

# 正激波结构与反射的蒙特卡罗模拟\*

沈青

胡振华 徐晓燕 吴万泉

(中国科学院力学研究所)

(航空航天工业部二零七所)

**摘要** 本文用变径刚球模型(VHS)与Larsen-Borgnakke模型借助直接模拟蒙特卡罗方法模拟正激波结构与反射问题。直接模拟显示了分子间作用力幂次对激波剖面的影响,平动自由度经激波的非平衡效应,双组分气体经激波的组分分离效应,有转动自由度激发(双原子分子)气体中激波结构、传播和反射、双原子轻分子作为载体的混合气体激波结构中重气体的温度超出等。

**关键词** 激波结构, 激波反射, 直接模拟蒙特卡罗法。

## 引言

激波结构问题一直是分子气体动力学的重要研究对象,研究非平衡效应激波结构也是一个合适的流场,因为它是一个简单的一维问题,但它可以检验各种分子模型,在恰当选择的马赫数下又能包括热力学与化学非平衡引起的许多现象。用N-S方程求解激波结构仅在激波马赫数 $M$ ,小于2时适用,一般总要借助于过渡领域的方法。直接模拟蒙特卡罗方法(DSMC)<sup>[1]</sup>是研究激波结构的有力工具,可以较容易地处理多组分有内自由度激发及化学反应的情况。本文用VHS模型<sup>[2]</sup>模拟分子间力的作用,用Larsen-Borgnakke模型<sup>[3]</sup>模拟碰撞中内自由度与平动自由度间的能量交换,研究了分子间作用力幂次对单原子气体中激波密度剖面的影响(VHS模型与普通逆幂律模型比较),平动自由度经激波的非平衡效应,双组分气体经激波的组分分离效应,有转动自由度激发的(双原子分子)气体中的激波结构及传播和反射,双原子轻分子作为载体的混合气体激波结构中重气体的温度的超出等。

## 一、计算方法与分子碰撞模型

直接模拟蒙特卡罗方法(DSMC)在计算机上通过追踪几千个分子的运动与碰撞来模拟真实的气体流动。每个分子赋予合适的位置坐标、速度和内能,并在运动和碰撞过程中经受变化。运动和碰撞分别考虑,模拟中的时间参数与实际时间相同,而流动总是作

\* 国家自然科学基金资助项目。

本文于1990年6月12日收到,1990年12月30日收到修改稿。

为非定常流动进行模拟,定常流动是非定常流动的大时间下的极限。在物理空间划分网格,其中布置足够多的分子,碰撞对从这些分子中选取,并对之求和取样得到流场的宏观量。边界条件对单个分子提出。碰撞作为三维现象进行计算,最简单的模型是刚球模型,为模拟更现实的分子间的作用,要用逆幂律模型等,当内自由度激发时,还要引入制约分子相对动能和各内自由度间能量交换的算法(模型)。

用 DSMC 方法研究激波结构,可以通过令活塞推动气体也可通过令激波上下游的顺向和逆向运动的分子在有限区域的运动和碰撞来产生激波。利用前者可以同时研究激波的传播和反射的规律,本文采用此法。令一镜面反射的活塞以速度  $u_w$  运动,推动静止气体产生激波,  $u_w$  与激波马赫数  $M$ , 有如下关系

$$u_w/a_1 = 2(M^2 - 1)/[(\gamma + 1)M] \quad (1-1)$$

$a_1$  为静止气体中的声速,  $\gamma$  为比热比。为使计算区域有限,在距活塞足够远的  $x_m$  处,置另一镜面反射壁,活塞与反射壁间划分为  $50(\div 200)$  个网格,每个网格尺寸  $\Delta x < 0.5\lambda$  ( $\lambda$ : 平均自由程)。初始时每网格内布置  $50(\div 20)$  个分子,其位置在空间均匀分布,其热运动速度则遵循 Maxwell 分布。在时间间隔  $\Delta t_m = 0.2\lambda/v_m$  ( $v_m$ : 最可几速度)内,将分子运动、活塞运动及分子在壁面的反射一起考虑。再分别考虑  $\Delta t_m$  时间内分子间的有代表性的碰撞,每发生一次碰撞,时间计算器前进一等值  $\Delta t_c$ 。

$$\Delta t_c = [LP/(n_M/n) + MP/(n_L/n)]\Delta x / (q_m, N_M \sigma_{LM} c_r) \quad (1-2)$$

