + S_n)}{S_n + (S_n^2 + 2)^{1/2}} \exp\left[\frac{1}{2} + \frac{S_n}{2} \{S_n - (S_n^2 + 2)^{1/2}\} - \left(\frac{u_n}{v_n}\right)^2\right] \quad (6)$$

其中, $v_n = \sqrt{2kT/m}$, u_n/v_n 需产生 ranf 按 $u_n/v_n = -3 + 6\operatorname{ranf}$ 计算, 但需满足 $u_n/v_n + S_n > 0$ 条件, $S_n = S \cos \theta$, 计算 $f(u_n/v_n)$ 与另一 ranf 比较决定 u_n 之取舍, 进入分子的法向速度为 $U_n + u_n$, 其余两方向热运动速度的产生类似(1)式, 迭加各该方向之宏观速度分量, 为进入计算区的分子速度分量之值。

按照(5)式计算出 N_i , 易得 Δt 时间内进入 S_x (或 S_y, S_z) 表面的分子数, $N_i S_x \Delta t = N_{ix}$ 。如果在整个 S_x 面, 随机布置分子位置将有很大的散布误差, 导致表面量以及总体量计算的巨大方差。为减少计算量引入降低方差的进入分子布置方法, 即将进入分子均布在进入表面上。设每个分子通过边长为 $\Delta l'$ 的正方形进入(见图4)。进入面为正方形时, 每边的 $\Delta l'$ 数目 N_x , 取为

$$N_x = N \operatorname{INT} \sqrt{N_{ix}} \quad (7)$$

而边长 $\Delta l'$ 为

$$\Delta l' = L_x / N_x \quad (8)$$

L_x 为 S_x 面的线性长度。从 S_x 面进入分子的位置元的 y, z 坐标, 由下式经用 $\Delta l'$ 归一并取整得到

$$\begin{aligned} y_i &= i \cdot \Delta l' + \Delta l' \cdot \operatorname{ranf}, \quad i = 0, \dots, N_x - 1 \\ z_j &= j \cdot \Delta l' + \Delta l' \cdot \operatorname{ranf}, \quad j = 0, \dots, N_x - 1 \end{aligned} \quad (9)$$

实际进入分子数为 $N_{ixf} = N_x^2$ 。将 $N_{ix} - N_{ixf}$ 之值加到下一 Δt 的 N_{ix} 中去。

6. 分子的运动及与表面的碰撞

对于未与表面发生碰撞的分子, 根据分子初始的位置和速度及时间步长 Δt , 容易定出 Δt 时刻后的终了位置 IXE , 当 $IX1 \leq IXE \leq IX2$ 时, 分子在此前已与表面发生碰撞。为寻找分子运动路径与表面元的交会, 采用计算机绘平面直线的 Bresenham 算法(见文献(13)的三维推广。Bresenham 算法首先确定运动最快的方向, 在此方向上步进一个单元, 再根据直线与竖格线的交点是靠近上一条横格线还是靠近下一条横格线来决定在另

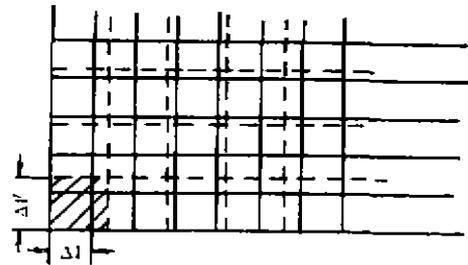


图4 分子进入的降低方差均布方法示意
Fig.4 To the uniform distribution of entering molecules for the variance reduction

一方向上是否也步进一个单元(见图5)。在三维的框架内即可定出分子运动所经加下一个

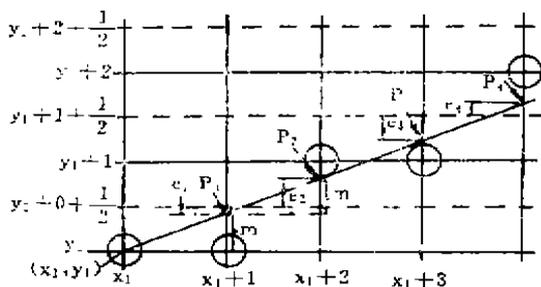


图5 Bresenham 算法示意图
Fig. 5 Schematic diagram showing the Bresenham algorithm for drawing two-dimensional pixel straight lines

