

DOI: 10.7511/jslx20220927002

# 一种分子运动和碰撞双重网格 DSMC 方法研究

刘传瑞, 王学德\*

(南京理工大学 能源与动力工程学院, 南京 210094)

**摘要:** 基于非结构网格与直角网格相结合的策略, 提出一种分子运动和碰撞双重网格 DSMC 实现方法。通过分子的位置坐标信息, 实现运动网格与碰撞网格信息交互, 从而结合非结构网格的贴体性和直角网格易于控制子网格数量的优点, 同时提出并实现了基于 MCS 自适应的动态子网格技术以有效限制分子平均碰撞距离, 提高了 DSMC 方法的通用性和计算精度。通过对超声速圆柱绕流和扩张管道的数值模拟, 验证该方法的有效性和高精度。数值结果表明, 本文提出的基于分子运动和碰撞双重网格的 DSMC 方法提高了流场的分辨率, 且通过基于 MCS 自适应的动态子网格技术, 有效地降低了流场的平均碰撞距离, 提高了碰撞质量和计算精度。

**关键词:** 双重网格; 直接模拟蒙特卡洛; 平均碰撞距离; 静态子网格技术; 自适应动态子网格技术

中图分类号: V448.2; O242.2

文献标志码: A

文章编号: 1007-4708(2024)03-0550-06

## 1 引言

随着现代航天技术的快速发展, 高超声速流动问题成为当今流体力学求解的热点<sup>[1-3]</sup>。高超声速飞行器穿越大气层时会经历严重的稀薄气体环境, 对飞行器流场特性造成很大程度的影响, 稀薄流域问题的求解变得愈发重要。经过几十年的不断发展, 直接模拟蒙特卡洛 DSMC(Direct Simulation Monte Carlo)方法已在稀薄流域问题的求解上得到广泛应用。DSMC 在求解过程中需要对宏观流场进行空间离散, 离散网格主要用于分子碰撞取样和流场性质统计, 网格类型也会影响计算速度和精度。

目前 DSMC 的应用中, 主要采用的网格分为直角网格、结构网格和非结构网格三类。Bird<sup>[4]</sup>提出的直角网格生成方法简单, 在此基础上, Bird<sup>[5]</sup>又提出子网格技术, 通过限制分子碰撞对选取区域, 降低平均碰撞距离(mean collision separation, MCS), 提高计算精度, 缺点是无法满足外形不规则的飞行器贴体性的要求。文献[6,7]对结构网格进行了深入研究, 结构网格贴体性较好, 但对于外形不规则的飞行器, 网格生成和分子轨迹追踪较为复杂, 计算效率低。Laux 等<sup>[8]</sup>提出的非结构网格

具有生成速度快, 贴体性良好的优点, 缺点在于其不利于子网格技术的拓展, 不能有效限制分子间的平均碰撞距离。三种网格技术各有优劣, 如何对网格技术进行改进以提高其适用性成为 DSMC 研究的热点<sup>[9-13]</sup>。由于非结构网格拓扑结构的无序性和流场发展过程中 MCS 的动态变化性, 到目前为止, 还没有一种通用的限制平均碰撞距离的有效方法, 过大的 MCS 意味着不合理的碰撞对选取概率增加, 造成计算精度降低。

为解决上述困难和问题, 本文提出了一种分子运动和碰撞双重网格 DSMC 方法, 采用基于非结构网格与直角网格相结合的策略, 将非结构网格贴体性的优点和直角网格易于子网格技术拓展的优点充分结合, 同时提出了动态子网格技术, 限制分子间的 MCS, 从而达到提高通用性和计算精度的目的。

## 2 双重网格 DSMC 基本思想

双重网格 DSMC 方法的基本思想是将分子运动和碰撞过程分别置于不同网格类型进行, 以充分发挥各自类型网格优点。运动网格采用非结构网格, 以满足计算域内不规则外形贴体性的要求, 在

收稿日期: 2022-09-27; 修改稿收到日期: 2022-01-03.

基金项目: 军委科技委基础加强重点项目(2020-JCJQ-ZD-111)资助.

作者简介: 王学德\*(1977-), 男, 副教授, 硕士生导师(E-mail: wangxuede2000@njust.edu.cn).

引用本文: 刘传瑞, 王学德. 一种分子运动和碰撞双重网格 DSMC 方法研究[J]. 计算力学学报, 2024, 41(3): 550-555.