其中  $n_M$ 、 $n_L$ 、 $n$  为初始  $M$ 、 $L$  组分及混合气体数密度,  $q_m, n_M/n$  为每个模拟  $M$  分子代表的真实分子数,  $q_m, n_L/n$  为每个模拟  $L$  分子代表的真实分子数,  $N_M$  和  $N_L$  为网格  $\Delta x$  中当时的分子数,  $\sigma_{LM}$  为  $L$ 、 $M$  分子间碰撞截面,  $c_r$  为分子间相对速度。  $LP$  和  $MP$  表征碰撞对中  $L$  和  $M$  分子的有效性,对于模拟分子代表真实分子少的组分(加权因子小)总是为 1,对于模拟分子代表真实分子多的组分(加权因子大)有时为 0,有时为 1,为 1 的几率等于加权因子比,以模拟真实碰撞效果。  $\Delta t_c$  保证在模拟气体中有与实际相同的碰撞频率。在  $n_s$  个  $\Delta t_m$  后 ( $n_s = 30$ , 对于  $M_s = 8$ ,  $n_s = 120$ , 对于  $M_s = 2$ ) 可得定常激波结构。一般选择  $x_m = A \cdot (2u_1 - u_w)n_s \Delta t_m$ ,  $A = 1.3$ , 可以保证激波结构不受反射壁面影响,合适地选择较小的  $x_m$ , 可得激波在壁面 ( $x = x_m$  处) 的反射的模拟。

为模拟分子间作用力采用变径刚球(VHS)模型<sup>[2]</sup>,即分子在碰撞中遵循刚球一样的散布规律,但其直径是变化的,分子的碰撞截面随相对速度  $c_r$  的变化与逆幂律分子的碰撞总截面随  $c_r$  的变化相同

$$\sigma \propto c_r^{-2\omega}, \quad \omega = 2/(\eta - 1) \quad (1-3)$$

$\eta$  为逆幂律分子间作用力  $F = K/r^\eta$  的方幂。平均碰撞率正比于  $c_r^{1-2\omega}$ 。计算中应用这种分子模型,即在选择分子对时令中选几率正比于  $c_r$  的  $(1-2\omega)$  即  $(\eta-5)/(\eta-1)$  次方,同时在计算增量  $\Delta t_c$  的表达式中  $\sigma$  用下式

$$\sigma = \sigma_{ref} \{m_r c_r^2 / [2(2-\omega)k T_{ref}]\}^{-\omega} \quad (1-4)$$

其中  $T_{ref}$  为参考温度,  $\sigma_{ref}$  为参考温度下的参考截面。为模拟双原子分子的激波结构,要引入转动自由度并考虑平动和转动间能量的交换,即考虑非弹性碰撞。为此采用了与 VHS 模型相适应的 Larsen-Borgnakke 模型<sup>[3]</sup>。分子的转动(或振动)松弛的非弹性碰撞数  $Z_R$  (或  $Z_V$ ) 在文[4]中根据直接模拟与实验给出松弛时间比较而定出。对于  $N_2$  分

子, 根据文[5]中收集的实验数据  $Z_R$  在 2 到 20 之间变化。关于 L-B 模型中能量交换的实现, 详见文[2]、[3]、[4]的讨论。

## 二、计算结果与讨论

### 1. 分子间作用力幂次对激波厚度的影响, 平动温度的分离效应

激波过渡区的密度剖面是激波结构的重要特征, 激波剖面所占范围大小因分子模型不同而异。文中采用 VHS 模型, 分子间作用力幂次  $\eta$  分别取为  $\infty$  (刚球模型)、12、9 及 5 (Maxwell 分子), 计算了  $M$  数为 8 时的单原子分子气体的激波结构, 所得密度剖面很好显示了  $\eta$  由大变小(分子由刚球逐渐变‘软’)时激波厚度的增加, 见图 1。图中给出了利用逆幂律分子模型在同样流动条件与幂次参数下的直接统计模拟结果(取自文[6])。从图中可见, 用 VHS 模型得到的结果与原始逆幂律模型的模拟结果相符很好。这里要指出, 文[6]中结果表达时,  $x$  坐标由刚球模型给出的平均自由程归一化

$$\text{HS 模型} \quad \lambda = (16\mu/5)(2\pi RT)^{-1/2}/\rho \quad (2-1)$$

$\mu$  为粘性系数,  $R$  为气体常数。而图 1 中, 空间坐标用 VHS 模型的平均自由程归一化(参看文[7])。

$$\text{VHS 模型} \quad \lambda = (2\mu/15)(6-2\omega)(4-2\omega)(2\pi RT)^{-1/2}/\rho \quad (2-2)$$