位置元,检查其是否为表面元,如是,即求得了所寻找的分子与表面交会的表面元。

在分子速度较大而在 Δt 内会运动足够大的距离时,有时尽管IXE在IX1和IX2之间,但实际上分子穿过物体。我们需要检查分子起始点在物体前方(来流方向),而分子终了点在物体后方的情况,对这样的分子同样用Bresenham算法检查与物面相交的表面元。

为解决局部分布量计算的技术难点,我们采取了分子在表面反射的几率判据方法。在求得分子与表面交会的表面元后,并不立即定其为分子在其上反射的表面元,而是求得分子运动方向上的所有相继的表面元(并需满足法线路径方向交角大于 90° 的条件,即迎风的条件),根据相继几个表面元所张的物体表面积的大小,来随机决定分子在它们中哪一个上反射。具体讲,分子运动途径表面元中第*i*个中选的几率由下式给出

$$P_i = \Delta S_i / \sum_{k=1}^N \Delta S_k, \quad i=1, 2, \dots, N_T, \dots, N \quad (10)$$

其中*N*是分子运动途径上所有相继的表面元总数,由于在 Δt 时间内,分子最多只能前进到用完 Δt 的位置上, N_T 为用完 Δt 时所达到的表面元数。如果分子在前 N_T 个表面元上均未被判断为发生碰撞,分子即停留在第 N_T 表面之上,并可以参加 Δt 内分子的碰撞过程的模拟,如果未被选中为碰撞对,在下一 Δt 内,分子继续前进,仍按(10)式判断是否在某一表面元反射。注意在(10)的求和式中,已经过的并判明未发生碰撞的表面元不对几率判据有贡献。当*i*=*N*-1未发生碰撞时,(10)式自动给出分子一定在 ΔS_N 上反射。这样的算法保证了分布量的正确统计计算。

分布表面通量的模拟结果要通过取样求平均及计算表面积扩展到与该表面元相邻的表面元来得到改善。可以取围绕该表面元的边长为 $3\Delta l$ 的立方体中所有表面元参加求平均,亦可取 $z = \text{const}$ 时围绕并包括该表面元的九位置元中的所有表面元参加求平均(图6)。

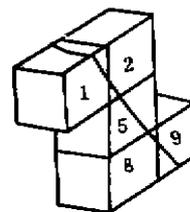


图6 表面分布量求平均示意图
Fig. 6 Illustration of averaging surface quantities on neighboring surface elements

7. 分子的碰撞与流场量的采集

在 Δt 内将分子运动和碰撞解耦,是DSMC方法关键的一步。控制 Δt 内模拟分子碰撞次数使与真正流动中相同构成了DSMC的碰撞取样方法,时间计数器(TC)法要求网格

中分子数较大,非时间计数器(NTC)法避免了这一缺点,计算效率也不受影响,我们采用后者。网格是流动宏观量采样求平均的单位,在近物体区,网格的构成单位为位置元,在其它区,其构成单位为亚网格。网格由构成单位组合的原则是,不跨过物体区和其它区的界限,从 x, y, z 坐标最小单元开始,相邻单元中选方向上密度梯度为小,以及构成网格中的分子数尽可能从上或从下接近平均网格分子数。在网格中相距最远处选中的某分子对会导致分子所代表的速度梯度转向^[12]。这虽为极小几率的情况,但为避免其发生,限制在相同亚网格、或相邻亚网格中选取碰撞对。

