

Hard-sphere/pseudo-particle modeling (HS-PPM) for hypersonic rarefied gas flow

Qi ZHAO^{1,2}, Mingcan ZHAO^{1,2}, Linbo MA^{1,3}, Wei GE^{1,2*}

1. State Key Laboratory of Multi-phase Complex Systems, Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China

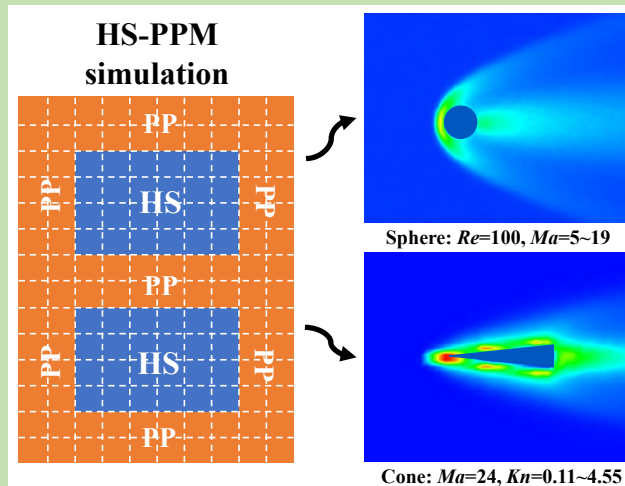
2. School of Chemical Engineering, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

3. School of Chemical Sciences, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

Abstract: Hard-sphere/pseudo-particle modeling (HS-PPM) has been demonstrated as an effective discrete simulation method for supersonic gas flow, but the simulated flow was limited to relatively low Mach number ($Ma \approx 3 \sim 5$) yet. Recently, hypersonic rarefied gas flow has attracted great attention in aerospace and material engineering under extreme conditions. In this work, flow past some objects with simple geometry was simulated in HS-PPM. The geometric method was used to describe the wall and specular, and diffuse reflection was coupled to represent the slip thermal boundary condition. The tangential accommodation coefficient was introduced to

adjust the proportion of slip and thermal accommodation. The simulated domain size was analyzed to determine the optimal values and the influence of tangential accommodation coefficient on the drag coefficient was considered. The hard sphere (HS) modeling, HS-PPM and direct simulation Monte Carlo (DSMC) method were used to simulate the flow past a sphere with a Mach number of 5 and a Knudsen number (Kn) of 0.8, which proved that the HS-PPM results were closer to those of the HS model. On this basis, 14 cases of the flow past a three-dimensional sphere with a Reynolds number (Re) of 100 were simulated, and Mach numbers change from 5 to 19. The upper and lower limits of the simulated drag coefficient were obtained by using the fully diffuse boundaries and the slip boundaries respectively, and were in good agreement with the corresponding results of the HS model. In addition, the simulated drag coefficient of cones with axial flow at a Mach number of 24 and Knudsen numbers from 0.11 to 4.55 was also obtained. The attack angle was zero and the results were consistent with the results of DSMC. This study demonstrated that HS-PPM was effective for hypersonic rarefied gas flow. Furthermore, the error caused by the invariable collisional cross of hard spheres in simulating hypersonic flow was found, indicating the direction of future improvement.

Key words: hard-sphere/pseudo-particle modelling (HS-PPM); hypersonic flow; rarefied gas



收稿: 2019-01-23, 修回: 2019-04-15, 网络发表: 2019-04-17, Received: 2019-01-23, Revised: 2019-04-15, Published online: 2019-04-17

基金项目: 国防基础科研科学挑战专题项目(编号: TZ2016001); 国家自然科学基金资助项目(编号: 91834303); 中国科学院前沿科学重点研究项目(编号: QYZDJ-SSW-JSC029); 中国科学院信息化专项课题(编号: XXH13506-301)

作者简介: 赵祺(1993-), 女, 河南省焦作市人, 硕士研究生, 化学工程专业, Email: zhaoqi_cup@163.com; 葛蔚, 通讯联系人, E-mail: wge@ipe.ac.cn.

引用格式: 赵祺, 赵明璨, 马琳博, 等. 硬球-拟颗粒模拟高超声速稀薄气体流动. 过程工程学报, 2019, 19(6): 1093-1100.

Zhao Q, Zhao M C, Ma L B, et al. Hard-sphere/pseudo-particle modeling (HS-PPM) for hypersonic rarefied gas flow (in Chinese).

Chin. J. Process Eng., 2019, 19(6): 1093-1100, DOI: 10.12034/j.issn.1009-606X.219120.

硬球-拟颗粒模拟高超声速稀薄气体流动

赵 祺^{1,2}, 赵明璨^{1,2}, 马琳博^{1,3}, 葛 蔚^{1,2*}



1. 中国科学院过程工程研究所多相复杂系统国家重点实验室, 北京 100190

2. 中国科学院大学化学工程学院, 北京 100049

3. 中国科学院大学化学科学学院, 北京 100049

摘 要: 发展了适应高超声速稀薄流动的硬球-拟颗粒模拟(HS-PPM), 并分别采用硬球分子动力学模拟(HS)、HS-PPM 和直接模拟蒙特卡洛(DSMC)对马赫数为 5、努森数为 0.8 的圆球绕流进行模拟, 证明了 HS-PPM 可以得到更接近 HS 的模拟结果。对雷诺数 100、马赫数 5~19 的三维圆球绕流, 采用 HS-PPM 模拟得到了填充率 0.01~0.08、完全热边界和完全滑移边界条件下的曳力系数, 与 HS 模拟结果的一致性较好; 模拟了马赫数 24、努森数 0.11~4.55 的零攻角三维尖锥绕流, 结果与文献中 DSMC 的模拟结果相符。研究验证了 HS-PPM 处理高超声速稀薄气体流动的可行性。