在将逆幂律模型结果在图 1 中表达时, 已考虑了  $\lambda_{VHS}/\lambda_{HS} = (3-\omega)(2-\omega)/6$  这一因子对于不同分子模型的不同数值。单原子分子的结果还显示了平动自由度经激波的非平衡效应, 即基于波前进方向速度分量的纵向温度与基于与之垂直的速度分量的横向温度的不同, 以及纵向温度对平动动力论温度的超出, 见图 2。

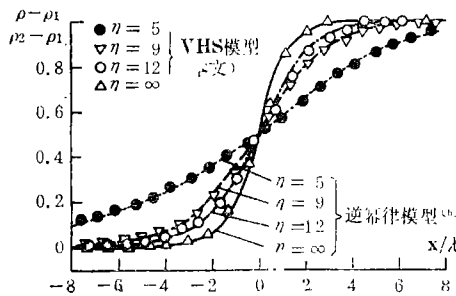


图 1  $\eta$  对 Ar 中激波 ( $M_s = 8$ ) 密度剖面的影响, VHS 模型(本文结果)与逆幂律模型<sup>[6]</sup>直接模拟结果的比较

Fig.1 The dependence of the density profiles across a shock wave in Ar ( $M_s = 8$ ) on  $\eta$ . The comparison of the results of direct simulations by the VHS model (present paper) and the inverse power law model<sup>[6]</sup>

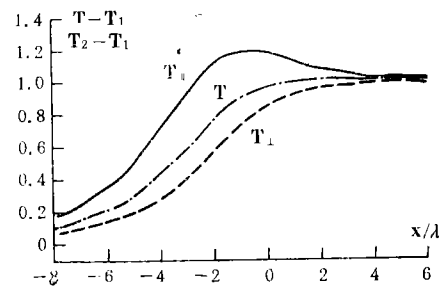


图 2 单原子气体 (Ar,  $\eta = 9$ )  $M_s = 8$  激波纵向温度、横向温度及平动动力论温度剖面

Fig.2 The profiles of longitudinal, transverse and translational kinetic temperatures across a shock wave of monoatomic gas (Ar,  $\eta = 9$ ) of  $M_s = 8$ .

### 2. 混合气体的组分分离效应

双组分混合气体中激波结构表现出组分间的分离效应, 引起广泛兴趣。文中对 2 %

的氦和 98% 的氩的混合气体在  $M_s$  为 2.05 时用 VHS 模型进行了直接模拟。用相同数目的模拟分子模拟了数密度比很大的两种组分, 利用了加权因子的概念, 在较小的  $M_s$  时 ( $M_s \approx 2$ ), 为得定常激波结构, 要在较大时间间隔 ( $n \approx 120$ ) 后取样。结果在图 3 与图 4 中给出。图 3 给出了组分的密度剖面, 可明显看出组分的分离效应。与文 [8] 中的实验结果基本相符。计算结果还显示出较重组分氩的纵向温度超出效应, 见图 4。

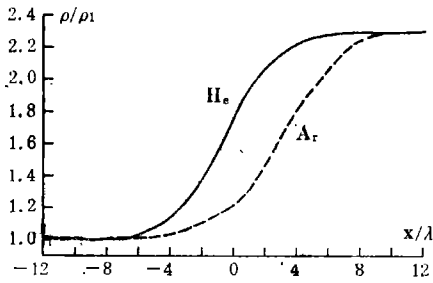


图 3 2% Ar 与 98% He 混合气体中  $M_s=2.05$  激波密度剖面

Fig.3 The density profiles across a shock wave of  $M_s=2.05$  in a 2% Ar and 98% He gas mixture

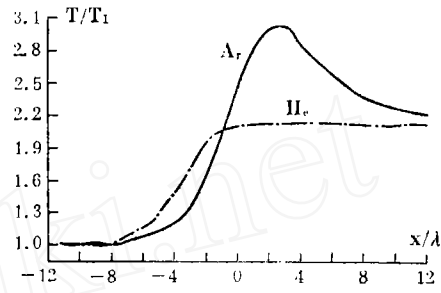


图 4 2% Ar 与 98% He 混合气体中  $M_s=2.05$  激波的平行温度剖面

Fig.4 The parallel temperature profiles across a shock wave of  $M_s=2.05$  in a 2% Ar and 98% He gas mixture

### 3. 双原子分子的激波结构及正激波在固壁上的反射

研究双原子分子经激波压缩时内能的激发与松弛过程是有意义的。由于转动松弛时间与平动松弛时间有相同的量级, 平动、转动间的耦合是双原子分子激波松弛过程的重要特征, 本文用 VHS 与 Larsen-Borgnakke 模型, 模拟分子的非弹性碰撞, 所模拟

