

基于分子平均自由程的热流计算壁面网格准则¹⁾

程晓丽 艾邦成 王 强²⁾

(中国航空气动力技术研究院, 北京 100074)

摘要 面向壁面热流 Navier-Stokes 方程数值计算的应用, 研究了壁面法向网格尺度问题. 从气体分子物理学角度, 对壁面热流进行了微观统计分析, 指出壁面热流与气体分子平均自由程之间的内在联系是壁面法向网格尺度存在最优下限的原因. 据此建立了一个新的壁面法向网格尺度准则, 即 MFP 准则. 该准则简单、实用, 具有清晰的热力学物理意义, 且只依赖于壁面局部参数. 并以多种对比算例验证了 MFP 准则的准确性和适用性.

关键词 气动热环境, 热流, 分子平均自由程, 网格尺度, 数值计算

中图分类号: O354 文献标识码: A 文章编号: 0459-1879(2010)06-1083-07

引 言

气动热环境的准确预测对于高速飞行器热防护系统设计至关重要^[1]. 近几年, 随着高超声速近空间飞行器 (near space vehicle, NSV) 等新概念飞行器的迅速发展, 气动热环境的准确预测问题日益突出.

壁面热流是描述气动热环境的特征物理量. 对热防护系统设计而言, 它是确定热传导气动加热影响的关键参数. 工程估算和数值计算是两种常见的壁面热流预测方法. 前者虽然简单、快捷, 但精度不高, 适用性差. 同时, 现代新型高速飞行器多为高升阻比复杂外形, 且绕流流场也十分复杂. 因此, 与之相比, 数值计算方法在新型热防护系统的设计中占有越来越重要的地位.

壁面热流数值计算的控制方程一般用 Navier-Stokes 方程, 其难点是结果的不确定性, 它涉及多种影响因素, 例如来流参数、边界条件、离散方法、数值格式、计算网格等^[2-3]. 其中, 壁面法向网格尺度被认为是最主要的影响因素^[4]. 壁面法向网格尺度的确定方法可分为两类: 一类是间接法, 通常由最小网格雷诺数间接给出^[5]; 另一类是直接法, 通常由来流参数的函数关系式直接给出^[6]. 这些现有的确定方法基本上都明显依赖于来流参数, 并且人为调整的范围很大, 随意性和经验性较强, 适用性相对不足, 有些还十分繁琐, 难以进行一般性工程应

用推广. 此外, 经验上, 壁面法向网格尺度并不是越小越好, 而是存在一个最优下限. 对此未见合理的解释, 该最优下限如何有效设置也尚未可知.

现有壁面法向网格尺度的确定方法均局限于宏观探讨, 且以外形几何参数或边界层壁面坐标 y^+ 为分析尺度, 物理意义模糊. 与之不同, 本文将采用气体分子物理学的微观统计分析方法, 引入气体分子平均自由程 (mean free path, MFP) 分析尺度, 尝试给出一个新的壁面热流 Navier-Stokes 方程数值计算的壁面法向网格尺度准则. 该准则简单、实用, 具有清晰的热力学物理意义, 且只依赖于壁面局部参数, 并可作为最优下限. 最后, 以多种对比算例表明它具有一定的准确性和适用性.

1 壁面热流微观统计分析

壁面热流是指由于热传导, 单位时间内沿壁面法向通过壁面单位面积输运的热量. 若假设气体局部各向同性, 根据 Fourier 热传导定律, 壁面热流

$$q_w = -\kappa \frac{\partial T}{\partial n} \Big|_w$$

其中, κ 为热传导系数, T 为温度, n 为壁面法向, 负号表示热量沿温度减小的方向输运. 一般认为, 由于壁面热流依赖于温度的壁面法向梯度, 所以后者是影响前者数值计算精度的关键. 另外, 温度

2009-07-24 收到第 1 稿, 2009-12-29 收到修改稿.

1) 国家自然科学基金重大研究计划资助项目 (90505015).

2) E-mail: qwang327@163.com

在边界层内沿壁面法向的分布是非线性的. 因此, 在数学上, 对温度的壁面法向梯度而言, 为提高其数值微分的精度, 壁面法向网格尺度越小越好. 但如前所述, 在物理上, 对壁面热流而言, 却并非如此, 而是存在一个最优下限.

