

文章编号: 1001-2486(2009)03-0006-05

# 稀薄流气粒两相耦合作用的热力学模型<sup>\*</sup>

李洁, 尹乐, 颜力

(国防科技大学 航天与材料工程学院, 湖南 长沙 410073)

**摘要:** 基于直接模拟 Monte Carlo (DSMC) 方法, 从描述粒子微观运动层次出发, 构造高空稀薄环境下气体-颗粒两相双向耦合作用的热力学模型, 发展适用于稀薄过渡区多相复杂流动的 DSMC 算法。通过算例验证, 结果表明, 此模型能够较好地反映相间动量和能量传输机制。

**关键词:** 稀薄气体动力学; 多相流; DSMC 方法

中图分类号: V211.3 文献标识码: A

## Two-way Coupled Model for Rarefied Multiphase Flow

LI Jie, YIN Le, YAN Li

(College of Aerospace and Material Engineering, National Univ. of Defense Technology, Changsha 410073, China)

**Abstract:** Based on the DSMC method, a two-way coupled mechanical and thermal model for high-altitude two-phase rarefied flow is presented with considering of particles' micro flow properties. An approach of DSMC is developed for multiphase flow in the transitional regime of rarefied gas. Simulations are performed for the verified case and the results show that the model agrees closely with the momentum and energy transfer mechanism.

**Key words:** rarefied gas dynamics; multiphase flow; DSMC method

在气粒两相流动过程中, 流动具有鲜明的非平衡性特征, 流动形态也可以是多种多样的。但是现有的研究工作大多围绕气相处于连续介质范畴的两相流, 对于稀薄条件下的气粒两相流, 则由于流场的稀薄气体效应显著, 传统的基于 Navier-Stokes 方程的 CFD 方法将不再适用<sup>[1]</sup>。随着航天飞行器在高空的机动飞行和制动的需求发展, 基于高空气粒两相耦合流场的两相稀薄流动研究日益受到重视<sup>[2-4]</sup>。目前 Burt<sup>[3]</sup> 和 Gimelshein<sup>[4]</sup> 均构造了适用于稀薄流动条件下的双向耦合的气粒相互作用模型, 两者为两相稀薄流建立了较好的数学描述方法, 开创了高空稀薄环境下气粒两相流动研究。但这些方法存在以下缺陷: 一是由于气体分子和颗粒相间作用的处理模式各不相同, 导致动量和能量的守恒仅是从时间平均层面上实现, 不能保证单个时间步长内的气粒相间碰撞的动量守恒和能量守恒; 二是在处理颗粒对气体分子的作用时, 采用的方法是针对每个颗粒依次进行与气体分子碰撞的处理, 这一样本的取法与事实不相符, 导致碰撞分子样本数目的减少。为克服上述方法缺陷, 文献[5]从描述粒子运动的微观层次出发, 结合宏观气粒相互作用关系式, 构造了气体-颗粒相互作用的热力学模型, 由于从宏观物理量出发构造的相间作用公式大多是基于试验的经验公式, 更加适用于低速连续介质流动, 而对高超声速稀薄流而言, 经验系数欠缺, 公式的准确度有待深究。为避免出现此类问题, 本文在文献[5]基础上, 采用基于粒子微观行为的热力学模型, 建立气粒两相双向耦合的动量和能量传输机制, 发展适用于稀薄条件下的气粒两相流的直接模拟 Monte Carlo (DSMC) 算法, 为解决稀薄流过渡区气粒两相复杂流动问题提供一种新的研究思路。

### 1 气粒两相耦合作用的热力学模型

利用 Gallis<sup>[6]</sup> 的单个气体模拟分子对单个颗粒的力和热作用公式<sup>[3]</sup>:

\* 收稿日期: 2009-01-08

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10602063)

作者简介: 李洁(1974-), 女, 副教授, 博士。

$$F = \frac{\pi R_p^2 F_{num}}{V} (m C_r + \frac{\tau}{3} \sqrt{2\pi m k_B T_p}) u_r \quad (1)$$

$$Q_p = \frac{\pi R_p^2 F_{num} C_r}{V} \left[ \frac{1}{2} m C_r^2 + e_{rot} - \left(2 + \frac{1}{2} \zeta\right) k_B T_p \right] \quad (2)$$