关键词: 硬球-拟颗粒模拟; 高超声速流动; 稀薄气体

中图分类号: O354.4

文献标识码: A

文章编号: 1009-606X(2019)06-1093-08

1 前 言

高超声速流动不仅是航空航天等领域的研究热点, 随着相关材料和应用技术的发展, 也成为了过程工程的新课题。高超声速流动具有薄激波层、涡干扰、粘性干扰、高温效应、高空稀薄效应等独特的物理特征, 研究手段主要有地面试验和数值模拟。风洞试验成本较高, 且无法全面了解流场细节, 随着计算机技术的发展, 数值模拟逐渐成为研究该问题的主要手段。高超声速流动的数值模拟方法主要包括传统计算流体力学(Computational Fluid Dynamics, CFD)方法和分子模拟方法。目前主流的高超声速 CFD 软件包括 GASP, LAURA 和 VULCAN 等, 其中多数采用 5, 7 或 11 组分空气化学反应模型, 考虑平动、转动、振动和电子能量激发模态。CFD 方法研究气速不太高的连续流和近连续流时表现较好, 但当气体稀薄至连续介质假设不再成立时失效。为此 Bird^[1,2]提出了直接模拟蒙特卡洛(Direct Simulation of Monte Carlo, DSMC)方法, 尝试从微观角度模拟分子碰撞、能量交换等过程。经过数十年的发展, DSMC 方法已成功应用于稀薄气体领域, 且完成了过渡流域高超声速流动的一系列验证工作^[3-6], 是目前该领域接受度较高的一种模拟手段。DSMC 方法采用随机抽样技术选取一定量的模拟分子代替大量的真实气体分子, 其缺陷在于模拟精度依赖于碰撞对的选择。离散模拟中另一具有代表性的方法是分子动力学(Molecular Dynamics, MD)方法, 对粒子运动和碰撞的模拟均精确, 在微观模拟中占据重要地位, 但其效率低, 不适用于宏观模拟。

针对以上方法的缺陷, Ge 等^[7]提出了拟颗粒模拟(Pseudo Particle Modeling, PPM)方法, 将流体等效为大

量的离散拟颗粒, 其对碰撞的处理与硬球 MD 相同, 但驱动方式却借鉴软球 MD 的时间驱动^[8,9], 具有强可扩展性和能量守恒性。沈国飞^[9]在此基础上提出了硬球-拟颗粒模拟(Hard-Sphere/Pseudo-Particle Modeling, HS-PPM), 以硬球事件驱动算法(HS)^[10]模拟流场中相互隔离的子区, 而以 PPM 模拟它们之间的边界区域, 实现了二者的耦合。该方法在保证碰撞精确性的同时解决了传统硬球模型不易扩展的问题, 为大规模并行计算提供了可能。Zhang 等^[11,12]采用 HS-PPM 模拟研究了管流和多孔介质流及其中的扩散过程, 展示了该方法在化工领域的应用价值, 其对超声速绕飞行器流动的模拟表明该方法在航空航天领域具有应用潜力。

高超声速流动的实际体系中涉及的气体反应、能量传递、气体-表面作用等影响因素在风洞试验中难以精确测定或表征, 尽管 CFD 和 DSMC 等数值模拟中已经采用了一系列相关模型以求复现这些因素对流场的影响, 但这些模型在不同条件下的适用性仍待考察。因此以实际体系的实验结果直接对比和评价不同的模拟方法往往难以区分模拟方法与考虑这些复杂因素的模型所引入的误差, 甚至可能误导对各种方法的后续改进。考虑到硬球模型是一种简单而又有广泛代表性的气体分子模型, 并能通过硬球事件驱算法 HS 严格求解, 本工作以理想的硬球气体绕流具有理想表面的简单三维几何体为物理对象, 通过硬球事件驱动算法获得严格数值结果, 并与相应的 DSMC 和 HS-PPM 模拟结果对比, 验证 HS-PPM 应用于过渡流域高超声速流动的可行性。本研究能有效避免其它复杂因素误导模型评价, 为 HS-PPM 的应用提供参考。

2 模拟方法

2.1 基本模型

硬球模型将粒子视为具有固定直径的刚性球, 只在与其它粒子接触瞬间发生完全弹性碰撞, 此外不受任何作用力。HS 模拟的本质是在给定时间步长内依次处理按时间排序的事件链表, 计算效率高但不易并行。PPM 在不同进程的 HS 子区之间架起桥梁, 利用其时间驱动算法使程序实现并行。硬球模型的物性可由 Enskog 理论计算得到^[13], 拟颗粒模型的物性可根据其等效直径求得。硬球和拟颗粒的直径转换关系^[14]如下:

$$d_e = d_{pp} - 2a(\eta_n)v_t\Delta t \quad (1)$$

$$a(\eta_n) = 0.23791 + 0.0428\eta_n - 0.02537\eta_n^2 + 0.60191\eta_n^3 \quad (2)$$

式中, d_e 为硬球直径, d_{pp} 为拟颗粒直径, η_n 为硬球填充率, v_t 为颗粒热速度, Δt 为模拟时间步长。

HS-PPM 算法的主要流程: (1) 导入初始颗粒位置和速度, 完成颗粒和网格的初始化并建立事件链表; (2) 处理 HS 区的有效事件; (3) 处理 PPM 区的颗粒运动和碰撞, 完成边界信息的交换; (4) 推进到下一时间步继续循环。HS-PPM 耦合方法的详细介绍见文献[11]。

