

二维过渡区含化学反应的喷流干扰流场 DSMC/EPsm 仿真*

李 洁, 陈伟芳, 任 兵

(国防科技大学 航天与材料工程学院, 湖南 长沙 410073)

摘 要: 构造可仿真含化学反应的稀薄/连续不同流动区域的 DSMC/EPsm 混合算法, 应用该算法, 数值模拟过渡区有横向喷流干扰的二维有限平板高超声速化学反应流场, 分析流场结构和物面气动系数分布等特性, 充分反映稀薄/连续混合区域高超声速流动中的化学反应效应, 同时通过与 DSMC 算法比较, 论证 DSMC/EPsm 混合算法的可行性与计算效率相对提高的优越性。

关键词: 喷流干扰; 稀薄气体; 化学反应; 混合算法; 数值仿真

中图分类号: V211.3 **文献标识码:** A **文章编号:** 1001-4055 (2005) 02-0106-05

Numerical study on chemical reactive jet interaction flows in the two-dimensional transitional regime by DSMC/EPsm method

LI Jie, CHEN Wei-fang, REN Bing

(Inst. of Aerospace and Material Engineering, National Univ. of Defence Technology, Changsha 410073, China)

Abstract A hybrid Direct Simulation Monte Carlo/Equilibrium Particle Simulation Method (DSMC/EPsm) code is established to provide solutions for transverse chemical reactive jet from two-dimensional flat plate interacting with rarefied external flows in the transitional regime. The structure of flow field and the aerodynamics properties on the plate surface are analyzed in details. The chemical reactive effects are verified in the hypersonic flows, and the hybrid DSMC/EPsm method is compared with the DSMC method. It is proved that the hybrid DSMC/EPsm method is appropriate and efficient.

Key words Jet interference; Rarefied gas; Chemical reaction; Combinatorial algorithm; Numerical simulation

1 引言

飞行器在过渡区中采用喷流反作用控制时, 将会出现连续介质区、过渡区或自由分子区共存的流动现象。国外通常采用 N-S 方程有限差分方法与 DSMC 方法的混合算法^[1~6]。但是, 这种方法存在明显的缺陷^[7], 尤其当航天器在高空中作高超声速飞行时, 流场的稀薄气体效应显著, 飞行器前方绕流流场, 特别是前方弓形激波附近流场, 气体分子状态远离平衡态, 不仅气体分子的平动温度、转动温度和振动温度存在明显差别, 而且气体分子之间的化学反应亦很剧烈。处理上述热化学非平衡流动时, DSMC/N-S 混合算法的缺陷更为显见。为此, 本文在文献 [8] 基础上

发展了 EPsm 算法, 使其能够处理振动能激发状态下的化学反应流动, 构造了可仿真含热力学非平衡及化学反应流动的 DSMC/EPsm 混合算法, 应用此算法, 数值模拟了含化学反应无厚度有限平板的横向喷流干扰, 体现了稀薄/连续混合区域高超声速流动中的化学反应效应, 对于高超声速再入飞行器的设计具有重要意义。

2 数值方法

2.1 DSMC/EPsm 混合算法的构造

混合算法是通过引入控制参数实现对流动区域的划分。稀薄区使用 DSMC 方法, 近连续流区使用 EPsm 方法。在混合算法中, 如何判断网格中分子碰

* 收稿日期: 2004-02-22 修订日期: 2004-09-20

作者简介: 李 洁 (1974—), 女, 博士, 讲师, 研究领域为计算流体力学。

撞达到平衡态成为运用 EPsm 方法的关键。由于 EPsm 方法是 DSMC 方法中分子碰撞频率达到无穷时的一种极限方法, Bird 指出在一个时间步长内网格中每个粒子碰撞 10 次后, 网格中的状态已达到平衡, 即 $\Delta t \cdot \gamma \geq 10$ 时, EPsm 方法成立, 故文献 [8] 采用碰撞次数为控制参数构造 DSMC/EPsm 混合算法进行流场计算, 计算区域划分为: 当网格中仿真分子的 $\tau = \Delta t \sqrt{2RT}/\lambda \geq 10$ 时, 选用 EPsm 方法; 当网格中仿真分子的 $\tau < 10$ 时, 选用 DSMC 方法。其中 τ 是一个时间步长中仿真分子的平均碰撞次数, T 是网格处气体温度, R 是气体常数, λ 是分子平均自由程。但是, DSMC 方法中对时间步长的要求为 $\Delta t \cdot \gamma < 1$, 以此保证粒子运动与碰撞解耦, 这一要求显然与 EPsm 方法相悖, 如何实现 DSMC 方法与 EPsm 方法的结合, 亟需解决。

