



Boltzmann 方程碰撞积分建模与稀薄空气动力学应用研究

吴雷¹, 张勇豪^{1*}, 李志辉^{2,3}

1. 思克莱德大学威尔流体实验室, 格拉斯哥 G1 1XJ, 英国;
2. 中国空气动力研究与发展中心超高速空气动力研究所, 绵阳 621000;
3. 国家计算流体力学实验室, 北京 100191

* 联系人, E-mail: yonghao.zhang@strath.ac.uk

收稿日期: 2016-09-30; 接受日期: 2016-10-31; 网络出版日期: 2017-03-24

英国 EPSRC 基金会 (编号: EP/M021475/1, EP/L00030X/1)、国家重点基础研究发展计划 (编号: 2014CB744100)、国家自然科学基金 (编号: 11325212, 91530319) 和英国皇家工程院的杰出访问学者计划 (编号: DVF1516/3/57) 资助项目

摘要 直接模拟蒙特卡罗方法 (Direct Simulation Monte Carlo, DSMC) 已经广泛用于稀薄空气动力学计算模拟, 而直接数值求解 Boltzmann 方程目前还只局限于简单流动, 比如一维线性问题. 高度非线性、积分微分属性的 Boltzmann 方程的求解关键是碰撞积分建模问题. 最近, 快速谱方法的提出和完善, 使得对复杂的三维非线性问题直接求解 Boltzmann 方程带来了希望. 相对于 DSMC, 快速谱方法具有数值上确定性的优势, 在低速多尺度流动计算模拟上更为高效. 本文介绍了快速谱方法在求解气体动理学方程的最新发展和成果, 并探讨其应用前景. 快速谱方法的推广应用使之真正成为 DSMC 的补充方法, 现在面临的困难是需要发展新的气体动理学模型来描述多原子、多组分、稠密气体等. 本文最后介绍了这方面的最新进展和直接求解 Boltzmann 模型方程气体动理论统一算法在模拟计算跨流域气体绕流及航天再入高超声速气动问题的应用.

关键词 稀薄空气动力学, 气体动理学模型, 离散速度法, Boltzmann 方程, 快速谱方法, 气动力理论统一算法

PACS: 47.11.-j, 47.45.-n, 51.10.+y

1 引言

19 世纪后期, Maxwell 和 Boltzmann 引入分子运动观点用统计的方法来研究气体的输运过程而创立了气体分子运动论 (气体动理学理论). 自 20 世纪早

期开始, 随着航空航天的发展, 使得气体动理学理论开始用于稀薄空气运动的研究 [1-3]. 现在, 稀薄空气动力学已经是一个涉及多领域的学科, 并且还在不断扩展. 这也反映在始于 1958 年的国际稀薄空气动力学研讨会讨论的范围越来越广泛. 思克莱德大学

引用格式: 吴雷, 张勇豪, 李志辉. Boltzmann 方程碰撞积分建模与稀薄空气动力学应用研究. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2017, 47: 070004

Wu L, Zhang Y H, Li Z H. Computable model on the collision integral of Boltzmann equation and application to rarefied aerodynamics (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2017, 47: 070004, doi: 10.1360/SSPMA2016-00409

威尔流体实验室将在 2018 年 7 月主办第 31 届国际稀薄空气动力学研讨会, 页岩气相关的稠密气体的稀薄效应和纳米尺度多孔介质的气体输运规律将是这个会议新增设的探讨主题.

在气体动理学研究中, 只有在克努森数很小即趋于零的情况下, 宏观量如密度、速度、温度、压力和热流的演化规律才能很好地由 Navier-Stokes 方程来描述^[4,51]. 这里, 克努森数, Kn , 定义为气体分子平均自由程与系统特征尺度之比, 或为气体分子平均碰撞频率与系统特征频率之比. 在常温常压下, 大气分子平均自由程约为 68 nm, 远小于常规器件尺寸, 因此, Navier-Stokes 方程成为气体动力学的主流方程. 但在航空、真空技术和微尺度系统中, 随着气体分子平均自由程的增大或系统尺寸的减小, Navier-Stokes 方程的模拟结果变得越来越不可靠. 尽管 Burnett^[6]对 Navier-Stokes 方程进行扩展而发展了新的连续流体计算模型, 它们的应用范围仍然非常有限.

稀薄气体动力学的发展最初主要是由于航天飞行器和真空技术的发展需求^[3,7], 这里, 通常气体的压力小、平均自由程大. 最近几十年来, 随着微纳米尺度加工技术的发展, 机械、电子、医药器件小型化, 稀薄气体动力学又成为研究的热点. 此时稀薄效应是在常压下由于系统的特征尺度变小而引起. 另外, 页岩气开发引出了一个对稀薄气体动力学新的具有挑战性的问题: 稠密气体微纳尺度流动的非平衡效应. 稀薄气体动力学就是在这种非常规航天再入与微细观流动情况下蓬勃发展起来的. 关于稀薄气体动力学的探讨, 读者可参考沈青^[8]非常有启发性的综述.

稀薄效应带来很多有趣的现象, 如物体表面速度滑移、温度跳跃、热蠕变、热应力滑移流等, 其中热蠕变成功地解释了 Crookes 辐射计的工作原理, 这还导致了科学史上有名的 Maxwell 和 Reynolds 之间的争论^[9].

2 Boltzmann 方程

气体由大量分子组成, 追踪每个分子的运动状态显然是不现实的. 为此, 气体动理学理论通常

1) 某些特殊情况下, 即使克努森 (Knudsen) 数趋于零, Navier-Stokes 方程也不能完备描述因温度跳跃引起重影等特殊的气体行为, 如幽灵效应.

采用速度分布函数来描述气体分子的统计性质, 用 $f(t, x, v)dx dv$ 表示在 t 时刻, 速度在 $[v, v + dv]$, 同时位置在 $[x, x + dx]$ 范围内的气体分子数. 宏观量可以通过对速度分布函数求矩得到. 速度分布函数 f 的演化遵从 Boltzmann 方程, 它是气体动理学的基本方程, 从介观层次对气体分子的集体行为进行描述. 本质上是介于分子动力学和连续介质理论的一种介观模型, 在当今多尺度物理系统的研究中扮演重要的角色.

Boltzmann 模型假设所有的气体分子在与其他分子碰撞前以固定的速度作直线运动. 因为气体分子平均自由程远大于分子直径, 碰撞在时空中是局域的, 一次碰撞只有两个分子参与, 碰撞后两分子的速度发生改变, 所以 Boltzmann 方程适用于描述稀疏 (Dilute) 气体的运动. 对稠密 (Dense) 气体微纳尺度流动的稀薄效应, 比如页岩气在致密孔隙流动, Boltzmann 方程需要进一步改进. 这里要强调的是, 稀薄效应是指针对所观察的系统由于分子数目有限导致的分子间碰撞数不足而偏离平衡态, 所以稀疏气体和稠密气体都可以有稀薄效应. 克努森数是用来衡量流动稀薄程度的重要参数.

Boltzmann 方程^[1-3]可以表示如下:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} = Q, \quad (1)$$

其中碰撞项 Q 的结构复杂, 是一个关于三维速度空间和二维立体角的五重积分

$$Q = \underbrace{\int \int \Theta(\cos \theta, |u|) |u| f(v'_*) f(v') d\Omega dv_*}_{Q^+} - \underbrace{v(v) f(v)}_{Q^-}, \quad (2)$$

其中 $v(v) = \int \int \Theta(\cos \theta, |u|) |u| f(v_*) d\Omega dv_*$ 是分子碰撞频率. v, v_* 是碰撞前的分子速度, v', v'_* 则是对应的碰撞后的分子速度. $\Theta(\cos \theta, |u|)$ 是微分碰撞截面, 跟分子间作用力密切相关. 碰撞满足动量和能量守恒

$$v' = v + \frac{|u|\Omega - u}{2}, \quad v'_* = v_* - \frac{|u|\Omega - u}{2}, \quad (3)$$

其中, $u = v - v_*$ 是碰撞前的分子相对速度, Ω 是单位球上沿着碰撞后的分子相对速度 $v' - v'_*$ 的立体

角. 碰撞前后的分子相对速度之间的反射角 θ 满足 $\cos \theta = \Omega \cdot u / |u|$, $0 \leq \theta \leq \pi$.

较早数值求解气体动力学基本方程—Boltzmann 方程或其模型方程, 使用的是离散速度法. 此方法始于 20 世纪 60 年代^[10]. 不久以后 Bird^[11] 提出 DSMC 方法, 并逐渐成为迄今为止稀薄空气动力学计算模拟的最主要方法, 离散速度法的研究因此有所沉寂. 随着计算机技术的发展, 直接求解气体动力学理论的控制方程, 近年来吸引了越来越多的研究兴趣. 在这里, 首先简要回顾过去 20 年内的主要进展, 重点介绍近期提出的快速谱方法和其在实际应用上的快速发展. 并简要介绍直接求解 Boltzmann 模型方程气体动力学理论统一算法 (Gas-Kinetic Unified Algorithm, GKUA) 及其在稀薄空气动力学实际应用上的发展, 最后讨论相对于 DSMC, 直接数值计算更需要在热化学非平衡流动与分子间相互作用气体动力学理论模型上有所突破.

3 Boltzmann 碰撞项的计算方法

离散速度法的基本思想是对速度分布函数进行离散而得到一系列离散方程. 通过一套与积分规则相一致的离散点分布, 使用各个离散速度点对应的速度分布函数簇消去分布函数对积分分量的连续依赖性. 这样, 连续速度空间被离散速度格点所代替. 在处理碰撞项时, 选取的碰撞速度必须使离散方程满足守恒性要求.

3.1 早期离散速度法

早期的离散速度法把速度空间划分为三维直角坐标系下的正交网格. 因为碰撞前后离散速度必须落在事先划分好的格点上, 求解碰撞项的方法被称为点对点法^[12-16]. 求解碰撞项时, 一般通过引入 δ 函数将五重碰撞积分变为八重积分. 如果微分碰撞截面为各向同性, 则计算复杂度为 $O(N^6)$, 而计算精度不高于 $O(N^{-1})$, 这里 N 为每个速度方向上所取离散速度的数目. 若碰撞截面为各向异性, 则需额外计算在立体角方向的积分, 复杂度可达 $O(N^8)$. 当然如果采用 Monte-Carlo 方法求解八重积分^[17,18], 计算

复杂度会降低, 但同时精度也减低. 近期, Mouhot 等人^[19] 借助 Carleman 表象变换改进了离散速度法, 改进后的离散速度法取得了比较好的计算效率 $N^3 \log N$. 但通常由于计算精度的要求, 使得 N 的取值相当大, 极大地限制了这类方法的实际应用.

3.2 近似核方法

基于硬球分子模型假设, 对 Boltzmann 方程碰撞积分线化处理, 1989 年, 京都大学的 Sone 等人^[20] 使用近似核分法数值求解了线性化的 Boltzmann 方程. 4 年后, Ohwada^[21,22] 进一步发展了该方法, 使之成为当时世界上较准确的求解线性化 Boltzmann 方程的方法. 该方法和位置空间上的有限差分迎风格式配合使用, 计算了一系列稀薄气体领域的重要问题, 如平板间的泊肃叶流动、热蠕动、正激波结构、热力和蒸发-冷凝问题等, 计算结果在今天看来依然准确, 常被作为标准解用来对比. 它的成功之处在于利用非均匀离散速度网格进行数值积分, 从而准确地捕捉到速度分布函数上的间断, 而这一点在计算高克努森数流动是至关重要的. 但是, 在近似核方法中, 速度分布函数被分解为轴向和径向分布函数的乘积以大大降低计算量, 这使得该方法只适用于计算一维空间问题, 且只针对硬球分子模型. 目前除了 Doi^[23] 将其推广到二维物理空间作一些简单计算外, 未能有进一步研究.

