

# 气体分子碰撞传能及反应的 DSMC 仿真\*

陈伟芳 石于中 吴其芬

(国防科技大学航天技术系 长沙 410073)

**摘要** 研究了气体分子的非弹性碰撞机理,给出了分子内自由度激发、反应的几率选择模式及分子内自由度能量交换模式。以钝体驻点线流场为仿真实例,比较了 DSMC 仿真结果与粘性激波层方程计算结果。二者在较低高度时的一致表明 DSMC 仿真中采用的模式是合理的。

**关键词** 分子碰撞传能, 化学反应, 热化学非平衡效应, DSMC 仿真, 高超声速稀薄气体流动

**分类号** O643.18, V434.11

## DSMC Simulation of the Molecular Energy Transfer and Reaction by Collision

Chen Weifang Shi Yuzhong Wu Qifen

(Department of Aerospace Technology, NUDT, Changsha, 410073)

**Abstract** This paper deals with the mechanism of molecular in elastic collision, presents the probability selective models of molecular internal excitation and molecular reactions, and introduces the energy transfer models among translational energy, rotational energy and vibrational energy. The results of the stagnation streamline flow of a hypersonic blunt body obtained by DSMC method conform with the results obtained by viscous shock layer (VSL) equation method at the lower altitude, which shows that models used in the DSMC simulation are appropriate.

**Key words** molecular energy transfer, chemical reaction, thermochemical nonequilibrium effects, DSMC simulation, hypersonic rarefied gas flow

由 Hawiland、Bird<sup>[1]</sup>等人发展的蒙特卡罗直接仿真(DSMC)方法是迄今为止研究热化学非平衡稀薄气体流动最为有效的数值方法。该法基于分子动力论的原理,从本质上揭示了气体分子运动的原理。本文以高超声速钝体绕流驻点线流场为仿真实例,研究了

\* 1995 年 9 月 27 日收稿

稀薄流热化学非平衡条件下分子内自由度激发、反应的几率选择模式及分子内自由度能量交换模式。

## 1 分子碰撞、内自由度激发、反应的几率选择模式

(1) 分子碰撞几率选择模式

$$P_c = \frac{\sigma g}{\sigma g|_{\max}} > R \quad (1)$$

式中  $P_c$  为分子碰撞几率,  $\sigma g$  为分子碰撞截面  $\sigma$  与分子相对速率  $g$  的乘积,  $\sigma g|_{\max}$  为每个单元中同一类碰撞的  $\sigma g$  的最大值,  $R$  为区间  $[0, 1]$  上均布的随机数。

(2) 平动能激发几率选择模式

$$P_t = 1 > R \quad (2)$$

式中  $P_t$  为平动能激发几率。

(3) 转动能激发几率选择模式

$$P_{rot} = \frac{1}{5} > R \quad (3)$$

式中  $P_{rot}$  为转动能激发几率。

(4) 振动能激发几率选择模式

$$P_v = \beta_v u^\omega \exp\left(-\frac{\bar{u}}{u}\right) > R \quad (4)$$

式中  $P_v$  为振动能激发几率,  $u = \left(\frac{\epsilon_c}{\epsilon_a}\right)^{\frac{1}{2}}$ ,  $\epsilon_c$  为碰撞分子对能量,  $\epsilon_a$  为双原子分子的离解能。  $\beta_v$ 、 $\omega$ 、 $\bar{u}$  为待定常数。

(5) 双原子分子的离解反应几率选择模式

$$P_d = \beta_d \frac{(\epsilon_c - \epsilon_a)^{\psi + \frac{\xi_c}{2} - 1}}{(\epsilon_c)^{\xi_c/2 - 1}} > R, \epsilon_c > \epsilon_a \quad (5)$$

式中  $P_d$  为离解反应几率,  $\xi_c$  为碰撞分子对自由度,  $\beta_d$ 、 $\psi$  为待定常数。

(6) 双原子分子与分子的交换反应几率选择模式与(5)式相同。

(7) 复合反应的几率选择模式

$$P_r = \begin{cases} \beta_r (\epsilon_{int(AB)})^{-\Phi}, & \text{催化物为单原子分子} \\ \beta_r (\epsilon_{int(AB)})^{-\Phi} (\epsilon_{int\chi})^{-\eta}, & \text{催化物为双原子分子} \end{cases} > R \quad (6)$$

