

文章编号: 100028055(2010)062120218

高温高速稀薄流的 DSMC 算法与 流场传热分析

王保国, 李学东, 刘淑艳

(北京理工大学 宇航学院, 北京 100081)

摘 要: 在非结构网格下, 研究了热力学碰撞传能的 6 种方式和化学反应的 8 种类型, 详细给出了上述碰撞传能和化学反应碰撞类型的子程序计算框图. 在可变硬球(VHS)分子模型、Borgnakke-Larsen 唯象模型、Bird 的化学反应几率模型以及壁面 CLL(Cercignani-Lampis-Lord)反射模型的基础上, 用 Fortran 语言编制了能够模拟内能松弛、热力学非平衡和化学非平衡的稀薄气体 DSMC(direct simulation Monte Carlo)源程序, 在地球大气层和火星大气层中完成了 Ballute 减速装置的 8 个工况计算(其中 Knudsen 数从 0.05 变到 30.0, 飞行 Mach 数从 26.3 变到 11.2), 并与 NASA Langley 研究中心 2007 年发表的计算结果作了比较, 本文的结果令人满意. 另外, 这里用 $|T - T_v|/T$ 去分析热力学非平衡, 用 Damköhler 数去分析化学反应非平衡, 用 Stanton 数去分析飞行器壁面的传热效果, 所有这些分析对高温部件的热防护设计十分有益.

关 键 词: 热力学非平衡; 化学反应非平衡; 高温传热分析; 直接模拟蒙特卡罗(DSMC)算法; 非结构网格

中图分类号: V19

文献标识码: A

DSMC algorithm and heat transfer analysis of high temperature and high velocity rarefied gas flow

WANG Baoguo, LI Xuandong, LIU Shuyan

(School of Aerospace Engineering, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

Abstract: This paper studied 6 kinds of energy transfer of thermodynamic collision and 8 types of chemical reaction on unstructured grids. Subroutine flow charts of the energy transfer and chemical reaction collision mentioned above were proposed in detail. Based on variable hard sphere (VHS) model, Borgnakke-Larsen phenomenological model, chemical reaction model of Bird and Cercignani-Lampis-Lord (CLL) gas surface interaction model, a rarefied gas direct simulation Monte Carlo (DSMC) code was produced using Fortran, enabling to simulate relaxation of internal energies, thermodynamic nonequilibrium and chemical reaction nonequilibrium. The computation of towed ballute applications of 8 cases was completed in the Earth's and Mars' atmosphere, in which Knudsen number changes from 0.05 to 30.0, flight Mach number changes from 26.3 to 11.2. The results were compared with the computation published by James N. Moss from NASA Langley Research Center in 2007, showing satisfactory agreement. In addition, this paper analyzed thermodynamic nonequilibrium, chemical reaction nonequilibrium and heat transfer efficiency of vehicle wall, by using $|T - T_v|/T$, Damköhler number and Stanton number, respectively. The analysis is beneficial to thermal

收稿日期: 20091221; 修订日期: 201004207

基金项目: 国家自然科学基金(50376004); 高等学校博士学科点专项基金(20030007028)

作者简介: 王保国(1947-), 男, 山东临清人, 教授、博导, 博士, 研究领域为计算流体力学、高速气动热力学.

protection design of high temperature assemblies.

Key words: thermodynamic nonequilibrium; chemical reaction nonequilibrium;
high temperature heat transfer analysis;
DSMC (direct simulation Monte Carlo) algorithm; unstructured grid

现代航空航天动力装置的姿态控制以及飞行器的热防护技术对气动热力学环境提出了越来越严格的要求^[1],尤其是近年来高空变轨技术的飞速发展^[2],需要较准确地确定稀薄气体环境中飞行器的气动力与气动热的分布,因此近年来稀薄气体动力学的计算引起了国内外学者们的普遍重视.多年来稀薄气体动力学的求解发展了许多有效的方法,例如 Bhatnagar-Gross-Krook (BGK) 法^[34]、矩方法^[5]以及 Monte Carlo 法^[6]等,其中以 Bird 提出与发展的直接模拟蒙特卡罗 (DSMC) 方法应用最为广泛. DSMC 方法直接模拟流动的物理过程,与 Boltzmann 方法相比,它能够较方便的处理高温环境下气体的热力学非平衡与化学非平衡现象.

在 DSMC 方法中,网格主要是用于对流场宏观量进行抽样统计以及对可能的碰撞对进行选取,因此合理的网格分布对完成流场的计算有重要作用.目前,网格的划分有两类:一类为结构网格(例如文献[629]等),另一类为非结构网格(例如文献[10]等).对于复杂外形的流场计算采取非结构网格要比结构网格更为有效.当前,非结构网格的生成技术主要有两种:一种是 Delaunay 方法,另一种是阵面推进法,两种方法各有长处而且在流场计算中都有广泛的应用^[11].相对国外,国内在非结构网格的生成技术方面开展的较少.在高温、高空环境下,流场的热力学状态十分复杂,热力学非平衡现象普遍存在,再加上高温下分子碰撞将发生各种复杂的化学反应,因此如何有效的用数值方法模拟出流场中存在的热力学非平衡与化学非平衡现象便成为稀薄气体动力学计算的主攻方向^[12].

本文以非结构三角形网格为例,较详细的研究了在非结构网格下流场的热力学非平衡与化学反应非平衡的数值计算,详细的研究了地球大气环境下高温高超声速流场内 5 组元 17 基元反应的机理以及火星大气环境下高温高超声速流场内 8 组元 44 基元反应机理的计算.编制了具有自主知识产权的适用于高超声速稀薄气体热力学非平衡态和化学反应的非结构 DSMC 源程序,并完成了 35 个典型工况的计算(因篇幅所限,本文只给

出部分算例的计算结果),初步验证了本文算法的合理性.

1 基本算法、关键步骤与程序框图

1.1 非结构网格的生成以及模拟分子的追踪办法

对于非结构网格的生成,本文采用了阵面推进方法(advancing front method),以平面问题为例,对计算域进行非结构三角形剖分,得到了计算区域内三角网格的节点和网格坐标^[1314].

在 DSMC 方法中,如何正确并快速的追踪到模拟分子的运动轨迹,是决定流场模拟算法可行性的关键.与结构网格相比,非结构网格无法以给定的坐标去确定该坐标所在网格的编号.为解决这个困难,本文应用一组二维数组来预先设置流场中网格与网格、网格与壁面相互位置,从而减少了模拟分子运动过程中追踪模拟分子的计算量,并能迅速判断模拟分子是否和壁面发生碰撞.从而减少分子运动过程中追踪模拟分子的计算量.

图 1 和图 2 分别给出了非结构网格中模拟分子运动子程序的框图和描述分子在网格中运动轨迹的示意图.可以看出本文在对于分子运动轨迹的追踪采用了如下 3 个步骤:

1) 首先确定模拟分子的起始位置 P_1 以及所在网格 ^{1} 的编号.在无碰撞的假设下,采取匀速直线运动求出模拟分子以各自速度在 Δt 时间内运动的距离,确定模拟分子新的位置 P_2 .判断点 P_2 是否在原始网格 ^{1} 内,如果在原网格内则存储模拟分子新的坐标并追踪下一个模拟分子.

2) 若模拟分子新位置 P_2 不在原始网格 ^{1} 内,则从设定数组中读取原始网格所有相邻网格 ($^o 2k$) 的编号,在这些相邻网格中找出模拟分子的新位置 P_2 所对应的网格.判断原始网格和新位置 P_2 所在网格是否与壁面(包括流场边界壁面和物体壁面)共线,若无共线则存储模拟分子新的坐标和所在网格编号,并追踪下一个模拟分子.

3) 若所在网格有边在壁面上,则需要判断分子是否与壁面发生碰撞.假设已知网格有边 AB 在壁面上,连接模拟分子原始位置 P_1 和新位置

P_2 . 通过几何算法判断共边 AB 和线段 P_1P_2 是否有交点, 若无交点则存储模拟分子新的坐标以及所在网格编号, 并追踪下一个模拟分子. 若有交点则模拟分子和壁面发生碰撞, 这时可调用模拟分子与壁面碰撞的子程序进行模拟分子碰撞的处理. 然后从碰撞点出发, 模拟分子继续完成 Δt 剩余时间的运动, 并找到新的位置 P_2 , 而后存储模拟分子新的坐标和所在网格的编号, 并追踪下一个模拟分子.

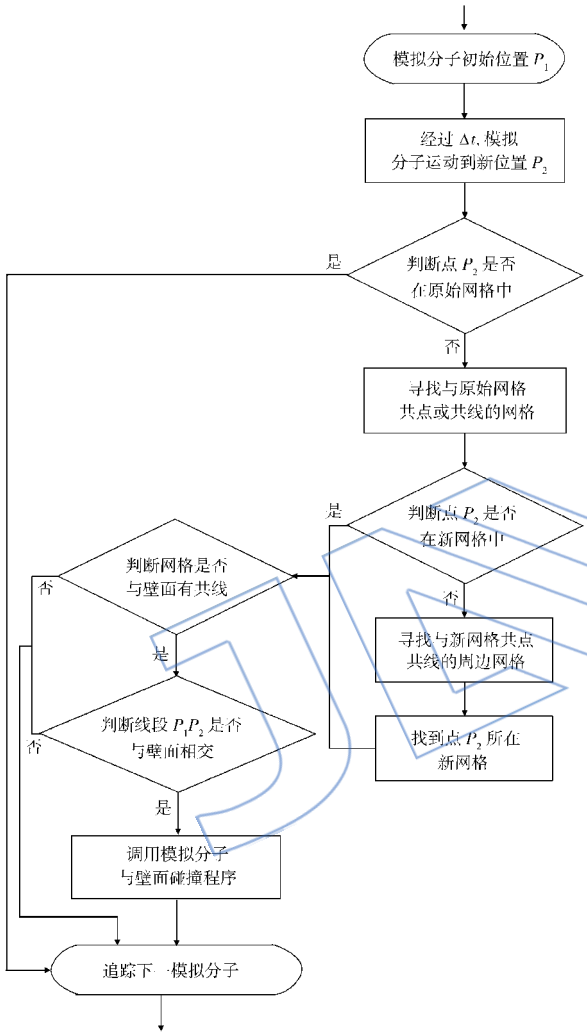


图 1 非结构网格中模拟分子运动的子程序框图
Fig. 1 Subroutine flowchart of simulation molecule's movement in unstructured grid

1.2 来流参数的设定

计算不同工况下大气的组分, 计算时应考虑飞行高度、大气层的种类(本文分别考虑了两种大气层: 一种为地球大气层, 另一种为火星大气层). 模拟分子采用了变径硬球模型(VHS), 模拟分子与壁面的碰撞分别采用了漫反射碰撞模型和CLL(Cercignan&Lampis&Lord)反射模型. 壁面采

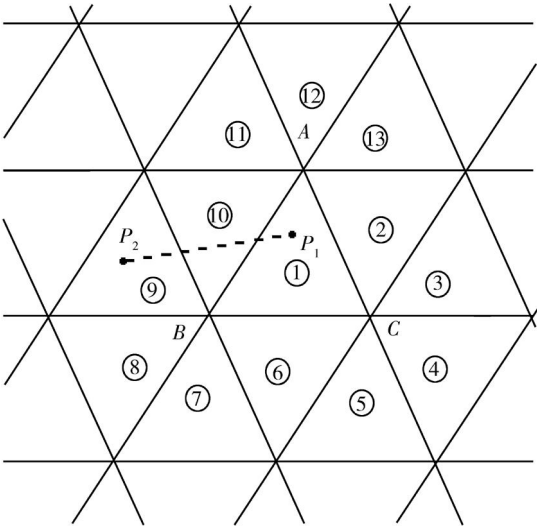


图 2 模拟分子在网格中的运动轨迹示意图
Fig. 2 Simulation molecule's movement in grid

用 CLL 模型后, 使得模拟分子在壁面很好地满足了互易性定理. 假定流场左边界和上下边界属于流动区域, 进入边界的分子的热运动速度分量按 Maxwell 速度分布函数产生, 而后再迭加各方向的宏观速度便得到进入计算区域模拟分子的各速度分量. 对于新进入流场的模拟分子, 则认为均匀随机分布在来流边界的网格面上, 其运动时间为 $\Delta t \cdot R_r$, 这里 R_r 为随机数.