式中,  $F_{num}$  表示气体分子权因子, 即一个模拟分子所代表的真实分子个数,  $V$  是网格体积,  $\tau$  是颗粒表面热适应系数,  $R_p$  是颗粒半径,  $T_p$  是颗粒温度,  $m$  是气体分子质量,  $u_r$  是气体分子相对于颗粒的速度,  $C_r$  是  $u_r$  的模值,  $\zeta$  是气体分子的转动自由度,  $e_{rot}$  是单个气体分子的转动动能。

在一个时间步长  $\Delta t$  内, 每个网格中依据式(1)和(2)累加计算出所有气体模拟分子对单个颗粒的力和热作用:

$$F_p = \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^{N_i} (F_{ij} F_{num}) \quad (3)$$

$$Q_p = \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^{N_i} (Q_{ij} F_{num}) \quad (4)$$

式中,  $N_i$  为网格中第  $i$  个组分的样本总数,  $M$  为气体分子的组分总数。从而可以得出  $\Delta t$  内气粒两相相互作用后颗粒的速度和温度:

$$u_p(t + \Delta t) = u_p(t) + \frac{F_p \Delta t}{M_p} \quad (5)$$

$$T_p(t + \Delta t) = T_p(t) + \frac{Q_p \Delta t}{C_{sp} M_p} \quad (6)$$

式中,  $M_p = \frac{4}{3} \pi R_p^3 \rho_p$ , 为单个颗粒质量,  $\rho_p$  是颗粒的材料密度,  $C_{sp}$  是颗粒的比热容。

根据公式(3)和(4), 逐个求出网格内每一颗粒所受到的相间作用力和热传递, 累计网格内所有颗粒的作用力和热传递, 得到网格内气相所受到的总相间力和热传递:

$$F = \sum_{j=1}^{N_s} (F_{\beta j} F_{num}) \quad (7)$$

$$\Delta E = \sum_{j=1}^{N_s} (Q_{\beta j} \Delta t F_{num}) \quad (8)$$

式中,  $F_{num}$  是颗粒相的权因子, 即一个颗粒样本所代表的实际颗粒个数。上式(7)和(8)便是此网格中  $\Delta t$  内所有气体分子受到的总相间作用力和热传递能量。

网格总的气粒相互作用体现在单个的气相模拟分子上。若不考虑化学反应等传质现象, 气粒相互作用后, 两相的宏观速度和温度将发生变化, 气相的宏观速度是气体模拟分子的平均速度, 而气相的温度是气体模拟分子热运动速度和内能的度量, 从而气粒相互作用改变了气体模拟分子的平均速度、热运动速度和内能, 并且其改变量要满足相间力和热的传递公式。为此, 依据 DSMC 算法, 采取如下步骤:

首先, 气粒相间相互作用传递动量。由于动量传递使得单个网格中气相分子的平均速度发生变化, 而动量传递并未改变气相分子能量分布, 所以气相分子的平动能不变。若考察  $x$  方向上的动量传递, 则需满足

$$\sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^{N_i} m_i (u_{ij} - u_{ij}^0) = \frac{F_x \Delta t}{F_{num}} \quad (9)$$

根据平均速度  $u$  定义和平均分子质量定义  $m$ , 有

$$u = u^0 + \frac{F_x \Delta t}{F_{num} \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^{N_i} m_i} = u^0 + \frac{F_x \Delta t}{F_{num} m N_g} \quad (10)$$

$$m = \frac{\sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^{N_i} m_i}{N_g} \quad (11)$$

再者,气相相间相互作用传递能量。从宏观上讲,能量传递改变了气相的温度分布。因为气相的温度由气相模拟分子的平动温度、转动温度和振动温度构成,其中平动温度是分子热运动速度的度量,所以相间能量传递改变了单个网格中气相分子的热运动速度和内能,而能量传递并未改变气相分子平均速度,故气相分子的平均速度由式(10)确定,在能量传递过程中保持不变。

