



北京大学

博士研究生学位论文

题目：适用于多尺度流动的

统一气体动理论格式研究

姓名：肖天白

学号：1401111514

院系：工学院

专业：流体力学

研究方向：计算流体力学

导师姓名：蔡庆东 徐昆

二〇一九年六月

Unified Gas-Kinetic Scheme for Multi-Scale Flows

Dissertation Submitted to
Peking University

**In partial fulfillment of the requirements for the degree of
Doctor of Natural Science**

By
**Xiao Tianbai, B. Eng.
(Fluid Mechanics)**

Dissertation Supervisor: **Associate Professor Cai Qingdong and
Professor Xu Kun**

Department of Mechanics and Engineering Science

College of Engineering

Peking University

June, 2019, Beijing

版权声明

任何收存和保管本论文各种版本的单位和个人，未经本论文作者同意，不得将本论文转借他人，亦不得随意复制、抄录、拍照或以任何方式传播。否则，引起有碍作者著作权之问题，将可能承担法律责任。

摘要

气体动力学具有内禀的多尺度特性。例如，在新一代空天飞行器起飞、变轨、巡航、再入、分离、解体，和微机电系统中的微尺度流动和振动等问题里，流场呈现典型的多尺度、多层次结构特征。在不同尺度的流动结构内，气体的行为表现出显著的差异，并伴随有不同程度的非平衡流动物理。发展统一的多尺度数值建模和计算方法，以实现对复杂流场演化过程精确和高效的定量描述，是计算流体力学面临的重要机遇和挑战。统一气体动理论格式 (Unified Gas-Kinetic Scheme, UGKS) 是一种直接建模方法，即以数值模拟中使用的网格尺寸和时间步长作为建模尺度，直接在该尺度上构建离散形式的控制方程。随着尺度的连续变化，UGKS 能够自动捕捉从稀薄气体动力学到连续介质力学的流动物理。本文研究的主要内容是针对典型的多尺度、多物理的流动问题，进行统一气体动理论学建模，发展具有多尺度性质的数值模拟方法，并通过理论分析和数值实验研究非平衡流动中的内在规律。

首先，基于有外力项的气体动理论学输运方程，我们发展了适用于模拟外力场下多尺度流动问题，并具有细致平衡 (Well-Balanced) 特性的统一气体动理论学格式。对于孤立的引力系统，该方法能够从任意初始状态沿正确的物理轨迹自演化至流体静力学平衡态，并精确保持其终态。我们将该方法用于外力场下的实际流动物理问题的研究中。通过动理论方程的线性理论和数值模拟，我们定量地分析了由外力项诱导产生的非平衡热流，及其在流动和传热问题中的作用。由于 Chapman-Enskog 展开形式的迭代作用原理，经典的 Fourier 热传导定律无法包含外力项的贡献。因此这一结果可以作为广义的本构关系，为 Navier-Stokes 等流体动力学方程提供更加完整的能量输运描述。这也是关于外力项引起的非平衡传热现象的首次系统的研究，可以用于解释大尺度环流和天体物理中广泛存在的重力-热不稳定性现象。

之后，针对离散速度法在高速、高温流动问题中资源消耗过多的问题，我们提出了速度空间自适应的统一气体动理论学格式。和原始的 UGKS 方法相比，这里粒子速度分布函数实现了在连续-离散速度空间的动态分配。提出了新的速度空间切换准则，并通过数值实验验证。在保证相同的数值解精度的前提下，新的自适应方法大幅降低了数值模拟过程中对计算资源的消耗，有效提升了计算效率。同时，基于快速谱方法，我们将完整的 Boltzmann 碰撞项和松弛模型耦合求解，扩展了该方法在全尺度流域内的适用范围。

最后，基于气体混合物的 Boltzmann 方程、松弛模型和描述电磁场演化规律的 Maxwell 方程组，我们将 UGKS 拓展至多组分气体和等离子体动力学。在不同的尺度

上, UGKS 能够自动恢复从多组分 Boltzmann 方程到 Euler 和 Navier-Stokes 方程, 以及从等离子体 Vlasov-Fokker-Planck 方程到磁流体流域的双流体方程、Hall 磁流体方程和理想磁流体方程描述的特征流体物理。除完全电离的等离子体外, 基于 Fokker-Planck 类碰撞项, 我们考虑了电离和复合反应在动态电离等离子体演化中的作用。这也是首次通过直接求解动理学尺度上的演化方程, 对部分电离等离子体物理进行定量研究的数值模拟方法。

统一气体动理学格式提供了一种对于多尺度输运问题建模和计算的通用框架。在本文中, 我们针对三种典型的多尺度流动问题发展了相应的数值模拟方法, 拓展了原有 UGKS 的适用范围, 并对相应的非平衡流动物理问题进行了研究。UGKS 提供了一种在全流域范围可靠的研究工具, 并可以在缺乏系统研究的过渡流域提供可靠的数值解。这种新型数值算法有望在科学的研究和工业生产中进一步扮演重要的角色。

关键词: 多尺度建模, 非平衡流动, 气体动理学格式

Unified Gas-Kinetic Scheme for Multi-Scale Flows

Xiao Tianbai (Fluid Mechanics)

Directed by Associate Professor Cai Qingdong and Professor Xu Kun

ABSTRACT

Gas dynamics is intrinsically associated with multiple scale nature. For instance, in the key processes of new generation of aerospace vehicles, including taking off, orbital transfer, high-speed cruise, reentry, separation, disintegration, and of Micro-Electro-Mechanical Systems including micro-scale flow and vibration problems, typical multi-scale and multi-level flow fields may appear. Inside different flow structures, it shows a diverse set of behaviors for gaseous flow on different characteristic scales, with ubiquitous non-equilibrium phenomena. It is impending to develop bran-new numerical algorithm, which is able to describe the evolution of complex flow dynamics accurately and efficiently. The unified gas-kinetic scheme (UGKS) provides such a kind of direct modeling method, in which the mesh size and time step in the simulation process are used as modeling scale to construct discretized governing equations. With a continuous change of characteristic scale, UGKS automatically captures the flow physics from rarefied gas dynamics to continuum mechanics. The main ingredient of this thesis is to further improve and develop the UGKS method and study multi-scale transport problems.

First, based on the gas kinetic equation with external forcing term, we develop a well-balanced UGKS for the study of multi-scale flow dynamics under external force field. For an isolated gravitational system, this algorithm can provide the physical path from an arbitrary initial state to hydrostatic equilibrium state, and maintain this final state accurately. We then use this method to study flow dynamics related with external force. Based on linear theory of kinetic equation and numerical experiments of UGKS, we quantitatively investigate the non-equilibrium heat flux induced by external forcing term and its role in flow transport and heat transfer problems. Due to the iterative nature of Chapman-Enskog expansion, classical Fourier's heat conduction law never includes such contributions of external force term. This result can serve as an augmentation of constitutive relations to help provide a more complete description of energy transport in Navier-Stokes and other fluid dynamics equations. This is the very first systematic investigation of heat transfer caused by external force, which can be used to illustrate widely existed gravity-thermal instability in large-scale atmospheric convection and astrophysics.

Then, we propose a velocity-space adaptive unified gas-kinetic scheme to overcome the burden of computational resources inherited by discrete velocity method in high speed and high temperature flows. Compared with the original UGKS method, here particle distribution function is dynamically allocated and deallocated over continuous-discrete velocity space. An alternative criterion of switching velocity space is derived and validated through numerical experiments. The current adaptive scheme speeds up computation, reduces memory requirement significantly, yet maintains the equivalent accuracy for multi-scale flow simulations. Meanwhile, on the basis of FFT-based fast spectral method, we couple the update of full Boltzmann collision integration and BGK-type relaxation model, which extends the applicability of the current scheme in the whole Knudsen regime.

Finally, based on multi-species Boltzmann equation, BGK relaxation model and Maxwell's equations for the evolution of electromagnetic field, we extend the UGKS to multi-component neural gas and plasma dynamics. With respect to different characteristic scales, UGKS connect different regimes seamlessly from Boltzmann equation to Euler and Navier-Stokes equations for neural gas, and from Vlasov-Fokker-Planck equation to two-fluid, Hall and ideal MHD equations for plasma. In addition to fully ionized plasma, chemical reactions including ionization and recombination are considered in a Fokker-Planck ansatz in the evolution of dynamically ionized plasma. This is a first attempt in plasma community that a direct solver on the kinetic scale for partially ionized plasma is available.

In summary, the unified gas-kinetic scheme provides a general framework for multi-scale modeling and simulation of transport problems. In this thesis, we consider three typical multi-scale scenarios of flow dynamics, and develop the corresponding numerical algorithms. The applicability of original UGKS is generalized, and the typical non-equilibrium physical problems are studied. UGKS sets up a irreplaceable tool in whole Knudsen regimes, and is able to provide reliable solutions in the transition regime, which has seldom been studied systematically. The state-of-the-art numerical algorithm is expected to be used in scientific research and industrial applications in the near future.

KEYWORDS: multi-scale modeling, non-equilibrium flow, unified gas-kinetic scheme

目录

第一章 引言	1
1.1 研究背景	1
1.2 流体运动的描述方法	3
1.2.1 连续介质描述	3
1.2.2 动理学描述	5
1.3 数值模拟方法	8
1.4 研究目标	11
第二章 外力场下细致平衡的统一气体动理学格式	13
2.1 简介	13
2.2 气体动理学基础	14
2.3 细致平衡的统一气体动理学格式	16
2.3.1 界面分布函数的构造	16
2.3.2 多维情况	18
2.3.3 更新方法	20
2.3.4 关于细致平衡特性的分析	21
2.3.5 算法概述	24
2.4 数值实验	24
2.4.1 一维流体静力学平衡解	24
2.4.2 外力场下的激波管问题	25
2.4.3 Rayleigh-Taylor 不稳定性问题	26
2.5 小结	30
第三章 外力场下非平衡流动和传热的研究	31
3.1 简介	31
3.2 关于外力物理效应的分析	33
3.3 非平衡流动和传热研究	39
3.3.1 外力驱动 Poiseuille 流动	40
3.3.2 静止热传导问题	41
3.3.3 外力场下的驱动方腔流动	46
3.4 小结	52

第四章 速度空间自适应的统一气体动理论学格式	58
4.1 简介	58
4.2 速度空间自适应的统一气体动理论学格式	59
4.2.1 离散速度空间的统一气体动理论学格式	60
4.2.2 碰撞项的计算方法	62
4.2.3 连续速度空间的统一气体动理论学格式	64
4.2.4 自适应的统一气体动理论学格式	66
4.2.5 速度空间变换准则	67
4.2.6 算法概述	69
4.3 数值实验	69
4.3.1 密度波传播问题	70
4.3.2 激波管问题	71
4.3.3 Rayleigh 问题	75
4.3.4 喷管流动	76
4.3.5 圆柱绕流问题	79
4.4 小结	84
第五章 多组分气体和等离子输运的统一气体动理论学格式	89
5.1 简介	89
5.2 气体动理论学建模	90
5.2.1 混合物的动理论学描述	90
5.2.2 等离子体的动理论学描述	92
5.2.3 电离和复合反应的动理论学建模	93
5.2.4 部分电离等离子体的 BGK 类松弛模型	95
5.2.5 Maxwell 方程组	96
5.3 统一气体动理论学格式	97
5.3.1 更新方法	97
5.3.2 界面分布函数的构造	98
5.3.3 碰撞项的计算方法	100
5.3.4 Maxwell 方程组的波传播方法	102
5.3.5 算法概述	104
5.4 数值实验	104
5.4.1 正激波结构	104
5.4.2 激波管问题	106
5.4.3 Landau 阻尼	110

5.4.4 双流不稳定性.....	114
5.4.5 Brio-Wu 激波管.....	115
5.4.6 Orszag-Tang 磁流体涡.....	118
5.4.7 部分电离等离子体.....	118
5.5 小结	137
第六章 结论	138
参考文献	141
附录 A 电离和复合反应碰撞截面近似	151
博士期间发表和完成的论文	153
致谢	155
北京大学学位论文原创性声明和使用授权说明	157

表格

3.1 在 $x = 0.5$ 和 $Kn_{ref} = 0.001$ 时的定常热传导解	47
3.2 在 $x = 0.5$ 和 $Kn_{ref} = 0.01$ 时的定常热传导解	48
3.3 在 $x = 0.5$ 和 $Kn_{ref} = 0.1$ 时的定常热传导解	49
4.1 密度波传播问题中 $t = 1$ 时的 CPU 计算时间和内存负载	71
4.2 Sod 激波管问题中 $t = 0.2$ 时的 CPU 计算时间和内存负载	73
4.3 Rayleigh 问题中输出时刻的 CPU 计算时间和内存负载	76
4.4 喷管流动中不同时刻的 CPU 计算时间和内存负载	79
4.5 圆柱绕流问题中的 CPU 计算时间和内存负载	84

插图

1.1 多种航天器的飞行轨迹示意图 ^[1]	2
2.1 UGKS 在每一个更新步里的算法步骤	24
2.2 静力学平衡解上压力扰动随时间演化的过程	25
2.3 外力场下的 Sod 激波管问题在 $t = 0.2$ 时刻的解	27
2.4 不同参考克努森数下外力场中的密度演化, 0.0001 (a-d), 0.01 (e-h), 1 (i-l)	28
2.5 不同参考克努森数下密度沿径向的分布, 0.0001 (a-d), 0.01 (e-h), 1 (i-l)	29
3.1 两平板间的粒子示意图	36
3.2 $\alpha = 1$ 时的密度、速度和温度的剖面图	41
3.3 $\alpha = 2$ 时的密度、速度和温度的剖面图	42
3.4 $\alpha = 3$ 时的密度、速度和温度的剖面图	42
3.5 $\alpha = 1$ 时应力和热流的剖面图	43
3.6 $\alpha = 2$ 时应力和热流的剖面图	44
3.7 $\alpha = 3$ 时应力和热流的剖面图	45
3.8 在 $\alpha = 3$ 时中心位置的温度剖面图	45
3.9 $\Delta q = \vec{q}_{Kinetic} - \vec{q}_{Fourier} $ 随外力加速度 ϕ_x 的变化。红圈为数值模拟结果， 红虚线为样条拟合线，黑线为线性理论给出的解析解	46
3.10 $Kn_{ref} = 0.001$ 时沿方腔中心线的速度分布	52
3.11 $Kn_{ref} = 0.001$ 时方腔内的速度 (U,V), 流线和速度矢量	53
3.12 $Kn_{ref} = 0.001$ 时沿方腔竖直中心线的密度和局部克努森数分布	53
3.13 $Kn_{ref} = 0.001$ 时方腔内的温度和热流分布	54
3.14 $Kn_{ref} = 0.075$ 时沿方腔中心线的速度分布	54
3.15 $Kn_{ref} = 0.075$ 时方腔内的温度和热流分布	55
3.16 $Kn_{ref} = 0.075$ 时热流沿方腔水平中心线的分布	55
3.17 $Kn_{ref} = 0.075$ 时方腔中心附近的热流分布	56
3.18 $Kn_{ref} = 1.0$ 时沿方腔中心线的速度分布	56
3.19 $Kn_{ref} = 1.0$ 时方腔内的温度和热流分布	57
3.20 $Kn_{ref} = 1.0$ 时热流沿方腔水平中心线的分布	57
4.1 适用于多尺度流动的自适应算法原理示意图	67

