上海交通大

## SHANGHAI JIAO TONG UNIVERSITY

# 学士学位论文

## THESIS OF BACHELOR



论文题目 针对超燃高效混合喷注设计的 RMI 普适相似定律研究

学生	姓名	刘昊辰
学生	学号_	515021910190
指导	教师	徐辉
专	业	航空航天工程
学院	(系)	航空航天学院

Submitted in total fulfilment of the requirements for the degree of Bachelor in Aeronautics and Astronautics Engineering

# A study on the unified similarity law of the Richtmyer-Meshkov instability for shock induced mixing enhancement in scramjet

HAOCHEN LIU

Supervisor Hui Xu

School of Aeronautics and Astronautics Shanghai Jiao Tong University Shanghai, P.R.China

June. 2019



### 针对超燃高效混合喷注设计的 RMI 普适相似定律研究

### 摘 要

本文主要基于超燃冲压发动机燃烧室内激波诱导的油气混合增强的应用背景,研究 了激波与气体界面的相互作用不稳定性 (RMI) 问题。本文从理论分析以及数值模拟两方 面,对该问题进行了较为详细的研究。

在理论分析方面,我们研究了微尺度条件下涡量传输方程的适用性,并给出了其中粘 性项的原始表达式以及传统人们常用的简化形式。接着我们从理论上推导得到了 RMI 问 题中环量沉积的解析式。现有的全部环量模型都是本文提出的环量模型的简化形式或是等 效变形,做到了环量模型方面的理论统一。更重要的是,本文给出了 RMI 问题中环量沉 积来源中粘性项的具体大小。这是前人研究中所未能实现的。我们基于双速度理论给出了 计算环量沉积粘性项的 TNSF 模型,并指出前人关于粘性影响的忽略以及认为其对环量沉 积产生消极影响是不正确的。我们还进一步将粘性项分解为了对环量沉积产生积极影响的 "粘性生成项"以及产生消极影响的"粘性耗散项"以研究粘性项的影响机制。理论推导 部分的所有内容都经过了数值模拟的详细验证,结果表明,我们得出的关于微尺度条件下 涡量传输方程粘性项的结论是真实的,我们推导得出的环量模型以及环量沉积粘性项解析 解也是准确可靠的。

在数值模拟部分,本文研究问题的特殊性决定了本文需要采用 DSMC 的数值模拟方 法进行模拟。本文分析研究了在微尺度条件下 RMI 问题的演化特征。主要是从流场特征、 涡量场特征、环量与涡拟能特征的角度进行的分析与研究,发现了在微尺度下,流动相似 定律失效的现象。基于对于涡量耗散与扩散的定性分析,我们进一步通过对该问题中涡量 场的 Gauss 分布拟合,引入了新的定量化反映涡量扩散程度的参数 σ。通过对该参数的研 究,我们定量化地得出了尺度越小、涡量的扩散程度越强的重要结论。符合我们前面定性 研究中得到的结论。

关键词: 激波诱导不稳定性, 环量沉积, 微尺度流动, 涡量扩散与耗散

## A study on the unified similarity law of the Richtmyer-Meshkov instability for shock induced mixing enhancement in scramjet

### ABSTRACT

The Richtmyer-Meshkov instability for shock induced mixing enhancement in scramjet was investigated theoretically and numerically.

In the aspect of theoretically investigation, we analysed the availability of the vorticity transport equation under micro-scale. The viscous source and its simplification was studied theoretically. Additionally, we provided a new model for the prediction of the circulation deposition. The previous models are either simplifications or transformations of our new model.

More importantly, the significant contribution of viscous source to the total circulation rate is investigated. A new model for the prediction of the magnitude of viscous source is derived theoretically based on the basic conservation equations across a single shock wave and the twovelocity modification of the classical Navier-Stokes-Fourier equation set. In spite of the ignoring of the viscous source in many previous studies, the present investigation shows that the viscous source have significant contribution to the circulation deposition. We further divided it into the viscous generation term and the viscous dissipation term to reveal the actual effects of the viscous source in circulation deposition.

All the theoretical investigations are validated and verified by numerical simulations, which illustrated the validity, availability and accuracy of them.

As for the numerical simulation part, the direct simulation Monte Carlo (DSMC) method was employed. The Richtmyer-Meshkov instability in micro-scale was numerically simulated and investigated comprehensively. We mainly focus on the evolution of the flow configuration, vorticity field, circulation and enstrophy in different scales. The break down of the similarity in small scale is noticed and studied. Based on the qualitatively view of the dissipation and diffusion of the vorticity, we further utilized the Gauss distribution to fit the vorticity distribution in our problem. The introduction of a new parameter  $\sigma$  enables us to study the vorticity diffusion quantitatively. We found that the change in scale will not change the magnitude of dissipation significantly, but will affect the magnitude of diffusion remarkably.

**KEY WORDS:** the Richtmyer-Meshkov instability, circulation deposition, microscale flow, vorticity diffusion and dissipation



第一章	绪论	1
1.1	研究意义	1
	1.1.1 学术意义	2
	1.1.2 工程背景	4
1.2	研究方法	7
1.3	研究现状	8
1.4	研究思路与章节安排	10
第二章	理论分析	11
2.1	涡量传输方程及其简化形式	11
2.2	RMI 问题中的环量模型	12
	2.2.1 基本思想方法	12
	2.2.2 单个激波问题	14
2.3	环量沉积过程中粘性项的贡献	17
	2.3.1 基于 Navier-Stokes-Fourier 方程组的模型	17
	2.3.2 NSF 模型的修正与改进	18
	2.3.3 粘性项的影响分析及其分解	21
2.4	本章小结	22
第三章	数值模拟研究方法	24
3.1	<b>DSMC</b> 数值方法概述	24
3.2	DSMC 算法与 NS 方程求解算法的关系	25
3.3	<b>DSMC</b> 算法求解方式	26
	3.3.1 一维定常激波问题 DSMC 求解算法	26
	<b>3.3.2</b> 二维非定常 <b>DSMC</b> 求解算法	28
3.4	本章小结	29



第四章	微尺度	RMI 演化特征	30
4.1	算例设	置	30
	4.1.1	问题描述	30
	4.1.2	数值方法的选取	31
	4.1.3	参数设置	32
4.2	流场演	化特征	33
4.3	涡量场	演化特征	33
	4.3.1	涡量的计算以及降噪处理	35
	4.3.2	结果分析	36
4.4	环量与	涡拟能的演化特征	38
4.5	涡量耗	散与扩散的进一步分析	39
4.6	本章小	结	42
第五章	理论验	证分析	44
5.1	微尺度	涡量传输方程验证分析	44
	5.1.1	微尺度下本构方程的验证	44
	5.1.2	微尺度下环量传输粘性项的验证	45
5.2	单个激	波问题的数值验证	48
	5.2.1	环量函数的数值验证	48
	5.2.2	TNSF 模型的数值验证	49
	5.2.3	粘性项函数的数值验证	51
5.3	本章小	结	52
全文总结	ŧ		54
参考文南	ť		56
致谢			64
攻读学位	立期间发	表的学术论文目录	65



## 表格索引

4–1	不同算例的时间空间信息			 •			•	•	•			•			•	•		32
4–2	算例 1-5 的 R <sup>2</sup> 平均值	•	•	 •			•	•	•		•	•			•	•		42



## 插图索引

1–1	Richtmyer-Meshkov 不稳定性示意图	1
1–2	RMI 后期的湍流化发展	3
1–3	高超声速飞行器的应用场景示意图	4
1–4	超燃冲压发动机示意图	5
1–5	多种激波诱导的混合增强示意图	6
1–6	基于守恒方程与基于粒子运动的数值模拟方法对比	7
1–7	研究思路图	10
2–1	典型的激波与气体界面或气泡相互作用问题示意图 1	13
2–2	单个激波问题示意图 1	14
3–1	定常 DSMC 采样策略示意图 2	27
3–2	非定常 DSMC 采样策略示意图 2	28
4–1	数值模拟研究问题示意图 3	30
4–2	激波与气体界面作用过程中的局部 Knudsen 数	32
4–3	不同尺度下不同时刻的流动结构 3	34
4–4	不同尺度下不同时刻的流动结构 3	34
4–5	涡量场的降噪处理结果演示 3	36
4–6	不同尺度不同时刻的涡量场 3	37
4–7	计算环量与涡拟能积分区域的选取 3	39
4–8	不同算例环量与涡拟能随时间的演化 4	40
4–9	不同算例涡心位置随时间的变化 4	41
4–10	涡量场 Gauss 分布拟合示意图以及结果 4	42
4–11	不同算例 <del>。</del> 随时间的变化 4	13
5–1	不同算例基于本构方程与粒子运动的粘性应力张量对比 4	46
5–2	不同算例斜压项与粘性项之和与环量变化率真实值对比 4	17
5–3	涡量传输粘性项简化形式适用性验证 4	18
5–4	单个激波环量方程的验证 4	19

第 vi 页 共 64 页



5–5	激波内部动量、能量守恒方程验证	50
5–6	NSF 模型与 TNSF 模型关于"密度-粘性应力"关系的对比验证	51
5–7	NSF 模型与 TNSF 模型关于粘性项函数的对比验证	52



### 第一章 绪论

#### 1.1 研究意义

若空间中存在两种密度不同的流体,在两种流体交界的位置会存在一个一定形状的界面。若此时对其施加一个持续的加速度,如重力,那么该气体界面上会发生一系列不稳定性演化过程,在一些情况下,会发生湍流化发展。该不稳定性问题被称为 Rayleigh-Taylor 不稳定性(RTI),分别以两位该问题上的先驱研究者 Rayleigh<sup>[1]</sup>和 Taylor<sup>[2]</sup>命名。

若上述 RTI 问题中,加速度并非连续的加速度,而为一个脉冲加速度,比如当激波 扫过该气体界面时,该不稳定性问题被称为 Richtmyer–Meshkov 不稳定性,如图1–1所示。 在历史上, Richtmyer 首先在理论上引入并研究了激波诱导的气体界面不稳定性<sup>[3]</sup>,他基 于脉冲加速的 Rayleigh-Taylor 不稳定性模拟了冲击驱动的界面不稳定性。通过激波管实 验, Meshkov 首先验证了 Richtmyer 的理论预测,并获得了与理论令人满意的一致性实验 结果<sup>[4]</sup>。



图 1-1 Richtmyer-Meshkov 不稳定性示意图

对 RMI 问题的详细研究与更加深入的理解有着十分重要的意义与价值,同时也有着 广泛的应用背景。

首先, RMI 问题广泛存在于自然界之中,因此对它的研究有助于我们更加深入地认 识这些自然现象,甚至加以利用。比如在激波与磁气圈相互作用<sup>[5,6]</sup> 以及超新星爆发的过 程<sup>[7,8]</sup> 中存在着 RMI 问题。

RMI 问题在工程界的应用背景十分广泛。RMI 问题的不稳定性机理可以被用于促进 超声速流动的混合<sup>[9-11]</sup>。RMI 问题还存在于激波与预混火焰相互作用<sup>[12, 13]</sup>、激波与非预混 化学反应流动相互作用<sup>[14, 15]</sup>、流体微尺度动力学下的激光与材料相互作用<sup>[16, 17]</sup>之中。近 些年,在"固-液"、"固-固"介质中的 RMI 问题也得到了十分广泛的关注<sup>[18, 19]</sup>。另外, 在球形 TNT 爆炸的过程中也存在着 RMI 问题。Brode 首先进行了该问题中一维层流情况



下的计算<sup>[20]</sup>,但研究表明在三维情况下,其会湍流化发展<sup>[21]</sup>。RMI问题在惯性约束聚变 (ICF)<sup>[22]</sup>中也有着十分广泛的应用背景。

关于 RMI 问题应用背景的详细介绍可以参考综述类文献<sup>[23-26]</sup>,本文不做过多的发散 性展开赘述。下面我们主要介绍本文研究的问题所关注的学术意义(与湍流问题的关系) 以及工程应用背景(超燃冲压发动机)。

#### 1.1.1 学术意义

本研究主要的学术意义即在于有助于人们更加深入地理解湍流问题。本小节主要阐述 RMI 问题与湍流问题的关系。

湍流问题作为公认的经典力学范畴内的最后一个未解之谜,一直以来都是学术界关注 的重点。著名物理学先驱海森堡曾经说过:"如果我见到上帝,我要问他两个问题。一个 是相对论是为什么,一个是湍流是为什么。我相信他只能回答第一个问题。"这足以证明 湍流问题研究中的困难与挑战。

湍流问题研究至今,无数专家学者都提出过里程碑式的理论。其中最为著名的即为 Kolmogorov于 1941 年提出的经典湍流理论<sup>[27,28]</sup>,在湍流研究界被简称为 K41。该理论主 要是基于两个当时学术界公认的假设,分别为:能量耗散率与粘性无关假设以及湍流在不 同尺度下的分离,湍流是均匀、各向同性且稳定的假设。

但随着实验手段、数值模拟方法以及理论分析上的一系列重要突破与进步,上述经典 湍流理论频频遭到质疑,也被发现与实验结果有许多矛盾。关于湍流的研究暴露出越来越 多的难点与问题。这主要包括下面几点。

1. 湍流对初始条件是否具有记忆性。

- 2. 湍流内在的混合增强机制到底是怎样的。
- 3. 密度差异对湍流演化的影响。
- 4. 流体的可压缩性对湍流的影响。
- 5. 湍流各向同性假设的正确性与适用性

6. 激波与湍流相互作用问题。

要想能够在这些难点问题中取得突破,合适的载体问题以及研究手段至关重要。而 RMI 问题就恰恰就是研究湍流的一个很好的载体。首先 RMI 流动问题在演化后期本身就 存在着湍流化发展的趋势,如图1–2所示<sup>[29]</sup>。

更为重要的是,在 RMI 问题中,存在着与上述湍流问题研究难点一一对应的研究重 点,如下:

1. 在 RMI 问题中,也存在着对初始条件的记忆性问题。许多研究都着眼于 RMI 问题 中,流场中后期的演化是否对初始条件存在记忆性问题<sup>[24,30]</sup> 以及初始条件是否会决定流 场最终的全湍流化发展问题<sup>[31]</sup>。



图 1-2 RMI 后期的湍流化发展

2. 在 RMI 问题中,有关于混合度与混合质量的研究也十分广泛,比如有关于演化后 期混合度与混合质量的收敛研究<sup>[32]</sup> 以及有关于可压缩与不可压缩算法在 RMI 演化后期对 混合过程的影响<sup>[33]</sup> 等。这些研究都对于湍流混合增强机制的理解有着重要作用。

3. 在 RMI 问题中,关于界面两侧密度差异的影响研究众多,其主要是反映于  $At = (\rho_2 - \rho_1)/(\rho_2 + \rho_1)$ 之中。研究表明,At 数的差异会影响某一特定 RMI 问题的初始 增长指数<sup>[34]</sup>、演化过程<sup>[32]</sup> 以及混合情况<sup>[35]</sup>。这些研究都能够对应于湍流问题关于密度差 异影响的研究之中。

4. 作为反映流体可压缩性的重要无量纲数,入射激波马赫数的影响在 RMI 问题中也 是研究与关注的重点。Weber 等人指出入射激波马赫数越高,流体的可压缩性越强,从而 导致 RMI 问题中的混合层越薄<sup>[36]</sup>。这对于可压缩湍流问题的研究有着重要的指导意义。

5. 由于 RMI 问题是一道运动的激波扫过气体界面从而诱导出的一系列不稳定性问题, 激波作为一个流体中十分强烈的梯度,其带来的各向异性必将影响后续的演化过程甚至是 湍流化发展。因此利用 RMI 问题来研究湍流的各向同性假设是十分合适的。关于这方面 的研究有很多,甚至存在着矛盾性的结论。比如 Lombardini 等人<sup>[37]</sup> 的研究指出 RMI 问题 末期的演化接近各向同性,然而 Thornber 等人<sup>[32]</sup> 与 Oggian 等人<sup>[33]</sup> 的研究表明其演化末



期流体中仍然保持各向异性。

6. 在 RMI 问题中,若激波在扫过气体界面之后,经过壁面的反射又再次扫过演化之后的混合层,该问题被称为 RMI 的 reshock 问题。该问题即涉及到激波与湍流的相互作用。研究指出<sup>[38, 39]</sup>,激波多次经过混合层,相当于给混合层注入了新的能量并诱导出了更小尺度下的涡量沉积。涡诱导的流动与涡本身的运动导致了 reshock 的混合增强,从而导致整个流场更快的湍流化发展。

综上,可以看出 RMI 问题作为一个重要的流动问题,能够反映出湍流问题的一系列 困难与挑战,以 RMI 问题作为载体研究湍流问题是十分合适的。

#### 1.1.2 工程背景

一直以来,人类的飞天梦都朝着两个方向不断地努力着,即飞得更快与飞得更安全。 人类历史上第一次突破音障距今已有 70 多年。即便如此,人类仍然没有停止对于更快的 空中运输方式的追求。稳定的长距离高超声速飞行器 (*Ma* > 5)持续扮演着航空航天界 举足轻重的研究重点。除了结构强度、热防护系统、气动控制等方面的一系列难题之外, 高超声速飞行器的化学推进系统也是飞行器能够达到高超声速并持续稳定飞行的关键。

早期超声速飞行器 (X-1, X-15) 使用的火箭推进系统航程短、燃烧时间短,因此对 飞行器的使用范围产生了严重的制约。火箭推进系统最大的弊端在于需要携带大量氧化剂 用以燃烧,这相当于浪费了一大部分推力用于给氧化剂加速。因此吸气式高超声速飞行器 才给长距离民用高超声速飞行、长距离快速反应的防御系统以及高发射率低空运载轨道发 射系统提供了潜在可能,如图1–3所示<sup>[40]</sup>。



图 1-3 高超声速飞行器的应用场景示意图

在高超声速的范畴,经典的推进系统,如涡喷、涡扇发动机由于巨大的能量损失、热 负荷等问题便不再适用。对于高超声速飞行器来说,其唯一可用的发动机类型即为超燃冲



压发动机。在超燃冲压发动机中,无需任何旋转部件,空气经过进气系统被自然压缩至高 温高压状态,随后与燃料经过混合在燃烧室内超声速燃烧,如图1-4所示<sup>[40]</sup>。但在如此高 速的流动条件下,混合与燃烧过程并不能很容易地在燃烧室的有效长度内高效进行。Ferri 在 1973 年指出<sup>[41]</sup>,超燃冲压发动机普遍面临的燃烧不充分问题的本质是燃料燃烧速率与 发动机内流速率的不匹配导致的混合不充分问题。燃料通过一个独立的端口被射入燃烧 室,需要在分子层面上进行混合才能保证后续的燃烧过程有效进行,混合的好坏直接决定 了燃烧的优劣,从而直接决定了产生推力的大小。



图 1-4 超燃冲压发动机示意图

在超燃冲压发动机内部会形成一系列复杂的激波、膨胀波系统。燃料与氧化剂燃烧过 程在这样的系统中可能会得到促进,同样也可能会被抑制。上述过程被称为激波诱导的燃 烧过程<sup>[42]</sup>。Curran 等人在 1997 年指出<sup>[43]</sup>,超声速燃烧"流动组织"是燃料高效燃烧的基 础。唯有有效地利用超燃冲压发动你内部的波系结构与燃油、空气的相互作用,才能实现 燃油与氧化剂的充分、高效混合。这种混合增强可以发生于许多不同情况下,如图1-5所 示<sup>[40]</sup>。可以看到,不论是那种激波诱导的混合增强过程,其本质上都是激波与不同种类的 气体相互作用,即 RMI 问题。因此 RMI 问题与超燃冲压发动机燃烧室的混合增强问题关 系十分紧密,对 RMI 问题的深入理解能够指导超燃冲压发动机燃油喷注系统的设计。