假设分子振动能未被激发,根据相间能量传递守恒原理,可知

$$E_{tr} + E_{rot} - E_{tr}^0 - E_{rot}^0 = \frac{\Delta E}{F_{nm}} \quad (12)$$

式中,  $E_{tr}$ 、 $E_{rot}$  分别为气相分子总平动能和总转动能,上标“0”表示相间作用前的值。

根据平动温度和转动温度定义可知:

$$E_{tr} = \frac{3}{2} k N_g T_{tr} \quad (13)$$

$$E_{rot} = \frac{k T_{rot}}{2} \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^{N_i} \zeta_{ij} \quad (14)$$

式中,  $k$  是 Boltzmann 常数,  $T_{tr}$  是平动温度,  $T_{rot}$  是转动温度,  $\zeta$  是转动自由度,  $N_g$  是分子数,从而

$$\Delta T_{tr} = \frac{2}{3} \frac{\Delta E_{tr}}{k N_g} \quad (15)$$

$$\Delta T_{rot} = \frac{2}{\zeta} \frac{\Delta E_{rot}}{k N_g} \quad (16)$$

针对第  $i$  种组分气相分子而言,单位质量单个方向上的平动能改变量满足下式:

$$\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N_i} (u_{ij}'^2 - u_{ij}^2) = \frac{k N_i \Delta T_{tr}}{2 m_i} \quad (17)$$

按照能量均分原理,即能量的变化量按照自由度均分,可得网格内气相模拟分子的平动能改变量和转动能改变量分别为

$$E_{tr} - E_{tr}^0 = \Delta E_{tr} = \frac{\sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^{N_i} 3}{\sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^{N_i} (3 + \zeta_{ij})} \Delta E' \quad (18)$$

$$E_{rot} - E_{rot}^0 = \Delta E_{rot} = \frac{\sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^{N_i} \zeta_{ij}}{\sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^{N_i} (3 + \zeta_{ij})} \Delta E' \quad (19)$$

式中,  $\zeta$  为气体分子内自由度,  $N_i$  为网格内第  $i$  种组分气体模拟分子数目,  $\Delta E_{tr}$  和  $\Delta E_{rot}$  分别是气相平动能改变量和转动能改变量。  $\Delta E'$  为

$$\Delta E' = \frac{\Delta E}{F_{nm}} \quad (20)$$

然后,将平动能和转动能的改变量分配到每个气相模拟分子上。处理转动能改变量  $\Delta E_{rot}$  时,当  $\Delta E_{rot} \geq 0$ , 将其分成  $N_g$  等分,均布到气相模拟分子中;当  $\Delta E_{rot} < 0$  时,则以每个分子转动能在网格总转动能中所占有的比例为权因子,按权重加权给出。

气相模拟分子的热运动速度的变化是根据总平动能改变量  $\Delta E_{tr}$  得到的。需要注意的是,此时对单个模拟分子而言,热运动速度可能是有变化的,但对于网格内的所有模拟分子而言,相间能量传递未改变平均速度,即热运动速度的质量平均值不变,其值为零。总平动能改变量  $\Delta E_{tr}$  仅仅使热运动速度发生改变,而不至于导致模拟分子的平均速度发生变化。若网格中气相模拟分子平动能改变量  $\Delta E_{tr}$  的分布以  $x$  方向为例,则需满足:

$$\sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^{N_i} \frac{1}{2} m_i (u'_{ij}{}^2 - u_{ij}{}^{\prime 0^2}) = \frac{\Delta E_{tr}}{3} \quad (21)$$

$$\sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^{N_i} m_i (u'_{ij} - u_{ij}{}^{\prime 0}) = 0 \quad (22)$$