4.2 AUGKS 在每一个更新步里的算法步骤	70
4.3 不同参考克努森数下 $t = 1.0$ 时流场中的密度分布	72
4.4 密度波传播问题在输出时刻的速度空间自适应情况	72
4.5 参考克努森数 $Kn = 0.0001$ 下 $t = 0.2$ 时 Sod 激波管问题的解	73
4.6 参考克努森数 $Kn = 0.001$ 下 $t = 0.2$ 时 Sod 激波管问题的解	74
4.7 参考克努森数 $Kn = 0.01$ 下 $t = 0.2$ 时 Sod 激波管问题的解	74
4.8 参考克努森数 $Kn = 1.0$ 下 $t = 0.2$ 时 Sod 激波管问题的解	74
4.9 Sod 激波管问题在 $t = 0.2$ 时的速度空间自适应情况	75
4.10 Rayleigh 问题示意图	76
4.11 参考克努森数 $Kn = 2.66$ 下 $t = 0.1\tau_0$ 时的 Rayleigh 问题数值解	77
4.12 参考克努森数 $Kn = 0.266$ 下 $t = \tau_0$ 时的 Rayleigh 问题数值解	77
4.13 参考克努森数 $Kn = 0.0266$ 下 $t = 10\tau_0$ 时的 Rayleigh 问题数值解	77
4.14 参考克努森数 $Kn = 0.00266$ 下 $t = 100\tau_0$ 时的 Rayleigh 问题数值解	78
4.15 Rayleigh 问题在输出时刻的速度空间自适应情况	78
4.16 喷管问题示意图	79
4.17 $t = 5\tau_0$ 时喷管流动的密度和温度等值面图	80
4.18 $t = 20\tau_0$ 时喷管流动的密度和温度等值面图	80
4.19 $t = 5\tau_0$ 时喷管流动的沿水平中心线的密度, 速度和温度分布	80
4.20 $t = 20\tau_0$ 时喷管流动的沿水平中心线的密度, 速度和温度分布	81
4.21 $t = \tau_0$ 时的速度空间自适应情况	81
4.22 $t = 5\tau_0$ 时的速度空间自适应情况	82
4.23 $t = 20\tau_0$ 时的速度空间自适应情况	83
4.24 $Kn = 0.001$ 时圆柱绕流的速度和温度等值面图 (上方等值面: AUGKS, 上方等值线: UGKS, 下方等值面: GKS)	85
4.25 $Kn = 0.01$ 时圆柱绕流的速度和温度等值面图 (上方等值面: AUGKS, 上方等值线: UGKS, 下方等值面: GKS)	85
4.26 $Kn = 0.001$ 时沿圆柱前方水平中心线的密度, 速度和温度分布	85
4.27 $Kn = 0.001$ 时沿圆柱后方水平中心线的密度, 速度和温度分布	86
4.28 $Kn = 0.001$ 时沿圆柱前方水平中心线的密度, 速度和温度分布	86
4.29 $Kn = 0.001$ 时沿圆柱后方水平中心线的密度, 速度和温度分布	86
4.30 $Kn = 0.001$ 时圆柱绕流的速度空间自适应情况	87
4.31 $Kn = 0.01$ 时圆柱绕流的速度空间自适应情况	87
5.1 UGKS 在每一个更新步里的算法步骤	105
5.2 $Ma = 1.5, m_B/m_A = 0.5, n_A/(n_A + n_B) = 0.1$ 时的正激波结构	107

5.3	$Ma = 1.5, m_B/m_A = 0.5, n_A/(n_A + n_B) = 0.5$ 时的正激波结构	107
5.4	$Ma = 1.5, m_B/m_A = 0.5, n_A/(n_A + n_B) = 0.9$ 时的正激波结构	107
5.5	$Ma = 1.5, m_B/m_A = 0.25, n_A/(n_A + n_B) = 0.1$ 时的正激波结构	108
5.6	$Ma = 1.5, m_B/m_A = 0.25, n_A/(n_A + n_B) = 0.5$ 时的正激波结构	108
5.7	$Ma = 1.5, m_B/m_A = 0.25, n_A/(n_A + n_B) = 0.9$ 时的正激波结构	108
5.8	$Ma = 3.0, m_B/m_A = 0.5, n_A/(n_A + n_B) = 0.1$ 时的正激波结构	109
5.9	$Ma = 3.0, m_B/m_A = 0.5, n_A/(n_A + n_B) = 0.5$ 时的正激波结构	109
5.10	$Ma = 3.0, m_B/m_A = 0.5, n_A/(n_A + n_B) = 0.9$ 时的正激波结构	109
5.11	$m_B/m_A = 0.5, n_A/(n_A + n_B) = 0.5, Kn = 0.0001$ 时激波管问题的解	110
5.12	$m_B/m_A = 0.5, n_A/(n_A + n_B) = 0.5, Kn = 0.01$ 时激波管问题的解	111
5.13	$m_B/m_A = 0.5, n_A/(n_A + n_B) = 0.5, Kn = 1.0$ 时激波管问题的解	111
5.14	$m_B/m_A = 0.25, n_A/(n_A + n_B) = 0.75, Kn = 0.0001$ 时激波管问题的解	111
5.15	$m_B/m_A = 0.25, n_A/(n_A + n_B) = 0.75, Kn = 0.01$ 时激波管问题的解	112
5.16	$m_B/m_A = 0.25, n_A/(n_A + n_B) = 0.75, Kn = 1.0$ 时激波管问题的解	112
5.17	弱 Landau 阻尼中电场能随时间的演化	113
5.18	弱 Landau 阻尼中 $x = 0$ 处电子分布函数随时间的演化	113
5.19	强 Landau 阻尼中电场能随时间的演化	114
5.20	强 Landau 阻尼中电子分布函数在相空间随时间的演化	115
5.21	强 Landau 阻尼中 $x = 0$ 处的电子分布函数随时间的演化	116
5.22	弱双流不稳定性中电场能随时间的演化	116
5.23	弱双流不稳定性中电子分布函数随时间的演化	117
5.24	强双流不稳定性中 $t = 70$ 时电子在相空间和区域中心的分布	117
5.25	Brio-Wu 激波管问题在不同参考 Larmor 半径下 $t = 0.1$ 时管内离子和电子的数密度、速度和 X 方向电场分量和 Y 方向磁场分量, 其中第一行 $r_L = 0.003$, 第二行 $r_L = 0.01$, 第三行 $r_L = 100.0$	119
5.26	Orszag-Tang 磁流体湍流问题初始时刻的流场和磁场分布	120
5.27	Orszag-Tang 磁流体湍流问题 $t = 0.5$ 时的离子数密度、压力、动能和磁压分布	120
5.28	Orszag-Tang 磁流体湍流问题 $t = 2.0$ 时的离子数密度、压力、动能和磁压分布	121
5.29	Orszag-Tang 磁流体湍流问题 $t = 3.0$ 时的离子数密度、压力、动能和磁压分布	122
5.30	无化学反应的 Brio-Wu 激波管问题在参考 Larmor 半径 $r_L = 0.001$, 中性气体占比 $n_n = 0.22$ 和 $t = 0.1$ 时管内的粒子数密度和速度分布	123

5.31 无化学反应的 Brio-Wu 激波管问题在参考 Larmor 半径 $r_L = 0.003$, 中性 气体占比 $n_n = 0.22$ 和 $t = 0.1$ 时管内的粒子数密度和速度分布	123
5.32 无化学反应的 Brio-Wu 激波管问题在参考 Larmor 半径 $r_L = 0.01$, 中性 气体占比 $n_n = 0.22$ 和 $t = 0.1$ 时管内的粒子数密度和速度分布	124
5.33 无化学反应的 Brio-Wu 激波管问题在参考 Larmor 半径 $r_L = 100$, 中性气 体占比 $n_n = 0.22$ 和 $t = 0.1$ 时管内的粒子数密度和速度分布	124
5.34 无化学反应的 Brio-Wu 激波管问题在参考 Larmor 半径 $r_L = 0.001$, 中性 气体占比 $n_n = 1$ 和 $t = 0.1$ 时管内的粒子数密度和速度分布	125
5.35 无化学反应的 Brio-Wu 激波管问题在参考 Larmor 半径 $r_L = 0.003$, 中性 气体占比 $n_n = 1$ 和 $t = 0.1$ 时管内的粒子数密度和速度分布	125
5.36 有化学反应的 Brio-Wu 激波管问题在参考 Larmor 半径 $r_L = 0.001$, 中性 气体占比 $n_n = 1$ 和 $t = 0.1$ 时管内的粒子数密度、速度、温度和电磁场 . . .	126
5.37 有化学反应的 Brio-Wu 激波管问题在参考 Larmor 半径 $r_L = 0.001$, 中性 气体占比 $n_n = 1$ 时管内的时间演化解 (实线: $t = 0.01$, 虚线: $t = 0.05$, 点画线 $t = 0.1$)	127
5.38 三组分惰性 Orszag-Tang 磁流体湍流问题 $t = 0.5$ 时的离子数密度、压力、 动能和磁压分布	128
5.39 三组分惰性 Orszag-Tang 磁流体湍流问题 $t = 2.0$ 时的离子数密度、压力、 动能和磁压分布	129
5.40 三组分惰性 Orszag-Tang 磁流体湍流问题 $t = 3.0$ 时的离子数密度、压力、 动能和磁压分布	130
5.41 电离反应占优的 Orszag-Tang 磁流体湍流问题 $t = 0.5$ 时的离子数密度、 压力、动能和磁压分布	131
5.42 电离反应占优的 Orszag-Tang 磁流体湍流问题 $t = 2.0$ 时的离子数密度、 压力、动能和磁压分布	132
5.43 电离反应占优的 Orszag-Tang 磁流体湍流问题 $t = 3.0$ 时的离子数密度、 压力、动能和磁压分布	133
5.44 复合反应占优的 Orszag-Tang 磁流体湍流问题 $t = 0.5$ 时的离子数密度、 压力、动能和磁压分布	134
5.45 复合反应占优的 Orszag-Tang 磁流体湍流问题 $t = 2.0$ 时的离子数密度、 压力、动能和磁压分布	135
5.46 复合反应占优的 Orszag-Tang 磁流体湍流问题 $t = 3.0$ 时的离子数密度、 压力、动能和磁压分布	136

第一章 引言

1.1 研究背景

计算流体力学 (Computational Fluid Dynamics, CFD) 是一种通过数值方法求解流动问题，从而定量地刻画流体输运和演化规律的科学^[2]。随着计算机科学和技术的迅速发展，CFD 方法取得了长足的进步，成为与理论分析和实验研究相辅相成的重要研究手段。然而，现有的数值方法在一些实际问题的应用中仍然存在困难，跨流域 (Flow Regime) 的多尺度流动问题就是一个比较典型的例子。随着科学的研究和工业生产中对于精确、高效地刻画复杂流场时空演化过程的迫切需求，发展新型多尺度数值模拟方法是 CFD 领域面临的重要挑战之一。

针对当前广泛使用的第五代喷气式民航客机，已经发展出较为完善的计算流体力学数值模拟框架，能够在亚声速飞行工况下较好地预测飞机周围的流场结构与表面的气动力和气动热。然而，随着人类发展高速飞行器和探索宇宙的努力不断深入，对有关 CFD 的基础科学与技术应用的研究也提出了更高层次的要求。空天飞行器再入就是一个典型的问题。早期的飞行器由火箭运载进入太空，如 Apollo 飞船^[3]，其结构多为简单的旋成体，飞行阻力较大，再入过程短，对热防护系统的要求相对较低。而随着近年来“空天一体化”概念的提出，水平起降的空天飞机不断吸引着人们的目光，例如美国空军、宇航局 (National Aeronautics and Space Administration, NASA) 和波音主导的空天飞机项目，研制了包括 X-30/33/34/37/38/40/43 等一系列型号，并正在进行代号“猎鹰”和“超-X”的发展计划。此外，俄罗斯研制的多用途航空航天系统 (MAKS)，英国的霍托尔 (Horizontal Take-Off and Landing, HOTOL) 项目，德国的 Saenger 空天飞机均取得了一定的成功，法国、日本、印度和中国也均有相应的空天飞机项目^[4]。能够针对起飞、变轨、高超声速巡航、再入等关键步骤，进行精确、高效的数值模拟，准确预测飞行器表面的气动力/热，对于空天飞机的材料选择、外形设计、入轨技术的发展和热防护系统的构建至关重要。

一般而言，近地表大气密度约为 $1\text{kg}/\text{m}^3$ ，而在海拔 100km 的高空大气则仅有 $10^{-6}\text{kg}/\text{m}^3$ 。对应于不同的稀薄程度，气体动力学也会相应地表现出显著不同的行为。由于地面实验条件和真实飞行条件的差异，在风洞实验中难以全面、真实地还原飞行器的飞行工况，实验测量值和真实情况可能存在很大差异^[5]。对于近空间飞行器，在距离地表 20-100km 的空域的高超声速巡航过程中，由于飞行器的复杂几何特征，远场处于近热力学平衡态的流动可能在飞行器周围演化为高度非平衡流动，例如机翼和进气道的前缘处。对于局部的流场结构，例如弓形激波，飞机表面的边界层流动，尾迹

湍流等^[6]，可能需要使用不同的数值方法才能精确地捕获相应特征流动解。而在再入问题中，随着飞行器周围的气体密度不断增大，相应的气体物理特征可能从高层大气的稀薄气体动力学 (Rarefied Gas Dynamics, RGD) 连续变化至近地区的连续介质力学。图1.1展示了几种再入航天器的飞行轨迹示意图。如何在再入过程中，尤其是中间的过渡区内连续、精确地计算飞行器的气动力/热，力矩，压力中心等飞行参数，将会对飞行器轨迹预测的精度产生决定性的影响，其重要性已经在天宫一号陨落的数值模拟^[7]中有所体现。

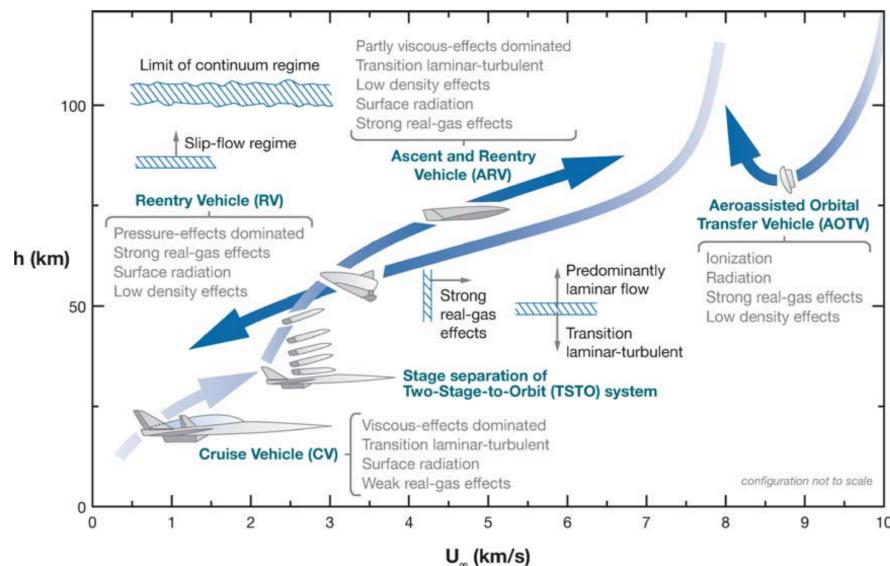


图 1.1 多种航天器的飞行轨迹示意图^[1]

此外，在气象和天体物理的研究中，由于行星大气的分层效应，其本身的环流即是一个重要的多尺度流动问题。例如，地球大气层沿垂直方向可以分为对流层、平流层、中间层、电离层和逃逸层。随着与地表的距离不断增大，大气密度不断减小，而温度则不是单调降低的，例如在平流层和电离层内温度随高度上升而升高。空气在对流层内具有强烈的对流运动，在平流层内以水平方向运动为主，而在中间层再次出现垂直方向的运动，并在电离层内与电离和复合的化学反应耦合。对大气环流进行可靠的数值模拟，对于气象学和地球物理的理解与研究十分重要。