2.2 壁面描述

几何解析和冻结粒子堆积是描述壁面的常用方法。前者需联立求解几何体的解析方程与粒子的运动方程, 通过粒子与几何体的相对位置判断并处理二者之间的碰撞。该方法适用于较简单的几何体模型, 优点在于其壁面精度不随模型相对尺寸变化而变化。冻结粒子堆积即利用大量静止颗粒构成壁面, 其特点在于灵活便捷, 尤其在描述复杂几何体时优势很大, 但缺点在于计算效率和壁面精度分别与静颗粒半径呈正、负相关, 需对其进行平衡和取舍。本工作旨在验证 HS-PPM 对高超声速稀薄流动的适用性, 选择的几何模型均较简单。综合考虑壁面精度和计算效率, 壁面描述选择几何解析法。

2.3 边界条件

根据实验条件, 模型上游远场区不存在流速梯度, 故入口边界采用带温控的周期性边界, 即将出口处粒子返回上游入口处, 并按照无穷来流性质重新生成其位置和速度。在时间步长 Δt 内, 若流场中的粒子向上游方向移动的距离大于其与边界的初始距离, 则将其镜像返回流场内。

垂直于流动方向的边界采用镜面反射的光滑边界, 边界条件设置应满足边界距离模型足够远, 以消除边界对模型附近粒子速度分布造成的干扰。

2.4 气体-表面作用模型

高超声速气体与壁面作用时通常采用镜面反射模型、漫反射模型或两者的结合^[15-18]。镜面反射模型中, 分子速度的法向分量沿法线反转, 切向分量不变。漫反射模型的基本假设是分子的反射速度完全独立于其入射速度的方向和大小, 且在所有方向上等概率。该类分子通常具有完全热适应能力, 其反射速度根据由壁温决定的偏麦克斯韦分布随机生成。对于过渡流和自由分子流, 固体表面气体分子的状态对气体-表面作用模型的选择十分敏感。此外, 稀薄气体性质大多体现在距壁面几个分子平均自由程的范围内。因此, 对气体分子与固体表面相互作用的合理假设至关重要。一般采用漫反射和镜面反射的不同结合, 引入切向动量适应系数 α 。即生成反射速度时, α 部分采用遵循偏麦克斯韦分布的漫反射, $(1-\alpha)$ 部分采用镜面反射, 如式(3)所示:

$$\mathbf{v}_{\text{reflect}} = \alpha \mathbf{v}_{\text{diffuse}} + (1-\alpha) \mathbf{v}_{\text{specular}} \quad (3)$$

式中, $\mathbf{v}_{\text{reflect}}$ 为粒子反射后速度, $\mathbf{v}_{\text{diffuse}}$ 为漫反射速度, $\mathbf{v}_{\text{specular}}$ 为镜面反射速度。

模拟均采用耦合镜面反射和漫反射的滑移热边界条件, 而 α 为固壁面条件可变的参数。

2.5 数据后处理

曳力系数 C_D 为表征物体在流体中所受阻力的无量纲数, 计算公式见式(4)。在模拟数据后处理中, 壁面的受力由统计粒子撞击球面的冲量之和除以统计时间得到, 无穷来流密度和流速均取模拟算例的无量纲值。

$$C_D = \frac{F}{\frac{1}{2} \rho_\infty U_\infty^2 \frac{\pi D^2}{4}} \quad (4)$$

其中, F 为模型壁面受到的合力, ρ_∞ 为无穷来流密度, U_∞ 为无穷来流流速, D 为模型的特征尺度。

为了考察流场温度分布, 引入无量纲温度 T^* :

$$T_j^* = \frac{\sum_i m_i v_i^2}{\sum_i m_i} - \left(\frac{\sum_i m_i v_i}{\sum_i m_i} \right)^2 \quad (5)$$

其中, j 为网格编号, i 为网格中的粒子编号, m 为粒子质量, v 为粒子速度。

2.6 计算平台配置

算例均在 Mole-8.5E^[19] 超级计算系统上完成, 软硬件设置见表 1。

表 1 计算平台配置

Table1 Configuration of the computational platform	
Platform	Mole-8.5E
CPU	Intel Xeon E5-2680 v2 (2.80 GHz, 10 cores)
OS	CentOS release 6.3 (Final) Kernel:2.6.32-279.el6
Compiler	GCC:4.4.6, Intel compiler:14.0.0

3 算例验证

高超声速飞行器通常以细长体和锐利前缘为特征,以获得高升力、低阻力等良好的气动性能。马赫数(Ma)较高时,飞行器前缘应采用类圆球的钝体,以便降低传热速率至可接受的水平。高超声速飞行器的几何外形十分复杂,但模拟时可看作若干个简单几何体的组合。球体和锥体均为常见的几何因素。选择圆球和尖锥这两个简单几何体进行高超声速流动的模拟验证。

3.1 DSMC, HS-PPM 和 HS 的圆球绕流模拟的对比

3.1.1 模拟设置

为了验证 HS-PPM 在高超声速流动中的适用性,对

比相同条件下的 HS-PPM 和 DSMC 的圆球绕流模拟结果,选择 HS 模拟结果作为对比标准,考察 HS-PPM 应用于高超声速流动的适用性。模拟马赫数 $Ma=5$, 克努森数 $Kn=0.8$ 条件下的圆球绕流,无穷来流气体选择氩气,以排除能量转换和反应对模拟结果的影响,无穷来流的速度 U_∞ 、数密度 n_∞ 、质量密度 ρ_∞ 、温度 T_∞ 和平均分子自由程 λ_∞ 等物性见表 2。为了更好地进行比较,还需指定 3 种方法的若干模拟设置,包括模拟区域尺寸、球径、模拟粒子数、出入口及壁面条件、分子模型和气体表面作用模型等(表 3)。DSMC 算例均采用 SPARTA^[20] 完成计算,用其内嵌工具生成球面网格和流场网格。