3.3 守恒投影法

守恒投影法最早由 Tcheremissine^[24] 在 2005 年提出, 是当今求解 Boltzmann 碰撞项的一个主流算法. 它在早期离散速度法的基础上做了两点改进: (1) 如果碰撞后的分子速度未落在网格点上, 所对应的速度分布函数通过临近格点上的分布函数插值得到, 且在插值中保证了守恒性. 在小克努森数流动中, 速度分布函数比较光滑, 插值具有良好精度. 而在高克努森数流动中, 速度分布函数经常存在间断, 插值的精度会有所降低. 实际上, 该方法从未在大克努森数流动下进行过严格测试. (2) 守恒投影法中的八重碰撞积分通过数论中的 Korobov 序列方法求解, 计算精度比 Monte-Carlo 积分好, 但仍然低于 $O(N_c^{-1})$, 其中

$N_c \approx N^3$. 在一些简单的流动中, 该方法被证明具有正比于 N^{-2} 的精度 [25].

3.4 谱方法

谱方法应用到求解 Boltzmann 方程, 最早可追溯到 1988 年 Bobylev [26] 的开创性工作, 他首次引入傅里叶变换, 得到基于 Maxwell 分子模型的 Boltzmann 方程的一类解析解. 受此工作启发科研人员纷纷提出各种不同版本的谱方法, 这里简要介绍两种谱方法. Pareschi 和 Perthame [27] 在 1996 年提出用谱方法数值计算不同分子模型的 Boltzmann 碰撞项, 计算效率正比于 N_ξ^6 , N_ξ 为每个频率方向上所取离散频率的数目, 跟 N 并非完全相等. Pareschi 和 Russo [28] 于 2000 年对可变硬球模型 (Variable Hard Sphere, VHS) 分子取得了谱精度, 即针对光滑的速度分布函数, 误差的递减比任何指数更快. 该方法被称为常规谱方法. 2006 年, Mouhot 和 Pareschi [29] 借助于 Carleman 表象变换发展出同样具有谱精度的快速谱方法, 把计算复杂度降到 $N_\xi^3 \log N_\xi$. 由于该方法具有谱精度, 通常 N_ξ 小于 N . 表 1 总结了计算 Boltzmann 方程碰撞项的不同方法的特点.

4 快速谱方法

以上各种确定性数值求解 Boltzmann 方程碰撞项的方法中, 真正被应用于空间非均匀问题计算的只有守恒投影法和快速谱方法. 快速谱方法的精确性在各种极限情况下得到验证, 而投影法在高克努森数的情况下还没被严格测试. 所以下面只详细介绍快速谱方法.

4.1 谱方法的基本思想

谱方法具有如下共同特征: (1) 速度分布函数和碰撞项都用傅里叶级数近似

$$[f, Q] = \sum_{j=-N_\xi/2}^{N_\xi/2-1} [\hat{f}_j, \hat{Q}_j] \exp(i\xi_j \cdot v), \quad (4)$$

其中 $\xi_j = j\xi_0$ 为均匀分布的离散频率, ξ_0 为频率间距, i 为虚数单位. (2) 碰撞项的傅里叶频谱都可以表

表 1 数值计算 Boltzmann 碰撞项各种方法的比较

Table 1 Comparison of the numerical methods for solving the Boltzmann equation

方法特点	离散速度	常规谱方法	投影法	快速谱方法
复杂度	N^6	N^6	$N^3 N_c$	$N^3 \ln N$
精度	N^{-1}	谱精度	$\ln N_c / N_c$	谱精度
质量守恒	满足	满足	满足	满足
动量守恒	满足	谱精度	满足	谱精度
能量守恒	满足	谱精度	满足	谱精度
碰撞截面	各向同性	无限制	无限制	特殊形式

示为如下形式:

$$\hat{Q}_j = \sum_{\substack{l+m=j \\ l,m=-N_\xi/2}}^{N_\xi/2-1} \hat{f}_l \hat{f}_m [\beta(l, m) - \beta(m, m)]. \quad (5)$$

从上式可以看到, $\hat{f}_l \hat{f}_m \beta(m, m)$ 是一个卷积, 若直接计算, 复杂度为 N_ξ^6 ; 若使用傅里叶卷积定律, 则复杂度可以降为 $N_\xi^3 \log N_\xi$. 而 $\hat{f}_l \hat{f}_m \beta(l, m)$ 不能用快速傅里叶卷积算法, 因此常规谱方法的计算复杂度为 $O(N_\xi^6)$. Mouhot 和 Pareschi [29, 30] 提出的快速谱方法采用了特殊形式的微分散射截面, 使 $\beta(l, m)$ 可以分解为 $\beta_1(l)$ 和 $\beta_2(m)$ 的乘积, 从而 $\hat{f}_l \hat{f}_m \beta(l, m) = \hat{f}_l \beta_1(l) \hat{f}_m \beta_2(m)$ 可以使用快速卷积算法, 大大地提高了计算效率.

4.2 Boltzmann 方程碰撞项的傅里叶变换

Mouhot 和 Pareschi 提出的快速谱方法首先使用 Carleman 表象变换把五重积分的碰撞项变成八重积分, 用到的关键变换是 $2 \int_{\mathbb{R}^3} \delta(2y \cdot u + |y|^2) f(y) dy = |u| \int_{\mathbb{S}^2} f(|u|\Omega - u) d\Omega$, 其中 δ 为狄拉克 δ 函数. 为方便起见, 以下只考虑 Boltzmann 碰撞项中的增益项, 它可以改写为 [29, 31]

$$Q^+ = 4 \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \Theta \delta(y \cdot z) f(v+z) f(v+y) dy dz, \quad (6)$$

在得到上式时, 使用了变换 $y = (|u|\Omega - u)/2$ 和 $z = -u - y$. 因此, 反射角 θ 满足

$$\cos \theta = \frac{\Omega \cdot u}{|u|} = \frac{-(y-z) \cdot (y+z)}{|y+z|^2} \stackrel{y \perp z}{=} \frac{|z|^2 - |y|^2}{|y|^2 + |z|^2}, \quad (7)$$

这说明微分碰撞截面 Θ 是 $|y|$ 和 $|z|$ 的函数.

将傅里叶变换作用到方程 (6) 上, Boltzmann 碰撞项的傅里叶频谱由方程 (5) 表示, 而碰撞核模式为

$$\beta(l, m) = 4 \int \int \delta(y \cdot z) \Theta \exp(i\xi_l \cdot y + i\xi_m \cdot z) dy dz, \quad (8)$$

其中积分在以零为圆心以 R 为半径的球内进行, 而 R 一般取 $\sqrt{2}S$ (S 为速度分布函数的截断速度), 以消除由周期性傅里叶变换引起的频率混叠误差.

显然, 要将 $\beta(l, m)$ 分解为 $\beta_1(l)$ 和 $\beta_2(m)$ 的乘积, Θ 必须分解成 $\Theta_1(|y|)$ 和 $\Theta_2(|z|)$ 的乘积. 硬球分子模型满足这一点, 因为 $\Theta(|y|, |z|)$ 为一常数. 而其他所有的分子作用势都不满足这一要求. 可能受到 DSMC 中的可变硬球模型启发 (剪切黏性是温度的幂函数), Mouhot 和 Pareschi 指出, 采用如下形式的微分散射截面:

$$\Theta = \sin^{\alpha-1} \left(\frac{\theta}{2} \right) |u|^{\alpha-1} \equiv |y|^{\alpha-1}, \quad (9)$$

可以实现快速谱方法.

4.3 快速谱方法的应用改进

自 2006 年 Mouhot 和 Pareschi [29] 提出快速谱方法以来, 较长一段时间没有在工程问题上得到应用. 我们在该方法基础上作了一些改进, 包括严格计算碰撞核模式、引入非均匀离散速度和实际的分子作用势等, 使得实用性大大提高. 在低速稀薄气体流动模拟中, 改进后的方法在计算效率上甚至优于适用于近平衡的即马赫数趋向于零的低噪声 DSMC 方法 [32].

4.3.1 微分散射截面

我们发现采用以下形式的微分散射截面

$$\Theta = \sin^{\alpha+\gamma-1} \left(\frac{\theta}{2} \right) \cos^{-\gamma} \left(\frac{\theta}{2} \right) |u|^{\alpha-1} \equiv |y|^{\alpha+\gamma-1} |z|^{-\gamma}, \quad (10)$$

可以在更广泛的参数范围内实现剪切黏性和温度的依赖关系 [31], 其中 α 决定剪切黏性和温度的指数关系, 而 γ 可以在保证剪切黏性正确的情况下调节扩散系数. 同时发现不同形式 Θ 的组合可以用来模拟 Lennard-Jones 势和 Sutherland 黏性公式, 且计算效率跟硬球分子模型相同.

4.3.2 碰撞核模式的严格推导

不同参考文献给出了不同碰撞核模式的计算 [29,30,33]. 下面针对方程 (10) 具体推导碰撞核模式 $\beta(l, m)$ 的形式. 将方程 (10) 代入方程 (8), 作变换 $y = \rho e$ 和 $z = \rho' e'$, 并对 ρ 和 ρ' 积分, 得到 $\beta(l, m) = \int \phi_{\alpha+\gamma}(\xi_l \cdot e) \int \delta(e \cdot e') \phi_{1-\gamma}(\xi_m \cdot e') de' de$, 其中 $\phi_\delta(s) = 2 \int_0^R \rho^\delta \cos(\rho s) d\rho$, e 和 e' 是单位球面上的向量.

根据 δ 函数的性质, 碰撞核模式可以做进一步简化. 构建如图 1 由 x' , y' 和 e 组成的直角坐标系. 假设单位向量 e' 在该坐标系下的极角和方位角分别为 θ 和 $\pi/2 - \theta_2$, 而向量 m 和 y' 轴的夹角为 θ_1 . 显然, $\xi_m \cdot e' = |\xi_m| \cos \theta_1 \cos \theta_2$, $\delta(e \cdot e') = \delta(\cos \theta)$, 且对任意连续函数 $g(\theta)$ 有 $\int_0^\pi g(\theta) \delta(\cos \theta) d\theta = g(\pi/2)$. 因此, $\int \delta(e \cdot e') \phi_{1-\gamma}(\xi_m \cdot e') de$ 可以化为 $\int_0^{2\pi} \phi_{1-\gamma}(|\xi_m| \cos \theta_1 \cos \theta_2) d\theta_2 = 2\psi_\gamma(|\xi_m| \cos \theta_1) de$, 其中 $\psi_\gamma(s) = 2\pi \int_0^R \rho^{1-\gamma} J_0(\rho s) d\rho$, J_0 为零阶贝塞尔函数. 从而碰撞核模式最终简化为

$$\beta(l, m) = 2 \int \phi_{\alpha+\gamma}(\xi_l \cdot e) \cdot \psi_\gamma(|\xi_m| \cos \theta_1) de. \quad (11)$$

现在 l 和 m 出现在两个不同的函数里, 因此快速谱方法的最后一步是对方程 (11) 中的积分作近似,

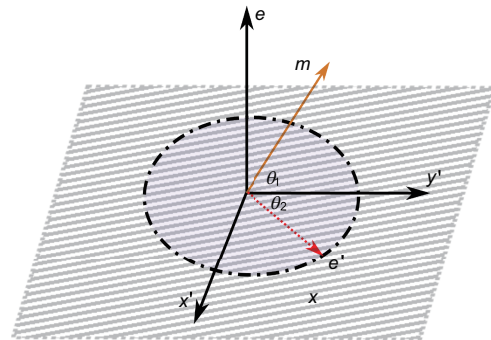


图 1 (网络版彩图) 计算碰撞核模式对 e' 积分的图示. 向量 e 是固定的, 而 e' 是在跟 e 垂直的 $x'y'$ 面上, 所以 e' 变成了一个二维向量, 其中 θ_2 在 $0-2\pi$ 范围变化. 由于对称性, 仅考虑 $0 \leq \theta_2 \leq \pi$ [31]

Figure 1 (Color online) Demonstration of the integral with respect to e' used in the calculation of the kernel mode. When the vector e is fixed, e' is in the $x'y'$ plane perpendicular to e . That is, it degenerates to a two-dimensional vector with θ_2 varying from 0 to 2π . Because of symmetry, we only consider the region $0 \leq \theta_2 \leq \pi$ [31].