此外，近年来快速发展的微机电系统 (Micro-Electro-Mechanical-Systems, MEMS) 在微纳尺度对多尺度数值模拟方法提出了新的需求。例如化学气相沉积 (Chemical Vapor Decomposition, CVD) 是一种生产高纯度薄膜的技术，其物化反应过程包含从微米到米量级连续变化的特征尺度^[8,9]。在微流体过滤器中，过滤槽中的气体往往处于高度稀薄的状态，而槽道外的气体是密集的连续介质流体^[10]。在微尺度喷管流动中，进口侧的流动是稠密的，出口侧的流动则很稀薄^[11]。在 Crookes 辐射计中，用于研究辐射的密封玻璃泡内的气体处于接近真空的状态^[12]。这些多尺度、多物理问题的提出对于精确、

高效地模拟多尺度流动运动特征提出了更高层次的要求。因此，在国家自然科学基金“十三五”发展规划中，高速流动及控制的机理和方法被确定为优先发展领域，其研究内容包括：与高速空天飞行器和海洋航行器流动以及多相复杂流动相关的湍流机理及其控制手段；稀薄气体流动和高速流动的理论、模拟方法及实验技术。本文的研究内容紧靠这一发展规划，以高速、稀薄流动为研究中心，发展适用于非平衡流动的理论分析工具和具有多尺度特性的数值模拟方法，探索多尺度、多物理流动的内在机理。

1.2 流体运动的描述方法

对流动运动的建模和定量描述，是一个粗粒度 (coarse grained) 近似的过程^[13]，即使用有限的自由度来模拟可以认为自由度无限的真实流动的演化过程。经典的流体力学方程，如 Navier-Stokes(NS) 方程，是在连续介质假设下建立的守恒律。在稀薄气体动力学中，其并不等价于真实的物理流动，因为此时流体系统中的自由度远大于 NS 方程中使用的建模变量数。在不同的尺度上，应使用不同的分辨率来描述流动的演化过程。

流动的尺度 (或稀薄程度) 可以用克努森数 (Knudsen Number, Kn) 进行表征，其定义为

$$Kn = \frac{\ell}{L}, \quad (1.1)$$

其中 ℓ 是气体分子的平均自由程， L 是所考虑流动问题的特征尺度。钱学森在 1946 年发表的论文是国际上公认的对这一问题的开创性工作^[14]。根据克努森数的不同，流场可以分成连续流 ($Kn < 0.001$)、滑移流 ($0.001 < Kn < 0.1$)、过渡流 ($0.1 < Kn < 10$) 和自由分子流 ($Kn > 10$) 几个不同的流域。一般认为，当 $Kn < 0.001$ 时，可以采用宏观流体力学方程求解流动问题；而当 $Kn > 0.1$ ，则采用 Boltzmann 方程对流动进行描述。

考虑 Kn 的两个极限情形，有两种方法可以在不同的分辨率下描述流动演化的规律，即基于宏观的连续介质描述，和基于微观的动理学描述。

1.2.1 连续介质描述

第一种方法基于宏观的流动物理量，如质量、动量和能量密度 $\mathbf{W} = (\rho, \rho\mathbf{U}, \rho\mathcal{E})^T$ ，从基本的物理对称性出发，推导出控制流动演化的方程。采用这种方法，Euler 和 Navier-Stokes 方程实质上是基于第一性原理的物理描述。为了使控制方程的含义是明确的，需要明确其对应的建模尺度和在该尺度上流动物理量的定义。

连续介质假设研究的流体所占有的空间是被流体微团连续无空隙地充满的。流体微团或质点，是一个理想化的模型，指微观上充分大，宏观上无限小的原子或分子团。微观上充分大，因而个别分子行为导致的涨落对大量分子统计平均后的宏观物理量影

响微乎其微；宏观上无限小，因而其与所研究问题的特征尺度相比微不足道，可以作为几何上没有维度的单点看待^[15]。

流体微团是宏观连续介质描述方法的最小单元，流体动力学的建模尺度应大于流体微团的尺度。基于第一性原理的物理建模，微团的质量、动量和能量守恒律给出，

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) &= 0, \\ \frac{\partial(\rho \mathbf{U})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) &= \rho \mathbf{F} + \nabla \cdot \mathbf{P}, \\ \frac{\partial(\rho \mathcal{E})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathcal{E} \mathbf{U}) &= \rho \mathbf{F} \cdot \mathbf{U} + \nabla \cdot (\mathbf{P} \cdot \mathbf{U}) - \nabla \cdot \mathbf{q}.\end{aligned}\quad (1.2)$$

这里的 $\mathbf{F}, \mathbf{P}, \mathbf{q}$ 分别是体积力，应力张量和热流。

方程 (1.2) 的封闭基于两个基本假设，即：

1. 方程 (1.2) 中出现的应力张量和热流能够以某种形式和宏观的流动物理量的时空非对称性联系起来，即所谓的本构关系。在 Euler 方程中，应力张量是各向同性的，热流为零，

$$\begin{aligned}\mathbf{P} &= -p \mathbf{I} \\ \mathbf{q} &= 0,\end{aligned}\quad (1.3)$$

其中 \mathbf{I} 是二阶单位张量。而经典的 Navier-Stokes 方程本构关系建立在广义的 Newton 公式和 Fourier 定律上，

$$\begin{aligned}\mathbf{P} &= -p \mathbf{I} + 2\mu \left(\mathbf{S} - \frac{1}{3} \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{U} \right) + \mu' \mathbf{I} \nabla \cdot \mathbf{U}, \\ \mathbf{q} &= -\kappa \nabla T,\end{aligned}\quad (1.4)$$

其中 \mathbf{S} 是二阶对称张量 $\mathbf{S} = (\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^T)/2$ ， μ 是流体的动力学粘性系数， μ' 是第二粘性系数， κ 是热传导系数。上述两个关系将应力张量和热流矢量和流体速度和温度的空间不均匀性联系起来。

本质上，本构关系的得出基于唯象论和演绎法，是试验现象的概括和提炼。Newton 在 1687 年第一次做了以水为工作介质的剪切流动实验，建立了切向应力和剪切变形速度之间的关系。Stokes 在这一实验定律的基础上，作了应力张量是应变率张量的线性函数、流体各向同性、流体静止时应变率为零的三项假设，从而导出了广泛应用于流体力学研究的线性本构方程，以及现被广泛应用的 Navier-Stokes 方程。同样地，Fourier 在 1822 年的工作^[16] 也是对先导性的实验结果的总结。从理论上而言，我们不知道上面的两种关系能够适用的精确尺度。近年来的研究成果表面，除了温度梯度之外，在特定的流域内，热流还可以取决于应力张量^[17] 和体积力^[18] 等其他因素，其关系甚至可以作为统一的矢量流和热力学力，在近平衡区被 Onsager 提出的对易关系^[19] 所描述。而我们唯一能作的结论是，只有在上述关系适用的范围内，Navier-Stokes 方程才

是对流体物理的一种合理描述。

2. 存在局部热力学平衡，使得我们可以使用经典的热力学定律描述流动的准静态过程。从方程(1.2)中的能量方程中可以看出，流体的机械能和内能存在相互耦合和转化的非线性过程，这就要求我们将流体的运动学量和动力学量联系起来。如果流体处于平衡态，那么其体积 V （几何变量），压力 p （力学变量）和温度 T （热力学变量）可以通过状态方程联系起来，

$$F(p, V, T) = 0 \quad (1.5)$$

对于完全气体有，

$$pV = NkT, \quad (1.6)$$

其中 N 是分子总数， k 是 Boltzmann 常数。严格地说，完全气体的状态方程仅在密度不太大、分子间作用力较小及分子所占据的体积和考虑问题的特征尺度相比可以忽略时才成立。对于高密度的气体，必须采用更严格的描述考虑分子间相互作用力及分子占据体积的影响，例如 Van der Waals 公式，

$$\left(p + \frac{\alpha}{V^2}\right)(V - \beta) = RT, \quad (1.7)$$

其中 α/V^2 是分子间的吸引力， β 是分子的体积。但由于其形式复杂，在实际问题中一般仍采用完全气体的状态方程。

在建立了流体运动学量和热力学量间的关系后，方程(1.2)的含义就确定了。如 Landau 所解释的^[20]，运动流体的状态被五个量——速度矢量的三个分量和任意的两个热力学量所确定。换言之，流体动力学完备方程组中独立的方程数必须是五个。

1.2.2 动理学描述

宏观尺度的物理现象是微观物理的投射。统计力学是将微观物理状态和宏观物质的可观察性质联系起来的科学，亦即根据相互作用力和分子结构，借由配分函数将由大量分子组成系统的微观物理状态（速度、动能、势能等）与宏观物理量统计规律（压力、体积、温度、热力学函数、状态方程等）连结起来。相应的，热力学则基于统计力学的物理图像和定量解释，直接在宏观尺度上研究物质的平衡态及不同平衡态之间的物质和能量转换。对于平衡态系统，热力学和统计物理已发展得非常完备，原则上能对一般的问题给出相应的解决办法；而非平衡状态的研究要困难得多，使用动理学理论 (Kinetic Theory) 来处理不同系统中的非平衡现象可能是必须的。由于针对固态和液态没有形成完备的动理学描述方法，对于气体的非平衡物理研究走在了前列，可以得到一些目前对一般系统（固体和液体）无法普适的结果。

动理学理论是建立在物质的原子论的基础上的。这一理论最早可以追溯至古希腊

的 Democritus，他认为每一种事物都是由原子所组成的，整个世界的本质只是原子和虚空。而在当时更为普遍和直观的认知下，物质则是一个连续介质的延展。现代的分子动理论一般认为是从 D. Bernoulli 在 1738 年提出的基本原理开始发展起来的。在这一理论中，他认为气体是由大量弹性分子组成的，这些弹性分子的运动、冲击、碰撞和反弹满足基本的力学定律，而其撞击固壁时的力学效应则引起气压。Bernoulli 的理论定性地解释气体的基本性质（压缩性，压缩时的升温和膨胀时的降温，向均匀各向同性状态的演化趋势），定量的气体动力学理论的则在十九世纪后期建立，其中 R. Clausius 在 1858 年引入了分子平均自由程 (Mean Free Path) 的概念，即在两次连续碰撞之间的粒子运动的平均距离。平均自由程的提出，建立了定量描述分子运动的基本尺度 (即动理学尺度)，奠定了 Boltzmann 方程提出的基础。

在一个标准大气压和 $273K$ 的单位立方厘米的气体中，存在大约 1.4×10^{20} 个气体分子，此时分子平均自由程约为 70 纳米。对于如此多的粒子，通过指定所有的微观状态，即每个粒子的位置和速度来尝试描述气体的状态，当然是不可能完成的任务，而必须求助于统计数据（分布函数）。这是一个合理的诉求，因为在实际的生产和实践中，可以观察和检测到的通常是描述气体宏观状态的物理量，即密度、速度、温度、应力、热流等，而这些量可以通过微观状态在某种意义上的平均得到。基于 Clausius 的平均自由程的概念，J. C. Maxwell 在 1858 年提出了一个输运过程的初步理论，并给出了以他的名字命名的速度分布函数 (Maxwellian Distribution) 的启发式推导。在 1866 年，基于他提出的传递方程 (Transfer Equation)，Maxwell 给出了基于一种分子间作用力与距离的五次方成反比的分子模型 (Maxwell 分子) 的平衡分布函数的严格推导。传递方程的形式接近于今天所为人熟知的描述分布函数的演化方程，而这一工作最终由 L. Boltzmann 完成^[21]。他所得到的方程通常被称为 Boltzmann 方程，或 Maxwell-Boltzmann 方程（以确认 Maxwell 在其发现中所起的重要作用）。在这篇论文中，他同时说明了气体演化过程中的不可逆性可以通过分子碰撞引发的熵增来解释，这一结果被称为 H 定理。Boltzmann 的理论在当时受到了数学界和物理学界的普遍攻击，然而在他于 1906 年自杀之后，布朗运动等现象的发现确认了原子的存在，而 Boltzmann 方程也成为公认的研究分子平均自由程尺度上气体性质的有效工具。

1912 年，D. Hilbert 指出了如何通过一系列的渐近展开来获得 Boltzmann 方程的近似解^[22]。1917 年，S. Chapman 和 D. Enskog 独立地获得了 Boltzmann 方程的近似解，其中 Enskog 提出了一种推广 Hilbert 思想的系统技术，而 Chapman 只是扩展了 Maxwell 先前指出的方法来获得输运系数。但对于足够稠密的气体而言，他们推导得到的结果是等价的，通过平衡态分布函数本身及其一阶导数的展开项能够从 Boltzmann 方程严格地推导出 Euler 方程和 Navier-Stokes 方程。在撰写非均匀气体数学理论^[23] 时，Chapman 和 T. G. Cowling 采用了 Enskog 的方法，后来被称为 Chapman-Enskog 展开方

法。这种方法提供了推导宏观流体动力学方程的另一个思路，即确定某种特定的分布函数形式，通过对对应的 Boltzmann 方程的矩方程确定宏观流体系统以及与其对应的本构关系，也深刻地揭示了 Navier-Stokes 方程仅适用于近平衡区的流动问题。一个符合直觉的想法是，补全一阶 Chapman-Enskog 展开截断的高阶项，使其能描述更加偏离平衡态的稀薄流动，得到的二阶方程称为 Burnett 方程^[24]，三阶方程称为 Super-Burnett 方程^[25]。简单来说，这些方程对应的应力和热流的本构关系里引入了越来越高次的温度和速度梯度^[26]。除了方程的形式变得极其复杂外，是否通过将分布函数在渐近意义下截断至更高的阶数就是对高度稀薄和非平衡流动问题更全面的描述这一观点是存疑的，Chapman-Enskog 级数本身的收敛性也未经证明。如 A. V. Bobylev 在^[27] 中说明的，Burnett 和 Super-Burnett 方程是线性不稳定的。在特定的问题里，可以通过人工地改进 Burnett 的展开方法克服其本身的不稳定性^[28]，但这些方法需要根据具体问题做半经验性的人工处理，找到和 Boltzmann 方程自治的且普适的 Burnett 关系和展开阶数似乎是很难完成的任务，近年来学界对于 Burnett 流动的研究热潮也已逐渐消退。

1949 年，H. Grad 拓展了 Hilbert 展开方法，发展了将解扩展为一系列正交 Hermite 多项式来求解 Boltzmann 方程的矩方法。Grad 的方法以一种极为优雅的方法得到 Boltzmann 方程的解，具有完备的数学理论和简洁的数学结构。与 Chapman、Enskog 和 Burnett 不同的是，这里将分布函数高阶矩，即应力和热流，看待成独立的未知量并显式给出其演化方程，形成了一个关于 13 个矩的方程组。为了封闭该系统，他建议将分布函数展开成 Hermite 多项式的形式，并截断至展开的前四项。似乎很难从物理直觉上理解高阶矩和其对应的演化方程的意义，但这套理论至少在数学结构上是自洽的。Grad 的 13 矩方程可以获得比 Chapman-Enskog 方法更为普适的非平衡流体物理解，但其并不足够覆盖所有 Boltzmann 方程的适用情况，尤其是在高度稀薄的高空大气飞行研究中的应用。一个众所周知的例子是，Hermite 多项式在正激波来流马赫数大于 1.85 时发散，对应的 Grad 的矩方程在计算时也有稳定性问题^[29]。针对 Grad 方法的优越性和其存在的问题，C. D. Levermore^[30] 发展了基于最大熵原理的优化问题，在矩封闭问题里确定唯一的分布函数形式，发展了最大到关于 35 个矩的方程组。这种思想之后被 M. Frank 等人广泛应用在辐射输运等问题里^[31]。Sone 基于扩展的 Hilbert 展开，对 Boltzmann 方程做了系统的渐近分析，并包含了近壁 Knudsen 层里的额外修正，推导出了一系列流体动力学形式的方程^[32]。Eu 在^[33] 中提出了矩方法的一种变体，并由 Myong 在数值模拟^[34] 中使用。针对 Grad 方法的缺陷，其本人也在专著^[35] 的脚注里讨论过将 Hermite 多项式和 Chapman-Enskog 方法混合的修正方法。这个方法被 H. Struchtrup 和 M. Torrilhon 继承，从基于伪平衡的 Chapman-Enskog 展开构造分布函数，发展了正则化方法，将完全双曲型的 Grad 矩方程转换为混合双曲抛物型方程组，即 R13 方程组。根据他们的数值模拟结果^[36]，R13 方程组具有不错的稳定性，在偏离平

