

405-413

第13卷 第4期
1995年12月空气动力学学报
ACTA AERODYNAMICA SINICAVol.13, No.4
Dec., 1995

过渡领域高超声速圆柱绕流直接模拟*

樊菁 沈青

中国科学院力学所, 北京(邮政编码 100080)

A 摘要 本文用直接模拟蒙特卡罗方法模拟了再入速度为7.5km/s, 高度分别为80、85、90km, 物壁是完全漫反射有限催化壁的圆柱绕流。在80km考察了壁面催化率的影响。计算结果表明, 稀薄程度对壁面物理量和流场结构有十分显著的影响, 热力学和化学非平衡效应显著。随着高度降低, 壁面催化率对壁面热流量等有明显影响。而流场沿物面方向变化比较缓慢, 应用较粗的沿壁向网格也可以得到满意的宏观结果。最后, 我们作了球体绕流的数值模拟并与半球头柱头部热流量的实验结果作了比较, 二者符合良好。

关键词 DSMC 方法, 非平衡, 壁面催化, 稀薄程度, 高超声速流。

⑮ 引言

对过渡领域高超声速流的兴趣主要源于航天飞行的需要。航天飞行器约以7.5km/s或更高的速度运动, 实际发射前, 要求对包括过渡领域在内的流场和热流气动参数有尽可能多的了解。

但是, 进行类似参数下的地面实验设备还没有建立起来, 求解过渡领域的控制方程——Boltzmann方程十分困难, 并且Boltzmann框架也未能包括高空中实际发生的内能松弛及化学反应过程。而Bird提出的直接模拟蒙特卡罗(DSMC)^[1,2]方法经过20多年的发展^[3~7], 日渐成熟, 已能较好地模拟过渡领域的复杂流动, 引起了人们日益广泛的兴趣。

本文用DSMC方法模拟了80、85、90km下的圆柱绕流, 重点考察稀薄程度、壁面催化率对壁面热流量、阻力系数、物面压力和摩擦力的分布以及流场的影响。对壁向不同粗细网格进行了比较计算。最后, 将球体绕流壁面热流量的计算结果与半球头柱头部热流量的实验结果^[8]作了比较, 二者符合良好。

一、计算方法和计算条件

在DSMC方法中, 真实气体由若干模拟分子代表, 其中发生的过程解耦为分子自由运动和相互碰撞。分子的位置、速度、内能等由于分子运动、相互碰撞及分子撞击壁

* 国家自然科学基金资助项目。

本文于1994年5月16日收到, 12月5日收到修改稿。

V211
0354.4

面而随时间不断变化。计算通常从平衡态或真空开始,在确定的边界条件下,经非定常过程趋向定常状态。利用流场对称性可减少计算区域维数,但碰撞总在三维速度空间进行。网格作用仅限于选取分子碰撞对和进行宏观物理量统计。通过合适的算法,DSMC方法可在网格分子数很小的情况下正确模拟流动并使计算量与分子数成正比^[9~12]。

本文用变径刚球(VHS)模型^[6]模拟分子间相互作用力,即碰撞后的速度按刚球散射规律计算,但碰撞截面 $\sigma_T(c_r)$ 随 c_r 的变化规律与逆幂律模型一致

$$\begin{cases} \sigma_T(c_r) = \sigma_{ref} \left[\frac{m_r c_r^2}{2(2-\omega)kT_{ref}} \right]^{-\omega} \\ \sigma_{ref} = \frac{15(2\pi m_r kT_{ref})^{1/2}(202-12\omega)\mu_{ref}}{8\Gamma(4-\omega)(2-\omega)^\omega [205-12\omega(2-\omega)]} \end{cases} \quad (1)$$

其中, σ_{ref} 和 d_{ref} 分别是参考温度 T_{ref} 下碰撞截面和碰撞直径, μ_{ref} 是在 T_{ref} 下的粘性系数, m_r 是折合质量, k 是 Boltzmann 常数, $\omega=2/(\eta-1)$, η 是分子相互作用逆幂律模型中的指数幂次。本文用到的几种分子和原子的 d_{ref} 值见表1。用与VHS模型相适

