

DSMC 法模拟双组元姿控发动机喷管流动

王平阳, 程惠尔, 杨卫华

(上海交通大学 工程热物理研究所, 上海 200030)

摘 要: 为了准确获得喷管内不同燃气成分的参数, 采用直接模拟蒙特卡罗 (DSMC) 方法结合可变软球 (VSS) 模型模拟喷管流动。单组分的计算结果与文献比较表明, 所采用的程序和计算结果可信。对真空双组元钟形喷管内流动的模拟结果表明, 压强扩散和热扩散的综合效应导致质量越大的分子越趋向于向边界层内扩散。

关键词: 双元推进剂火箭发动机; 姿控火箭发动机; 蒙特卡罗法; 喷管气流; 数值仿真

中图分类号: V435.11; TK121 **文献标识码:** A **文章编号:** 1001-4055 (2003) 02-0112-04

DSMC simulation of nozzle flow of bipropellant attitude control engine

WANG Ping-yang, CHENG Hui-er, YANG Wei-hua

(Inst. of Engineering Thermal Physics, Shanghai Jiaotong Univ., Shanghai 200030, China)

Abstract: To accurately obtain the parameters of different species in a nozzle, the direct simulation Monte Carlo (DSMC) method in combination with the variable soft sphere (VSS) model was employed in the analysis of a low-density gas flow in a small nozzle. Comparison of the present results for simple gas with those of previous work in reference shows that the results are believable. Based on this, the mixed gas flow in the bell-shaped nozzle of a bipropellant engine was simulated. The results show the integrated effect of the pressure and thermal diffusion caused the heavy gases to move towards boundary layer.

Key words: Bipropellant rocket engine; Attitude control rocket engine; Monte Carlo method; Nozzle flow; Numerical simulation

1 引 言

对姿态控制发动机, 大面积比小推力喷管内流动包括连续流和稀薄气体流, 而 DSMC 方法是处理稀薄气体流动的一种行之有效的方法^[1,2]。目前的相关文献大都针对单组分工质以及恒温壁面^[1,3-6]或等熵流动^[7]。对于多组分稀薄气体流动, 用于 DSMC 方法的 VHS 模型应被 VSS 模型取代, 因为该模型不仅能准确给出粘性系数和导热系数, 并能通过参数 α 准确模拟 Schmidt 数。黄琳等^[8]采用 DSMC 并行算法模拟了胖发动机的喷管内流场, 本文采用 DSMC^[9] 方法模拟真空推力为 0.5N 的双组元 (N_2O_4/MMH) 发动机喷管流动。采用 VSS 模型计算碰撞截面和偏转角, 并考虑了拉伐尔喷管壁面向真空环境的辐射散热。重点在于考察各组分在喷管出口截面的分布情况。

2 DSMC 方法描述

DSMC 方法是求解 Boltzmann 方程的一种行之有效的方^[2]法, 采用有限个仿真分子代替数量巨大的真实气体分子, 由概率密度模型给出仿真分子的运动、碰撞和传能过程, 并纪录随时间而改变的分子的位置坐标、速度分量和内能。最后通过统计网格内仿真分子的运动状态实现对真实气体流动问题的模拟。在 DSMC 方法中, “分子” 是单原子分子、双原子分子和多原子分子的统称。

本文采用无时间计数器 (NTC) 法进行碰撞抽样; Boyd 转动松弛抽样几率函数^[10] 结合通用的 L-B 模型处理非弹性碰撞的能量传递; 温度全调节的漫反射模型模拟气-壁作用; 假设没有化学反应和振动传能。

• 收稿日期: 2002-03-05; 修订日期: 2002-07-15。基金项目: 高等学校博士学科点专项科研基金 (No.20010248024) 和博士后基金资助课题。

作者简介: 王平阳 (1971—), 男, 博士后, 研究领域为介质辐射、火箭发动机热分析以及羽流。

2.1 分子出场及碰撞过程

假设燃气成分在喷管喉部均匀分布,外部为真空环境。为了使计算更有效率,分子出场速度按照平衡态气体速度分布函数采用接受-拒绝方法进行选取^[9]。分子运动一个时间步长 Δt 后,需要进行碰撞处理,以获得碰撞后的速度和能量。

