

直接统计模拟位置元方法中的 分子表面反射确定论判据*

樊菁¹ 刘宏立¹ 沈青¹ 陈黎明²

1. 中国科学院力学研究所, 北京 100080

2. 清华大学工程力学系, 北京 100084

摘要 在直接模拟 Monte-Carlo (DSMC) 方法的位置元方法中准确判断分子是否与某一表面元相撞, 直接关系到气动力热的计算精度, 是方法需要解决的关键问题。本文发展的分子表面反射判据, 使这个问题得到了有效的解决。此外, 还讨论了分子空间位置坐标的记录方法、分子碰撞对的极限距离、网格自适应等实际模拟技术。与圆球自由分子流准确解和过渡领域贴体网格 DSMC 模拟结果的比较, 证明了上述判据和技术的有效性。

关键词 过渡领域流动; 位置元方法; 分子表面反射确定论判据

中图分类号 V211.3 文献标识码 A 文章编号: 0258-1825(2000)02-0180-08

0 引言

过渡领域流动发生在航天器再入过程、低压薄膜蚀刻与沉积反应腔、微机械等高新技术领域, 是指分子平均自由程与流动特征尺度量阶可比的情况。目前只有直接模拟蒙特卡罗方法(简称 DSMC 方法)有能力模拟过渡领域三维真实气体流动^[1,2]。DSMC 方法是直接以分子为研究对象的数值模拟方法。它在计算机中用大量模拟分子代表真实气体。模拟分子的位置坐标、速度分量及内能等存储在计算机中。由于分子运动、相互碰撞及与物面碰撞, 这些量随着时间不断地变化。通过追踪分子运动轨迹, 可以知道分子所在的网格以及哪些分子与物面相撞。对同一网格中的分子的个数、速度和内能做统计平均, 可以求出流场的密度、平动、转动和振动温度以及压力和速度分布等宏观量。对与物面相撞的分子入射时及反射时所携带的物理量进行统计平均, 可以求出气动力系数及物面压力、热流分布。确定分子所在网格以及分子与物面相撞位置的算法的效率和准确性, 直接决定着 DSMC 方法的效率与气动力、热的计算精度。

为了事半功倍地预言和对比各种外形在过渡领域的气动特性, 人们一直努力在 DSMC 方

*国家自然科学基金资助项目。

收稿日期: 1998-10-11; 修正日期: 1999-07-15。

作者简介: 樊菁, 1987 年毕业于北京大学力学系, 1992 年获硕士学位, 1996 年获博士学位。中国科学院副研究员, 现美国密执安大学访问学者。

法的框架下,发展能通用于不同几何外形的方法和程序。90年代初,NASA 发展了以四面体为亚网格的第一代通用程序,并用它模拟了三角翼绕流^[3]。为提高计算效率,NASA 又采取 Bird 建议的位置元方法,发展新一代通用程序^[4,5]。位置元是小的正方体,它将流场空间划分为规则的正方体格网。在 Bird 的位置元方案中,每个计算网格由若干个亚网格组成,每个亚网格由若干个位置元构成,物面则近似地由若干表面元(与物面相交的位置元)的表面来代表。西欧采用的是无结构网格方案^[6]。无结构网格是大小可以变化的三角形(二维)或四面体(三维),它将流场空间细分为不规则的三角形或四面体格网,物面则近似为若干个三角形的边或四面体的表面。

Bird 位置元方案,通过一组简单的算术运算,把分子空间位置转化为整数。这些整数既能直接确定分子所在网格,又能直接判断分子运动过程中是否与近似物面相撞。因此,这种方案的效率是很高的。但是,它对物形的处理不够细致,会给气动力、热的计算带来误差,并且这种误差,对表面元的大小比较敏感。例如,对于高超声速自由分子流圆球绕流,具有完全漫反射物面的阻力系数,准确解为^[11]

$$C_D = \frac{2 F_D}{v^2 S} = \frac{2s^2 + 1}{\sqrt{s^3}} \exp(-s^2) + \frac{4s^4 + 4s^2 - 1}{2s^4} \operatorname{erf}(s) \quad (1)$$