衡态不远时能给出和 Boltzmann 方程一致的解。

一般来说，基于 Boltzmann 方程和类似的动理学输运方程渐近展开解的方法，均是在适当的函数空间观察分布函数的投影从而间接获得 Boltzmann 方程解的方法。这种方法能够成功建立的前提是存在一组完备的基函数，其本质则是物理系统的时空连续性和对称性。从物理上讲，Boltzmann 方程描述的是一族粒子自由运动的规律，而流体的集体效应是由个体运动的叠加自然得到。对应的，基于渐近解的方法则直接从集体效应着手，通过归纳得到的粒子分布函数形式，衡量其对于集体行为的作用。因此，经典的矩方法鲜有应用于高度稀薄和非平衡的自由分子流的科学的研究和工业实例。随着稀薄程度的不断增加，粒子间的耦合作用变得松散，集体效应随之削弱。在无碰撞极限下，所有粒子遵循自己的轨道进行运动（不考虑量子效应），此时流体不存在集体行为，自然也就不能通过矩方法进行描述。从数学上讲，此时流场中的粒子分布函数接近于 Delta 函数叠加的形式。由于 Delta 函数不是平方可积的函数，经典 Hermite 展开方法无法有效逼近并得到收敛解。

动理学的思想已经广泛应用于众多的物理领域，如辐射传递、等离子、中子输运理论和量子效应的研究^[37]。尽管其在理论上仍存在不足和可继续发展的内容，但计算科学的迅速发展和计算资源的普及，使得我们可以摆脱传统理论分析的限制，使用直接建模和数值模拟的方法对一些典型的物理问题进行研究，并反馈于理论建模与分析。

1.3 数值模拟方法

经典的 CFD 方法建立在直接离散流体动力学方程的基础上，核心目标是获得偏微分方程的数值解。不同控制方程的建模尺度和基本假设不同，因而有不同的适用范围。例如，Boltzmann 方程建立在分子（粒子）混沌假设的基础上，其适用的时空尺度是分子平均自由程和平均碰撞时间；Navier-Stokes (NS) 方程则建立在连续介质假设的基础上，考虑的最小单元是流体微团。所有的偏微分方程都只能刻画其模型尺度上的流体物理，换言之，是单一尺度的分析方法。选用不同的控制方程对流动进行描述，可以理解为使用不同的分辨率对不同尺度的流动细节进行描述的过程。

现代的可压缩计算流体力学以 Godunov 的工作^[38] 为开端，在 Euler 方程组的 Riemann 问题的解的基础上，发展出了一系列基于迎风思想的计算格式。根据 Euler 方程的建模尺度，流场中相邻网格单元的相互作用是通过离散的有限振幅波完成的。这些波的种类、传播速度和振幅通过精确或近似地求解 Riemann 问题得到，其中间断处于网格的界面处。波的传播方向是通过通量分裂的方法完成的，例如 Roe^[39, 40]、Osher^[41] 提出的近似 Riemann 问题求解器，Leveque^[42] 提出的波传播 (Wave Propagation) 方法，Steger-Warming 算法^[43]，HLL^[44] 和 HLLC^[45] 解算器等。

而在动理学尺度，Chu^[46] 基于 BGK 方程提出的离散速度方法是最早用于激波管

问题研究的算法之一。由于 Boltzmann 方程的右端分子碰撞项是一个复杂的五重积分，受计算资源所限，最初的动理学算法一般基于简化模型进行计算。一个典型的方法是由 P.L. Bhatnagar, E.P. Gross 和 M. Krook 提出的简化模型^[47]。这个模型用一个简单的分布函数松弛项代替了原始的碰撞积分，描述了在分子平均碰撞时间尺度上分布函数由初始态向 Maxwell 平衡分布趋近的过程，且并不丢失主要的物理性质，例如 H 定理。在 BGK 模型中，原始的碰撞项被极大地简化，同时 Chu 在一维问题中将另外两方向的分布函数理论积分后得到简化的分布函数形式，进一步降低了计算资源的消耗。一般来说，数值求解动理学模型方程使用的是离散速度法 (Discrete Velocity Method)，即在固定的粒子速度空间里建立欧拉网格，对离散形式的方程进行求解。之后，一系列的离散速度方法^[48–54] 出现，其中的大部分算法在动理学尺度的流动问题中能够给出令人满意的解。

随着计算机算力的大幅提高，近年来也出现了一系列直接求解 Boltzmann 碰撞积分的数值方法。早期的数值方法^[55] 多基于简单的点对点原理，即碰撞后的粒子速度也需落在速度网格上。显然，这种方法的收敛精度小于一阶。为了保证计算精度，网格点的数目需要足够多。对于简单的各向同性碰撞截面，这种方法消耗的计算资源约为 $O(N^6)$ ，其中 N 是每方向上速度网格的数目，而对于复杂的碰撞截面计算消耗则可能达到为 $O(N^8)$ 。使用 Monte Carlo 方法计算碰撞积分能够减少扫描速度网格带来的计算消耗，但会进一步地降低精度，并削弱确定论动理学解算器本身没有统计涨落的优势。针对这个问题，F. Tcheremissine^[56,57] 提出了一种投影 (Projection) 方法，引入了速度网格间的插值，并通过 Korobov 序列^[58] 计算碰撞积分，其精度相比于 Monte Carlo 方法为高。与此同时，Y. Sone 和 T. Ohwada 等发展了数值核 (Numerical Kernel) 方法^[59,60]，能够对硬球分子模型进行计算。另一种谱方法基于 Fourier 变换对碰撞积分进行求解。这种方法开始于 Bobylev 的工作^[61]，并发展出了常规谱方法^[62] 和快速谱方法^[63] 的形式。

此外，G. Bird 发展了一种直接从流动的物理模拟出发的直接模拟 Monte Carlo 方法 (Direct Simulation Monte Carlo, DSMC)^[64]，能够对动理学尺度的非平衡流动进行数值求解。DSMC 方法从平均自由程尺度对粒子的运动过程进行直接建模，在计算机中储存每个模拟粒子的位置、速度及内能，在分子平均自由程和碰撞时间的时空尺度中，将粒子的自由输运和碰撞过程的求解过程解耦，其中粒子碰撞对的选取通过概率统计中的 Monte Carlo 方法确定。本质上，DSMC 方法和 Boltzmann 方程是建立在同样的物理推导上，Wagner^[65] 证明了在简单情况下其极限收敛于 Boltzmann 方程。同时，由于 DSMC 的直接建模特性，其在实际的应用中比 Boltzmann 方程拥有更多的灵活性，例如分子间存在多体碰撞和化学反应的情况。因此，在实际使用中无需特别强调 DSMC 和 Boltzmann 方程的等价性^[66]。由于算子分裂的处理方法，DSMC 里时间步长应严格

小于碰撞时间，网格尺寸应小于平均自由程。这限制了 DSMC 在小克努森数流动中的应用，而直接求解 Boltzmann 方程的离散速度法采用了类似 DSMC 的解耦处理，其中通量由粒子的自由输运计算得到，而碰撞项作为源项处理，因此也会受到相同的时间步长和网格尺寸限制。

在传统的 CFD 研究中，考虑的往往是单尺度、无跨流域的问题，而此时只需根据所考虑的特征尺度选取相应的控制方程离散求解，例如在动理学尺度 (Kinetic Scale) 选取 Boltzmann 方程或 DSMC 方法，在宏观尺度 (Hydrodynamic Scale) 对 Navier-Stokes 方程进行求解。如果考虑的流动具有清晰的尺度划分，那么不同的控制方程均能够在其特定的尺度描述特定流场的演化，针对不同控制方程的数值格式也应能给出正确的解。然而，在真实的流体物理中，流动尺度往往是连续渐变、相互耦合的，并不存在一个个独立的流动区域。理想的描述流体运动的方程应该是一个能够给出流体动力学连续谱的方程，Navier-Stokes 方程和 Boltzmann 方程应只是其中的两个极限情形。然而，由于不同流域内流体的粒子性及其集体性行为扮演的不同角色，这样的控制方程很难解析地写出其具体形式。例如，由于物理建模的困难，在过渡区 (Transition Regime) 尚未有完善的宏观控制方程，甚至不清楚应该用什么物理量来进行建模和分析。因此，在传统 CFD 的思路下，如果想构造一个统一的算法对多尺度的流动进行模拟和分析，有相当大的难度。

基于数值离散求解偏微分方程的基本思路，传统的 CFD 使用离散的时空网格求解流动问题。在实际的计算中，网格尺寸和时间步长仅仅作为辅助计算的参数出现，而与流场中的物理过程无关。根据网格收敛性和无关性的要求，网格尺度通过加密趋近于零，计算得到的数值解应当以格式对应的精度逼近微分方程的精确解。然而，在实际的计算中总是使用有限大小的网格，而考虑到控制方程建立时隐含的建模尺度问题，收敛的数值解 (即使存在) 是否是对物理问题的准确描述，会相应地受到模型方程适用性的制约。在对空间进行离散后，单个网格的尺度 Δx 将会被引入系统，如果我们将这一尺度作为观察流动的基础，那么这一尺度和所考虑流动结构的特征尺度及模型方程的建模尺度的相对大小，和所计算出的流动物理应是相关的。如果在系统中某个特征问题的尺度是 L ，那么如果要精确地描述这个流动结构，需要满足 $\Delta x < L$ ，否则这一物理过程对流场的影响则表现为亚网格的模型。这个基本原理在湍流研究和大涡模拟 (Large Eddy Simulation) 中已有普遍共识^[67, 68]，但在目前的可压缩和高超声速流动建模和计算研究中似乎并没有被严肃考虑。对于一个理想的多尺度算法，在计算过程中不同尺度的网格应识别、追踪不同尺度的流动，并给出合理的流场物理量。例如考虑一个激波附近的流场，激波的厚度约为 5-10 个分子平均自由程^[69, 70]。如果网格尺度为一个平均自由程，那么一个优秀的算法应当能够分辨激波物理量在激波内部的变化；相应的，如果使用的网格尺度远远大于分子自由程，由于有限的空间分辨率，此时算法应

退化成一个激波捕捉格式，而激波则作为一个强间断出现在流场中，其上、下游的宏观物理量满足 Rankine-Hugoniot 关系。类似的，时间步长在算法中也会扮演类似的角色。基于以上这个原则，对于一个理想的多尺度算法，网格尺度和时间步长应当作为动力学参量在算法里显式地参与流动的演化过程，而不仅仅是传统 CFD 中与物理过程无关的计算参数。

基于这一准则，我们可以设计多尺度、多物理的计算方法。近年来快速发展的的统一气体动理学格式 (Unified Gas-Kinetic Scheme, UGKS)^[71, 72] 提出了一条行之有效的多尺度建模和计算方法。UGKS 方法是一种直接建模方法，即不以获得特定的流体动力学控制方程数值解作为目标，而是以数值模拟中的网格大小和时间步长作为基本的建模尺度，直接在该尺度上构造离散的控制方程。基于粒子输运和碰撞的耦合考虑，UGKS 在网格界面和网格内部分别进行尺度自适应的建模，并用以统一连续地描述不同克努森数流域下的流动物理特性。在计算过程中，当前时刻对应的局部流体物理取决于每一个更新步中使用的时间步长和局部粒子碰撞时间之比。在这里网格尺度和时间步长提供了观察流体物理的建模尺度和参考基准，直接作为动力学参量参与流体的演化过程，而不再仅仅是获得传统偏微分控制方程数值解的辅助参数。统一气体动理学格式提供了一个有力的基本框架，可以用来对多尺度输运问题进行建模和计算。

1.4 研究目标

从航空航天中的巡航、再入、分离、解体、变轨和对接问题，到微机电系统中的微尺度管流和振动问题，多尺度、非平衡流动无处不在。如上文所述，除稀薄气体流动外，统一气体动理学格式 (UGKS) 在多尺度输运问题中有着广泛的适用范围。为了对这些具有挑战性的问题进行准确建模和高效数值模拟，仍有关键性的问题亟待突破。在本文的研究中，在 UGKS 的框架下，对三种典型的多尺度输运问题开展了研究工作，尝试引入 CFD 研究的新思路和新概念，发展新的物理建模思路和数值模拟方法，更好的理解非平衡动力学的内在机理。

1. 细致平衡 (Well-Balanced) 的统一气体动理学格式。

外力场下的气体动力学具有内禀的多尺度特性，而能够从任意一个初态准确地演化并保持终态的静力学平衡解的细致平衡特性，是对算法可靠性的必需要求。近年来对于细致平衡数值格式的研究仍集中在浅水波 (Shallow Water) 方程和 Euler 方程所描述的单尺度问题上。本文第二章中，在 UGKS 方法的基础上，发展出具有多尺度特性的细致平衡算法，并在第三章中对外力场下的非平衡流体物理进行研究。

2. 高速流动的速度空间自适应方法

UGKS 是一种渐近保持 (Asymptotic-Preserving) 格式^[73]，时间步长不受动理学时空尺度的刚性限制。但对于离散速度方法而言，其消耗的计算资源始终和离散速度网

格的数目成正比，这在高超声速、高温度流动中是一个很大的挑战。在第四章中，我们对原始的 UGKS 方法进行改进，使粒子分布函数能够在速度空间进行连续/离散分布的动态分配，在不降低数值解精度的前提下降低对计算资源的消耗，提升计算效率。

3. 气体混合物和等离子体输运的统一气体动理论学格式

混合物中不同组分间的相互作用向气体动力学系统引入了额外的自由度，等离子体中电场力和洛伦兹力相互作用使得动力学系统的演化更加复杂。现有的数值方法均局限于单尺度的控制方程。在第五章中，我们将 UGKS 延拓至多组分的气体混合物系统，并与描述电磁场演化规律的 Maxwell 方程组耦合，对中性气体以及完全电离和部分电离的等离子体进行统一的数值建模和模拟，提供一个通用的演化模型，在不同流域自动给出中性气体的多组分 Euler 方程、Navier-Stokes 方程和等离子体的 Vlasov 方程、双流体方程、Hall 磁流体方程、理想磁流体方程等不同控制方程的数值解，为非平衡等离子体物理研究提供简洁高效的数值方法。

第二章 外力场下细致平衡的统一气体动理论学格式

2.1 简介

宇宙是一个自演化的引力系统。与引力相关的气体动力学在恒星和星系的形成，以及行星上的大气对流中起着至关重要的作用。对于一个持续演化的引力系统，几乎没有任何有效的控制方程能够对不同状态下的非平衡动力学进行统一的描述。目前发展较为完善的统计力学和热力学依然仅适用于描述非定常演化过程中初态和终态的近平衡态物理。对于一个孤立的引力系统，在质量、动量和能量守恒的基本要求下，系统会从任意初始条件下最终达到流体静力学平衡状态。从守恒律方程上看，这样的静力学定常解之所以能够得以保持，是由于外力源项和非均匀的通量函数之间达到的精确平衡。为了研究外力系统的演化规律，CFD 学界已经发展了很多具有细致平衡特性 (Well-Balanced Property) 的数值格式。这里所谓的细致平衡特性，即是能够从在任何初始条件下对于孤立的引力系统给出演化为流体静力学平衡态并保持这种状态的能力，这也是对于一个数值方法可用于外力场下的流体和天体物理实际应用的最低要求。在外力系统的长时间演化过程中，如果使用的数值方法缺乏这一特性，可能会产生伪解 (Spurious Solution) 和非物理解，甚至导致出现数值振荡。本章的目的是发展这样一种多尺度的数值格式，使其不仅具有细致平衡的性质，同时也能够捕捉流体演化中的非平衡物理。在流体力学学界，这样的系统研究在理论上和数值上均是较为缺乏的。