LIU Chuan-rui, WANG Xue-de. A DSMC implement method of a hybrid grid of molecular motion and collision [J]. Chinese Journal of Computational Mechanics, 2024, 41(3): 550-555.

运动网格上完成分子运动的迁移和与边界的作用以及宏观性质的统计,以实时呈现气体流动的计算演进。碰撞网格采用直角网格,覆盖整个计算区域,只需对有分子的碰撞网格单元引入子网格技术,进行分子碰撞对的选取和能量分配,无需对复杂边界进行切割处理,避免繁琐的外形处理过程,解决了直角网格无法满足不规则外形贴体性的困难。

在 DSMC 模拟过程中,首先,分子经过一个时间步长获得唯一的位置信息,通过分子的始末位置坐标确定其在运动网格和碰撞网格中的网格序号,实现双重网格的信息交互。分子的碰撞网格序号根据其在运动网格下的运动情况进行判定,实现了碰撞网格与运动网格信息的交互,确保了分子网格信息传递的准确性。其次,利用分子在运动网格中与边界的作用信息,作为其在碰撞网格中与物理边界发生作用的确定性判据,实现分子碰撞网格与边界作用信息的传递。最后,根据碰撞网格信息完成分子间碰撞对选取及能量分配,在运动网格完成流场宏观性质取样和输出。

这种基于分子运动和碰撞双重网格结合的策略,能够保证在不增加算法时间复杂度的情况下,将直角网格中的子网格技术应用到非结构网格中,使得直角网格子网格技术得以拓展,并发挥了非结构网格贴体性的优势并保留了直角网格的高精度计算特点,从而提高算法的通用性和计算精度。

### 3 双重网格分子位置判定方法

分子在一个时间步长内做匀速直线运动,在二维空间中始末位置变化为

$$X_1 = X_0 + V_x \cdot \Delta T, Y_1 = Y_0 + V_y \cdot \Delta T \quad (1)$$

式中  $(X_0, Y_0)$  为该时间步长内分子初始位置坐标,  $(X_1, Y_1)$  为末位置坐标,  $V_x$  和  $V_y$  为初始速度。在双重网格 DSMC 方法中,分子有两种网格信息,一是运动网格信息;二是碰撞网格信息。在运动网格中,通过有向面积法确定分子运动后的网格序号。由于运动网格拓扑结构的无序性,分子轨迹的追踪和确定其在网格之间的迁移变得非常困难,现有直角网格 DSMC 方法中的搜索方法不能移植到非结构网格上来。本文 DSMC 方法运用有向面积法来跟踪分子的运动迁移和确定运动网格序号,获得网格信息。

碰撞网格覆盖整个计算域,因其无需进行边界处理,所以生成过程简单而直接。设网格尺寸在  $X$  和  $Y$  方向均匀分布,  $C_x$  和  $C_y$  分别为分子所在列数

和行数,  $N_x$  和  $N_y$  分别为  $X$  和  $Y$  方向碰撞网格数,根据坐标利用位置元的搜索方法确定网格序号。具体判定方法为

$$C_x = (X_1 - L) \cdot N_x / W + 1 \quad (2)$$

$$C_y = (Y_1 - B) \cdot N_y / H + 1 \quad (2)$$

$$C = (C_y - 1) \cdot N_x + C_x \quad (3)$$

式中  $L$  和  $B$  分别为计算域的左边界横坐标和下边界纵坐标,  $W$  和  $H$  分别为计算域的宽度和高度,  $C$  为碰撞网格序号, 在计算过程中, 只保留小数点前的整数部分。子网格的判定方式同理。分子碰撞网格判定如图 1 所示, 根据式(2,3)快速定位分子的碰撞网格。

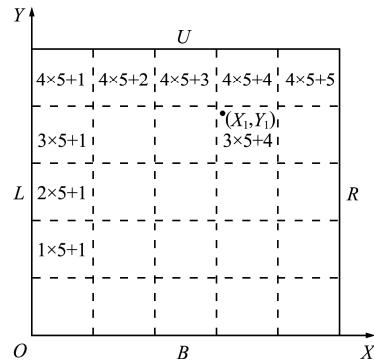


图 1 分子碰撞网格判定 ( $N_x=5, N_y=5$ )

Fig. 1 Molecular collision grid location ( $N_x=5, N_y=5$ )