将 l 和 m 彻底分开. Mouhot 和 Pareschi 将立体角均匀离散, 并用梯形积分近似得到

$$\beta(l, m) \simeq \frac{4\pi^2}{M^2} \sum_{p,q=1}^{M-1,M} \phi_{\alpha+\gamma}(\xi_l \cdot e_{\theta_p, \varphi_q}) \times \psi_\gamma \left\{ \sqrt{|\xi_m|^2 - [\xi_m \cdot e_{\theta_p, \varphi_q}]^2} \right\} \sin \theta_p, \quad (12)$$

其中 $e_{\theta_p, \varphi_q} = (\sin \theta_p \cos \varphi_q, \sin \theta_p \sin \varphi_q, \cos \theta_p)$, $\theta_p = p\pi/M$, $\varphi_q = q\pi/M$, $p, q = 1, 2, \dots, M$. 当然对 e 的积分也可以用高斯-勒让德求积公式近似, 精度上有很好的改善^[31], 一般 M 取 5 就可以达到良好的精度.

4.3.3 快速谱方法具体计算过程

图 2 给出了快速谱方法的具体计算过程, 以便读者对该方法的理解. 首先, 通过傅里叶变换计算速度分布函数的频谱从而得到图 2(b). 所得频谱分别乘以碰撞核模式 ϕ 和 ψ , 得到图 2(c) 和 (d). 然后通过傅里叶卷积定理计算图 2(c) 和 (d) 中两函数的卷积, 得到图 2(e) 中碰撞项的频谱. 最后, 通过傅里叶逆变换得到碰撞项. 需要注意的是, 从图 2(c) 和 (d) 到 (e) 需要操作 M^2 步, 每一步对应不同方位下的离散立体角, 因此快速谱方法的计算复杂度为 $O(M^2 N_\xi^3 \log N_\xi)$.

快速谱方法的特点可以总结如下: (1) 快速谱方法中碰撞核模式的存储量级为 $O(M^2 N_\xi^3)$, 远远小于常规谱方法 $O(N_\xi^6)$; (2) 碰撞项主要在频率空间处理,

而非在速度空间, 因此计算量由离散频率数目决定. 因为快速谱方法具有谱精度, 离散频率数目可以相对较小, 从而大大提高计算效率; (3) 为了使用傅里叶卷积定律, 离散频率必须均匀分布, 但离散速度可以非均匀分布 (这在计算高克努森数流动中至关重要); (4) 谱方法只满足质量守恒, 但在计算动量和能量守恒方面具有谱精度^[29], 因此可以通过拉格朗日乘子方法^[34]实现动量、能量守恒.

4.3.4 非均匀离散速度

为了提高计算精度, 日本京都大学的研究者^[20-22]最早提出用非均匀离散速度网格捕捉速度分布函数上的间断. 在计算平板间泊肃叶流动和热蠕动时, 他们使用了非均匀离散速度网格: 在垂直板速度方向上, 大部分离散速度点分布在零附近, 准确计算了克努森数小于 20 的流动. 最近, 日本京都大学的 Takata 和 Funagane^[35]给出了把大部分离散速度分布在零附近的理论解释: 在高克努森数下, 垂直板方向上的速度分布函数以零为中心, 范围随 $1/Kn$ 减小. 因此, 如果采用均匀分布的离散速度, 有可能在整个速度分布函数上只有少数几个有效离散速度, 从而得到错误的计算结果. 这也是为什么很少有数值方法能准确计算 Boltzmann 方程在高克努森数下流动的原因. 基于此认识, 在速度空间采用了非均匀离散速度, 在频率空间采用均匀离散频率, 使用快速谱方法得到了极高克努森数下的准确解^[36], 解决了高克努森微尺度低速流动计算的难题, 计算效率甚至远远超过低噪声 DSMC^[32].

图 3 给出了一个壁面温度周期变化引起的稀薄气体流动的例子, $Kn = 10$. 具体参照文献^[36]. 可以看到速度分布函数的云图是非常复杂的, 既有复杂的精细结构又有间断, 远远偏离了 Maxwell 平衡分布. 一般的 Boltzmann 方程数值解法很难准确计算该流动, 但对快速谱方法来说却较为容易.

4.3.5 真实分子作用势模型

对于一般形式的微分碰撞截面, 碰撞核模式可以写成

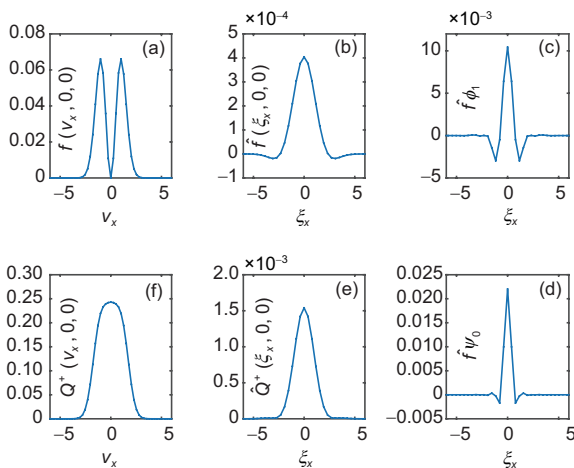


图 2 (网络版彩图) 数值计算步骤
Figure 2 (Color online) Demonstration of numerical implementation.

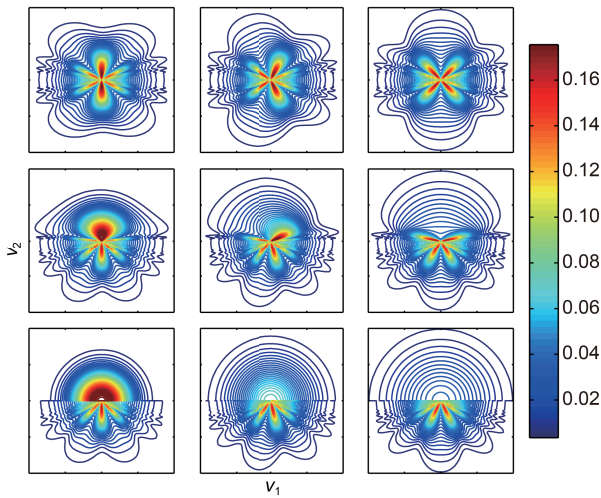


图 3 (网络版彩图) 边缘 VDF $f dv_3$ 的分布图. 从下到上: $x_2 = 0.5, 0.25,$ and 0.5 ; 从左到右: $x_1 = 0, 0.25,$ and 0.5 . 离散速度选取的范围为 $[-2, 2] \times [-2, 2]$ [36]

Figure 3 (Color online) Contour plots of the marginal VDF, $f dv_3$. In each figure, from bottom to top, $x_2 = 0.5, 0.25,$ and 0.5 , respectively. From left to right, $x_1 = 0, 0.25,$ and 0.5 , respectively. The velocity region shown is $[-2, 2] \times [-2, 2]$ [36].

$$\beta(l, m) = \int \int \delta(\mathbf{e} \cdot \mathbf{e}') \left[\int_{-R}^R |\rho| \exp(i\rho \xi_l \cdot \mathbf{e}) d\rho \right] \times \left[\int_{-R}^R |\rho'| \Theta(\rho, \rho') \exp(i\rho' \xi_m \cdot \mathbf{e}') d\rho' \right] d\mathbf{e}' d\mathbf{e},$$

要将 l 和 m 分开, 可以采用高斯 - 勒让德积分公式先近似计算对 ρ 的积分, 得到

$$\beta(l, m) = 2\rho_r \omega_r \sum_{r=1}^{M_r} \int \int \delta(\mathbf{e} \cdot \mathbf{e}') \cos(\rho_r \xi_l \cdot \mathbf{e}) \times \left[\int_{-R}^R |\rho'| \Theta(\rho_r, \rho') \exp(i\rho' \xi_m \cdot \mathbf{e}') d\rho' \right] d\mathbf{e}' d\mathbf{e},$$

其中 ρ_r 和 ω_r 是 $[0, R]$ 区间上的高斯 - 勒让德积分公式的积分点和权重. 接下来的计算与 4.3.2 节相同, 但慢了近 1 个数量级. 混合气体的快速谱方法也可通过类似方法得到 [37].

4.3.6 稠密气体谱方法计算模型

大多数情况下, Boltzmann 方程可以很好地描述稀疏气体的动力学行为, 这是因为当气体分子平均自由程远大于分子尺寸时, 气体分子的碰撞行为可以用局域的 Boltzmann 碰撞项描述. 当气体被压缩

到高密度时, 气体分子平均自由程与分子尺寸大小相当或小于分子尺寸时, 局域的碰撞假设显然不再成立, 但此时如果气体分子被限制在狭小空间, 非平衡效应可能很显著 (如甲烷在致密页岩里面的流动). 对于稠密气体, Enskog 最早将 Boltzmann 方程修正如下:

$$Q_{\text{dense}} = \sigma^{d-1} \int \int \mathbf{k} \cdot \mathbf{u} [g(x, \mathbf{k}, v'_*) f(x, v') - g(x, -\mathbf{k}, v_*) f(x, v)] dv_* d\mathbf{k}, \quad (13)$$

其中 σ 为硬球分子直径, d 为物理空间维度, \mathbf{k} 为单位向量, 它连接碰撞分子的中心. 非局域碰撞体现在碰撞分子对应的速度分布函数的位置不同

$$g(x, \mathbf{k}, v) = \chi \left(x + \frac{\sigma \mathbf{k}}{2} \right) f(x + \sigma \mathbf{k}, v), \quad (14)$$

其中 χ 为空间相关因子, 体现了排除体积效应后分子碰撞频率的增加, 这与分子速度无关.