三、算例及检验

我们的方案允许将绕流外形在“外形准备”程序中改变,而整个程序即可给出该外形的阻力、升力、力矩系数以及压力、热流等局部分布量。由于是用立方表面元代替光滑的表面,检验所提方案是否给出正确的分布量是必要的。用来检验的算例是圆球的自由分子流绕流。自由分子流条件下圆球的结果是周知的^[11]。而超热力学及完全漫反射条件下的压力和热流与物面法向与来流速度夹角 θ 有极简单的关系^[14]。

$$p_i = \rho_\infty U^2 \cos^2 \theta \quad (11)$$

$$q_i = \frac{1}{2} \rho_\infty U^3 \cos \theta \quad (12)$$

模拟在 $128 \times 128 \times 128$ 个边长 $\Delta l = 0.02\text{m}$ 位置元系中进行,圆球直径取为 $R = 0.8\text{m}$,来流速度 $U = 7500\text{m/s}$, $T_\infty = 500\text{K}$,壁温 $T_w = 500\text{K}$,分子的进入在 $2.56 \times 2.56\text{m}^2$ 面积上均布以减少方差,每 $\Delta t = 10^{-4}\text{s}$ 进入16384个模拟分子,100 Δt 后开始取样,取3000个 Δt 时间的平均值。模拟分别用:(1)不做碰撞几率判断;(2)仅对分子运动途径上的前两个表面元做碰撞判断;(3)分子运动途径上所有表面元参加碰撞几率判断的算法进行,并给出对相邻位置元求平均及不求平均的结果。表面热流分布及压力分布的模拟结果分别在图7、图8中给出。可看出,所有表面元参加几率判断,并对相邻位置元求平均给出