现对热传导系数 κ 进行微观统计分析. 采用气体分子硬球模型, 气体分子彼此既无引力, 也无斥力, 并假设气体分子之间的碰撞以二体碰撞为主, 且为完全弹性碰撞. 经过简单的推导, 可得

$$\kappa = \frac{1}{3}nm\bar{v}\lambda c_V \quad (1)$$

其中, n 为气体分子数密度, m 为气体分子质量, $\bar{v}$ 为气体分子热运动平均速率, λ 为气体分子平均自由程, c_V 为气体定容比热. 式 (1) 表明, 热传导系数是与气体分子平均自由程相关的宏观物理量. 所以, 考虑到气体分子热运动的随机性, 当一个热力学系统存在某个方向空间尺度小于气体分子平均自由程时, 其热传导系数是不确定的. 也就是说, 该热力学系统的各向空间尺度至少应不小于气体分子平均自由程. 这就是将壁面网格单元视作一个热力学系统时, 壁面法向网格尺度存在最优下限的原因.

同样按照气体分子物理学的观点, 壁面热流是大量微观气体分子通过热运动与壁面碰撞, 进行热传导的宏观反映. 近似地, 一方面, 气体分子只有与壁面距离不大于一个平均自由程时, 才可能与壁面碰撞; 另一方面, 只有不小于一个平均自由程的壁面距离时, 才可能包含所有与壁面碰撞的气体分子. 这进一步说明了壁面热流与气体分子平均自由程之间的内在联系.

基于上述分析, 讨论建立一个新的壁面热流 Navier-Stokes 方程数值计算的壁面法向网格尺度准则.

2 壁面法向网格尺度 MFP 准则

记壁面法向网格尺度为 Δn_w . 由第 1 节分析, 若将壁面气体分子平均自由程近似看作最优下限, 则可得约束条件

$$\Delta n_w = O(\lambda_w) \quad (2)$$

其中, λ_w 为壁面气体分子平均自由程. 这就是本文给出的用于壁面热流 Navier-Stokes 方程数值计算的壁面法向网格尺度准则, 称作 MFP 准则.

为了便于应用, 将式 (2) 改写为

$$\Delta n_w = c_w \cdot \lambda_w \quad (3)$$

其中, 正参数 $c_w = O(1)$. 由相关理论^[7], 壁面气体分子平均自由程

$$\lambda_w = \frac{m}{\sqrt{2}\pi d^2} \cdot \frac{1}{\rho_w} \quad (4)$$

其中, ρ_w 为壁面密度. 气体分子有效直径 d 的表达式为

$$d = \left[\frac{5}{16} \cdot \frac{202}{205} \cdot \frac{(mkT_{\text{ref}}')^{1/2}}{\pi^{1/2}\mu_{\text{ref}}} \right]^{1/2} \quad (5)$$

其中, T_{ref} 为参考温度, μ_{ref} 为参考温度下的动力黏性系数. 气体分子质量 $m = M/N$, M 为气体分子量, N 为 Avogadro 常数, 即 $N = 6.022 \times 10^{26} \text{ kmol}^{-1}$. Boltzmann 常数 $k = 1.38 \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$.

实际计算中, 建议 c_w 取 1. 参考温度 T_{ref} 和参考动力黏性系数 μ_{ref} 可查相关气体常数表, 或以 Sutherland 公式确定. 特别地, 类似于湍流数值模拟中壁面网格 Δy_{min}^+ 的常见确定方法, 壁面密度 ρ_w 也以粗网格预先试算确定.

令 $c_w = 1$, 则式 (3)~ 式 (5) 的壁面法向网格尺度 MFP 准则还可进一步简化为

$$\Delta n_w = c_{\text{MFP}} \cdot \frac{1}{\rho_w} \quad (6)$$

对于空气, 分子量 $M = 28.9 \text{ kg} \cdot \text{kmol}^{-1}$, 分子有效直径 $d = 3.5 \times 10^{-10} \text{ m}$, 因此可以近似地计算出上式中的常数 c_{MFP} , 得

$$c_{\text{MFP}} \approx 0.88 \times 10^{-7} \text{ kg} \cdot \text{m}^{-2}$$

不难看出, 壁面法向网格尺度 MFP 准则形式简单, 易于实现. 它以气体分子平均自由程作为分析尺度, 具有清晰的热力学物理意义. 它只依赖于壁面局部参数, 而来流参数和外形参数变化的影响仅间接显现, 故在复杂流动和复杂外形问题上的适应性更强. 值得一提的是, 该准则具有统一和明确的表达式, 在一定程度上消除了壁面法向网格尺度设置时常见的随意性和经验性问题. 参照第 1 节的分析, 该准则还相当于给出了壁面法向网格尺度的一个最优下限.