## 4 子网格技术

### 4.1 静态子网格技术

本文提出的一种分子运动和碰撞双重网格 DSMC 方法充分发挥直角网格易于子网格技术拓展的优点,通过增加碰撞网格单元的子网格数来限制分子间的 MCS, 其表达式为

$$D_i = \sum \sqrt{(X_L - X_M)^2 + (Y_L - Y_M)^2} / O_i \quad (4)$$

式中  $L$  和  $M$  为一组碰撞对的两个碰撞分子,  $X$  和  $Y$  分别为碰撞分子的坐标,  $O_i$  为网格  $i$  内的总碰撞次数,  $D_i$  为平均碰撞距离。

为了确定不同子网格数对流场不同密度区域 MCS 的影响,给定  $X$  和  $Y$  方向统一的子网格数,如  $3 \times 3, 5 \times 5$  和  $7 \times 7$  等,运用双重网格 DSMC 方法对超声速圆柱绕流<sup>[14]</sup> 进行模拟,得到驻点线上 MCS 随子网格数变化曲线,如图 2 所示。

可以看出,驻点线激波前 MCS 均匀不变,但不同子网格数下 MCS 值不同,且呈现了随子网格数增加, MCS 先降低后升高的趋势,均匀流场 MCS 存在最小值;激波后由于密度增加, MCS 随着子网格数增加一直降低,表明算例中所取子网格数仍未有效限制非均匀区域流场的 MCS。这是因

为随着子网格数增加,激波前单个子网格中分子数量减小,有效碰撞对数不足,从而造成 MCS 先降低后升高;激波后密度急剧增高,分子数增多,需要更多的子网格数才能使得 MCS 降到最低。由于激波的存在,流场密度存在较大的梯度变化,统一的子网格数不能很好地限制不同密度区域的 MCS,从而无法合理选取碰撞对,造成碰撞质量较低。为解决此困难,本文提出了自适应的动态子网格技术。

#### 4.2 自适应的动态子网格技术

本文提出的自适应动态子网格技术是基于平均碰撞距离自适应思想,将碰撞对限制在合理的距离范围内以满足近距离的碰撞要求。对不同密度区域的碰撞网格进行子网格划分。动态子网格技术实现方法如下。

(1) 给定碰撞网格单元统一的子网格数( $T_{x,i}=1, T_{y,i}=1$ )、初始平均碰撞距离( $D_{i,\text{old}}=1$ )和网格碰撞属性( $P_i=0$ )。

(2) 运行  $N$  个时间步长后,记录网格单元的平均碰撞距离  $D_{i,\text{new}}$ 。

(3) 当到达假设稳定状态时,判断网格碰撞属性。

(a) 判断  $P_i=0$  的网格单元,若  $D_{i,\text{new}} < D_{i,\text{old}}$ ,则子网格数  $T_{x,i}$  和  $T_{y,i}$  增加,更新网格平均碰撞距离  $D_{i,\text{old}}=D_{i,\text{new}}$ ,初始化相关变量;否则,更新碰撞属性  $P_i=1$ ;按照更新后碰撞子网格数进行流场更新,返回步骤(2)。

(b) 判断  $P_i=1$  的网格单元,若  $D_{i,\text{new}} < D_{i,\text{old}}$ ,更新碰撞属性  $P_i=2$ ;否则,子网格数  $T_{x,i}$  和  $T_{y,i}$  减小,初始化相关变量,更新碰撞属性  $P_i=3$ ;按照更新后碰撞子网格数进行流场更新,返回步骤(2)。

(c) 判断  $P_i=2$  的网格单元,若  $D_{i,\text{new}} < D_{i,\text{old}}$ ,则子网格数  $T_{x,i}$  和  $T_{y,i}$  增加,更新网格平均碰撞距离  $D_{i,\text{old}}=D_{i,\text{new}}$ ,初始化相关变量;否则,子网格数  $T_{x,i}$  和  $T_{y,i}$  减小,初始化相关变量,更新碰撞属性  $P_i=3$ ;按照更新后碰撞子网格数进行流场更新,返回步骤(2)。

(d) 判断  $P_i=3$  的网格单元,停止该碰撞网格子网格数更新。

(4) 当所有碰撞网格单元  $P_i=3$ ,停止子网格自适应,初始化流场,重新计算。

步骤((a)~(c))是对单个碰撞网格前后两次 MCS 进行比较的过程,运用 MCS 自适应探测器进行判断直至找到网格 MCS 极小值对应的子网格数。与静态子网格技术相比,本文方法对不同密度