表1 273K时几种分子和原子的 d_{ref} 值

Table 1 Values of d_{ref} for molecules and atoms under 273K

	N ₂	O ₂	NO	N	O
$d_{ref}(\text{m} \times 10^{-10})$	4.07	3.96	4.0	3.0	3.0

应的公式(2)计算分子平均自由程^[13],式中 $\tilde{\omega}=\omega+(1/2)$, μ 是粘性系数, ρ 是密度, R 是普适气体常数

$$\lambda = \frac{1}{\rho} (2\mu/15) (7-2\tilde{\omega}) (5-2\tilde{\omega}) (2\pi RT)^{-1/2} \quad (2)$$

用随机取样频率法估算分子碰撞频率^[13]。所谓随机取样频率法,就是从任一网格的所有可能的分子碰撞对中,有放回的随机抽样 M 对分子,以 $\sum_{i=1}^M \sigma_T(c_r) c_r / M$ 估计碰撞频率表达式 $\nu = n \overline{\sigma_T(c_r) c_r}$ 中的 $\overline{\sigma_T(c_r) c_r}$ 。数学分析和检验计算表明,这种估算办法是可行的。

分子碰撞后的平动能、转动能和振动能分配按 Larsen-Borgnakken 现象论模型^[4]进行

$$f(E'_1/E_s) \propto (E'_1/E_s)^{1-\omega} (1-E'_1/E_s)^{\omega-1} \quad (3a)$$

$$f(E'_{i_1}/E_{i_s}) \propto (E'_{i_1}/E_{i_s})^{\frac{1}{2}-1} (1-E'_{i_1}/E_{i_s})^{\frac{1}{2}-1} \quad (3b)$$

其中, $f(\dots)$ 代表分布函数, $E_s = E_1 + E_{i_1} + E_{i_2} = \text{const}$ 是碰撞对总能量, $E_1 = (1/2)m_r c_r^2$ 是平动能, E_{i_1} 代表内能,下下标1、2、*分别表示分子1的、分子2的、分子1和分子2之和的,上标(')表示碰撞后的, $s = (s_1 + s_2)/2$, s_1 和 s_2 分别是分子1和分子2被激发的内自由度。首先用取舍法^[13],根据(3a)确定 E'_1 ,而 $E'_{i_*} = E_s - E'_1$,再用(3b)确定 E'_{i_1} ,易知 $E'_{i_2} = E'_{i_*} - E'_{i_1}$ 。振动松弛所导致的分配函数的奇性则由文献[7]给出的奇异分布函数取样法解决,弹性碰撞次数、转动非弹性碰撞次数和振动非弹性碰撞次数之

比是 $0.78:0.2:0.02^{[1]}$ 。

化学反应速率常数通常可以写作 $k(T) = aT^b \exp[-E_a/KT]$ ，其中 a 、 b 是常数， E_a 是离解能。Bird^[5] 在假定反应几率 P 与 T 显式无关的前提下，认为仅当 $E_a \geq E_c$ 时才可能发生反应，给出了与 VHS 模型相适应的 P 表达式^[6]

$$P_r = \frac{ea}{2\sqrt{\pi} \langle d_{r,i}^2 \rangle} \cdot \frac{\Gamma(\langle s \rangle + 2 - \omega)}{\Gamma(2 - \omega) \Gamma(\langle s \rangle + 1.5 + b)} \left(\frac{m_r}{2k} \right)^{\frac{1}{2} - \omega} \left[\frac{m_r}{2(2 - \omega)kT_{rel}} \right]^\omega \cdot \left[1 - \frac{E_a}{E_c} \right]^{(\omega) + 1 - \omega} \left[\frac{E_a - E_c}{k} \right]^{b - 0.5 + \omega} \quad (4)$$

这里， ε 是对称因子，对相同分子取 2，不同分子取 1， $\langle s \rangle$ 是分子对内自由度的算术平均值。每次碰撞中，仅当 P 大于 0~1 间一均匀随机数时发生化学反应。采用 5 组分 (N_2, O_2, NO, N, O) 的 Bortner 化学反应系统^[14]，由于复合反应影响小^[15]，将其忽略，只考虑 15 个离解反应和 4 个置换反应。物壁假定是完全漫反射有限催化的，N 和 O 被壁面吸附后，随机配对，以相应的壁面催化率作标准量，用取舍法判断是否发生壁面复合反应，N 和 O 的壁面有限催化率分别取为 0.0077^[16] 和 0.0049^[17]。