其中 F_D 和 S 分别为圆球受到的阻力和最大截面积; $s = v \sqrt{m/2kT}$, v 是来流速度, $k = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$ 是 Boltzmann 常数, m 是分子质量, T 、 T_w 分别为来流和壁面温度, $\operatorname{erf}(\dots)$ 是误差函数。当圆球直径为 1.6m, $T_w = 350 \text{ K}$, $T = 500 \text{ K}$, $v = 7500 \text{ m/s}$ 时,(1)式算出的阻力系数为 2.087。Bird 的位置元方案,在位置元边长为 6cm 和 9cm 时,算出的阻力系数分别为 2.293 和 2.362,偏离准确值的幅度约为 10% 和 18%。与 Bird 的位置元方案相反,无结构网格方案由于采用了大小不规则网格,因此它能比较细致地描述物形。但是,它需要逐个计算分子运动轨迹,才能确定分子在网格之间的迁移。此过程冗繁费时^[7]。文献[7,8]关于上述两种方案的对比计算表明:在一个时间步长内,无结构网格方案追踪一个分子运动所花费的时间,一般为位置元方案的 2~10 倍。

理想的方案是既具有 Bird 位置元方案的效率,又能像无结构网格方案那样比较准确地描述物形。为此,我们发展了一种位置元新方案^[9,10]。它采用位置元概念,将流场空间细分为规则的正方体格网,但对物形做进一步细致处理,即详细算出并记录物面在表面元上所张的面积及法向方向余弦等^[9](参见图 2 和图 3),作为表面压力和热流计算的基础。

为进一步提高我们位置元方案计算气动力系数和表面物理量分布的准确性,本文第 1 段提出用确定论的分子表面反射判据代替原来采用的几率判据。第 2 段对一些具体模拟技术做了简要讨论。第 3 段利用上述判据和技术模拟了圆球绕流,并与贴体网格下 DSMC 模拟结果^[11]以及自由分子流理论解做了比较。

1 分子表面反射的确定论判据

在 Bird 的位置元方案中,当分子运动轨迹与表面元的某一个表面相交时,就认为分子与物面发生碰撞。将表面元局部放大(图 1),可以看到,直接用表面元的表面近似物面,会产生明显误差。这种误差将直接影响气动力、热的计算精度,正如引言中算例结果所反映的那样。

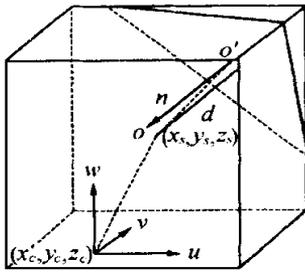


图1 分子表面反射确定论判据的示意图

Fig. 1 Illustration of molecular reflection deterministic criterion

分子表面反射判据直接关系着位置元方案的计算精度,因此,是一个必须认真加以解决的问题。我们在文献[9]提出分子在表面反射的几率判据:当分子运动遇到物面之时,找出分子运动方向上所有的表面元,若分子在运动途径上前($i-1$)个表面元未反射,那么它在第 i 个表面元反射的几率为

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

其中 n 是分子运动途径上所有相继表面元的总数, S_k 是物面在第 k 个表面元上所张的面积。

文献[10]对这一判据进行了改进,改进后的判据考虑了分子从表面掠过的可能性。两种几率判据,不同程度地提高了位置元方案的计算精度。但是,运动轨迹一定的分子是否与表面相撞,是一个确定性事件,采用几率判据,只是一种近似,实际应用中也发现,采用几率判据的位置元方案的计算精度,对位置元的大小,仍有所依赖。