当分子运动到右出口边界, 由于流场中沿 X 方向的速度远远超过热运动速度, 所以可以认为右边界基本上没有模拟分子从外部进入计算边界, 将该边界处理为真空边界.

1.3 热力学碰撞传能的 6 种类型及 8 种化学反应类型

气体分子之间的热力学碰撞传能, 通常包括 6 种类型, 即分子平动能与分子平动能之间的能量交换(简称为 T2T 传能, 也就是通常说的弹性碰撞传能)、分子平动能与分子转动能之间的能量交换(简称为 T2R 传能, 即分子转动弹性碰撞)、分子转动能与分子转动能之间的能量交换(简称为 R2R 传能, 注意它仅发生在双原子分子之间)、分子振动能与分子振动能之间的能量交换(简称为 V2V 传能, 注意当 $T < 4000\text{ K}$ 时 V2V 传能决定了气体分子振动能的松弛过程)、分子平动能与分子振动能之间的能量交换(简称为 T2V 传能, 注意当 $T > 4000\text{ K}$ 时 T2V 传能决定了气体分子振动能的松弛过程)以及转动能与分子振动能之间的能量交换(简称为 R2V 传能, 注意在 R2V 传

能过程中,碰撞分子各自由度上的平动能保持着守恒性质).

图 3 给出了热力学碰撞传能的子程序框图. 图中 R_r 为随机数, P_c , P_r 与 P_v 分别代表碰撞几率、转动能松弛几率与振动能松弛几率. 应当指出,热力学碰撞传能是一类不改变碰撞分子组分也不改变碰撞分子结构的二元碰撞,然而当碰撞分子的热力学总能量大于化学反应活化能 E_a 时,便可能发生化学反应碰撞. 一旦这类碰撞发生,它使得参与碰撞的分子成分或者分子结构发生了改变,这里不妨以高超声速飞行器再入大气层为例

扼要说明常见的 8 种化学反应的碰撞类型: ^{1} 离解反应; $^{\circ}$ 单原子的复合反应; $\gg$ 交换原子反应 (又称置换反应); $\frac{1}{4}$ 单原子的缔合电离反应; $\frac{1}{2}$ 离子与电子之间发生的离解式复合反应; $\frac{3}{4}$ 由电子所激发的电离反应; i 离子与电子间发生的三体复合反应; λ 电荷交换反应. 显然,在 DSMC 方法中如果要细致的描述上述 8 类化学反应的碰撞过程,则图 4 给出了这时化学反应的子程序框图,图中 R_r 为随机数, P_c 为碰撞几率, P_{re} , P_{di} , P_{∞} , P_{ri} , P_{ei} 与 $P_{\infty e}$ 分别代表有关化学反应的抽样几率函数.

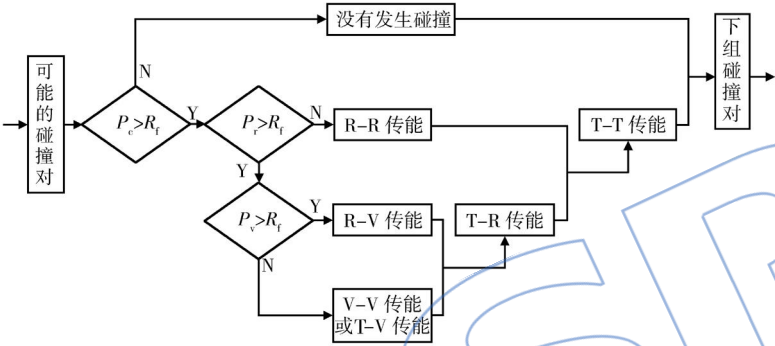


图 3 热力学碰撞传能的子程序框图
Fig. 3 Subroutine flowchart of thermodynamic collision energy transfer

在本文的计算中,模拟分子碰撞后的平动能、转动能和振动能分配采用了 BorgnakkeLarsen 的唯象模型^[15]. 因此在 DSMC 计算中弹性碰撞次数、转动非弹性碰撞次数与振动非弹性碰撞次数之比为 $\left[1 - \frac{1}{Z_r} - \frac{1}{Z_v}\right] B\left(\frac{1}{Z_r}\right) B\left(\frac{1}{Z_v}\right)$, 这里 Z_r 为转动松弛碰撞数, Z_v 为振动松弛碰撞数,通常可取 $Z_r = 5$, 而 Z_v 采用了 Bird 在文献[16]给出的表达式,即

$$Z_v = (C_1/T^X) \exp(C_2 T^{-1/3}) \tag{1}$$

式中 C_1 和 C_2 是根据气体的不同组分所对应的常数, X 为黏性指数, T 是分子碰撞的有效温度. 在上述计算中,对于非弹性碰撞中能量的分配采取了平动能 E_t 和振动能 E_v 以及转动能 E_r 分别进行分配的办法. 当振动能被激发,令 $E_G = R_r E_G$, 式中 R_r 是 0~1 的随机数. 而振动能的最大值占总能量的概率

$$P_{\max} = \left[1 - \frac{E_G}{E_t + E_v}\right]^{\frac{2}{3} X_2} \tag{2}$$

上式中 X_2 是气体黏性系数的温度幂指数. 若 $R_r < P_{\max}$, 则碰撞后的振动能 $E_v^* = E_v$, 否则重新选择随机数 R_r , 直到满足 $R_r < P_{\max}$ 为止.

当转动能被激发,碰撞后的转动能

$$E_r^* = (1 - R_r^{\frac{2}{3} X_2})(E_t + E_r) \tag{3}$$

对于化学反应,采用了 Bird 的化学反应几率模型 (又称化学反应的位阻因子法). 在这种模型中,碰撞分子发生化学反应的几率由化学反应速率推出,在本文的计算中,考虑了飞行器再入的两种大气层中的化学反应,一种是再入地球大气层时所发生的 5 组元 17 基元反应,另一种是再入火星大气层时所发生的 8 组元 44 基元反应. 对于地球大气,化学反应机制选取如表 1 所示的 5 组元(N_2 , O_2 , NO , N 和 O)、17 基元反应模型,其中 M 为反应碰撞单元.

表 1 地球大气层中所发生的化学反应机制
Table 1 Earth atmosphere reaction

	化学反应	反应碰撞单元 M
1	$N_2 + M \rightarrow N + N + M$	N_2, O_2, NO, N, O
2	$O_2 + M \rightarrow O + O + M$	N_2, O_2, NO, N, O
3	$NO + M \rightarrow N + O + M$	N_2, O_2, NO, N, O
4	$NO + O \rightarrow N + O_2$	无
5	$N_2 + O \rightarrow NO + N$	无

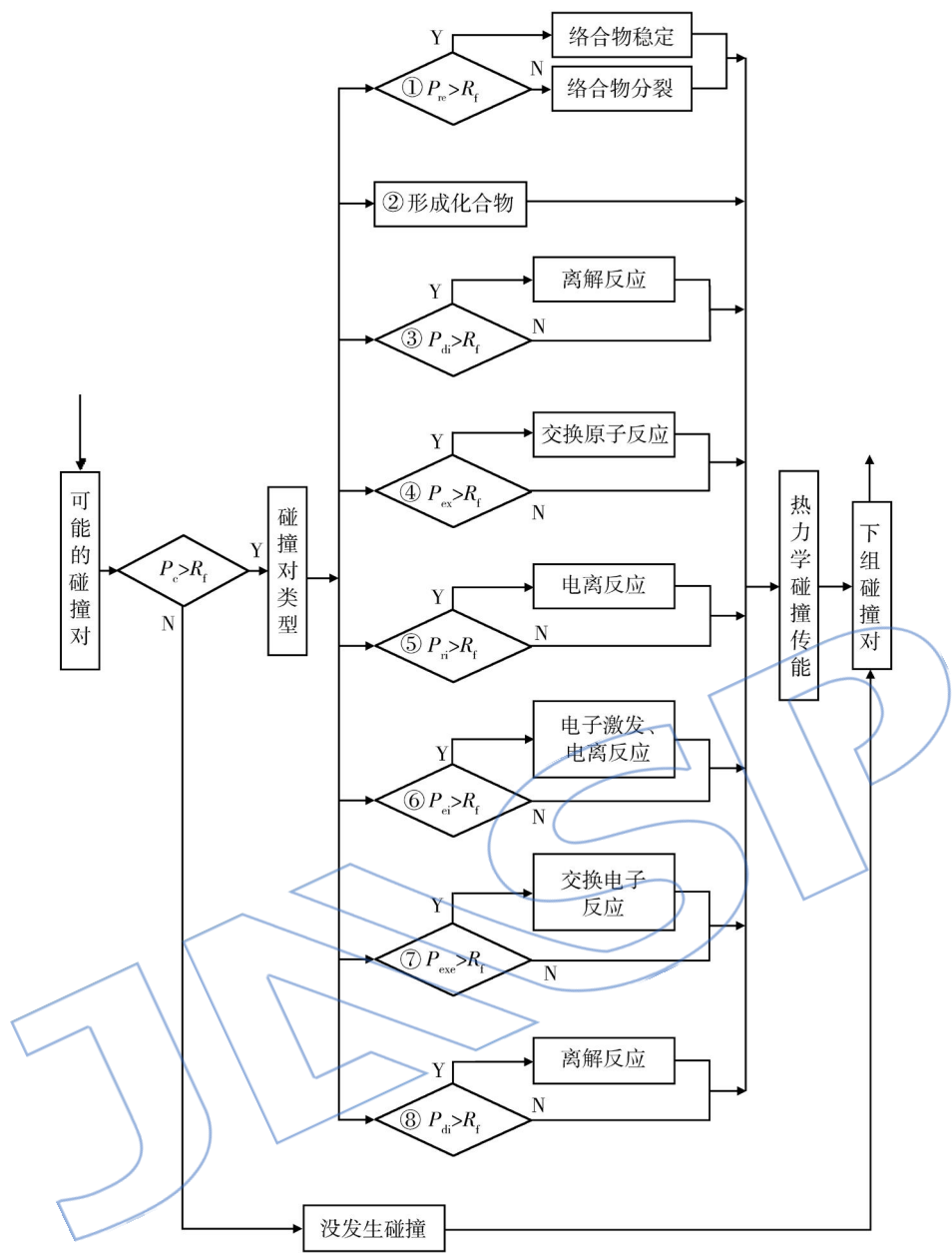


图 4 化学反应碰撞过程的子程序框图

Fig. 4 Subroutine flowchart of chemical reaction

当组分 A 的分子与组分 B 的分子碰撞时, 以一定的几率发生化学反应, 通常引入反应截面 R 与总碰撞截面 R 之比来代表由于碰撞所导致的化学反应发生的几率. 借助于 Bird 的唯象化学反应模型, 这时 $\frac{R}{R}$ 的表达式为

$$\frac{R}{R} = \frac{E_a P^{1/2} T_{ref}^{b_{ref}}}{2 R_{ref} (kT_{ref})^{b_{ref} + \frac{1}{2}} X_{AB}} \cdot \frac{\# \left[\bar{F} + \frac{5}{2} - X_{AB} \right]}{\# \left[\bar{F} + b + \frac{3}{2} \right]} \cdot \left(\frac{m_r}{2kT_{ref}} \right)^{1/2} \frac{(E_c - E_a)^{b_{ref} - \frac{1}{2}}}{E_c^{\frac{b_{ref} - 1}{2} - X_{AB}}} \quad (4)$$

式中 E 为对称因子, 对于不同类分子则取 $E = 1$, 对同类分子则取 $E = 2$. $\bar{F}$ 为内自由度的平均值, X_{AB} 是气体黏性系数的温度幂指数, E_a 和 E_c 分别代表活化能与碰撞的总能量, m_r 代表折合质量, $\#(*)$ 为 Gamma 函数, a 和 b 分别是化学反应速率公式中的常数, 这里表达式为

$$k(T) = a T^b \exp(-E_a/kT) \quad (5)$$

式中 E_a 为活化能, $k(T)$ 为化学反应速率. 注意式 (5) 等号右边的 k 代表 Boltzmann 常数; 图 5 给出了本文给出的一种简化处理热力学传能与化学反

应碰撞过程的子程序框图并用它完成了一些工况下的流场计算, 获得了一些可喜的结果.