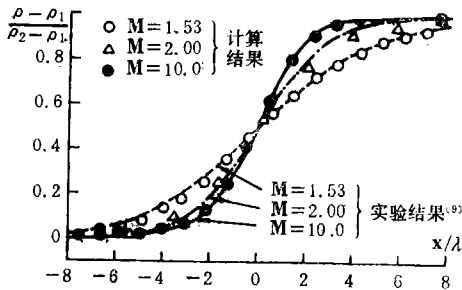


图 5  $N_2$  分子激波密度剖面直接模拟 (Larsen-Borgnakke + VHS 模型) 与实验结果比较

Fig.5 The comparison of the density profiles across shock wave in  $N_2$  gas by the direct simulation (Larsen-Borgnakke + VHS model) and the experimental results

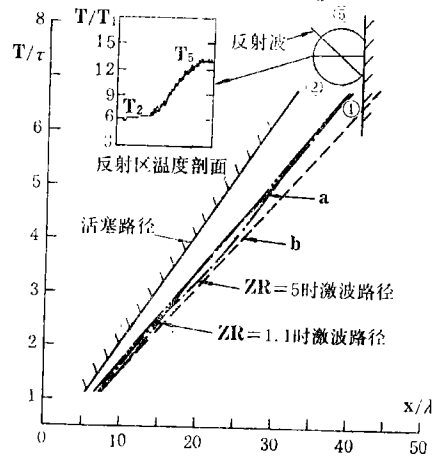


图 6 双原子分子气体 ( $N_2$ ) 中激波的传播与反射 a, b— $\gamma=1.4$  和 1.667 时 Rankine-Hugoniot 激波路径

Fig.6 The propagation and reflection of shock wave in a diatomic gas ( $N_2$ ) a, b—the shock paths according to Rankine-Hugoniot for  $\gamma=1.4$  and 1.667, respectively

的  $N_2$  分子的转动弛豫非弹性碰撞数  $Z_R$  取为 5。对于几个  $M_1$  值计算了激波密度剖面,并与文[9]的实验结果进行了比较,见图 5。图 6 给出了  $x-t$  图中激波的路径( $\tau$  为平均碰撞时间),直线  $a$ 、 $b$  是 Rankine-Hugoniot 关系式对双原子分子  $\gamma=1.4$  和单原子分子  $\gamma=1.667$  的结果。直接模拟所得的激波路径,当  $Z_R=1.1$  时很快与  $a$  直线相符, $Z_R=5$  的结果则介于  $a$ 、 $b$  直线间但最终仍与  $a$  直线相符。直接模拟计算还给出了激波在壁面反射后参数的变化。以温度为例,气体动力学给出 5 区与 1 区的温度比为<sup>[10]</sup>

$$T_{s1} = [(3\gamma - 1)M^2 - 2(\gamma - 1)][2(\gamma - 1)M^2 + (3 - \gamma)] / [(\gamma + 1)^2 M^2] \quad (2-3)$$

可见当  $M=5.1$  时,  $T_{s1}|_{\gamma=1.667} = 20$ ,  $T_{s1}|_{\gamma=1.4} = 12.33$ 。对于单原子分子直接统计模拟给出:当  $M=5.1$  时,  $T_{s1}|_{\text{单原子}} \approx 20$ 。反射区双原子分子的温度模拟结果见图 6 所附细节图。所得  $T_2/T_1 \approx 6$ 、 $T_5/T_1 \approx 12.7$  均与气体动力学预言结果相符较好。

#### 4. 混合气体中载体为双原子分子时重组分单原子分子的温度超出

双组分混合气体中一组分为单原子分子另一组分为双原子分子时,单原子分子(较小密度)的纵向温度的超出表现得特别突出<sup>[11]</sup>。图 7 给出  $M_1=8$  时,  $n_h:n_l=1:10$ ,  $m_h:m_l=10:1$  情况下,重组分(单原子分子)的平行温度的超出。  $T_1$ ,  $T_2$  为激波前后的温度,从图可见  $(T-T_1)/(T_2-T_1)$  达到约为 2.3 之值,其中  $T$  为重组分平行温度。轻组分为双原子分子,  $Z_R$  值分别取为 2、5、10、20。尽管轻组分转动温度对不同  $Z_R$  值为不同,但重组分平行温度的超出表现出对  $Z_R$  值的不敏感。这样的数值实验还期待与实验结果的比较。