图 4 描述了平板间外力驱动不同分子直径的稠密气体的泊肃叶流动, 显示了在不同克努森数的非平衡效应 [38]. 显然, 流动特性跟稀疏 (Dilute) 气体有

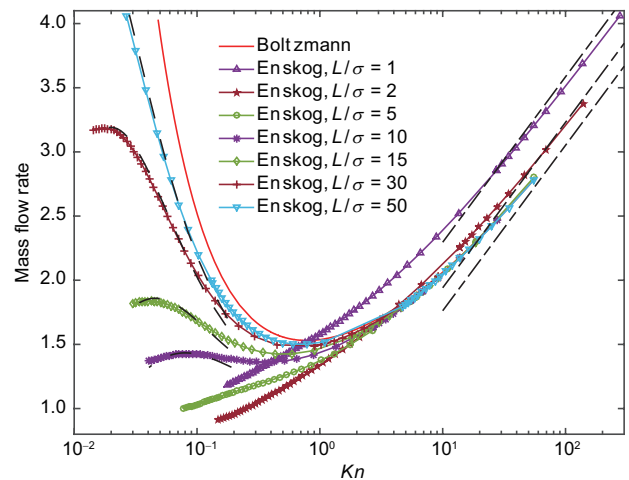


图 4 (网络版彩图) 归一化质量流量在不同的 L/σ 值和弹性碰撞时和克努森数的关系, L 是两平行板的距离. 实线表示 Navier-Stokes 方程在一阶滑移速度边界条件的解. 其他线表示 $Kn \rightarrow \infty$ 时的渐进分析解. 从高到低: $L/\sigma = 1, 2,$ and 10 [38]

Figure 4 (Color online) The mass flow rate as a function of the Knudsen number, for various values of L/σ , when the collision between the hard discs is elastic. Solid lines: numerical results of the Navier-Stokes equation with the first-order velocity slip boundary condition. The other lines: the asymptotic analytical solutions as $Kn \rightarrow \infty$; from top to bottom: $L/\sigma = 1, 2,$ and 10 [38].

很大的差别. 这意味着, 目前基于 Boltzmann 方程的对页岩气流量的估算可能存在着很大的偏差.

当然图 4 仅考虑了硬球分子的排斥作用, 实际的气体还应该考虑吸引相互作用. 这时, Enskog 方程被扩展为 Enskog-Vlasov 方程. Enskog-Vlasov 方程用平均场势来描述分子之间的相互作用也可以适用于气体和液体的流动, 它能自动捕捉气液界面和流体与固体界面 [39,40], 使之也适用于多相流的模拟.

4.3.7 非弹性碰撞: 颗粒物质

Enskog 非局域碰撞项也可以推广到颗粒气体, 即有许多离散颗粒组成的体系, 在非弹性碰撞中颗粒的动能会受到损失. 通过引入恢复系数 α 来描述颗粒碰撞后总动能的恢复程度, Enskog 碰撞项可推广如下:

$$Q_{\text{granular}} = \sigma^{d-1} \int \int k \cdot u \left[\frac{J}{\alpha} g(x, k, \tilde{v}_*) f(x, \tilde{v}) - g(x, -k, v_*) f(x, v) \right] dv_* dk, \quad (15)$$

这里, \tilde{v} and \tilde{v}_* 是碰撞前速度, v 和 v_* 是碰撞后速度, 而 J 是雅可比矩阵实现从 (\tilde{v}, \tilde{v}_*) 到 (v, v_*) 的转换. 扩展的 Enskog 方程可以广泛应用于从天体物理比如恒星云的形成到流化床、制药过程等具体工业应用. 图 5 显示外力驱动的颗粒气体在平板间流动时外力对质量流量的影响.

5 多原子气体的扩展 Boltzmann 方程

当需要考虑多原子气体的转动和振动自由度时, Boltzmann 方程变得更加复杂. 采用量子力学能级概念, Chang 和 Uhlenbeck [41] 最早将玻尔兹曼方程推广到 Wang-Chang-Uhlenbeck (WCU) 方程以描述多原子气体. Buet [42] 最早提出守恒格式求解 WCU 方程的碰撞项, 但因为计算量巨大, 该方案未被采用. Tchermissine 等人 [43] 用守恒投影算法计算了碰撞项, 并用于氮气的正激波结构计算, 发现计算效率比单原子分子的 Boltzmann 方程慢了近百倍. 最近, 常规谱方法也被用于计算 WCU 方程, 复杂度在 $N_e^4 N^6$ 量级 [44], 其中 N_e 是离散能级数目: 对于 $N_e = 5$ 和 $N = 16$, 内存的需求达到了 88 GB, 在 12 线程计算机上计算一

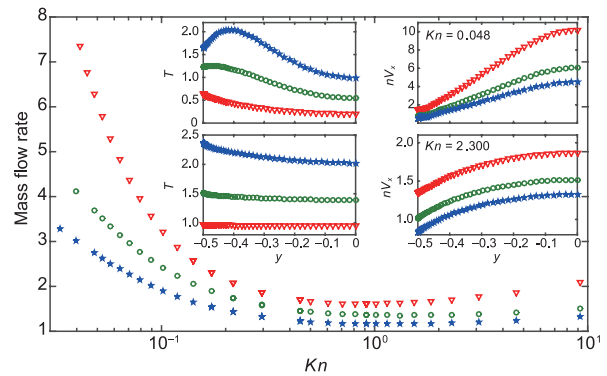


图 5 (网络版彩图) 外力对质量流量的影响, $L/\sigma = 30$, 恢复系数 $\alpha = 0.9$. 无量纲加速度 $F = 0.0001$ (三角形), $F = 0.5$ (圆), 和 $F = 1$ (五角星). 插图: 温度和动量的分布, 第一排是在滑移区, 第二排是在过渡区 [38]

Figure 5 (Color online) The influence of the external acceleration on the MFR at $L/\sigma = 30$, when the restitution coefficient is $\alpha = 0.9$. The normalised acceleration is $F = 0.0001$ (triangles), $F = 0.5$ (circles), and $F = 1$ (pentagrams). Inset: temperature and momentum profiles in the slip (first row) and transitional (second row) flow regimes [38].

次碰撞项所需时间约为 3 s. 这显然远远不能达到实际应用的要求. 所以许多动理学模型方程使用不同方案来简化计算 [45-50]. 在大多数模型中, 碰撞增益项用高斯-厄米多项式表示, 而碰撞频率跟分子速度毫无关系. 也有学者直接用 Fokker-Planck 碰撞项来描述多原子气体. 这些模型的缺点是不能体现分子作用势的影响, 而这在有些计算中至关重要, 如平板间的泊肃叶流动等. 为此, 基于 Rykov 双原子模型, 提出了一个新的动理学模型 [45].

5.1 Rykov 模型的扩展

正如 DSMC 中的 Larsen-Borgnakke 分子碰撞模型处理模式, 大多数动理学模型, 将弹性碰撞和非弹性碰撞区别对待, Rykov 模型也不例外. 这里的弹性碰撞指的是只涉及分子平动动能的碰撞, 碰撞前后分子总平动动能保持不变; 非弹性碰撞指碰撞前后分子平动动能和内部转动或振动动能进行了交换. Rokov 模型最初只适用于双原子分子 [50], 但其模型构造方法容易推广到多原子气体.

将 Rokov 模型的碰撞项推广如下:

$$Q_{\text{poly}} = \underbrace{\frac{g_t - f}{\tau}}_{\text{elastic}} + \underbrace{\frac{g_r - g_t}{Z\tau}}_{\text{inelastic}}, \quad (16)$$

其中 $\tau = \mu/p$ 是特征碰撞时间, Z 表示非弹性碰撞松弛数, 即在 Z 次碰撞中有一次是非弹性碰撞. Z 的大小正比于体积黏度和剪切黏度之比. 其中, 参考分布函数 g_t 和 g_r 的形式可以参考文献 [45] 中方程 (2.4).

在实际数值计算中, 一般引入两个约化的速度分布函数将平动自由度和内部自由度分开. 引入 $G(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) = \int_0^\infty f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}, I) dI$ 和 $R(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}) = \int_0^\infty f(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}, I) I^{2/d} dI$, 推广的 Rykov 模型可以简化如下:

$$\frac{\partial G}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial G}{\partial \mathbf{x}} = \frac{G_t - G}{\tau} + \frac{G_r - G_t}{Z\tau}, \quad (17)$$

$$\frac{\partial R}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial R}{\partial \mathbf{x}} = \frac{R_t - R}{\tau} + \frac{R_r - R_t}{Z\tau}, \quad (18)$$

其中, 参考 VDF 的具体表达式, 即 $G_t(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})$, $G_r(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})$, $R_t(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})$ 和 $R_r(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})$ 可以参照文献 [45] 中的方程 (2.7).

5.2 改进的 Rykov 计算模型

Rykov 方程用于氮气正激波结构的计算 [51-57], 得到的密度场跟 DSMC 符合得很好, 但是温度场跟 DSMC 有很大差别, 尤其是在大马赫数情况下. 实际上, 温度场跟 DSMC 模拟的差别不但在双原子分子中存在, 在单原子分子中也存在. 一个主要的原因是 DSMC 中分子碰撞频率是分子速度的函数, 而 Shakhov, BKG, Rykov 等模型中碰撞频率跟分子速度无关. 如果 DSMC 模拟中采用 Maxwell 分子模型, 此时碰撞频率跟分子速度无关. 则得到的温度场跟一般模型方程得到的结果非常接近. 因此, 通过在扩展 Rykov 模型方程中引进实际的分子碰撞频率来解决这个问题.

将方程 (17) 的弹性碰撞项 $(G_t - G)/\tau$ 用 Boltzmann 碰撞项 $Q(G, G)$ 代替, 其次, 方程 (18) 中的碰撞项 $(R_t - R)/\tau$ 也相应被替换为

$$R' = \frac{d}{2} kT_r (\tau Q + G) + \left(\frac{m}{2\pi kT_t} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{-mc^2}{2kT_t} \right) (1 - \delta) \frac{m\mathbf{q}_r \cdot \mathbf{c}}{kT_t}, \quad (19)$$

从而得到新的模型方程

$$\begin{aligned} \frac{\partial G}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial G}{\partial \mathbf{x}} &= Q(G, G) + \frac{G_r - G_t}{Z\tau}, \\ \frac{\partial R}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial R}{\partial \mathbf{x}} &= \frac{R' - R}{\tau} + \frac{R_r - R_t}{Z\tau}. \end{aligned} \quad (20)$$

虽然新的模型方程比 Rykov 方程的计算更复杂, 但计算精度却大大提高了, 比如氮气正激波结构的计算, 参见图 6.

由于多数实际气体是双原子或多原子, 我们的模型极大地拓宽了通常基于单原子气体的气体动力学模型的应用范围. 下面简要讨论在瑞利 - 布里渊散射频谱计算的应用.

5.3 改进的 Rykov 模型计算应用瑞利 - 布里渊散射频谱计算

瑞利 - 布里渊散射是一种非破坏性的光学诊断手段, 可用于测量气体液体的性质, 比如声速、温度

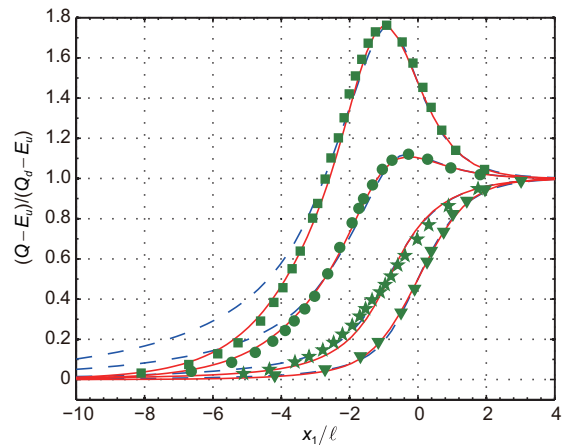


图 6 (网络版彩图) 使用气体动力学模型和 DSMC 方法分别计算氮气正激波的结果比较 [56]. 方块、圆、星和三角分别代表 DSMC 计算的无量纲化在 x_1 方向的平移温度、平移温度、转动温度和分子数密度. 实线和虚线是我们的气体动力学模型 [45] 和 Rykov 模型中方程 (16) 的结果. 这里, Q 代表宏观量, 下标 u 和 d 代表上下游的值 [45]

Figure 6 (Color online) Comparisons of kinetic model results and DSMC data [56] for normal shock waves in nitrogen. The squares, circles, stars, and triangles are the normalized translational temperature in the x_1 direction, the translational temperature, the rotational temperature, and the molecular number density, respectively, all obtained from the DSMC simulations. The solid and dashed lines are, respectively, the results of our kinetic model [45] and the Rykov kinetic model eq. (16). Here Q represents the value of the macroscopic quantity, and subscripts u and d represent the upstream and downstream values, respectively [45].