为获得较满意的壁面热流数值计算结果, 许多研究者所采用的壁面法向网格尺度已接近或达到气体分子平均自由程量级. 例如, Klopfer 等^[5] 在驻点附近将其取为 $1.1 \times 10^{-6} \text{ ft}$, 即 $3.0 \times 10^{-7} \text{ m}$. 来流条件为: 马赫数 $M_\infty = 8.03$, 单位雷诺数 $Re = 5.085 \times$

10^6 m^{-1} , 静温 $T_\infty = 124 \text{ K}$, 壁面温度 $T_w = 294 \text{ K}$, 驻点压力和来流静压比 $P_0/P_\infty = 83.5$. 由此推知驻点附近的气体分子平均自由程约为 $1.026 \times 10^{-7} \text{ m}$, 他们选取的壁面法向网格尺度与之量级完全相同.

3 数值验证

验证算例均针对空气采用式 (6) 的简化壁面法向网格尺度 MFP 准则. 验证内容包括网格及算法无关性、驻点热流准确性、复杂外形适用性.

3.1 网格及算法无关性

这是一个 0 攻角高超声速球钝锥绕流算例, 取自文献 [8] 的实验. 球头半径为 6.35 mm , 半锥角为 25° . 来流条件为: 马赫数 $M_\infty = 11.3$, 静压 $P_\infty = 21.99 \text{ Pa}$, 静温 $T_\infty = 244.44 \text{ K}$, 壁面温度 $T_w = 297.22 \text{ K}$. 取球头中心为坐标原点, x 轴为流向. 下面以有实验数据的锥身壁面热流的对比分析为主, 实验数据相对误差为 $8.9\% \sim 10.6\%$.

关于网格无关性, 考虑一组网格总数均为 121 (流向) $\times 46$ (法向) $\times 37$ (周向) 的网格. 共包括 5 种网格, 由代数方法生成. 它们之间的唯一差别是沿流向的壁面法向网格尺度不同, 由大到小依次记作 Grid 1~5. 关于算法无关性, 考虑 3 种离散方法, 即有限差分、有限体积和有限元; 以及 4 种常见数值格式, 即 TVD, WENO, NND, AUSM-DV. 图 1 是 5 种网格的壁面法向网格尺度沿流向的分布. 其中, Grid 4 的壁面法向网格尺度由式 (6) 的 MFP 准则确定, 此间所涉及的壁面密度 ρ_w 的预先试算采用 TVD 有限差分方法在粗网格 Grid 1 上完成; 其他 4 种网格的壁面法

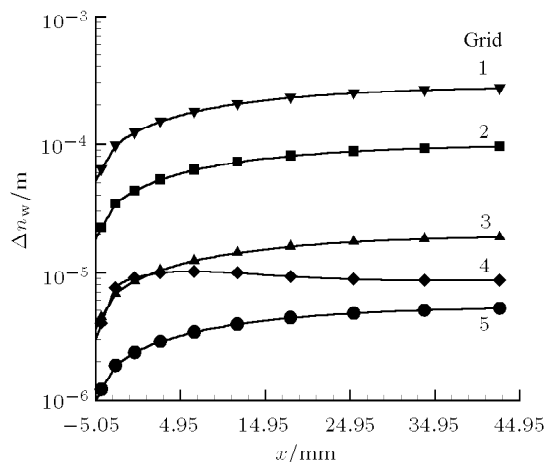


图 1 不同网格壁面法向网格尺度沿流向分布

Fig.1 Wall normal grid scales of Grid 1~5

向网格尺度由不同的指数分布函数伸缩因子确定. 为了显示在不同网格上预先试算出壁面密度 ρ_w 后, 经式 (6) 的 MFP 准则确定的壁面法向网格尺度彼此差别微小, 图 2 给出了相关计算结果, 算法也均为 TVD 有限差分方法. 图 2 表明, 尽管 Grid 1~5 各自的壁面法向网格尺度之间最大相差约 2 个量级, 但得到的 MFP 准则受此影响较弱. 因此, 在壁面热流 Navier-Stokes 方程准确预测前, 以粗网格预先试算快速确定满足 MFP 准则的数值计算网格是可行的.

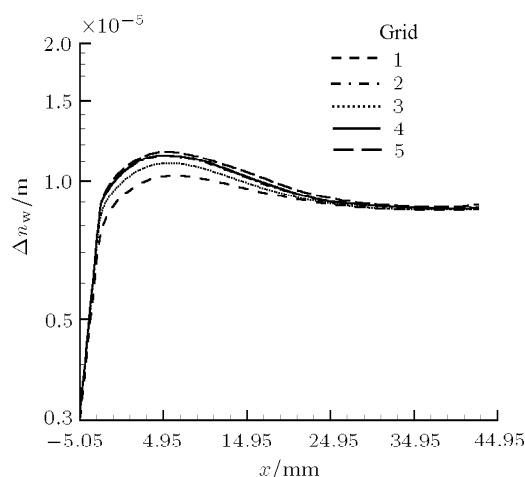


图 2 基于不同网格的 MFP 准则壁面法向网格尺度对比

Fig.2 Comparison of wall normal grid scales from MFP criterion

图 3 是不同网格及不同算法的壁面热流数值计算结果对比. 满足 MFP 准则的 Grid 4 的计算结果与实验结果十分吻合, 相对误差均小于 10% , 符合工程应用上壁面热流准确预测的要求. 特别地, 当网格满足 MFP 准则时, 离散方法和数值格式的影响显著减弱. 而当网格不满足 MFP 准则时, 不管其壁面法向网格尺度相对较大还是较小, 离散方法和数值格式的影响都十分突出. 可见, 壁面法向网格尺度是壁面热流数值计算的关键, MFP 准则有效地给出了其最优下限.