借鉴 DSMC/N-S 混合算法中, 采用 P 或 Kn 作为判据划分连续介质区和稀薄区: $P < 0.01$ 或 $Kn < 0.05$ 的区域为连续介质区, $P \geq 0.01$ 或 $Kn \geq 0.05$ 的区域为稀薄区, 其中 P 定义为

$$P = (\bar{V} \cdot \rho) / (\gamma \cdot \rho) \quad (1)$$

式中 γ 是粒子碰撞频率。 Kn 定义为当地 Kn 数

$$Kn = \lambda/L \quad (2)$$

式中 $L = \rho/\rho \cdot \lambda$ 是分子平均自由程。

Boyd 等^[9] 指出参数 P 适用于流动存在膨胀的流场, 参数 Kn 适用于流动存在压缩的流场, 如激波和边界层, 从而对于复杂流场, 联合使用参数 P 和 Kn 。考虑到 Boltzmann 方程的一级近似正是 N-S 方程, 平衡态 Maxwell 分布是 Boltzmann 方程的零阶解, 由此引入参数 P 和 Kn , 在每种组分满足 $P < 0.02$ 且 $Kn < 0.05$ 的条件下, 判断 EPsm 方法是否可用, 同时兼顾 DSMC 方法对时间步长的要求, 具体做法如下:

记 $CN(N)$ 为 t 时间第 N 个网格的碰撞次数, $CNN(N)$ 为一个时间步长内第 N 个网格的碰撞次数, Δt 为时间步长。

(a) 逐次求出每一网格中的碰撞频率 γ P 和 Kn , 当 $P \geq 0.02$ 或 $Kn \geq 0.05$ 时, 判断 $\Delta t \cdot \gamma$ 是否大于 1, 若大于 1, 则更新时间步长, 使得 $\Delta t \cdot \gamma < 1$, 否则 $P < 0.02$ 且 $Kn < 0.05$ 时, 认为网格中粒子有可能达到平衡态, 记录此网格的碰撞频率。

(b) 求出网格中碰撞次数 $\Delta t \cdot \gamma$ 赋值给 $CNN(N)$ 。

(c) 求出 $t + \Delta t$ 时间的每一网格的碰撞次数, 即 $CN(N) + CNN(N)$, 将此值赋值给 $CN(N)$, 若 CN

$(N) \geq 10$ 则采用 EPsm 方法计算碰撞, 若 $CN(N) < 1$ 则令 $CN(N) = 0$ 采用 DSMC 方法计算碰撞。对于 $CN(N) < 10$ 的网格, 先不计碰撞, 也不参与样本统计, 继续下一时间步长的计算, 直至 $CN(N)$ 不小于 10 时, 方采用 EPsm 方法计算碰撞并统计样本。

2.2 处理振动能激发的 EPsm 方法

Macrossan^[10] 构造的 EPsm 方法适用于任何整数自由度的能量分布, 文献 [8] 发展了在振动能完全激发状态下的与高温气体化学反应动力学理论相匹配的 EPsm 耦合模型, 实际上, 振动能不完全激发的情况经常存在, 而此时自由度并非整数, 在处理此类热化学非平衡问题时, 需要对 EPsm 方法做进一步的改进, 使其适用于求解热化学非平衡流动问题, 本文提出用如下方法予以推广求解。

当计及振动能的非谐性效应时, 振动能与振动能级的关系可表示成^[11]

$$\epsilon_{vib} = qk\theta_{vib} \left[1 - \frac{\eta_v}{4} \cdot \frac{\theta_{vib}}{\theta_d} q \right] \quad (3)$$