其中上标“0”表示相间作用前的物理量, 下标“j”表示第j个气相模拟分子,  $u'$ 为模拟分子x向的热运动速度,  $m_i$ 为第i种组分的分子质量。考察第i种组分气相分子, 平动能的改变量  $\Delta E_{tr_i}$ 可写为

$$\Delta E_{tr_i} = \frac{3}{2} k N_i \Delta T_{tr} \quad (23)$$

第i种组分气相分子x向的热运动速度满足下式

$$\sum_{j=1}^{N_i} \frac{1}{2} m_i (u'_{ij}{}^2 - u_{ij}{}^{\prime 0^2}) = \frac{\Delta E_{tr_i}}{3} \quad (24)$$

为满足式(22), 假设每种组分气相分子的热运动速度之和不变, 且热运动速度增量呈均匀分布态, 采用文[3]步骤得到第i种组分气相分子x向的热运动速度。

综上所述, 气粒相间作用后气相模拟分子的速度和转动动能可求出。至此, 可以得到一个时间步长内每个网格中的所有气相模拟分子在两相作用后的新物理量。

## 2 算例验证

基于上述模型, 采用文献[3]算例进行验证。计算域长 20mm, 宽 0.1mm, 壁面镜面反射, 如图 1 所示。气体分子为  $H_2$ 、CO 和  $N_2$ , 分子数密度分别为  $2 \times 10^{23}/m^3$ 、 $1 \times 10^{23}/m^3$  和  $1 \times 10^{23}/m^3$ , 入口处气相速度为 2000m/s, 气相温度为 1000K。颗粒相入口流量为  $13.33 \text{ kg}/(\text{s} \cdot \text{m}^2)$ , 速度为 1200m/s, 温度为 2200K, 密度为  $3970 \text{ kg}/m^3$ , 定容比热为  $765 \text{ J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$ , 质量分数为 40%, 颗粒直径为  $3 \mu\text{m}$  和  $6 \mu\text{m}$ , 质量各占一半, 颗粒表面热适应系数为 0.89。网格  $1000 \times 5$ (个), 时间步长为  $1.5 \times 10^{-9} \text{ s}$ 。

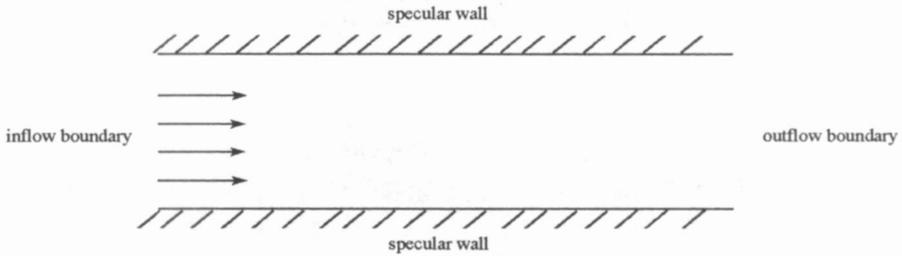


图 1 计算模型示意图  
Fig. 1 Computational domain

结果表明, 沿流向颗粒和气体分子传递动量和能量。由于入口处颗粒的温度大于气体, 因此, 沿流向颗粒的温度下降, 而气体的温度上升, 如图 2、图 3 所示。同样, 入口处颗粒的速度小于气体, 颗粒的速度沿流向逐渐上升, 而气体速度逐渐下降。沿流向的颗粒和气体分子数密度变化趋势同温度变化趋势, 由于粒子数的统计涨落, 数密度曲线收敛较慢。

图 2、图 3 还给出了文中算法与文献[3]算法的结果比较。由图可知, 两种算法气体和颗粒的速度、温度分布趋于一致。因此, 通过此算例验证, 本文构造的气粒耦合作用模型是可行的, 且有效避免了文献[3-4]算法中因两相处理模式的不一致性导致随气相和颗粒相数密度差距增加而产生较大误差等问题。