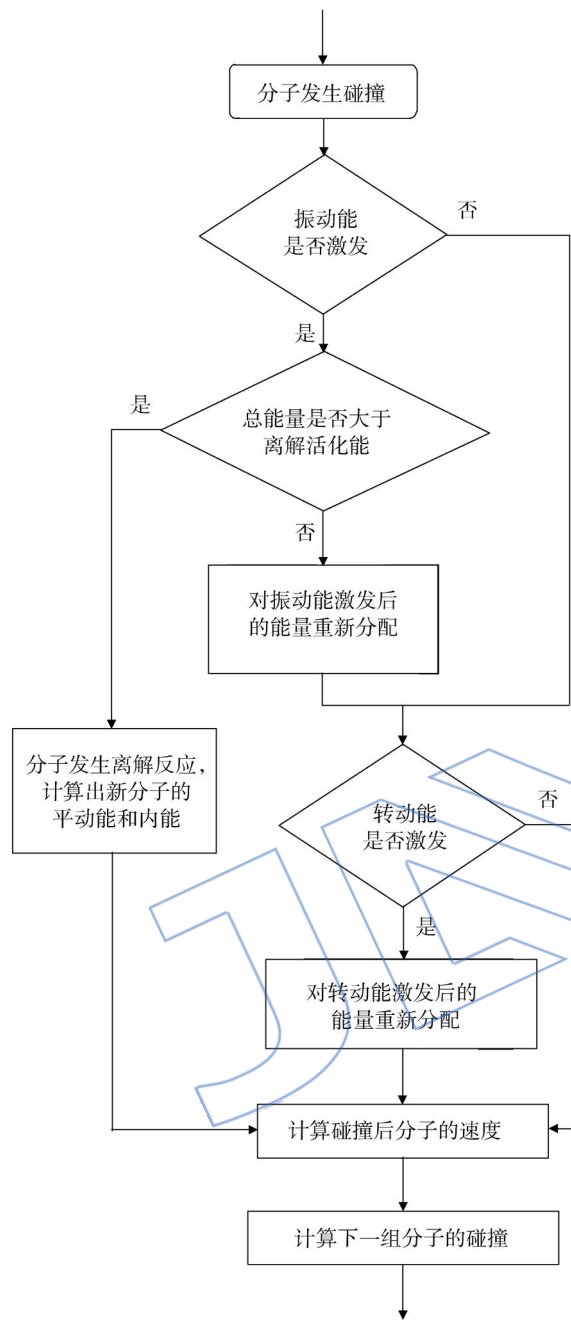


图 5 一种简化的处理两类碰撞的子程序框图
Fig. 5 A simplified subroutine flowchart of chemical reaction

2 典型算例计算及传热学分析

2.1 Ballute 减速问题

Ballute 减速装置是目前飞行器进入目标星球飞行轨道的一种新型气动制动技术的关键装置^[2], 该装置由探测器与环形气球组成, 由图 6 给出了进入火星轨道探测器(Mars Pathfinder)与环

形气球的示意图, 该气球总体直径 $D = 52.0\text{ m}$, 气球圆环截面直径 $D_{es} = 13.0\text{ m}$, 探测器尾部和环形气球中心距离是 28.46 m . 图 7 仅给出了火星探测器的结构尺寸图, 详细几何数据见文献[17].

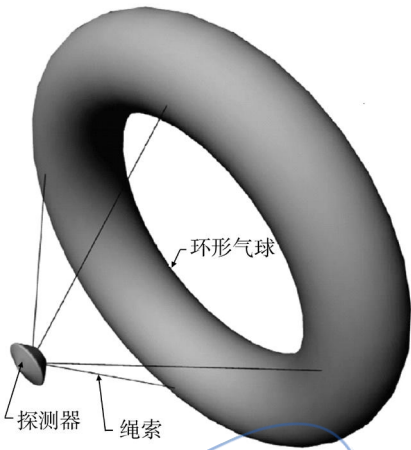


图 6 探测器和环形气球示意图
Fig. 6 Schematic of a toroidal ballute towed behind a spacecraft

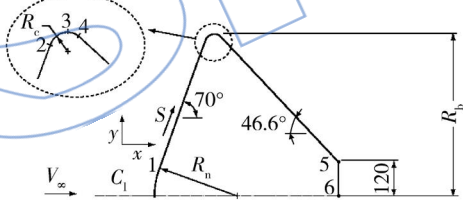


图 7 探测器结构图
Fig. 7 Spacecraft configuration

2.2 在地球大气层运动时 5 种工况的数值计算

表 2 给出了距离地球表面 110 km 到 200 km 时来流分子的自由程 λ 、数密度 n_1 、温度 T_1 、各组气体所占比例和气球特征长度(这里取为气球圆环截面直径 D_{es})所对应的 Knudsen 数, 为方便讨论分析, 这里来流速度统一取 8.55 km/s , 本文计算了表 2 中所给出的 5 种工况的稀薄流场.

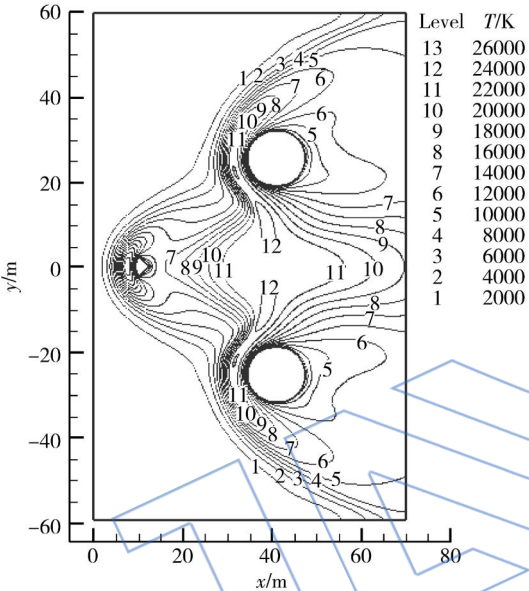
5 种工况下流场平动²转动温度 T 的分布如图 8(a)至图 8(e)所示, 温度最高值出现在探测器和气球的头部驻点区域内, 并且随着海拔高度的增加, 峰值逐渐由 $26\,000\text{ K}$ 降低到 $17\,000\text{ K}$. 探测器头部与气球头部各自的脱体激波间相互作用使得在探测器的尾部后方存在着一个高温区, 该区域的温度值均在 $12\,000\text{ K}$ 以上.

由探测器与气球头部温度等值线的分布可以看出, 在稀薄大气空间内, 随着海拔高度的上升,

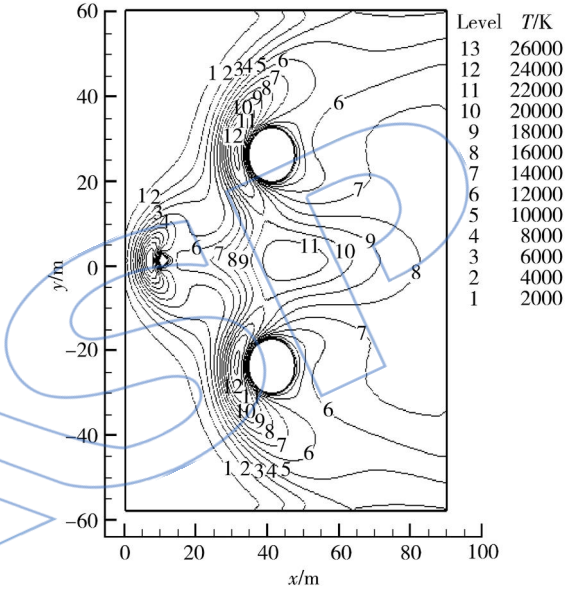
表 2 距离地面不同高度的自由来流参数

Table 2 Free stream conditions

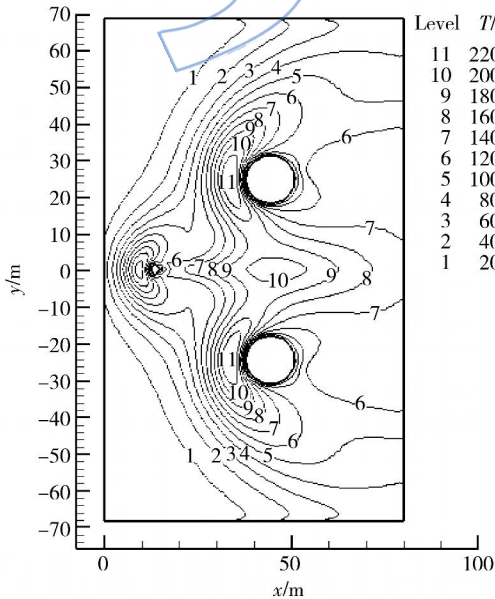
高度/km	K_f / m	n_f / m^3	T_f / K	X_{O_2}	X_{N_2}	X_{O}	Kn	Ma
200	389.9	$8.9996 @ 10^{15}$	1026	0.0315	0.4548	0.5138	30.0	11.2
140	20.76	$9.3526 @ 10^{16}$	625	0.0618	0.6517	0.2865	1.60	15.8
120	3.03	$5.2128 @ 10^{17}$	368	0.0845	0.7327	0.1828	0.23	21.2
115	1.59	$9.8565 @ 10^{17}$	305	0.0978	0.7539	0.1483	0.12	23.4
110	0.64	$2.1246 @ 10^{18}$	247	0.1232	0.7704	0.1064	0.05	26.3