区域进行子网格数的动态分配,最大程度降低全局平均碰撞距离,提高了碰撞质量和计算精度。

图 2 中 SAS(self-adaptive subgrids)曲线为引入动态子网格技术后,超声速圆柱绕流驻点线上平均碰撞距离变化曲线。可以看出,经过动态子网格自适应后,不同密度区域的平均碰撞距离都得到了有效的限制,从而使得分子碰撞对的选取更具合理性,能够提高碰撞质量。

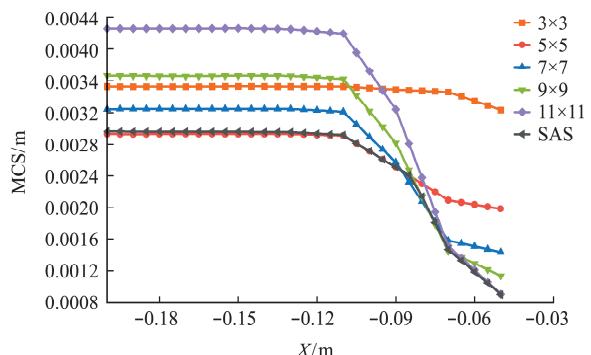


图 2 流场驻点线上平均碰撞距离变化曲线

Fig. 2 Mean collision separation curve of flowfield's stagnation line

## 5 算例与验证

为了验证上述方法的正确性,本文对高超声速圆柱绕流和扩张管道绕流现象进行数值模拟,并对数值结果进行了简单的分析。

### 5.1 高超声速圆柱绕流

计算模型来自文献[14],对圆柱进行二维非结构网格生成,计算区域为  $(-0.4 \text{ m}, 0.4 \text{ m}) \times (-0.4 \text{ m}, 0.4 \text{ m})$ ,圆球的直径为  $0.1 \text{ m}$ 。其中,运动网格单元数为 15907,如图 3 所示,碰撞网格单元数为 1600,如图 4 所示。来流气体为  $N_2$ ,计算条件列入表 1。

表 1 圆柱绕流来流条件

Tab. 1 Incoming condition of the cylinder

$n_\infty / 1 \cdot \text{m}^{-3}$	$T_\infty / \text{K}$	$U_\infty / \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	$T_w / \text{K}$	$\lambda_\infty / \text{m}$
$5.0 \times 10^{20}$	273.0	2000.0	300.0	0.00052

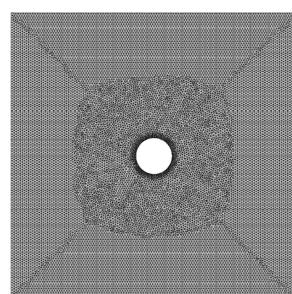


图 3 圆柱绕流运动网格  
Fig. 3 Moving grids of the cylinder

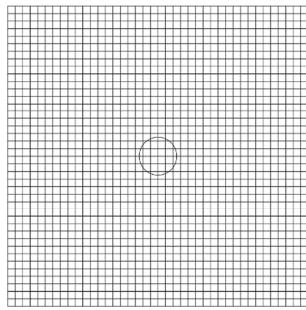


图 4 圆柱绕流碰撞网格  
Fig. 4 Collision grids of the cylinder

引入自适应子网格前后流场温度分布云图如图 5 所示。圆柱的迎风面前端产生了明显的脱体激波,在激波的强烈压缩作用下温度迅速升高,由于冷温壁效应,高温中心并不位于贴壁处,壁面处的流场温度等于冷温壁的温度。当碰撞网格中不引入子网格,尽管能捕捉到脱体激波,但流场温度分布均匀性和过渡性差,分辨率低,流场计算精度不高。采用动态子网格技术后,流场分布的均匀性和过渡性更好,分辨率和计算精度得到提高。