基于"在激波诱导的混合流动中,流体的接触面积越大、混合情况越好"的思想<sup>[44]</sup>, 人们常常会将一定体积的燃料通过微喷、雾化等过程分成一系列微流体单元。这样的单元 的特征尺度 (Sauter mean diameter, SMD) 通常在微米量级<sup>[45]</sup>。这些微流体燃料单元与激波 相互作用,即为微尺度下的 RMI 问题。然而对于微尺度下 RMI 的流动问题,人们的认识 还不够深刻,不论是理论推导还是数值模拟方面的研究都比较匮乏。

本研究主要面向的工程应用背景即为超燃冲压发动机燃烧室的高效混合喷注设计。本研究主要包括理论推导以及数值模拟,旨在给出 RMI 问题中环量沉积的理论预测模型以及其不同的来源,在微尺度条件下,研究分子层面上 RMI 问题的演化与混合,从物理本



图 1-5 多种激波诱导的混合增强示意图

质上得到一些有关于微尺度 RMI 流动问题的结论,从而用以指导超燃冲压发动机燃烧室的高效混合喷注设计。



#### 1.2 研究方法

本研究主要是进行理论推导与数值模拟方面的研究工作。有关于数值模拟方法,目前 主要有两大类,分别为基于守恒方程的数值模拟方法以及基于粒子运动的数值模拟方法。 二者的区别是显而易见的,如图1-6所示。图中红色与蓝色分别代表了两种不同的流体。 对于基于守恒方程的数值模拟方法来说,即便是把气体界面无限扩大,其也是数学上完全 平整的,两种气体完全由网格单元分割开来。而对于基于粒子运动的数值模拟方法来说, 由于其模拟的是粒子的运动与碰撞过程,因此若将界面处放大,在界面上存在着不同种类 的粒子的掺混与扩散。可以看出,基于粒子运动的数值模拟方法从物理上来讲是更加真实 的。



图 1-6 基于守恒方程与基于粒子运动的数值模拟方法对比

虽然目前绝大多数关于 RMI 问题的研究都是采用基于守恒方程的数值模拟方法(NS 求解器),但该方法在许多问题中都存在着局限性甚至是失效问题。比如网格难以收敛问题<sup>[46,47]</sup>、激波内部结构求解不真实<sup>[48,49]</sup>、多组分扩散问题求解不真实<sup>[50]</sup>等。更为严重的是,该方法排除了在自然界中普遍存在的随机扰动的影响。实验表明,即便是一个初始完全平整没有人为扰动过的界面,若对其施加一个加速度,其仍然存在着不稳定演化,这对于基于 NS 方程的数值模拟方法是无法实现的。这样的随机扰动在微尺度条件下的影响十分显著<sup>[51,52]</sup>。

由于本文主要是着眼于微尺度下的 RMI 问题,其涉及到激波结构的求解、多组分扩 散问题的求解、随机扰动的影响,因此采用从物理上更为真实的基于粒子运动的数值模拟 方法是十分有必要的。本文采用直接模拟蒙特卡洛 (DSMC)方法进行数值模拟。有关于 该方法,本文将在第三章进行较为详细的介绍。



#### 1.3 研究现状

有关于 RMI 问题的研究有许多不同的方面。基于涡量动力学,本文主要研究的重点 是 RMI 问题中的环量沉积过程以及微尺度下的 RMI 问题,因此以下研究现状回顾也主要 是从这两个方面进行介绍。

研究 RMI 问题的关键方法之一是基于涡量的研究方法,它是由 Hawley 和 Zabusky 首 先引入的<sup>[53]</sup>。进行涡量分析可以得到激波诱导的气体界面不稳定的许多流动物理学上的重 大发现。当激波通过非均匀界面时,压力和密度梯度的存在导致涡量在界面上的沉积。正 如在涡量传输方程中所证明的那样,非零斜压项是涡量产生的主要来源。涡量沉积与演化 是流场中涡流的产生和进一步演变的主要原因。

在 RMI 环量的沉积方面,主要有四种环量模型。分别为: "PB 模型"<sup>[54,55]</sup>, "Yang 模型"<sup>[56,57]</sup>, "SZ 模型"<sup>[58]</sup>以及"1D 模型"<sup>[59]</sup>。上述四种模型可以被分为两类。PB 模型 与 Yang 模型通过一些简化计算得到了环量沉积的斜压源项,并认为该项是环量沉积的唯一来源,即忽略了粘性项。我们将它们称之为"斜压类"。而 SZ 模型与 1D 模型则直接利用环量的定义式,对速度进行线积分来求得环量。我们将它们称之为"速度类"。在这四种环量模型之中,应用最为广泛的是 SZ 模型。其基于激波极曲线的分析方法,对激波与界面相互作用点附近对速度进行直接的积分,从而得到了其环量模型。并将其推广到了任意形状的界面以及其他密度比的界面<sup>[60,61]</sup>。PB 模型与 Yang 模型主要针对的都是激波与气泡相互作用(SBI)的问题,都是对环量沉积的斜压项进行建模,并通过一定的简化与数学处理得到环量变化率的表达式。1D 模型也是针对 SBI 问题,但其可以很容易地推广到 其他形式的 RMI 问题中。

不论是哪种环量模型,都只能给出环量变化率的表达式,并不能给出其具体来源以及 各项的大小。对于斜压类的环量模型来说,他们只考虑斜压项对环量沉积的影响而将粘性 项完全忽略掉是不科学的。本文在理论推导方面的研究就主要解决了这一问题。我们不仅 给出了一个新的环量模型,将上述四种环量模型做到了统一性的认识,还从理论上给出了 粘性项的大小,指出了粘性项在其中所发挥的作用。

另外,关于 RMI 问题中的涡量沉积于演化,还有一些其他方面的研究。Kotelnikov 等 人<sup>[62]</sup> 研究了 reshock 的 RMI 问题之中采用可压缩算法与不可压缩算法在涡量沉积与演化 方面的区别。发现二者的结果在激波二次作用前后的吻合较好,但在激波二次作用的过 程中的吻合很差。Gaozhu Peng 等人<sup>[63]</sup> 研究了 RMI 问题中的二次斜压涡量沉积的影响, 指出二次斜压涡量沉积严重影响界面中后期演化,并会提供向湍流发展的长期驱动力。 Hejazialhosseini 等人<sup>[64]</sup> 从涡量动力学的角度研究了三维条件下的激波与气泡相互作用问 题。考虑了三个方面的涡量沉积与演化,分别是三维拉伸项、膨胀项以及斜压项,并给出 了该问题中环量变化的经验公式。

上述关于 RMI 问题中涡量沉积与演化的研究,主要都是只考虑了斜压项在其中的影响与作用,都没有考虑粘性在其中发挥的作用。这样忽略粘性项的假设是不科学的。王子



昂等人<sup>[65]</sup>研究了 SBI 问题中,涡量沉积与演化中粘性项的影响与作用,指出了由于粘性 项导致的相似定律失效现象,并给出了反应粘性项与斜压项之比的无量纲数。但该研究仍 然是基于传统的 NS 求解器进行的数值模拟研究,没有给出更小尺度下的一些普适结论。 同时对于粘性项的具体作用机制的认识也不够深刻。本文进一步在这一方面利用基于粒子 运动的数值模拟方法做了一系列深入的理论性研究以及数值模拟工作。

有关于微尺度条件下相关问题的研究回顾,我们并不局限于 RMI 问题,而是包括了 RTI 问题。因为二者都属于加速度作用下的界面不稳定性问题,具有很多的相似性。

Kadau 等人<sup>[51]</sup>率先利用分子层面的数值模拟方法(MD 与 DSMC)研究了微尺度下的 RTI 问题。他们指出了随机扰动定性、定量地影响不稳定性中的复杂流动。通过与实验结 果的对比,他们发现传统的连续性方法与实验吻合很差,而基于分子运动的模拟与实验吻 合较好。另外,可以通过引入随机扰动使连续性方法的结果得到大大改善。Kadau 等人<sup>[66]</sup> 还研究了微尺度下 RTI 问题的相似定律,该研究所得出的结论主要为微尺度下的 DSMC 数值模拟结果符合大尺度下预测的相似定律。Gallis 等人<sup>[67]</sup>利用 DSMC 方法研究了微尺 度下的 RMI 问题。他们模拟了多种不同马赫数、At 数下的 RMI 问题,但该工作主要是 验证了 DSMC 方法研究 RMI 问题的可行性。所得到的微尺度下线性增长模型以及相似规 律都与大尺度下无异,并没有从分子层面上得到新的现象与结论。Gallis 等人<sup>[52]</sup>还利用 DSMC 方法研究了微尺度下的 RTI 问题。他们研究了四个不同方面的影响,分别为尺度、 加速度、At 数以及初始水平界面。指出了扩散在微尺度下该问题中的重要影响。

上述微尺度下的相关问题研究都主要是验证大尺度下得到的经典理论的适用性,或是 验证分子层面的数值模拟方法在该问题中的适用性,并没有得到太多的开创性结论或是小 尺度下的新现象与新理论。本文主要是从涡量动力学的角度,对微尺度下的 RMI 问题进 行了理论上的分析以及数值模拟方面的研究,得到了一些不同于大尺度下经典理论的结 论。

歪う 上海え近大学

#### 1.4 研究思路与章节安排

本研究的研究思路如图1-7所示。本研究一共分为两大块,分别为理论推导以及数值 模拟。理论推导部分主要分为两个方面。第一个方面是有关于涡量传输方程的分析与推 导。具体关注其中的粘性项表达式,给出了其原始形式以及人们常用的简化形式,为后续 数值模拟部分在微尺度条件下的进一步验证打下基础。理论推导的第二个方面为 RMI 问 题中环量沉积的研究。我们将问题转化为了单个激波的问题,并从理论上给出了 RMI 问 题中环量沉积的解析式,并从理论上给出了其中粘性源项的具体大小。

在数值模拟方面,我们利用 DSMC 的数值模拟方法,对微尺度下,不同尺度的 RMI 问题进行了数值模拟。首先我们分析了不同尺度的演化特征,主要包括流场演化、涡量场演化以及环量和涡拟能演化。基于环量和涡拟能演化的规律,我们进一步定量化地研究了 微尺度 RMI 问题中涡量的耗散与扩散规律。另一方面,我们利用数值模拟的结果对前面的理论分析部分进行了一系列验证。我们分别验证了单个激波问题的理论推导解析式以及 微尺度下涡量传输方程粘性项的表达形式,以证明在理论分析部分得到的一系列模型与结论的正确性与普适性。



#### 图 1-7 研究思路图

本文的章节安排如下:第二章是理论分析部分,主要进行了一系列理论上的分析与推导,研究了涡量传输方程中的粘性项及其简化形式并给出了 RMI 问题中环量沉积和其中粘性项具体大小的解析解。第三章简要介绍了本研究所使用的数值模拟方法,即 DSMC 数值模拟方法。第四章利用数值模拟研究了微尺度下的 RMI 演化特征。第五章验证了第二章中得出的一系列模型与结论的正确性与普适性。



### 第二章 理论分析

#### 2.1 涡量传输方程及其简化形式

对于忽略体积力的三维可压缩流体,其动量方程如下:

$$\frac{DV}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \frac{1}{\rho}\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}$$
(2-1)

对于满足连续性假设的牛顿流体,其内部粘性应力张量 $\tau$ 的计算可以引入流体的本构 关系。因此,在忽略粘性系数 $\mu$ 的空间变化率的情况下,上述动量方程可以转化为下面的 形式:

$$\frac{D\mathbf{V}}{Dt} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \nu\nabla^2 \mathbf{V} + \frac{\nu}{3}\nabla(\nabla \cdot \mathbf{V})$$
(2-2)

对该方程两边同时求旋度,同时忽略流体内部动力学粘度  $\nu = \mu/\rho$  的空间变化率,我 们可以得到无体积力的三维可压缩流体的涡量传输方程,如下:

$$\frac{D\boldsymbol{\omega}}{Dt} = (\boldsymbol{\omega} \cdot \nabla)\boldsymbol{V} - \boldsymbol{\omega}(\nabla \cdot \boldsymbol{V}) + \frac{1}{\rho^2}(\nabla\rho \times \nabla p) + \nu\nabla^2\boldsymbol{\omega}$$
(2-3)

上式中, 左边为涡量的当地点全导数, 右边第一项为三维拉伸项, 只有在三维流体中 才存在, 对于本文所研究的二维问题, 该项并不存在。右边第二项为膨胀项, 在该项中, ∇·V 反映了流体的压缩程度, 因此该项只有在高度压缩的流体之中才会发挥作用。对于 本文所研究的问题, 该项被忽略。右边第三项为斜压项, 这是 RMI 问题中涡量沉积的最 主要来源, 由压力梯度和密度梯度方向的不一致性而产生。右边第四项为粘性项, 这一项 主要的影响是涡量的粘性扩散以及耗散。事实上, 传统关于 RMI 问题的研究均为宏观层 面上的研究, 这种情况下, 粘性项的影响也可以忽略不计。但在我们所研究的微尺度条件 下, 其影响变得显著起来, 与斜压项具有可比性, 必须要加以考虑。在后面的数值模拟部 分, 我们进一步说明了粘性项在微尺度 RMI 问题中所发挥的作用。

注意上述涡量传输方程为本问题中前人研究常用的涡量传输方程表达形式。其粘性项的表达形式涉及到三个假设,分别是粘性系数的空间变化率的忽略、动力学粘度空间变化率的忽略以及流体内部的本构关系。三个假设总结如下:

$$\begin{cases} \nabla \mu = 0 \\ \nabla \nu = 0 \\ \tau_{ij} = \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \right) + \delta_{ij} \lambda \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \ 3\lambda + 2\mu = 0 \end{cases}$$
(2-4)

#### 第11页共64页



上述假设在宏观尺度固然成立,但其在微尺度条件下的适用性仍然需要进一步验证。 因此这里我们推导得出不基于上面三个假设的涡量传输方程粘性项表达形式,如下:

$$(\dot{\omega})_{vis} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} \right) \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} \right) \right]$$
(2-5)

上述涡量传输方程粘性项的表达是不基于任何假设的,因此可以认为是粘性项的真实 值,其在宏观尺度上的近似表达式如式2-3中的右边第四项。二者在微尺度下的偏差需要 进一步考虑与验证。

基于涡量传输方程,对方程两边分别进行面积分,我们可以得到环量变化率的表达 式,如下:

$$\dot{\Gamma} = \iint \dot{\omega}_{bar} dx dy + \iint \dot{\omega}_{vis} dx dy \tag{2-6}$$

在上式中,  $\dot{\omega}_{bar}$  为涡量传输方程中的斜压项, 而  $\dot{\omega}_{vis}$  为涡量传输方程中的粘性项。基于上面关于粘性项的论述, 需要考虑在微尺度条件下, 粘性项的简化形式是否适用。这些都将在数值模拟部分得到进一步验证。

#### 2.2 RMI 问题中的环量模型

对于 RMI 问题,环量的沉积过程是一直以来人们研究的重点。众所周知,环量沉积的强度严重影响到后续的流场演化过程以及不同组分流体的混合过程,这对于 RMI 问题 研究的工程应用方面有着重要意义。因此在 RMI 问题中对于环量沉积的建模与准确预测 十分重要。本节主要研究 RMI 问题中的环量沉积,给出了一个新的环量模型用以准确预 测环量沉积的大小。

#### 2.2.1 基本思想方法

基于流体的动量方程,即为式2-1,在某一个关心的区域边界上进行线积分,可以得 到环量变化率的表达式,如式2-7,其中,右边第一项为环量变化率的斜压项,第二项为 环量变化率的粘性项。

$$\dot{\Gamma} = -\oint_{L} \frac{1}{\rho} \nabla p \cdot ds + \oint_{L} \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} \cdot ds = \dot{\Gamma}_{baro} + \dot{\Gamma}_{vis}$$
(2-7)

在 RMI 问题中,环量沉积的主要过程就是激波扫过界面的过程。在这一过程中,流动结构包含一系列激波或膨胀波。基于前人关于 RMI 问题流动结构方面的研究<sup>[68-70]</sup>, RMI 问题中流场内部的波系结构主要取决于入射激波马赫数、界面两侧气体性质以及界面形状。只要给定这些条件,即可在理论上确定出 RMI 问题中的波系结构,并对式2-7中的积分进行计算。图2-1为两种典型的 RMI 问题示意图,作左图为激波与气体斜界面相互作用



示意图,右边为激波与重气泡相互作用示意图。图中的虚线代表了我们所关心的区域边界,即为环量计算的积分线。



图 2-1 典型的激波与气体界面或气泡相互作用问题示意图

从式2-7中可以看出,环量变化率主要依赖于压力以及粘性应力张量的梯度,而在 RMI 问题中,各个流动量的梯度只有在激波内部才比较显著,其他没有激波的区域中流 动梯度都比较小,可以忽略。因此对于式2-7中的积分,我们可以只考虑每一个激波内部 的积分,即在图2-1中,只需要计算从 *A*<sup>-</sup> 到 *A*<sup>+</sup>,从 *B*<sup>-</sup> 到 *B*<sup>+</sup> 以及从 *C*<sup>-</sup> 到 *C*<sup>+</sup> 的积分, 并把它们加起来即可。另外,在选取积分线的时候,可以使积分线在每一个激波的位置上 都平行于激波法向,如图2-1所示。这也是激波内部流动量的梯度方向,因此积分的结果 与跨过激波的积分线方向的选取无关。经过验证,上述简化可以得到令人满意的准确结 果。

因此,为了计算式2-7中的积分,首要问题即为计算单个激波内部的积分值大小,如 图2-2所示。为了简化问题,参考系建立于激波参考系上,x轴选取为垂直于激波的方向, 并使激波位于 x = 0 的位置上。图2-2中的 0<sup>-</sup> 与 0<sup>+</sup> 分别代表激波的左右边界。坐标系位 置与方向的选取并不会影响积分结果。在计算积分的一小块区域内,我们忽略会导致流动 量切向梯度的激波曲率。相对于激波来讲,来流来自于激波左边,反之则只需改变积分结 果的正负号即可。激波波前压力与密度分别为  $p_l$ ,  $\rho_l$  而波后压力和密度分别为  $p_r$ ,  $\rho_r$ 。

只要得到了跨过单个激波的积分值,再将整个 RMI 问题中积分线上的每一个激波的积分值全部加起来即可得到环量沉积的大小。因此式2-7可以表达为2-8的形式。其中下标



图 2-2 单个激波问题示意图

i代表某一个激波, N<sub>s</sub>代表积分边界上的激波总数。

$$\dot{\Gamma} = \dot{\Gamma}_{baro} + \dot{\Gamma}_{vis} = \sum_{i=1}^{N_s} \mathcal{B}_{s,i} + \sum_{i=1}^{N_s} \mathcal{V}_{s,i}$$

$$= \sum_{i=1}^{N_s} -\int_{0^-}^{0^+} \frac{1}{\rho} \frac{dp}{dx} dx + \sum_{i=1}^{N_s} \int_{0^-}^{0^+} \frac{1}{\rho} \frac{d\tau_{xx}}{dx} dx$$
(2-8)

式2-8中引入了单个激波的斜压积分与粘性积分的概念,分别用 B<sub>s</sub>和 V<sub>s</sub>来表示。关于它们的计算是求解环量沉积大小以及粘性所发挥的作用的核心问题,我们称之为"单个激波问题"。在下一小结,我们将解决这一问题。