式中  $P_r$  为复合反应几率,  $\epsilon_{int(AB)}$  为络合物  $(AB)$  的内能,  $\epsilon_{int\chi}$  为催化物  $\chi$  的内能,  $\beta_r$ 、 $\Phi$ 、 $\eta$  为待定常数。

## 2 分子碰撞能量交换模式

按照分子动力论,分子各自由度间能量交换必须遵守能量守恒定律,平衡态时各自由度能量服从 Boltzmann 分布。分子能量由平动能  $\epsilon_t$ 、转动能  $\epsilon_r$ 、振动能  $\epsilon_v$  以及分子中的电子能  $\epsilon_e$  组成。本文仅考虑  $\epsilon_t$ 、 $\epsilon_r$ 、 $\epsilon_v$  间的交换,并称分子平动能之外的分子能量为分子内能,记为  $\epsilon_{int}$ 。

(1) 平动能与平动能能量交换模式

在此能量交换模式中,仅发生平动能的交换,分子内能不变。碰撞后每个分子的速度为

$$V_a = G + \frac{u_{ab}}{m_a} g', V_b = G - \frac{u_{ab}}{m_b} g' \quad (7)$$

式中下标  $a, b$  分别表示  $a$  分子、 $b$  分子,上标“ $'$ ”表示碰撞后物理量。 $m$  为分子质量, $u_{ab}$  为分子  $a$  与分子  $b$  的简并质量。 $g' = gn$ ,  $g$  为分子间相对速度。 $n = (n_x, n_y, n_z)$ ; 为单位矢量且  $n_x = \cos\varphi_1$ ,  $n_y = \sin\varphi_1 \cos\varphi_2$ ,  $n_z = \sin\varphi_1 \sin\varphi_2$ 。 $\varphi_1, \varphi_2$  为欧拉角,  $\cos\varphi_1 = 2R_1 - 1$ ,  $\varphi_2 = 2\pi R_2$ ,  $R_1, R_2$  为均布随机数。 $G$  为碰撞对质心速度。

(2) 平动能与转动能能量交换模式

$$\epsilon_i' = (1 - F')(\epsilon_i + \epsilon_r) \quad (8)$$

$$\epsilon_r' = F'(\epsilon_i + \epsilon_r) \quad (9)$$

式中  $F'$  为平衡分布  $f^*(F)$  的抽样值, $f^*(F)$  的表达式为

$$f^*(F) = \frac{\Gamma\left(2 - \frac{2}{\alpha} - \frac{\xi_r}{2}\right)}{\Gamma\left(2 - \frac{2}{\alpha}\right)\Gamma\left(\frac{\xi_r}{2}\right)} F^{\xi_r/2-1} (1 - F)^{1-2/\alpha} \quad (10)$$

式中  $\Gamma$  为伽玛函数, $\xi_r$  为分子转动自由度, $\alpha$  为分子作用势幂律指数。

(3) 转动能与转动能能量交换模式

基于统计物理关于两个碰撞的振动转子间能量分配机会均等假设,两个碰撞转动转子间的能量交换模式为

$$\epsilon_{ra}' = R(\epsilon_{ra} + \epsilon_{rb}) \quad (11)$$

$$\epsilon_{rb}' = (1 - R)(\epsilon_{ra} + \epsilon_{rb}) \quad (12)$$

(4) 转动能与振动能能量交换模式

根据分子振动能的谱特征,将分子内能  $\epsilon_{in}$  用振动能的特征谱量子化,得到 0 到  $Q$  总数为  $Q+1$  的能谱。对于简单谐振子, $Q = \text{mod}(\epsilon_{in}/k\theta_v)$ 。 $\text{mod}(\ )$  为截断取整, $k$  为玻尔兹曼常数, $\theta_v$  为振动特征温度。如果碰撞后分子的振动能均匀分布在  $Q+1$  能级上,那么碰撞后分子转动能与振动能分别为