和体积黏性等参数. 这些数据可以通过比对实验散射光谱和理论计算光谱得到. 近几年来, 实验精度有了很大提高 [58-61], 但尽管有不少理论计算模型可供选择 [62-64], 尚缺乏精确的理论计算.

在瑞利 - 布里渊散射实验中, 光可以通过两种方式被散射. 第一种是光被大气中分子的自发密度涨落所散射, 即自发瑞利 - 布里渊散射. 第二种散射中, 光被两束相干光引起的气体密度波动所散射, 因此称为相干瑞利 - 布里渊散射. 目前常用的理论计算方法由 Tenti 等人 [62] 提出, 它只能准确计算 Maxwell 分子在小克努森数情况下的光谱. 下面讨论用改进的 Rykov 模型精确计算光谱的一些结果.

5.3.1 自发瑞利 - 布里渊散射

由于直接求解线性 Boltzmann 方程可以定量分析自发瑞利 - 布里渊散射的光谱, 但是计算的速度限制了其实际应用. 实际应用需要使用简化模型来实

现所需的快速计算. 我们的模型能得到与 DSMC 相同的结果, 但计算效率快了将近 1000 倍. 我们的模型相比 Rykov 和 S6 模型 [63] 在计算精度上有显著提高. S6 模型只适用于 Maxwell 气体. 图 7 显示 3 个模型对 Maxwell 气体的计算结果很一致. 可是对硬球气体而言, Rykov 模型的结果和 Maxwell 气体的没有差别, 而我们的模型可以预测在 $Kn = 0.06$ 时瑞利峰值 ($f_s \sim 0$) 的相对高的频谱和近 $Kn = 0.08$ 区布里渊峰值 ($f_s \sim 0.8$) 相对低的频谱. 这是因为分子作用势对多原子气体的自发瑞利 - 布里渊散射有影响. Rykov 和 S6 模型都不能描述这种影响.

图 8 显示对氮气的自发瑞利 - 布里渊散射, 我们的模型预测与实验数据一致 [61].

5.3.2 相干瑞利 - 布里渊散射

在相干瑞利 - 布里渊散射实验中, 单个分子受到

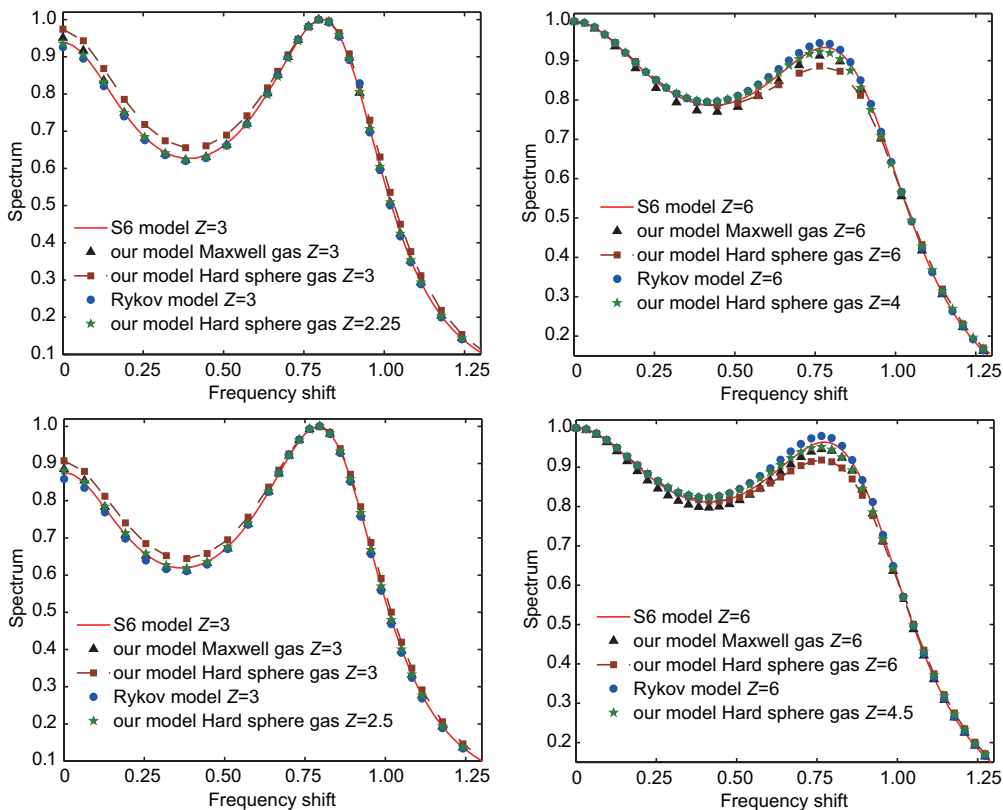


图 7 (网络版彩图) 自发瑞利 - 布里渊散射: 模型方程和气体分子作用势对计算结果的影响 [45]

Figure 7 (Color online) The influence of kinetic model and molecular potential on spontaneous RBS spectra [45].

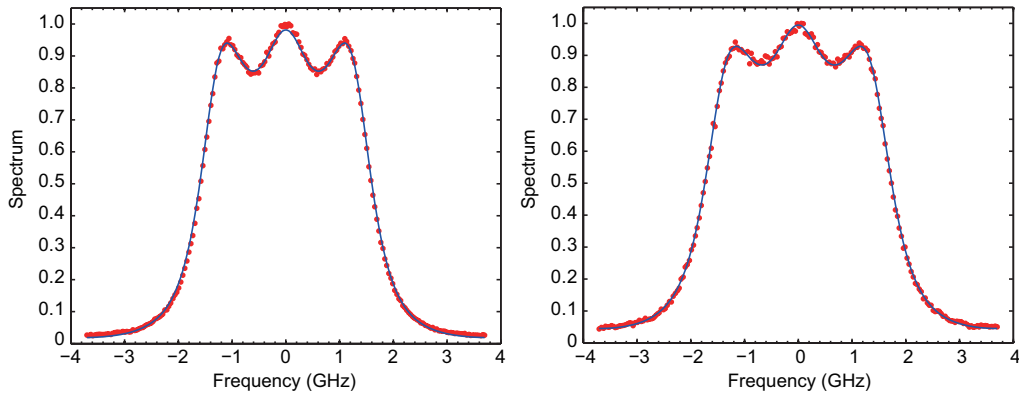


图8 (网络版彩图) 氮气的自发瑞利 - 布里渊散射: 本文模型预测 (线) 和实验数据 (点) 的比较 [45,61]

Figure 8 (Color online) Spontaneous RBS spectra for nitrogen, comparing our model (lines) to the experimental data (dots) of refs. [45, 61].

外加的光偶极子力 [58,59,65]. 当光束强度不大时, 线性 Boltzmann 方程可以定量分析光谱.

图9显示了多原子气体的相干瑞利 - 布里渊散射光谱在 $Kn = 0.08$ 时的形状线. 从中可以清晰地看出分子模型的影响: 在谱线瑞利峰值, 黏性指数下降, 同时光谱加强. 而 Rykov 模型只适用于 Maxwell 气体不能预测多原子气体的相干瑞利 - 布里渊散射光谱从而大大影响多原子气体体积黏性的测量. 图9显示, 对于硬球气体分子, 如果用 S6 模型提取气体的体积黏性, 则误差达到 100%. 值得一提的是, 欧洲太空局将于 2017 年发射卫星 ADM-Aeolus, 用于探测全球风速分布. 精确的瑞利 - 布里渊散射光谱的计算将提高风速测量的精度.

6 Boltzmann 方程碰撞积分可计算建模统一算法在跨流域空气动力学问题应用研究

借助 Rykov 模型 [50,57] 在气体分子速度分布函数演化更新求解中考虑转动自由度影响, 采用转动惯量来描述气体分子自旋运动, 利用分子总角动量守恒作为一个新的碰撞不变量. 把分子内部能量 e 作为分布函数自变量, 引入能量模式配分函数将能量在各自由度平均分布, 在求解 Boltzmann 模型方程统一算法框架下 [66-72], 基于权因子 1 和 e 对速度分布函数所依赖的速度空间进行无穷积分, 引入能级约化速度分布函数 f_0 与 f_1 , 去掉方程对内部能量连续依赖关系, 确立含非平衡效应各流域统一 Boltzmann 模型方

程, 其无量纲形式可参考文献 [73,74]. 其分析推导反映黏性与热传导属性的扩散时间与气体分子平均碰撞时间描述含内能激发的多原子分子弹性与非弹性碰撞松弛变化统一表达式, 表征气体分子速度分布函数趋于当地平衡态分布碰撞松弛速率. 通过对 Boltzmann 方程碰撞积分可计算建模, 将气体分子碰撞松弛参数和当地平衡态分布函数, 与各流域流态控制参数、宏观流动物理量、气体黏性输运特性、热力学效应及气体分子相互作用规则、分子模型联系起来, 确立描述航天器跨越飞行各流域复杂高超声速流动输运现象统一的 Boltzmann 模型速度分布函数方程. 利用气体动理学数值格式构造方法, 可建立求解各流域转动非平衡效应 Boltzmann 模型方程统一算法 [73,74].

针对一个平板与 25° 倾角斜板构成二维 Ramp 再入制动器外形 [73,74], 如图 10 所示, 计算 $Ma_\infty = 10$ 的高马赫数绕流流场. 其中, 克努森数 $Kn_\infty = 6 \times 10^{-4}$, 来流气体温度 $T_\infty = 52 \text{ K}$ 、密度 $\rho_\infty = 3.91 \times 10^{-4} \text{ kg/m}^3$ 、速度 $V_\infty = 1477 \text{ m/s}$, 壁面温度 $T_w = 290 \text{ K}$. 图 11 绘出该二维 Ramp 制动器上表面压力系数 c_p 和摩阻系数 c_f 沿 x 轴线分布统一算法计算值 (Cal.) 与文献 [75] 中 Boltzmann-ES 模型结果比较情况, 可看出两者相当吻合, 证实含转动非平衡效应 Boltzmann 模型方程统一算法对飞行器物面气动特性计算的可靠性与精度.