式中 θ_{vib} 为振动特征温度, θ_d 为离解特征温度, q 为振动能级, η_v 为非谐性因子, 取值范围为 $[0, 1]$ 。由式 (3) 可得最大量子能级为^[11]

$$q_d = \lceil (2\theta_d / (\eta_v \theta_{vib})) (1 - \sqrt{1 - \eta_v}) \rceil \quad (4)$$

符号 “ $\lceil \cdot \rceil$ ” 表示截断取整数。处于第 q 级能级上分子的振动能平衡态分布函数为^[11]

$$F_v^*(\epsilon_{vibq}) = \left| 1 - \exp \left[- \frac{\theta_{vib}}{T} \right] \left[1 - \frac{\eta_v}{4} \frac{\theta_{vib}}{\theta_d} - \frac{\eta_v}{4} \frac{\theta_{vibq}}{\theta_d} q \right] \right| \cdot \exp(-\epsilon_{vibq}) \quad (5)$$

可见, 振动能平衡态分布不再具有类似转动能的简单的指数函数特性——可以用两分速度的伪速度表示。这时可采用“舍选抽样”法实现从已知分布函数的集合中抽样, 使得抽样值 ϵ_{vibq} 的分布满足 $F_v^*(\epsilon_{vibq})$, 得到振动能不完全激发状态下的分布。

2.3 处理化学反应的 DSMC/EPsm 混合算法

解决了 EPsm 方法在分子自由度为非整数时的应用后, 通过建立高温气体化学反应动力学理论与 EPsm 方法的耦合模型, 混合算法自然而然推广到化学反应流动。即按照上述处理振动能激发的 EPsm 方法, 在文献 [8] 的基础上, 根据振动能平衡态分布抽样, 将网格内发生化学反应后的总热能中的振动能按照“舍选抽样”方法, 分配到每个模拟分子中, 余下的热能则按自由度均分为平动能和转动能, 得到每个模拟分子的速度及转动能。将改进的 EPsm 方法与

DSMC方法结合,便可构造出可模拟包含不同区域及气体化学反应流动的 DSMC/EPSC 方法,其方法与前述的混合算法相同,只是在判断网格中控制参数 P 和 Kn 时,需要判断每种组分的参数 P 和 Kn 是否满足要求,依照上述的步骤,碰撞次数大于 10 时,选用 EPSC 方法,碰撞次数小于 1 时选用 DSMC 方法。

3 算例及结果分析

计算区域为 $(-0.02\text{m}, 0)$, $(-0.02\text{m}, 0.15\text{m})$, $(0.25\text{m}, 0.15\text{m})$, $(0.25\text{m}, 0)$ 四点构成的矩形域。平板位于 $y = 0$ 平面,前端点坐标为 $(0, 0)$,板长 150mm ; 喷流中心点坐标为 $(0.125\text{m}, 0)$, 喷口直径为 4mm 。来流与喷流均采用由氮气 N_2 与氧气 O_2 按照 $0.8:0.2$ 的摩尔比组成的混合气体; 来流分子数密度为 $2.4072 \times 10^{20}/\text{m}^3$, 气体温度为 65K , 气体速度为 6km/s 。喷流气体温度为 250K , 分子数密度为 $5.2787 \times 10^{22}/\text{m}^3$, 喷流速度为 1km/s 。平板壁面以温度 300K 进行漫反射。