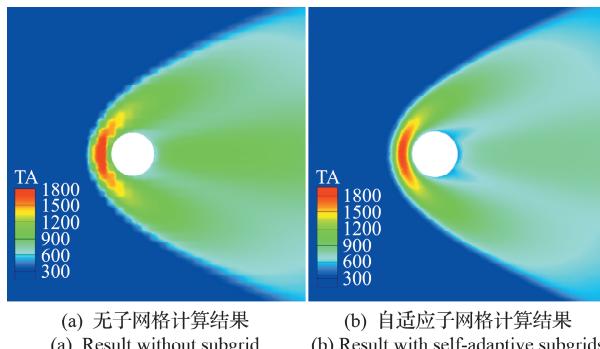


图 5 圆柱绕流温度分布云图  
Fig. 5 Contours of flow temperature distribution around the cylinder

## 5.2 二维扩张管道绕流

为了进一步验证分子运动和碰撞双重网格 DSMC 算法高精度性,本文选择了具有实验数据对比的二维扩张管道模型进行数值模拟,模型来自文献[15],如图 6 所示。

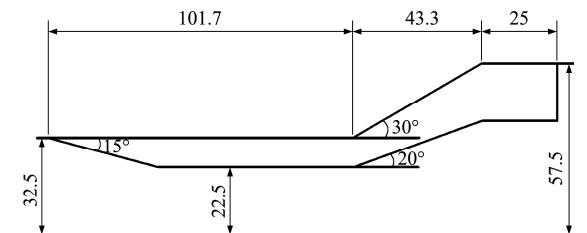


图 6 二维扩张管道模型(单位:mm)  
Fig. 6 2D expanding pipeline (unit:mm)

计算域为  $(-0.05 \text{ m}, 0.20 \text{ m}) \times (0.00 \text{ m}, 0.10 \text{ m})$ , 上边界以及左右边界取来流边界, 下边界取为对称边界。来流气体为氮气和氧气组成的混合气体, 其所占百分比为 0.763:0.237, 计算条件列入表 2。

表 2 扩张管道绕流来流条件  
Tab. 2 Incoming condition of the expanding pipeline

$n_{\infty}/1 \cdot \text{m}^{-3}$	$T_{\infty}/\text{K}$	$U_{\infty}/\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	$T_w/\text{K}$	$\lambda_{\infty}/\text{m}$
$8.95 \times 10^{21}$	51.9	1430.0	295.0	0.0001

不同子网格数及引入动态子网格技术后管道中心线处 MCS 随子网格数变化曲线如图 7 所示, 管道中心线处密度变化曲线如图 8 所示。可以看出, 中心线前半段处于几乎不受激波影响的低密度区域, 后半段处于激波后较高密度区域。无论是低密度区域还是高密度区域, 分子间的平均碰撞距离都得到有效限制, MCS 得以降低, 流场计算精度提高。流场平均碰撞距离的变化规律与密度的变化规律恰好相反, 即随着密度升高, 平均碰撞距离降低, 由此得到平均碰撞距离一定程度上反映出流场密度的变化。

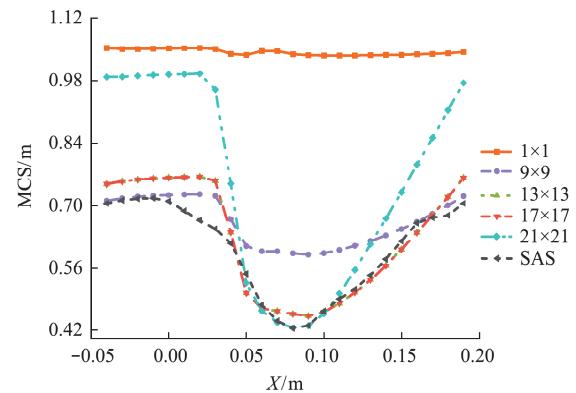


图 7 流场中心线平均碰撞距离变化曲线  
Fig. 7 Curve of centerline's the mean collision separation of flowfield

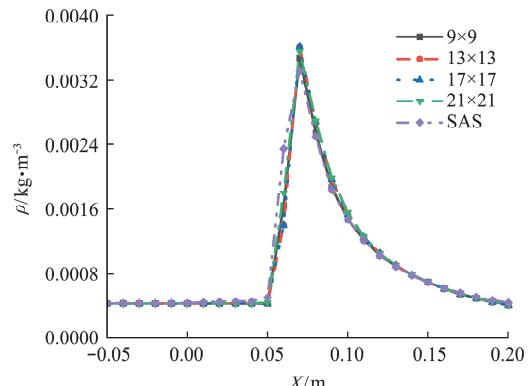


图 8 流场中心线密度曲线  
Fig. 8 Curve of the centerline's density of flowfield

扩张管道外表面压力系数曲线如图9所示,其中,SAS为动态自适应后压力系数曲线,USG为二维非结构网格程序数值压力系数曲线,EXP为试验数据。可以看出,将数值结果与试验数据进行对比,通过分子运动和碰撞双重网格DSMC方法得到的数值结果与文献[15]的试验结果吻合度较高,且加入动态子网格技术后,计算结果更趋近于试验数据。虽然对比结果存在着一定偏差,但是偏差都在合理范围内,也由此验证了方法的正确性。