为了检验求解转动非平衡效应 Boltzmann 模型方程统一算法在高克努森数稀薄过渡流区较高马赫

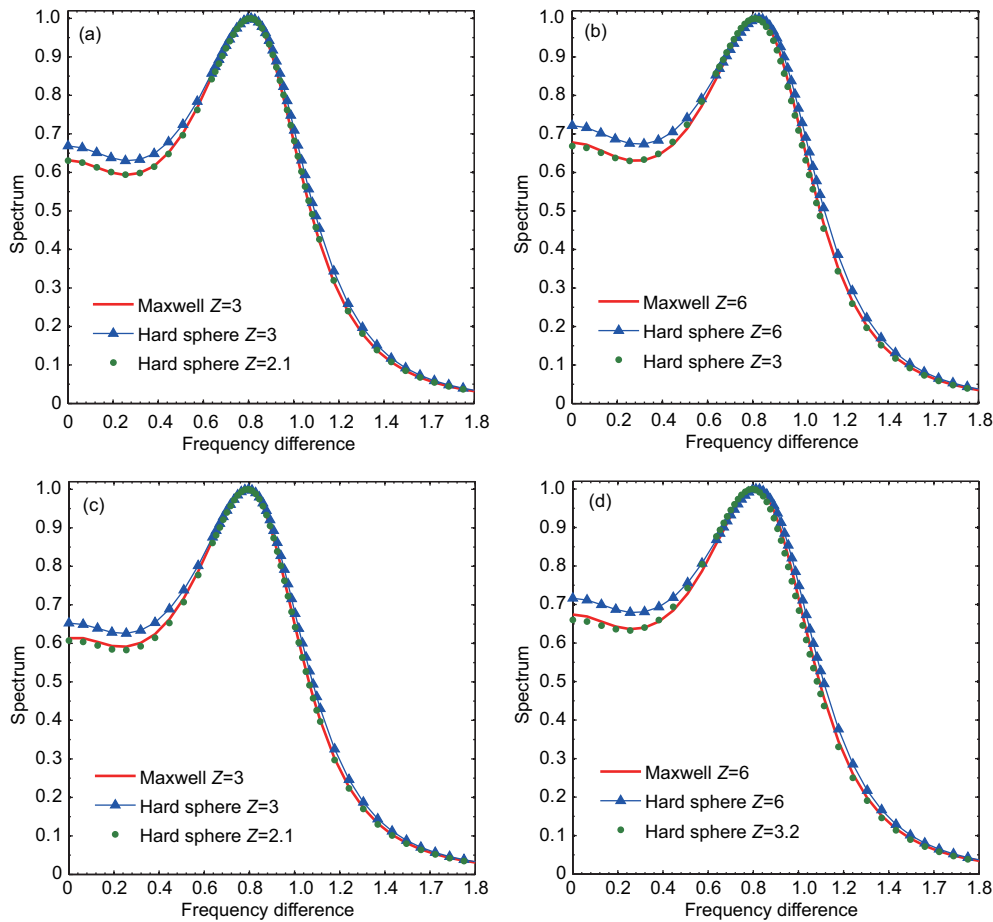


图9 (网络版彩图) 相干瑞利-布里渊散射光谱: 硬球模型和 Maxwell 气体在 $Kn = 0.08$ 的比较. (a) 和 (b) 为双原子气体; (c) 和 (d) 为非线性多原子气体 [45]

Figure 9 (Color online) Coherent RBS spectra for hard-sphere and Maxwell gases, with $Kn = 0.08$: (a) and (b) are the diatomic gases; (c) and (d) are nonlinear polyatomic gases [45].

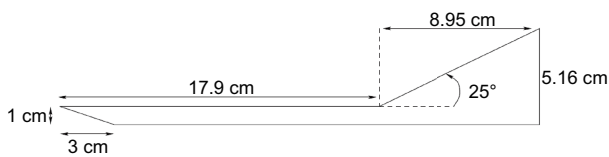


图10 Ramp 制动器外形及尺寸 [73, 74]

Figure 10 The shape and size of brake ramp [73, 74].

数绕流问题计算与稀薄空气动力学模拟广泛使用的 DSMC 计算一致性, 图 12(a) 与 (b) 分别给出气体动理论统一算法 (GKUA) 与 DSMC 方法数值计算得到 $Kn_\infty = 0.01, Ma_\infty = 1.6$ 近连续过渡区圆柱绕流流场马赫数等值线云图与圆柱表面无量纲压力分布, 图 12(c) 给出 GKUA 与 DSMC 计算 $Kn_\infty = 0.1, Ma_\infty = 4$

稀薄流区圆柱绕流物面无量纲压力分布比较情况. 图中计算表明 GKUA 与 DSMC 两种方法得到的流场与物面绕流变化规律是基本一致的, GKUA 光滑性更好, DSMC 模拟结果存在一定统计波动, 尤其是远场流动速度较低的区域, 对 $Kn_\infty = 0.01, Ma_\infty = 1.6$ 绕流状态, 圆柱头部前端存在较为明晰的脱体激波, 两种方法得到的激波脱体位置、强度基本相同; 气体流动绕过圆柱在后方形成的稀疏膨胀波和二次压缩波也较好地吻合, 在稀疏波和二次压缩波之间由于流动扩张均形成了一个高马赫数流动区域. 图 12(b) 中圆柱表面无量纲压力分布也基本一致, 从驻点区域 $\varphi = 0^\circ$ 接近 4 往后逐渐下降, 到 $\varphi = 120^\circ$ 附近达到最小值 (0.2), 再往后的尾迹区压力值略有增加, 说

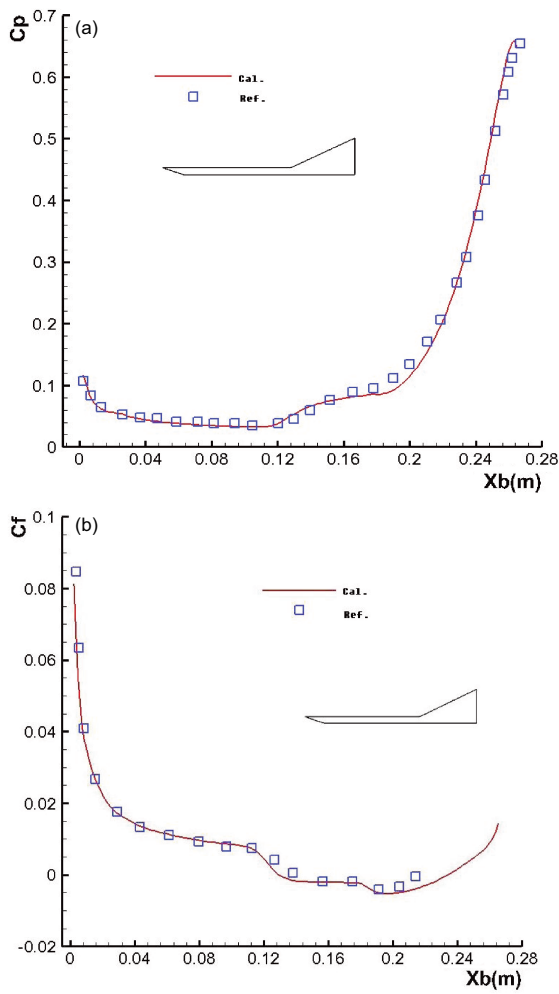


图 11 (网络版彩图) Ramp 上表面压力 (a) 和摩擦系数 (b) 分布计算比较 [73, 74]

Figure 11 (Color online) The distribution of pressure (a) and friction coefficients (b) on the ramp surface [73, 74].

明该状态绕流 $\varphi = 120^\circ$ 附近流动开始分离, 形成的回流涡结构使得尾迹区表面压力值有所回升. 在回流漩涡区, 两种方法结果稍有差别, GKUA 表现出更强的非线性效应, DSMC 结果偏高在此区域变化幅度不大. 图 12(c) 给出更高稀薄流区圆柱 $Kn_\infty = 0.1$, $Ma_\infty = 4$ 绕流物面压力分布, 对此高稀薄绕流状态, 由于不存在尾部流动分离, GKUA 与 DSMC 两种方法计算得到的柱面压力分布从前驻点 $\varphi = 0^\circ$ 到后驻点 $\varphi = 180^\circ$ 均吻合很好, 在计算误差范围内其变化规律几乎完全一致, 验证了所建立方法模型的准确可靠性.

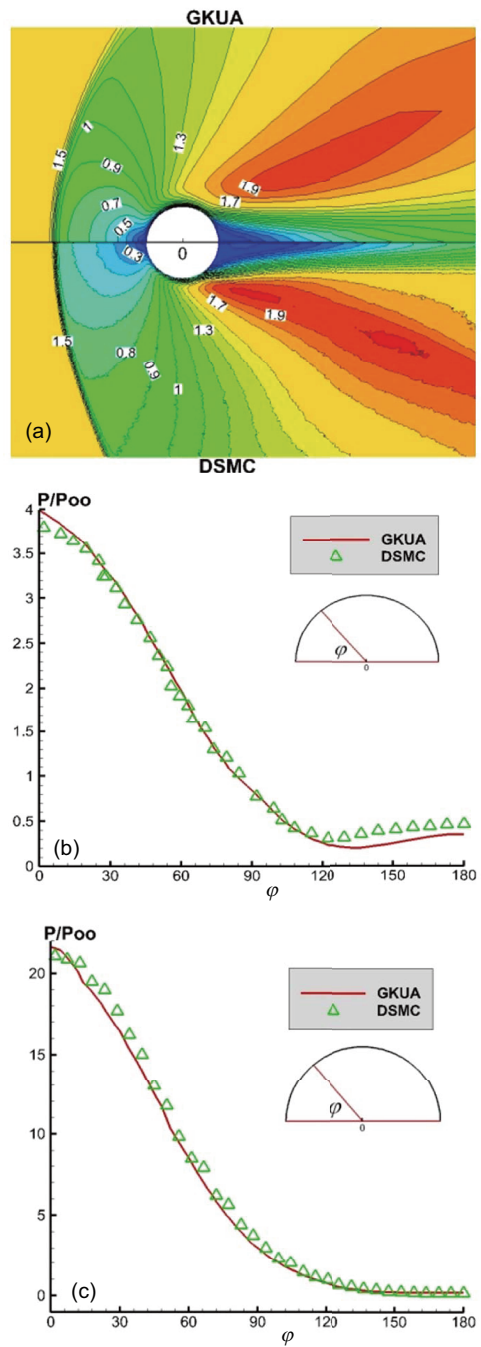


图 12 (网络版彩图) 稀薄过渡流区圆柱绕流流场与物面压力分布 GKUA 与 DSMC 计算比较. (a) $Kn_\infty = 0.01, Ma_\infty = 1.6$ 等值线; (b) $Kn_\infty = 0.01, Ma_\infty = 1.6$ 物面压力分布; (c) $Kn_\infty = 0.1, Ma_\infty = 4$ 物面压力分布

Figure 12 (Color online) Comparison of the GKUA and DSMC simulations of the flow field and surface pressure distribution around cylinder in rarefied transition regime. (a) Mach number contours with $Kn_\infty = 0.01, Ma_\infty = 1.6$; (b) surface pressure distribution with $Kn_\infty = 0.01, Ma_\infty = 1.6$; (c) surface pressure distribution with $Kn_\infty = 0.1, Ma_\infty = 4$.