2.1.1 可能发生碰撞的分子对数

假设分子碰撞为二体碰撞。对于 NTC 法,体积为 V_c 的网格内可能发生碰撞的分子总对数 N_c 为^[9]:

$$N_c = \frac{1}{2} N_p \bar{N}_q F_c [(\sigma_T c_r)_{\max}]_{pq} \Delta t / V_c \quad (1)$$

式中, N_p 为网格 c 内组元 p 的仿真分子数; $\bar{N}_q$ 为网格 c 内,本次计算前组元 q 的平均仿真分子数; F_c 是每个仿真分子代表的真实分子数; $[(\sigma_T c_r)_{\max}]_{pq}$ 是组元 p 和 q 分子的碰撞截面 σ_T 与相对速度 c_r 乘积的最大值。采用 0~1 之间均匀分布的随机数 R 来判断分子对是否发生碰撞,即如果 $R < \sigma_T c_r / [(\sigma_T c_r)_{\max}]_{pq}$ 则发生碰撞,否则没有碰撞。可见, σ_T 是碰撞过程的关键因素。

2.1.2 碰撞截面

对于 VSS 模型,总的碰撞截面仍然采用硬球(HS)模型的形式,即 $\sigma_T = \pi d_m^2$, d_m 为碰撞分子对的平均分子直径。单个分子直径 d 则由下面公式给出

$$d = d_{\text{ref}} [(c_r \beta)^{1-2\omega} / \Gamma(5/2 - \omega)]^{1/2} \quad (2a)$$

式中 β 是参考温度 T_{ref} 下最可几速度的倒数; ω 是粘性指数; Γ 是 gamma 函数; d_{ref} 是 T_{ref} 下的参考直径,其计算式为

$$d_{\text{ref}} = \left[\frac{5(\alpha + 1)(\alpha + 2)(mkT_{\text{ref}}/\pi)^{1/2}}{4\alpha(5 - 2\omega)(7 - 2\omega)\mu_{\text{ref}}} \right]^{1/2} \quad (2b)$$

式中 m 是分子质量; k 是 Boltzmann 常数; μ_{ref} 是 T_{ref} 下的粘性系数; α 是 VSS 模型参数。

2.1.3 碰撞后的运动速度

VSS 模型中,相对速度偏转角 φ 以及碰撞平面与参考平面的夹角 θ 分别为

$$\varphi = \arccos(2R_p^{1/\alpha} - 1); \quad \theta = 2\pi R_\theta \quad (3)$$

对于非弹性碰撞,令 $V'_r = \sqrt{2E'_r/m_r}$ 为传能后相对速度的大小,其中 E'_r 为碰撞后总的平动能, m_r 为简并质量,则碰撞后的相对运动速度分量分别为

$$\begin{aligned} V_{rx}^* &= V'_{rx,e} \cos \varphi + \sin \varphi \sin \theta \sqrt{V_{ry,e}^2 + V_{rz,e}^2} \\ V_{ry}^* &= V'_{ry,e} \cos \varphi + \sin \varphi (V'_r V'_{rz,e} \cos \theta - \\ &\quad V'_{rx,e} V'_{ry,e} \sin \theta) / \sqrt{V_{ry,e}^2 + V_{rz,e}^2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} V_{rz}^* &= V'_{rz,e} \cos \varphi - \sin \varphi (V'_r V'_{ry,e} \cos \theta + \\ &\quad V'_{rx,e} V'_{rz,e} \sin \theta) / \sqrt{V_{ry,e}^2 + V_{rz,e}^2} \end{aligned} \quad (4)$$

式中 $i = x, y, z$; $V_{ri,e} = V_{ri} V'_r / V_r$; V_{ri} 和 V_r 分别为碰撞前的相对速度分量和相对速度。令 V_{mi} 为碰撞分子的质心速度,则碰撞后两分子的运动速度分别为

$$\begin{aligned} V_{1i}^* &= V_{mi} + V_{ri}^* m_r / m_1 \\ V_{2i}^* &= V_{mi} - V_{ri}^* m_r / m_2 \end{aligned} \quad (5)$$

2.2 能量传递

采用 Boyd 公式^[10] 计算转动松弛抽样几率函数 $P_{\text{rot}}(E_c)$, 即

$$\begin{aligned} P_{\text{rot}}(E_c) &= \left\{ 1 + \frac{\Gamma(\zeta + 2.5 - \omega)}{\Gamma(\zeta + 2 - \omega)} \left(\frac{kT^*}{E_c} \right)^{1/2} \frac{\pi^{3/2}}{2} + \right. \\ &\quad \left. \frac{\Gamma(\zeta + 2.5 - \omega)}{\Gamma(\zeta + 1.5 - \omega)} \left(\frac{kT^*}{E_c} \right) \left(\frac{\pi^2}{4} + \pi \right) \right\} / Z_{\text{rot},\infty} \end{aligned} \quad (6)$$