MFP 准则的准确性及其对网格和算法的弱依赖性显示了其一定的普适意义和良好的实用价值. 围绕壁面热流数值计算影响因素已有的一些确定的研究结论, 有助于在一定范围内放宽 MFP 准则的限制. 例如, 积分型离散方法和低耗散数值格式被认为更适于壁面热流计算, 观察图 3 中 Grid 2 和 Grid 3 对应的曲线可知, 在图 3(d) 中, 当有限元方法和低耗散的 AUSM-DV 格式结合时, 同图 3(a)~3(c) 相

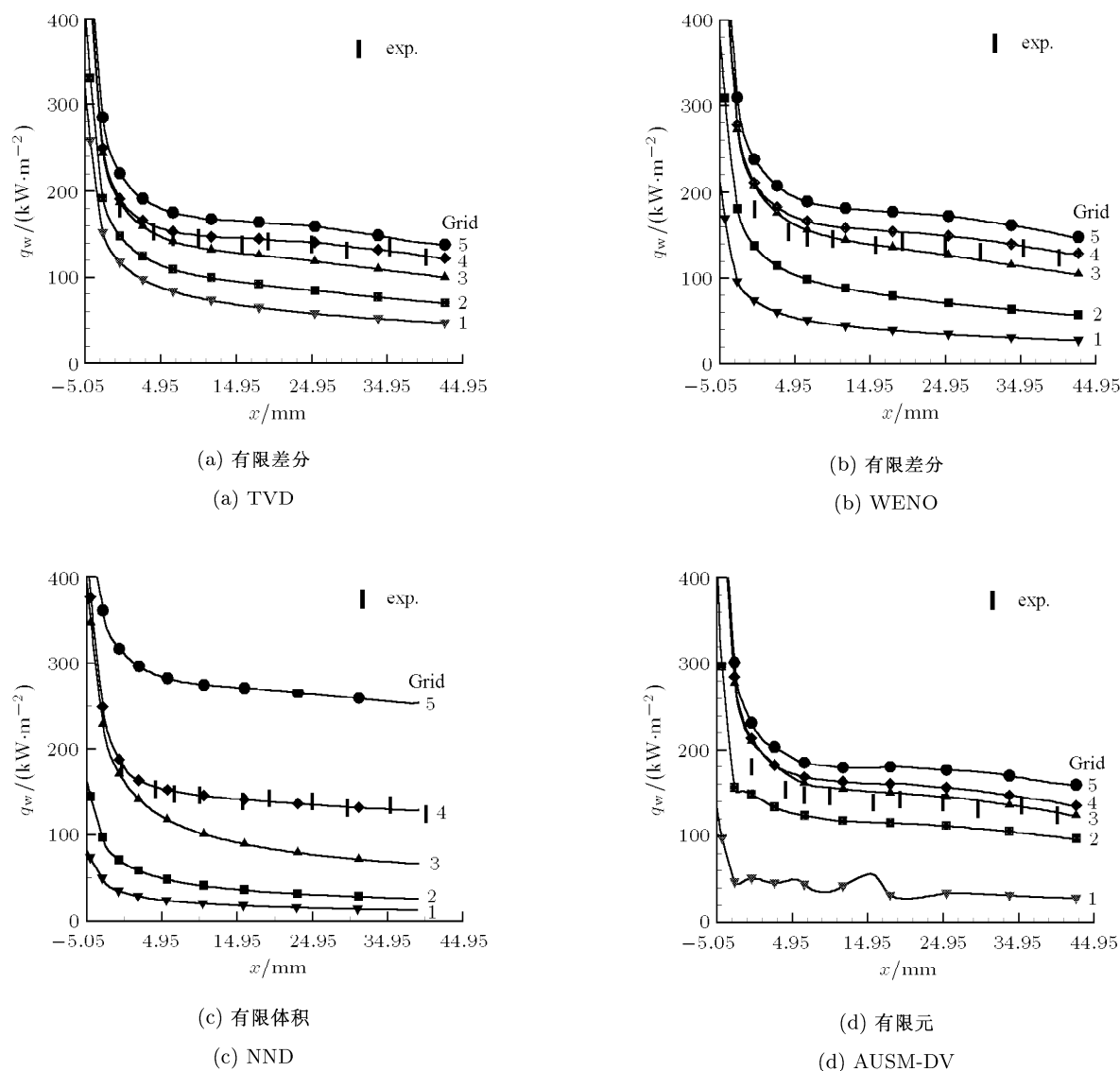


图 3 不同网格及不同算法的壁面热流数值计算对比

Fig.3 Wall heat fluxes from different grids and different algorithms

比, 网格无需小至完全满足 MFP 准则, 只需与之接近, 就能得到与实验结果吻合较好的计算结果.

3.2 驻点热流准确性

高超声速钝双锥绕流算例, 取自文献 [9] 的实验. 球头半径为 3.835 mm, 前锥半锥角为 12.84° , 后锥半锥角为 7° ; 前锥总长为 69.55 mm, 全锥总长为 122.24 mm; 攻角 $\alpha = 0^\circ, 4^\circ$. 来流条件为: 马赫数 $M_\infty = 9.86$, 密度 $\rho_\infty = 4.27 \times 10^{-3} \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$, 静压 $P_\infty = 59.9 \text{ Pa}$, 静温 $T_\infty = 48.8 \text{ K}$, 壁面温度 $T_w = 300 \text{ K}$. 取球头前缘为坐标原点, x 轴为流向. 采用 TVD 有限差分方法.

驻点热流是气动热环境准确预测的重点之一. 从数值计算的角度来看, 壁面热流与驻点热流之间