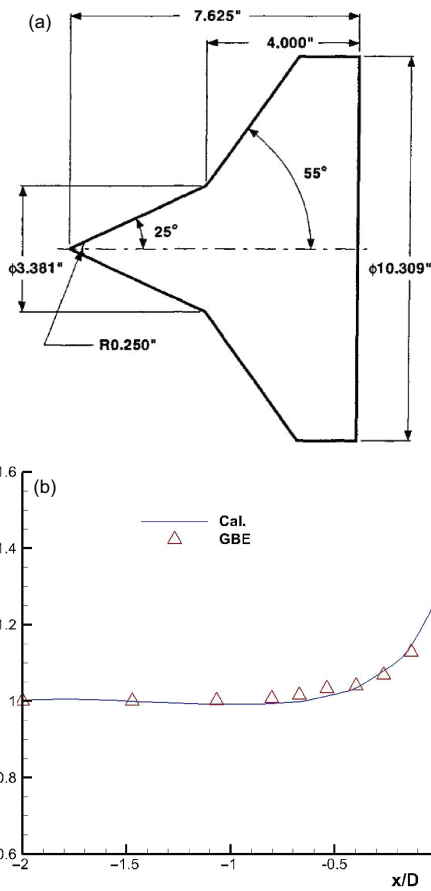


图 13 (网络版彩图) 尖双锥飞行器再入绕流, $Ma_\infty = 3, Kn_\infty = 1$. (a) 双锥再入体外形; (b) 驻点线密度分布 [73, 74]
Figure 13 (Color online) Reentry flow around the tine bicone, $Ma_\infty = 3, Kn_\infty = 1$. (a) The tine bicone geometry; (b) density distribution along the stagnation line [73, 74].

为了检验含转动非平衡效应 Boltzmann 模型方程统一算法对三维复杂飞行器再入绕流问题模拟能力, 拟定尖双锥再入体外形及尺寸如图 13(a) 所示, 为了与适于高稀薄流模拟的 GBE 解算器 [75] 计算比较, 拟定来流 $Ma_\infty = 3, Kn_\infty = 1$ 绕流状态, 图 13 (b) 给出统一算法计算该状态驻点线密度分布与文献 [75] 结果 (符号 Δ) 的对比情况, 可看出两种方法计算结果很一致, 证实考虑转动非平衡效应 Boltzmann 模型方程统一算法用于计算再入飞行器绕流问题的可行性. 为了剖析再入稀薄过渡区流动非平衡效应, 图 14 和 15 分别给出了 $Kn_\infty = 1$ 与 $Kn_\infty = 0.1$ 两种状态对应的绕流流场温度分布, 其中 (a) 表示平动温度等值线, (b) 表示转动温度等值线. 可看出: 在 $Kn_\infty = 1$ 对应的

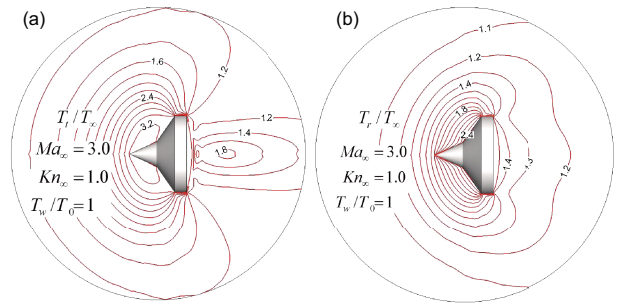


图 14 (网络版彩图) 尖双锥飞行器再入绕流温度分布, $Ma_\infty = 3, Kn_\infty = 1$. (a) 平动温度; (b) 转动温度 [73, 74]
Figure 14 (Color online) Temperature distribution of the flowfield around the tine bicone at entry, $Ma_\infty = 3, Kn_\infty = 1$. (a) The translational temperature; (b) rotational temperature [73, 74].

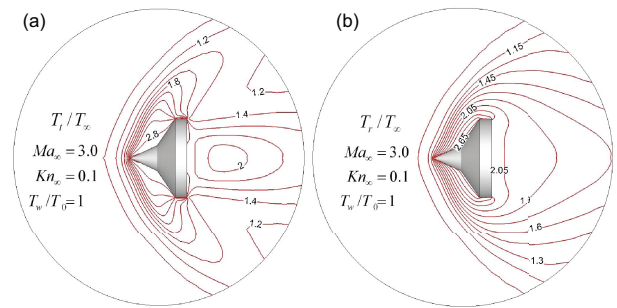


图 15 (网络版彩图) 尖双锥飞行器再入绕流温度分布, $Ma_\infty = 3, Kn_\infty = 0.1$. (a) 平动温度; (b) 转动温度 [73, 74]
Figure 15 (Color online) Temperature distribution of the flowfield around the tine bicone at entry, $Ma_\infty = 3, Kn_\infty = 0.1$. (a) The translational temperature; (b) rotational temperature [73, 74].

高稀薄流区, 平动温度与转动温度彼此差别很大, 计算得到的物体前部绕流区平动温度最大值约为 3.2, 而转动温度最大为 2.4 左右; 对应的过渡区绕流, 平动温度与转动温度之间的差异明显减小, 物体前部高温区平动温度最大值下降为 2.8, 转动温度升高为 2.65 左右. 这体现了高克努森数稀薄过渡流区存在严重的流动非平衡, 且克努森数越大非平衡效应越严重, 飞行器绕流流动非平衡影响越明显, 说明了在稀薄流区考虑非平衡效应对飞行器绕流影响的必要性.

7 结果与展望

本文简要介绍了通过不同途径的 Boltzmann 方

程碰撞积分可计算建模, 发展直接求解 Boltzmann 模型速度分布函数方程数值方法进展特点. 在这些方法中, 最近发展的快速谱方法由于其对低速稀薄气体流动与微尺度环境下稠密气体、两相颗粒气体良好的计算效率和精度, 有着潜在的应用前景. 为此, 首先讨论了该方法原理、发展过程, 并介绍了把该方法推广到实际应用的一些工作. 在此基础上, 针对航天再入空气动力学特点, 叙述了通过对 Boltzmann 碰撞积分物理分析与模型化表征, 建立求解航天再入稀薄流到连续流跨流域绕流问题 Boltzmann 模型方程统一算法研究发展状况, 剖析了该方法的理论基础与实际模拟应用能力. 展望进一步发展求解 Boltzmann 模型方程高精度统一算法, 预期可提供一条研究解

决航天器再入跨越飞行高稀薄流到连续流各流域复杂高超声速气动力/热绕流问题的道路. 虽然 Boltzmann 方程碰撞积分建模与在跨流域空气动力学高性能计算应用已产生巨大的突破, 相较 DSMC 方法在模拟热化学非平衡流动方面, 仍存在局限性, 主要原因是对于高温真实气体非平衡问题, Boltzmann 方程并不适用, 需要发展新的气体动力学模型方程. 另一方面, 从 Boltzmann 方程碰撞积分计算建模发展气体动力学方法, 如快速谱方法与气体动理论统一算法 (GKUA), 有数值上确定性优点, 特别对低速流动比 DSMC 在计算效率精度上有相当的优势. 该类方法模型有望在今后进一步发展与实际应用发挥越来越大的作用.

致谢 感谢课题组吴俊林、蒋新宇、彭傲平等人的支持和帮助.

参考文献

- 1 Chapman S, Cowling T G. *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*. Cambridge: Cambridge University, 1970
- 2 Cercignani C. *The Boltzmann Equation and Its Applications*. Berlin: Springer Verlag, 1988
- 3 Muntz E P. Rarefied gas dynamics. *Annu Rev Fluid Mech*, 1989, 21: 387–422
- 4 Sone Y. The new features of continuum aerodynamics and rarefied gas dynamics from gas kinetic perspective (in Chinese). *Adv Mech*, 1997, 27: 389–404 [Sone Y. 从分子运动论看连续介质气体动力学和稀薄气体的新特性. *力学进展*, 1997, 27: 389–404]
- 5 Sone Y. Flows induced by temperature fields in a rarefied gas and their ghost effect on the behavior of a gas in the continuum limit. *Annu Rev Fluid Mech*, 2000, 32: 779–811
- 6 Burnett D. The distribution of molecular velocities and the mean motion in a nonuniform gas. *Proc London Math Soc*, 1935, 40: 382–435
- 7 Tsien H S. Superaerodynamics, mechanics of rarefied gases. *J Aero Sci*, 1946, 13: 653–664
- 8 Shen Q. Get acquainted with rarefied gas dynamics (in Chinese). *Mech Eng*, 2002, 24: 1–14 [沈青. 认识稀薄空气动力学. *力学与实践*, 2002, 24: 1–14]
- 9 Maxwell J C. On stresses in rarefied gases arising from inequalities of temperature. *Phil Trans Roy Soc*, 1879, 170: 231–256
- 10 Huang A, Giddens D, Bagnall C. Rarefied gas flow between parallel plates based on the discrete ordinate method. *Phys Fluid*, 1967, 10: 498–502
- 11 Bird G. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Oxford: Science Publications, 1994
- 12 Goldstein D, Sturtevant B, Broadwell J E. Investigations of the motion of discrete-velocity gases. In: *Proceedings of Rarefied Gas Dynamics: Theoretical and Computational Techniques*. Washington: Institute of Aeronautics and Astronautics, 1989
- 13 Bobylev A V, Palczewski A, Schneider J. On approximation of the Boltzmann equation by discrete velocity models. *C R Acad Sci Paris*, 1995, 320: 639–644
- 14 Aristov V V, Tcheremissine F G. *Direct Numerical Solutions of the Kinetic Boltzmann Equation*. Moscow: Comp Center Russ Acad Sci Moscow, 1992
- 15 Wagner W. Approximation of the Boltzmann equation by discrete velocity models. *J Statist Phys*, 1995, 78: 1555–1570
- 16 Buet C. A discrete-velocity scheme for the Boltzmann operator of rarefied gas dynamics. *Transp Theory Stat Phys*, 1996, 25: 33–60
- 17 Morris A B, Varghese P L, Goldstein D B. Improvement of a discrete velocity Boltzmann equation solver that allows for arbitrary post-collision velocities. *AIP Conf Proc*, 2008, 1084: 458–463
- 18 Morris A B, Varghese P L, Goldstein D B. Monte Carlo solution of the Boltzmann equation via a discrete velocity model. *J Comput Phys*, 2011, 230: 1265–1280
- 19 Mouhot C, Pareschi L, Rey T. Convolution decomposition and fast summation methods for discrete-velocity approximations of the Boltzmann