在每个时间步长内,在大量的模拟分子中,只有很小部分与表面元相撞的分子。采取细致的办法,准确地决定它们是否与物面相撞,可以充分保证位置元方案的计算精度,对计算效率的影响却很小。考虑到表面元的几何尺寸总是远小于物体的几何尺寸,因而它与物面的交截面可以近似看作为平面,我们称之为物形截面(图1)。根据解析几何的知识,能够确定物面与该表面元的交点^[9,10];根据这些交点坐标,很容易算出该物形截面的法向 \bar{n} 及表面元中心到该截面的距离 d (d 等于表面元中心与该截面重心联线的长度在 \bar{n} 上的投影)。将 \bar{n} 和 d 记录下来。当分子与该表面元的某一表面相交时,记交点坐标为 (x_s, y_s, z_s) ,分子的速度和在此时间步长内的剩余运动时间分别为 (u, v, w) 和 t_r 。根据 \bar{n} 和 d ,及 (x_s, y_s, z_s) 和 (u, v, w) ,可以算出这个分子继续运动直至轨迹与该表面元在 x, y 和 z 三个方向上的表面相交所需的时间 $t_x = |x_s - x_c| / u$, $t_y = |y_s - y_c| / v$, $t_z = |z_s - z_c| / w$ 以及轨迹与物形平面相交所需的时间

$$t_w = \left| \frac{(x_s - x_c) \cdot \bar{n}_x + (y_s - y_c) \cdot \bar{n}_y + (z_s - z_c) \cdot \bar{n}_z + d}{(u \cdot \bar{n}_x + v \cdot \bar{n}_y + w \cdot \bar{n}_z)} \right| \quad (3a)$$

式中 x_k, y_m, z_n 分别为沿 u, v, w 所指方向点 (x_s, y_s, z_s) 所在表面元表面下一站面的 x, y, z 坐标, x_c, y_c, z_c 为当前表面元中心坐标, $\bar{n}_x, \bar{n}_y, \bar{n}_z$ 为 \bar{n} 的三个方向余弦。以 t_s 标记 t_x, t_y, t_z 中绝对值最小的那一个,分子表面反射的确定论判据可表述为,当且仅当

$$0 < t_w < t_r \text{ 与 } t_w < t_s \quad (3b)$$

分子与物面相撞,并且相撞点的坐标为 $(x_s + u \cdot t_w, y_s + v \cdot t_w, z_s + w \cdot t_w)$ 。

2 模拟中的一些技术问题

2.1 分子空间坐标的记录方法

为了利用计算机整数运算快的特点,Bird建议,在位置元方案中,用整数表示分子的空间

坐标^[4]。他认为:这样做虽然降低了对分子空间位置的分辨率,但是,降低后的分辨率与用表面元表面近似物面得到的分辨率精度相当,因而不会额外降低计算整体精度。

对于高超声速过渡领域流动,流场有展现激波前后诸量变化的激波过渡带出现。为正确模拟激波结构,应使激波区域中的分子在一个时间步长 t_m 内的运动距离 $v_s \cdot t_m$ 小于激波厚度 $t \sim 10 \cdot l^{[12]}$, 即

$$v_s \cdot t_m < 10 \quad (4)$$

其中, v_s 为激波速度, l 为来流分子平均自由程。为分辨表面反射分子在一个时间步长走过的距离,应保证

$$v_w \cdot t_m \sim 5 \cdot l \quad (5)$$

这里, $v_w = \sqrt{2kT_w/m}$ 代表分子表面反射速度, l 代表位置元的边长。对于表面温度不很高的高超声速绕流,有 $v_s \sim \sqrt{T_s/T_w} \cdot v_w \sim 10 \cdot v_w$, 由(4)式和(5)式得出

$$\frac{L}{l} > \frac{10 \cdot n}{c_1 \cdot Kn} \sim \frac{5}{Kn} \quad (6)$$

式中, $Kn = l/\lambda$ 。在近连续介质区域, $Kn \sim 10^{-2}$, 上式右端约等于 500。用如此多的表面元描述物形,仅存储表面法向量等就需要 100 兆以上内存。

为避免分子空间坐标用整数表示所带来的对计算机内存的高要求,在我们的位置元方案中,采用实数表示分子空间坐标。

2.2 分子碰撞对的极限距离

DSMC 方法从同一网格中选取分子碰撞对,不考虑分子在网格中具体位置对碰撞几率的影响^[1]。理论上讲,分子碰撞对距离 d 应与局部分子自由程 λ 相当。满足这个要求的一个简单办法是限制网格大小 $L_m < \min(L_f, \lambda/3)$ ^[13], 式中 L_f 表示流场特征长度。但是,实际计算中,尤其对三维流场,受计算条件的限制,很难处处保证 $L_m < \lambda/3$ 。在某些不满足 $L_m < \lambda/3$ 的情况下,计算结果被扭曲^[1]。为此, Bird 建议,把网格再细分为若干亚网格,分子碰撞对只在相同或相邻亚网格中选取^[1]。本文直接要求:处在同一网格中的分子对,仅当其距离小于规定值才能成为碰撞对。这种要求与亚网格技术的功用相同,在程序中更易于实现。