的相对值的精度较易获得. 所以, 驻点热流是验证 MFP 准则准确性的理想的参数.

对于驻点热流, 当 $\alpha = 0^\circ$ 时, 计算值为 $411.0 \text{ kW}\cdot\text{m}^{-2}$, 实验值为 $443.2 \text{ kW}\cdot\text{m}^{-2}$; 当 $\alpha = 4^\circ$ 时, 计算值为 $463.7 \text{ kW}\cdot\text{m}^{-2}$, 实验值为 $458.1 \text{ kW}\cdot\text{m}^{-2}$. 计算值与实验值十分吻合, 因此, 由 MFP 准则确定数值计算网格是准确的. 图 4 是壁面热流沿子午线 $\varphi = 0^\circ, 90^\circ, 180^\circ$ 的分布对比, 其中 $\varphi = 0^\circ$ 为背风面, $\varphi = 180^\circ$ 为迎风面. 在锥身, 计算值也与实验值符合得较好.

3.3 复杂外形适用性

高超声速双椭球绕流算例, 取自文献 [10] 在激

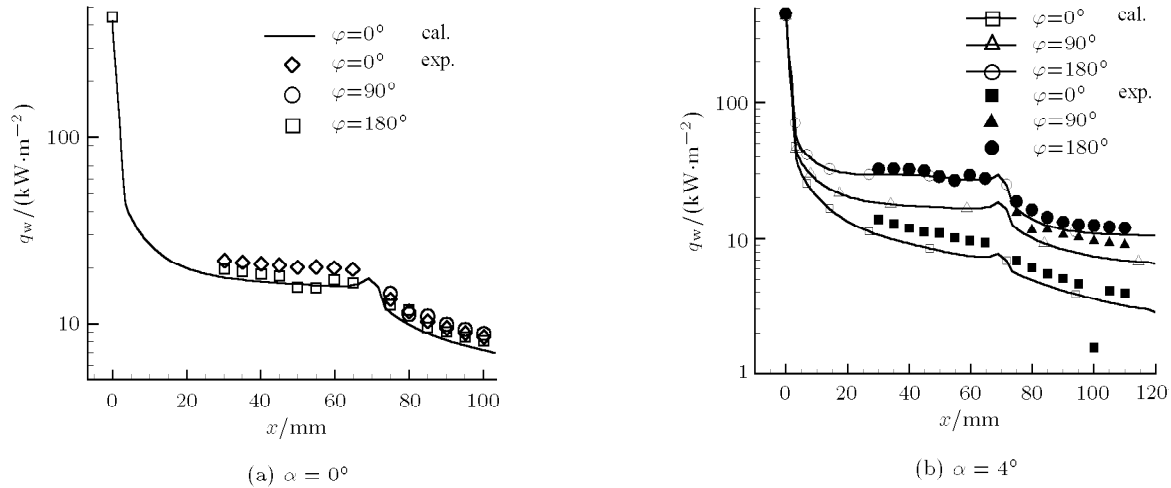


图 4 不同攻角壁面热流沿子午线分布

Fig.4 Wall heat fluxes along different meridians at different angle of attacks

波风洞里完成的实验. 攻角 $\alpha = -5^\circ, 0^\circ, 10^\circ, 20^\circ$. 来流条件为: 马赫数 $M_\infty = 8.04$, 总压 $P_0 = 7.8 \text{ MPa}$, 总温 $T_0 = 892 \text{ K}$, 单位雷诺数 $Re = 1.13 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$.