- equation. *Math Mod Num Anal*, 2013, 47: 1515–1531
- 20 Sone Y, Ohwada T, Aoki K. Temperature jump and Knudsen layer in a rarefied gas over a plane wall: Numerical analysis of the linearized Boltzmann equation for hard-sphere molecules. *Phys Fluids A*, 1989, 1: 363–370
 - 21 Ohwada T. Structure of normal shock waves: Direct numerical analysis of the Boltzmann equation for hard-sphere molecules. *Phys Fluids*, 1993, 5: 217–234
 - 22 Ohwada T. Heat flow and temperature and density distributions in a rarefied gas between parallel plates with different temperatures. Finite-difference analysis of the nonlinear Boltzmann equation for hard-sphere molecules. *Phys Fluids*, 1996, 8: 2153–2160
 - 23 Doi T. Numerical analysis of the Poiseuille flow and thermal transpiration of a rarefied gas through a pipe with a rectangular cross section based on the linearized Boltzmann equation for a hard sphere molecular gas. *J Vac Sci Tech A*, 2010, 28: 603–612
 - 24 Tcheremissine F G. Direct numerical solution of the Boltzmann equation. *AIP Conf Proc*, 2005, 762: 677–685
 - 25 Anikin Y A, Dodulad O I, Kloss Y Y, et al. Method of calculating the collision integral and solution of the Boltzmann kinetic equation for simple gases, gas mixtures and gases with rotational degrees of freedom. *Int J Comput Math*, 2014: 1775–1789
 - 26 Bobylev A V. The theory of the nonlinear spatially uniform Boltzmann equation for Maxwell molecules. *Math Phys Rev*, 1988, 7: 111–233
 - 27 Pareschi L, Perthame B. A Fourier spectral method for homogeneous Boltzmann equation. *Transp Theory Stat Phys*, 1996, 25: 369–382
 - 28 Pareschi L, Russo G. Numerical solution of the Boltzmann equation I: Spectrally accurate approximation of the collision operator. *SIAM J Numer Anal*, 2000, 37: 1217–1245
 - 29 Mouhot C, Pareschi L. Fast algorithms for computing the Boltzmann collision operator. *Math Comput*, 2006, 75: 1833–1852
 - 30 Filbet F, Mouhot C, Pareschi L. Solving the Boltzmann equation in $N \log_2 N$. *SIAM J Sci Comput*, 2006, 28: 1029–1053
 - 31 Wu L, White C, Scanlon T J, et al. Deterministic numerical solutions of the Boltzmann equation using the fast spectral method. *J Comput Phys*, 2013, 250: 27–52
 - 32 Baker L L, Hadjiconstantinou N G. Variance reduction for Monte Carlo solutions of the Boltzmann equation. *Phys Fluids*, 2005, 17: 051703
 - 33 Hu J, Ying L. A fast spectral algorithm for the quantum Boltzmann collision operator. *Commun Math Sci*, 2012, 10: 989–999
 - 34 Gamba I M, Tharkabhushanam S H. Spectral-Lagrangian methods for collisional models of non-equilibrium statistical states. *J Comput Phys*, 2009, 228: 2012–2036
 - 35 Takata S, Funagane H. A force acting on an oblate spheroid with discontinuous surface temperature in a slightly rarefied gas. *J Fluid Mech*, 2014, 748: 712–730
 - 36 Wu L, Reese J M, Zhang Y H. Solving the Boltzmann equation deterministically by the fast spectral method: Application to gas microflows. *J Fluid Mech*, 2014, 746: 53–84
 - 37 Wu L, Zhang J, Reese J M, et al. A fast spectral method for the Boltzmann equation for monatomic gas mixtures. *J Comput Phys*, 2015, 298: 602–621
 - 38 Wu L, Liu H H, Reese J M, et al. Non-equilibrium dynamics of dense gas under tight confinement. *J Fluid Mech*, 2016, 794: 252–266
 - 39 Frezzotti A, Gibelli L, Lorenzani S. Mean field kinetic theory description of evaporation of a fluid into vacuum. *Phys Fluids*, 2005, 17: 012102
 - 40 Barbante P, Frezzotti A, Gibelli L. A kinetic theory description of liquid menisci at the microscale. *Kinet Relat Models*, 2015, 8: 235–254
 - 41 Chang C S W, Uhlenbeck G E. *Transport Phenomena in Polyatomic Gases*. Research Report. Ann Arbor: University of Michigan Engineering, 1951, CM-681
 - 42 Buet C. Conservative and entropy schemes for the Boltzmann collision operator of polyatomic gases. *Math Models Methods Appl Sci*, 1997, 7: 165–192
 - 43 Tcheremissine F G, Agarwal R K. Computations of hypersonic shock waves in diatomic gases using the generalized Boltzmann equation. In: *Proceedings of 26th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*. Kyoto: AIP Publishing, 2008
 - 44 Munafò A, Haack J R, Gamba I M, et al. A spectral-Lagrangian Boltzmann solver for a multi-energy level gas. *J Comput Phys*, 2014, 264: 152–176
 - 45 Wu L, White C, Scanlon T J, et al. A kinetic model of the Boltzmann equation for non-vibrating polyatomic gases. *J Fluid Mech*, 2015, 763: 24–50
 - 46 Morse T F. Kinetic model for gases with internal degrees of freedom. *Phys Fluids*, 1964, 7: 159–169
 - 47 Holway L H. New statistical models for kinetic theory: Methods of construction. *Phys Fluids*, 1966, 9: 1658–1673
 - 48 Andries P, Tallec P L, Perlat J, et al. The Gaussian-BGK model of Boltzmann equation with small Prandtl number. *Eur J Mech B Fluids*, 2000, 19: 813–830
 - 49 Fernandes A S, Marques W. Kinetic model analysis of time-dependent problems in polyatomic gases. *Phys A*, 2007, 373: 97–118
 - 50 Rykov V. A model kinetic equation for a gas with rotational degrees of freedom. *Fluid Dyn*, 1975, 10: 959–966
 - 51 Gorji M H, Jenny P. A Fokker-Planck based kinetic model for diatomic rarefied gas flows. *Phys Fluids*, 2013, 25: 062002

- 52 Gorji M H, Torrilhon M, Jenny P. Fokker-Planck model for computational studies of monatomic rarefied gas flows. *J Fluid Mech*, 2011, 680: 574–601
- 53 Shakhov E M. Generalization of the Krook kinetic relaxation equation. *Fluid Dyn*, 1968, 3: 95–96
- 54 Sharipov F, Bertoldo G. Poiseuille flow and thermal creep based on the Boltzmann equation with the Lennard-Jones potential over a wide range of the Knudsen number. *Phys Fluids*, 2009, 21: 067101
- 55 Wu L, Reese J M, Zhang Y H. Solving the Boltzmann equation by the fast spectral method: Application to microflows. *J Fluid Mech*, 2014, 746: 53–84
- 56 Liu S, Yu P B, Xu K, et al. Unified gas-kinetic scheme for diatomic molecular simulations in all flow regimes. *J Comput Phys*, 2014, 259: 96–113
- 57 Larina I N, Rykov V A. Kinetic model of the Boltzmann equation for a diatomic gas with rotational degrees of freedom. *Comput Math Math Phys*, 2010, 50: 2188–2130
- 58 Pan X, Shneider M N, Miles R B. Coherent Rayleigh-Brillouin scattering. *Phys Rev Lett*, 2002, 89: 183001
- 59 Vieitez M O, Van Duijn E J, Ubachs W, et al. Coherent and spontaneous Rayleigh-Brillouin scattering in atomic and molecular gases and gas mixtures. *Phys Rev A*, 2010, 82: 043836
- 60 Gerakis A, Shneider M N, Barker P F. Single-shot coherent Rayleigh-Brillouin scattering using a chirped optical lattice. *Opt Letts*, 2013, 38: 4449–4452
- 61 Gu Z, Ubachs W. Temperature-dependent bulk viscosity of nitrogen gas determined from spontaneous Rayleigh-Brillouin scattering. *Opt Lett*, 2013, 38: 1110–1112
- 62 Tenti G, Boley C, Desai R. On the kinetic model description of Rayleigh-Brillouin scattering from molecular gases. *Can J Phys*, 1974, 52: 285–290
- 63 Pan X, Shneider M N, Miles R B. Coherent Rayleigh-Brillouin scattering in molecular gases. *Phys Rev A*, 2004, 69: 033814
- 64 Marques W. Coherent Rayleigh-Brillouin scattering in binary gas mixtures. *J Stat Phys*, 2007, 2007: P03013
- 65 Grinstead J H S, Barker P F. Coherent rayleigh scattering. *Phy Rew Lett*, 2000, 85: 1222–1225
- 66 Robben F, Talbot L. Experimental study of the rotational distribution function of nitrogen in a shock wave. *Phys Fluids*, 1966, 9: 653–662
- 67 Shizgal B. A Gaussian quadrature procedure for use in the solution of the Boltzmann equation and related problems. *J Comput Phys*, 2009, 41: 309–328
- 68 Li Z H, Zhang H X. Numerical investigation from rarefied flow to continuum by solving the Boltzmann model equation. *Int J Num Meth Fluids*, 2003, 42: 361–382
- 69 Li Z H, Zhang H X. Study on gas kinetic unified algorithm for flows from rarefied transition to continuum. *J Comput Phys*, 2004, 193: 708–738
- 70 Li Z H, Zhang H X. Study on gas kinetic numerical algorithm using Boltzmann model equation (in Chinese). *Sci Sin-Phys Mech Astron*, 2009, 39: 414–427 [李志辉, 张涵信. 基于 Boltzmann 模型方程各流域三维复杂绕流问题统一算法研究. *中国科学: 物理学力学天文学*, 2009, 39: 414–427]
- 71 Li Z H, Zhang H X. Gas-kinetic numerical studies of three-dimensional complex flows on spacecraft re-entry. *J Comput Phys*, 2009, 228: 1116–1138
- 72 Li Z H, Peng A P, Zhang H X, et al. Rarefied gas flow simulations using high-order gas-kinetic unified algorithms for Boltzmann model equations. *Prog Aerosp Sci*, 2015, 74: 81–113
- 73 Li Z H, Jiang X Y, Wu J L, et al. Gas-kinetic unified algorithm for Boltzmann model equation in rotational nonequilibrium and its application to the whole range flow regimes (in Chinese). *Chin J Theor Appl Mech*, 2014, 46: 336–351 [李志辉, 蒋新宇, 吴俊林, 等. 转动非平衡玻尔兹曼模型方程统一算法与全流域绕流计算应用. *力学学报*, 2014, 46: 336–351]
- 74 Li Z H, Wu J L, Jing X Y, et al. The unified algorithm for various flow regimes solving Boltzmann model equation in rotational non-equilibrium (in Chinese). *ACTA Aerodyn Sin*, 2014, 32: 137–145 [李志辉, 吴俊林, 蒋新宇, 等. 含转动非平衡效应 Boltzmann 模型方程统一算法与跨流域绕流问题模拟研究. *空气力学学报*, 2014, 32: 137–145]
- 75 Wilson C D, Agarwal R K, Tcheremissine F G. Computation of Hypersonic flow of a diatomic gas in rotational nonequilibrium past 3D blunt bodies using the generalized boltzmann equation. In: *Proceedings of 39th AIAA Thermophysics Conference*. Miami: AIAA, 2009

Computable model on the collision integral of Boltzmann equation and application to rarefied aerodynamics

WU Lei¹, ZHANG YongHao^{1*} & LI ZhiHui^{2,3}

¹ James Weir Fluids Laboratory, University of Strathclyde, Glasgow G1 1XJ, UK;

² Hypervelocity Aerodynamics Institute, China Aerodynamics Research and Development Center, Mianyang 621000, China;

³ National Laboratory of Computational Fluid Dynamics, Beijing 100191, China

Due to its complexity in dealing with the collisional integral term of the Boltzmann equation and computational costs associated with multi-dimensional problems, deterministic methods are still restricted to simple flow such as one-dimensional linear flow. However, the recently emerged fast spectrum method has achieved breakthroughs in computational efficiency and accuracy, which can enable simulations for more realistic three-dimensional non-linear flows. In comparison with the dominant direct simulation Monte Carlo method, the deterministic method has advantages especially in simulating low-speed flows where statistical variations prevail. Here, we review the development of fast spectrum method and discuss its applications for practical flow simulations. In particular, extended Boltzmann model is required for polyatomic and dense gases where the Boltzmann equation may not be valid. We present the applications of extended Boltzmann model for polyatomic gases in predicting spectra of both spontaneous and coherent Rayleigh-Brillouin Scattering, and in simulating space vehicle reentries with a broad range of Kn . Finally, we discuss the gas-kinetic unified algorithm (GKUA) of computable model Boltzmann equation and applications to the hypersonic aerodynamics of space reentry covering various flow regimes.

rarefied gas dynamics, gas kinetic theory, discrete velocity method, Boltzmann equation, fast spectrum method, gas-kinetic unified algorithm

PACS: 47.11.-j, 47.45.-n, 51.10.+y

doi:10.1360/SSPMA2016-00409