式中 E_c 是碰撞对平动能和转动能量的总和; ζ 是转动自由度; $T^* = 190\text{K}$, 是气体分子作用势的特性温度; $Z_{\text{rot},\infty} = 18.5$, 是极限值。

公式(6)给出了碰撞对各种运动形式的能量之间是否发生传递的判断:如果随机数 $R < P_{\text{rot}}$, 则发生能量传递,此时采用通用 L-B 模型实现能量传递。考虑组元 1 的分子和组元 2 的分子之间的碰撞, $\Xi = (5/2 - \omega_{12}) + \zeta_{\text{rot},1}/2 + \zeta_{\text{rot},2}/2$ 为参与能量传递的总的平均自由度,下标“rot”表示转动。令 Ξ_a 包含总平均自由度中的一项或多项, Ξ_b 代表其余各项。能量将被分配到第一组自由度 Ξ_a 中的能量为 E_a , 分配到第二组的能量为 E_b 。能量在两组间分布的 L-B 公式为

$$\begin{aligned} f\left(\frac{E_a}{E_a + E_b}\right) &= f\left(\frac{E_b}{E_a + E_b}\right) = \\ &= \frac{\Gamma(\Xi_a + \Xi_b)}{\Gamma(\Xi_a)\Gamma(\Xi_b)} \left(\frac{E_a}{E_a + E_b}\right)^{\Xi_a-1} \left(\frac{E_b}{E_a + E_b}\right)^{\Xi_b-1} \end{aligned} \quad (7)$$

3 喷管几何结构及计算条件

喷管从喉部到出口的几何结构和二维网格如图 1 所示,外部为真空。为了满足 DSMC 法所要求的空间步长小于当地分子平均自由程,并考虑到喷管内膨胀导致分子平均自由程沿流动方向迅速增大,采用等比级数控制网格尺寸,另外,在每个网格内又划分了 4 个子网格,用于碰撞抽样。考虑向真空辐射散热的喷管内壁面温度由二维计算给出。燃气为 $\text{N}_2\text{O}_4/\text{MMH}$ 的燃烧产物,为了简单起见,只考虑 5 种主要成分: N_2 , H_2O , H_2 , CO_2 和 CO 。为了使碰撞抽样更具效率,对分子直径相差较大的组元划分为不同的碰撞抽

样组,燃气各组元的摩尔浓度和相关参数见表 1。燃烧室压强 $p_0 = 37\text{kPa}$, 温度 $T_0 = 3000\text{K}$ 。

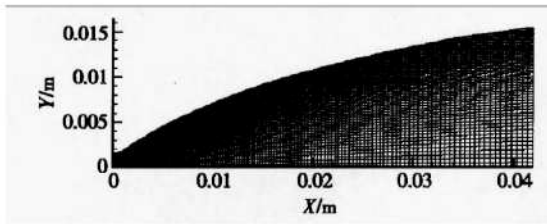


Fig.1 Nozzle geometry and computational grid

Table 1 Various species and VSS parameters

Molecular species	Mole fraction	Diameter $d/10^{-10}\text{m}$	Rotational degrees of freedom	Ratio of specific heats	α	Viscosity index	Species groups
N_2	0.3104	4.11	2	1.4	1.36	0.74	1
H_2O	0.3090	5.01	3	1.33	1.54	0.93	2
H_2	0.2087	2.88	2	1.4	1.35	0.67	3
CO_2	0.0930	5.54	3	1.29	1.61	0.93	4
CO	0.0789	4.12	2	1.4	1.49	0.73	1

4 结果与分析

4.1 与文献计算结果的比较

文献[1]以 N_2 为工质,采用连续流方法和 VHS 模

型的 DSMC 方法计算了圆锥喷管内的流动。为了与之进行比较,本文首先编制了 VHS 模型的 DSMC 程序,并采用其计算条件进行了计算。比较结果见图 2 和图 3。图中 R 是出口半径; D_e 是出口直径; V_0 是总温 T_0 下的分子热速度。可见,本文计算结果与文献[1]的结果吻合。由于喷口处的气体比较稀薄,致使连续流方法出现较大的偏差。