对于完全平衡的流动，如外力场下的浅水波 (Shallow Water) 和 Euler 系统，已有一些细致平衡算法的研究工作。Leveque 和 Bale^[74] 开发了一种基于准定常的波传播算法，该算法能够捕获小扰动下的准稳态解。Botta 等人^[75] 使用了局部的、时间相关的静力学解重构方法来实现流体静力学的细致平衡。Xing 和 Shu^[76] 提出了一种高阶 WENO 格式在相对粗糙的网格上解析偏离静力学状态的小扰动。总体来看，这些方法的基本思想是将基本的浅水波和 Euler 方程算法延拓至外力系统，并予以适当的修正。

在不同的建模尺度下，相应地可以构造不同的气体动力学方程。例如，Boltzmann 方程在动理论学尺度^[77] 是适定的，即粒子的平均自由程和在相邻碰撞间的平均运动时间。而在宏观流体动力学尺度，虽然并未有针对其建模尺度的定量化描述，但 Euler 和 Navier-Stokes 方程是常用的宏观描述手段。由于明确的尺度结构划分，动理论学方程和流体动力学方程组均可对应其适用的尺度。然而，真实物理与工业应用中的气体动力学可能并不存在这样的尺度分离。换言之，从 Boltzmann 方程到 Navier-Stokes 方程的解的过渡应该是一个连续变化的谱。而这样的多尺度性质在引力系统中可能尤为重要，这是因为外力效应可能造成流场中存在很大的气体密度和其对应的当地粒子平均自由

程的变化。在一个固定的建模尺度下，例如流动结构的特征尺度，或是在计算中数值格式使用的网格尺度，其对应的物理克努森数 Kn_p 或网格克努森数 Kn_c 可能存在量级上的显著变化。对于一个存在单向外力的系统而言，其中流体的性质可能从上层的气体动理论物理连续变化至底部高密度区的连续介质物理。因此，外力系统具有内禀的多尺度性质。对于这类系统的模拟，相应的数值算法也应是多尺度的，即涵盖从稀薄气体到连续流体动力学的连续谱特性。

近年来，由徐昆等提出的统一气体动理论格式 (Unified Gas-Kinetic Scheme, UGKS) [71,72] 展现了其在多尺度输运建模和计算问题上的潜力。这一算法的基本思路是不以获得特定的偏微分方程数值解作为目标，而是以数值模拟中的网格大小和时间步长作为基本的建模尺度，直接在该尺度上构造离散的控制方程，即所谓的直接建模方法。基于粒子输运和碰撞耦合的尺度，一个具有尺度自适应特性的通量函数在网格界面处被确定，并用来统一地描述不同克努森流域下的流体物理特性。在数值模拟中，该方法对应的流体物理取决于每一个演化更新步中时间步长和物理的局部粒子碰撞时间之比。网格尺度和时间步长提供了评估流体物理的建模尺度和参考基准，不再仅仅是获得传统偏微分控制方程数值解的辅助工具，而是直接作为动力学参量参与流体的演化过程。在本章中，我们基于这一思路，进一步提出和发展适用于外力系统的多尺度计算格式。

为了建立外力场下细致平衡的气体动理论格式 (Well-Balanced Unified Gas-Kinetic Scheme, WBUGKS)，最重要的步骤是将外力的作用直接引入网格界面和内部的流体物理中。在之前的研究中，已有针对浅水波方程^[78] 和流体动力学方程^[79] 构造细致平衡算法的尝试。本章在统一气体动理论格式的框架下，将这种构造方法拓展至多尺度流动输运问题。该方法可用于外力场下的非平衡流动现象的研究，而这也是从未被学界系统研究过的重要物理问题。

本章内容组织如下。首先给出外力场下的气体动理论基本概念。之后，我们将提出外力系统的细致平衡统一气体动理论格式的构造方法和数值实现。第四部分介绍了相关的数值实验用以验证该方法的表现。最后是结论部分。

2.2 气体动理论基础

气体动理论基于粒子分布函数 $f(\mathbf{x}, t, \mathbf{u}, \xi)$ 和其的时空演化为基础描述气体的输运过程。这里 \mathbf{u} 是微观粒子运动速度， ξ 表示粒子中可能存在的转动和振动等内自由度变量。在动理论尺度上，分布函数 f 在时空 (\mathbf{x}, t) 的演化可以通过粒子输运和碰撞的两个分裂算子进行描述，即所谓的 Boltzmann 方程，

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f + \boldsymbol{\phi} \cdot \nabla_{\mathbf{u}} f = Q(f, f), \quad (2.1)$$

这里 ϕ 是外力作用在粒子上的加速度, $Q(f)$ 是碰撞项,

$$Q(f, f) = \int_{\mathcal{R}^3} \int_{\mathcal{S}^2} [f(\mathbf{u}') f(\mathbf{u}'_1) - f(\mathbf{u}) f(\mathbf{u}_1)] \mathcal{B}(\cos \theta, g) d\Omega d\mathbf{u}_1, \quad (2.2)$$

其中 \mathbf{u}, \mathbf{u}_1 是两族分子的碰撞前速度, $\mathbf{u}', \mathbf{u}'_1$ 则是相应的碰撞后速度。碰撞核 $\mathcal{B}(\cos \theta, g)$ 描述不同方向上的碰撞的相对强度, 其中 θ 是偏移角, $g = |\mathbf{g}| = |\mathbf{u} - \mathbf{u}_1|$ 是两种粒子碰撞前相对速度的绝对值。 Ω 是沿碰撞后相对速度 $\mathbf{u}' - \mathbf{u}'_1$ 方向的单位矢量, 偏移角 θ 满足 $\cos \theta = \Omega \cdot \mathbf{g}/g$ 。通过粒子的动量和能量守恒可以得到以下的关系,

$$\begin{aligned} \mathbf{u}' &= \frac{\mathbf{u} + \mathbf{u}_1}{2} + \frac{|\mathbf{u} - \mathbf{u}_1|}{2} \Omega = \mathbf{u} + \frac{g\Omega - \mathbf{g}}{2}, \\ \mathbf{u}'_1 &= \frac{\mathbf{u} + \mathbf{u}_1}{2} - \frac{|\mathbf{u} - \mathbf{u}_1|}{2} \Omega = \mathbf{u}_1 - \frac{g\Omega - \mathbf{g}}{2}. \end{aligned} \quad (2.3)$$

基于最大熵原理, Maxwell^[80] 发现了气体在平衡状态下的分布函数, 即 Maxwell 分布,

$$\mathcal{M} = \rho \left(\frac{\lambda}{\pi} \right)^{\frac{N+3}{2}} e^{-\lambda[(\mathbf{u}-\mathbf{U})^2 + \xi^2]}, \quad (2.4)$$

这里 ρ 是气体密度, \mathbf{U} 是宏观速度, T 是温度。 $\lambda = m/(2kT)$, 其中 m 是分子质量, k 是 Boltzmann 常数。 N 是分子内自由度的数目, 并满足 $\xi^2 = \xi_1^2 + \dots + \xi_N^2$ 。

宏观的流体物理量和微观的粒子分布函数存在一一对应的关系,

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho \mathbf{U} \\ \rho E \end{pmatrix} = \int f \psi d\Xi \quad (2.5)$$

$$\mathbf{P} = \int (\mathbf{u} - \mathbf{U})(\mathbf{u} - \mathbf{U}) f d\Xi, \quad (2.6)$$

$$\mathbf{q} = \int \frac{1}{2} (\mathbf{u} - \mathbf{U})(\mathbf{u} - \mathbf{U})^2 f d\Xi, \quad (2.7)$$

其中 \mathbf{W} 是守恒量, \mathbf{P} 是压力张量, \mathbf{q} 是热流矢量, $\psi = (1, \mathbf{u}, \frac{1}{2}(\mathbf{u}^2 + \xi^2))^T$ 是碰撞不变量组成的矢量写法, $d\Xi = d\mathbf{u} d\xi$ 是微观变量的微分。可以看到, 每个微观态分布函数对应于唯一的宏观系统, 但一个宏观态可以对应无数个微观分布函数。

不同的气体动理论模型, 例如 Bhatnagar–Gross–Krook(BGK) 模型^[47], Ellipsoidal Statistical BGK(ES-BGK) 模型^[81], Shakhov 模型^[82], 和完整的 Boltzmann 碰撞积分算子均可以用来构造统一气体动理论格式。在这里, 我们先用模型方程介绍算法的基本原理。包含有外力项 ϕ_x 的广义一维 BGK 类松弛模型可以写成,

$$f_t + u f_x + \phi_x f_u = \frac{f^+ - f}{\tau}, \quad (2.8)$$

其中 f^+ 是平衡态分布函数, τ 是松弛时间。对于经典的 BGK 方程, f^+ 是精确的

Maxwellian 分布,

$$f^+ = \mathcal{M} = \rho \left(\frac{\lambda}{\pi} \right)^{\frac{K+1}{2}} e^{-\lambda[(u-U)^2 + \xi^2]},$$

其中 $\lambda = m/(2kT)$, K 是一维情况下的简并内自由度 ξ 的维度, 其满足 $K = N + 2$ 。对于 Shakhov 模型方程, f^+ 可以写为以下形式,

$$f^+ = \mathcal{M} \left[1 + (1 - Pr) cq \left(\frac{c^2}{RT} - 5 \right) / (5pRT) \right],$$

其中 $c = u - U$ 是分子特征速度或热运动速度, q 是热流, Pr 是普朗特数。这是一个分级松弛的模型, 即分布函数 f 先向 f^+ 松弛, 从而保证流体正确的普朗特数, 而平衡态 f^+ 又逐渐向 Maxwellian 分布 \mathcal{M} 趋近。以上所有的碰撞项均满足相容性条件, 即碰撞不变量约束,

$$\int (f^+ - f) \psi d\Sigma = 0,$$

这里 $\psi = (1, u, \frac{1}{2}(u^2 + \xi^2))^T$ 是一维的碰撞不变量, 而 $d\Sigma = du d\xi$.

如果我们假设松弛时间 τ 是一个局部常数, 那么方程 (2.8) 形式上的演化解可以基于其特征线构造出来^[83], 即

$$f(x, t, u, \xi) = \frac{1}{\tau} \int_{t^n}^t f^+(x', t', u', \xi) e^{-(t-t')/\tau} dt' \\ + e^{-(t-t^n)/\tau} f_0^n(x^n, t^n, u^n, \xi), \quad (2.9)$$

其中 $x' = x - u'(t - t') - \frac{1}{2}\phi_x(t - t')^2$ 和 $u' = u - \phi_x(t - t')$ 是粒子在物理空间和速度空间运动的轨迹。 f_0^n 是分布函数在上一个时间步 n 中的形式。这个积分解将在细致平衡统一气体动理论格式中扮演重要的角色。

2.3 细致平衡的统一气体动理论格式

2.3.1 界面分布函数的构造

在统一气体动理论格式里, 分布函数在界面的形式 $f(x_{i+1/2}, t, u_k, \xi)$ 由积分演化解 (2.9) 构造, 并用于计算相应的界面数值通量。使用简化的标记 $x_{i+1/2} = 0$ 和 $t^n = 0$, 随时间演化的界面分布函数是,

$$f(0, t, u_k, \xi) = \frac{1}{\tau} \int_0^t f^+(x', t', u'_k, \xi) e^{-(t-t')/\tau} dt' \\ + e^{-t/\tau} f_0(x^0, 0, u_k^0, \xi), \quad (2.10)$$

其中 (x^0, u^0) 是在时间 t 穿过网格界面的粒子在上一步相空间中的初始位置。来自于外力项对于粒子轨迹影响的累积效应被显式地考虑在算法框架中。

为了实现数值格式的二阶精度，在界面 $x_{i+1/2}$ 两边我们重构初始的分布函数 f_0 ,

$$f_0(x, 0, u_k, \xi) = \begin{cases} f_{i+1/2,k}^L + \sigma_{i,k}x, & x \leq 0, \\ f_{i+1/2,k}^R + \sigma_{i+1,k}x, & x > 0, \end{cases} \quad (2.11)$$

其中 $f_{i+1/2,k}^L$ and $f_{i+1/2,k}^R$ 是重构出的界面左、右两端的分布函数值。在实际的计算中，可以使用不同的重构方法，例如 van Leer 提出的限制器方法， f 在第 i 个物理网格和第 k 个速度网格上的斜率可以写作，

$$\sigma_{i,j} = (\text{sign}(s_1) + \text{sign}(s_2)) \frac{|s_1||s_2|}{|s_1| + |s_2|},$$

其中 $s_1 = (f_{i,k} - f_{i-1,k})/(x_i - x_{i-1})$, $s_2 = (f_{i+1,k} - f_{i,k})/(x_{i+1} - x_i)$ 。

而对于平衡分布函数 f^+ ，我们将其向界面两边展开成 Taylor 级数，

$$f^+ = f_0^+ [1 + (1 - H[x])a^L x + H[x]a^R x + At], \quad (2.12)$$

其中 f_0^+ 是界面上初始时刻 ($x = 0, t = 0$) 的平衡态分布函数， $H[x]$ 是 Heaviside 阶梯函数。这里 a^L, a^R 和 A 可以写成基于碰撞不变量的形式，

$$\begin{aligned} a^{L,R} &= a_1^{L,R} + a_2^{L,R}u + a_3^{L,R}\frac{1}{2}(u^2 + \xi^2) = a_\alpha^{L,R}\psi_\alpha, \\ A &= A_1 + A_2u + A_3\frac{1}{2}(u^2 + \xi^2) = A_\alpha\psi_\alpha. \end{aligned}$$

基于界面上的相容性条件，平衡态可以根据界面上的宏观量 \mathbf{W}_0 唯一地确定，即

$$\int (f^+ - f)|_{x=0,t=0} \psi d\Xi = 0,$$

其中 $d\Xi = du d\xi$ ，进一步有，

$$\int f_0^+ \psi_\alpha d\Xi = \mathbf{W}_0 = \sum_{u_k > 0} f_{i+1/2,k}^L \psi d\Xi + \sum_{u_k < 0} f_{i+1/2,k}^R \psi d\Xi.$$

在确定界面宏观量和平衡态分布函数后，其空间导数 a^L, a^R 可以通过宏观量在界面两端的斜率得到，

$$\left(\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x} \right)^L = \int a^L f_0^+ \psi d\Xi, \quad \left(\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x} \right)^R = \int a^R f_0^+ \psi d\Xi.$$

相似地，平衡态的时间导数对应于宏观量的时间变化率，

$$\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial t} = \int A f_0^+ \psi d\Xi,$$

并通过以下的相容性条件得到，

$$\frac{d}{dt} \int (f^+ - f) \psi d\Xi |_{x=0,t=0} = 0.$$

根据 Chapman-Enskog 展开中的迭代方案，我们可以基于低阶的宏观方程，使用宏观量

的空间分布代替其时间导数。例如，基于包含外力源项的 Euler 方程，我们可以得到，

$$-\int u \frac{\partial f^+}{\partial x} \psi d\Xi - \int \phi_x \frac{\partial f^+}{\partial u} \psi d\Xi = \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial t} = \int A f_0^+ \psi d\Xi,$$

其中空间导数可以根据平衡态 (2.12) 的 Taylor 展开构造，而其在速度空间的导数可以根据显式的平衡分布函数形式求出。结果如下，

$$-\int a^{L,R} u f_0^+ \psi d\Xi + 2 \int \phi_x \lambda_0 f_0^+ (u - U_0) \psi d\Xi = \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial t} = \int A f_0^+ \psi d\Xi,$$