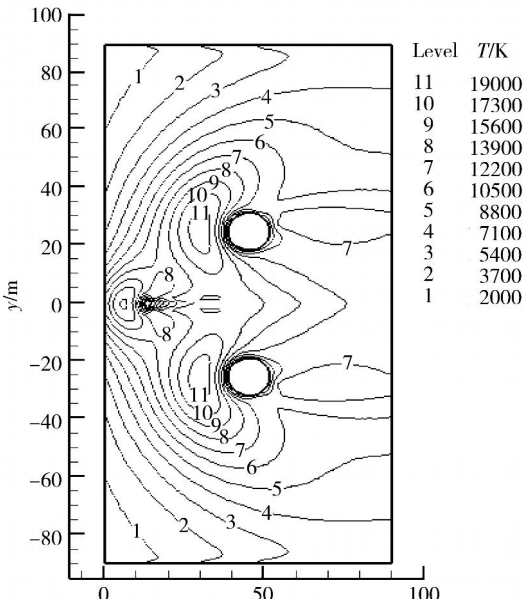
(a) 110 km 高度的温度分布图



(b) 115 km 高度温度分布图



(c) 120 km 高度温度分布图



(d) 140 km 高度温度分布图

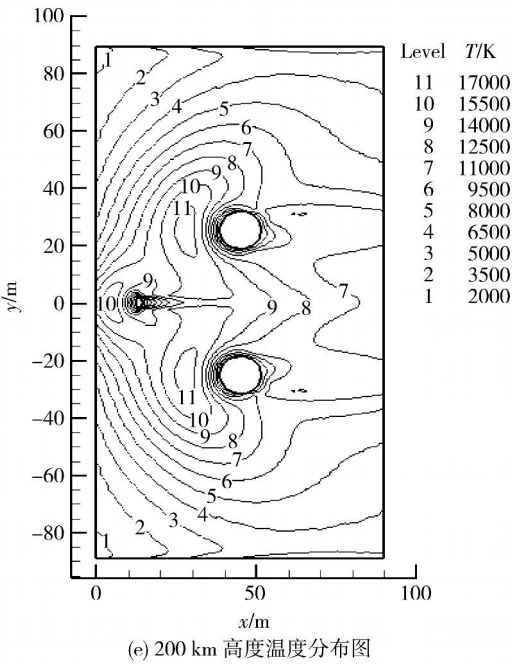
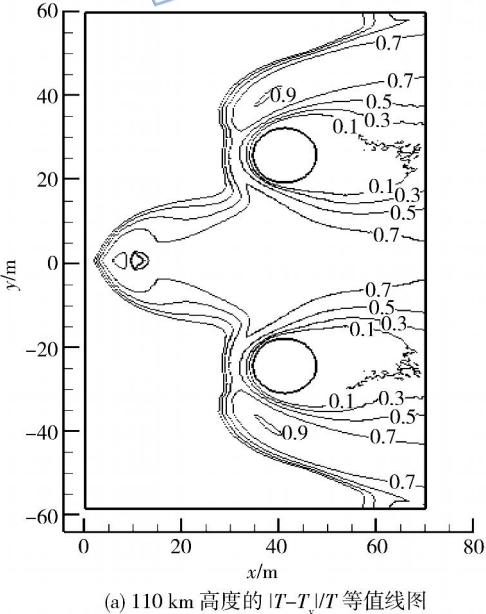


图 8 地球大气中 5 种工况时的温度等值线的分布图
Fig. 8 Translational temperature contours in the Earth's atmosphere

Knudsen 数由 0.05 增大到 30, 激波层的厚度也有显著增加. 在 110 km 处, 由于 Knudsen 数较小, 气体分子间的碰撞频率较大, 从而导致温度的等值线分布的较密, 激波层厚度较小; 在海拔高度 200 km 处, 此时 Knudsen 数为 30, 这时大气已经极其稀薄, 分子间的碰撞频率很低, 激波本身的厚度已非常大, 等值线的分布十分稀疏, 温度的变化梯度很小.

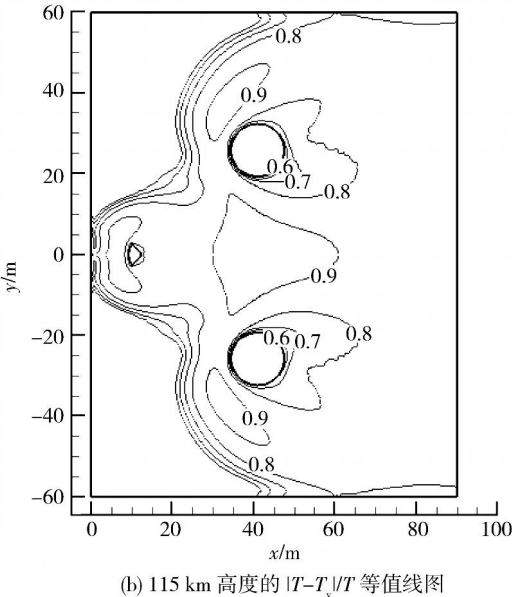
由图 9 可知, 4 种工况下气球头部驻点区域



内平动转动温度 T 的值相比探测器头部驻点区域的值较大. 在同一工况下, 气球头部的驻点区域中 $|T - T_v| / T$ 的值较小, 表明热力学非平衡态现象较弱, 这是由于气球头部的驻点区域中, 气体密度要大得多, 分子碰撞频率较大, 使得 T_v 的数值与 T 较为接近. 另外, 相比之下探测器头部驻点区域内 $|T - T_v| / T$ 的值大于气球头部区域的值, 表明该处热力学非平衡态现象比气球的头部要强, 这是由于气体密度较小, 分子的碰撞频率较低, 使得分子的热振动较弱, 振动温度 T_v 的值较低缘故.

从图 9 可以看出, 随着海拔高度的上升, 整个流场区域内气体的分子平均自由程增大, 分子间的碰撞频率减小, 使得分子的热激发程度降低, 分子的振动温度 T_v 很小, 从而导致全流场内分子的振动温度均远小于平动转动温度, 即 $|T - T_v| / T$ 的值很大, 流场内热力学非平衡态的剧烈程度和区域都逐渐增大, 在海拔 140 km 处, 绝大部分流场内 $|T - T_v| / T$ 的值已达到 0.9.

图 10 分别给出了距地面不同高度时环形气球表面热流密度沿表面圆周长 s 的分布图, 将本文得到的高度为 110 km 和 120 km 时两种工况的数值结果与文献[17]比较, 两者吻合较好. 从本文图 10 所给出的 5 种工况来看, 气球表面热流密度开始随着 s 的增大逐渐增大, 在驻点处达到最大值. 过了驻点后热流密度又逐渐降低, 在气球后部热流密度值很小. 受稀薄程度的影响较大, 随着高度的变化, 热流密度峰值从海拔高度 110 km 处的 8406 W/m^2 降低到 200 km 处的 98 W/m^2 .



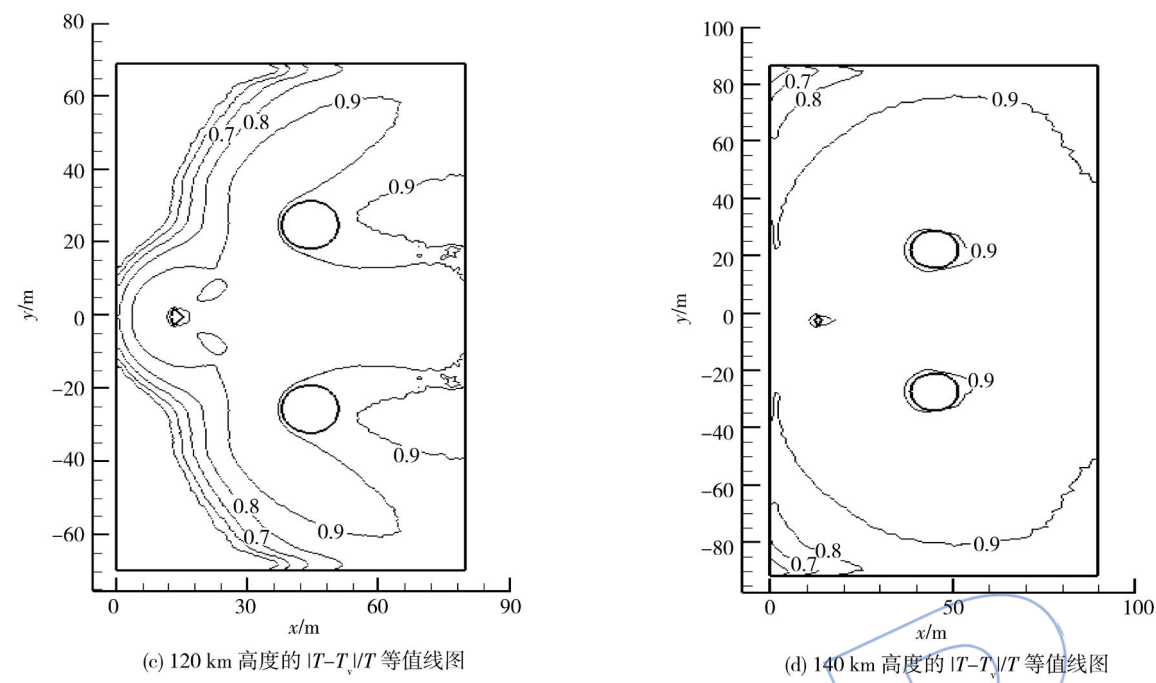


图 9 在地球大气层中 4 种工况时流场 $|T - T_v|/T$ 等值线的分布图

Fig. 9 $|T - T_v|/T$ contours in the Earth's atmosphere

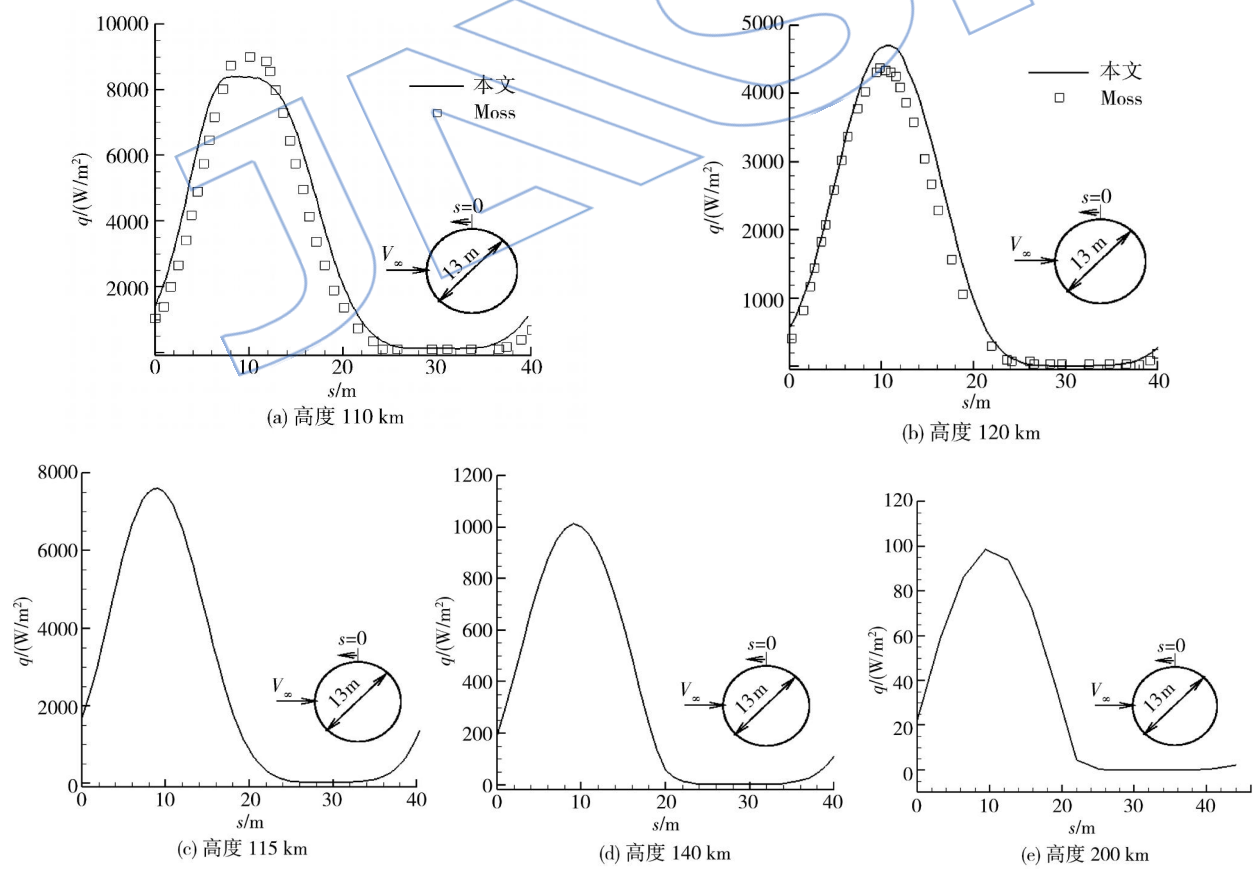


图 10 在地球大气层中 5 种工况时气球表面热流密度沿圆周 s 分布图

Fig. 10 Wall heat transfer rate distribution along s in the Earth's atmosphere

图 11 给出了上述 5 种工况时计算出的 $Stan2$ ton 数^[1821]沿壁面的分布,显然这时的分布与热流密度的分布很类似,气球表面 $Stanton$ 数开始随着 s 的增大逐渐增大,在驻点处达到最大值.