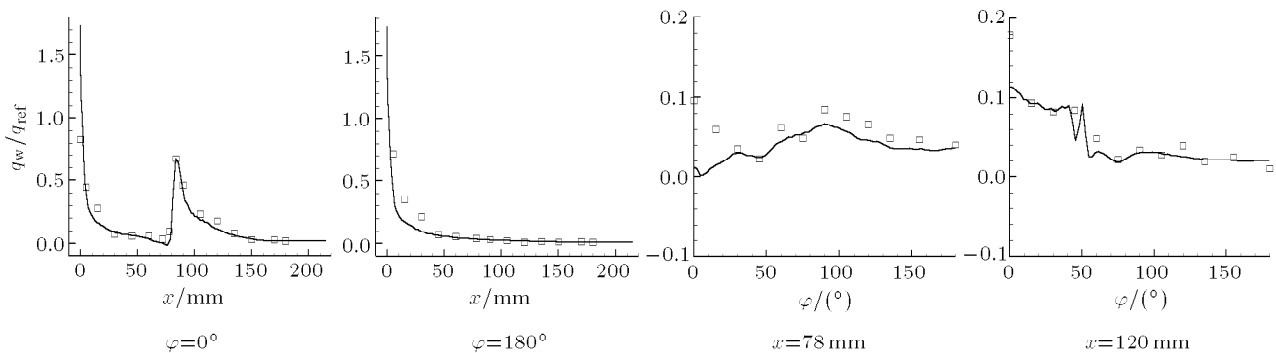
该流动的典型特点是, 下椭球前缘钝头区为高热流区, 上下椭球前部相交区存在激波 / 边界层干扰, 可诱导边界层分离, 影响壁面热流. 实验中, 每种状态有效重复 3 次, 每次实验结果与 3 次平均值的相对误差均控制在 10% 以内^[10].

取下椭球前缘为坐标原点, x 轴为流向. 实验的壁面温度未知, 故根据激波风洞特点, 计算设定 $T_w = 300 \text{ K}$. 参考热流 $q_{\text{ref}} = 568.4 \text{ kW}\cdot\text{m}^{-2}$, 为对应来流条件下, 球头半径 15 mm 的标准球头在 0 攻角时的驻点热流. 同前, 计算还采用 TVD 有限差分方法.

考虑 $\varphi = 0^\circ, 180^\circ$ 子午线和 $x = 78 \text{ mm}, 120 \text{ mm}$ 截面. 图 5 是 $\alpha = 0^\circ$ 时, 不同 φ 子午线和不同 x 截面上壁面热流的计算值 (实线) 与实验值 (符号) 的

对比, 总体上符合得较好. 其中, 有 3 个区域值得一提. 在下椭球前缘钝头区, 计算值高于实验值, 原因是在激波风洞中, 驻点附近的温升较大, 不会像计算一样保持不变; 在下椭球前缘上下膨胀区, 计算值低于实验值, 原因是此处壁面压力沿流向变化较大, 应考虑壁面流向网格尺度对壁面热流的影响; 在上下椭球前部相交区, 计算值低于实验值, 原因是那里的壁面热流不高, 对激波 / 边界层干扰诱导边界层分离现象相对敏感, 数值计算具有一定困难. 图 6 是 $\alpha = -5^\circ, 10^\circ, 20^\circ$ 时, 不同 φ 子午线和不同 x 截面上壁面热流的计算值与实验值的对比, 总体上也符合得较好.

以上 4 组攻角高超声速双椭球绕流算例的对比结果表明, 按照 MFP 准则确定壁面法向网格尺度, 进而生成相应网格, 对于三维复杂外形的壁面热流数值计算是适用的.