计算区域如图 1，BFC 是物壁，在对称线 AB 和 CD 上用镜面反射边界条件。分子由 AE 进入模拟区域 AEDCFBA。单位时间、单位面积从周向角为 θ 的外边界处进入区域的分子数目为^[11]

$$N_i = \frac{n v_m}{2\sqrt{\pi}} \left\{ \exp(-s^2 \cos^2 \theta) + \sqrt{\pi} s \cos \theta [1 + \operatorname{erf}(s \cos \theta)] \right\} \quad (5)$$

来流分子的速度等于来流速度加上分子热运动速度，热运动速度在圆柱的轴向分量和切向分量都遵循 Maxwell 分布，法向分量 u_n 的分布函数为

$$f\left(\frac{u_n}{v_m}\right) = \frac{u_n/v_m + s_n}{\sqrt{\pi} v_m} \exp(-u_n^2/v_m^2) \quad (6)$$

其中 $s = u_\infty/v_m$ ， u_∞ 、 v_m 、 s_n 分别是来流速度、分子最可几热运动速度、来流速度沿圆柱法向分量与 v_m 之比。当分子逸出外边界 AED 时被注销。在径向和周向都采用指数型网格，以加密激波外缘到物壁(沿径向)和驻点线附近(沿周向)网格，因为正是在这些区域流动参数变化比较激烈。做反变换，回到均匀网格以找出分子所属网格。

具体计算参数和部分计算结果见表 2。 v 、 T 代表来流速度和温度， q 是热流量， $C_D = 2F_x/\rho_\infty v_\infty^2 S$ 是阻力系数， F_x 是物体在 x 方向受到的力， S 是最大迎风面积。下标 0、 ∞ 、 w 和 i 代表驻点、无穷远、壁面和组分 i 的值。实际计算中其余参数取值如下： $T_\infty = 1000\text{K}$ ， $v_\infty = 7.5\text{km/s}$ ，圆柱半径 $r = 0.0254\text{m}$ ，在 80km 和 85km，来流组分摩尔百分比为 $N_2:O_2 = 0.763:0.237$ ，在 90km， $N_2:O_2:O = 0.788:0.209:0.003$ 。

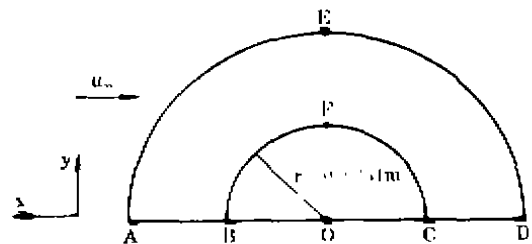


图 1 计算区域
Fig.1 Schematic diagram of computational domain

表2 本文计算参数和部分计算结果

Table 2 Parameters of the present calculation and some calculated results

高度 (km)	T_∞ (K)	ρ_∞ (kg/m ³)	λ_∞ (m)	Kn_∞	M_∞	Re_∞	网格划分 径向×周向	C_D	q_0 (kW/m ²)
80	181	1.999×10^{-5}	3.96×10^{-9}	0.16	27.8	230	50×15	1.55	1437.2
85	181	7.955×10^{-6}	9.94×10^{-9}	0.39	27.8	92	25×15	1.71	964.6
90	181	3.418×10^{-6}	2.30×10^{-8}	0.91	27.8	42	25×15	1.83	494.5

通过沿壁向粗细二种网格的比较计算,我们考察了用较粗网格的可行性。DSMC方法原则上要求^[1], (1)物理量经过每个网格变化不大。(2)网格尺寸小于局部分子平均自由程。条件(2)是苛刻的,对复杂流动尤其如此。在实践中,既有不满足(2)得到良好宏观流场的例子^[18],也有与此相反的例子^[19],网格究竟怎样取合适,尚无准则可依。对85km的圆柱绕流,在径向布置25个网格,在周向分别布置15个和7个网格。周向网格数取得少,两种情况皆不满足(2),径向从激波外缘到物壁满足(2),从外边界到激波外缘不满足(2)。对比结果表明,无论是壁面热流系数 $C_H=2q/(\rho_\infty v_\infty^2)$ (图2),还是壁面摩擦系数 $C_f=2\tau/(\rho_\infty v_\infty^2)$,两者符合的都很好。这说明目前的网格布置方法适合于这类流动,同时也说明流动沿周向变化缓慢,一维驻点线模型^[20]的模拟结果有良好的物理背景和实用价值。