#### 2.2.2 单个激波问题

在上一小结我们阐述了 RMI 环量沉积的问题核心即是求解单个激波内部的斜压积分 以及粘性积分。在这一小节,我们给出其解析解。

首先我们考虑正激波。由于本节考虑的是环量沉积的大小,因此无需对  $\mathcal{B}_s$ 和  $\mathcal{V}_s$ 进行 分别求解,只需要得出二者的加和即可。这里我们定义单个激波的"环量积分"的概念如下:

$$\mathcal{C}_{s} = \mathcal{B}_{s} + \mathcal{V}_{s} = -\int_{0^{-}}^{0^{+}} \frac{1}{\rho} \frac{dp}{dx} dx + \int_{0^{-}}^{0^{+}} \frac{1}{\rho} \frac{d\tau_{xx}}{dx} dx = \int_{\rho_{l}}^{\rho_{r}} \frac{1}{\rho} \frac{d(\tau_{xx} - p)}{d\rho} d\rho \qquad (2-9)$$

为了计算上述积分,我们需要得到激波内部  $\rho = (\tau_{xx} - p)$  的关系。这里我们利用激波 内部的质量与动量守恒 (式2–10, 2–11) 给出二者的关系。

$$\rho u = \rho_l u_l \tag{2-10}$$



$$\rho u^2 + p - \tau_{xx} = \rho_l u_l^2 + p_l \tag{2-11}$$

将式2-10带入式2-11即可得到激波内部  $\rho = (\tau_{xx} - p)$  的关系,如下:

$$\tau_{xx} - p = \frac{\rho_l^2 u_l^2}{\rho} - \rho_l u_l^2 - p_l \tag{2-12}$$

因此,式2-9中的积分可以表达为如下形式:

$$C_s = \int_{\rho_l}^{\rho_r} \frac{1}{\rho} \frac{d(\tau_{xx} - p)}{d\rho} d\rho = \int_{\rho_l}^{\rho_r} -\frac{\rho_l^2 u_l^2}{\rho^3} d\rho = \frac{u_l^2}{2} \left(\frac{1}{f_\rho^2} - 1\right)$$
(2-13)

其中  $f_{\rho} = \rho_r / \rho_l$  为激波前后的密度比,其可以利用 Rankine-Hugoniot 激波关系式得到:

$$f_{\rho}(\gamma, M_s) = \frac{(\gamma+1)M_s^2}{(\gamma-1)M_s^2+2}$$
(2-14)

而对于 u<sub>1</sub>,其可用激波马赫数以及波前声速来表达:

$$u_l^2 = \gamma M_s^2 \frac{p_l}{\rho_l} \tag{2-15}$$

将式2-14与2-15带入2-13,我们便得到了单个激波环量积分的解析解,如式2-16所示。这里  $f_{\Gamma}(\gamma, M_s)$ 称为单个激波的环量函数。

$$C_s = \frac{p_l}{\rho_l} f_{\Gamma} \left( \gamma, M_s \right) \tag{2-16}$$

其中,

$$f_{\Gamma}(\gamma, M_s) = \frac{2\gamma}{(\gamma+1)^2} \left[ -\gamma M_s^2 + \frac{1}{M_s^2} + \gamma - 1 \right]$$
(2-17)

可以看到,单个激波的斜压积分与粘性积分之和只依赖于激波马赫数以及比热比,而 并不依赖于粘性的相对大小。

上述关于正激波的推导可以很容易地推广到斜激波。在积分线与激波法向平行以及忽略激波曲率的前提下,基于激波内部的 y 方向动量守恒我们可以得到下述关系:

$$\frac{dv}{dx} = 0 \tag{2-18}$$

对于斜激波来说,激波内部的质量以及 *x* 方向上的动量守恒方程与正激波形式相同,因此在式2-17中,仅需要将激波马赫数 *M*<sub>s</sub> 替换为垂直于斜激波方向上的马赫数 *M*<sub>s,n</sub> 即可。因此我们给出的单个激波环量积分的解析解对于斜激波来说也是同样适用的。得到了单个激波的环量积分解析解,对于一个特定的 RMI 问题,只需要将每一个激波上的环量积分累加起来即可得到总的环量沉积解析解。

#### 第15页共64页



进一步,我们来考虑上述环量模型与前人提出的不同环量模型的比较。在 RMI 问题 中,前人提出的环量模型共有四种,分别为: "PB 模型"<sup>[54,55]</sup>, "Yang 模型"<sup>[56,57]</sup>, "SZ 模型"<sup>[58]</sup>以及"1D 模型"<sup>[59]</sup>。上述四种模型可以被分为两类。PB 模型与 Yang 模型通过 一些简化计算得到了环量沉积的斜压源项,并认为该项是环量沉积的唯一来源,即忽略了 粘性项。我们将它们称之为"斜压类"。而 SZ 模型与 1D 模型则直接利用环量的定义式, 对速度进行线积分来求得环量。我们将它们称之为"速度类"。

从本质上讲,斜压类的主要问题为忽略了环量沉积中粘性项的影响。本文后面的章节 对粘性项做了建模以及理论预测,指出了粘性项在这一问题中发挥的重要作用。在一些情 况下,其对环量沉积的贡献占比可以达到10%以上。因此,斜压类的环量模型直接对粘 性项的忽略是不科学的,将带来较大的误差。

而为了求出环量沉积的斜压项大小,两个模型都做了不同的简化与假设。在 PB 模型 中,将激波考虑为一个阶跃,假设跨过激波的压力与密度跳跃是同步的。这样就可以对斜 压项进行简单的积分求解。而在 Yang 模型中,(1/ρ<sup>2</sup>)由于难以建模,因此被直接从积分 号内部提了出来,并选取合适的特征密度常量来代替。对于激波与气泡相互作用的问题, 两个特征密度分别带入的是波后密度以及气泡内外的平均密度。总之斜压类的环量模型可 以认为是本文环量模型在忽略粘性项的情况下的不同简化形式。

而速度类的环量模型是直接在积分边界上对速度进行线积分。积分边界被根据流场内 的激波结构分成几段,每一段都有各自的速度,速度的大小可以根据 Rankine-Hugoniot 激 波关系式或经验公式得到。若考虑速度类的环量模型的物理意义,可以发现其与本为提出 的环量模型是等效的。二者都是直接基于流体的动量方程。本文环量模型只与马赫数与比 热比有关的事实也可以印证这一点。

综上:所有前人提出的环量模型可以大体分为两类。其中斜压类的环量模型是本文提出的环量模型的简化形式,而速度类的环量模型是本文环量模型的变形,具有相同的物理 意义。但不论哪种环量模型,都无法给出环量沉积不同来源的相对贡献大小。本文的下一 小结将对这一问题进行详细的理论性研究。

🏝 上海え近大学

#### 2.3 环量沉积过程中粘性项的贡献

在本节,我们对环量沉积的粘性项进行理论建模与求解,以揭示环量沉积过程中粘性 项所发挥的作用以及相对贡献的大小。我们这里仍然对单个激波问题进行研究,即求解单 个激波的粘性积分 *V*<sub>s</sub>的大小。

#### 2.3.1 基于 Navier-Stokes-Fourier 方程组的模型

单个激波的粘性积分可以写成下面的形式。从中我们可以看出,只要得到了激波内部的  $\rho 与 \tau_{xx}$  的关系,粘性积分即可以求解得出。

$$\mathcal{V}_{s} = \int_{0^{-}}^{0^{+}} \frac{1}{\rho} \frac{d\tau_{xx}}{dx} dx = \int_{\rho_{l}}^{\rho_{r}} \frac{1}{\rho} \frac{d\tau_{xx}}{d\rho} d\rho$$
(2-19)

为了给出 $\rho 与 \tau_{xx}$ 的关系,我们在激波内部质量、动量守恒方程的基础之上,进一步引入能量守恒方程,如下:

$$(E + p - \tau_{xx}) u + q = (E_l + p_l) u_l \tag{2-20}$$

上式中q为流体内部的热量传导,可以通过傅里叶导热定律给出:

$$q = -k\frac{dT}{dx} \tag{2-21}$$

另外,理想气体状态方程可以被用于计算温度 T 与总能 E:

$$T = \frac{p}{R\rho} = \frac{1}{R} \left( \frac{\rho_l u_l^2 + p_l}{\rho} - \frac{\rho_l^2 u_l^2}{\rho^2} + \frac{\tau_{xx}}{\rho} \right)$$
(2-22)

$$E = \frac{p}{\gamma - 1} + \frac{1}{2}\rho u^2$$
 (2-23)

经过一些代数推导,可以得到激波内部的温度梯度的表达式:

$$\frac{\partial T}{\partial x} = \frac{1}{R} \left[ -\frac{(\rho_l u_l^2 + p_l)}{\rho^2} + \frac{2\rho_l^2 u_l^2}{\rho^3} - \frac{\tau_{xx}}{\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d\tau_{xx}}{d\rho} \right] \frac{d\rho}{dx}$$
(2-24)

而对于流体内的导热系数 k,利用流体内部普朗特数 Pr 不变的假设,可以表达为  $\rho = \tau_{xx}$ 的函数:

$$k = \frac{c_p}{Pr}\mu = \frac{3c_p}{4Pr}\frac{\tau_{xx}}{(du/dx)} = -\frac{3c_p}{4Pr}\frac{\rho^2\tau_{xx}}{\rho_l u_l(d\rho/dx)}$$
(2-25)

进而我们引入无量纲参数:

$$\phi = \frac{\tau_{xx}}{p_l} , \ \xi = \frac{\rho}{\rho_l} \tag{2-26}$$

#### 第17页共64页

## () 上海交通大学

将式2-21至2-26带入2-20就得到了下面的 ρ 与 τ<sub>xx</sub> 的控制方程:

$$\frac{d\phi}{d\xi} = \frac{\phi}{\xi} + f_1(\xi) + \frac{f_2(\xi)}{\phi} \tag{2-27}$$

其中,

$$\begin{cases} f_1(\xi) = \left(\gamma M_s^2 + 1\right) \frac{1}{\xi} - \left(\frac{4Pr}{3} + 2\gamma\right) M_s^2 \frac{1}{\xi^2} \\ f_2(\xi) = \frac{4Pr}{3} \gamma M_s^2 \left[ \left(\frac{\gamma - 1}{2} M_s^2 + 1\right) \frac{1}{\xi} - \left(\gamma M_s^2 + 1\right) \frac{1}{\xi^2} + \frac{\gamma + 1}{2} M_s^2 \frac{1}{\xi^3} \right] \end{cases}$$
(2-28)

式2-27即为我们得到的激波内部  $\rho = \tau_{xx}$  的控制方程,因此可以用于给出单个激波粘性积分的理论解。其是从经典的 Navier-Stokes-Fourier(NSF) 方程组推导得出,因此这里我们称之为"NSF 模型"。

#### 2.3.2 NSF 模型的修正与改进

本质上,式2-27是从经典的 Navier-Stokes-Fourier(NSF) 方程组推导得出。许多前人的 研究都指出,该方程组并不适用于求解激波内部结构<sup>[48,49]</sup>。在一个强激波内部,各种物理 量的梯度过大,这导致流体内部的粘性应力张量  $\tau$  以及热传导矢量 q 偏离牛顿以及傅里叶 线性定律。我们也比较了不同马赫数的正激波内部 ( $\xi$ , $\phi$ ) 曲线的 DSMC 数值模拟结果与基 于式2-27的理论解,发现在激波马赫数大于 2 左右时,二者相去甚远,不可接受。

许多研究都对传统的 NSF 方程组做了修正与改进<sup>[71]</sup>,以得到激波内部结构求解问题 中较为精确的解。因此本文也选取一种修正方法对之前提出的 NSF 模型进行修正与改进。

虽然有很多研究所做出的 NSF 方程组修正方法能够准确求解激波结构,或是更加接近于物理真实,但它们可能都过于复杂,或是依赖于新引入的经验参数<sup>[72]</sup>。这并不符合本文所要研究提出的模型的出发点。

因此,考虑到各种修正方法的计算准确性以及简便性,本文主要是基于"双速度理论" 对 NSF 模型进行的修正与改进。双速度理论首先由 Brenner<sup>[73-75]</sup>提出,并由 Greenshields 等人<sup>[76]</sup>进行了在马赫数的宽域范围内的验证。

从原理上来讲,双速度理论指出,在流体内部密度梯度很大的区域存在着质量速度  $u_m$ 与体积速度 $u_v$ 的较大偏差。因此在计算流体内部粘性应力张量的过程中,应使用 $u_v$ 而不是 $u_m$ 。二者的关系可以表达为下式:

$$\boldsymbol{u}_v = \boldsymbol{u}_m + \alpha \frac{1}{\rho} \nabla \rho \tag{2-29}$$



其中 α 为体积扩散率,可以用体积扩散率系数 α\* 以及动力学动力学粘度表示为:

$$\alpha = \alpha^* \frac{\mu}{\rho} \tag{2-30}$$

因此,修正后的粘性应力张量可以表示为下面的形式,其中 $\tilde{\tau}_{xx}$ 代表了未经修正的、原始 NSF 方程中的粘性应力张量。

$$\tau_{xx} = \tilde{\tau}_{xx} + \frac{4}{3}\mu \frac{d}{dx} \left(\frac{\alpha}{\rho} \frac{d\rho}{dx}\right)$$
(2-31)

其中,

$$\widetilde{\tau}_{xx} = \frac{4}{3}\mu \frac{du}{dx} = -\frac{4}{3}\mu \frac{\rho_l u_l}{\rho^2} \frac{d\rho}{dx}$$
(2-32)

将2-31与2-32合并,我们可以得到 $\rho$ ,  $\tau_{xx}$  以及 $\tilde{\tau}_{xx}$ 的一个控制方程:

$$\tau_{xx} = \tilde{\tau}_{xx} + \frac{3\alpha^*}{4\rho_l^2 u_l^2} \rho^2 \tilde{\tau}_{xx} \frac{d\tilde{\tau}_{xx}}{d\rho}$$
(2-33)

除此之外,双速度理论还指出,由于体积扩散流量的存在,能量守恒方程中也需要引入额 外的项。修正之后的能量守恒方程如下:

$$(E+p-\tau_{xx})u - k\frac{dT}{dx} - \alpha \frac{p}{\rho}\frac{d\rho}{dx} = (E_l + p_l)u_l$$
(2-34)

这里我们再一次引入无量纲量  $\eta = \tilde{\tau}_{xx}/p_l$ 。将2–22至2–26以及2–30至2–33带入2–34,便可 以得到下面完整的  $\rho$ ,  $\tau_{xx}$  以及  $\tilde{\tau}_{xx}$  的控制方程组:

$$\begin{cases} \frac{d\eta}{d\xi} = \frac{4\gamma M_s^2}{3\alpha^*} \frac{1}{\xi^2} \left(\frac{\phi}{\eta} - 1\right) \\ \frac{d\phi}{d\xi} = f_1(\xi)\phi + f_2(\xi) + f_3(\xi)\frac{1}{\eta} + f_4(\xi)\frac{\phi}{\eta} \end{cases}$$
(2-35)

其中,

$$\begin{cases} f_{1}(\xi) = \left(1 - \alpha^{*} \operatorname{Pr} \frac{\gamma - 1}{\gamma}\right) \frac{1}{\xi} \\ f_{2}(\xi) = \left(1 - \alpha^{*} \operatorname{Pr} \frac{\gamma - 1}{\gamma}\right) \left(\gamma M_{s}^{2} + 1\right) \frac{1}{\xi} - \left[2\gamma - \alpha^{*} \operatorname{Pr}(\gamma - 1)\right] M_{s}^{2} \frac{1}{\xi^{2}} \\ f_{3}(\xi) = \frac{4Pr}{3} \gamma M_{s}^{2} \left[ \left(\frac{\gamma - 1}{2} M_{s}^{2} + 1\right) \frac{1}{\xi} - \left(\gamma M_{s}^{2} + 1\right) \frac{1}{\xi^{2}} + \frac{\gamma + 1}{2} M_{s}^{2} \frac{1}{\xi^{3}} \right] \\ f_{4}(\xi) = -\frac{4Pr}{3} M_{s}^{2} \frac{1}{\xi^{2}} \end{cases}$$
(2-36)

上述即为基于原始的双速度理论得到的 $\rho$ ,  $\tau_{xx}$  控制方程组。可以看到,相比于前面



的 NSF,模型,这一模型需要两个微分方程,更加复杂。更为严重的是,上述模型的鲁棒性依赖于体积扩散率系数  $\alpha^*$ 的选取。Greenshields 等人<sup>[76]</sup> 指出,若采用原始双速度理论  $\alpha^* = Pr^{-1}$ 的选取方式,会在波前得到非物理解。他们进一步对该方法控制方程进行了稳定性分析,并指出当  $\alpha^* \gtrsim 1.45$  时会出现非物理解。

基于稳定性分析, Greenshields 等人<sup>[76]</sup> 指出上述非物理解的出现主要是由于动量方程 中额外引入的项所导致的,并非由于能量方程中所引入的额外项。另外,本文也研究了在 高马赫数激波求解过程中,利用2-11计算的动量守恒情况以及利用2-11计算的能量守恒情 况。发现对于一个在氩气中的马赫数为 10 的激波,内部的动量守恒误差很小,在 3% 左 右,而能量守恒的误差较大,在 13% 以上。

上述事实表明,该方法的不稳定性由动量方程的修正所引起,但 NSF 方程组求解激 波问题的不准确性却主要由能量方程的不准确所导致。因此我们决定仅利用双速度理论对 能量方程进行修正,而保持动量方程的原始形式不变,从而给出我们的 TNSF 模型。

修正后的热传导 q 的表达式如下,其中右边第二项即为双速度理论给出的额外的体积 扩散项:

$$q = -k\frac{dT}{dx} - \alpha \frac{p}{\rho}\frac{d\rho}{dx}$$
(2-37)

利用本构方程以及质量守恒方程,我们可以将体积扩散项用 $\rho = \tau_{xx}$ 来表达:

$$\tau_{xx} = \frac{4}{3}\mu \frac{du}{dx} = -\frac{4}{3}\rho_l u_l \frac{\mu}{\rho^2} \frac{d\rho}{dx}$$
(2-38)

$$-\alpha \frac{p}{\rho} \frac{d\rho}{dx} = -\alpha^* p \frac{\mu}{\rho^2} \frac{d\rho}{dx} = \frac{3}{4} \alpha^* \frac{p\tau_{xx}}{\rho_l u_l}$$
(2-39)

因此,我们便得到了基于双速度理论改进的  $\rho = \tau_{xx}$  的控制方程,即 TNSF 模型,如下, 其中关于体积扩散率系数  $\alpha^*$  的选取,我们采用 Brenner 原始理论中的论述,即对于单一 组分的导热流体来说  $\alpha^* = Pr^{-1}$ 。

$$\frac{d\phi}{d\xi} = \frac{\phi}{\gamma\xi} + f_1(\xi) + \frac{f_2(\xi)}{\phi}$$
(2-40)

其中,

$$\begin{cases} f_1(\xi) = \left(M_s^2 + \frac{1}{\gamma}\right) \frac{1}{\xi} - \left(\frac{4Pr}{3} + \gamma + 1\right) M_s^2 \frac{1}{\xi^2} \\ f_2(\xi) = \frac{4Pr}{3} \gamma M_s^2 \left[ \left(\frac{\gamma - 1}{2} M_s^2 + 1\right) \frac{1}{\xi} - \left(\gamma M_s^2 + 1\right) \frac{1}{\xi^2} + \frac{\gamma + 1}{2} M_s^2 \frac{1}{\xi^3} \right] \end{cases}$$
(2-41)

可以看到,相比于之前的 NSF 模型, TNSF 模型在复杂程度上并没有任何改变,也无 需引入新的参数。但其对于高马赫数激波内部结构求解的精确度却有了显著提高。这一点 将在后面的章节进行进一步的详细验证。