过了驻点后 $Stanton$ 数又逐渐降低,在气球后部 $Stanton$ 数很小.受稀薄程度的影响较大,随着高度的增加,来流密度减小, $Stanton$ 数逐渐增大, $Stanton$ 数的峰值从 0.285 增大到 0.839.

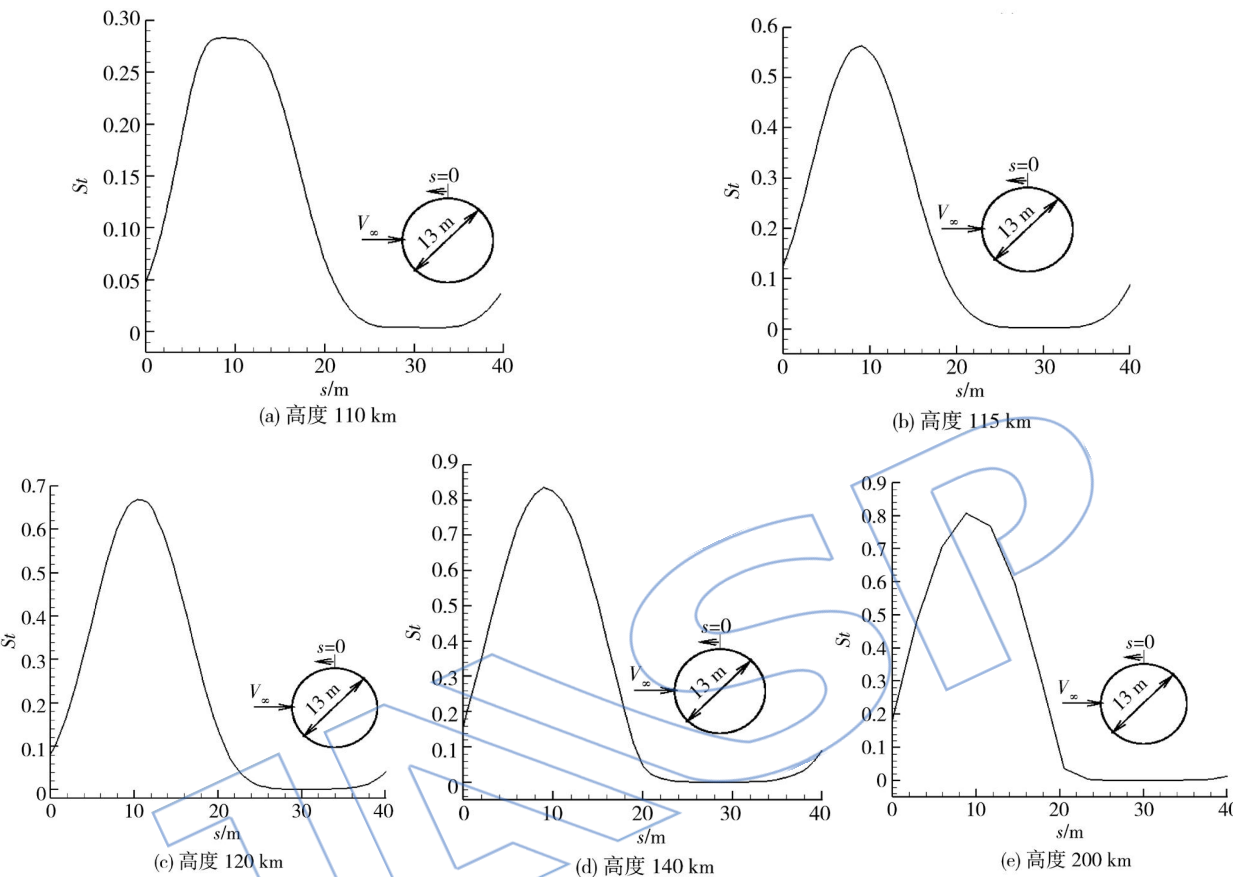


图 11 在地球大气层中 5 种工况时沿气球表面 $Stanton$ 数分布图
Fig. 11 Stanton number distribution along s in the Earth's atmosphere

将壁面气热流密度的模拟结果无量纲化,得到壁面热流系数 C_h

$$C_h = \frac{q}{\frac{1}{2} \rho U_1^3} \tag{6}$$

式中 q 是热流密度, ρ 和 U_1 分别是自由来流的密度和速度.

表 3 给出了相同来流速度 8.55 km/s , 不同高度(即 $110\sim 200\text{ km}$ 范围)时,环形气球表面的气球壁面热流密度与热流系数的峰值.从表 3 可以看出,壁面热流密度和热流系数受稀薄程度的影响较大,随着高度的变化,热流密度峰值从 8406 W/m^2 降低到 98 W/m^2 与其相对应的热流系数峰值从 0.280 变化到 0.961.并将本文的数值结果与文献[17]的结果相比,显然两者基本一致.

表 3 不同高度的气球表面热流密度、热流系数的峰值
Table 3 Heating results for wall of ballute

高度/km		$q/(\text{W/m}^2)$	C_h
110	本文	8 406	0.280
	Moss	9 300	0.310
120	本文	4 705	0.628
	Moss	4 400	0.622
140	本文	1 013	0.841
	Moss	1 020	0.847
200	本文	98	0.961
	Moss	100	0.975

图 12(a)给出了 110 km 高空时沿气球头部驻点线组分的摩尔百分比的分布图.从上图可以看出,激波后接近壁面的位置,由于气体分子密度增

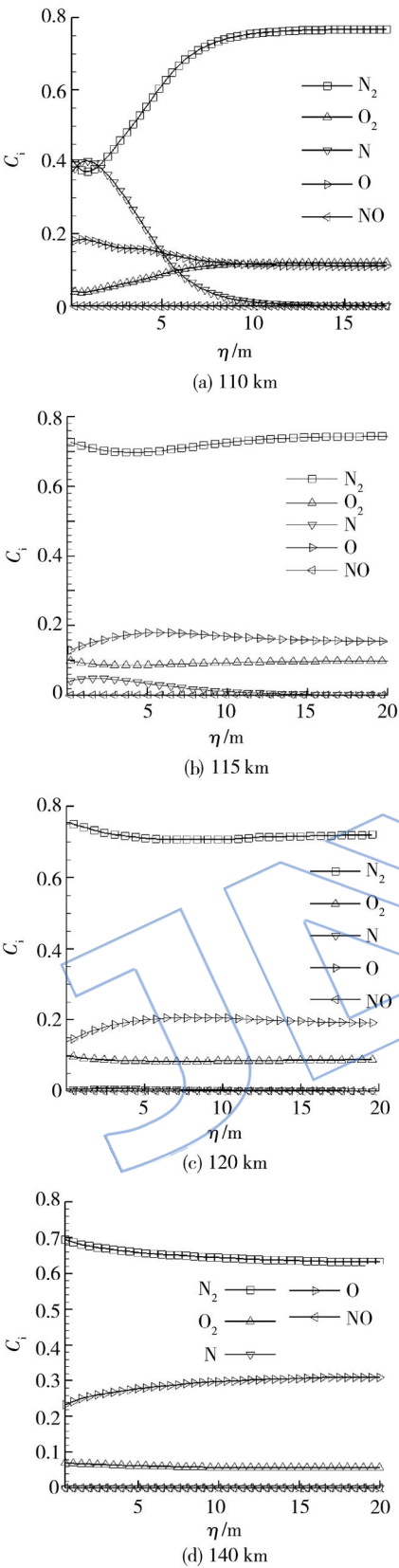


图 12 在地球大气层中 4 种工况时气体各组分沿气球头部驻点线的摩尔百分比分布图

Fig. 12 Species mass fractions along the stagnation streamline of ballute in the Earth's atmosphere

大,碰撞数目增大,气体分子化学反应最强烈.越靠近壁面,分子碰撞频率会逐渐增加,由于离解反应、置换反应和复合反应的发生,可以看出氮气与氧气组分逐渐降低,而氮原子和氧原子逐渐升高.值得注意的是,靠近壁面这时因冷壁效应导致了氮气与氧气组分略有升高,氮原子与氧原子略有降低.图 12 中给出了距离地面高度为 110, 115, 120 km 和 140 km 这 4 种工况时不同组分气体中所占的摩尔百分比,从图中可以看出整个流场的化学反应的变化过程.

从图 12 可以看出,随着高度从 110 km 增加到 140 km,气体稀薄程度增加, N_2 和 O_2 分子的分解趋势减弱,这表明流场中的化学反应程度降低.当飞行高度达到 140 km 时, N_2 和 O_2 分子基本上没离解反应发生,流场化学反应已经变的很微弱.所以可以得出飞行器表面的化学反应程度随着高度的增加而减弱,当气体稀薄程度接近于自由分子区时,化学反应对流场的影响将十分有限.这主要是因为随着来流密度减少导致分子的碰撞频率减小,由于分子间化学反应发生主要是通过分子碰撞来实现的,因此上述过程所对应的气体的化学反应程度减弱.

为了更有效的定量描述流场中的化学非平衡态,引进 Damk hler 数(它是流动特征时间与化学反应特征松弛时间的比),并用符号 D_m 来表示.对于同一反应, D_m 数越大,则流场中的化学反应越强烈.对于 N_2 分子来讲,它在流场中的化学反应的程度用 $D_m(N_2)$ 来表示,其表达式为

$$D_m(N_2) = (L/U_1) k_{f,N_2} Q_2 / M_{N_2} \quad (7)$$

式中 L 是气球特征长度, U_1 是来流速度, k_{f,N_2} , Q_2 和 M_{N_2} 分别是 N_2 分子分解的速率、密度和分子质量

图 13 给出了流场中 N_2 分子离解反应时所对应的 D_m 数的分布图.从图 13(a)中给出的流场 D_m 数等值线的分布图可以看出,等值线主要集中在气球头部区域,这表明在气球头部局域化学反应较显著,相比来讲,探测器头部的化学反应较弱,因此图 13(b)~(d) 便仅给出气球部分的 D_m 数等值线的分布图.在距离地面 4 种工况(即高度分别为 110, 115, 120 km 和 140 km)时, D_m 数的最大值分别为 4.2×10^{-2} , 6.5×10^{-4} , 2.0×10^{-6} , 4.5×10^{-9} ,可见随着来流稀薄程度的增加, D_m 数值降低很快,这说明流场内的化学反应程度减弱.当高度达 140 km 时,化学反应已基本不发生,这与前面的分析是一致的.