表 2 无穷来流性质
Table 2 Properties of freestream

Mach number, Ma	Knudsen number, Kn	Velocity of freestream, $U_\infty/(m/s)$	Number density of freestream, n_∞/m^{-3}	Mass density of freestream, $\rho_\infty/(kg/m^3)$	Temperature of freestream, T_∞/K	Mean free path of freestream, λ_∞/mm
5	0.8	1610	1.35×10^{20}	8.94×10^{-6}	300	9.6

表 3 HS, HS-PPM 和 DSMC 的指定模拟设置
Table 3 Specified simulation settings for HS, HS-PPM and DSMC

Domain/m	Sphere diameter/m	Number of simulated particles	Inlet/outlet condition	Wall condition	Molecular model	Gas-surface interaction model
0.06×0.08×0.08	0.012	4.84×10^6	Free stream	Specular reflection	Hard sphere	Diffuse reflection

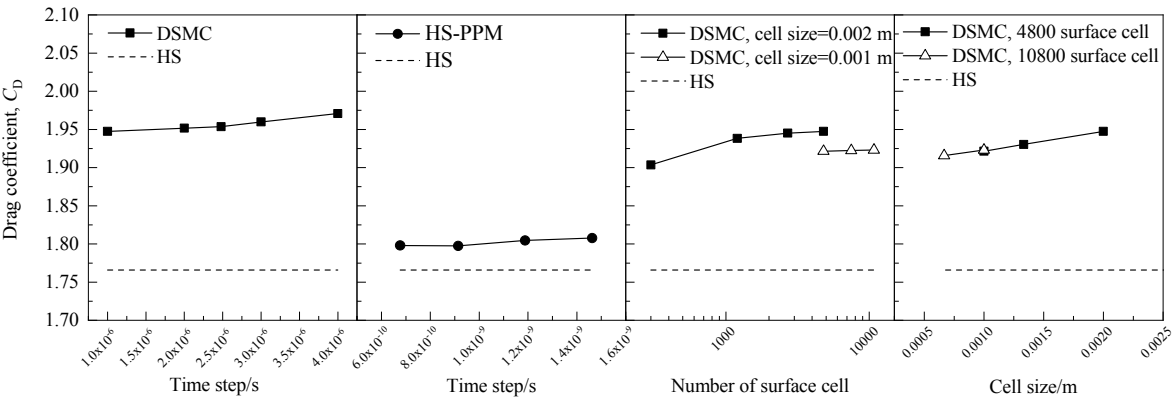


图 1 DSMC 和 HS-PPM 的模拟参数对曳力系数的影响

Fig.1 Influence of simulation parameters of DSMC and HS-PPM on drag coefficient

3.1.2 结果分析

DSMC 中可能影响结果的参数包括流场网格尺寸、球面网格数及时间步长等,HS-PPM 中可能影响结果的参数仅有时间步长。对于 HS,一旦确定了模拟区域和模拟粒子数,其结果不再受其它因素影响。为排除 DSMC 和 HS-PPM 中参数设置对结果的影响,进行若干组对比模拟,结果如图 1 所示。图 1 中所有曳力系数均为时均统计结果,统计误差不超过±0.001,图中虚线为确定的 HS 结果。可以看出,DSMC 模拟得到的曳力系数随时间步长增大而增大,随流场网格尺寸增大而增大,随球面网格数增加而增加。时间步长过大可能造成

球面碰撞的漏检,导致结果不准确,但时间步长过小则会浪费计算资源,实际设置应以每步流动距离大于 1 个网格尺寸而小于 2 个网格尺寸为界。球面网格数小于 1000 时,较低的球面精度可能是造成结果偏低的原因。流场网格尺寸过大可能导致激波附近描述失真,过大会导致每个网格中粒子数太少而影响采样,本工作中网格尺寸为 10~13 mm,符合经验。HS-PPM 得到的曳力系数随时间步长增加而略微增加。在 HS-PPM 的参数设置中,为降低拟颗粒重叠对结果的影响,要求时间步长与速度的乘积小于硬球直径的 1/10,即粒子每步的移动距离在可控范围内,时间步长的取值不能太大。对于曳力

系数, HS 的模拟结果为 1.766 ± 0.001 , DSMC 模拟得到的范围为 $1.904 \sim 1.971$, HS-PPM 模拟的范围为 $1.797 \sim 1.808$, HS-PPM 得到的结果比 DSMC 更接近 HS, 表明其对固定体系粒子运动和碰撞的模拟更准确。

选取流场网格 0.001 m 、球面网格数 4800、时间步长 $1.0 \times 10^{-6} \text{ s}$ 的算例作为 DSMC 的代表算例, 选择时间步长为 $6.8 \times 10^{-10} \text{ s}$ 的算例作为 HS-PPM 的代表算例, 将二者与 HS 的时均流场模拟结果进行对比。选择圆球沿流动方向的对称轴作为流场的中心轴线, 流场沿中心轴线的密度、温度分布分别如图 2 和 3 所示。可以看出, 三者无穷来流的性质一致, 且均在球前出现了明显的密度和温度突跃, 但头部激波附近的性质出现差别, HS-PPM 模拟的头部激波密度略高于 DSMC, 头部激波温度略低于 DSMC, 但均比 DSMC 更接近 HS 的模拟结果。球后温度计算结果出现明显差异, DSMC 得到的球后流场存在温度梯度, 在距球面约 0.5 个平均自由程距离才发展至与 HS 和 HS-PPM 模拟相当的温度。从流场分布可以明显看出 HS-PPM 与 HS 模拟结果一致。