$$\epsilon_v' = \text{mod}(R(Q + 1))k\theta_v \quad (13)$$

$$\epsilon_r' = (\epsilon_r + \epsilon_v) - \epsilon_v' \quad (14)$$

(5) 平动能与振动能能量交换模式

本文采用式(8)、(9)、(13)、(14)的组合模式。

### 3 DSM 仿真实例与结果分析

以高超声速钝体绕流驻点线流场作为 DSMC 方法仿真实例。仿真的钝体球头半径  $R_n = 0.065\text{m}$ ,来流马赫数  $M_\infty = 20$ ,壁温  $T_w = 1100\text{K}$ ,飞行高度为 74km 及 92km。

由图 1、图 2 给出的驻点线流场的密度分布可以看出,随飞行高度增大,激波的宽度相应增大。在飞行高度为 92 km 时,激波与粘性激波层相互作用尤为明显,此时已很难定义激波。由 DSMC 方法仿真结果与采用激波间断假设的粘性激波层(VSL)数值结果

的比较看出,在飞行高度较低时二者基本相符;随着飞行高度的增加,二者结果尤其是在激波附近存在显著差异。这就表明,随飞行高度增加,气体的非平衡稀薄效应增大,激波间断假设不再成立。

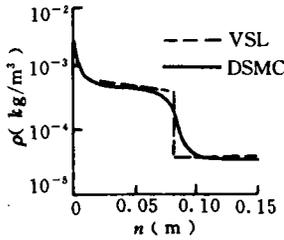


图1 密度分布(高度 74km)

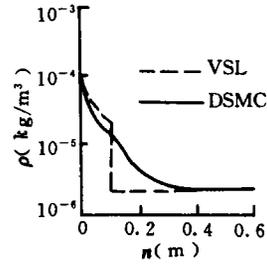


图2 密度分布(高度 92km)

图 3 给出了钝体绕流驻点线流场中气体的平动温度  $T_t$ 、转动温度  $T_r$  及振动温度  $T_v$  的分布。由于气体分子振动的松弛时间远大于平动与转动的松弛时间,气体内分子的振动平衡需要更多的分子碰撞次数。因此,激波附近的气体振动温度明显低于气体平动温度及转动温度。

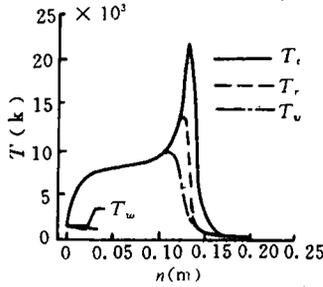


图3 温度分布(高度 74km)

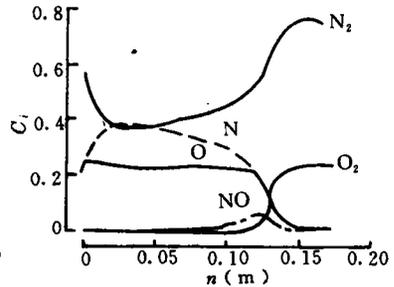


图4 组元浓度分布(高度 74km)

图 4 给出了钝体绕流驻点线流场中 5 个组元( $N_2$ 、 $O_2$ 、 $N$ 、 $O$ 、 $NO$ )的浓度分布。来流气体分子在激波后温度达到峰值之前就发生比较显著的离解反应,表明在高超声速稀薄流条件下,在激波阵面前就存在严重的化学非平衡效应,来流气体分子穿过激波时的冻结流假设不再成立。

### 参 考 文 献

- 1 Bird G A. Molecular Gas Dynamics. Clarendon Press. 1976
- 2 Boyd I D. Rotational and Vibrational Nonequilibrium Effects in Rarefied Hypersonic Flows. Journal of Thermophysics and Heat Transfer. 1992
- 3 Baganoff D, McDonald J D. A Collision Selection Rule for a Particle Simulation Method Suited to Vector Computers. Phys. Fluids A, 1990, 2(7)

(责任编辑 卢天颢)