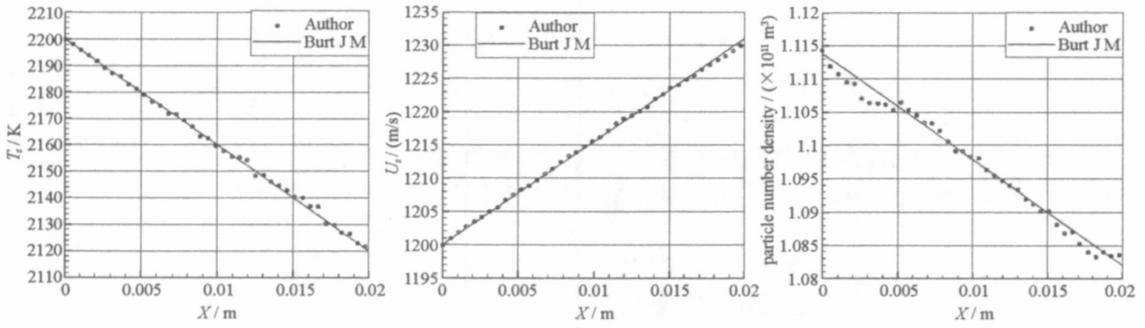


图2 颗粒相的温度、速度和数密度分布图

Fig. 2 Variation in particle temperature, speed and number density

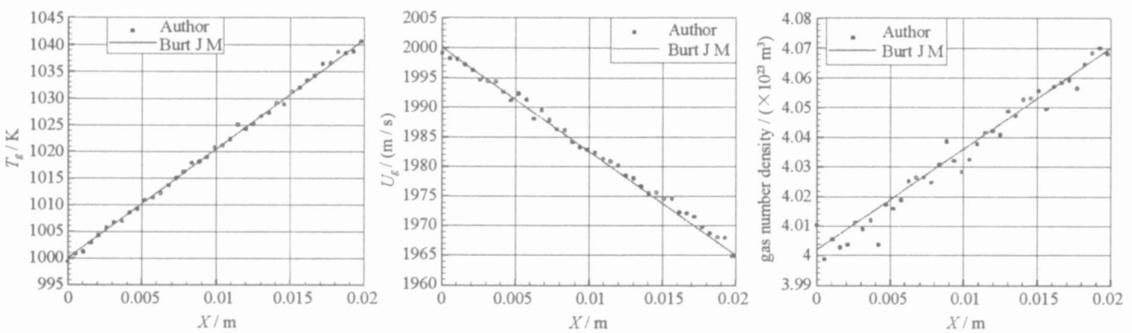


图3 气相的温度、速度和数密度分布图

Fig. 3 Variation in gas temperature, speed and number density

### 3 结论

利用描述粒子微观运动的 Galls 模型, 建立高空稀薄环境下的气体—颗粒两相双向耦合作用的动量和能量传输机制, 根据相间动量和能量传递守恒原则和气体分子能量按自由度均布原则, 构造相间作用后的气体和颗粒速度、温度等物理量分布模型, 通过与文献算例的比较验证此模型的可行性, 为解决稀薄条件下的气粒两相复杂流动问题提供一种新的研究手段。

### 参考文献:

- [1] Burt J M, Boyd I D. Evaluation of a Monte Carlo Model for Two Phase Rarefied Flows[R]. AIAA- 2003- 3496, 2003.
- [2] Gimelshein S F, Markelov G, Muyaert J. Numerical Modeling of Low Thrust Solid Propellant Nozzles at High Altitudes[R]. AIAA- 2006- 3273, 2006.
- [3] Burt J M, Boyd I D. Development of a Two-way Coupled Model for Two Phase Rarefied Plume Flows[R]. AIAA- 2004- 1351, 2004.
- [4] Gimelshein S F, Alexeenko A A. The Influence of Particulates on Thruster Plume/ Shock Layer Interaction at High Altitudes[R]. AIAA- 2005- 766, 2005.
- [5] 李洁, 任兵, 陈伟芳. 稀薄流过渡区气固两相喷流的建模与数值模拟[J]. 空气动力学学报, 2005, 23(4): 484- 489.
- [6] Galls M A, Torzynski J R, Rader D J. An Approach for Simulating the Transport of Spherical Particles in a Rarefied Gas Flow via the Direct Simulation Monte Carlo Method[J]. Physics of Fluids, 2001, 13(11): 3482- 3492.