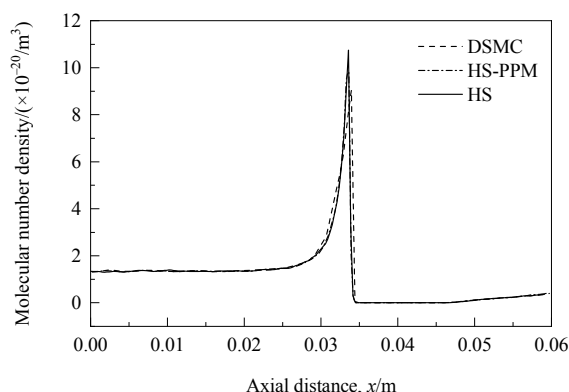


图2 HS, HS-PPM 和 DSMC 模拟的轴线方向的分子数密度
Fig.2 Molecular number density along the x-axis of the sphere simulated by HS, HS-PPM and DSMC methods

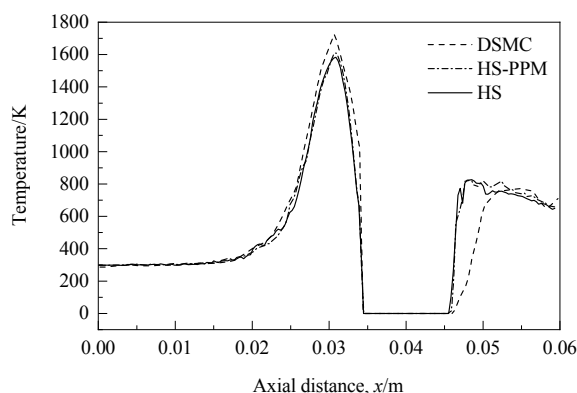


图3 HS, HS-PPM 和 DSMC 模拟的轴线方向的温度分布
Fig.3 Temperature distribution along the x-axis of the sphere by HS, HS-PPM and DSMC methods

上述所有算例均依托 Mole-8.5E 完成计算。HS 算例采用单个 CPU 核心完成计算, 收敛时间约为 10 h; HS-PPM 代表算例采用 8 个 CPU 核心完成计算, 收敛时间约为 12 h; DSMC 代表算例采用 4 个 CPU 核心完成计算, 收敛时间约为 10 min。由于 DSMC 模拟的时间步长很大, 流场稳定非常快, 收敛速度明显优于 HS 和 HS-PPM。但由于算例中的流动是定常的, 收敛速度并不影响结果的精度, HS-PPM 由于计算结果准确度更高而具有一定的研究价值和应用潜力。

3.2 高超声速圆球绕流

3.2.1 模拟参数设置

采用 HS-PPM 模拟若干组指定高超声速条件下的圆球绕流, 计算其曳力系数 C_D 并对比相同条件下的 HS 模拟结果。算例的准数范围为 $Re_\infty=100$, $Ma_\infty=5 \sim 19$, 对应过渡流域。壁面温度与无穷来流一致。

(1) 模拟区域设置

模拟区域的设置应保证激波不切割垂直流动方向的壁面, 以降低壁面效应对结果的影响, 并保证激波在流动方向上充分发展。参考文献^[10]推荐的比例, 模拟区域长宽比最终设置为 $L/W=3:4$ 。

$Ma=19$ 时曳力系数随模拟区域设置的变化如图 4 所示, 其中 $N=L/D$, D 为圆球直径。由图可知, 模拟区域较小时, C_D 受边界影响较大。当 N 大于 9 时, C_D 趋于稳定, 此时可视为消除了边界影响, 模拟等效为将圆球置于无限大流场中。在以上模拟区域设定下, 本组算例的计算网格数和模拟粒子数在 10^6 量级。

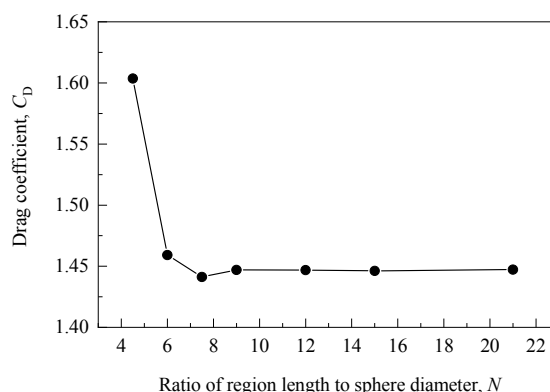


图4 模拟区域对曳力系数的影响
Fig.4 Effect of simulated domain size on drag coefficient

(2) 切向动量适应系数 α

$Ma=19$ 时 C_D 随 α 的变化趋势如图 5。由图可知, C_D 与 α 正相关。实验中 α 与表面材料性质、表面清洁度等因素相关, 若实验中未测定, 模拟仅能确定对应流动条件下的 C_D 范围, 即由完全热边界 ($\alpha=1$) 和完全滑移边界