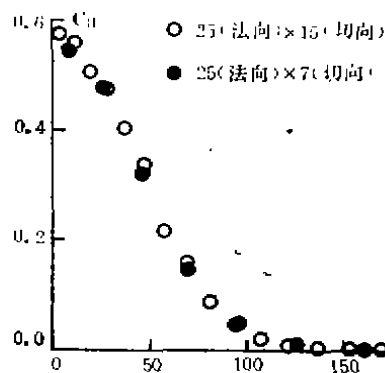


图2 不同壁向网格计算结果的比较

Fig.2 Comparison between the results with different mesh grid along the wall direction

二、计算结果和讨论

1. 稀薄程度的影响

图3是沿驻点线各物理量随高度的变化情况, η 是距物面距离,感兴趣的区域是激波和靠近壁面处。为突出其中的现象,没有给出全部模拟结果(下同)。密度在物面附近激增是冷物壁再入的典型特征(图3(a));随高度 H 增加,法向速度变化渐缓(图3(b)),在90km已见不到高超声速绕流中常见的经激波物理量跳跃现象,而且激波和边界层逐渐合并了(图3(c))。值得指出的是,图3(a)、(b)、(c)都显示出连续激波过渡带,即使在较低高度下,其厚度也与边界层厚度相当。图3(d)给出N的摩尔百分比随高度的变化情况,实际上表征着整个流场的化学反应状况。在90km化学反应已变得很微弱,可以预计90km以上化学反应的影响将十分有限(对所考察的物理尺寸)。