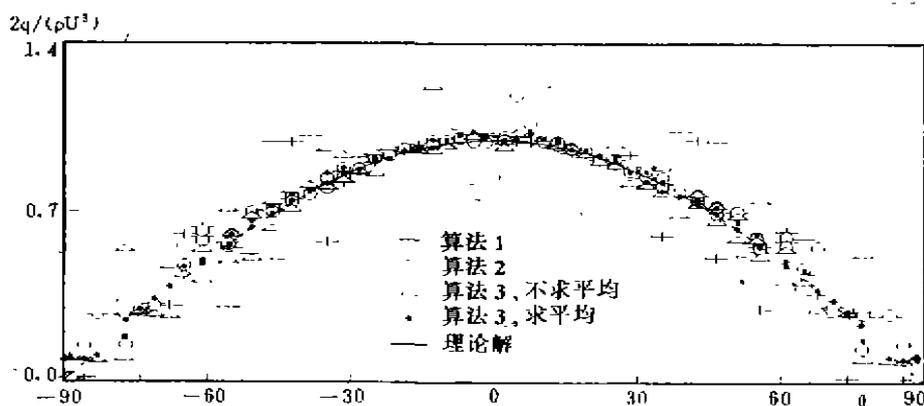


图7 表面热流模拟结果与理论值比较

Fig. 7 Comparison of simulated and theoretical surface heat fluxes

与理论准确值相符很好的结果。说明提出的方案和算法，解决了分布表面通量计算提出的挑战。

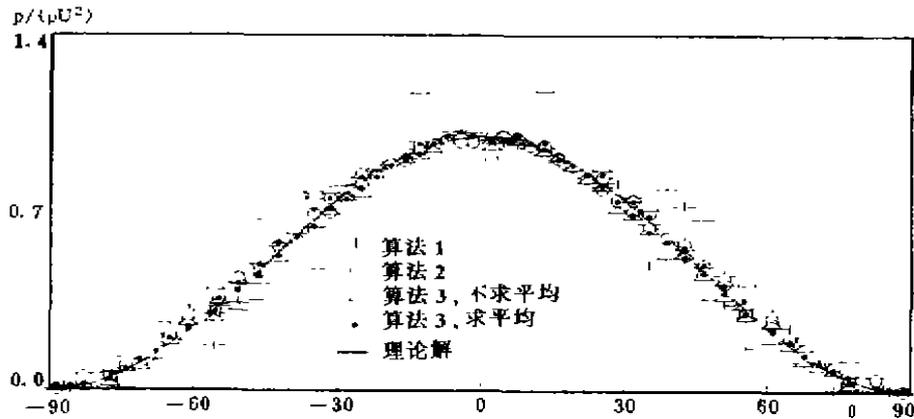


图 8 表面压力分布模拟结果与理论值比较

Fig. 8 Comparison of simulated and theoretical surface pressure distribution

四、讨论

DSMC方法是过渡领域中计算气动力热的有效数值模拟方法，对各种外形均能适用而效率高的通用软件是希望的。应用位置元概念的通用程序，将外形复杂的困难的处理集中于“初始外形准备”中，而将分子运动、表面反射、分子进入与逸出、分子碰撞归为不依赖外形的通用子程序。本文发展了计算三维绕流的位置元方法的新方案，对于表面位置元的标识、分子的进入、运动、表面反射进行了分析讨论，并在程序中实施。尤其是针对分布量计算的要求，对模拟算法、分子与表面碰撞判断及表面位置元信息处理与存贮提出了新的技术方案。通过圆球算例与理论准确值的比较，证明所采用的方案和技术是有效的。对于加入分子间碰撞引起的问题，如分子对的选取，网格的划分和适应，以及方法的进一步完善和优化，将在另文中讨论。

参 考 文 献

- 1 Dogra V K, Moss J N, Simmonds A L. Direct Simulation of Aerothermal Loads for an Aeroassist Flight Experiment Vehicle. AIAA Paper 87-1546, 1987.
- 2 Celenligil M C, Moss J N, Bird G A. Direct Simulation of 3-D Flow About an AFE Vehicle at High Altitudes. Progress in Astro and Aeronautics, 1989, 118:447~462
- 3 Celenligil M C, Moss J N, Blanchard R C. 3-D Flow Simulation About the AFE Vehicle in the Transitional Regime. AIAA Paper 89-0245, 1989.
- 4 Celenligil M C, Bird G A, Moss J N. Direct Simulation of 3-D Hypersonic Flow About Intersecting Blunt Wedges. AIAA Paper 88-0463, 1988.
- 5 Dogra V K, Moss J N. Hypersonic Rarefied Flow About Plates at Incidence. AIAA Paper 89-1712, 1989.
- 6 Celenligil M C, Moss J N. Hypersonic Simulation of Hypersonic Rarefied Flow About a Delta Wing. AIAA Paper 90-0143, 1990.
- 7 Celenligil M C, Moss J N. Application of the DSMC Method to Hypersonic Flow About a Delta Wing. Rarefied Gas Dynamics (17th), ed. by A. E. Beylich, VCH, 1991. 778~783

- 8 Bird G A, Influence of Local Configuration on the Backflow from Small Rocket Thrusters, AIAA Paper 90-0147, 1990.
- 9 Dogra V K, Wilmoth R G, Moss J N, Aerothermodynamics of a 1.6-m-diameter Sphere in Hypersonic Rarefied flow, AIAA Paper 91-0773, 1991.
- 10 Bird G A, Application of the DSMC Method to the Full Shuttle Geometry, AIAA Paper 90-1692, 1990.
- 11 Bird G A, Molecular Gas Dynamics, Clarendon Press, Oxford, 1976.
- 12 Bird G A, Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows, Clarendon Press, Oxford, 1994.
- 13 陈振初, 蔡宣平, 计算机图形显示原理, 国防科技大学出版社, 1991.
- 14 沈青, 稀薄气体动力学, 中国科技大学近代力学系专题讲义, 1962, 1964.

A New Version of Position Element Space Discretization in Direct Statistical Simulation of Three-dimensional Flow in Transitional Regime

Shen Qing Fan Jing

(Institute of Mechanics, Chinese Academy of Science)

Hu Zhenhua Xu Xiaoyan

(Institute of Environmental Features 207)

Abstract In the present paper a new version of position element space discretization in calculating three-dimensional flows by the DSMC method is developed. The overall scheme and the implementation details have been suggested by us on the basis of analysis and tests. In particular, the new problems encountered in calculating the various local fluxes such as the aerodynamic heating and pressure distribution besides the overall characteristics such as aerodynamic forces and moments have been solved. A number of implementation issues has been tackled and discussed: the marking and spotting of the surface position elements, the entering of the molecules and the judgement of their colliding with the surface position elements, the initial division and adjustment of the cells, the special demands raised by the calculation of local fluxes towards the simulation algorithm and the storing of information. Comparison with the exact results confirms the validity of the suggested scheme and techniques.

Key words DSMC, position element space discretization, transitional regime three-dimensional flow.