2.3 网格自适应技术

高超声速过渡领域绕流中存在着的激波过渡带等流场特性激烈变化的区域,其尺度随流动条件敏感地变化,并引起流场的局部特征长度的变化。为提高流场分辨率,需要采用网格自适应技术。我们的位置元方案中,网格由网格元构筑,网格元是流场的最小分辨单位。由 $n \times n \times n$ 个位置元组成,它的作用仅限于构筑网格。网格自适应的原则是:(1)各网格中包含近似相同的分子数,这样有利于取样统计效果的提高;(2)网格元的组合方向沿最小密度梯度方向进行。寻找一个网格所包括的网格元,总是从尚未编入其它网格的网格元中的最左下端开始,按(2)进行,直到满足(1)为止。

3 算例与检验

3.1 自由分子流圆球绕流

高超声速自由分子流条件下,完全漫反射的圆球表面压力和热流分布与表面法向和来流速度夹角 之间存在着如下简单关系^[1]

$$C_p^i - \frac{D_i}{v^2} = \cos^2 \quad (7a)$$

$$C_H^i - \frac{D_i}{v^3/2} = \cos \quad (7b)$$

升力系数 C_L 为零,阻力系数 C_D 由(1)式决定。

圆球直径取为 1.6m,来流条件为: $v = 7500\text{m/s}$, $\rho = 8.23 \times 10^{-9}\text{kg/s}$, $T = 500\text{K}$ 。表面温度 $T_w = 350\text{K}$ 。在位置元边长 l 分别为 0.031m、0.062m 和 0.093m 三种情况下,模拟结果与准确解(7(a))、(7(b))符合得都很好(参见图 2(a))、2(b)和表 1)。三种情况的位置元边长之比为 1:2:3,但是,气动力系数和表面物理量分布变化很小,说明采用确定论判据后,我们的位置元方案关于气动力、热的计算精度,不敏感地依赖于位置元边长与物形特征长度之比。

表 1 气动力系数的模拟值与理论值的比较

Table 1 The comparison of the simulated values of aerodynamic force coefficients with the predicted theoretical values

l (m)	0.093	0.062	0.031	理论值
C_D	2.084	2.087	2.087	2.087
C_L	7.774×10^{-4}	4.938×10^{-4}	4.821×10^{-4}	0

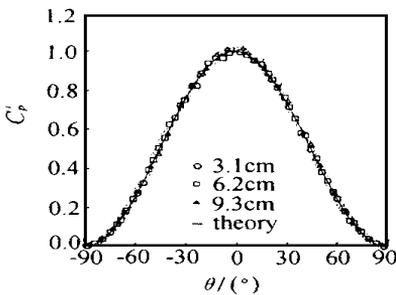


图 2(a) 圆球表面压力分布的比较

Fig.2(a) Comparison of simulated pressure distributions on a sphere with exact solution

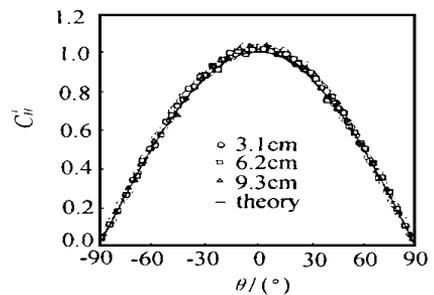


图 2(b) 圆球表面热流分布的比较

Fig.2(b) Comparison of simulated heat flux distributions on a sphere with exact solution