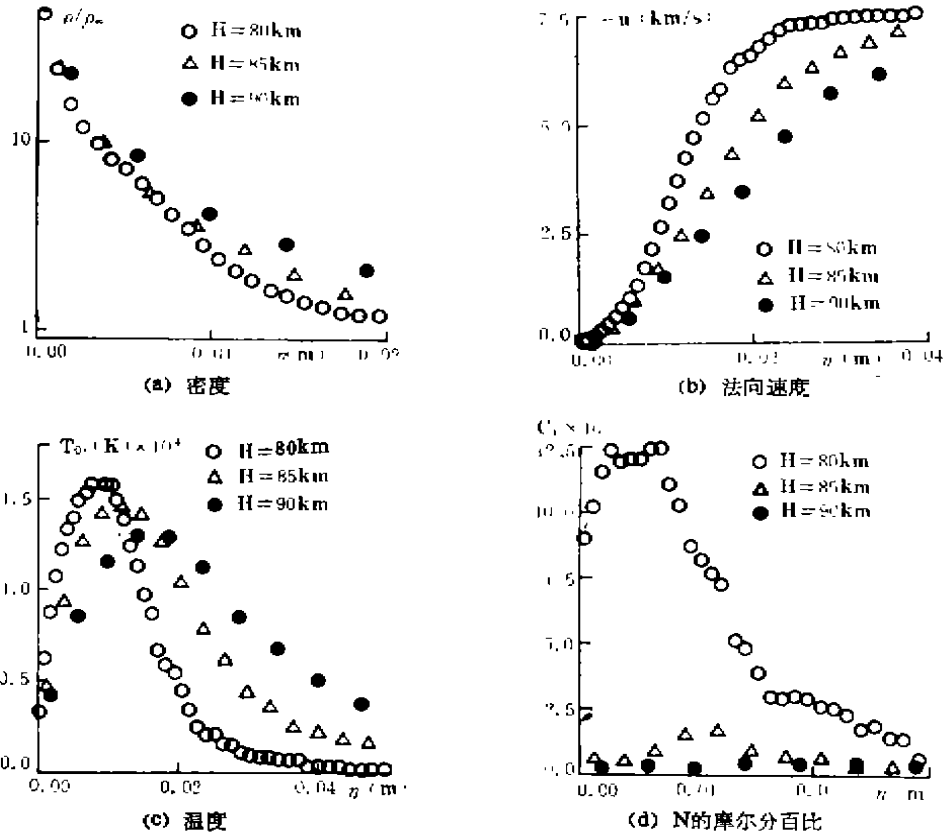


图 3 稀薄程度对驻点线物理量的影响
Fig.3 Effects of rarefaction on stagnation streamline values

从图4(a)可看出热力学非平衡现象非常显著,与图3(a)相比,平动温度远在密度前开始上升且升得很快。这是自由来流分子和受物面影响的分子在激波外缘形成的双峰速度分布所致。图4(b)与此一致,尽管 N_2 具有较高的离解活化能阈值($1.559 \times 10^{-18}\text{ J}$),但从激波外缘($\eta \approx 0.026\text{ m}$)到激波($\eta \approx 0.01\text{ m}$),其摩尔百分比呈直线下降,说明在此区域

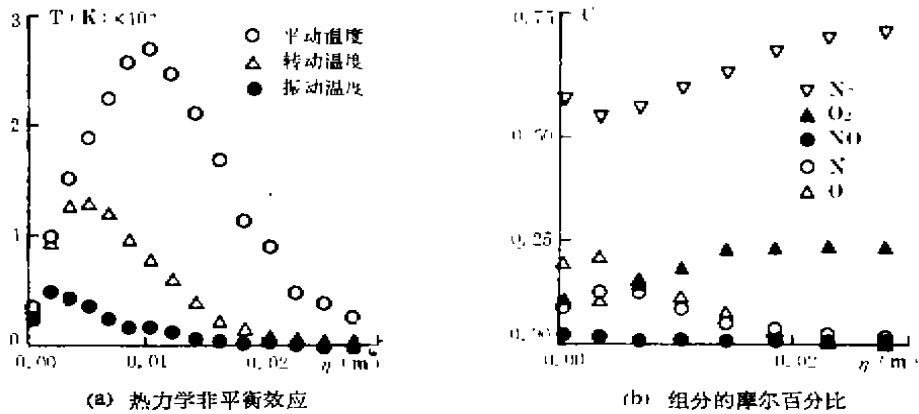


图 4 80km 高度处沿驻点的流场结构
Fig.4 Stagnation streamline structure at altitude 80km

发生碰撞的分子对具有很高能量。 N_2 的摩尔百分比在壁面突然升高,这是较高的 N_2 离解活化能阈值和冷壁效应(图3(a))所致。当较高的密度导致了较大的分子碰撞频率后,从 $\eta \approx 0.012m$ 到物壁,由于 O_2 的离解活化能阈值($8.19 \times 10^{-19}J$)较低,其离解速率陡然增高,远远超过了 N_2 的离解速率,并一直保持到物壁。 O 的摩尔百分比在壁面附近下降而 NO 的摩尔百分比升高是由于 N_2 和 O 发生置换反应的活化能阈值($5.175 \times 10^{-19}J$)低于 O_2 的离解阈值及冷物壁的聚集作用引起的。

沿壁面物理量随高度的变化有如下特点:压力系数 $C_p = 2p/(\rho_\infty v_\infty^2)$ 几乎与高度无关,从 0° 到 90° ,类似余弦函数形状。 C_f 的最大值尽管都出现在 45° 左右,峰值差别

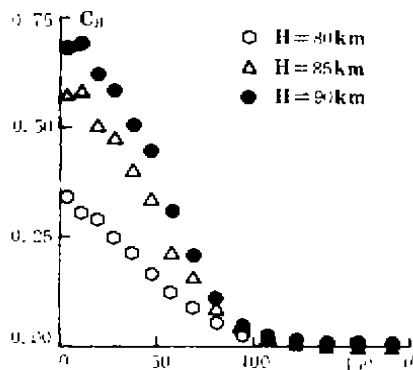


图5 稀薄程度对壁面热流系数的影响
Fig.5 Effect of rarefaction on surface heat transfer coefficient

却很大,这与图3结论一致。从 120° 到 180° , C_p 和 C_f 几乎为零,说明在这里的物面附近形成了真空区,与我们以前的计算结果一致^[12]。 C_D 随高度的增长态势(表2)可从 C_f 的变化规律中获得满意的解释。 C_H 随高度变化敏感(图5)的原因已在前面解释过了。

速度滑移($u_{y=0}/u_\infty$)大约在0.03以下,紧贴壁面网格内的温度与壁温相差悬殊,高度增高,愈加突出。除去网格划分较粗的影响,壁面温度跳跃现象相当明显,这与我们以前在较细网格下得到的结果一致^[12]。