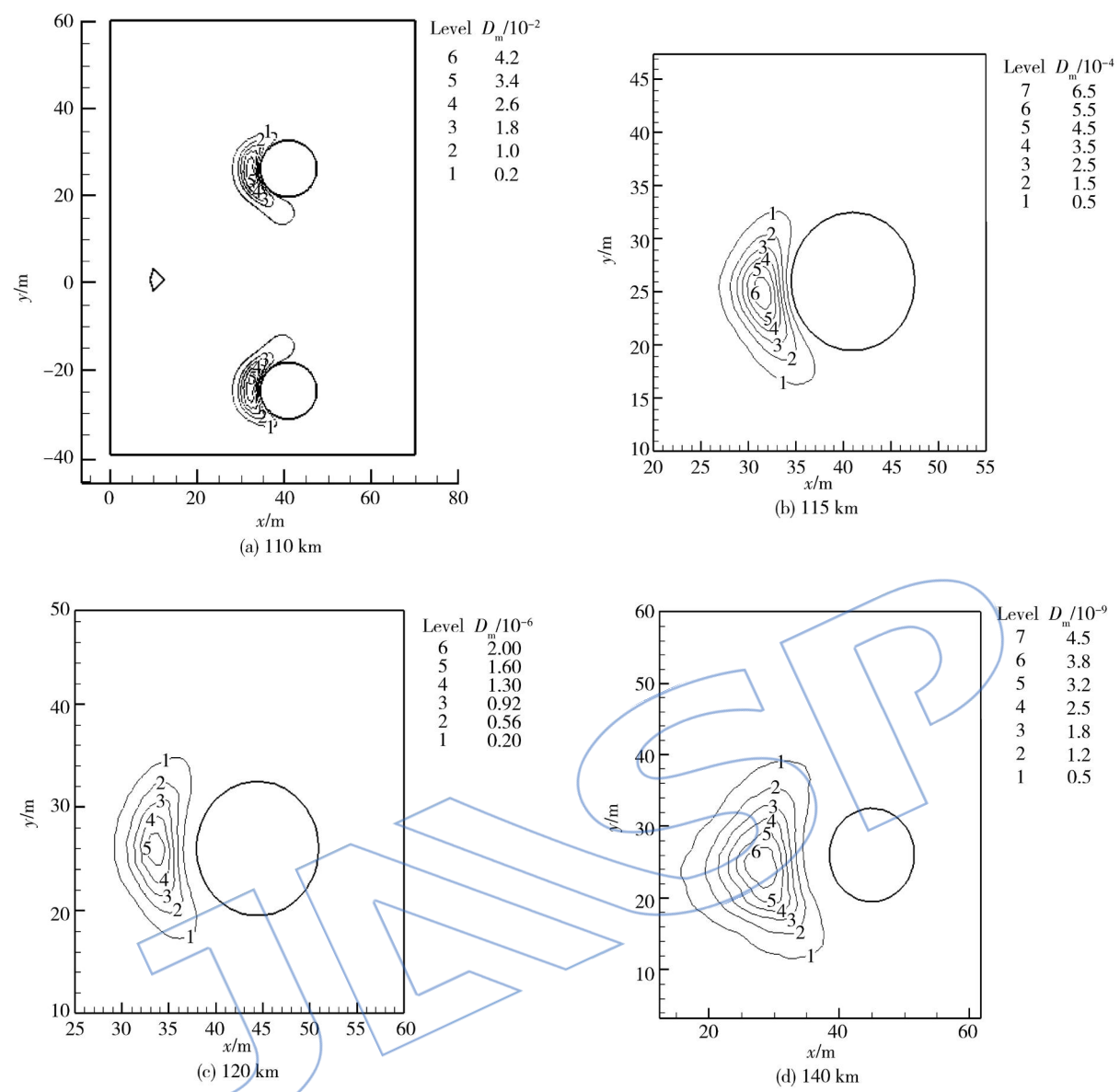


图 13 在地球大气层中 4 种工况时流场中 N_2 分子离解反应对应的 D_m 数等值线的分布图
Fig. 13 D_m number contours in the Earth's atmosphere

表 4 给出了本文在完成上述 5 种工况计算时所选用的 N_s 和 N_t 等值, 这里 N_s 为额定取样数,

表 4 程序中的所选用的部分参数以及计算所占用的 CPU 时间

Table 4 Parameters and CPU times of computation			
高度/km	N_s	N_t	机时/h
110	100	250	67
115	100	250	32
120	100	250	18
140	100	300	9
200	100	500	5

N_t 为总循环数. 表 4 中的/ 机时 0 表示完成计算所占用的 CPU 时间(本计算是在双 CPU, Intel(R) Xeon(TM) 双核处理器, 主频 2. 66 Hz, 内存 2 G 的计算机上进行的).

2.3 在火星大气层运动时 3 种不同工况时的数值计算

火星是人类未来星际探索的重要目标之一. 火星大气与地球大气相比, 它要稀薄的多, 而且大气中 95% 是 CO_2 . 表 5 给出了距离火星表面 100 km 到 130 km 高度处来流分子的自由程 K_f 、数密度 n_1 、各组分气体所占比例以及对应气球特征长度(取气球直径 D_s) 的 Knudsen 数. 为方便分析,

这里将来流速度统一取 8.55km/ s.

表 5 火星大气环境时不同高度处的来流参数
Table 5 Free stream conditions

高度/km	K_f /m	n_f /m ⁻³	X_{CO_2}	X_{N_2}	Kn
130	44.3	1.61@10 ¹⁶	0.954	0.046	3.41
110	2.83	2.52@10 ¹⁷	0.954	0.046	0.22
100	0.74	9.60@10 ¹⁷	0.954	0.046	0.057

Ballute 装置在火星大气层中运动时, 在探测器的头部和环形气球的迎风面头部都将产生激波, 激波后气体温度升高并将发生化学反应, 其反应模型可用包含 C, O, N, N₂, CO, CO₂, NO 和 O₂ 在内的 8 组元 44 个基元反应的模型来描述. 令 M 为反应碰撞单元(这里 M 为 C, O, N, N₂, CO, CO₂, NO 和 O₂ 的任意一个). 表 6 给出了在火星大气层作高超声速飞行时所发生化学反应的模型.

为了比较 Ballute 装置在地球与火星两种大气层中的运动, 本文又对火星大气层进行了数值计算, 图 14 给出了距离火星表面 100km 和距离地球表面 110km 的温度等值线, 两者的自由来流速度相同(都取为 8.55km/s), 这时两者的 Knudsen 数较为接近. 从计算结果上可以看出, 火星大气层的气球前缘附近的激波层厚度明显大于地球大气层的结果. 对于火星大气层, 其温度峰值达到了 30000K, 而对于地球大气层为 26000K, 显然两者具有很明显的差异. 之所以这样是由于分子自由程的计算采用了硬球模型

$$K=\frac{1}{\sqrt{2}Pd^2n}$$

(8)

可以看出, 在相同的分子自由程时, 数密度 n 和分子直径 d 的平方成反比. 火星大气的主要组分是 CO₂ 的分子直径 d= 5.62 @10⁻¹⁰ m, 而地球大气的主要组分 N₂ 分子(分子直径 d= 4.17 @10⁻¹⁰ m)和 O₂ 分子(分子直径 d= 4.07 @10⁻¹⁰ m)相比 CO₂ 的分子直径要小, 对应的数密度就相对较大. 所以在相同的 Knudsen 数下, 火星大气相比地球大气更加稀薄. 另外, 流场的平动温度的计算公式

$$T=\frac{m\overline{c^2}}{3k}$$

(9)

式中 m 是分子质量, $\overline{c^2}$ 是网格内分子相对速度的平方, k 是 Boltzmann 常数. 由(9)式可以看出平动温度 T 和分子质量成正比. 火星大气的主要组分是 CO₂ 的分子质量(m= 7.31 @10⁻²⁶kg), 大于地球大气的主要组分 N₂ 分子(m= 4.65 @10⁻²⁶kg)和 O₂ 分子(m= 4.65 @10⁻²⁶kg)的分子质量, 所以相同来流速度和相同 Knudsen 数情况下, 火星大气工况下的总温要比地球大气的高.

图 15 给出了来流速度统一取 8.55km/s, 距离火星表面 110km 和 130km 高度时的计算得到的探测器和环形气球的温度分布图. 从该图中可以看出其分布特性与地球大气环境中的数值模拟结果相类似, 随着距离火星表面高度的增加(当从 100km 变到 130km 时), 大气稀薄程度增加, 对应的 Knudsen 数从 0.057 增加到 3.41. 另外, 从 100km 和 110km 工况时的温度图可以发现激波

表 6 火星大气层中所发生的化学反应机制模型
Table 6 Mars atmosphere reaction

	化学反应	反应碰撞单元
1	CO ₂ + M\ CO+ O+ M	M= N ₂ , O ₂ , NO, CO ₂ , CO , N, O, C
2	CO+ M\ C+ O+ M	M= N ₂ , O ₂ , NO, CO ₂ , CO, N, O, C
3	N ₂ + M\ N+ N+ M	M= N ₂ , O ₂ , NO, CO ₂ , CO, N, O, C
4	O ₂ + M\ O+ O+ M	M= N ₂ , O ₂ , NO, CO ₂ , CO, N, O, C
5	NO+ M\ N+ O+ M	M= N ₂ , O ₂ , CO, N, O, C, NO, CO ₂
6	NO+ O\ N+ O ₂	无
7	N ₂ + O\ NO+ N	无
8	CO+ O\ C+ O ₂	无
9	CO ₂ + O\ CO+ O ₂	无

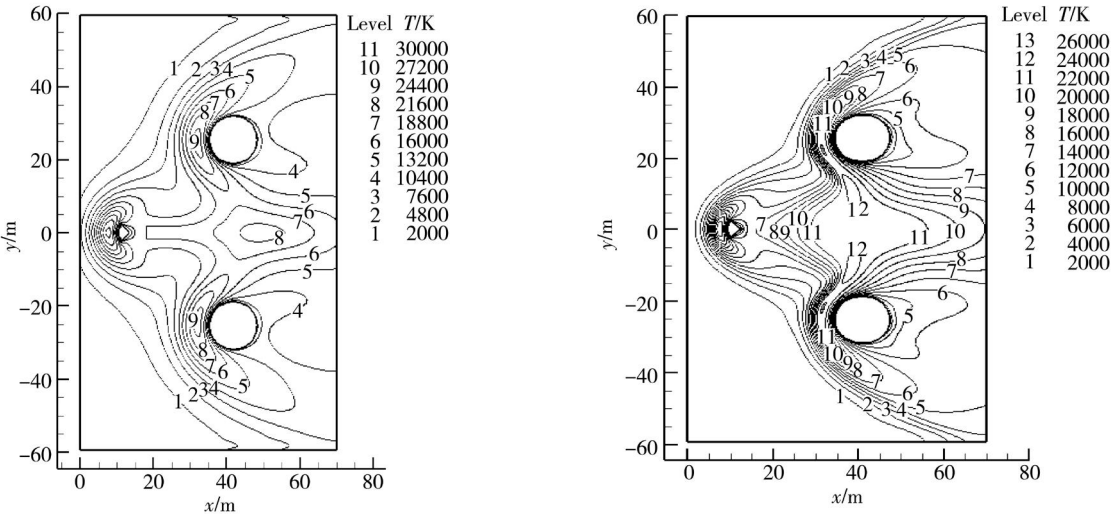


图 14 距离火星表面 100km 和距离地球表面 110km 处的温度等值线分布图

Fig. 14 Translational temperature contours in the Mars. (100km) and Earth. s (110km) atmosphere