4.2 双组元喷管流动的模拟

模拟了真空推力为 0.5N 发动机的钟形喷管内部流动。模拟中,时间步长采用 10^{-9}s ,小于喉部的平均碰撞时间 $2.5 \times 10^{-9}\text{s}$ 。当从喉部进入流场的分子与喷管出口逸出流场的分子相差不大时,认为流场达到稳定。图 4~7 给出了计算结果。可见:(1)气体的稀薄效应在壁面处引起了明显的速度滑移(见图 4);(2)有较强的非平衡效应出现(见图 5);(3)为了便于分析各组分的扩散情况,图 6 给出了无量纲摩尔浓度 G ,即出口截面上组分 e 的摩尔浓度 G_e 与该组分在喉部的摩尔浓度 G_i 之比。显然,由于各组分在喷管喉部均匀分布,如果没有其它形式扩散的作用,各组分在喷口的无量纲摩尔浓度 G 也应该是均匀的。但从图 6 可以看出,出口截面上出现了较大的浓度梯度。这正由于压强扩散和热扩散的作用导致的。

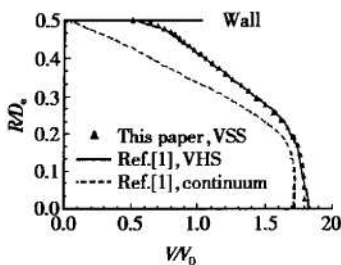


Fig.2 Comparison of velocity profiles in the nozzle exit plane

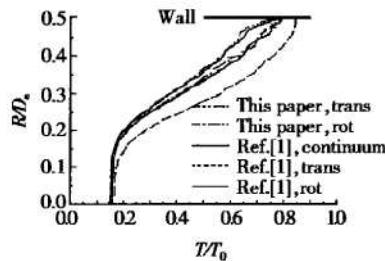


Fig.3 Comparison of temperature profiles in the nozzle exit plane

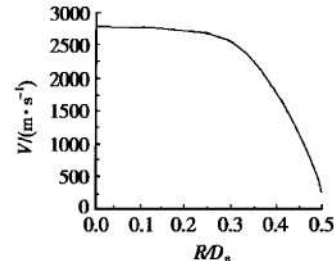


Fig.4 Velocity profiles in the nozzle exit plane

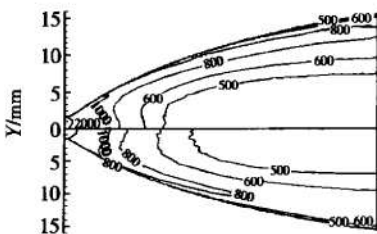


Fig.5 Contours of translational (upper) and rotational (lower) temperature

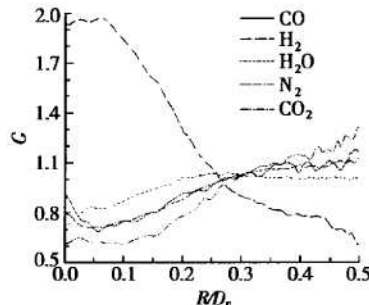


Fig.6 Dimensionless species mole fraction in the nozzle exit plane

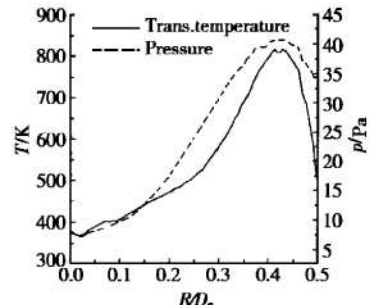


Fig.7 Translational temperature and pressure profiles in the nozzle exit plane

(下转第 165 页)

4 结束语

(1)根据流动的特点,引射燃烧流场可以大致划分为主火箭发动机射流核心区、高速主流与低速被引射流之间的高速剪切层区、支板背壁回流区、二次流流动区、发动机后部膨胀区等5个区域。其中化学反应主要发生在高速剪切层区域。

(2)对所计算工况的性能分析表明,采取SMC模式的组合发动机在 $Ma = 0 \sim 0.7$ 范围内推力增强效率较低,而在 $Ma = 0.7$ 以上获得了推力增强。