2. 壁面催化率的影响

壁面催化率 γ_i 起作用需两个条件:(1)流场能量足以发生离解反应,从而可提供进行催化反应所需的原子。(2)存在一定程度的化学非平衡使壁面附近有较多的原子存在。航天飞行中可能具备这两个条件。因此,有必要考虑壁面催化的影响。

在80km考虑完全催化、半催化(N 和 O 的 γ_i 都取为0.5)、有限催化、完全不催化四种情况。容易看到壁面热流量对 γ_i 比较敏感(图6)。计算还表明, γ_i 对壁面附近的组分摩尔百分比有重要影响,对其它物理量影响不大。

由于上述条件(1)在较低高度下更容易被满足,而条件(2)在过渡领域流动中常常被满足,故可预计壁面催化率随高度降低影响增大。

3. 与实验结果的比较

可供参考比较的类似流动参数下的实验数据非常有限。为了与Boylan所测半球头柱壁面热流量的实验结果做比较,我们模拟了球体绕流。实验气体是 N_2 ,自由来流马赫数为20.8,总温和壁温分别为4150K和332K,总压是12个大气压,球头半径仍为0.0254m。计算中球的半径、壁温、来流马赫数与实验值相同,并由理想气体等熵膨胀公式得到: $T_\infty = 47.4K$, $u_\infty = 2.919km/s$, $\rho_\infty = 1.378 \times 10^{-5}kg/m^3$,所用的比热比为1.4。两者热流分布符合得很好(图7),引起驻点热流量相差15%的原因之一可能是用理想

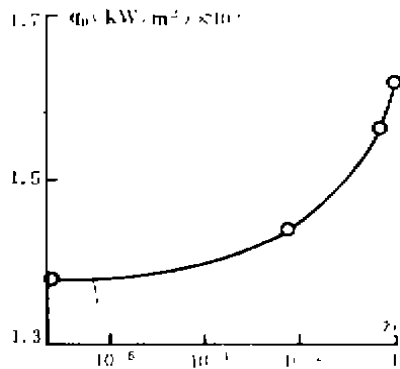


图6 壁面催化率对壁面热量的影响
Fig.6 Effect of surface catalysis on heating

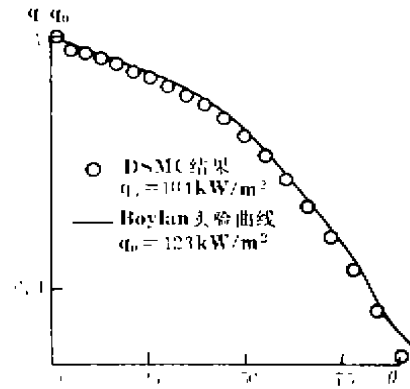


图7 DSMC 计算结果与实验结果的比较(球体)
Fig.7 Comparison of heattransfer around a sphere

气体等熵膨胀公式求无穷来流条件有所不妥。

应该指出的是, V Cuda Jr. 等用DSMC方法模拟半球头柱绕流也得到了类似的结果^[21]。我们也做了此条件下圆柱绕流模拟。有热力学非平衡现象出现, 但总体温度较低, 没有化学反应发生。这在一定程度上暴露了地面实验的弱点, 即现有设备不能完全模拟实际飞行中的高速条件。

三、结 论

1. 稀薄程度对流场结构及壁面物理量都有重要影响, C_D 、 C_H 、 C_f 随高度增高明显增长。
2. 热力学和化学非平衡现象突出, 存在不宜忽略的壁面温度跳跃现象。
3. 对不同高度所作的类似图6的计算表明, 壁面催化率随高度降低影响增大。
4. 对圆柱和球绕流, 放宽网格尺寸仍能得到满意的宏观物理结果。
5. DSMC 方法的计算结果与实验符合良好, 增强了用 DSMC 方法模拟实验不能模拟的实际飞行的意义。