#### 第20页共64页



不论是式2-27还是式2-40,其解析解都难以求出。Uribe 等人<sup>[49]</sup> 指出,对于激波内部 结构的问题,目前还没有人得到能够用初等函数表达的解析解,也没有研究能够证明出其 不存在初等函数解析解。但有了 $\rho = \tau_{xx}$ 的控制方程,我们便可以很容易地利用数值方法 对其进行求解。由于本研究的目标为得到环量沉积中的粘性项大小,核心即为求解单个 激波的粘性积分的大小,因此我们可以利用所得到的 $\rho = \tau_{xx}$ 的关系积分得到 $\mathcal{V}_s$ 的大小,如下:

$$\mathcal{V}_s = \frac{p_l}{\rho_l} \int_1^{f_\rho} \frac{1}{\xi} \frac{d\phi}{d\xi} d\xi = \frac{p_l}{\rho_l} f_{\mathcal{V}} \left( Pr, \gamma, M_s \right) \tag{2-42}$$

上式中  $f_{\rho} = \rho_r / \rho_l$  为激波前后的密度比,  $f_{\mathcal{V}}(Pr, \gamma, M_s)$  被我们称之为"单个激波的粘性 项函数"。

上述关于正激波的理论推导仍然可以简单地推广到斜激波。对于一个斜激波,其存在 不变的 y 方向速度 v<sub>l</sub>,因此在计算总能量时应该使用下面的表达式:

$$E = \frac{p}{\gamma - 1} + \frac{1}{2}\rho\left(u^2 + v_l^2\right)$$
(2-43)

但若将其带入式2-20,便会发现 $\rho_l u_l v_l^2/2$ 将出现于方程的左右两边,可以消去。因此,上述模型对于斜激波仍然适用,仅需要将激波马赫数 $M_s$ 替换为垂直于斜激波方向上的马赫数 $M_{s,n}$ 即可。

不论是我们给出的单个激波的环量积分还是粘性积分,斜激波都具有和正激波相同的 表达式。这一点可以通过"斜激波可以通过选取合适的参考系转换为正激波"的事实来理 解。

#### 2.3.3 粘性项的影响分析及其分解

前面一小节已经对单个激波的粘性积分做出了理论上的推导。本小节将对环量积分 中,粘性积分所发挥的具体作用做出定性的分析与研究。

通过数学上的变形,粘性积分可以表达为下面的形式:

$$\mathcal{V}_{s} = \int_{\rho_{l}}^{\rho_{r}} \frac{1}{\rho} \frac{d\tau_{xx}}{d\rho} d\rho = \left. \frac{\tau_{xx}}{\rho} \right|_{\rho_{l}}^{\rho_{r}} + \int_{\rho_{l}}^{\rho_{r}} \frac{\tau_{xx}}{\rho^{2}} d\rho = \int_{\rho_{l}}^{\rho_{r}} \frac{\tau_{xx}}{\rho^{2}} d\rho$$
(2-44)

容易看出,单个激波的粘性积分 $\mathcal{V}_s$ 与环量积分 $\mathcal{C}_s$ 具有相同的符号,即在环量沉积过程中,粘性项将产生积极的影响。这与前人关于 RMI 问题中粘性项的研究与论述是矛盾的。前人的研究认为,在这一问题中粘性耗散会导致环量的下降,是对环量增长起阻碍作用的<sup>[65]</sup>。之所以存在这样的矛盾,是因为前人研究中忽略了粘性系数 $\mu$ 的空间变化率。

为了进一步说明粘性系数空间变化率的影响,我们将粘性积分分解为下式中的两项,



其中引入了流体内部的本构方程来计算粘性应力张量。

$$\mathcal{V}_{s} = \int_{0^{-}}^{0^{+}} \frac{1}{\rho} \frac{d\tau_{xx}}{dx} dx = \int_{0^{-}}^{0^{+}} \frac{1}{\rho} \frac{d\mu}{dx} \frac{du}{dx} dx + \int_{0^{-}}^{0^{+}} \frac{\mu}{\rho} \frac{d^{2}u}{dx^{2}} dx \qquad (2-45)$$

右边第一项为与粘性系数的梯度有关的项,容易看出,其与*V<sub>s</sub>*和*C<sub>s</sub>*都具有相同的符号,因此对于环量的沉积是具有促进作用的。

对于右边第二项,其可以表达为下面的形式来研究其贡献:

$$\int_{0^{-}}^{0^{+}} \frac{\mu}{\rho} \frac{d^2 u}{dx^2} dx = \frac{\mu}{\rho} \left. \frac{du}{dx} \right|_{0^{-}}^{0^{+}} - \int_{0^{-}}^{0^{+}} \frac{d(\mu/\rho)}{dx} \frac{du}{dx} dx = -\int_{0^{-}}^{0^{+}} \frac{d(\mu/\rho)}{dx} \frac{du}{dx} dx \tag{2-46}$$

可以看到,该项的符号取决于  $d(\mu/\rho)$  的符号,进而考虑到粘性系数与温度的近似指数关系,如式2-47所示,  $d(\mu/\rho)$  的符号与  $d(T^{\omega+1}/p)$  的符号相同。

$$\frac{\mu}{\rho} = C_{\mu} \frac{T^{\omega+1}}{p} \tag{2-47}$$

热力学第二定律指出,任何不可逆过程需满足熵增的条件。因此,对于一个激波来 讲,其内部温度以及压力满足下面的不等式,其中*s*即为激波内部某一点的熵大小:

$$ds = c_p \frac{dT}{T} - R \frac{dp}{p} \ge 0 \tag{2-48}$$

对于一个实际的气体来讲,总存在 $\omega + 1 > \gamma$ 的不等关系。经过一些代数推导,可以得出:

$$d\left(\frac{T^{\omega+1}}{p}\right) > d\left(\frac{T^{\gamma}}{p}\right) = \frac{T^{\gamma}}{p}\frac{ds}{R} \ge 0$$
(2-49)

因此,式2-45中右边第二项为正,即其对于环量沉积具有消极影响。考虑到两项的相 反影响,我们将右边第一项称为"粘性生成项",将右边第二项称为"粘性耗散项"。若忽 略粘性系数的空间变化率,则只存在粘性耗散项,对环量产生消极影响,符合前人研究的 结果。但对于该梯度很大的区域,尤其是激波作用的区域,"粘性生成项"影响很大,不 可忽略。

#### 2.4 本章小结

本章首先从理论上分析研究了在微尺度条件下传统常用的涡量传输方程的适用性。发现其中主要包含三个假设,分别是:忽略粘性系数的空间变化率的忽略、动力学粘度空间变化率的忽略以及流体内部的本构关系。这三个假设需要在微尺度条件下通过数值模拟进行进一步验证。另外我们还给出了不基于任何假设的涡量传输粘性项的表达式,为后续基于数值模拟结果的进一步对比打下基础。

第22页共64页



接着本章通过将 RMI 环量问题转化为单个激波内部的积分问题,给出了一个新的环量模型,并分析对比了新的环量模型于前人模型的区别于联系。指出前人的所有环量模型 都是本章模型的简化形式或是等效变形。这在环量模型方面做到了理论上的统一。

更重要的是,本章通过研究激波内部的"密度-粘性应力"关系,给出了 RMI 问题 中,环量沉积粘性源项的理论计算方法。利用双速度理论,我们对经典的 NSF 方程组进 行了修正并给出了 TNSF 模型用以求解单个激波的粘性积分。同时我们还进一步研究了粘 性项在环量沉积中所发挥的具体作用,并将其分解为了"粘性生成项"以及"粘性耗散 项",更加深入地认识了粘性项作用的具体物理机制。

上述理论都将在后面的章节得到详细的推导与验证。



### 第三章 数值模拟研究方法

本章主要介绍本研究的数值模拟部分所使用的数值模拟方法。由于我们研究的是微尺度条件下的激波与气体界面相互作用问题,其中涉及到微尺度流动、多组分扩散、大梯度流动等一系列问题,因此我们采用直接模拟蒙特卡洛(DSMC)方法进行数值模拟。关于采用该方法的必要性,我们将在后边的章节进一步论述。

本研究所使用的 DSMC 程序为本课题组内发展出的一维定常以及二维非定常并行 DSMC 程序。使用该程序,我们曾经进行了一系列算法方面<sup>[77,78]</sup> 以及流动机理方面<sup>[79,80]</sup> 的研究。其可行性已在之前的研究中得到的验证。

由于本研究并非针对于 DSMC 本身的算法类研究,因此本章关于 DSMC 算法只做简要的介绍与说明。

#### 3.1 DSMC 数值方法概述

直接模拟蒙特卡洛 (DSMC) 方法起源于最早的粒子模拟方法:分子动力学方法 (Molecular Dynamics, MD)<sup>[81]</sup>。MD 方法内在对于粒子碰撞的模拟上采用的物理机制使其 计算消耗过大,因此只能被用于研究分子层面上的小规模流动问题。数值模拟日益增长的 需求催生了一系列更加高效、准确的数值模拟方法的诞生。其中就包括 Bird 教授在 20 世 纪 60 年代提出的 DSMC 数值模拟方法<sup>[82]</sup>。该方法的核心是采用几率论的方法判断分子间 是否发生碰撞。

DSMC 方法是一种分子运动模拟算法,用于模拟分子平均自由程远大于分子直径时的流动问题(通常都是这种情况)。DSMC 方法采用基于粒子运动的随机算法,通过用离散的采样粒子来估计连续的分子速度分布函数,从而求解玻尔兹曼方程。每个采样粒子通常代表大量真实粒子,这些粒子移动、碰撞,并从边界反射或出射。计算域被离散化为一系列网格。DSMC 方法使用"时间分割方法"。即在每一个时间步内,采样粒子首先经过平移过程,随后经过碰撞过程。在碰撞过程中,每个网格内的粒子进行随机碰撞。气体的宏观物理量(压力、温度、密度等)通过每一个采样粒子的微观信息(质量、速度)利用统计学方法计算得到。标准 DSMC 方法按照 "移动,碰撞和采样"的顺序在每个时间步内执行一次这些操作。一般情形下,匀速运动足以描述分子的平移运动,因此对于这一简单问题精确求解是可行的。然而对于分子的碰撞,动力学角度上完全真实的分子碰撞描述是缺乏理论依据、现阶段无法实现的。Bird 教授利用统计力学中混沌假设条件,认为碰撞的粒子之间不可辨识。这样便避开了碰撞粒子选择的问题,再利用统计的碰撞频率和简化的碰撞模型实现了对分子之间碰撞的描述。在绝大部分的 DSMC 应用中,采用的分子模型包括硬球模型(HS)、可变径硬球模型(VHS)和可变径软球模型(VSS)。由于篇幅限制



本文对各种碰撞模型的构造不加以详细的解释。具体细节参见 Bird 教授的书籍<sup>[82]</sup>。

近些年,DSMC方法被广泛应用于模拟流体力学领域的稀薄、高速、微尺度流动问题<sup>[83]</sup>,如:激波反射问题<sup>[79,80]</sup>,微尺度下的流动不稳定性问题<sup>[52,67]</sup>,爆轰波传播问题<sup>[84]</sup>,激波内部结构问题等<sup>[85]</sup>。另外,Gallis等人<sup>[86]</sup>首次利用DSMC方法研究了湍流的耗散问题,并与直接数值模拟(DNS)的结果吻合很好,实现了分子层面上对湍流问题的研究。 DSMC方法在这些问题中的可行性主要是与实验结果<sup>[87]</sup>以及MD方法数值模拟结果<sup>[88]</sup>进行对比。

相比于传统的数值模拟方法,DSMC 有其明显的优势,当然也有严重的弊端。其优势 在于该方法并不局限于模拟近平衡流动问题或是小梯度流动问题。DSMC 从其固有的物理 机制方面考虑了流体内部的近平衡输运(粘性、热传导、质量扩散)以及非平衡现象(热 扩散、压力扩散)。若引入适当的物理化学模型,DSMC 方法在描述流场中存在的热力学 非平衡、化学反应非平衡以及流场脉动等不满足连续假设的流场结构问题中具有的天然优 势。

其最主要弊端即在于计算代价方面。其采样过程需要大量的模拟分子数或者大量的独 立模拟过程及采样样本空间,由此带来的高额计算资源消耗和巨大的内存需要使得现有 的 DSMC 研究基本都局限小尺度或稀薄流动问题中。在计算机发展尚未达到满足非定常 DSMC 广泛应用之前,在能够大大缓解非定常 DSMC 计算资源巨大消耗的新方法问世之 前,我们在采用非定常 DSMC 时需要权衡到计算机内存消耗和计算效率二者的平衡。鉴 于此,我们使用的程序用了一种可缓解计算机内存消耗的方法,将每一个独立模拟过程、 每一时刻输出的粒子信息通过文本的形式写出,在求样本平均时再读入。这样,承受巨大 存储消耗的将变为计算机的硬盘而非内存。因此,本文所采用的非定常 DSMC 程序在可 接受的计算时间内,可以采用大量的模拟分子实现更为精细的结果。

#### 3.2 DSMC 算法与 NS 方程求解算法的关系

基于 NS 方程的求解算法被广泛应用于对流体的数值模拟之中。前人关于 RMI 问题的数值模拟研究也几乎全部采用基于 NS 方程的求解算法<sup>[25, 26]</sup>。因此本小节主要阐述 DSMC 算法与 NS 方程求解算法的关系。

二者最大的区别就在于是否基于连续性假设。该假设包含了两层含义。第一是分子之间的碰撞频率非常高,对于分子数密度比较大的流体是这样的。这会带来分子各形态的能量的松弛时间非常小,那么可以认为每个分子的能量分布都是处于平衡态的。这样使用统计学上分子的宏观物理量,如温度、压力等参数可以很好地描述流体微团的性质。第二便是相比于计算尺度,分子的平均自由程非常小,即物理问题的 Knudsen 数很小。这种情况下,宏观上信息的传递过程是连续的,所以各类基于梯度的线性化方程 (如傅里叶热传导定律、牛顿流体本构方程)才能成立。但对于高稀薄流动问题或是流体内部梯度非常大的问题,上述假设不再成立,NS 求解器也就不再适用。



而 DSMC 算法的创立就是为了解决这样一系列连续性假设失效的问题。由于其固有的模拟粒子运动与碰撞的真实性,其能够反应真实流体的物理过程,解决了连续性假设失效问题中 NS 求解器无法使用的问题。

上面阐述了物理层面上二者的本质区别。在计算的角度,二者也有许多不同之处。

首先 DSMC 是基于 Monte Carlo 方法的计算方法,相较于基于守恒方程的 NS 求解器, 它每一个网格内的计算负载是时变的,网格之间的信息传递也是受粒子运动过程所决定, 这一点导致 DSMC 算法在高效并行计算的实现上存在巨大困难。

其次,从数学的角度来讲,DSMC 算法是无条件稳定的,但 NS 求解器很大程度上依赖于初始条件的设置、边界条件的选取以及网格的生成质量。尤其是应用各种湍流模型求解大梯度分离流、复杂几何外形流动等问题,NS 求解器网格的生成十分考究。DSMC 算法则不需要对网格质量进行详尽的考虑。但同时,被 NS 求解器广泛使用的诸如局部网格加密、自适应网格、多重网格等提高计算效率的处理方法在 DSMC 算法之中不再可行。

总之,相比于传统常用的 NS 求解器, DSMC 方法能观察到更微小的流场结构,更精 细的流场过程。对于某些特定的物理问题采用 DSMC 算法能够发现一些全新的现象,得 到一些全新的结论。但些的代价就是高额的计算资源消耗。在向连续流区推广的过程中, 减少不必要的计算负载和修正计算方法的错误都是未来的发展方向。

#### 3.3 DSMC 算法求解方式

本研究涉及到的数值模拟方法主要分为两种。第一种为求解一维激波问题的定常 DSMC方法,主要用于验证前面理论分析部分单个激波问题的理论性研究。第二种为求解 RMI问题的二维非定常 DSMC 方法,主要用于研究微尺度条件下的 RMI 问题。本节分别 对两种算法的求解过程进行简要的介绍。

#### 3.3.1 一维定常激波问题 DSMC 求解算法

关于激波内部结构的求解问题,研究表明<sup>[89]</sup>,由于激波内部局部 Knudsen 数过大,对于马赫数大于 1.6 左右的激波,采用 NS 方程进行数值模拟便会存在较大误差。对于马赫数大于 2 的问题,误差不可接受。而采用 DSMC 数值模拟的方法来研究激波内部结构问题是公认的。

本文研究所使用的一维定常 DSMC 算法的理论依据主要是 Bird 等人的一维定常 DSMC 算法<sup>[82]</sup>。这里的"一维"指的是流动只在一个方向上存在宏观梯度,但流动的速度 分量在三个方向上都存在。这里的"定常"指的是本算法在数值模拟的过程中,流动达到 稳定阶段之后,才开始进行采样平均的过程,如下图3–1所示。

整个计算域的左右边界分别为  $x_1$  和  $x_2$ ,并被分为了  $N_x$  个网格。每个网格的大小都 是相同的。网格大小的设置取决于计算结果的精度要求,具体可参考 Alexander 等人关于 DSMC 算法空间离散误差的研究<sup>[90]</sup>。



图 3-1 定常 DSMC 采样策略示意图

关于边界条件,有一些不同的设置方法。其中一种是计算域的左右边界分别设置为 "流入流出"边界条件。流动参数分别根据激波波前波后的流动参数进行设置。在流场的 初始阶段,整个计算域的左半边设置为波前参数,右半边设置为波后参数。这样在激波的 初始位置上为一个流动参数的不连续。即初始时刻激波没有厚度。随着计算的开始、流场 的演化,激波会逐渐发展出厚度。对于激波内部结构求解问题,只要粒子数、采样次数足 够多,这样的方法就可以得到准确的结果。但问题是在这种办法中,进出口的粒子数是随 机波动的,这会导致计算域内的总粒子数的随机波动,从而带来定常激波在计算域内的随 机游走。这样的随机游走对于 DSMC 的时间平均过程来说是不可接受的。

由于激波下游为亚声速,因此上面提到的流量波动问题主要是由激波下游出口导致的。因此,这里我们用一个沿 *x* 轴方向移动的反射壁面边界来代替原来的出口边界。其移动速度为 Rankine-Hugoniot 激波关系式给出的波后速度。那么对于一个碰撞到其上的粒子,其碰后的瞬时速度 *u*'为:

$$u' = 2u_w - u \tag{3-1}$$

其中 uw 为壁面移动速度, u 为碰前粒子瞬时速度。

那么粒子的碰后位置 x' 即为:

$$x' = 2x_{\rm w} - x + u'\mathrm{d}t \tag{3-2}$$

其中 xw 为壁面位置, x 为碰前粒子瞬时位置, dt 为时间步长。

本质上,这样的边界条件是一个运动的活塞,与粒子碰撞过后,瞬间"跳"回原位置。除了避免了粒子流量在出口随机波动的问题,这样的边界条件的另一个好处是只需要用到 Rankine-Hugoniot 激波关系式中的速度,不需要用到温度、压力。

即便是采用了上述下游边界条件,还是无法完全消除激波随机游走的问题。因此需要 加入另外一个子程序用于解决这一问题。若计算域内的当前总粒子数与初始总粒子数之差 超过了一个设定值,所有粒子都统一的被移动一段距离。从某一边界上穿过的粒子会被移

#### 第27页共64页


动回来。移动的距离是通过 Rankine-Hugoniot 激波关系式给出的波前波后密度所对应的原始总粒子数计算出来的。经过这样的处理,激波的随机游走现象几乎被完全消除了。经验证,上述在算法上的操作手段并不会影响激波内部物理量的分布情况。

## 3.3.2 二维非定常 DSMC 求解算法

本文研究所使用的二维定常 DSMC 算法的理论依据主要也是 Bird 等人的二维非定常 DSMC 算法<sup>[82]</sup>。与之前类似,这里的"二维"指的是流动只在两个方向上存在宏观梯度, 但流动的速度分量在三个方向上都存在。这里的"非定常"指的是本算法在数值模拟的过 程中,流场并不存在一个稳定的收敛点,而是持续地在随时间变化当中。