(3)SMC模式的组合发动机可能在更低马赫数(包括 $Ma = 0$)范围内能达到推力增强,这取决于对多种因素的优化匹配,特别是二次燃烧及构型因素。为了获得二次燃烧及构型等因素对低速范围($Ma = 0 \sim 0.7$)内组合发动机性能的影响机理,有待于对SMC模式的引射燃烧流场作更深入的分析。

(上接第114页)

压强扩散的作用使质量大的分子向高压区扩散,质量小的分子向低压区扩散,热扩散则与分子的尺寸密切相关,它会导致大分子(通常大分子的质量较大)向冷区域迁移;由图7可见,压强和温度均在 $R/D_e = 0.42$ 附近达到最大值,然后下降,在 $R/D_e < 0.42$ 的区域内,压强梯度显然大于温度梯度,压强扩散起主导作用,而在 $R/D_e > 0.42$ 的区域内,热扩散又起主导作用,因此,压强扩散和热扩散的综合结果导致分子质量越大的分子越趋向于向边界层内扩散。

5 结论

通过与文献比较,本文结果具有一定的可信度。在此基础上,模拟了双组元发动机钟形喷管流动。计算结果表明,压强扩散和热扩散对超声速膨胀流动的组分浓度分布具有较大的影响,虽然本文的边界条件没有引入浓度梯度,但由于压强扩散和热扩散的综合结果导致了质量越大的分子越趋向于向边界层内扩散。由于反流分子绝大部分来自于边界层,因此,采用VSS模型提供的喷口组分浓度分布来计算羽流的污染效应更为准确。同时,本文计算结果也表现出了明显的速度滑移和非平衡效应。

参考文献:

- [1] Boyd I D, Penko P F, Meissner D L, et al. Experimental and numerical investigations of low-density nozzle and plume

参考文献:

- [1] Siebenhaar A, Bulman M J. The strutjet engine: the overlooked option for space launch[R]. AIAA 95-3124.
- [2] Bulman Mel, Siebenhaar Adam. The strutjet engine: exploding the myths surrounding high speed airbreathing propulsion[R]. AIAA 95-2475.
- [3] Siebenhaar A, Bulman M J, Bonnar D K. The role of the strutjet engine in new global and space market[R]. IAF-98-S. 5.04.
- [4] Landrum D Brian, Thamest Mignon. Investigation of the rocket induced flow field in a rectangular duct[R]. AIAA 99-2100.
- [5] Lehman M, Paul S, Santoro R J. Experimental investigation of the RBCC rocket-ejector mode[R]. AIAA 2000-3725.
- [6] 张福祥. 火箭燃气射流动力学[M]. 北京:国防工业出版社,1988.

(编辑 王居信)

flows of nitrogen[J]. AIAA Journal, 1992, 30(10):2453 ~ 2461.

- [2] Bird G A. Recent advances and current challenges for DSMC [J]. Computers Math. Applic., 1998, 35(1/2):1 ~ 14.
- [3] Chung C H, Kim S C, Stubbs R M, et al. Low-density nozzle flow by the direct simulation Monte Carlo and continuum methods[J]. Journal of Propulsion and Power, 1995, 11(1):64 ~ 70.
- [4] 蔡国飙,王慧玉,祖国君,等. 低密度小喷管流场的DSMC直接模拟[J]. 推进技术, 1996, 17(5):9 ~ 13.
- [5] Zelesnik D, Micci M M, Long L N. Direct simulation Monte Carlo model of low Reynolds number nozzle flows[J]. Journal of Propulsion and Power, 1994, 10(4):546 ~ 553.
- [6] Gatsonis N A, Nanson A R, LeBeau G J. Simulations of cold-gas nozzle and plume flows and flight data comparisons [J]. Journal of Spacecraft and Rockets, 2000, 37(1):39 ~ 48.
- [7] Doo Y C, Neison D A. Direct Monte Carlo simulation of small bipropellant engine plumes [R]. AD ~ A177079, 1987.
- [8] 黄琳,陈伟芳,吴其芬. 姿控发动机喷管内流场的DSMC并行算法[J]. 推进技术, 2001, 22(5).
- [9] Bird G A. Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows[M]. Oxford: Clarendon Press, 1994.
- [10] Boyd I D. Analysis of rotational nonequilibrium in standing shock waves of nitrogen[J]. AIAA Journal, 1990, 28(11): 1997 ~ 1999.

(编辑:梅 璞)