其中 U_0 和 λ_0 是对应平衡态 f_0^+ 的宏观量。使用上面的关系，我们可以得到时间系数矩阵 $A = (A_1, A_2, A_3)^T$ 。

当所有的系数确定后，界面上随时间演化的分布函数具有以下的形式，

$$\begin{aligned} f(0, t, u_k, \xi) &= \left(1 - e^{-t/\tau}\right) f_0^+ + \left(\tau(-1 + e^{-t/\tau}) + te^{-t/\tau}\right) a^{L,R} u_k f_0^+ \\ &\quad - \left[\tau \left(\tau(-1 + e^{-t/\tau}) + te^{-t/\tau}\right) + \frac{1}{2} t^2 e^{-t/\tau}\right] a^{L,R} \phi_x f_0^+ + \tau \left(t/\tau - 1 + e^{-t/\tau}\right) A f_0^+ \\ &\quad + e^{-t/\tau} \left[\left(f_{i+1/2,k}^L + \left(-(u_k - \phi_x t)t - \frac{1}{2} \phi_x t^2\right) \sigma_{i,k}^0\right) H[u_k - \frac{1}{2} \phi_x t] \right. \\ &\quad \left. + \left(f_{i+1/2,k}^R + \left(-(u_k - \phi_x t)t - \frac{1}{2} \phi_x t^2\right) \sigma_{i+1,k}^0\right) (1 - H[u_k - \frac{1}{2} \phi_x t]) \right] \\ &= \widetilde{\mathcal{E}_{i+1/2,k}} + \widetilde{\mathcal{I}_{i+1/2,k}}, \end{aligned} \tag{2.13}$$

其中 $\widetilde{\mathcal{E}_{i+1/2,k}}$ 包括前四项的贡献，对应于平衡态分布函数的积分； $\widetilde{\mathcal{I}_{i+1/2,k}}$ 是最后一项，由上一时间步的初始分布函数决定。

2.3.2 多维情况

基于动理学 Boltzmann 及其模型方程，气体动理学格式的界面建模可以拓展至真正的多维度情形，而这是发展基于 Riemann 问题精和近似解的多维迎风格式困难的挑战^[84,85]。简单起见，这里我们考虑二维笛卡尔网格，其中界面法向和切向的贡献被统一处理。其向三维情况的延拓是很直观的。考虑外力场 $\vec{\phi} = \phi_x \vec{i} + \phi_y \vec{j}$ ，BGK 模型方程在笛卡尔坐标下可以写作，

$$f_t + u f_x + v f_y + \phi_x f_u + \phi_y f_v = \frac{f^+ - f}{\tau},$$

其中 $\tau = \mu/p$ 是粒子平均松弛时间， f^+ 是平衡分布函数。

在这里，BGK 方程的积分演化解写作，

$$\begin{aligned} f(x, y, t, u, v, \xi) &= \frac{1}{\tau} \int_{t^n}^t f^+(x', y', t', u', v', \xi) e^{-(t-t')/\tau} dt' \\ &\quad + e^{-(t-t')/\tau} f_0^n(x^n, y^n, t^n, u^n, v^n, \xi), \end{aligned} \tag{2.14}$$

其中在外力作用下的粒子轨迹和微观速度的变化是 $x' = x - u'(t - t') - \frac{1}{2} \phi_x (t - t')^2, y' = y - v'(t - t') - \frac{1}{2} \phi_y (t - t')^2, u' = u - \phi_x (t - t'), v' = v - \phi_y (t - t')$ 。

在细致平衡的统一气体动理学格式(WBUGKS)中, 在界面中心处 $(x_{i+1/2}, y_j)$, 其演化解 $f_{i+1/2,j,k,l}$ 来自于方程(2.14)的特征线解。使用简化标记 $x_{i+1/2} = 0, y_j = 0$ 和 $t^n = 0$, 时变界面分布函数可以写作,

$$\begin{aligned} f(0, 0, t, u_k, v_l, \xi) &= \frac{1}{\tau} \int_0^t f^+(x', y', t', u'_k, v'_l, \xi) e^{-(t-t')/\tau} dt' \\ &\quad + e^{-t/\tau} f_0(-(u_k - \phi_x t)t - \frac{1}{2}\phi_x t^2, -(v_l - \phi_y t)t - \frac{1}{2}\phi_y t^2, 0, u_k - \phi_x t, v_l - \phi_y t, \xi), \end{aligned}$$

其中粒子轨迹是 $x' = -u'_k(t-t') - \frac{1}{2}\phi_x(t-t')^2, y' = -v'_l(t-t') - \frac{1}{2}\phi_y(t-t')^2, u'_k = u_k - \phi_x(t-t'), v'_l = v_l - \phi_y(t-t')$ 。

同样地, 初始分布函数 f_0 被重构至二阶精度,

$$f_0(x, y, 0, u_k, v_l, \xi) = \begin{cases} f_{i+1/2,j,k,l}^L + \sigma_{i,j,k,l}x + \theta_{i,j,k,l}y, & x \leq 0, \\ f_{i+1/2,j,k,l}^R + \sigma_{i+1,j,k,l}x + \theta_{i+1,j,k,l}y, & x > 0, \end{cases} \quad (2.15)$$

其中 $f_{i+1/2,j,k,l}^L$ 和 $f_{i+1/2,j,k,l}^R$ 分别是重构出来的界面两端分布函数的值。 f 在物理网格 (i, j) 速度网格 (k, l) 中沿 x 和 y 的斜率分别表示为 $\sigma_{i,j,k,l}$ 和 $\theta_{i,j,k,l}$ 。

同时, 界面两端的平衡态分布函数被构造如下,

$$f^+ = f_0^+ [1 + (1 - H[x])a^L x + H[x]a^R x + b y + A t], \quad (2.16)$$

其中 f_0^+ 是 $(x = 0, t = 0)$ 处的平衡分布函数。 a^L, a^R , 和 A 基于平衡分布函数的 Taylor 展开式,

$$\begin{aligned} a^{L,R} &= a_1^{L,R} + a_2^{L,R}u + a_3^{L,R}v + a_4^{L,R}\frac{1}{2}(u^2 + v^2 + \xi^2) = a_\alpha^{L,R}\psi_\alpha, \\ b &= b_1 + b_2u + b_3v + b_4\frac{1}{2}(u^2 + v^2 + \xi^2) = b_\alpha\psi_\alpha, \\ A &= A_1 + A_2u + A_3v + A_4\frac{1}{2}(u^2 + v^2 + \xi^2) = A_\alpha\psi_\alpha. \end{aligned}$$

上面的时空系数可以用与一维情形相同的方法确定。之后, 时变的界面分布函数可以写作,

$$\begin{aligned} f(0, 0, t, u_k, v_l, \xi) &= \left(1 - e^{-t/\tau}\right)f_0^+ + \left(\tau(-1 + e^{-t/\tau}) + t e^{-t/\tau}\right)a^{L,R}u_k f_0^+ \\ &\quad - \left[\tau\left(\tau(-1 + e^{-t/\tau}) + t e^{-t/\tau}\right) + \frac{1}{2}t^2 e^{-t/\tau}\right]a^{L,R}\phi_x f_0^+ + \left(\tau(-1 + e^{-t/\tau}) + t e^{-t/\tau}\right)b v_l f_0^+ \\ &\quad - \left[\tau\left(\tau(-1 + e^{-t/\tau}) + t e^{-t/\tau}\right) + \frac{1}{2}t^2 e^{-t/\tau}\right]b\phi_y f_0^+ + \tau\left(t/\tau - 1 + e^{-t/\tau}\right)A f_0^+ \\ &\quad + e^{-t/\tau} \left[\left(f_{i+1/2,k^0,l^0}^L + \left(-u_k t + \frac{1}{2}\phi_x t^2\right)\sigma_{i,k^0,l^0} + \left(-v_l t + \frac{1}{2}\phi_y t^2\right)\theta_{i,k^0,l^0}\right)H[u_k - \frac{1}{2}\phi_x t] \right. \\ &\quad \left. + \left(f_{i+1/2,k^0,l^0}^R + \left(-u_k t + \frac{1}{2}\phi_x t^2\right)\sigma_{i+1,k^0,l^0} + \left(-v_l t + \frac{1}{2}\phi_y t^2\right)\theta_{i+1,k^0,l^0}\right)(1 - H[u_k - \frac{1}{2}\phi_x t]) \right] \\ &= \widetilde{\mathcal{E}_{i+1/2,j,k,l}} + \widetilde{\mathcal{I}_{i+1/2,j,k,l}}, \end{aligned} \quad (2.17)$$

其中 $\widetilde{\mathcal{E}_{i+1/2,j,k,l}}$ 取决于平衡态分布函数的积分， $\widetilde{\mathcal{I}_{i+1/2,j,k,l}}$ 是初始分布函数的贡献。上述做法向三维情况的扩展是直接的。

2.3.3 更新方法

考虑粒子分布函数在网格内的平均值，

$$f_{x_i,y_j,t^n,u_k,v_l} = f_{i,j,k,l}^n = \frac{1}{\Omega_{i,j}(\mathbf{x})\Omega_{k,l}(\mathbf{u})} \int_{\Omega_{i,j}} \int_{\Omega_{k,l}} f(x,y,t^n,u,v) dx dy du dv,$$

其在离散空间演化的直接建模可以给出，

$$\begin{aligned} f_{i,j,k,l}^{n+1} = & f_{i,j,k,l}^n + \frac{1}{\Omega_{i,j}} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \sum_{r=1} u_r \hat{f}_r(t) \Delta L_r dt \\ & + \frac{1}{\Omega_{i,j}} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega_{i,j}} Q(f) dx dy dt + \frac{1}{\Omega_{i,j}} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega_{i,j}} G(f) dx dy dt, \end{aligned} \quad (2.18)$$

其中 \hat{f}_r 是分布函数在界面上的形式，而 ΔL_r 是网格界面的长度。 $Q(f)$ 和 $G(f)$ 分别是来自分子碰撞项和外力项的源项，

$$\begin{aligned} Q(f) &= \frac{f_{i,j,k,l}^+ - f_{i,j,k,l}^{n+1/2}}{\tau}, \\ G(f) &= -\phi_x \frac{\partial}{\partial u} f_{i,j,k,l}^{n+1/2} - \phi_y \frac{\partial}{\partial v} f_{i,j,k,l}^{n+1/2}. \end{aligned}$$

在 WBUGKS 中，我们使用隐式方法更新分布函数的源项。一个简单的基于梯形公式的更新方法可以写成下面的形式，

$$\begin{aligned} f_{i,j,k,l}^{n+1} = & f_{i,j,k,l}^n + \frac{1}{\Omega_{i,j}} (F_{i-1/2,j,k,l} - F_{i+1/2,j,k,l}) + \frac{1}{\Omega_{i,j}} (F_{i,j-1/2,k,l} - F_{i,j+1/2,k,l}) \\ & + \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{f_{i,j,k,l}^{+(n+1)} - f_{i,j,k,l}^{n+1}}{\tau^{n+1}} + \frac{f_{i,j,k,l}^{+(n)} - f_{i,j,k,l}^n}{\tau^n} \right) - \phi_x \Delta t \frac{\partial}{\partial u} f_{i,j,k,l}^{n+1} - \phi_y \Delta t \frac{\partial}{\partial v} f_{i,j,k,l}^{n+1}. \end{aligned} \quad (2.19)$$

为了隐式地更新气体分布函数，但不涉及复杂的不动点或 Newton 迭代法，我们首先对方程 (4.2) 在速度空间求矩。对应碰撞不变量的矩方程就是宏观守恒量的更新方程，即

$$\mathbf{W}_{i,j}^{n+1} = \mathbf{W}_{i,j}^n + \frac{1}{\Omega_{i,j}} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \sum_{r=1} \Delta \mathbf{L}_r \cdot \mathbf{F}_r dt + \frac{1}{\Omega_{i,j}} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega_{i,j}} \mathbf{G}_{i,j} d\vec{x} dt, \quad (2.20)$$

其中 \mathbf{F}_r 是穿越界面 $\Delta \mathbf{L}_r$ 的宏观守恒量的通量，而 $\mathbf{G}_{i,j}$ 是外力贡献的源项，

$$\mathbf{G}_{i,j} = \int_{\Omega_{k,l}} \left(-\phi_x \Delta t \frac{\partial}{\partial u} f_{i,j,k,l} - \phi_y \Delta t \frac{\partial}{\partial v} f_{i,j,k,l} \right) \psi du dv d\xi.$$

在更新步骤里，我们先解方程 (2.20)，其更新后的解可以用来构造 t^{n+1} 时间步的平衡分布函数 (2.19)。

外力源项根据下面的方法求解。对于在速度空间足够宽的离散网格，可以假设沿

外力加速度迎风方向的第一点上分布函数的速度导数为零，因而在这一点上的分布函数更新没有来自于外力源项的贡献。从下一个点开始，可以使用之前更新的速度点上的离散分布函数，使用迎风差分法计算下一点上的速度导数。这样，方程 (2.19) 对于 f^{n+1} 的求解是隐式的，但可以完全基于显式方法实现。

在计算中，时间步长由相空间的 Courant–Friedrichs–Lowy(CFL) 条件决定，

$$\Delta t = \text{CFL} \min \left\{ \frac{\Delta x \Delta y}{u_{max} \Delta y + v_{max} \Delta x}, \frac{\Delta u \Delta v}{\phi_x \Delta v + \phi_y \Delta u} \right\}, \quad (2.21)$$

其中 CFL 是 CFL 数， $u_{max} = \max(|u_k|)$, $v_{max} = \max(|v_l|)$ 是 x 和 y 方向上最大的离散速度。对于宏观量和分布函数的更新不会受到动理学的时空尺度的限制，这在近连续流动中带来极大的便利。

2.3.4 关于细致平衡特性的分析

在连续介质极限下，Euler 和 Navier-Stokes 方程可以用来描述宏观的流体运动。这里，让我们考虑一维 Euler 方程，

$$\begin{aligned} \rho_t + (\rho U)_x &= 0, \\ (\rho U)_t + (\rho U^2 + p)_x &= \rho \phi_x, \\ E_t + ((E + p)U)_x &= \rho U \phi_x. \end{aligned}$$

这组方程允许一个等温的流体静力学解的存在，

$$\rho = \rho(x), U = 0, p_x = \rho \phi_x.$$

对于一个定常的外力加速度 ϕ_x ，相应的解简化为，

$$\rho = \rho_0 \exp \left(\frac{\phi_x x}{RT} \right), u = 0, p = p_0 \exp \left(\frac{\phi_x x}{RT} \right), \quad (2.22)$$

其中 R 是气体常数。由于这里并不存在宏观速度及其导数，事实上 Navier-Stokes 方程也可以允许同样的解 (2.22) 的存在。对于一个细致平衡的格式，尽管严格来说应当从任意一个初值给出满足这样条件的解，但能够维持这样的定常解的存在是其最低限度的要求，即实现外力源项和空间不均匀性导致的通量函数间的精确平衡，

$$\frac{1}{\Delta x} \int_{t^n}^{t^{n+1}} (F_{i-1/2} - F_{i+1/2}) dt + \frac{1}{\Delta x} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} G_i dt = 0. \quad (2.23)$$

在 WBUGKS 方法中，通量由界面处的分布函数演化解 (2.13) 确定。在连续介质极限下的流动中存在 $\Delta t \gg \tau$ ，此时强烈的分子间碰撞作用使得分布函数趋于

$$f_{i+1/2} = f_0^+ - (\tau(a u + A) + t A) f_0^+ - \tau^2 a \phi_x f_0^+.$$

简单起见，这里我们考虑完全定常的流体静力学平衡， f^+ 是精确的 Maxwellian 分布函

数，并忽略分子的内自由度 ξ ，相应的界面分布函数退化为，

$$f_{i+1/2} = f_0^+ - \tau a u f_0^+ - \tau^2 a \phi_x f_0^+. \quad (2.24)$$

其计算的界面通量是

$$\mathbf{F}_{i+1/2} = \int u f_{i+1/2} \psi du.$$

由于这里的界面分布函数是 Maxwellian 的组合，它在速度空间的矩 $\int u^\alpha g du = \rho < u^\alpha >$ 可以通过高斯分布的理论积分得到。在定常状态，高斯分布函数的矩如下，

$$\begin{aligned} & < u^0 > = 1, \quad < u^1 > = 0, \\ & < u^2 > = \frac{1}{2\lambda}, \quad < u^3 > = 0, \quad < u^4 > = \frac{3}{4\lambda^2}, \end{aligned}$$