DSMC 算法只有经过大量的采样并做统计平均才能够得到准确可靠的数值模拟结果。 对于定常 DSMC 算法来说,采样过程是通过流场达到收敛点之后,在每一个时间步上进 行采样所实现的,如图3-1所示。然而对于非定常 DSMC 算法来说,流场中并不存在稳定 的收敛点。因此采样过程是通过很多个独立运行的非定常样本进行的,如图所示3-2。每 个输出时刻的样本空间由大量独立的样本组成,为了得到光滑的结果需要进行大量的独立 的模拟过程或者足够多的模拟分子数。为保证每一次模拟过程的独立性,在程序开始之前 运行一次随机数子程序,以确保初始化粒子速度时的随机性和独立性。相比于定常 DSMC 算法,非定常 DSMC 算法消耗的计算代价更大。



图 3-2 非定常 DSMC 采样策略示意图

第28页共64页



# 3.4 本章小结

本章主要是对本研究所涉及到的数值模拟方法进行介绍。由于本研究并非针对于 DSMC本身的算法类研究,因此本章关于 DSMC 算法只做简要的介绍与说明,并不涉及 详细的求解过程或是算法实现。

首先我们对 DSMC 算法做了概述,介绍了其发展背景基本物理思想以及应用背景。随后我们阐述了 DSMC 算法与传统的 NS 求解器的关系,主要是从物理层面以及算法层面上进行的说明。最后,我们简要介绍了本研究所用到的 DSMC 数值模拟方法的具体实现过程,主要分为一维定常算法以及二维非定常算法。在一维定常算法中我们介绍了所使用的特殊边界条件以及防止激波随机游走的方法。

由于本研究所使用的程序已经在近几年进行了一系列算法方面<sup>[77,78]</sup> 以及流动机理方面<sup>[79,80]</sup> 的研究。其可行性已在之前的研究中得到的验证。因此可以说明本文的数值模拟 方法是准确可靠的。



# 第四章 微尺度 RMI 演化特征

本章主要通过基于 DSMC 的数值模拟方法,研究在微尺度条件下,不同尺度的 RMI 问题的演化特征。关注的重点主要包括流场演化、涡量场演化、环量与涡拟能演化。

## 4.1 算例设置

## 4.1.1 问题描述

本研究的数值模拟部分首先主要着眼于这样一类阶梯形状的气体界面,如图4-1所示。 本研究之所以选取这样的界面形状是因为在激波与界面相互作用过程中,只有在台阶的水 平段存在压力梯度与密度梯度的矢量积,而且该矢量积从理论上将是不随时间变化的。即 只有在该段存在涡量生成的斜压项,这将使后续的理论分析部分得到大大简化。



图 4-1 数值模拟研究问题示意图

如图4–1所示,本文所模拟的问题波前温度压力均为与海平面大气条件相同,即 p = 101.325kpa, T = 288.15K,而界面左侧为氩气,右侧为氙气,因此界面两侧具有密度 差异,At数为0.533。初始时刻界面静止,一个正激波以6马赫的速度向右运动扫过气体 界面,诱导出后续的一系列不稳定性。

我们选取界面台阶的水平段长度作为本问题的特征长度 L\*。在这里,我们主要关注 的是微尺度条件下的这一类问题,因此我们的数值模拟主要有五个算例,特征长度从 5μm 等间隔变化到 1μm,而这五个算例的初始条件是完全相似的,只是在尺度上进行了缩放。

整个计算域的大小为  $5L^* \times 2L^*$ , 初始时刻激波位于  $x = L^*$  的位置, 界面左端点位 于  $x = 1.2L^*$  的位置。初始时刻, 激波左侧流动参数由 Rankine-Hugoniot 激波关系式给出,



激波右侧流体静止。激波在初始时刻为一个流动参数的跳跃,没有厚度。计算域的上下边 界为对称边界,左右边界分别为氩气与氙气的出入口边界。

## 4.1.2 数值方法的选取

上述问题的数值模拟方法选取为 DSMC 的数值模拟方法。该方法利用采样粒子来模 拟真实气体中粒子的运动与碰撞过程,每一个采样粒子都代表着大量的真实粒子。从分子 运动层面上来讲 DSMC 数值模拟方法能够更加真实准确地模拟流体的运动过程。该方法 在近连续流区以及稀薄流区都发挥着重要作用。

传统的基于 NS 方程组的数值模拟方法,在求解微尺度、高稀薄条件下的流动问题<sup>[91]</sup>、大梯度流动问题<sup>[92]</sup>、不同组分混合与扩散问题<sup>[50]</sup>以及热力学非平衡问题之中,都 难以做到对流体的真实模拟,得到的结果与真实值也相差较大。另外更重要的问题是传统 方法排除了真实世界中普遍存在的随机扰动对这一问题的影响,这种影响在微尺度条件下 是十分重要的<sup>[51]</sup>。相比之下,DSMC 方法在这些问题之中具有其独特的优越性,因为它是 对粒子的运动进行直接的模拟。而本文所要研究的 RMI 问题涉及到很强的正激波、微尺 度流动、不同组分气体扩散,因此使用 DSMC 方法而非传统的基于守恒方程的连续性方 法是必要的。

进一步我们通过流场中的局部 Knudsen 数来说明采用 DSMC 数值模拟方法的必要性。 考虑到在本问题之中激波内部流动参数的梯度过大,基于连续性假设的 NS 方程在这种条 件下是不适用的。根据 Boyd 等人的研究<sup>[93]</sup>,可以将流体内部局部的 Knudsen 数作为连续 性失效的判据,其定义如下:

$$Kn_{GL-Q} = \frac{\lambda}{Q} |\nabla Q| \tag{4-1}$$

其中 Q 为流动参数,可以选为压力或温度。对于某个特定的气体,当地点的分子平均自由程 λ 可以通过下式计算得到,其中 n 为分子数密度, d<sub>ref</sub> 为在参考温度下的分子直径。 对于多组分气体,其分子平均自由程可以用式4-3来计算。

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2\pi} d_{\rm ref}^2 n \left(T_{\rm ref}/T\right)^{\omega - 0.5}}$$
(4-2)

$$\overline{\lambda} = \frac{n_{Ar}}{n} \lambda_{Ar} + \frac{n_{Xe}}{n} \lambda_{Xe} \tag{4-3}$$

这里我们取基于密度与温度的局部 Knudsen 数的较大值作为连续性失效的判据,临界 值选取为 0.05<sup>[94]</sup>。因此连续性失效的条件可以写为:

$$Kn_{GL} = \max(Kn_{GL-\rho}, Kn_{GL-T}) > 0.05$$
 (4-4)

对于本文所研究的问题,我们选取尺度最小的算例计算结果来计算局部 Knudsen 数。 如图4-2所示,虽然在整个流场中有很大一本分区域的局部 Knudsen 数很小,但在我们所

第31页共64页



关心的激波与气体界面相互作用的区域附近,局部 Kn 数已经远远超过连续性假失效的阈值 (0.05),有些区域已经达到 0.6 以上。这足以证明在本问题中使用 DSMC 方法进行数 值模拟的必要性。



图 4-2 激波与气体界面作用过程中的局部 Knudsen 数

### 4.1.3 参数设置

本文所模拟的五个算例均采用 500\*200 的网格数。关于网格的无关性 Gallis 等人<sup>[67]</sup> 指 出计算域内的最大网格需要小于最小分子平均自由程。本文所采用的 DSMC 数值模拟方 法使用了子网格技术,每一个网格都在两个方向上均分为 5 个子网格,即一个网格内部有 25 个子网格。在这样的情况下,本文涉及到的数值模拟均符合上述网格精度的要求。同 时,每一个算例所取的时间步长也小于网格内粒子的平均碰撞时间 ( $\lambda/\overline{v_0}$ ) 以及平均运动 时间 ( $\Delta x/\sqrt{v_0}$ ) 以保证时间离散的精确性<sup>[95]</sup>。表4–1列出了不同算例的时间空间信息。这 里  $\overline{v_0} = \sqrt{2kT_0/m}$  是粒子的最似然热运动速度。

表 4-1 不同算例的时间空间信息								
	$L^*, \mu m$	$\Delta x_{sub}, \mu m$	$\overline{\lambda}_{min}, \mu m$	$\Delta t, s$	t,s			
算例1	5	0.010	0.0162	$2 \times 10^{-12}$	$1.25 \times 10^{-8}$			
算例 2	4	0.008	0.0169	$2 \times 10^{-12}$	$1.00 \times 10^{-8}$			
算例 3	3	0.006	0.0179	$2 \times 10^{-12}$	$7.50  imes 10^{-9}$			
算例 4	2	0.004	0.0190	$2 \times 10^{-12}$	$5.00 \times 10^{-9}$			
算例 5	1	0.002	0.0202	$2 \times 10^{-12}$	$2.50 \times 10^{-9}$			

另外,在 DSMC 数值模拟中,采样次数与每个网格内的粒子数决定着计算结果的统计误差。研究表明统计误差的大小反比于二者乘积的二分之一次方<sup>[96]</sup>。本文的五个算例采 样次数均为 3328 次,初始时刻每个网格内的粒子数为 12 个 (波后粒子数会增加到每个格 子 40-50 个左右)。这样的条件下,统计误差的估计值约为 0.5%。

### 第32页共64页

(霊)) 上海え豆大学

## 4.2 流场演化特征

本文所涉及到的五个算例只有尺度上的差别,因此对于结果的对比可以反映出在微尺度条件下,尺度变化对于计算结果的影响。

首先我们对比分析了不同尺度下的流动结构,这里我们用氩气的摩尔分数来说明,如 图4-3所示。其中红色代表 100% 氩气而蓝色代表 0% 氩气。这里为了能够进行有意义的对 比,每一行的三个图分别为同一个尺度下的三个不同演化阶段,分别对应于激波与界面相 互作用的前期、中期与后期。而每一列的五个图分别为不同尺度下同一无量纲时间下的流 动结构。

在演化的初期阶段,即激波刚刚开始与气体界面相互作用的阶段,不同尺度的算例最 主要的区别在于界面上的扩散程度。对于尺度比较大的算例(算例1&2),气体扩散并不 是十分明显,流场相似性很高。但对于尺度更小的算例,界面上的气体扩散随着尺度的降 低明显越来越显著,尤其是界面的下半部分,即为波后部分。对于这几个算例,流场的相 似性并不是显而易见的。

在激波与气体界面相互作用的过程中,压力梯度与密度梯度的外积是涡量沉积的主要 来源。而涡量沉积也是后续流场中涡的生成与演化的主要原因。图3的中间一列五张图代 表了不同尺度下,激波刚刚扫过界面时刻的流动结构。可以看到,较大尺度的情况(算例 1&2),中间主涡的发展明显比尺度较小的情况要好,同时流场相似性也很好。而对于尺 度较小的情况,相似性基本失效。尤其是对于最小尺度的情况,流场中基本看不到主涡的 生成与发展。图3最右边一列代表着不同尺度演化后期的流场情况。同样地,较大尺度下 相似性满足,主涡的生成与发展明显,更小尺度下相似性失效。

在宏观尺度下,仅仅在尺度上的变化,流动结构应该满足相似性<sup>[97]</sup>。为了进一步研 究在微尺度下的 RMI 问题的相似性失效现象,我们提取了在演化末期氩气浓度 60% 的等 值线,如图4-4所示。为了进行不同尺度下的对比,图4-4中采用无量纲的空间坐标,即  $\overline{x} = x/L^*$  以及  $\overline{y} = y/L^*$ 。可以看到,在较大尺度的条件下,等值线基本重合,这表明流 场具有很好的相似性。但对于尺度更小的情况,不同尺度的等值线开始分离,尤其是尺度 最小的情况下,等值线与叫大尺度的算例相去甚远,表明在该尺度下流场相似性的失效。 对于最小尺度,看不到流场中涡的卷起与发展。

# 4.3 涡量场演化特征

本节主要研究微尺度 RMI 问题中涡量的演化特征。作为一个重要的流动物理量,涡 量能够反映出在流场内的流动结构物理机制。对于涡量场更加深入的研究与认知能够知道 我们更加全面地理解微尺度 RMI 的流动特征。





图 4-3 不同尺度下不同时刻的流动结构



图 4-4 不同尺度下不同时刻的流动结构

第34页共64页

●) 上海え近大学

### 4.3.1 涡量的计算以及降噪处理

流场中涡量定义为速度矢量的旋度,如下:

$$\omega = \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} \tag{4-5}$$

要想求得流场中某一点的涡量大小,需要我们对数值模拟的速度场结果进行后处理。 这里我们采用四阶中心差分的方式来计算偏导数,如下:

$$\begin{cases}
\frac{\partial v}{\partial x} = \frac{-v(x_{i+2}, y_j) + 8v(x_{i+1}, y_j) - 8v(x_{i-1}, y_j) + v(x_{i-2}, y_j)}{12\Delta x} \\
\frac{\partial u}{\partial y} = \frac{-u(x_i, y_{j+2}) + 8u(x_i, y_{j+1}) - 8u(x_i, y_{j-1}) + u(x_i, y_{j-2})}{12\Delta y}
\end{cases}$$
(4-6)

在 DSMC 所得到的数值模拟结果中,往往存在着流动量的较大噪声。这主要是由于数值模拟中的粒子数以及采样次数不足造成的。然而过多的粒子数与采样次数会带来过重的计算负担,这样的消耗往往是没有必要的。对于一些积分量,比如流场中的环量(式4-7),其结果并不会受到噪声的影响,因为其是流场内格点位置上的统计平均,会自然地将噪声消除掉。但对于涡量场来说,噪声的存在会造成计算域内涡量的严重震荡,是我们更难观察出涡量场内部的一些特征。更加严重的是,噪声的存在会造成某些重要的积分量严重偏离真实值,比如涡拟能(式4-8)。其是流程内部格点涡量平方的总和。噪声越大,其值会越大。因此,对于涡量场的降噪处理是十分有必要的。

$$\Gamma = \int_{\partial A} \omega(x, y) dx dy \tag{4-7}$$

$$En = \int_{\partial A} \omega^2(x, y) dx dy \tag{4-8}$$

这里我们采用一种平均的方法来进行降噪处理。在每一个网格处,其涡量值用其周围 八个点以及其本身的平均值来代替,如下式所示:

$$\tilde{\omega}(x_{i}, y_{j}) = \frac{1}{9} \left[ \omega_{0}(x_{i}, y_{j}) + \sum \omega_{0}(x_{i\pm 1}, y_{j}) + \sum \omega_{0}(x_{i}, y_{j\pm 1}) + \sum \omega_{0}(x_{i+1}, y_{j\pm 1}) + \sum \omega_{0}(x_{i+1}, y_{j\pm 1}) \right]$$
(4-9)

这样,流场中各点的涡量在噪声方面就得到了大幅改善。为了说明上述降噪方法的效果, 我们选取了尺度最小的算例的计算终止时刻的涡量场。对于  $x \in [0, L^*], y \in [0, 2L^*]$  的区 域内,理论上流场中各点的涡量都应该为 0。图4–5展示了在该区域内未经降噪处理以及 经过了降噪处理的涡量场结果。可以看到,上述降噪方法能够简单而且有效地降低涡量场 的噪声,使之在粒子数与采用次数不变的情况下,更加接近于真实值。因此,后续有关于 涡量的一系列分析都是经过上述降噪方法处理过的结果。

第35页共64页





图 4-5 涡量场的降噪处理结果演示

另外,我们对涡量场进行了无量纲化,无量纲的方式如下:

$$\overline{\omega} = \frac{\omega}{V_{ps}/L^*} \tag{4-10}$$

其中, *V<sub>ps</sub>* 为本问题中选取的特征速度——激波波后速度。对于一个马赫数为6、比热比 5/3 为的运动激波, 其值为 1383.12 m/s。这对于本文的五个算例都是相同的。

### 4.3.2 结果分析

我们对比分析了不同尺度下涡量场的演化情况,如图4-6所示。与图4-3相同,每一行的五个图分别为同一个尺度下的五个不同演化阶段,而每一列的五个图分别为不同尺度下同一无量纲时间下的涡量场。这里我们展示的是无量纲的涡量大小。

在激波与气体界面相互作用的初期,即图4-6中第一列,流场中可以看到十分明显的 负涡量沉积。这样的涡量沉积是流场中主涡形成与发展的主要驱动力。另外,可以看到在 流场中还存在着正涡量的沉积 (图中红色区域)。这可以归因于从三波点发展出来的滑移 剪切层,它并非本文关注的重点。在激波扫过界面之后,流场中的涡开始自由演化,尺度 在其中产生的影响也可以被明显地看到。

对于尺度比较大的情况,涡量的演化表现出明显的相似性,这也是图4-3中流场满足 相似性的主要原因。可以看到负涡量在流场中分布十分集中,涡量的耗散、扩散并不是十 分显著。但对于尺度较小的情况,涡量的扩散十分显著,演化后期负涡量覆盖的区域随着 尺度的减小而增大,涡量的分布更加分散。对于尺度最小的情况,涡量十分分散,这也解



释了图4-3中主涡无法形成的现象。从现象学的角度来讲,涡量演化的相似性失效,对应 于流场演化的相似性失效。



图 4-6 不同尺度不同时刻的涡量场

🏝 上海え豆大学

## 4.4 环量与涡拟能的演化特征

前面的部分我们分析了不同尺度下的涡量演化。为了得到关于微尺度条件下 RMI 问题的更加全面的理解,我们进而计算了不同尺度下与涡量相关的重要积分量并分析了它们的演化过程,主要包括无量纲环量以及无量纲涡拟能,二者的表达式如下。

$$\overline{\Gamma} = \frac{\Gamma}{V_{ps}L^*} \tag{4-11}$$

$$\overline{En} = \frac{En}{V_{ps}^2} \tag{4-12}$$

另外,我们将演化时间也进行了无量纲化:

$$\bar{t} = \frac{t}{L^*/V_{ps}} \tag{4-13}$$

研究 RMI 问题中的环量与涡拟能演化并得到有效的结论,积分区域的选取很重要。 前面提到,这里涡量的沉积有两个主要来源。其中我们关心的主要是负涡量沉积,它主要 来自于激波与界面相互作用过程。另外一种是正涡量沉积,主要源于三波点衍生出来的滑 移剪切层,这并不是我们关心的涡量沉积来源,因此在计算环量与涡拟能的过程中应该将 这一部分剔除掉。由于 DSMC 算法的结果固有的噪声,直接对计算域内的负环量进行积 分是不合理的。这里经过一系列尝试性分析,我们应用氩气组分浓度为 15% 的等值线作 为每一时刻计算环量与涡拟能的积分区域边界。如图4-7所示,这样对积分区域的选取可 以有效地将我们并不关心的正涡量剔除掉。

不同尺度下的无量纲环量与涡拟能的演化情况如图4-8所示。为了说明的清晰性,这 里我们展示的是环量的相反数,以表征激波与界面作用过程中环量的沉积现象。

首先,关于环量的演化,在激波与界面相互作用的过程中,环量出现了陡增,这可以 归因于界面上的斜压涡量沉积。当激波已经完全扫过界面以后,理论上在界面上不再有斜 压涡量沉积,因此环量不再增长。对于宏观尺度上的问题,环量在这一阶段应该保持不 变。与此相反,在微尺度情况中,环量在激波与界面作用之后呈现下降的趋势。这是由于 涡量的粘性耗散导致的<sup>[65]</sup>。在大尺度条件下,涡量的粘性耗散项相比于斜压项来说是可以 忽略的。但在微尺度下,涡量的粘性耗散与斜压项具有可比性,开始发挥重要的作用。同 样的,涡拟能也在激波与界面作用的过程中显著增长,后续的过程中由于粘性耗散而慢慢 下降。