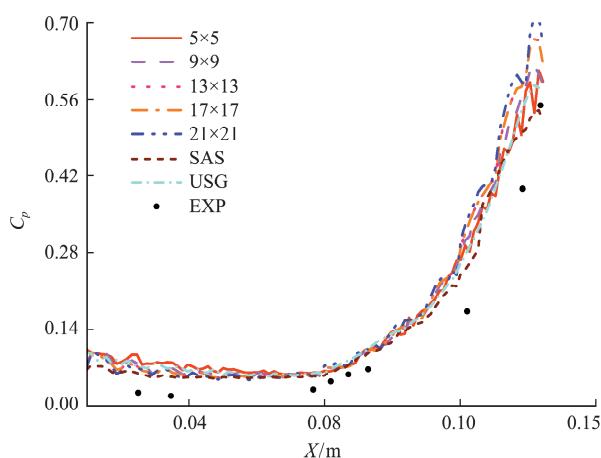


图9 扩张管道外表面压力系数曲线

Fig. 9 Curve of pressure coefficient on the outer surface of the expanding pipeline

## 6 结 论

本文基于非结构网格与直角网格相结合的策略,提出了一种分子运动和碰撞双重网格DSMC实现方法,结合非结构网格贴体性和直角网格易于控制子网格数量的优点,同时提出并实现了基于平均碰撞距离自适应的动态子网格技术以有效限制分子间的平均碰撞距离,提高了DSMC方法的通用性和计算精度。运用双重网格DSMC方法对超声速圆柱绕流和扩张管道进行数值模拟,结果表明,流场计算结果与参考文献提供的结果吻合度较高。本文提出的基于分子运动和碰撞双重网格的DSMC方法能够提高流场分辨率,精准获得流场信息,且通过自适应动态子网格技术,有效降低了流场全局平均碰撞距离,提高了分子间的碰撞质量。引入动态子网格技术后,计算结果与实际结果吻合度更高,提高了计算精度。

## 参考文献(References):

- [1] 赵鹏刚,刘振,党天骄,等.地面效应影响下的高速火箭橇气动特性数值与风洞试验研究[J].计算力学

学报,2023,40(2):314-322. (ZHAO Peng-gang, LIU Zhen, DANG Tian-jiao, et al. Numerical and wind tunnel test research on aerodynamic characteristics of high-speed rocket sled under the influence of ground effect[J]. *Chinese Journal of Computational Mechanics*, 2023, 40(2):314-322. (in Chinese))