图 5 壁面热流计算值与实验值对比 ($\alpha = 0^\circ$)Fig.5 Comparison of wall heat fluxes between computations and experiments ($\alpha = 0^\circ$)

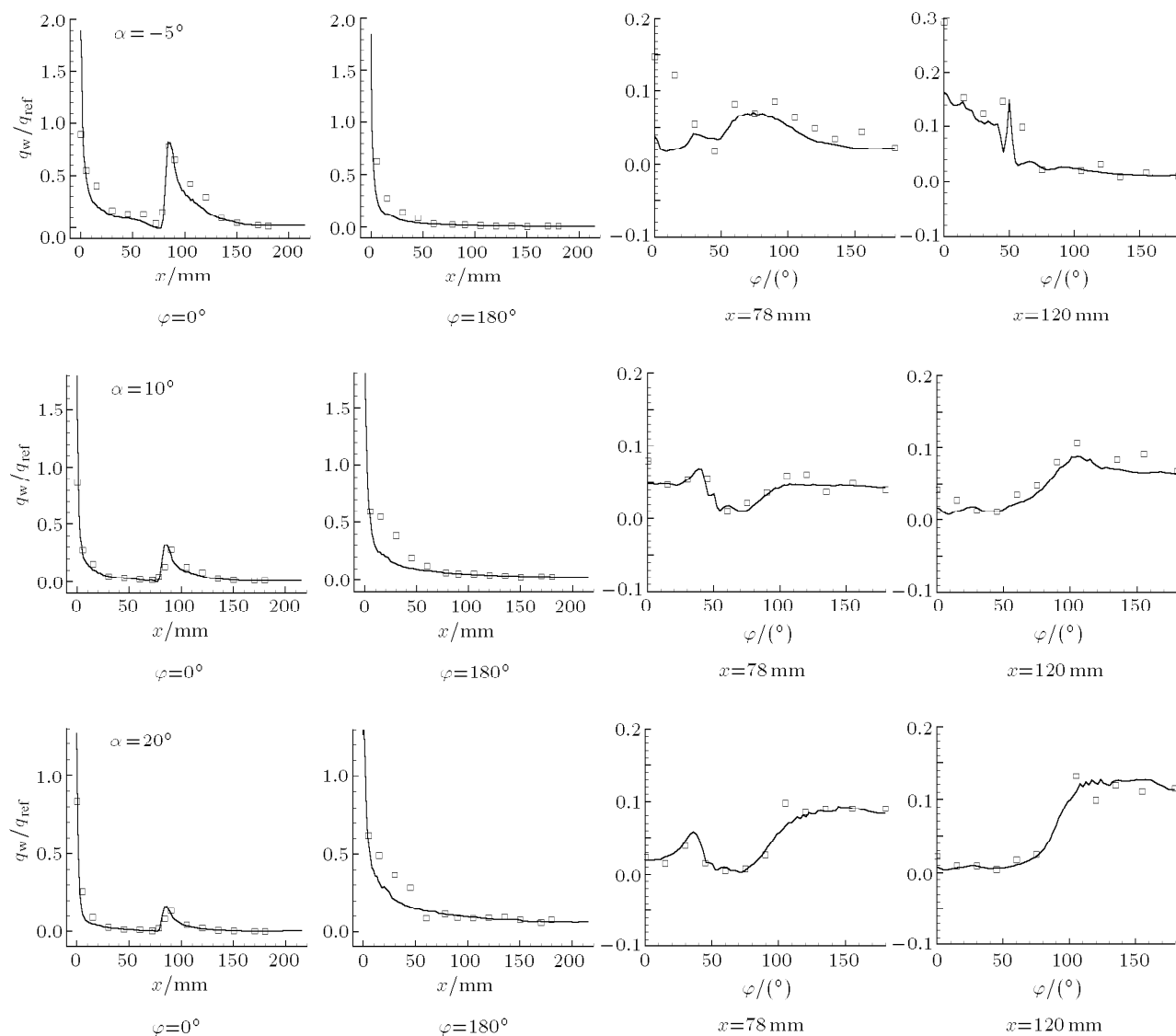


图 6 不同攻角下壁面热流计算值与实验值对比

Fig.6 Comparison of wall heat fluxes between computations and experiments at different angle of attacks

4 结 论

针对壁面热流 Navier-Stokes 方程数值计算中壁面法向网格尺度的设置问题, 采用气体分子物理学的微观统计分析方法, 指出气体分子平均自由程是壁面法向网格尺度最优下限的约束条件, 进而建立了一个新的壁面法向网格尺度准则——MFP 准则, 并给出了其应用形式及简化形式. 该准则的主要特点是: 物理意义明确, 形式简单, 易于实现; 只依赖于壁面局部参数, 对复杂流动问题的适应性强. 以 3 个高超声速壁面热流算例, 通过与实验结果的对比分析, 验证了 MFP 准则的可靠性和有效性. 当计算网格满足 MFP 准则时, 离散方法和数值格式的影响显著减弱.

尽管 MFP 准则得到了实验结果的对比验证, 也

不乏研究者在经验上将壁面法向网格尺度设置为接近或达到气体分子平均自由程量级, 但在理论上, 根据气体连续介质假设, 宏观物理量应具有稳定性. 因此, 尚存的问题是: 气体分子平均自由程尺度下, 宏观物理量的微观统计涨落是否可以近似忽略? 或者, 流体质点的尺度是否可与气体分子平均自由程量级相近?