一个十分重要而且有趣的现象是环量与涡拟能在不同尺度下呈现出的不同相似性。对 于无量纲环量来说,不同尺度的演化曲线十分吻合,呈现出很强的相似性。但不同尺度下 的无量纲涡拟能却相差很远。这可以得到有关于尺度变化对于涡量扩散以及耗散的不同影 响。在流场中的某一个点上,涡量的变化有两部分,分别为当地涡量大小随时间的变化, 即为涡量的耗散,以及不同位置之间涡量的输运,即为涡量的扩散。环量是不同位置上涡





图 4-7 计算环量与涡拟能积分区域的选取

量的直接累加,因此其只能反映出涡量耗散的情况,无法反映涡量的扩散。而涡拟能是涡量平方的累加,在相同环量的情况下,涡量的分布越集中,涡拟能越大。这可以通过均值 定理直观理解。即当一组数的总和一定时,方差越大,所有数的平方和越大。

在图4-8中,不同尺度下的环量呈现出很好的相似性,但尺度越小,涡拟能就越小。 这说明在不同尺度下,涡量的耗散程度基本相同,而涡量的扩散情况差异显著,这便是我 们研究微尺度条件下的 RMI 问题中所得到的重要结论。这一点也反映在了图4-6之中,即 尺度越小,涡量的分布越分散。

# 4.5 涡量耗散与扩散的进一步分析

从上面的章节中,我们发现对于微尺度条件下的 RMI 问题,尺度对于涡量扩散与耗 散的影响有所不同。尺度变化对于涡量扩散程度的影响显著,但对于涡量的耗散程度并没 有明显的不同影响。在本节我们进一步定量化地研究涡量的耗散与扩散情况。

在我们对涡量场建模研究之前,首先需要确定流场中涡心的位置。这里我们采用涡量 面积平均的办法来确定涡心的位置,计算公式如式4-14。对于某一时刻的涡量场,首先我 们将涡心选取为最大涡量的位置。接着我们在距涡心 0.2L\* 的范围内对涡量进行面积平均 从而求出当前迭代步的涡心位置。接着再重复上述过程进行迭代,直到两次迭代的涡心距



图 4-8 不同算例环量与涡拟能随时间的演化

离在 0.001L\* 以内停止迭代。

$$\begin{cases} x_c = \frac{\sum x_i \tilde{\omega} (x_i, y_j)}{\sum \tilde{\omega} (x_i, y_j)} \\ y_c = \frac{\sum y_j \tilde{\omega} (x_i, y_j)}{\sum \tilde{\omega} (x_i, y_j)} \end{cases}$$
(4-14)

对于本为的五个算例,涡心的位置随时间变化如图4-9。这里我们采用无量纲的时间 与无量纲的位置。可以看到,不同尺度的涡心均为等速移动,移动速度基本相同。这一速 度与波后速度基本相同。因此,在涡心的确定方面,上述面积平均迭代的方法是可行而且 有效的。

为了定量化地研究涡量的扩散与耗散,我们在每一个演化时刻都提取了一条过涡心 且平行于 y 轴的直线。在该线上的涡量分布反映了涡量的耗散与扩散情况。从理论上说, RMI 问题中的涡量沉积应该只存在于激波与气体界面相互作用的位置。若提取一条平行 于 y 轴的直线,那么该线上在激波刚作用的时刻会出现一个十分集中的涡量,类似于一个 点涡源。在之后涡量会由于粘性耗散的作用而越来越分散。这样的物理机制十分类似于一 个典型的 Ossen 涡的演化。Ossen 涡的涡量分布与演化可以从涡量传输方程中理论推导得 到,其解析解满足 Gauss 分布。因此,这里我们也采用 Gauss 分布来建模本问题中的涡量 分布。

对于本文所研究的算例,在每一个时刻上,我们都可以将之前提取出来的过涡心的线上的涡量分布拟合为高斯分布。式4-15即为拟合所使用的公式。其中 $\overline{\Gamma}_{line}(t)$ 为无量纲的涡量在过涡心的线上的积分,即 $\overline{\Gamma}_{line}(t) = 2 \int_{y_c}^{y_{max}} \overline{\omega}(x_c, y, t) dy$ 。因此,在该拟合中,唯一需要确定的参数即为 $\sigma(t)$ 。我们这里采用最小二乘法来确定 $\sigma(t)$ 。在前面的章节中,我们提到了由三波点滑移线产生的正涡量并非我们关心的重点。由于正涡量的沉积只存在于涡心的下方区域,如图4-7所示,而高斯分布本身是一种对称的分布,因此我们在拟合过程



图 4-9 不同算例涡心位置随时间的变化

中,只选用涡心上方的数据进行拟合。这样在分析涡量的扩散与耗散时,便排除了正涡量 沉积的影响。

$$\overline{\omega}_{fit}(y,t) = \frac{\overline{\Gamma}_{line}(t)}{\sqrt{2\pi}\sigma(t)} \exp\left\{-\frac{(y-y_c)^2}{2\sigma^2(t)}\right\}$$
(4-15)

作为示例,图4-10展示了拟合区域的示意图以及算例1和算例5在最终计算时刻的涡量计算结果和拟合曲线的对比情况。总的来说,在涡心的上方区域,拟合情况很好,在涡心的下方区域,通过拟合,正涡量的影响被有效地排除在外。说明我们的拟合方式能够有效地反映涡量的分布特征。

进一步我们定量化地说明涡量的拟合情况。我们计算了每一个算例在每一个时刻上的 拟合度  $R^2$ ,它能反映拟合曲线与原始数据的相似程度。 $R^2$  越接近于 1,说明拟合程度越 好。在我们的研究中, $R^2$ 的计算公式如式4–16,其中  $\omega, \overline{\omega}, \omega_{fit}$ 分别为计算得到的涡量、 涡量的线上平均值以及拟合涡量。注意到我们仅对涡心以上的涡量数据进行拟合处理,因 此在式4–16中, $y_i > y_c$ 。我们计算了每一个算例在激波与气体界面作用结束之后  $R^2$ 的平 均值。结果如表4–2。总的来说,每一个算例的平均拟合度都非常接近于 1,表明我们的拟 合是行之有效的。

$$R^{2}(t) = 1 - \frac{\sum \left[\omega(x_{c}, y_{i}, t) - \overline{\omega}(x_{c}, y_{i}, t)\right]^{2}}{\sum \left[\omega(x_{c}, y_{i}, t) - \omega_{fit}(x_{c}, y_{i}, t)\right]^{2}}$$
(4-16)

通过对五个算例的涡量场进行 Gauss 分布的拟合,我们得到了一个新的重要参数,即 为 $\sigma(t)$ ,其在数学上为 Gauss 的方差。因此对于采用 Gauss 拟合的涡量场来说, $\sigma(t)$ 越小, 涡量分布越集中。 $\sigma(t)$ 可以直接反映涡量的扩散情况。 $\sigma(t)$ 越大说明涡量的扩散越严重。



图 4-10 涡量场 Gauss 分布拟合示意图以及结果

表 4-2 算例 1-5 的 R <sup>2</sup> 平均值								
	算例1	算例 2	算例 3	算例 4	算例 5			
$\overline{R^2}$	0.996	0.996	0.997	0.995	0.989			

图4-11展示了不同尺度下的五个算例  $\overline{\sigma} = \sigma/L^*$  随时间的演化情况。

可以看到,在图4-11左图中,对于尺度越小的算例,其*σ*越大,即涡量的扩散程度越强。这很符合我们前面章节中的定性研究的结论。

另外,有趣的是,我们发现不同尺度的算例,其 $\sigma$ 可以通过  $(L^*)^{-1/3}$ ·来进行归一化,即 $\sigma(\bar{t}) \propto (L^*)^{-1/3}$ ,涡量的扩散程度与尺度的负三分之一次方成正比。这样的现象还需后续更为详细的验证,其原因也需要更为严密的理论推导,对此本文不加论述。

# 4.6 本章小结

本章主要基于 DSMC 的数值模拟方法,研究了微尺度条件下 RMI 的演化特征。首先介绍了本文所进行的数值模拟的问题描述、数值方法的选取以及参数的设置,说明了本文所关注的物理问题采用 DSMC 的数值模拟方法是十分有必要的。

接着本章分析研究了在微尺度条件下,尺度对于流动结构演化的影响,发现了微尺度 下流场相似率的失效现象。降噪处理是我们能够更加清晰准确地认识涡量场的演化特征。 关于涡量场演化的分析使我们更加清楚地认识了流动结构演化差异背后的物理机制。

第42页共64页



图 4-11 不同算例 σ 随时间的变化

本章还研究了不同尺度下的环量与涡拟能的演化,得到了"在不同尺度下,涡量的耗 散程度基本相同,而涡量的扩散情况差异显著"的重要结论。进一步我们定量化地分析了 不同尺度下涡量的扩散情况。通过对涡量场的 Gauss 分布拟合,我们呢得到了一个能够直 接反映涡量扩散情况的参数 ō。通过对该参数的分析研究,发现尺度越小,涡量的扩散程 度越强。这很符合我们前面定性研究中得到的结论。



# 第五章 理论验证分析

本研究做出了一系列理论上的推导工作,得到了一些新的结论和模型,这些严格的推导过程与分析过程都已经在本文的"理论分析"章节论述详细了。本章主要是基于数值模拟得到的结果,对理论推导部分进行验证与进一步分析。

## 5.1 微尺度涡量传输方程验证分析

## 5.1.1 微尺度下本构方程的验证

在理论分析部分的第一节,我们推导研究了微尺度条件下的涡量传输方程。并阐述了 传统人们常用的涡量传输方程中的粘性项的表达式是基于三个假设得到的(式2-4),这三 个假设在微尺度条件下的适用性还需要进一步验证。

下面我们基于前面数值模拟的结果进行分析验证。首先我们验证流体本构方程的假 设。即:

$$\begin{cases} \tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \frac{\partial u_j}{\partial x_j}\right) + \delta_{ij} \lambda \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) \\ 3\lambda + 2\mu = 0 \end{cases}$$
(5-1)

其中, μ 为流体的粘性系数, 其可以表达为与温度有关的函数。这里我们采用指数定律的 形式<sup>[82]</sup>:

$$\mu = \mu_0 \left(\frac{T}{T_0}\right)^a \tag{5-2}$$

对于混合气体,粘性系数的计算如下:

$$\mu_{mix} = \mu_1 X_1 + \mu_2 X_2 \tag{5-3}$$

上述本构方程在大尺度下是普遍成立的,但在微尺度或是高稀薄条件下,存在失效的 现象。上述假设是基于 NS 方程的数值模拟方法的基本假设,是该数值模拟计算粘性应力 的基本方法。但由于我们采用的是基于 DSMC 的数值模拟方法,其本质并非是基于守恒 方程的,而是基于粒子运动的。因此,流体内部的粘性应力可以利用其微观表达式来得 到<sup>[82]</sup>。可以认为,这样得到的应力张量值为粘性应力的真实值。粘性应力的微观表达式如 下:

$$\begin{cases} \tau_{xx} = -n\overline{mu'u'} + p \\ \tau_{yy} = -n\overline{mv'v'} + p \\ \tau_{xy} = -n\overline{mu'v'} \end{cases}$$
(5-4)

#### 第44页共64页



因此,我们可以基于前面得到的五个算例的数据,分别采用本构方程以及粒子运动计 算出流场中各点的粘性应力,并比较二者的差距,以此来验证本构方程在该尺度下的适用 情况。

图5-1展示了上一章介绍的算例中,算例1与算例5的对比结果。分别为我们研究的最大尺度以及最小尺度。同一行的三张图分别为同一尺度下的三个不同的演化阶段,分别为前期、中期和后期。同一列的两张图具相同的无量纲时间。每张图所对应的流场情况都展示于图的右下角。每张图的横轴均为基于粒子运动得到的粘性应力张量,纵轴为基于本构方程得到的应力张量。不同颜色的点代表不同方向上的应力张量分量。因此若图中的点越偏离于 *y* = *x* 直线,则证明本构方程失效越严重。

可以看到,大体上图中的点都分布于 y = x 直线附近。但尺度越小,偏离越严重。可以看到对于我们研究的最小尺度,粘性应力张量的分布更为分散。离 y = x 直线变差稍大的点也更多。这说明了随着尺度的降低,本构方程的失效就越严重。这是符合前人研究的结论的。前人研究表明<sup>[98]</sup>,流动的 Knudsen 数越高,连续性假设越失效,与我们这里进行的验证结果相同。

但从图5-1可以看到,即便是我们研究的最小尺度,本构方程失效的程度也不高,大体上本构方程的粘性应力计算结果与真实值是比较接近的。因此可以认为在涡量传输方程中,本构方程的假设在本研究所涉及到的尺度范围内是适用的。

# 5.1.2 微尺度下环量传输粘性项的验证

上面我们验证了微尺度条件下流体本构方程的适用性,发现在我们所研究的尺度条件下,流体本构方程的失效情况并不严重,可以认为在涡量传输方程粘性项的表达式中该假设成立。本小结进一步研究另外两个假设是否成立,即流体内部粘性系数以及动力学粘度空间变化率的忽略。

这里我们采用间接的方式进行验证。在 RMI 问题中,环量变化率可以分解为斜压项 与粘性项之和 (式2-6)。斜压项与粘性项的原始表达式如下,其中对于 DSMC 数值模拟 的结果,上式中的粘性应力张量 *τ* 可以通过其微观表达求得。

$$\dot{\omega}_{bar} = \frac{1}{\rho^2} \left( \frac{\partial \rho}{\partial x} \frac{\partial p}{\partial y} - \frac{\partial \rho}{\partial y} \frac{\partial p}{\partial x} \right)$$
(5-5)

$$\dot{\omega}_{vis} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} \right) \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} \right) \right]$$
(5-6)

我们先来验证上面的表达式是否成立。图5-2展示了前面数值模拟的算例中最大尺度 与最小尺度下的结果。其中点代表了由式5-5和5-6计算得到的环量变化率斜压项与粘性项 之和,而线代表直接对涡量在面上积分得到的环量随时间的导数。这里采用二阶中心差分 的数值微分方法。

#### 第45页共64页



图 5-1 不同算例基于本构方程与粒子运动的粘性应力张量对比

可以看到,斜压项与粘性项之和与环量变化率的真实值基本相同,可以证明只要斜压 项与粘性项分别都能够计算准确,那么采用式2-6来计算环量是可行的。这实际上是流体 内部动量守恒直接推导得到的结果。

基于此,我们可以对粘性项简化形式的可用性加以验证。对于粘性项,其表达式如下,其中等号右边为粘性项在本构方程假设条件下的原始形式,约等号右边为在粘性系数 与动力学粘度空间变化率忽略的情况下的简化形式,即传统人们常用的形式。这里 7 代表 了基于本构方程计算得到的粘性应力张量值。

$$\dot{\omega}_{vis} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial \widetilde{\tau}_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \widetilde{\tau}_{yy}}{\partial y} \right) \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial \widetilde{\tau}_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \widetilde{\tau}_{xy}}{\partial y} \right) \right] \\ \simeq \nu \left( \frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial y^2} \right)$$
(5-7)

因此我们接下来验证粘性项的简化形式是否成立。若成立,那么在每一时刻其面积分 与斜压项的面积分之和应该恰好等于当时的环量变化率。若不等于则其不成立。

图5-3展示了最小尺度下的对比结果。其中蓝色点划线为粘性项的简化形式,红色虚 线为粘性项的非简化形式。蓝色三角为简化的粘性项与斜压项之和,红色三角为非简化的



图 5-2 不同算例斜压项与粘性项之和与环量变化率真实值对比

粘性项与斜压项之和。红色实现为环量变化率的真实值。

可以看到,若采用非简化的粘性项形式,斜压项与粘性项之和能够与环量变化率相吻 合,然而若采用简化的粘性项形式则无法吻合。这说明在小尺度下,涡量传输方程中粘性 项的简化形式并不适用,并不能真实地反映出环量的变化情况。

由于粘性项的简化形式主要是基于三个假设,而对于流体内部本构方程假设的可行性 我们已经在上一小节验证过了,因此,上面阐述的粘性项简化形式失效的本质原因可以归 因于粘性系数空间变化率的忽略。

在理论分析部分我们也详细论证了粘性项在环量沉积过程中所发挥的重要作用,说明 了其对环量沉积是产生促进作用的。同时我们还将粘性项分解为了"粘性生成项"与"粘 性耗散项",分别研究了二者对于环量沉积的影响。在图5-3中展示的粘性项非简化形式曲 线中,其的确是对环量沉积产生积极作用的。而若忽略粘性系数的空间变化率,则粘性项 只剩下"粘性耗散项",对环量沉积产生相反的影响,在图中也可以明显看到。说明数值 模拟的结果与我们在理论分析部分得到的重要结论是相吻合的。



图 5-3 涡量传输粘性项简化形式适用性验证

# 5.2 单个激波问题的数值验证

## 5.2.1 环量函数的数值验证

在前面的理论分析章节中,我们给出并详细推导了 RMI 问题中环量沉积以及其中的 粘性源项解析形式。我们给出的整个理论体系都是基于的那个激波问题提出的。因此本节 对理论分析章节中得到的关于单个激波问题的重要公式与结论进行验证分析。

对于一维激波问题,由于实验手段的局限性,目前人们只有办法能够得到激波内部的 密度分布,对于其他物理量的分布无法测得。在这一问题中,DSMC 算法是公认的可以作 为实验值的数值模拟方法,其得到的密度分布与实验值的结果也十分吻合<sup>[99]</sup>。因此本文采 用 DSMC 的数值模拟方法验证理论分析部分得到的重要结论。

我们主要采用一维稳定激波问题的 DSMC 数值模拟方法。其在 Bird 关于 DSMC 算法的书中有过详细的介绍以及实践<sup>[82]</sup>。

首先我们验证理论分析部分得到的单个激波环量函数 (式2-17) 的正确性。即验证跨 过激波,下式是否成立:

$$\frac{\rho_l}{p_l} \int_{\rho_l}^{\rho_r} \frac{1}{\rho} \frac{d(\tau_{xx} - p)}{d\rho} d\rho = \frac{2\gamma}{(\gamma + 1)^2} \left[ -\gamma M_s^2 + \frac{1}{M_s^2} + \gamma - 1 \right]$$
(5-8)

第48页共64页



等式左边可以认为是单个激波环量函数的真实值,我们通过对一维定常激波的数值模拟结果的数值积分得到。数值积分采用梯形公式。等式右边即为我们理论上给出的解析解。

这里我们对氩气内的正激波进行了马赫数在 1-10 范围内的数值模拟。波前温度压力选取为实验中<sup>[99]</sup>使用的 300*K*,50*mTorr*。在该条件下,波前分子平均自由程为 1.098*mm*。计算域大小为  $x \in [-0.03, 0.03]m$ ,网格精度为  $\Delta x = 0.1mm$ ,约为波前分子平均自由程的十分之一,可以认为计算结果的空间离散误差很小<sup>[90]</sup>。时间步长为  $\Delta t = 2 \times 10^{-8}$ ,小于分子平均碰撞时间,可以认为计算结果的时间离散误差很小<sup>[100]</sup>。流场稳定时间选取为  $2 \times 10^{-3}s$ 。随后采样步数设置为 10<sup>6</sup> 步以得到光滑准确的模拟结果。

计算结果如图5-4所示,其中三角代表数值模拟积分得到的单个激波环量函数,实线 代表本文理论给出的解析解。可以看到,对于马赫数在很大范围内的氩气正激波而言,解 析解与真实值几乎完全一样。足以证明,本文所给出的单个激波环量函数解析解是正确 的,能够准确预测单个激波的环量积分。这也间接地证明了本文所提出的 RMI 问题环量 模型是准确可行的。