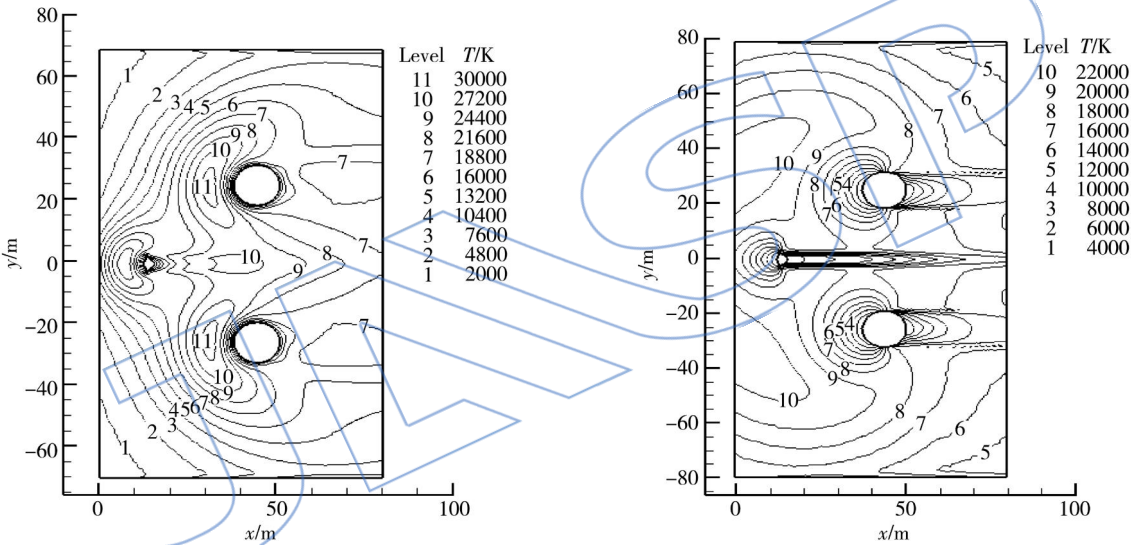


图 15 Ballute 装置在距离火星表面 110km 和 130 km 高度处的温度分布图

Fig. 15 Translational temperature contours in the Mars atmosphere

相互作用的物理现象, 这种现象是由于探测器的激波和环形气球的激波相互作用的结果, 因此在探测器尾部区域和环形气球间的区域内存在着一个很明显的高温区, 其最高温度为 21 600 K. 而在距离火星表面 130 km, 稀薄程度接近自由分子区, 探测器与气球的头部激波厚度增大, 而且相应温度的峰值也降低了(见图 15).

图 16 给出了火星大气环境中, 3 个不同高度时的环形气球表面的热流系数沿壁面的分布图. 从中可以看出随着高度的降低, 热流系数受稀薄程度的影响较大, 其热流系数峰值从 0.45 增加到 0.91.

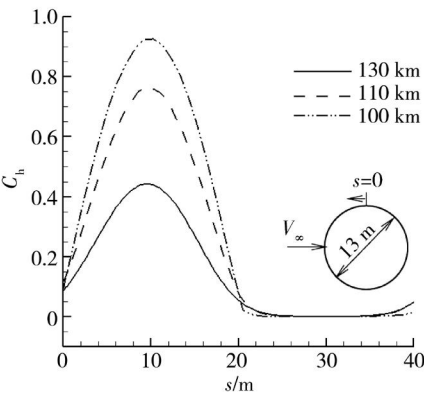


图 16 在火星大气层中 3 个高度处沿环形气球壁面的热流系数分布图

Fig. 16 Wall heat transfer coefficient distribution along s in the Mars. atmosphere

图 17(a) 给出了距离火星表面 110 km 高度处, 气体不同组分分子沿驻点线的摩尔百分比的分布图. 可以看出, 由于 CO_2 分子的离解温度远远低于 N_2 的分解温度, 所以 CO_2 的离解率远远大于 N_2 的值. 另外, 火星大气中的主要反应生成物是 O , N 和 CO , 从图中可以看出作为 CO_2 分解的生成物 O 和 CO 在流场中的摩尔分数基本相同, 这是表明 CO 的离解温度很高, 导致了 CO 的

离解率很低. 可以看出上述情况与地球大气中流场的化学反应趋势基本上是一致的, CO_2 与 N_2 的气组分越靠近壁面越低, 而 O , N 和 CO 逐渐升高. 此外, 当靠近壁面时, 由于冷壁效应的存在导致了 CO_2 与 N_2 组分略有升高, O , N 和 CO 略有降低.

对比图 17 中的 3 种工况时气体的各组分分子沿驻点线的摩尔百分比分布图还可以看出, 在距离火星表面 100 km 高度处 CO_2 的分解率最高, CO_2 所占的摩尔百分比从由来流的 95% 下降到了接近壁面附近的 15%, 流场中的化学反应很强烈; 在距离火星表面 110 km CO_2 从由来流的 95% 下降到了接近壁面附近的 85%, 距离火星表面 130 km CO_2 的摩尔百分比基本不发生变化, 流场中化学反应效果并不明显. 由图 17 还可以看出, 在火星大气中所发生的化学反应与地球大气中的反应有共同之处, 那就是它们都是随着来流密度减少, 分子的碰撞频率减小, 因此对应的气体化学反应程度减弱.

图 18 给出了火星大气层中高度分别为 100 km 和 110 km 这 2 种工况时流场的 $|T - T_v|/T$ 值的等值线分布图. 由图中可以看出, 这里 $|T - T_v|/T$ 值的等值线分布图与地球大气层中相应的结果类似, 都是在同一工况下, 气球头部的驻点区域中 $|T - T_v|/T$ 的值较小, 表明热力学非平衡态现象较弱. 另外, 相比之下探测器头部驻点区域内 $|T - T_v|/T$ 的值大于气球头部区域, 表明该处热力学非平衡态现象比气球的头部要强. 此外, 由 18 图 (a) 可知, $|T - T_v|/T$ 值从 0.1 变化到 0.7; 图 18 (b) 可知, $|T - T_v|/T$ 值从 0.5 变化到 0.9. 还需说明的是, 对于 130 km 高度的工况时流场的 $|T - T_v|/T$ 值的等值线分布图, 由于它与图 18 (b) 相类似, 这里因篇幅所限不再给出.

图 19 给出了上述 3 种工况时的 Stanton 数沿壁面的分布图, 很显然这里的分布与图 11 在地球大气层的结果相类似, 其规律都是气球表面 Stanton 数开始随着 s 的增大逐渐增大, 在驻点处达到最大值. 过了驻点后 Stanton 数又逐渐降低, 在气球后部 Stanton 数很小. 受稀薄程度的影响较大, 随着高度的增加, 来流密度减小, Stanton 数逐渐增大. Stanton 数的峰值从 0.451 增大到 0.932.

表 7 给出了在火星大气环境下完成上述 3 种工况计算时所选取的 N_s 与 N_t 值, 以及完成计算所需用的计算时间. 该计算也是在双 CPU, Intel

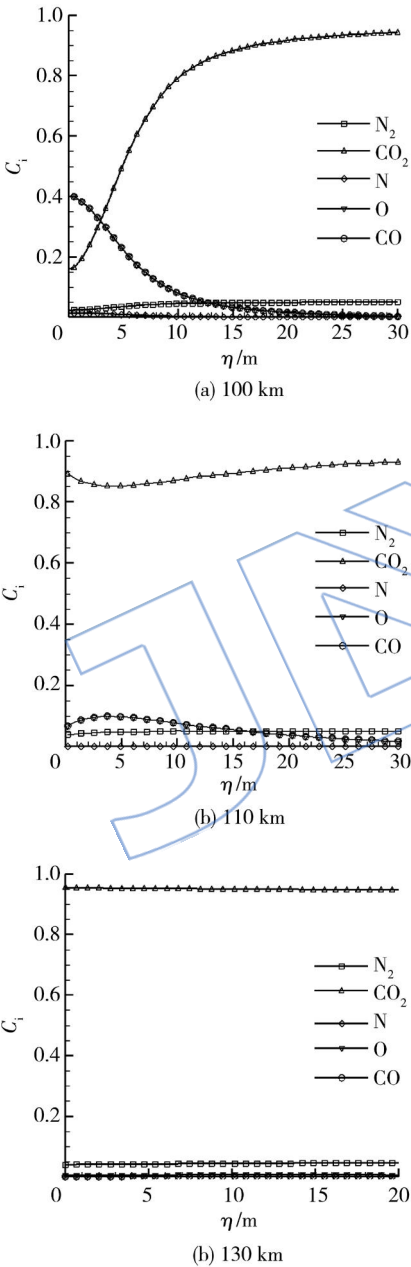


图 17 在火星大气层中 3 种工况时气体各组分沿气球头部驻点线的摩尔百分比分布图

Fig. 17 Species mass fractions distribution along the stagnation streamline of ballute in the Mars atmosphere

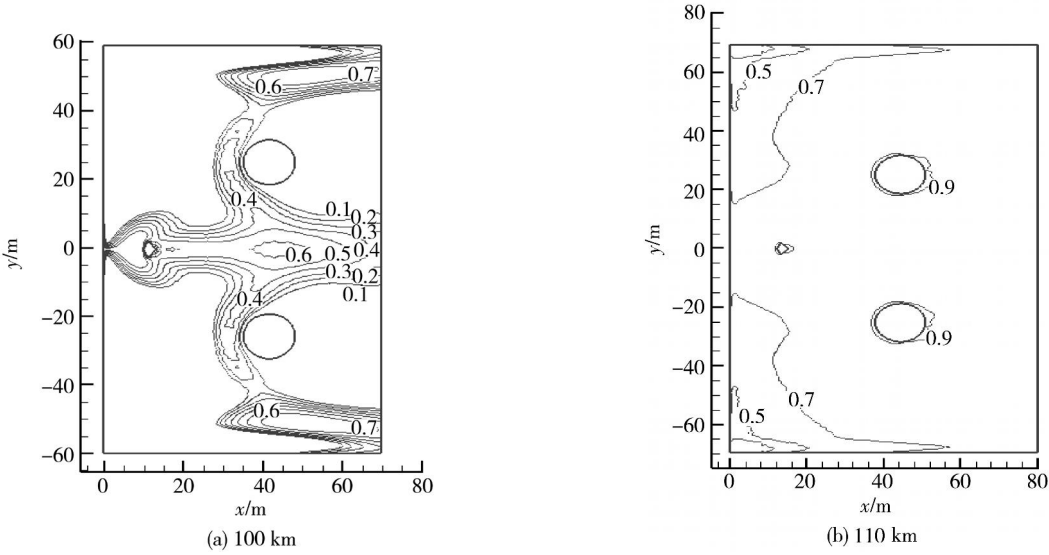


图 18 在火星大气层中 2 种工况时流场 $T - |T_v|/T$ 等值线的分布图
Fig. 18 $|T - |T_v|/T$ contours in the Mars. atmosphere

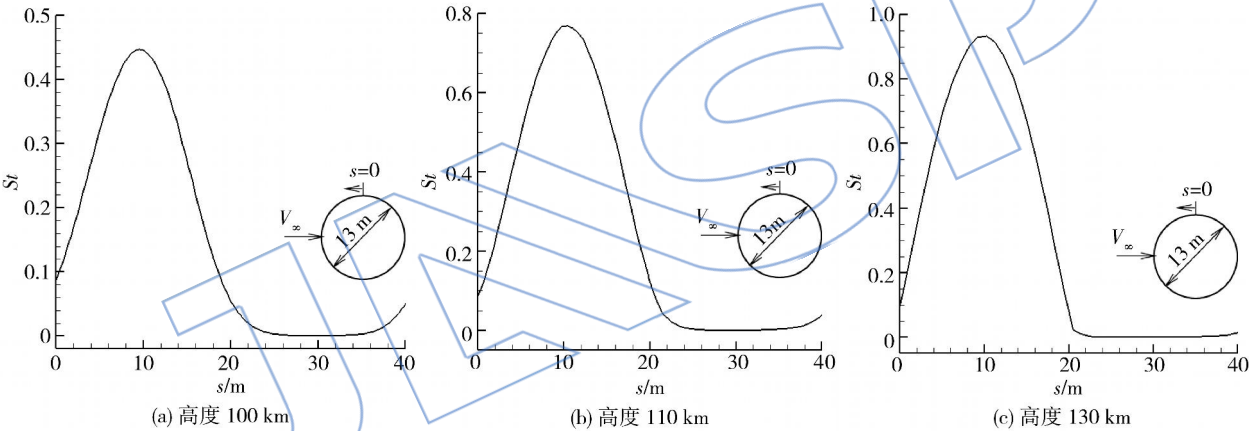


图 19 在火星大气层中 3 种工况时沿气球表面 Stanton 数的分布图
Fig. 19 Stanton number distribution along s in the Mars. atmosphere

表 7 程序中的部分参数和计算时间			
Table 7 Parameters and CPU times of computation			
高度 / km	N_s	N_t	机时 / h
100	100	250	55
110	100	250	28
130	100	300	10

(R) Xeon(TM) 双核处理器, 主频 2.66Hz, 内存 2G 的计算机上进行的。

3 结 论

1) 本文详细讨论了稀薄气体流场计算的 DSMC 算法, 给出了热力学碰撞传能的 6 种方式

和化学反应的 8 种碰撞过程, 详细给出了相关的计算子程序框图. 在非结构网格下, 在可变硬球 (VHS) 分子模型、Borgnakke-Larsen 唯象模型、Bird 的化学反应几率模型以及壁面 CLL 反射模型的基础上, 用 Fortran 语言编制了具有自主知识产权的能够模拟内能松弛、热力学非平衡和化学非平衡的稀薄气体 DSMC 源程序, 在地球大气层和火星大气层中完成了 8 种工况的数值模拟计算, 并与美国 NASA Langley 研究中心 Moss J N 2007 年发表的计算^[17]做了比较, 结果令人满意, 从而初步显示了所编程序的可行性与有效性.