混合气体中重组分单原子分子的温度超出引起许多研究者的兴趣,这在 17 届国际稀薄气体动力学会议上得到反映。我们用第二节中提到的第二种方法对这一问题进行模拟得到了更为准确的结果,并给出了温度超出机制的解释和预言超出值的半经验公式(见文[12])。

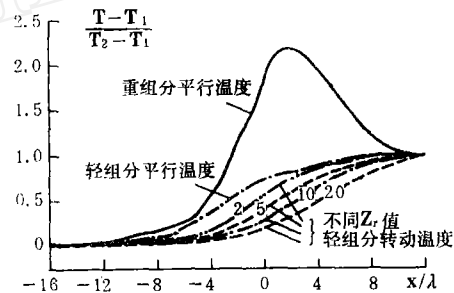


图 7 单原子分子(重组分)与双原子分子(轻组分)混合气体中经激波的温度剖面  
Fig.7 The temperature profiles across a shock wave in a monoatomic (heavy-trace) and diatomic (light-carrier) gas mixture

#### 参 考 文 献

- [1] Bird, G.A., Molecular Gas Dynamics, Clarendon Press, Oxford, (1976).
- [2] Bird, G.A., 12th Symposium on Rarefied Gas Dynamics, (1980), 239—255.
- [3] Borgnakke, C. and Larsen P.S., J. of Comp. Physics, 18, (1975), 405—420.
- [4] 沈青、吴万泉、胡振华、徐晓燕, 第五届全国计算流体力学会议, (1990).
- [5] Beltikov, A.E. et al., Preprint 183-88, Institute of Thermophysics, Siberian Branch of Ac. Sci. USSR, (1988).
- [6] Bird, G.A., Phys. of Fluids, 13, (1970), 1172—1177.
- [7] Bird, G.A., Phys. of Fluids, 26, (1983), 3222—3223.
- [8] Center, R.E., Phys. of Fluids, 10, (1967), 1777—1784.
- [9] Alsmeyer, H., J. of Fl. Mech., 74, 3 (1976), 497—513.
- [10] Henshall, B.D., ARC Paper 291, (1956).

- [11] Bird, G.A., 14th Symposium on Rarefied Gas Dynamics, 1, (1985), 175.  
[12] Shen, C., Hu, Z., Wu, W. and Xu, X., Paper presented at 17th Symposium on Rarefied Gas Dynamics, Aachen, (1990), 7.8—7.14.

## MONTE CARLO SIMULATION OF THE STRUCTURE AND REFLECTION OF NORMAL SHOCK WAVES

Shen Qing

(*Institute of Mechanics, Academia Sinica*)

Hu Zhenhua Xu Xiaoyan Wu Wanquan

(*Institute of Environmental Features*)

**Abstract** The structure and reflexion of normal shock wave in simple monoatomic gas, diatomic gas and in gas mixtures are simulated by the direct simulation Monte Carlo method (DSMC). To simulate the intermolecular forces the variable hard sphere model (VHS) is used, and the interchange of translational energy and the internal energy is simulated by the phenomenological model of Larsen and Borgnakke. The thickness of the shock wave transition zone obtained by the VHS model for different values of the power in the intermolecular force is shown to be identical with the result obtained by the inverse power law model, provided the expressions for the mean free path corresponding to the viscosity expressions derived for relevant models are used accordingly. Also shown is the effect of non-equilibrium in the translational degrees of freedom across shock wave in a simple monoatomic gas, i. e. the difference between the longitudinal (parallel) temperature based on the velocity component in the direction of wave progression and the transverse (perpendicular) temperature based on the velocity component in the direction perpendicular to the wave motion. For gas mixtures of two components calculations reveal the component separation effect and the effect of overshoot of the heavy component parallel temperature. In the paper the structure and the process of propagation and reflexion of normal shock wave in a diatomic gas (i. e. with coupling between the translational and rotational energies of a molecule) is also simulated, with the rotational relaxation number  $Z_R$  chosen to be 5. The density profiles across the shock obtained are in good agreement with the experimental data, and the change of the parameters experienced

in the reflection of the shock from a solid wall are found to be in excellent accordance with the result from the gas dynamic relations. Initiative investigations have been carried on the parallel temperature overshoot in a mixture of heavy (trace)-light (carrier, diatomic) gases. Simulation with more exact method and the analysis of the overshoot data and mechanism are underway and will be published elsewhere.

**Key words** shock wave structure, shock wave reflection, direct simulation Monte Carlo method.

www.cnki.net