参 考 文 献

- 1 Bird G A. Approach to Translational Equilibrium in a Rigid Sphere Gas, *Phys. Fluids*, 1963, 6:1518
- 2 Bird G A. Shock Wave Structure in a Rigid Sphere Gas, Proc. of 4th Symp. on Rarefied Gas Dyn., 1965, 216~222
- 3 Bird G A. *Molecular Gas Dynamics*, Oxford, Clarendon Press, 1976.
- 4 Borgnakke C, Larsen L S. Statistical Collision Model for Monte Carlo Simulation of Polyatomic Gas Mixture, *J. Comput. Phys.*, 1975, 18, 405~420
- 5 Bird G A. Simulation of Multi-Dimensional and Chemically Reacting Flows, Proc. of 11th Symp. on Rarefied Gas Dyn., 1978, 365~388
- 6 Bird G A. Monte Carlo Simulation in an Engineering Context, Proc. of 12th Symp. on Rarefied Gas Dyn., 1980, 239~258

- 7 沈青等, 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
- 8 Boylan D A, Laminar Convective Heat-Transfer Rates on a Hemisphere Cylinder in Rarefied Hypersonic Flow, *AIAA J.*, 1971, 9(8), 1661~1663
- 9 Koura K, Null-Collision Technique in the Direct Simulation Monte Carlo Method, *Phys. Fluids*, 1986, 29, 3508~3511
- 10 Ivarov M S, Regezhinski S V, *USSR Comput. Maths. Phys.*, 1988, 28(4), 63~71
- 11 Bird G A, Perception of Numerical Methods in Rarefied Gas Dynamics, Proc. of 16th Symp. on Rarefied Gas Dyn., 1989, 211~226
- 12 樊著, 沈青. 直接模拟蒙特卡罗方法中的一个新算法——随机取样频率法, 计算流体力学的理论、方法和应用, 北京: 科学出版社, 1992, 127~130
- 13 Bird G A, Definition of Mean Free Path for Real Gases, *Phys. Fluids*, 1983, 26, 3222~3223
- 14 Bortner M H, Suggested Standard Chemical Kinetics for Flow Field Calculations—A Consensus Opinion, *AMRAC Proc.*, 1986, 14(1), 569~581
- 15 沈青. 真实流体的非平衡效应, 现代流体力学进展, 北京: 科学出版社, 1991, 108~114
- 16 Scott C D, Catalytic Recombination of Oxygen and Nitrogen in High Temperature Reusable Surface Insulation, *Progress in Astron. and Aeron.*, 1981, 77, 192~212
- 17 Zoby E V et al, Temperature-Dependent Reaction Rate Expressions for Oxygen, *Progress in Astron. and Aeron.*, 1985, 96, 445~464
- 18 Muntz E P et al, A Review of the Kinetic detail Required for Accurate Predictions of Normal Shock Waves, Proc. of 17th Symp. on Rarefied Gas Dyn., 1990, 198~216
- 19 Nanbu K, Numerical Simulation of Boltzmann Flows of Real Gases—Accuracy of Models Used in the Monte Carlo Method, Hypersonic Flows for Reentry Problems, Springer-Verlag Press, 1991, 1, 120~138
- 20 Bird G A, Direct Simulation of Typical AOIV Entry Flows, *AIAA-86-1310* 1986.
- 21 Cuda V Jr et al, Direct Simulation of Hypersonic Flows over Blunt Slender Bodies, *AIAA-86-1348*, 1986.

The Monte Carlo Direct Simulation of the Hypersonic Nonequilibrium Flow Past a Circular Cylinder in Transition Regime

Fan Jing Shen Qing

(*Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences*)

Abstract Presented are the results of Monte Carlo direct simulation of hypersonic flow past a circular cylinder for reentry velocity of 7.5km/s and altitudes of 80km, 85km and 90km. The wall is assumed to be diffuse with full thermal accommodation and finite catalysis. The numerical simulation shows that the effect of rarefaction on the wall physical qualities and flow field structure is significant, the thermodynamic and chemical nonequilibrium effects are evident, and that the effect of the surface recombination probabilities on the surface heat transfer is more evident at lower altitudes. As the flow field characteristics change slowly along the wall direction, satisfactory macroscopic results are obtained with relatively coarse grid along the wall. Finally, a DSMC calculation of the flow around a sphere is made and the heat transfer rate is compared with the measurements obtained in a hypersonic wind tunnel by Boylan. The results are shown to be in good agreement.

Key words DSMC method, nonequilibrium, surface catalysis, rarefaction, hypersonic flow.