此外, 高超声速双椭球复杂外形绕流的计算结果表明, 对于存在膨胀和分离等流向大梯度变化的高速边界层流动, 在壁面热流数值计算网格生成时, 如何计及壁面流向网格尺度的影响也是 MFP 准则尚待完善的内容.

致谢 第 3.1 节中的部分数值计算分别由中国航天空气动力技术研究院第一研究所气动热物理研究

室的苗文博、潘宏禄、张亮、陈思员、孙震等完成, 在此表示衷心感谢。

参 考 文 献

- 1 Dorsey JT, Poteet CC, Chen RR, et al. Metallic thermal protection system technology development: concepts, requirements and assessment overview. AIAA Paper 2002-0502, 2002
- 2 David RO, Henline WD. Numerical benchmarks for Navier-Stokes heating calculations on access to space vehicles. AIAA Paper 95-2078, 1995
- 3 Siddiqui MS, Hoffmann KA, Chiang ST, et al. A comparative study of the Navier-Stokes solvers with emphasis on the heat transfer computations of high speed flows. AIAA Paper 92-0835, 1992
- 4 Hoffmann KA, Siddiqui MS, Chiang ST. Difficulties associated with the heat flux computations of high speed flows by the Navier-Stokes equations. AIAA Paper 91-0457, 1991
- 5 Klopfer GH, Yee HC. Viscous hypersonic shock-on-shock interaction on blunt cowl lips. AIAA Paper 88-0233, 1988
- 6 阎超, 禹建军, 李君哲. 热流 CFD 计算中格式和网格效应若干问题研究. 空气动力学学报, 2006, 24(1): 125-130 (Yan Chao, Yu Jianjun, Li Junzhe. Scheme effect and grid dependency in CFD computations of heat transfer. *Acta Aerodynamica Sinica*, 2006, 24(1): 125-130 (in Chinese))
- 7 Vincenti WG, Kruger GH. Introduction to Physical Gas Dynamics. New York: Wiley, 1965
- 8 Holden MS, Harvey JK. Code validation study of laminar shock / boundary layer and shock / shock interactions in hypersonic flow. Part A: experimental measurements. AIAA Paper 2001-1031, 2001
- 9 Charles GM. Experimental and predicted heating distributions for biconics at incidence in air at Mach 10. NASA TP-2334, 1984
- 10 李素循. 典型外形高超声速流动特性. 北京: 国防工业出版社, 2006. 63-71 (Li Suxun. Characteristics of Hypersonic Flows around Some Modeled Configurations. Beijing: National Defense Industry Press, 2006. 63-71 (in Chinese))

(责任编辑: 周冬冬)

A WALL GRID SCALE CRITERION BASED ON THE MOLECULE MEAN FREE PATH FOR THE WALL HEAT FLUX COMPUTATIONS BY THE NAVIER-STOKES EQUATIONS¹⁾

Cheng Xiaoli Ai Bangcheng Wang Qiang²⁾

(China Academy of Aerospace Aerodynamics, Beijing 100074, China)

Abstract The wall heat flux is a very important physical parameter for the heat protection system design of high-speed vehicles, and its accurate prediction is one of difficult problems in computational fluid dynamics. In this paper, the wall normal grid scale is discussed for the accurate computation of wall heat flux by the Navier-Stokes equations. Firstly, the wall heat flux is analyzed using the micro statistical approach in gas molecule physics, and the analysis shows that the coherent relation between the wall heat flux and the gas molecule mean free path results in the optimal critical limit of the wall normal grid scale. Secondly, a new wall normal grid scale criterion, called MFP (mean free path) criterion for short, is given based on the foregoing theoretical analysis. This criterion with clear thermodynamics sense is simple and easy to be applied, and it only depends on the wall local parameters. Finally, a few different numerical examples are chosen for comparisons to validate the accuracy and the validity of the MFP criterion, namely, a hypersonic flow around a blunt cone at zero angle-of-attack, a hypersonic flow around a blunt bi-cone with and without angle-of-attack, and a hypersonic flow around a double ellipsoid at different angle-of-attacks. The considered numerical methods are finite difference, finite volume, and finite element, and the considered numerical schemes are TVD, WENO, NND, and AUSM-DV. The wall heat fluxes based on the MFP criterion are in well agreement with the relevant experiment data for all of the numerical methods and numerical schemes.

Key words aerothermal environment, heat flux, molecule mean free path, grid scale, numerical calculation

Received 24 July 2009, revised 29 December 2009.

1) The project supported by the Key Research Plan of the National Natural Science Foundation of China (90505015).

2) E-mail: qwang327@163.com