- [2] 张培红,贾洪印,郭勇颜,等.基于Flowstar软件的栅格舵气动特性模拟[J].计算力学学报,2022,39(4):531-538. (ZHANG Pei-hong, JIA Hong-yin, GUO Yong-yan, et al. Aerodynamic characteristics simulation of grid rudder using FlowStar software[J]. *Chinese Journal of Computational Mechanics*, 2022, 39(4):531-538. (in Chinese))
- [3] 张兵,许辉,韩景龙,等.高超声速舵面颤振的数值模拟影响因素研究[J].计算力学学报,2019,36(1):43-51. (ZHANG Bing, XU Hui, HAN Jing-long, et al. Study on influencing factors of the flutter numerical simulation of hypersonic control surface[J]. *Chinese Journal of Computational Mechanics*, 2019, 36(1):43-51. (in Chinese))
- [4] Bird G A. Application of the direct simulation Monte Carlo method to the full shuttle geometry [A]. 5<sup>th</sup> Joint Thermophysics and Heat Transfer Conference [C]. 1990.
- [5] Bird G A. *The DSMC Method* [M]. Create Space Independent Publishing Platform, 2013.
- [6] Celenligil M, Moss J, Blanchard R. Three-dimensional flow simulation about the AFE vehicle in the transitional regime [A]. 27<sup>th</sup> Aerospace Sciences Meeting [C]. 1989.
- [7] 汤继斌,钟诚文.一种基于结构化贴体网格的DSMC方法研究[J].航空计算技术,2005,35(2):57-61. (TANG Ji-bin, ZHONG Cheng-wen. A direct simulation Monte Carlo (DSMC) method based on structured body-fitted grids [J]. *Aeronautical Computer Technique*, 2005, 35(2):57-61. (in Chinese))
- [8] Laux M, Fasoulas S, Messerschmid E. Development of a DSMC code on planar unstructured grids with automatic grid adaptation [A]. 30<sup>th</sup> Thermophysics Conference[C]. 1995.
- [9] 周士杰,夏健,陈晓霞,等.基于切割单元直角坐标网格的DSMC方法及优化技术[J].南京航空航天大学学报,2016,48(4):486-494. (ZHOU Shi-jie, XIA Jian, CHEN Xiao-xia, et al. DSMC method and optimization techniques for cut-cell cartesion mesh [J]. *Journal of Nanjing University of Aeronautics & Astronautics*, 2016, 48(4):486-494. (in Chinese))
- [10] Bird G A. Forty years of DSMC, and now? [A]. 22<sup>nd</sup> International Symposium of Rarefied Gas Dynamics

- [C]. 2000.
- [11] 黄飞,陈智,程晓丽,等.一种基于自适应碰撞距离的 DSMC 虚拟子网格方法[J].空气动力学报,2014,32(4):506-510. (HUANG Fei, CHEN Zhi, CHENG Xiao-li, et al. A virtual sub-cells technique with transient adaptive collision distance for the DSMC method[J]. Acta Aerodynamica Sinica, 2014, 32(4):506-510. (in Chinese))
- [12] 王学德,伍贻兆,夏健,等.二维自适应非结构网格 DSMC 并行算法研究[J].计算力学学报,2009,26(2):276-281. (WANG Xue-de, WU Yi-zhao, XIA Jian, et al. A parallel DSMC method using 2D self-adaptive unstructured meshes[J]. Chinese Journal of Computational Mechanics, 2009, 26(2):276-281. (in Chinese))
- [13] 黄飞,靳旭红,赵波,等.大尺度网格下 DSMC 仿真碰撞概率的修正方法[J].计算力学学报,2015,32(1):21-26. (HUANG Fei, JIN Xu-hong, ZHAO Bo, et al. A modification technique of collision probability on coarse grid in the direct simulation Monte Carlo method[J]. Chinese Journal of Computational Mechanics, 2015,32(1):21-26. (in Chinese))
- [14] 王学德.高超声速稀薄气流非结构网格 DSMC 及并行算法研究[D].南京航空航天大学,2006. (WANG Xue-de. DSMC Method on Unstructured Grids for Hypersonic Rarefied Gas Flow and Its Parallelization [D]. Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, 2006. (in Chinese))
- [15] Chanetz B. Study of Axis-symmetric Shock Wave Boundary Layer Interaction in Hypersonic Laminar Flow [R]. ONERA Technical Report RT 42/4362 AN, 1995.

## A DSMC implement method of a hybrid grid of molecular motion and collision

LIU Chuan-rui, WANG Xue-de\*

(School of Energy and Power Engineering, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing 210094, China)

**Abstract:** Based on the strategy of combining unstructured grid with Cartesian grid, a double grid DSMC method for molecular motion and collision is proposed. Through the position information of molecules, the contact between the moving grid and the collision grid is established, which combines the body-fitting of an unstructured grid and the advantage of being easy to control the number of subgrids of a Cartesian grid. At the same time, a technique of dynamic self-adaptation subgrids based on MCS is proposed and implemented to improve the applicability and computational accuracy of the DSMC method, which effectively limits the mean collision separation of molecules. The effectiveness and high precision of the DSMC method are verified by numerical simulation of the flow around a supersonic cylinder and an expanding pipeline. Numerical results show that the resolution of the flow field around the supersonic cylinder can be enhanced through the DSMC method based on molecular motion and collision double grids, and the mean collision separation through the self-adaptive dynamic subgrids technique can be effectively reduced, the collision quality and the calculation accuracy can be improved.

**Key words:** double grid; DSMC; mean collision separation; static technology of subgrids; self-adaptive dynamic technology of subgrids