($\alpha=0$)确定的曳力系数区间。

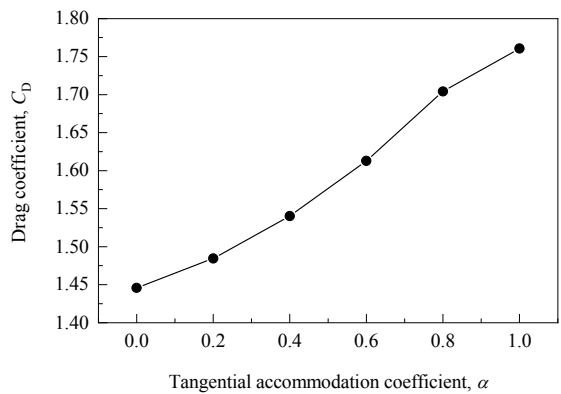


图 5 切向动量适应系数对曳力系数的影响
Fig.5 Effect of tangential accommodation coefficient on the drag coefficient

最终选择的模拟区域长度 $L=15D$ ，宽度 $W=20D$ ， α 分别取 0 和 1，在不同 Ma 下模拟 14 组算例，模拟中取硬球直径、粒子质量和热速度为参考值，参数进行归一

化处理。代表性算例的其它参数见表 4，其中 η 为模拟区域硬球填充率， D 为球径， u 为无穷来流速度， d_{pp} 为拟颗粒的直径。为保证结果的可信度，统计样本应取得足够大。所有算例的统计误差均不超过 1%。

3.2.2 结果和分析

图 6 为采用 HS-PPM 得到的算例 R051 的密度场和温度场。从图中可以看出，高速气体流过圆球时，流向向其自身方向发生偏转，形成明显激波面，且激波厚度较小，符合高超声速流动薄激波层的特征。图 7 为沿圆球 X 方向轴线的数密度和无量纲温度分布，可以看出，通过激波面时密度、温度等性质发生了间断性突跃。此外，由于激波面在圆球外侧形成一道高密度屏障，球后的低密度现象十分明显，即使在距离球体较远处也只有自由来流密度的一半。由于激波温度较高，球后也会存在高温区域，但温度下降速度较快，在图 3 所示的模拟区域内即可下降到稳定状态，温度约为来流的 2 倍。

表 4 圆球绕流算例参数
Table 4 Parameters of the sphere cases

Case	Mach number, Ma	Knudsen number, Kn	Solid volume fraction, η	Sphere diameter, D	Velocity, u	Diameter of pseudo particle, d_{pp}
R051	5.22	0.0774	0.05	26.79	0.434	1.006
R071	7.26	0.108	0.05	19.24	0.605	1.004
R091	8.90	0.132	0.05	15.70	0.741	1.003
R112	11.0	0.162	0.04	16.39	0.876	1.003
R133	13.1	0.194	0.03	18.72	1.01	1.002
R154	15.0	0.223	0.02	25.17	1.11	1.002
R185	17.83	0.264	0.01	43.46	1.27	1.001

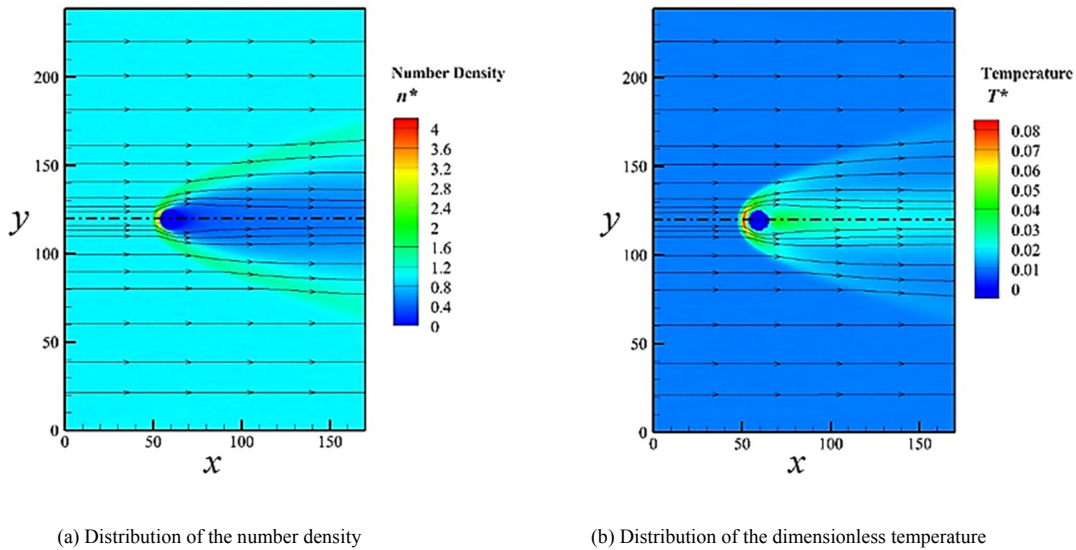


图 6 圆球绕流的数密度和无量纲温度分布
Fig.6 Distribution of the number density and dimensionless temperature in the flow past a sphere

相同条件下几组算例的 HS 模拟结果见图 8。可见其曳力系数与 HS-PPM 模拟的结果一致，相对误差不超过 HS 模拟值的 1%。由于 HS 难以高效并行，低 Ma 和

低 η 的算例难以完成，仅用 HS 校验了若干组规模较小的算例。由图中 HS-PPM 的模拟结果可知，相同 η 下 C_D 与 Ma 近似为线性关系， $R^2 \geq 0.99$ 。随 η 减小， C_D 随 Ma

变化减缓，且趋于定值。 η 减小使模拟的粗粒化程度降低，拟颗粒性质趋于真实气体分子，故 C_D 也趋于稳定。尽管尚未引入复杂的壁面和反应模型及能量方程，但这些算例也能初步说明 HS-PPM 对高超声速实际流动模拟的应用潜力。