2) 以 Ballute 减速装置(其中包括探测器与环形气球)为典型算例, 完成了在两种大气环境下的数值计算: ① 在地球大气环境(高度从 110 km

到 200 km, Knudsen 数从 0.05 变到 30.0, 飞行 Mach 数从 26.3 变到 11.2) 时 5 种飞行工况的 DSMC 计算; ° 在火星大气环境(高度从 100 km 到 130 km, Knudsen 数从 0.057 变到 3.41, 来流速度为 8.55 km/s) 时 3 种飞行工况的 DSMC 计算. 分别得到了 8 种工况下壁面热流密度和 Stanton 数的分布, 这对飞行器的热防护以及 Ballute 气动制动装置的热防护设计提供了有效的分析工具.

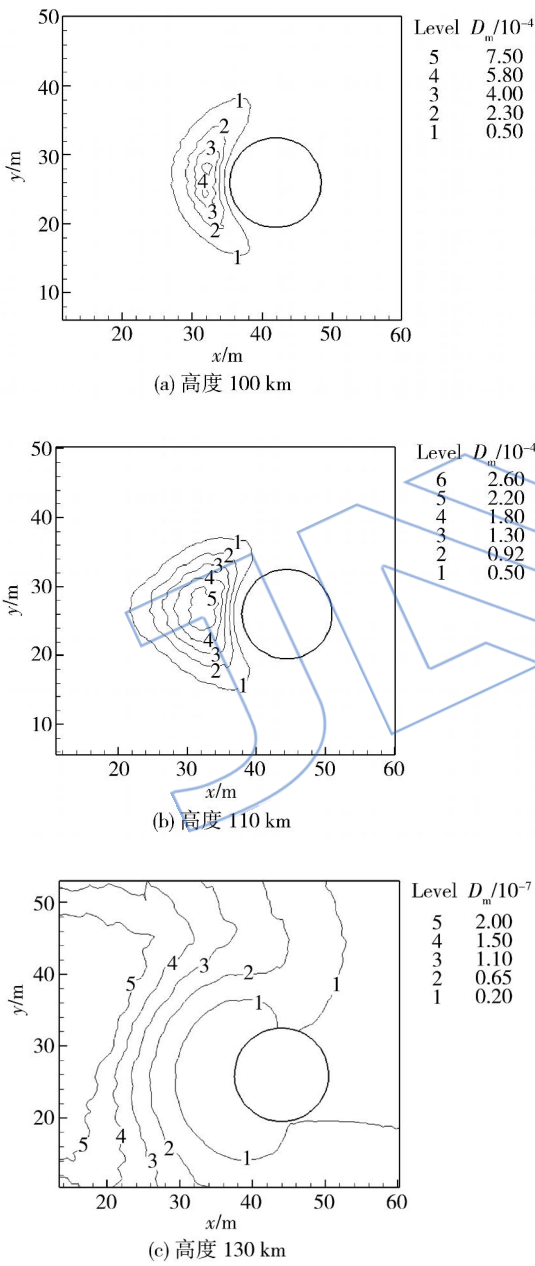


图 20 在火星大气层中 3 种工况时流场中 N₂ 分子离解反应时对应的 Damköhler 数分布图

Fig.20 D_m number contours in the Mars. atmosphere

3) 在高温稀薄流场的热力学分析与传热学分析方面,注意了用 $|T - T_v| / T$ 去分析热力学非平衡,用 Damköhler 数去分析化学反应的非平衡,用壁面的 Stanton 数分布^{[18][19]} 去分析壁面的传热效果,显然这些分析对高温部件的热防护分析与设计提供了坚实的理论分析基础. 另外以图 20 为例,该图给出流场中 N₂ 分子离解反应时对应的 D_m 数的分布图. 从图 20 所给的 D_m 数等直线的分布图可以看出, 这里的结果与图 13 地球大气层中的结果有相似之处, 即等值线都主要集中在气球头部区域, 这表明在气球头部局域化学反应较显著. 在图 20 中, 3 种工况(即飞行高度分别为 100, 110, 130 km) 时, D_m 数的最大值分别为 $7.5 @ 10^{-4}$, $2.6 @ 10^{-4}$, $2.0 @ 10^{-7}$. 从这些结果可以看出, 随着来流稀薄程度的增加, D_m 数的值降低很快, 这说明随着高度的增大流场内的化学反应程度逐渐变弱. 显然, 用 D_m 数去分析化学反应的非平衡程度是十分有益的.

参考文献:

[1] 王保国, 刘淑艳, 黄伟光. 气体动力学[M]. 北京: 国防科工委五所院校(北京理工大学、北京航空航天大学、西北工业大学、哈尔滨工业大学、哈尔滨工程大学) 联合出版社, 2005: 522-576.

[2] Hall J L, Le A K. Aerocapture trajectories for spacecraft with large towed ballutes [R]. AAS/AIAA Paper 02-235, 2001.

[3] 孙成海, 王保国, 沈孟育. 格子 Boltzmann 方法的质量扩散模型[J]. 计算物理, 1997, 14(4): 672-673.

SUN Chenghai, WANG Baoguo, SHEN Mengyu. Lattice Boltzmann models for mass diffusion [J]. Chinese Journal of Computation Physics, 1997, 14 (4) : 672-673. (in Chinese)

[4] 孙成海, 王保国, 沈孟育, 等. 完全气体格子 Boltzmann 热模型[J]. 清华大学学报, 2000, 40(4), 525-524.

SUN Chenghai, WANG Baoguo, SHEN Mengyu, et al. Thermal Lattice Boltzmann model for perfect gas [J]. Journal of Tsinghua University (Science and Technology), 2000, 40(4), 525-524. (in Chinese)

[5] 陈伟芳, 吴其芬. Boltzmann 方程求解方法综述[J]. 国防科技大学学报, 1999, 21(1): 427.

CHEN Weifang, WU Qifen. Methods for solving Boltzmann equation [J]. Journal of National University of Defense Technology, 1999, 21(1): 427. (in Chinese)

[6] Bird G A. Molecular gas dynamics [M]. Oxford: Clarendon Press, 1976: 118-132.

[7] 沈青, 樊菁. 过渡领域三维绕流直接统计模拟位置元法的一种新方案[J]. 空气动力学学报, 1996, 14(3): 292-303.

SHEN Qing, FAN Jing. A new version of position element space discretization in direct statistical simulation of three-dimensional flow [J]. Journal of Aerodynamics, 1996, 14(3): 292-303.

- dimensional flow in transitional regime[J]. *Acta Aerodynamica Sinica*, 1996, 14(3): 292-303. (in Chinese)
- [8] 樊菁, 刘宏立, 沈青, 等. 直接统计模拟位置元方法中的分子表面反射确定论判据[J]. *空气动力学学报*, 2000, 18(2): 180-187.
- FAN Jing, LIU Hongli, SHEN Qing, et al. Molecular reflection deterministic criterion used in the position element algorithm of direct statistical simulation [J]. *Acta Aerodynamica Sinica*, 2000, 18(2): 180-187. (in Chinese)
- [9] 樊菁, 刘宏立, 沈青, 等. DSMC 位置元方法中的表面元的程序标识及分子表面反射确定论判据[J]. *力学学报*, 1999, 31(6): 672-676.
- FAN Jing, LIU Hongli, SHEN Qing, et al. Program marking of surface elements and the determination of molecular surface reflection in position element algorithm of DSMC method[J]. *Acta Mechanica Sinica*, 1999, 31(6): 672-676. (in Chinese)
- [10] Laux M, Fasoulas S. Development of a DSMC code on planar unstructured grids with automatic grids adaptation [R]. AIAA 92-2053, 1995.
- [11] 王保国, 黄虹宾. 叶轮机械跨声速及亚声速流场的计算方法 [M]. 北京: 国防工业出版社, 2000: 98-123.
- [12] 沈青. 认识稀薄气体动力学 [J]. *力学与实践*, 2002, 24(6): 12-14.
- SHEN Qing. Get acquainted with rarefied gas dynamics [J]. *Mechanics and Engineering*, 2002, 24(6): 12-14. (in Chinese)
- [13] 王保国, 李荣先, 马智明, 等. 非结构网格下含冷却孔的涡轮转子三维流场计算[J]. *航空动力学报*, 2001, 16(3): 224-231.
- WANG Baoguo, LI Rongxian, MA Zhiming, et al. Calculation of turbulent flow over three-dimensional turbine rotor blade rows with film cooling on unstructured grids[J]. *Journal of Aerospace Power*, 2001, 16(3): 224-231. (in Chinese)
- [14] 王保国, 刘淑艳, 杨英俊, 等. 非结构网格下涡轮级三维非定常 N-S 方程的数值解[J]. *工程热物理学报*, 2004, 25(6): 940-942.
- WANG Baoguo, LIU Shuyan, YANG Yingjun, et al. Unstructured-grid numerical solution of the 3D unsteady Navier-Stokes equations in a turbine stage[J]. *Journal of Engineering Thermophysics*, 2004, 25(6): 940-942. (in Chinese)
- [15] Borgnakke C, Larsen P S. Statistical collision model for Monte Carlo simulation of polyatomic gas mixture [J]. *Journal of Computational Physics*, 1975, 18(4): 405-420.
- [16] Bird G A. *Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flow* [M]. Oxford: Clarendon Press, 1994: 109-145.
- [17] Moss J N. Direct simulation Monte Carlo simulations of Ballute aerothermodynamics under hypersonic rarefied conditions [J]. *Journal of Spacecraft and Rockets*, 2007, 44(2): 282-298.
- [18] 陈懋章. 粘性流体动力学基础 [M]. 北京: 高等教育出版社, 2002: 102-108.
- [19] 陶文铨. 传热学 [M]. 西安: 国防科工委五所院校 (西北工业大学、北京理工大学、北京航空航天大学、哈尔滨工业大学、哈尔滨工程大学) 联合出版社, 2006: 393-400.
- [20] 王保国, 刘淑艳, 王新泉, 等. 传热学 [M]. 北京: 机械工业出版社, 2009: 212-223.
- [21] 王保国, 刘淑艳, 刘艳明, 等. 空气动力学基础 [M]. 北京: 国防工业出版社, 2009: 212-227.