3.2 过渡领域圆球流动

为便于比较,取两组与文献[11]相同的来流条件(表 2)。90km 的流动条件靠近连续介质区域。圆球直径为 1.6m。用变径钢球模型模拟分子间相互作用力^[14],用随机取样频率法计算分子碰撞频率^[15],碰撞后分子能量按照 Larsen-Borgnakke 现象论模型分配^[16],用奇异分布函数取样法处理振动分配函数的奇性^[17],化学反应按反应几率模型进行^[18]。

模拟在 $128 \times 128 \times 128$ 个位置元系中进行。模拟 100km 高度流动时,位置元边长取为

0.193m,为提高流场分辨率,每个网格元只包含一个位置元。模拟 130km 高度流动时,位置元边长取为 0.93m,每个网格元由 $2 \times 2 \times 2$ 个位置元构成。

在两种流动条件下,阻力系数 C_D 、驻点压力系数 $C_{p,s}$ 和热流系数 $C_{h,s}$,以及流场分布,与 Dogra 等贴体网格下直接统计模拟结果^[11],符合得都很好(表 3,图 3)。图 4 给出了在 130km 高度经过自适应的网格分布,与图 3 对比看到,在密度梯度较大的物面附近,网格显著加密,提高了对流场的分辨率。

表 2 来流条件

Table 2 Incoming flow conditions

高度 km	ν kg/m ³	T km/s	T K	摩 尔 组 分			\bar{M}	
				X _{O₂}	X _{N₂}	X _O	g/mol	m
100	5.66×10^{-7}	7.5	194	0.177	0.784	0.004	28.24	0.10
130	8.23×10^{-9}	7.5	500	0.071	0.691	0.238	25.43	7.72

表 3 流动参数和计算结果

Table 3 Flow parameters and calculated results

高度 km	kn	本 文			Dogra, Wilmoth & Moss ^[11]		
		C_D	$C_{p,s}$	$C_{h,s}$	C_D	$C_{p,s}$	$C_{h,s}$
100	0.063	1.47	1.97	0.63	1.46	1.97	0.62
130	4.828	1.98	2.16	1.03	1.97	2.15	1.01

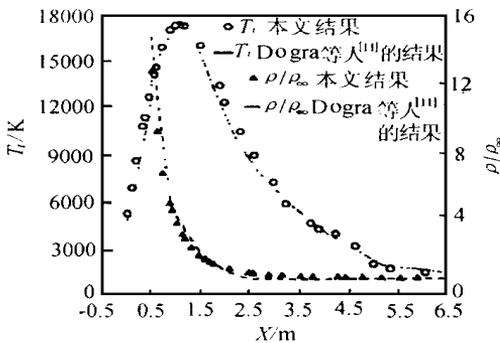


图 3 高度 130km 圆球驻点线密度和温度分布

Fig. 3 Density and temperature distribution along the stagnation line of a sphere at an altitude 130km

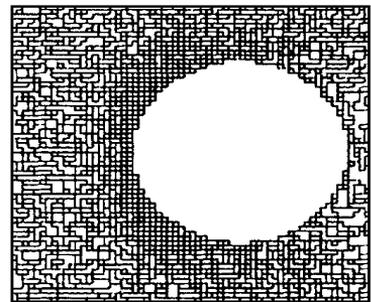


图 4 高度 130km 圆球绕流自适应网格分布

Fig. 4 Self-adaptive grids structure around a sphere at an altitude of 130km.

每个时间步长内,在大量的模拟分子中,只有很小部分有可能与物面相撞,需要用确定论判据做具体判断,所以,引入这种判据,不会影响位置元方法的计算效率。为了验证这种分析,我们做如下需时对比计算:在高度 130km,圆球绕流达到定常状态后,分别做两次计时计算,两次的取样次数相同,都为 3000 次。对于与表面元相撞的分子,第一次,采用确定论判据决定它是否与物面相撞,第二,直接让它从该表面元反射。两次计算在 DEC/1000A 服务器上的 CPU

用时分别为 2 小时 17 分和 2 小时 25 分,相差很小,与我们的分析一致。

上述算例表明,本文发展的分子表面反射确定论判据和其它技术,对于自由分子流和过渡领域流动,都是适用的。在具有很高效率的位置元方案中嵌入这种确定论判据,可以有效地保证气动力、热的计算精度,并且不会影响位置元方法的计算效率,是一种模拟过渡领域流动的有效方法。我们已将它用于航天飞机等复杂外形的过渡领域绕流模拟,并得到了合理的结果。