3.1 流场结构

图 1 是流场密度等值线,图 2 是流线图,由图可

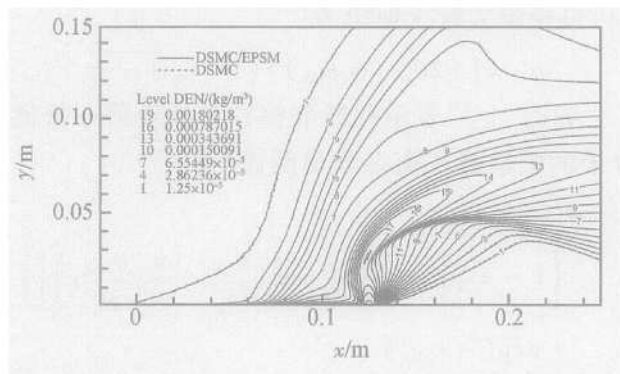


Fig 1 Density contours

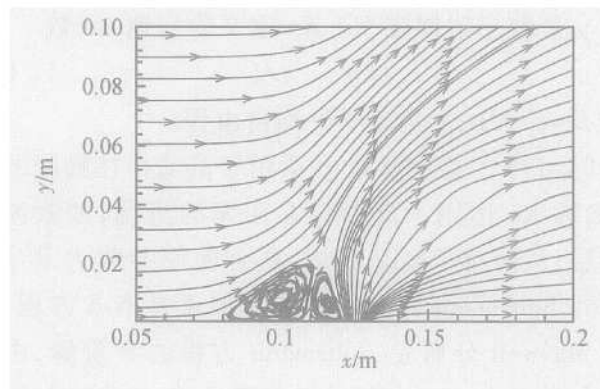


Fig 2 Flow stream lines

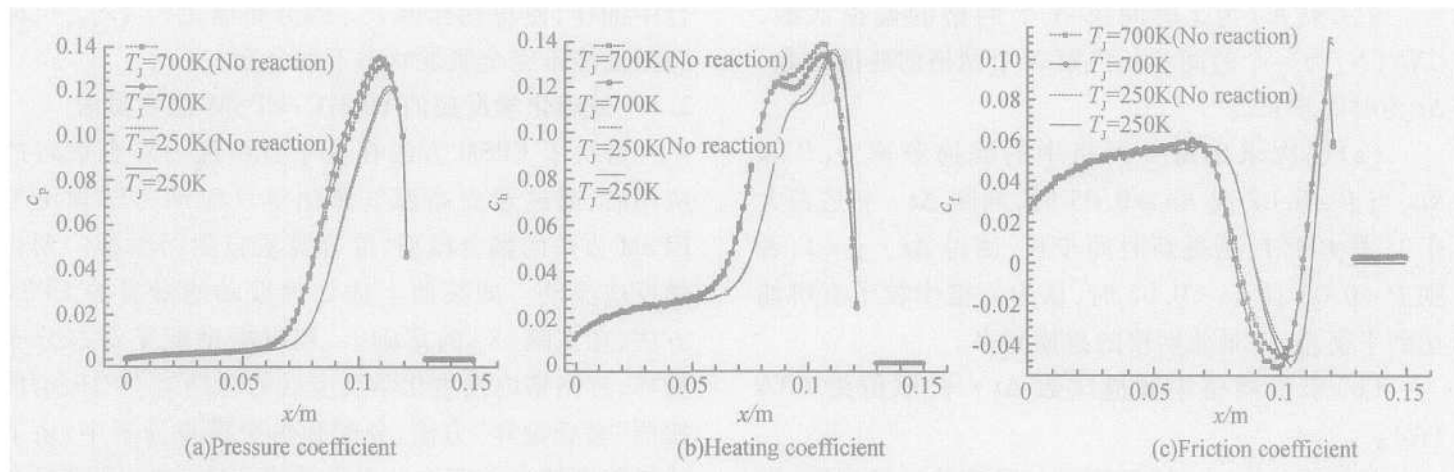


Fig 3 Stress on the flat plate surface

见,流场基本结构与文献 [12] 中的平板无化学反应喷流干扰流场相近。来流经平板前缘,产生脱体激波,温度增大,喷口前部有两个分离涡,方向相反,形成对涡,其中第二个涡尺度较小; 喷流自喷口喷出后迅速膨胀,密度急剧减小,在喷口上方一定高度时,喷流受主流压缩而向下游弯曲,使得在喷口后方和喷流下方处,气体密度极低,发生化学反应的概率很小,组分 N , O 和 NO 的浓度几乎为 0。