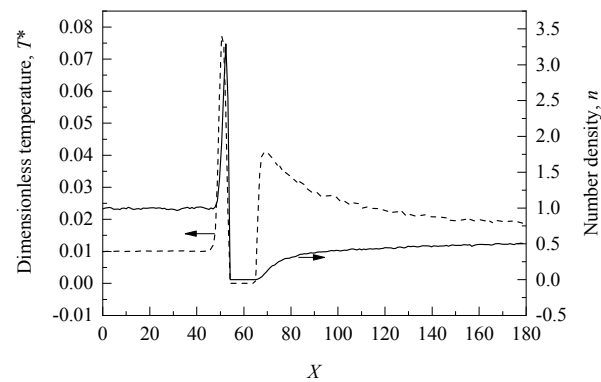


图 7 X 对称轴线上的数密度和无量纲温度
Fig.7 Number density and dimensionless temperature along the X -axis of the sphere

3.3 高超声速尖锥绕流

3.3.1 模拟参数设置

Takata 等^[21]采用 DSMC 方法模拟了不同半锥角的尖锥绕流，得到了不同 Kn 下的曳力系数。保证 HS-PPM

中无穷来流的相关准数与文献^[21]相同， $Ma_\infty=24$ ， $Kn_\infty=0.11\sim 4.55$ 。模型半锥角分别为 6° 和 10° ，攻角为 0° 。进行若干组与 3.2.1 中相似的不同区域模拟测试后，最终选择的模拟区域为 $15D_z\times 20D_z\times 20D_z$ ，其中 D_z 为圆锥基底直径。在该模拟区域设置下，本组算例的计算网格数和模拟粒子数均处于 10^6 量级水平。由于 DSMC 模拟中采用完全漫反射表面作用模型，尖锥绕流算例的 α 均设为 1。代表算例的详细参数设置见表 5，结果的统计误差不得超过 2%。

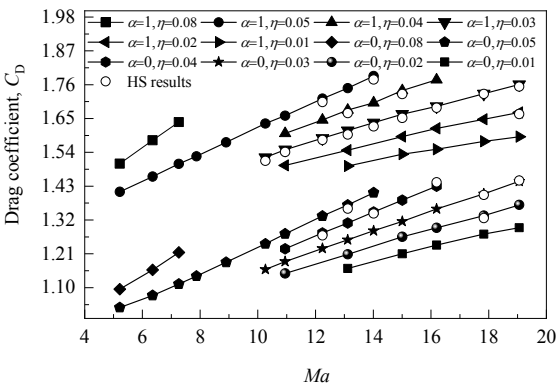


图 8 不同马赫数和硬球填充率下 HS 和 HS-PPM 模拟得到的圆球绕流曳力系数
Fig.8 Drag coefficient of the sphere under different Ma and η simulated by HS and HS-PPM methods

表 5 尖锥绕流算例参数
Table 5 Parameters of the cone cases

Case	Knudsen number, Kn	Reynolds number, Re	Half cone angle, θ	Ratio of wall temperature to freestream temperature, T_w/T_∞	Solid volume fraction, η	Diameter of pseudo particle, d_{pp}	Base diameter of the cone, D	Velocity, u
M20	0.187	190	6°	0.01	0.07	1.001	7.494	0.432
M21	0.187	190	6°	0.13	0.07	1.001	7.494	0.732
M40	0.463	128	6°	0.01	0.03	1.001	7.855	0.369
M41	0.463	77	6°	0.13	0.03	1.001	7.855	0.369
M60	1.81	32	6°	0.01	0.0105	1.001	6.044	0.342
M61	1.81	32	6°	0.01	0.0105	1.001	6.044	0.342
M70	2.71	13	10°	0.13	0.006	1.001	7.138	0.336

3.3.2 结果和分析

采用风洞实验、DSMC 和 HS-PPM 模拟得到的不同 Kn 下的归一化曳力系数如图 9 所示。由文献^[21]结论，当定义 $Kn=\lambda_\infty/D$ 时可以消除不同半锥角引起的误差。曳力系数的归一化基准为自由分子极限值 C_{FM} 。实验数据来源于采用自由飞行技术的风洞实验^[22,23]。文献^[21]分别采用硬球和 Maxwell 分子模型进行了 DSMC 模拟，最大统计误差为 4%。由图 9 可见，采用 HS-PPM 模拟获得了与硬球模型下的 DSMC 模拟较为接近的结果，误差不得超过 7%。而当 $Kn>0.2$ 时，Maxwell 分子模型下的 DSMC 模拟能获得比 HS-PPM 模拟更接近实验值的结果。在该实验条件下粘性截面随温度变化剧烈，此时采用软球分子模型能更好地模拟该变化趋势。因此，可在

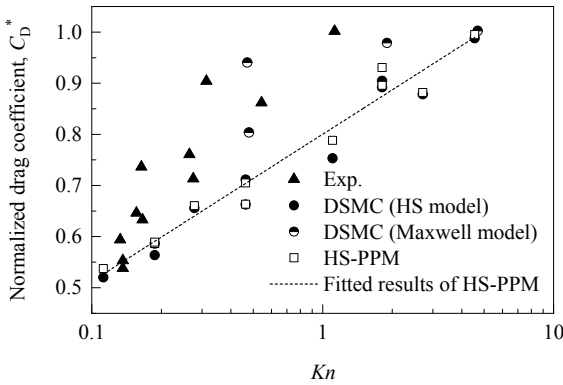


图 9 不同克努森数下各模型的尖锥绕流模拟结果
Fig.9 Simulation results of cones simulated by different simulation methods with different Kn