其中 $\lambda = \rho/(2p)$ 。方程 (2.24) 中的系数 a 取决于宏观守恒量的空间分布，

$$\begin{aligned} a_3 &= \frac{4\lambda_0^2}{(K+1)\rho_0} \left[2(\rho E)_x + (U_0^2 - \frac{K+1}{2\lambda_0})\rho_x - 2U_0(\rho U)_x \right], \\ a_2 &= \frac{2\lambda_0}{\rho_0} [(\rho U)_x - U_0\rho_x] - U_0 a_3, \\ a_1 &= \frac{1}{\rho_0} \rho_x - U_0 a_2 - \frac{1}{2} \left(U_0^2 + \frac{K+1}{2\lambda_0} \right) a_3, \end{aligned}$$

其中 (ρ_0, U_0, λ_0) 是界面上的特征变量。对于等温静止的气体而言，这个关系退化为

$$a_1 = \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \rho}{\partial x}, \quad a_2 = a_3 = 0.$$

方程 (2.23) 中的源项是，

$$\mathbf{G}_i = \int -\phi_x f_u \psi du. \quad (2.25)$$

通过分部积分，我们可以得到外力源项的贡献，

$$\begin{aligned} G^\rho &= 0, \\ G^{\rho U} &= \rho \phi_x, \\ G^{\rho E} &= \rho U \phi_x = 0. \end{aligned} \quad (2.26)$$

因此，对于质量、动量和能量密度，WBUGKS 方法具有精确的外力场下的细致平衡性质。

1. 质量平衡

$$F_{i-1/2}^\rho = F_{i+1/2}^\rho = 0,$$

$$G_i^\rho = 0.$$

2. 动量平衡

$$F_{i-1/2} = \frac{\rho_{i-1/2}}{2\lambda}, \quad F_{i+1/2} = \frac{\rho_{i+1/2}}{2\lambda},$$

$$G_i^{\rho U} = \rho \phi_x.$$

在这里，我们可以使用静力学下网格内的密度分布 (2.22) 来验证动量的平衡关系，即

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} G_i^{\rho U} dx = \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \rho \phi_x dx = RT(\rho_{i+1/2} - \rho_{i-1/2}) = -(F_{i-1/2} - F_{i+1/2}).$$

3. 能量平衡

$$F_{i-1/2}^{\rho E} = F_{i+1/2}^{\rho E} = 0,$$

$$G_i^{\rho E} = 0.$$

很明显，在统一气体动理学格式中，细致平衡特性 (2.23) 能够被精确地满足。流体的质量、动量和能量解在静力学状态下是被精确保持的。可以看到，在连续介质流域内，随着强烈的分子碰撞，松弛时间趋近于零，方程 (2.24) 中的外力项是一个相对松弛时间的二阶项。换言之，外力场对于相邻碰撞间粒子轨迹的影响可以忽略不计，而仅仅贡献一个对于宏观流体微团的体源项作用。

总的来说，外力对于气体流动的影响是一个多尺度的问题，和时间步长与松弛时间的比例 $\Delta t/\tau$ 相关。随着粒子碰撞时间 τ 的增加，粒子的输运过程和碰撞过程的耦合变得松散，而外力场也将在气体的演化过程中发挥更重要的角色。如果我们考虑自由分子流极限，即 $\tau \gg \Delta t$ ，那 WBUGKS 可以恢复一个自由输运过程，

$$f_{i+1/2,k} = \begin{cases} f_{i+1/2,k^0}^L + \left(-(u_k - \phi_x t)t - \frac{1}{2}\phi_x t^2 \right) \sigma_{i,k^0}, & u_k - \frac{1}{2}\phi_x t \geq 0, \\ f_{i+1/2,k^0}^R + \left(-(u_k - \phi_x t)t - \frac{1}{2}\phi_x t^2 \right) \sigma_{i+1,k^0}, & u_k - \frac{1}{2}\phi_x t < 0. \end{cases}$$

在扩大的平均自由程和自由输运时间里，粒子在外力的作用下加速运动，导致质量、动量和能量沿外力方向的输运。在这种情况下，并不存在一个严格意义上的流体静力学平衡解，而必须从统计平均的意义上理解其概念，而非平衡的气体演化也可能蔓延至整个流场。在这种情况下，讨论传统意义上的细致平衡特性就没有意义了。在中等大小的 $\Delta t/\tau$ 比例对应的过渡流域，细致平衡概念应当对应一个在宏观尺度上的粗粒度近似。即便如此，在任何情况下，外力的影响都应当显式地包含在网格界面的通量求解器中。这不仅仅是处于静力学的细致平衡特性要求，更重要的是，由于外力场对粒子运动轨迹的影响，其对于准确捕捉粒子的非定常演化是必需的。在统一气体动理学格式中，式 (2.10) 和 (2.14) 就是一种将考虑外力效应的通量求解方案，而尺度自适应的通量函数保证了该算法的多尺度性，而这与引力演化的物理过程是一致的。有关外力场下多尺度非平衡流动动力学的系统分析和计算将在下一章的内容中介绍。

2.3.5 算法概述

细致平衡的统一气体动理学格式的算法步骤概括如下。WBUGKS 在式 (2.20) 和 (2.19) 中同时更新宏观流体守恒量和微观粒子分布函数。根据动理学模型方程在一维 (2.13) 和二维 (2.17) 的情形，我们根据其特征线计算网格界面处的粒子分布函数，并用其构造尺度自适应的通量函数。外力场对于粒子轨迹的影响被显式地纳入通量函数和源项的处理以实现对气体演化过程的精确建模。如理论分析阐明的，当前的算法具有精确的细致平衡特性。

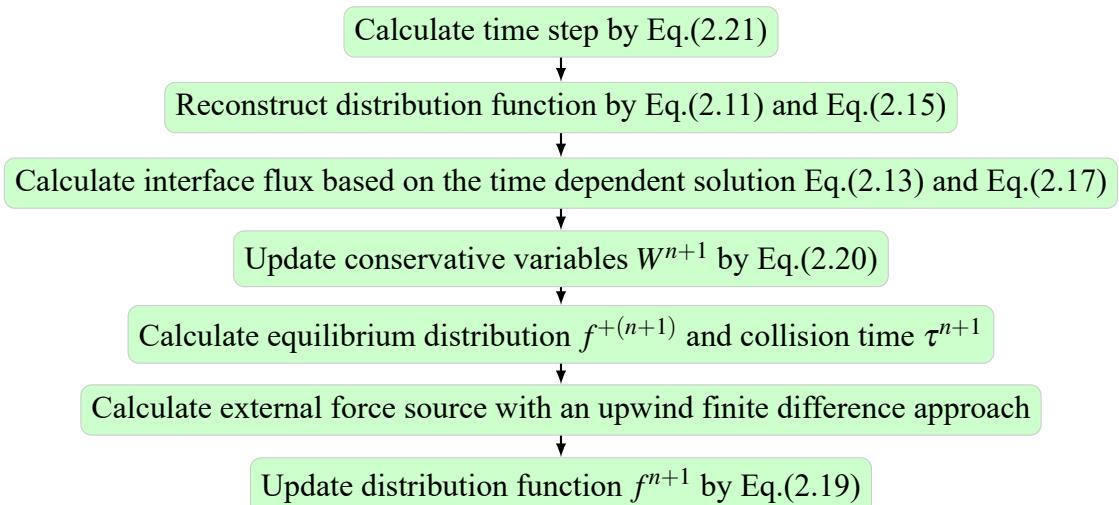


图 2.1 UGKS 在每一个更新步里的算法步骤

2.4 数值实验

在这一节，我们将展示一些数值算例的结果以验证细致平衡的统一气体动理学格式的表现。为了阐明该算法解析多尺度流动物理的能力，数值模拟包含从自由分子流到连续介质 Euler 和 Navier-Stokes 流动在外力场下的演化情况。数值实验表明，当前的统一算法可以有效地捕捉不同流态下的流动特征。与此同时，一些有趣的非平衡物理现象例如在方腔驱动问题中热流与外力项的关联，第一次被系统地进行研究。在所有的算例中，我们均考虑硬球 (Hard Sphere) 模型描述的单原子理想气体，并采用 Shakhov 模型构建 WBUGKS 方法。

2.4.1 一维流体静力学平衡解

第一个例子起源于 Leveque 和 Bale 的文章^[74]。在数值模拟中，单原子理想气体的绝热指数 $\gamma = 5/3$ ，初始场设置为在 $x \in [0, 1]$ 指向 x 轴负方向的均匀外力场 $\phi_x = -1.0$ 下满足流体静力学平衡解，

$$\rho_0(x) = p_0(x) = \exp(-x), u_0(x) = 0.$$

在初始的压力分布上增加一个小扰动项，即

$$p(x, t = 0) = p_0(x) + \eta \exp(-100(x - 0.5)^2),$$

其中 $\eta = 0.01$ 是扰动的幅值。物理计算域被均匀划分为 200 个网格，同时速度空间使用 100 个均匀速度网格用以分布函数的更新。在这个例子里，参考克努森数设置为 $Kn = 10^{-4}$ ，基本对应于连续介质极限下的流动。图2.2展示了 $t = 0.2$ 时的计算结果。正如文献 [74, 79] 中分析的，基于算子分裂的计算格式无法捕捉这样一个小扰动行波解，如图中非细致平衡的数值方法结果 (标记为 Non-WB solution) 所示。对于一个细致平衡格式，必须显式地在通量求解器中考虑外力的影响。很明显，在扰动的传播过程中，WBUGKS 可以精确地捕捉小扰动传播的行波解，同时精确地保持外力场下的流体静力学解。当 x 方向网格数等于 200 时，WBUGKS 给出了和网格收敛解 ($nx = 2000$) 相同的物理理解。

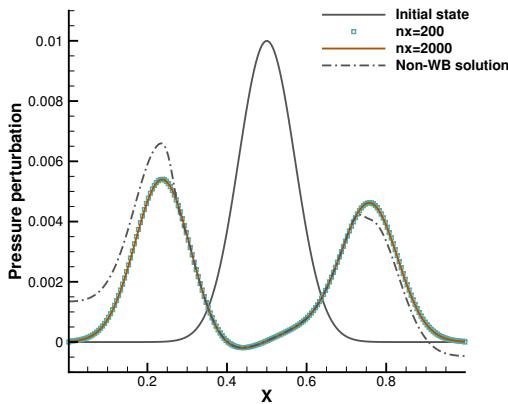


图 2.2 静力学平衡解上压力扰动随时间演化的过程

2.4.2 外力场下的激波管问题

第二个算例是外力场下的标准 Sod 激波管问题 [86]。物理计算域 $x \in [0, 1]$ 被划分成 100 个均匀网格，其中两个边界使用镜面反射边界条件。使用针对 Navier-Stokes 解的外力场下细致平滑的连续流气体动理学格式 [79]，辅以 1000 个均匀网格，给出连续介质极限下的参考解。计算的初始条件设置为，

$$\rho = 1.0, U = 0.0, p = 1.0, x \leq 0.5,$$

$$\rho = 0.125, U = 0.0, p = 0.1, x > 0.5.$$

外力加速度 $\phi_x = -1.0$ 沿 x 轴的负方向。在这里，我们展示的是 $t = 0.2$ 时刻激波管内的瞬态解。为了验证当前算法在不同流域下模拟相应的流体物理的适用性，我们在不同的参考克努森数下进行了数值实验，例如 $Kn = 0.0001, Kn = 0.01$ and $Kn = 1$ ，对

应典型的连续流，过渡流和自由分子流。参考克努森数可以用来计算参考状态下的动力学粘性系数，例如变径软球 (variable soft sphere, VSS) 模型可以给出，

$$\mu_{ref} = \frac{5(\alpha+1)(\alpha+2)\sqrt{\pi}}{4\alpha(5-2\omega)(7-2\omega)} Kn_{ref}. \quad (2.27)$$

在数值计算中，我们选取 $\alpha = 1.0$ 和 $\omega = 0.5$ 来恢复完全单原子硬球模型的粘性系数。对于硬球分子，其粘性是

$$\mu = \mu_{ref} \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^\theta, \quad (2.28)$$

其中 T_{ref} 是参考温度， θ 是硬球模型的指数因子。在这里我们采用 $\theta = 0.72$ 。局部的碰撞时间可以根据动理论关系 $\tau = \mu/p$ 确定。

计算结果如图2.3所示。可以看到，在外力场作用下，激波管内的粒子被“拉回” x 的负方向。和无外力作用的标准 Sod 激波管算例相比，粒子向激波管左侧运动，导致密度、温度和压力的升高，以及一些区域内的负向速度。

这个算例阐明了统一气体动理论格式在外力场下模拟不同流域内流动物理的能力。在 $Kn = 0.0001$ 的连续流中，粒子碰撞时间远小于计算所用的时间步长，因而格式自动给出 Euler 解。由于空间和时间分辨率的限制，WBUGKS 在这里自动变成了一种激波捕捉格式。数值模拟的结果与连续流的 GKS 方法给出的参考解一致，这表明了 WBUGKS 方法的渐近保持特性。随着克努森数的增加，碰撞时间也随之扩大，流动物理也相应地发生变化。从 Euler 方程的 Riemann 问题，到无碰撞的 Boltzmann 解，WBUGKS 给出一个连续的流体动力学谱。

2.4.3 Rayleigh-Taylor 不稳定性问题

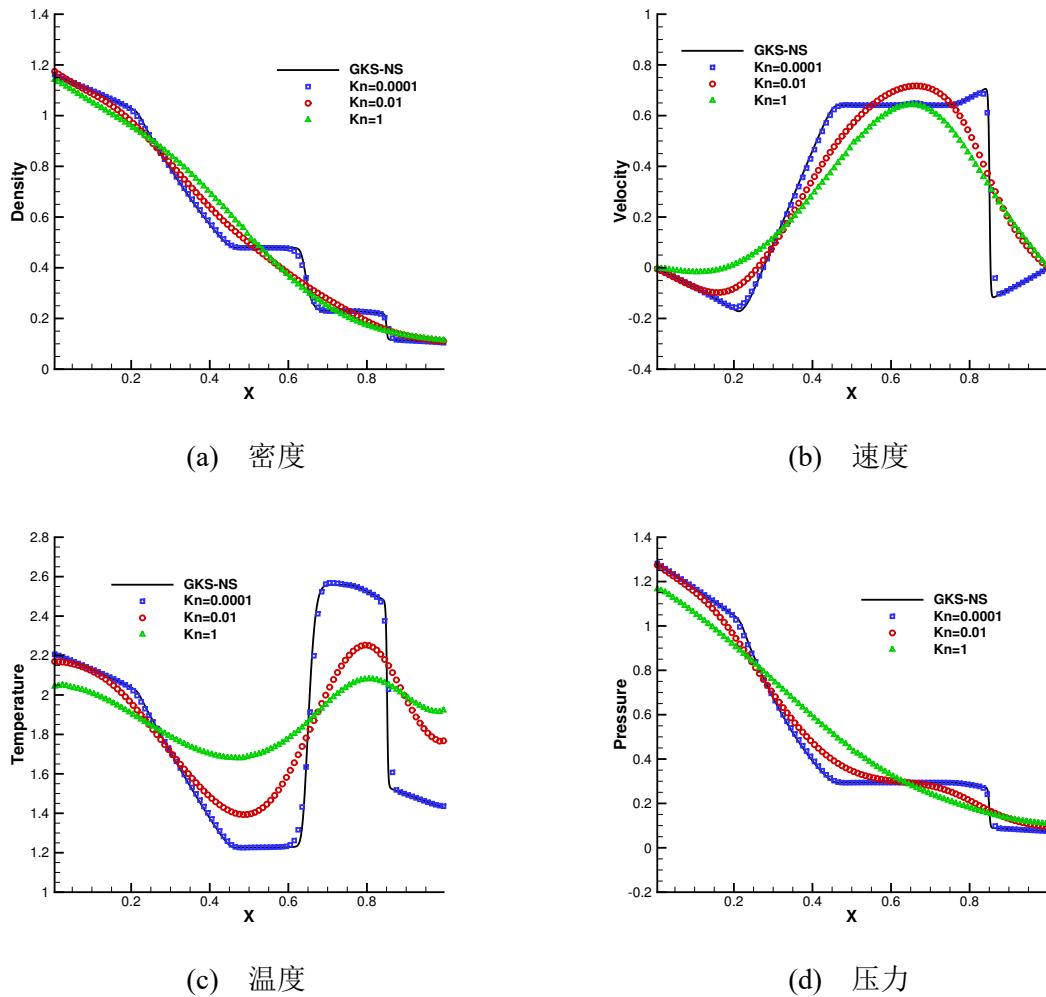
这个算例同样来自于^[74]。考虑等温静止的理想气体，其中密度和压力在极坐标系 (r, θ) 中满足两个分段的指数形式，

$$\rho_0(r) = e^{-\alpha(r+r_0)}, p_0(r) = \frac{1.5}{\alpha} e^{-\alpha(r+r_0)}, U_0 = 0,$$