图 5-4 单个激波环量方程的验证

### 5.2.2 TNSF 模型的数值验证

接下来,我们验证理论分析部分提出的单个激波 TNSF 模型。前面已经详细论述过, 我们的 TNSF 模型是基于双速度理论,对经典的 NSF 方程组中的能量方程进行修正而不 对其中的动量方程进行修正。下面我们来说明这种修正方法的合理性。

这里我们选取一个在氩气中的马赫数为10的激波,分别计算其基于经典的NSF方程

第49页共64页



组的动量守恒相对误差以及能量守恒相对误差,并计算基于修正的能量方程的能量守恒相 对误差。其中误差的计算都是相对于波前的动量及能量。具体公式如下:

$$error_m = \left| 1 - \frac{\rho u^2 + p - \tau_{xx}}{\rho_l u_l^2 + p_l} \right| \times 100\%$$
 (5–9)

$$error_{e} = \left| 1 - \frac{(E+p-\tau_{xx})u+q}{(E_{l}+p_{l})u_{l}} \right| \times 100\%$$
 (5-10)

图5-5展示了三个相对误差的大小。可以看到,对于原始的 NSF 方程组,其动量守恒 的误差(红线)本来就不大,最大误差只有 3% 左右。但其能量守恒的误差(绿线)相对 较大,最大误差达到了 13% 左右。而若采用本文 TNSF 模型中修正能量方程的办法进行 修正,能量守恒方程的最大误差降到了 6%。以上事实说明,基于双速度理论,本文采用 的只修正能量方程,不修正动量方程的办法是合理可行的。



图 5-5 激波内部动量、能量守恒方程验证

本文理论分析部分阐述了要想求得环量沉积中粘性项大小的解析解,激波内部"密度-粘性应力"的关系求解是核心问题。本文也分别给出了 NSF 模型以及 TNSF 模型来求 解"密度-粘性应力"关系,控制方程分别为式2-27以及式2-40。下面我们基于对单个激 波的数值模拟结果来验证两个模型的可行性。由于经典的 NSF 方程对于马赫数越高的激 波,其适用性越差。因此为了暴露问题,我们这里选取一个氩气中马赫数为 10 的激波来 进行验证分析。

由于式2-27或式2-40的解析解难以获得,我们通过数值方法对该常微分方程进行求



解。这里我们选用欧拉方法进行求解,推进步数为 10000 步,初值为 ( $f_{\rho}$ , -0.0001),其中  $f_{\rho}$ 为利用 Rankine-Hugoniot 激波关系式求得的波后密度。这里  $\phi$  的初值选取为一小量以防 止分母为 0 的问题发生。

图5-6展示了 NSF 模型与 TNSF 模型给出的"密度-粘性应力"关系曲线与 DSMC 数 值模拟结果的对比。可以看到,基于经典 NSF 方程组的 NSF 模型对粘性应力的计算(绿 线)偏大,与真实值相差甚远,不可接受。而 TNSF 模型对激波内部"密度-粘性应力" 的计算(蓝线)十分吻合于 DSMC 数值模拟结果。这说明我们所提出的 TNSF 模型能够较 为准确的给出激波内部"密度-粘性应力"关系,可以用于进一步单个激波粘性项函数的 计算。



图 5-6 NSF 模型与 TNSF 模型关于"密度-粘性应力"关系的对比验证

## 5.2.3 粘性项函数的数值验证

最后,我们对基于理论分析部分的 NSF 模型以及 TNSF 模型得到的单个激波粘性项 函数进行对比验证。这里我们仍然选取氩气中马赫数 1-10 的正激波进行与 DSMC 数值模 拟结果的对比。

基于式2-27或式2-40给出的"密度-粘性应力"关系,我们可以通过数值积分的办法, 给出式2-42所示的单个激波粘性项函数结果。这里我们仍然选用梯形公式进行数值积分。 在马赫数 1-10 的范围内,我们间隔 0.01 的马赫数进行数值求解。其与 DSMC 数值模拟结 果的对比如图5-7所示。

可以看到,基于 NSF 模型得到的单个激波粘性项函数(绿线)与真实值偏差很大,尤 其是对于马赫数较高的激波。而 TNSF 模型(蓝线)则在马赫数 1-10 的范围内,能够对单



个激波粘性项函数做出准确的预测,结果与 DSMC 数值模拟结果十分吻合,证明了我们 提出的 TNSF 模型的可行性。



图 5-7 NSF 模型与 TNSF 模型关于粘性项函数的对比验证

综上,一系列验证结果表明,本文的理论推导部分对单个激波问题做出了很准确可靠的预测。只要将其应用于 RMI 问题,便可以给出某一特定的 RMI 问题环量变化率以及其中粘性项的大小。即:

$$\begin{cases} \dot{\Gamma} = \sum_{i=1}^{N_s} \left( \mathcal{B}_{s,i} + \mathcal{V}_{s,i} \right) = \frac{p_0}{\rho_0} \sum_{i=1}^{N_s} f_{p/\rho,i} \left( \gamma_0, M_0 \right) f_{\Gamma,i} \left( \gamma_i, M_{s,i} \right) \\ \dot{\Gamma}_{vis} = \sum_{i=1}^{N_s} \mathcal{V}_{s,i} = \frac{p_0}{\rho_0} \sum_{i=1}^{N_s} f_{p/\rho,i} \left( \gamma_0, M_0 \right) f_{\mathcal{V},i} \left( \operatorname{Pr}_i, \gamma_i, M_{s,i} \right) \end{cases}$$
(5-11)

上式中,每一个激波的波前压力与密度之比  $p_l/\rho_l$  被表达为了一个与入射激波马赫数以及 比热比有关的函数,这一函数对于不同的 RMI 问题是不同的:

$$f_{p/\rho,i}(\gamma_0, M_0) = \frac{\rho_0}{p_0} \frac{p_{l,i}}{\rho_{l,i}}$$
(5-12)

# 5.3 本章小结

本章主要是对本文第二章的一系列理论推导所得出的结论与公式进行数值模拟的验证。

首先我们验证与分析了微尺度下的涡量传输方程。经验证,即便是我们研究的最小尺



度,本构方程失效的程度也不高,大体上本构方程的粘性应力计算结果与真实值是比较接近的。因此可以认为在涡量传输方程中,本构方程的假设在本研究所涉及到的尺度范围内 是适用的。但同时经验证,涡量传输方程中粘性项的简化形式在微尺度条件下式不适用 的。这主要是由于粘性系数空间变化率的忽略所导致的。这也间接印证了我们在理论推导 部分将粘性项分解为"粘性生成项"与"粘性耗散项"的合理性。

接着我们对单个激波问题进行了数值验证。关于单个激波环量函数的验证表明,我们 在理论分析部分给出的环量函数解析解是准确可靠的,与数值模拟结果几乎相同,这也间 接地证明了本文所提出的 RMI 问题环量模型是准确可行的。

最后我们对理论分析部分提出的 NSF 模型与 TNSF 模型进行了数值验证。结果表明, 相比于基于经典 NSF 方程组得到的 NSF 模型, TNSF 模型与数值模拟结果吻合很好,即 便是对于马赫数很高的激波也是适用的。基于此得到的单个激波粘性项函数的结果也与数 值模拟结果十分吻合,证明了我们提出的 TNSF 模型的可行性。

因此本文的理论推导部分对单个激波问题做出了很准确可靠的预测。将其应用于 RMI 问题,便可以给出某一特定的 RMI 问题环量变化率以及其中粘性项的大小。



# 全文总结

### 主要工作总结

本文主要基于超燃冲压发动机燃烧室内油气高效混合的应用背景,研究了激波与气体 界面的相互作用不稳定性问题。本文从理论分析以及数值模拟两方面,对该问题进行了较 为详细的研究。具体研究总结如下:

首先我们进行了理论分析方面的研究。我们从理论上分析研究了微尺度条件下涡量传输方程的适用性并给出了其中粘性项的原始表达式以及传统人们常用的简化形式。接着我们从理论上推导得到了 RMI 问题中环量沉积的解析式。现有的全部环量模型是本文提出的环量模型的简化形式或是等效变形,做到了环量模型方面的理论统一。

在理论研究方面,更重要的是,本文给出了 RMI 问题中环量沉积来源中粘性项的具体大小。这是前人研究中所未能实现的。我们基于双速度理论给出了计算环量沉积粘性项的 TNSF 模型,并指出前人关于粘性影响的忽略以及认为其对环量沉积产生消极影响是不正确的。我们还进一步将粘性项分解为了对环量沉积产生积极影响的"粘性生成项"以及产生消极影响的"粘性耗散项"以研究粘性项在本质上的影响机制。

在数值模拟部分,本文研究问题的特殊性决定了本文需要采用 DSMC 的数值模拟方 法进行模拟。本文分析研究了在微尺度条件下 RMI 问题的演化特征。主要是从流场特征、 涡量场特征、环量与涡拟能特征的角度进行的分析与研究。基于对于涡量耗散与扩散的定 性分析,我们进一步通过对该问题中涡量场的 Gauss 分布拟合,引入了新的定量化反映涡 量扩散程度的参数 σ。通过对该参数的研究,得出了"在微尺度 RMI 问题中,尺度越小、 涡量的扩散程度越强"的结论。符合我们前面定性研究中得到的结论。

最后,我们对理论分析部分给出的一系列结论与公式进行了详细的数值模拟方面的验证。我们首先验证与分析了涡量传输方程粘性项简化形式的适用性。发现在本文所研究的 微尺度条件下,粘性项的简化形式并不适用。这主要是由于对粘性系数空间变化率的忽略 所导致的,间接印证了我们在理论推导部分将粘性项分解为"粘性生成项"与"粘性耗散项"的合理性。接着我们对单个激波问题进行了数值验证。关于单个激波问题的验证表 明,我们在理论分析部分给出的环量函数解析解是准确可靠的,与数值模拟结果几乎相 同。最后我们对理论分析部分提出的 NSF 模型与 TNSF 模型进行了数值验证。结果表明,相比于基于经典 NSF 方程组得到的 NSF 模型,TNSF 模型与数值模拟结果吻合很好,即 便是对于马赫数很高的激波也是适用的。证明了我们提出的 TNSF 模型的可行性。

## 未来研究展望

基于以上关于 RMI 问题的研究成果,仍可继续进行的研究有:

1. 进一步将本文提出的 RMI 问题中的环量模型以及粘性项的 TNSF 模型进行简化,



从数学上给出可以简单应用的初等函数解析形式,并将其推广应用于特定的 RMI 问题。

2. 进一步研究不同马赫数、不同密度比、不同界面初始形式的 RMI 问题,得到关于 该问题真正的普适定律以及结论。

3. 进一步分析在 RMI 问题中,激波扫过界面之后环量变化的来源,从理论上给出在 作用后期环量增长或衰减的的原因以及预测模型。

4. 继续深入研究本研究在超燃冲压发动机燃烧室油气混合方面的应用。



参考文献

- [1] LORD R. Investigation of the character of the equilibrium of an incompressible heavy fluid of variable density[J]. Scientific papers, 1900:200–207.
- [2] TAYLOR G I. The instability of liquid surfaces when accelerated in a direction perpendicular to their planes. I[J]. Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences, 1950, 201(1065):192–196.
- [3] RICHTMYER R D. Taylor instability in shock acceleration of compressible fluids[J]. Communications on Pure and Applied Mathematics, 1960, 13(2):297–319.
- [4] MESHKOV E. Instability of the interface of two gases accelerated by a shock wave[J]. Fluid Dynamics, 1969, 4(5):101–104.
- [5] WU C, ROBERTS P. Richtmyer-Meshkov Instability and the Dynamics of the Magnetosphere[J]. Geophysical research letters, 1999, 26(6):655–658.
- [6] WU C. Shock wave interaction with the magnetopause[J]. Journal of Geophysical Research: Space Physics, 2000, 105(A4):7533–7543.
- [7] BETHE H A. Supernova mechanisms[J]. Reviews of Modern Physics, 1990, 62(4):801.
- [8] JANKA H T, LANGANKE K, MAREK A, et al. Theory of core-collapse supernovae[J]. Physics Reports, 2007, 442(1-6):38–74.
- [9] MARBLE F E, HENDRICKS G J, ZUKOSKI E E. Progress toward shock enhancement of supersonic combustion processes[M]//Turbulent Reactive Flows.[S.1.]: Springer, 1989:932–950.
- [10] YANG J, KUBOTA T, ZUKOSKI E E. Applications of shock-induced mixing to supersonic combustion[J]. AIAA journal, 1993, 31(5):854–862.
- [11] YANG Q, CHANG J, BAO W. Richtmyer-Meshkov instability induced mixing enhancement in the scramjet combustor with a central strut[J]. Advances in Mechanical Engineering, 2014, 6:614189.
- [12] KHOKHLOV A M, ORAN E S, CHTCHELKANOVA A Y, et al. Interaction of a shock with a sinusoidally perturbed flame[J]. Combustion and flame, 1999, 117(1-2):99–116.



- [13] KHOKHLOV A, ORAN E, THOMAS G. Numerical simulation of deflagration-to-detonation transition: the role of shock–flame interactions in turbulent flames[J]. Combustion and Flame, 1999, 117(1-2):323–339.
- [14] BILLET G, ABGRALL R. An adaptive shock-capturing algorithm for solving unsteady reactive flows[J]. Computers & fluids, 2003, 32(10):1473–1495.
- [15] BILLET G. Improvement of convective concentration fluxes in a one step reactive flow solver[J]. Journal of Computational Physics, 2005, 204(1):319–352.
- [16] FUKUMOTO Y, LUGOMER S. Instability of vortex filaments in laser-matter interactions[J]. Physics Letters A, 2003, 308(5-6):375–380.
- [17] ZABUSKY N, LUGOMER S, ZHANG S. Micro-fluid dynamics via laser metal surface interactions: Wave-vortex interpretation of emerging multiscale coherent structures[J]. Fluid dynamics research, 2005, 36(4-6):291.
- [18] SAMULYAK R, PRYKARPATSKYY Y. Richtmyer–Meshkov instability in liquid metal flows: influence of cavitation and magnetic fields[J]. Mathematics and Computers in Simulation, 2004, 65(4-5):431–446.
- [19] SUBRAMANIAM A, GHAISAS N S, LELE S K. High-order eulerian simulations of multimaterial elastic-plastic flow[J]. Journal of Fluids Engineering, 2018, 140(5):050904.
- [20] BRODE H L. A calculation of the blast wave from a spherical charge of TNT[R].[S.I.]: RAND CORP SANTA MONICA CA, 1958.
- [21] BALAKRISHNAN K, GENIN F, NANCE D V, et al. Numerical study of blast characteristics from detonation of homogeneous explosives[J]. Shock Waves, 2010, 20(2):147–162.
- [22] BETTI R, HURRICANE O. Inertial-confinement fusion with lasers[J]. Nature Physics, 2016, 12(5):435.
- [23] HOLMES R L, DIMONTE G, FRYXELL B, et al. Richtmyer–Meshkov instability growth: experiment, simulation and theory[J]. Journal of Fluid Mechanics, 1999, 389:55–79.
- [24] BROUILLETTE M. The richtmyer-meshkov instability[J]. Annual Review of Fluid Mechanics, 2002, 34(1):445–468.
- [25] ZHOU Y. Rayleigh–Taylor and Richtmyer-Meshkov instability induced flow, turbulence, and mixing. I[J]. Physics Reports, 2017, 720-722:1–136.
- [26] ZHOU Y. Rayleigh–Taylor and Richtmyer–Meshkov instability induced flow, turbulence, and mixing. II[J]. Physics Reports, 2017, 723:1–160.



- [27] KOLMOGOROV A N. The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large Reynolds numbers[J]. Cr Acad. Sci. URSS, 1941, 30:301–305.
- [28] KOLMOGOROFF A. Dissipation of energy in the locally isotropic turbulence[J]. CR Acad. Sci. URSS, 1941, 32:16–18.
- [29] GRINSTEIN F, GOWARDHAN A, RISTORCELLI J. Implicit large eddy simulation of shock-driven material mixing[J]. Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 2013, 371(2003):20120217.
- [30] XIAO J X, BAI J S, WANG T. Numerical study of initial perturbation effects on Richtmyer-Meshkov instability in nonuniform flows[J]. Physical Review E, 2016, 94(1):013112.
- [31] BALASUBRAMANIAN S, ORLICZ G, PRESTRIDGE K. Experimental study of initial condition dependence on turbulent mixing in shock-accelerated Richtmyer–Meshkov fluid layers[J]. Journal of Turbulence, 2013, 14(3):170–196.
- [32] THORNBER B, DRIKAKIS D, YOUNGS D, et al. The influence of initial conditions on turbulent mixing due to Richtmyer–Meshkov instability[J]. Journal of Fluid Mechanics, 2010, 654:99–139.
- [33] OGGIAN T, DRIKAKIS D, YOUNGS D, et al. Computing multi-mode shock-induced compressible turbulent mixing at late times[J]. Journal of Fluid Mechanics, 2015, 779:411–431.
- [34] DIMONTE G, SCHNEIDER M. Density ratio dependence of Rayleigh–Taylor mixing for sustained and impulsive acceleration histories[J]. Physics of Fluids, 2000, 12(2):304–321.
- [35] ZHOU Y, CABOT W H, THORNBER B. Asymptotic behavior of the mixed mass in Rayleigh–Taylor and Richtmyer–Meshkov instability induced flows[J]. Physics of Plasmas, 2016, 23(5):052712.
- [36] WEBER C R, HAEHN N S, OAKLEY J G, et al. An experimental investigation of the turbulent mixing transition in the Richtmyer–Meshkov instability[J]. Journal of Fluid Mechanics, 2014, 748:457–487.
- [37] LOMBARDINI M, PULLIN D, MEIRON D. Transition to turbulence in shock-driven mixing: a Mach number study[J]. Journal of Fluid Mechanics, 2012, 690:203–226.
- [38] BALAKUMAR B, ORLICZ G, TOMKINS C, et al. Simultaneous particle-image velocimetry-planar laser-induced fluorescence measurements of Richtmyer–Meshkov instability growth in a gas curtain with and without reshock[J]. Physics of Fluids, 2008, 20(12):124103.



- [39] BALAKUMAR B, ORLICZ G, RISTORCELLI J, et al. Turbulent mixing in a Richtmyer–Meshkov fluid layer after reshock: velocity and density statistics[J]. Journal of Fluid Mechanics, 2012, 696:67–93.
- [40] URZAY J. Supersonic combustion in air-breathing propulsion systems for hypersonic flight[J]. Annual Review of Fluid Mechanics, 2018, 50:593–627.
- [41] FERRI A. Mixing-controlled supersonic combustion[J]. Annual Review of Fluid Mechanics, 1973, 5(1):301–338.
- [42] RUBINS P, BAUER R. Review of shock-induced supersonic combustion research and hypersonic applications[J]. Journal of Propulsion and Power, 1994, 10(5):593–601.
- [43] CURRAN E, HEISER W, PRATT D. Fluid phenomena in scramjet combustion systems[J]. Annual Review of Fluid Mechanics, 1996, 28(1):323–360.
- [44] TOMKINS C, KUMAR S, ORLICZ G, et al. An experimental investigation of mixing mechanisms in shock-accelerated flow[J]. Journal of Fluid Mechanics, 2008, 611:131–150.
- [45] BABINSKY E, SOJKA P. Modeling drop size distributions[J]. Progress in energy and combustion science, 2002, 28(4):303–329.
- [46] MOVAHED P, JOHNSEN E. A solution-adaptive method for efficient compressible multifluid simulations, with application to the Richtmyer–Meshkov instability[J]. Journal of Computational Physics, 2013, 239:166–186.
- [47] SAMTANEY R, PULLIN D. On initial-value and self-similar solutions of the compressible Euler equations[J]. Physics of Fluids, 1996, 8(10):2650–2655.
- [48] GRIFFITH W C. Shock waves[J]. Journal of Fluid Mechanics, 1981, 106:81–101.
- [49] URIBE F, VELASCO R. Shock-wave structure based on the Navier-Stokes-Fourier equations[J]. Physical Review E, 2018, 97(4):043117.
- [50] HOUIM R W, KUO K K. A low-dissipation and time-accurate method for compressible multicomponent flow with variable specific heat ratios[J]. Journal of Computational Physics, 2011, 230(23):8527–8553.
- [51] KADAU K, ROSENBLATT C, BARBER J L, et al. The importance of fluctuations in fluid mixing[J]. Proceedings of the National Academy of Sciences, 2007, 104(19):7741–7745.
- [52] GALLIS M A, KOEHLER T, TORCZYNSKI J R, et al. Direct simulation Monte Carlo investigation of the Rayleigh-Taylor instability[J]. Physical Review Fluids, 2016, 1(4):043403.