3.2 物面气动系数

图 3 是平板物面气动系数分布曲线,图中实线表示计及化学反应效应时的值,虚线表示不计化学反应时的值。由图可见,物面压力和热流起先沿平板缓慢增大,由于 $x = 0.125\text{m}$ 处的喷流干扰作用,物面压力和热流在 $x = 0.08\text{m}$ 处开始陡然上升,喷口上游形成高压区,下游产生一低压区。在附着点 $x = 0.113\text{m}$ 的附近压强和热流量明显增大,而摩擦阻力在 $0.09\text{m} < x < 0.113\text{m}$ 处迅速下降为负值,表明此处存在流动分离,与速度图对照可知,此处正是对涡中的反向涡所在之地,在正向涡附近,摩擦阻力上升为正。在喷口下游,因为气体密度极低,压力系数、热流系数和摩

擦阻力系数趋于 0。与不考虑化学反应时相比, 当计及化学反应效应时, 喷口前方平板的物面压力系数增大, 摩擦系数和热流系数减小, 摩擦系数的绝对值在增大, 当喷流温度升高时, 物面气动系数的差异更加显见。当喷流温度增大时, 喷口下方平板的物面气动系数并不为 0 如图 4 所示, 考虑化学反应效应的气动系数比不计化学反应的值明显偏高。

3.3 DSMC/EPsm 混合算法的验证

首先, 从运动论层次上证实处理化学反应的混合算法的有效性。利用 DSMC 方法计算流场, 记录当地时间喷流中心线上的若干位置的网格内仿真分子速度分布, 运用 Lilliefors 检验法, 测试各个位置处的分子速度是否服从基于当地物理量的正态分布。以 y 向速度为例, 检验结果见图 5 直方图表示仿真分子当地时间的速度真实分布, 曲线则表示建立在当地宏观物理量上的正态分布。从图 5 可看出, 离喷流出口处越远, 仿真分子速度分布越发偏离正态分布, 当 $y < 24\text{mm}$ 时, 分子速度服从正态分布。图 6 是 11 个位置处的控制参数 P 和 Kn 值, 显然, 满足 $P < 0.02$ 且 $Kn < 0.05$ 的点的位置落于区间 $(0, 24\text{mm})$, 表明

当利用混合算法时, 这些位置上的网格采用 EPsm 方法是有效的。其次, 从流体动力学层次的描述上证实处理化学反应的混合算法的有效性, 即运用 DSMC 方法与 DSMC/EPsm 混合算法这两种方法, 比较所得到的宏观物理量的差异。具体结果见图 1, 由图可见, 结果是较为一致的, 进一步验证了混合算法。但后者的计算效率却大大提高。

3.4 DSMC/EPsm 混合算法的计算效率

文献 [9] 指出使用 EPsm 方法代替 DSMC 方法将有效提高计算效率。运用混合算法时, 并不是所有网格均采用 EPsm 方法, 实际上, 因稀薄气体及过渡区的 Kn 数较大, 一小部分区域才可用 EPsm 方法, 如喷流出口附近, 所以, 若从当地时间步考察, 流场中绝大部分区域采用的算法是 DSMC, 混合算法的计算效率并未明显提高。但是, 从时间历程考察, 混合算法会加速收敛, 收敛性强于 DSMC 方法, 这一结论可以从图 7 观察得出 (图中纵坐标为误差的对数值), 因为在使用 DSMC 方法时, 时间步长要满足 $\Delta t \cdot \gamma < 1$, 其中的 γ 与密度成正比, 喷流出口处的密度值在整个计算域中最大, 相应的当地网格时间步长最小, 使得