参 考 文 献

- 1 Bird G.A. Molecular Gas Dynamics and Direct Simulation of Gas Flow. Clarendon Press, Oxford, 1994.
- 2 沈青. DSMC 方法与稀薄气流计算的发展,力学进展,1996,26(1):1~13.
- 3 Celenligil M C, Moss J N. Application of the DSMC Method to Hypersonic Flow about a Deltawing. Rarefied Gas Dynamics, ed. by A. E. Beylinch, 1991:778~783.
- 4 Bird G.A. Application of the DSMC Method to the Full Shuttle Geometry. AIAA Paper 901692, 1990.
- 5 Rault D F, Cestero F J, Shane R W. Spacecraft Aerodynamics During Aerobraking Maneuver in Planetary Atmospheres. AIAA Paper 961890.
- 6 Laux M, Fasoulas S, Messerschmid E W. Development of a DSMC Code on Planar Unstructured Grids with Automatic Grid Adaptation. AIAA Paper 95-2053.
- 7 Wilmoth R G, LeBeau G J, Carlson A B. DSMC Grid Methodologies for Computing Low density, Hypersonic Flows about Reusable Launch Vehicles. AIAA Paper 961812, 1996.
- 8 Nance R P, Wilmoth R G, Hassan H A. A Comparison of Grid definition Schemes for DSMC. AIAA Paper 96-0604, 1996.
- 9 沈青,樊菁,胡振华,徐晓燕. 过渡领域三维绕流直接统计模拟位置元法的一种新方案. 空气动力学学报,1996,14(3):295~303.
- 10 Shen C, Fan J, Hu Z H, Xu X Y. A New Version of Position Element Algorithm of DSMC in Calculation of Three dimensional Transitional Flows. Rarefied Gas Dynamics, ed. by C. Shen, 1997,162~167.
- 11 Dogra V K, Wilmoth R G, Moss J N. Aerothermodynamics of a 1.6m Diameter Sphere in Hypersonic Rarefied Flow. AIAA Paper 91-0773.
- 12 Alsmeyer H. Density Profiles in Argon and Nitrogen Shock Waves Measured by the Absorption of an Electron Beam. *J. Fluid Mech.* 1976,74:497~513.
- 13 Bird G.A. Molecular Gas Dynamics. Clarendon Press, Oxford, 1976.
- 14 Bird G.A. Monte Carlo Simulation in an Engineering Context. Rarefied Gas Dynamics, ed. by S. S. Fisher, 1981:239~258.
- 15 樊菁,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,科学出版社,北京,1992:127~130.
- 16 Borgnakke C. & Larsen L S. Statistical Collision Model for Monte Carlo Simulation of Polyatomic Gas Mixture. *J. Comput. Phys.*, 1975,18:405~420.
- 17 沈青,吴万泉,胡振华,徐晓燕. 均匀气体中内自由度激发松弛与解离反应的直接统计模拟. 空气动力学学报,1991,9(1):1~7.
- 18 Bird G.A. Simulation of Multi-Dimensional and Chemically Reacting Flows. Rarefied Gas Dynamics, ed. by R. Campargue, 1979:365~388.

A Molecular Reflection Deterministic Criterion Used in the Position Element Algorithm of Direct Statistical Simulation

Fan Jing¹ Liu Hongli¹ Shen Qing¹ Chen Liming²

(1 *Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100086*)

(2 *Department of Engineering Mechanics, Qinghua University, Beijing 100084*)

Abstract The present paper suggests a molecular deterministic reflection criterion used in position element algorithm to precisely judge whether a molecule is in collision with surface element. Other problems caused by introducing molecular collisions, such as a method of recording molecular locations, limiting distance of a molecular collision pair, and an automatic adaptive grid generation scheme, are also discussed. Comparison with the exact results for free molecular flow and with the DSMC results based on body-fitted grid for transitional flow of a sphere confirms the validity of the suggested criterion and techniques.

Key words reflection deterministic criterion; position element algorithm; three-dimensional flow in transition regime