- [53] HAWLEY J F, ZABUSKY N J. Vortex paradigm for shock-accelerated density-stratified interfaces[J]. Physical review letters, 1989, 63(12):1241.
- [54] PICONE J, ORAN E, BORIS J, et al. Theory of vorticity generation by shock wave and flame interactions[R].[S.1.]: NAVAL RESEARCH LAB WASHINGTON DC, 1984.
- [55] PICONE J, BORIS J. Vorticity generation by shock propagation through bubbles in a gas[J]. Journal of Fluid Mechanics, 1988, 189:23–51.
- [56] YANG J, KUBOTA T, ZUKOSKI E E. An analytical and computational investigation of shockinduced vortical flows[C]//30th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit. .[S.l.]: [s.n.], 1991:316.
- [57] YANG J, KUBOTA T, ZUKOSKI E E. A model for characterization of a vortex pair formed by shock passage over a light-gas inhomogeneity[J]. Journal of Fluid Mechanics, 1994, 258:217–244.
- [58] SAMTANEY R, ZABUSKY N J. Circulation deposition on shock-accelerated planar and curved density-stratified interfaces: models and scaling laws[J]. Journal of Fluid Mechanics, 1994, 269:45–78.
- [59] NIEDERHAUS J H, GREENOUGH J, OAKLEY J, et al. A computational parameter study for the three-dimensional shock–bubble interaction[J]. Journal of Fluid Mechanics, 2008, 594:85–124.
- [60] YANG X, CHERN I L, ZABUSKY N J, et al. Vorticity generation and evolution in shockaccelerated density-stratified interfaces[J]. Physics of Fluids A: Fluid Dynamics, 1992, 4(7):1531–1540.
- [61] SAMTANEY R, RAY J, ZABUSKY N J. Baroclinic circulation generation on shock accelerated slow/fast gas interfaces[J]. Physics of fluids, 1998, 10(5):1217–1230.
- [62] KOTELNIKOV A D, RAY J, ZABUSKY N J. Vortex morphologies on reaccelerated interfaces: Visualization, quantification and modeling of one-and two-mode compressible and incompressible environments[J]. Physics of fluids, 2000, 12(12):3245–3264.
- [63] PENG G, ZABUSKY N J, ZHANG S. Vortex-accelerated secondary baroclinic vorticity deposition and late-intermediate time dynamics of a two-dimensional Richtmyer–Meshkov interface[J]. Physics of Fluids, 2003, 15(12):3730–3744.
- [64] HEJAZIALHOSSEINI B, ROSSINELLI D, KOUMOUTSAKOS P. Vortex dynamics in 3D shockbubble interaction[J]. Physics of Fluids, 2013, 25(11):110816.



- [65] WANG Z, YU B, CHEN H, et al. Scaling vortex breakdown mechanism based on viscous effect in shock cylindrical bubble interaction[J]. Physics of Fluids, 2018, 30(12):126103.
- [66] KADAU K, BARBER J L, GERMANN T C, et al. Scaling of atomistic fluid dynamics simulations[J]. Physical Review E, 2008, 78(4):045301.
- [67] GALLIS M A, KOEHLER T P, TORCZYNSKI J R, et al. Direct simulation Monte Carlo investigation of the Richtmyer-Meshkov instability[J]. Physics of Fluids, 2015, 27(8):084105.
- [68] HENDERSON L F, COLELLA P, PUCKETT E G. On the refraction of shock waves at a slow-fast gas interface[J]. Journal of Fluid Mechanics, 1991, 224:1–27.
- [69] ABD-EL-FATTAH A, HENDERSON L. Shock waves at a slow-fast gas interface[J]. Journal of Fluid Mechanics, 1978, 89(1):79–95.
- [70] ABD-EL-FATTAH A, HENDERSON L. Shock waves at a fast-slow gas interface[J]. Journal of Fluid Mechanics, 1978, 86(1):15–32.
- [71] BALAKRISHNAN R, AGARWAL R. A comparative study of several higher-order kinetic formulations beyond Navier-Stokes for computing the shock structure[C]//37th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit. .[S.l.]: [s.n.], 1999:224.
- [72] PAOLUCCI S, PAOLUCCI C. A second-order continuum theory of fluids[J]. Journal of Fluid Mechanics, 2018, 846:686–710.
- [73] BRENNER H. Kinematics of volume transport[J]. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 2005, 349(1-2):11–59.
- [74] BRENNER H. Navier–Stokes revisited[J]. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 2005, 349(1-2):60–132.
- [75] BRENNER H. Bi-velocity hydrodynamics[J]. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 2009, 388(17):3391–3398.
- [76] GREENSHIELDS C J, REESE J M. The structure of shock waves as a test of Brenner's modifications to the Navier–Stokes equations[J]. Journal of Fluid Mechanics, 2007, 580:407–429.
- [77] REN W, LIU H, JIN S. An asymptotic-preserving Monte Carlo method for the Boltzmann equation[J]. Journal of Computational Physics, 2014, 276:380–404.
- [78] ZHANG B, LIU H, JIN S. An asymptotic preserving Monte Carlo method for the multispecies Boltzmann equation[J]. Journal of Computational Physics, 2016, 305:575–588.



- [79] CHEN H, ZHANG B, LIU H. Non-Rankine–Hugoniot shock zone of Mach reflection in hypersonic rarefied flows[J]. Journal of Spacecraft and Rockets, 2016:619–628.
- [80] LIU H, CHEN H, ZHANG B, et al. Effects of Mach Number on Non-Rankine–Hugoniot Shock Zone of Mach Reflection[J]. Journal of Spacecraft and Rockets, 2018:1–10.
- [81] ALDER B J, WAINWRIGHT T E. Studies in molecular dynamics. I. General method[J]. The Journal of Chemical Physics, 1959, 31(2):459–466.
- [82] BIRD G A. Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows[M]. 1. Oxford Engineering Science Series, Oxford Univ. Press, Oxford, England, U.K.: Clarendon Press, 1994.
- [83] BIRD G. Monte Carlo simulation of gas flows[J]. Annual Review of Fluid Mechanics, 1978, 10(1):11–31.
- [84] SHARMA A, LONG L N. Numerical simulation of the blast impact problem using the Direct Simulation Monte Carlo (DSMC) method[J]. Journal of Computational Physics, 2004, 200(1):211–237.
- [85] BIRD G. Aspects of the structure of strong shock waves[J]. The Physics of Fluids, 1970, 13(5):1172–1177.
- [86] GALLIS M, BITTER N, KOEHLER T, et al. Molecular-level simulations of turbulence and its decay[J]. Physical review letters, 2017, 118(6):064501.
- [87] MUNTZ E P. Rarefied Gas Dynamics[J]. Annual Review of Fluid Mechanics, 1989, 21(1):387–422.
- [88] ERWIN D A, PHAM-VAN-DIEP G C, MUNTZ E P. Nonequilibrium gas flows. I: A detailed validation of Monte Carlo direct simulation for monatomic gases[J]. Physics of Fluids A: Fluid Dynamics, 1991, 3(4):697–705.
- [89] HICKS B L, YEN S M, REILLY B J. The internal structure of shock waves[J]. Journal of Fluid Mechanics, 1972, 53(1):85–111.
- [90] ALEXANDER F J, GARCIA A L, ALDER B J. Cell size dependence of transport coefficients in stochastic particle algorithms[J]. Physics of Fluids, 1998, 10(6):1540–1542.
- [91] KOFFI K, ANDREOPOULOS Y, WATKINS C B. Dynamics of microscale shock/vortex interaction[J]. Physics of Fluids, 2008, 20(12):126102.
- [92] ELIZAROVA T G, SHIROKOV I A, MONTERO S. Numerical simulation of shock-wave structure for argon and helium[J]. Physics of Fluids, 2005, 17(6):068101.



- [93] BOYD I D. Predicting breakdown of the continuum equations under rarefied flow conditions[J]. AIP Conference Proceedings, 2003, 663(1):899–906.
- [94] WANG W L, BOYD I D. Predicting continuum breakdown in hypersonic viscous flows[J]. Physics of fluids, 2003, 15(1):91–100.
- [95] GARCIA A L, WAGNER W. Time step truncation error in direct simulation Monte Carlo[J]. Physics of Fluids, 2000, 12(10):2621–2633.
- [96] HADJICONSTANTINOU N G, GARCIA A L, BAZANT M Z, et al. Statistical error in particle simulations of hydrodynamic phenomena[J]. Journal of computational physics, 2003, 187(1):274–297.
- [97] LEVY K, SADOT O, RIKANATI A, et al. Scaling in the shock–bubble interaction[J]. Laser and Particle Beams, 2003, 21(3):335–339.
- [98] SCHWARTZENTRUBER T, BOYD I. Investigation of Continuum Breakdown in Hypersonic Flows Using a Hybrid DSMC-NS Algorithm[C]//40th Thermophysics Conference. .[S.1.]: [s.n.], 2008:4108.
- [99] ALSMEYER H. Density profiles in argon and nitrogen shock waves measured by the absorption of an electron beam[J]. Journal of Fluid Mechanics, 1976, 74(3):497–513.
- [100] HADJICONSTANTINOU N G. Time step dependence of transport coefficients in the direct simulation Monte Carlo[J]. AIP Conference Proceedings, 2001, 585(1):381–387.


## 致 谢

随着毕业论文完稿在即,本科四年的学习生活即将结束。本文的顺利完成首先需要感谢我的导师徐辉老师,您对于学术前沿敏锐的把握力以及严谨的学术态度一直在潜移默化中影响着我,促进我克服一次又一次的困难。其次我要感谢张斌老师在我大二时就带领我进入实验室,通过科研比赛为我打开科研的大门。四年中张老师持续不断地鼓励与帮助我,在我陷入瓶颈的时候利用自己丰富的科研经验与我讨论,激发灵感。张老师的勤奋与刻苦将一直是我学习的榜样。其次我尤其要感谢实验室的余彬、陈浩师兄。从大二起,两位学长就一直在技术层面给予我悉心的指导,直到我理解为止。祝愿他们的的科研之路能越走越远,更上一层楼。另外,我想特别地感谢一下我的女朋友"古木夕羊"。在我开心的时候,她能与我一同分享喜悦,在我难过的时候,她能跟我共同分担痛苦。每当我谈起自己科研上的宏图壮志,或是我感兴趣的"科学小常识",她都会耐心聆听并与我一同交流,这让我感到十分幸福。科研生活有时候是枯燥乏味的,但每当想起远方还有一个人在乎着我,我便充满了动力,带着自信与执着去面对前方的困难和挑战。愿她在未来的学习生活中,有阳光、有甘露、还有我的陪伴。最后,我要感谢父母在生活上给予我无微不至的关怀,你们一直是我最坚实的依靠、最温暖的港湾。



## 攻读学位期间发表的学术论文目录

- LIU H C, CHEN H, ZHANG B, LIU H. Effects of Mach Number on Non-Rankine–Hugoniot Shock Zone of Mach Reflection[J]. Journal of Spacecraft and Rockets, 2019, 56(3): 761-770.
- [2] LIU H C, CHEN H, YU B, ZHANG B, LIU H. On the Shock/Step-interface Interaction in Microscale conditions[J](accepted). AIP Conference Proceedings, 2018.



## A STUDY ON THE UNIFIED SIMILARITY LAW OF THE Richtmyer-Meshkov instability for shock induced mixing enhancement in scramjet

The Richtmyer-Meshkov instability (RMI) for shock induced mixing enhancement in scramjet was investigated theoretically and numerically.

The so-called RMI problem is the shock-induced gas interface instability. RMI problems exist widely in nature. A better understanding of RMI problems will help us to understand these natural phenomena more deeply and even make use of them. Academically, the RMI problem is a good carrier to study the ultimate problem of aerodynamics, turbulence. In recent years, many studies have been done through RMI to study turbulence. It also has a very wide application background in the engineering field. The main engineering application background of this research is scramjet. The air-breathing hypersonic vehicle has very important application prospects and potential value in both military and civil applications. The only engine type available is scramjet. In scramjet, the fuel combustion time scale does not match the internal flow time scale of the engine, resulting in insufficient mixing of the fuel and gas, insufficient combustion and insufficient thrust. So how to promote mixing has always been the focus of the researches. Due to the existence of a series of shock waves in the flow field of scramjet, the interaction between air, fuel and shock waves the RMI problem. Therefore, an in-depth understanding of RMI is of guiding significance to the design of scramjet.

In the aspect of theoretically investigation, we analysed the availability of the vorticity transport equation under micro-scale. The viscous source and its simplification was studied theoretically. It has been found that the simplification of the viscous source will be unavailable under micro-scale due to the crucial effects of the spatial gradient of the viscous coefficient, which has been ignored for most of the investigations under macro-scale. The original form of the viscous was provided for the calculation under micro-scale.

Additionally, we provided a new model for the prediction of the circulation deposition in the Richtmyer-Meshkov instability. Our new model is a universal one, because the previous circulation models are either the simplifications or transformations of our model. Among those models, the baroclinic class ignored the viscous source of circulation deposition, which is the inherent flaw of them compared with our new model. While the velocity class is based on the definition of



circulation. They calculate the circulation by directly carry out the velocity integral along the region boundary. They can be seen as the transformation of our new model.

More importantly, the significant contribution of viscous source to the total circulation rate is investigated. None of the theoretically analysis on the circulation deposition in the Richtmyer-Meshkov instability provided the magnitude of different sources (baroclinic source and viscous source) in circulation deposition and we dealt with that problem theoretically. Based on the Navier-Stokes-Fourier equation set, the governing equation of density and viscous stress inside the shock wave is derived, namely, the NSF model. In consideration of the breakdown of the continuum hypotheses inside a strong shock wave, the so called "two-velocity" theory was employed to modify the NSF model. The energy conservation equation was modified and the TNSF model was obtained. With this model, the solution of the viscous source of circulation deposition can be obtained by carry out the integral inside the shock waves.

In spite of the ignoring of the viscous source in many previous studies, the present investigation shows that the viscous source have significant contribution to the circulation deposition (up to 10%). We further divided it into the viscous generation term and the viscous dissipation term to reveal the actual effects of the viscous source in circulation deposition. The viscous generation term mainly depends on the gradient of the viscous dissipation term has positive contribution to it. The previous understanding about the viscous effects is improper, because actually, it has positive contribution to the circulation deposition.

As for the numerical simulation part, the direct simulation Monte Carlo (DSMC) method was employed in consideration of the large local Knudsen number in our problem. The Richtmyer-Meshkov instability in micro-scale was numerically simulated and investigated comprehensively. We simulated the case of a moving shock interact with a step-like interface. Five cases with different scales were set, with characteristic length varied from  $5\mu m$  to  $1\mu m$ . We mainly focus on the evolution of the flow configuration, vorticity field, circulation and enstrophy in different scales.

As for the flow configuration evolution, the similarity breakdown phenomenon was observed under small scale cases. The cases with larger scales can be clearly seen the development of strong vortexes, and they are in good similarity. While the decreasing in scale induce the less obvious of the vortex as well as the disappearance of the similarity. For the smallest scale case, there can hardly be seen any vortex in the flow field.

Further, the vorticity field was investigated. The noise reduction was carried out, which is proved to be efficient and convenient. For the cases with larger scales, the evolutions of vorticity show high similarity. The negative vorticity induced by the interaction of shock and interface is very concentrated during the development of vortex, the diffusion and dissipation of the vorticity are all not obvious for those cases. While for the cases with smaller scales, remarkable diffusion



and dissipation lead to the similarity breakdown of the vorticity field. For the smallest scale case, the vorticity is remarkably decentralized, explaining the disability of the formation of vortex in the flow fields. The similarity of vortex evolutions breakdown in those smaller scale cases corresponds to the evolution of flow configurations.

As for the normalized circulations, the lines of different cases performed high agreement with each other, while the normalized enstrophy for the cases with different scales show significant gaps. That reflects the magnitude of vorticity dissipation and diffusion.

The variation of vorticity at a specific location in the flow field can be divided into two parts, the first one is the variation of vorticity magnitude, which is the dissipation in the cases we considered here after the interaction of shock and interface. Another part is the transformation of vorticity in space, namely, diffusion. The circulation is the simple accumulation of the vorticity on the whole domain, which can only reflect the difference in dissipation but not in diffusion. While the area-weighted enstrophy is the accumulation of the square of vorticity. Under the condition of the same accumulation of vorticity on the domain (same circulation), the more concentrated the vorticity is, the higher the enstrophy will be. That can be simply understood in consideration of the mean value theorem. Simply put, the change in scale will not change the magnitude of dissipation significantly, but will affect the magnitude of diffusion remarkably.

Based on the qualitatively view of the dissipation and diffusion of the vorticity, we further utilized the Gauss distribution to fit the vorticity distribution in our problem. The introduction of a new parameter  $\sigma$  enables us to study the vorticity diffusion quantitatively. Higher magnitude of  $\sigma$  is observed for smaller cases, revealing higher level of vorticity diffusion. That is the quantitative proof of the previous conclusion about the vorticity dissipation and diffusion.

All the theoretical investigations are validated and verified by numerical simulations, which illustrated the validity, availability and accuracy of them. Firstly, we validate and analyze the vorticity transfer equation at micro-scale. It has been proved that the breakdown of the constitutive equation is not significant even at the minimum scale of we studied. Generally speaking, the calculated viscous stress of the constitutive equation is close to the true value based on the particle movement. Therefore, it can be considered that the assumption of constitutive equation is applicable in the scale range involved in this study. At the same time, it is proved that the simplified form of viscous term in vorticity transfer equation is not applicable under micro-scale conditions. This is mainly due to the neglect of the gradient of viscosity coefficient. This also indirectly confirms the rationality of decomposing the viscous term into the viscous generation term and the viscous dissipation term in our theoretical derivation.

Then we validate the our derivation about the single shock problem by numerical simulation. The verification of the single shock circulation function shows that the analytical solution of the circulation function given in the theoretical analysis section is accurate and reliable, which is almost



the same as the results of numerical simulation. This indirectly proves that the circulation model of RMI problem proposed in this paper is accurate and feasible. Finally, we validate the NSF model and TNSF model proposed in the theoretical analysis part. The results show that compared with the NSF model based on the classical NSF equations, the TNSF model and are much more accurate. The simulation results are in good agreement, even for shock waves with high Mach number. The results of the single shock viscous term function based on this method are also in good agreement with the numerical simulation results, which proves the feasibility of the proposed TNSF model. Therefore, the theoretical derivation part of this paper makes a very accurate and reliable prediction for the single shock problem. Applying it to RMI problem, we can give the circulation rate and the magnitude of the viscous term of a particular RMI problem.