HS-PPM 引入可变碰撞截面以复现更复杂的软球分子行为, 扩展其在高超声速流动模拟中的应用。

4 结 论

采用 HS, HS-PPM 和 DSMC 方法分别对 $Ma=5$, $Kn=0.8$ 下的圆球绕流进行模拟, 保证模拟区域和分子数完全相同, 得到如下结论:

(1) HS-PPM 可比 DSMC 得到更接近 HS 的曳力系数和流场分布的模拟结果。

(2) $Re=100$, $Ma=5\sim 19$ 的高超声速圆球绕流和 $Ma=24$, $Kn=0.11\sim 4.55$ 的高超声速圆锥绕流的 HS-PPM 模拟结果与 HS 或 DSMC 的模拟结果一致, 验证了该方法研究高超声速流动的可行性。

(3) 硬球模型模拟高超声速流动时截面不可变将产生误差。

参考文献

- [1] Bird G A. The DSMC method [M]. Charleston: CreateSpace Independent Publishing Platform, 2013: 13.
- [2] Bird G A. Approach to translational equilibrium in a rigid sphere gas [J]. The Physics of Fluids, 1963, 6(10): 1518–1519.
- [3] Antonov S, Ivanov M, Kashkovskii A, et al. Influence of atmospheric rarefaction on aerodynamic characteristics of flying vehicles [M]//Rarefied Gas Dynamics. Vancouver: the American Institute of Aeronautics and Astronautics, Inc., 1990: 522–530.
- [4] Et Defense A E, Les Mureaux F. Computation of transitional flows around three-dimensional re-entry bodies [M]//Rarefied Gas Dynamics: Space Science and Engineering, 1992: 161.
- [5] Moss J N, Price J M. Review of blunt body wake flows at hypersonic low density conditions [C]//31st AIAA Thermophysics Conference. 1996: 96–1803.
- [6] Ivanov M, Markelov G, Gimelshein S, et al. High-altitude capsule aerodynamics with real gas effects [J]. Journal of Spacecraft and Rockets, 1998, 35(1): 16–22.
- [7] Ge W, Li J H. Macro-scale phenomena reproduced in microscopic systems—pseudo-particle modeling of fluidization [J]. Chemical Engineering Science, 2003, 58(8): 1565–1585.
- [8] Ge W, Ma J, Zhang J, et al. Particle methods for multiscale simulation of complex flows [J]. Chinese Science Bulletin, 2005, 50(11): 1057–1069.
- [9] 沈国飞. 纳微流动的分子动力学模拟 [D]. 北京: 中国科学院研究生院(过程工程研究所), 2010: 73–98.
- Shen G F. Molecular dynamics simulation for micro-/nano-flows [D]. Beijing: Graduate School of University of Chinese Academy of Sciences (Institute of Process Engineering), 2010: 73–98.
- [10] Marin M, Risso D, Cordero P. Efficient algorithms for many-body hard particle molecular dynamics [J]. Journal of Computational Physics, 1993, 109(2): 306–317.
- [11] Zhang C L, Shen G F, Li C, et al. Hard-sphere/pseudo-particle modelling (HS-PPM) for efficient and scalable molecular simulation of dilute gaseous flow and transport [J]. Molecular Simulation, 2016, 42(14): 1171–1182.
- [12] 张成龙. 硬球-拟颗粒-软球耦合模拟及其化工应用 [D]. 北京: 中国科学院大学, 2016: 23–65.
- Zhang C L. HS-PP-SS coupled simulation and its applications in chemical engineering [D]. Beijing: University of Chinese Academy of Sciences, 2016: 23–65.
- [13] Chapman S, Cowling T G. The mathematical theory of non-uniform gases [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1970: 131–176.
- [14] Chen F G, Ge W. Statistical properties of pseudo-particle systems [J]. Particuology, 2010, 8(4): 332–342.
- [15] Bird G A, Broadwell J E, Vogenitz F W. Leading edge flow by the Monte Carlo direct simulation technique [J]. AIAA Journal, 1970, 8(3): 504–510.
- [16] Santos W. Aerothermodynamic characteristics of flat-nose power-law bodies in low-density hypersonic flow [C]//22nd Applied Aerodynamics Conference and Exhibit. 2004: 5381.
- [17] Santos W, Lewis M J. Calculation of shock wave structure over power law bodies in hypersonic flow [J]. Journal of Spacecraft and Rockets, 2005, 42(2): 213–222.
- [18] Santos W. Some extensions to the aerothermodynamic performance study of flat-nose power-law bodies [C]//43rd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit. 2005: 969.
- [19] Ge W, Lu L, Liu S, et al. Multiscale discrete supercomputing—a game changer for process simulation? [J]. Chemical Engineering and Technology, 2015, 38(4): 575–584.
- [20] Gallis M A, Torczynski J R, Plimpton S J, et al. Direct simulation Monte Carlo: the quest for speed [C]//AIP Conference Proceedings. 2014: 27–36.
- [21] Takata G Y, Vogenitz F W. Rarefied hypersonic flow about cones and flat plates by Monte Carlo simulation [J]. AIAA Journal, 1971, 9(1): 94–100.
- [22] Geiger R. Semi-Annual report [R]. DAH C04-67-C, 1968: 8.
- [23] Horstman C C, Kusoy M I. Cone drag in rarefied hypersonic flow [J]. AIAA Journal, 1970, 8(2): 315–320.