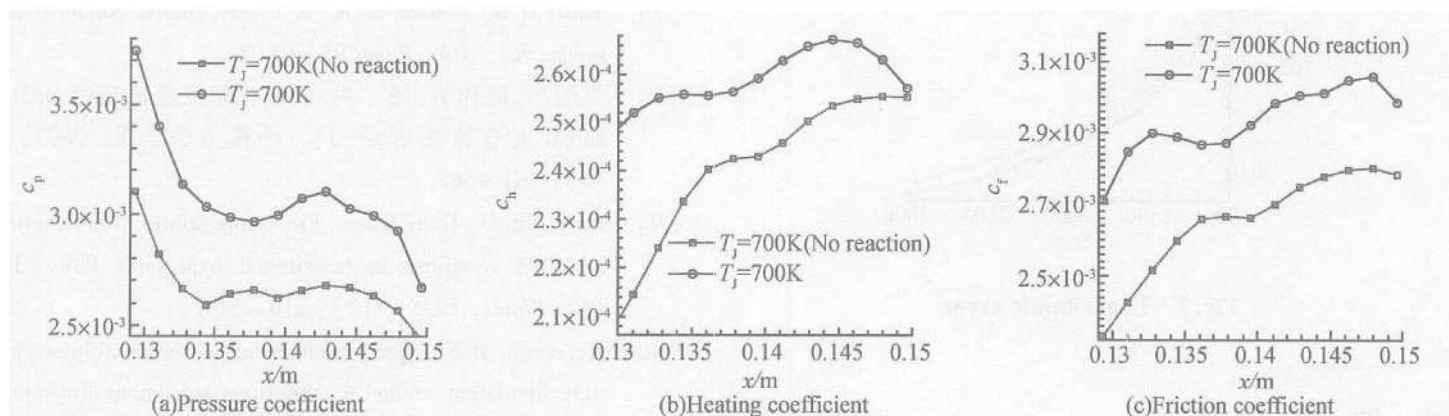


Fig 4 Coefficient on the flat plate surface in the rear of the exit

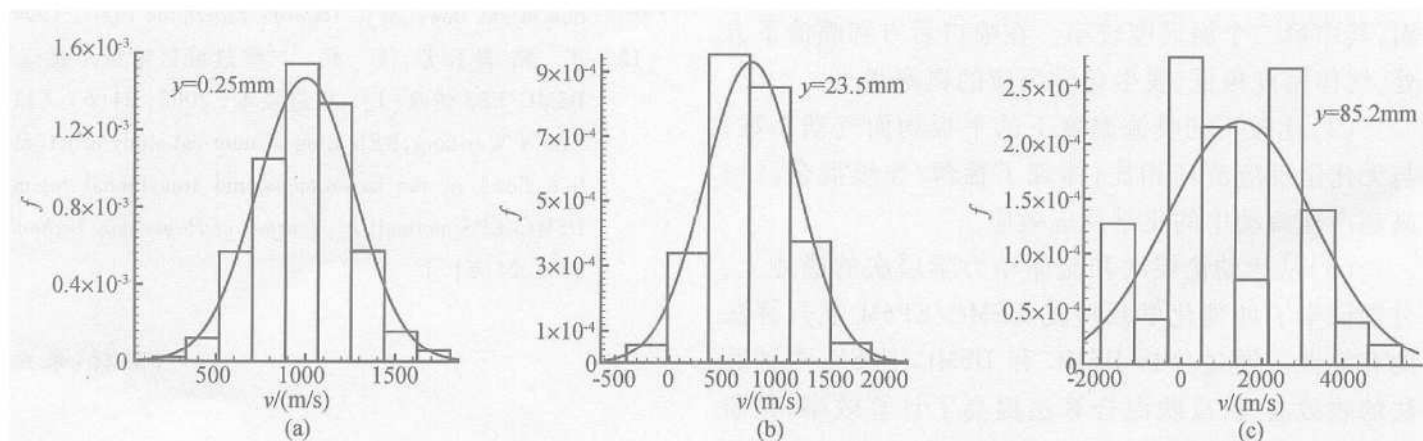


Fig 5 Velocity distribution of N_2

全流场采用的时间步长是基于此处喷流密度的最小当地时间步长,而利用混合算法时,喷流出口处的算法是 EPSM,此处网格没有参与计算时间步长,所以,在使用混合算法时,每一步的时间步长比纯粹使用 DSMC 要大,从而粒子间碰撞更加充分,统计涨落降低,收敛更快。使用 EPSM 方法的计算区域越多,混合算法优势越显见。

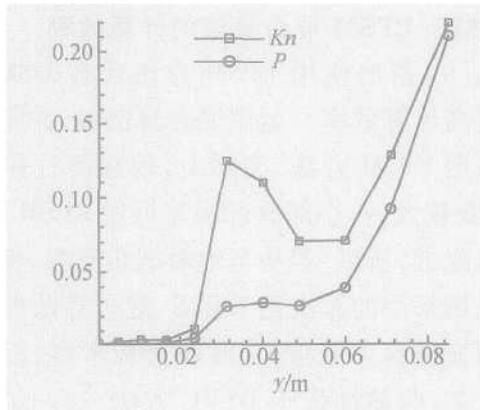


Fig 6 Parameters for the flow field

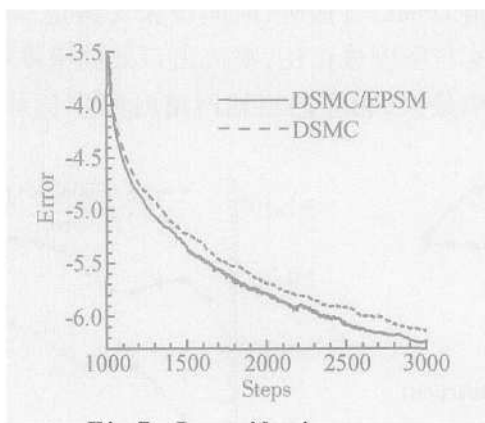


Fig 7 Logarithmic error

4 结 论

(1) 喷口上游有两个分离涡,方向相反,形成对涡,其中第二个涡尺度较小。在喷口后方和喷流下方处,气体密度极低,发生化学反应的概率很小。

(2) 比较不同喷流温度下的平板物面气动系数,与无化学反应流场相比,体现了稀薄/连续混合区域高超声速流动中的化学反应效应。

(3) 从运动论层次和流体动力学层次的描述上,分别证实了处理化学反应的 DSMC/EPSPM 混合算法的有效性。通过分析 DSMC 和 DSMC/EPSPM 两种算法的收敛曲线,反映混合算法提高了计算效率,是研究稀薄/连续混合区域高超声速热化学非平衡流动的

有效方法。

参考文献:

- [1] Lumpkin F E, Stuart P C, LeBeau G J. Enhanced analyses of plume impingement during Shuttle-Mir docking using a combined CFD and DSMC methodology[R]. *AAA Paper* 96-1877.
- [2] Hash D B, Hasson H A. A decoupled DSMC/Navier-Stokes analysis of transitional flow[R]. *AAA Paper* 96-0353.
- [3] Hash D B, Hasson H A. Assessment of schemes for coupling Monte Carlo and Navier-Stokes solution methods[J]. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 10(2): 242~249.
- [4] Wadsworth D C, Erwin D A. One-dimensional hybrid continuum/particle simulation approach for rarefied hypersonic flows[R]. *AAA Paper* 90-1690.
- [5] Wadsworth D C, Erwin D A. Two-dimensional hybrid continuum/particle approach for rarefied hypersonic flows[R]. *AAA Paper* 92-2975.
- [6] Glass C E. Numerical study of rarefied hypersonic flow interacting with continuum jet[R]. *NASA/TP* - 2000-210551.
- [7] Hash D B, Hasson H A. A hybrid DSMC/Navier-Stokes solver[R]. *AAA Paper* 95-0410.
- [8] 吴明巧,陈伟芳,任兵. 气体化学反应流动的 DSMC/EPSPM 混合算法研究[J]. *计算力学学报*, 2003, 20(5): 564~567.
- [9] Boyd Iain D, Gang Chen. Predicting failure of the continuum fluid equations in transitional hypersonic flows[J]. *Phys Fluids*, 1995, 7(1): 210~219.
- [10] Macrossan M N. Some developments of the equilibrium particle simulation method for the direct simulation of compressible flows[R]. *NASA-CR* - 198175 1995.
- [11] Bird G A. Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows[M]. *Oxford: Clarendon Press* 1994.
- [12] 李洁,陈伟芳,任兵. 二维过渡区喷流干扰流场的 DSMC/EPSPM 仿真[J]. *推进技术*, 2003, 24(6). (LI Jie, CHEN Weifang, REN Bing Numerical study of jet interaction flows in the two-dimensional transitional regime by DSMC/EPSPM method[J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2003, 24(6).)

(编辑: 朱立影)