其中

$$\begin{cases} \alpha = 2.68, r_0 = 0.258, r \leq r_1, \\ \alpha = 5.53, r_0 = -0.308, r > r_1, \end{cases} \text{with} \begin{cases} r_1 = 0.6(1 + 0.02 \cos(20\theta)), \text{for density,} \\ r_1 = 0.62324965, \text{for pressure.} \end{cases}$$

存在一个满足 $d\Phi/dr = 1.5$ 的外力势，即一个指向坐标原点的均匀外力。在初始条件下存在一个密度倒置区域，在外力场作用下，界面附近将逐渐发展出所谓的 Rayleigh-Taylor 不稳定性^[87]。Rayleigh-Taylor 不稳定界面附近的流体运动有望通过数值计算解析。与此同时，一个细致平衡的算法应当能够在远离界面的区域保持原有的静力学平衡解。计算区域是一个划分为 60×60 均匀网格的正方形，同时速度空间被划分为 20×20 的均匀网格。这里不同的参考克努森数 $Kn = 0.0001, 0.01$, 以及 1，被用于进行

图 2.3 外力场下的 Sod 激波管问题在 $t = 0.2$ 时刻的解

数值模拟。边界上均适用完全的镜面反射边界条件。

不同时刻的密度等值面如图2.4所示。可以清楚地看到, Rayleigh-Taylor 不稳定性 的演化过程在不同的稀薄程度下具有不同的特征。在连续介质流域下, 如图2.4的第一行所示, 频繁的粒子碰撞阻止了粒子在不同流体微团之间的穿透, 在界面区域发生了强烈的掺混现象。然而, 随着克努森数的增加, 掺混过程通过粒子穿透被加速, 使得界面不稳定现象大大减弱。图2.5展示了所有网格的密度与相对极坐标中心的半径的散射图。可以看出, 在连续介质流域中的掺混区域比过渡流和自由分子流窄得多。由于 WBUGKS 具有的细致平衡性, 流体静力学解在计算中得到很好的保持, 掺混过程仅发生在 Rayleigh-Taylor 不稳定界面附近。

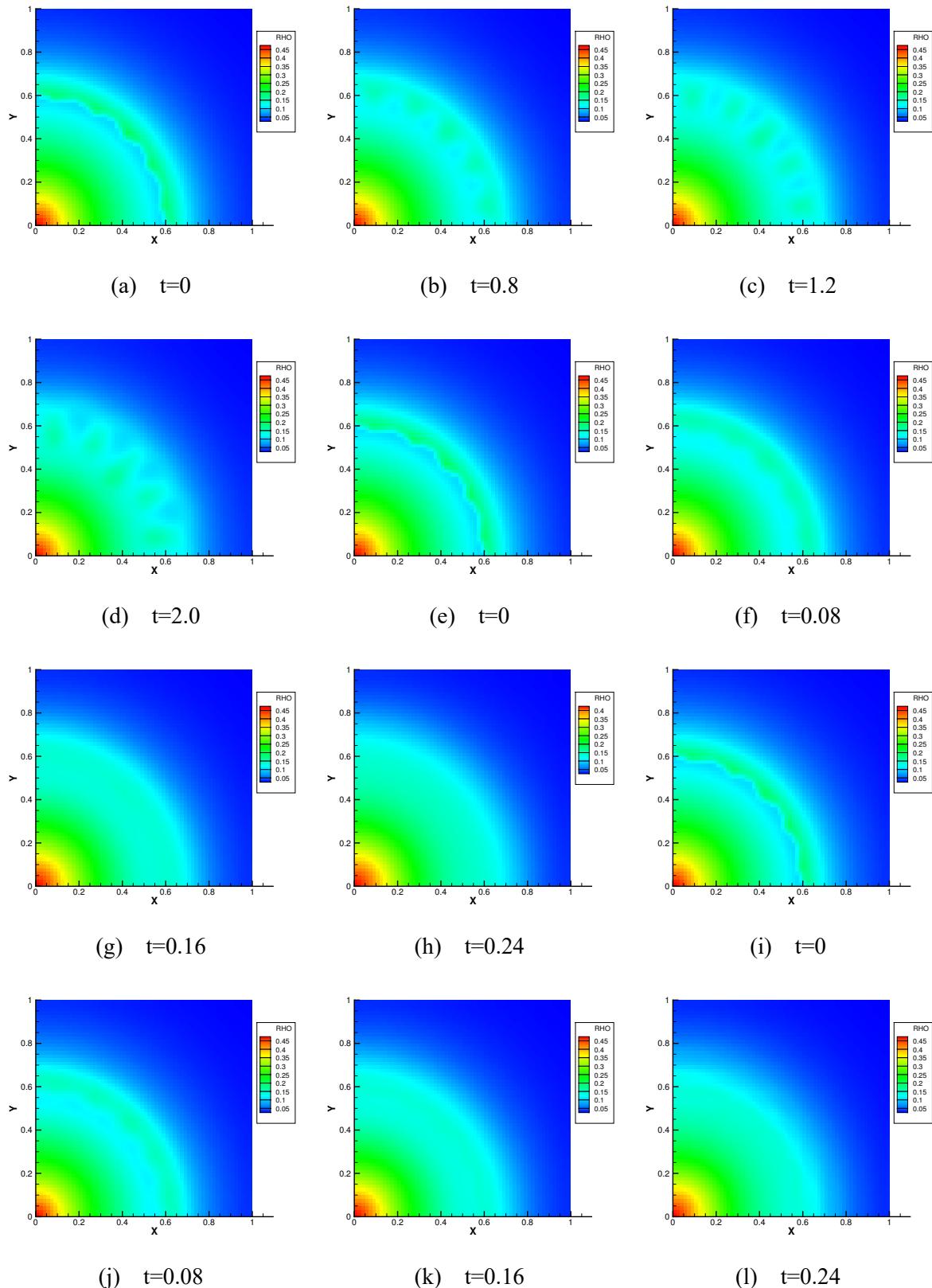


图 2.4 不同参考克努森下外力场中的密度演化, 0.0001 (a-d), 0.01 (e-h), 1 (i-l)

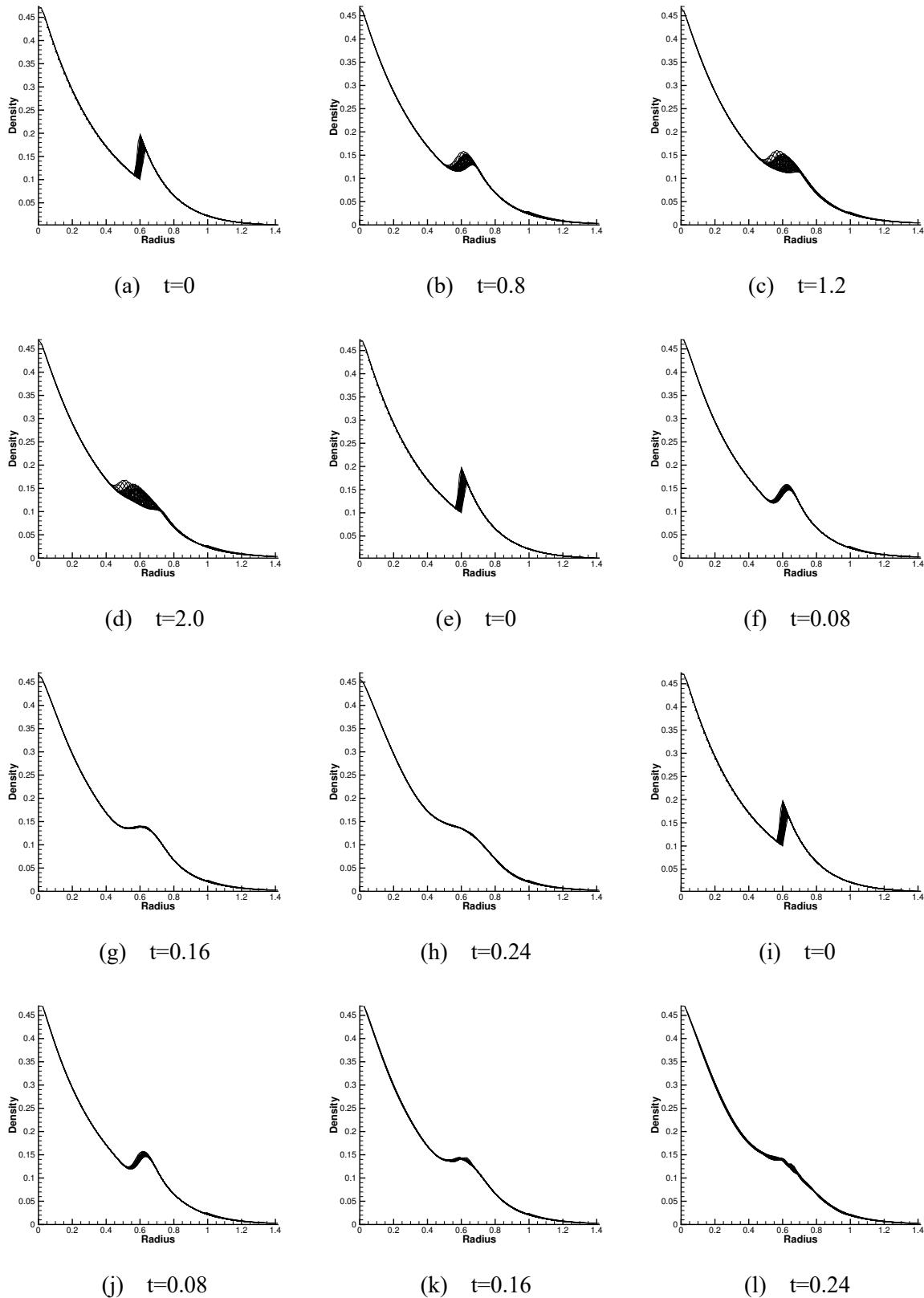


图 2.5 不同参考克努森下密度沿径向的分布，0.0001 (a-d), 0.01 (e-h), 1 (i-l)

2.5 小结

由于在不同区域中存在的显著气体密度的变化，外力场下的气体动力学具有多尺度的特征。本章从直接建模的角度出发，提出了外力场下的细致平衡统一气体动理学格式 (Well-Balanced Unified Gas-Kinetic Scheme)。通过理论分析和数值实验，我们验证了该算法的细致平衡特性。同时，由于多尺度建模的特性，WBUGKS 可适用于不同流域和流态的流动模拟，并能够捕捉与外力场相关的非平衡物理现象。WBUGKS 是一种可靠的从连续流到稀薄流的跨尺度计算方法。这一算法有助于对于行星表面大尺度的大气环流建模，以及对天体物理中广泛存在的重力-热不稳定性的定量研究。细致平衡的统一动理学格式为研究重力场下多尺度、非平衡的气体动力学提供了不可或缺的工具。

第三章 外力场下非平衡流动和传热的研究

3.1 简介

在天文学和天体物理问题中，引力相互作用是通过内力形式出现的；而在流体力学问题中，其往往以保体积力的外场形式出现。由于力场的存在，沿外力方向上气体的数密度和相应的局部克努森数可能会存在很大的变化。换言之，外力场下的气体动力学具有内禀的多尺度特性，我们可以用气体动理论来说明外力对气体分子运动过程的影响。在动理论尺度上，Boltzmann 方程通过追踪粒子速度分布函数 $f(\mathbf{x}, t, \mathbf{u})$ 的演化来描述粒子的输运和碰撞过程。伴随作用于粒子上的外力加速度 ϕ ，在方程 (3.1) 中 f 的演化过程通过两个基于过程分裂的算子描述，即粒子的自由输运（左端项）和它们间的碰撞（右端项），

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f + \phi \cdot \nabla_{\mathbf{u}} f = Q(f). \quad (3.1)$$

这里 \mathbf{u} 是微观粒子运动速度， $Q(f)$ 是碰撞项。对于一个真实的气体动力学系统，即使其初始处于精确的 Maxwell 分布，粒子在连续两次的碰撞间的自由运输总是使系统发展非平衡状态。在外力场下，在这段时间间隔内的粒子加速或减速过程会进一步导致在速度空间中的分布函数的变形。分布函数和 Maxwell 平衡分布的偏差受粒子平均弛豫时间 τ 的限制。而另一方面，粒子间的相互碰撞使系统趋于达到平衡态。在连续流中，由于强烈的分子间碰撞，系统偏离平衡态的程度很小，因而在 Euler 和 Navier-Stokes 宏观系统中，可以使用经典的本构关系描述粒子的非平衡输运过程，即粘性和热传导定律。然而，在过渡流和自由分子流中，由于显著扩大的粒子平均自由程和碰撞时间，粒子的输运和碰撞过程的耦合变得十分松散。在相邻碰撞之间，粒子的自由输运会引起复杂的非线性动力学效应，并且呈现出特殊的非平衡流动和能量输运现象。通常我们知道在高度耗散区会出现较强的非平衡效应，例如激波和边界层内。但外力场的存在，可能使得一个相对较弱的非平衡效应扩展至整个流场。研究外力场下的非平衡流动和传热问题，对于非平衡统计力学的发展和非平衡流体物理的研究有非常重要的意义。

值得注意的是，目前对于外力场作用下非平衡流动的研究非常有限^[88,89]。一般来说，外力场(如重力)的存在会引入一个额外的特征尺度 $H \sim kT/m\phi$ ^[90]，其中 k 是 Boltzmann 常数， m 为粒子质量， ϕ 为外力加速度的大小。它表示力场对气体演化产生显著影响的长度尺度。对于一个在地球大气中的重力系统， H 的量级大约是 $O(10^3)$ 米；在实验室条件下或微机电系统(MEMS)， H 要远远大于所考虑问题的特征尺度 L ，因此在经典的空气动力学研究中，我们有理由忽略外力的影响。然而，在一些 H 和 L 可以比拟的情形下，外力对于气体演化过程的影响就是不可忽略的了。例如，在恒星和行

星大气中的大尺度结构，重力的存在会引起气体密度的显著变化，相应的粒子平均自由程和局部克努森数同样如此。同样的情况也可能出现在小尺度、大加速度的情况下，例如激波和物质界面的相互作用。理论上，惯性系中的均匀外力场的作用相当于非惯性系中物体的恒定加速度。因此，研究多尺度非平衡输运在外力场中的形式是一个很有意义的问题。

不同的气体动力学方程可以用来描述不同建模尺度下的流动。在流体微团和宏观流体动力学尺度的模型中，Fourier^[16] 在 1822 年提出了一个著名的唯象的导热定律。基于 Fourier 定律和 Newtown 应力应变定律的本构关系，建立了描述流体运动和传热的 Navier-Stokes-Fourier 方程组。在 NSF 的微团模型中，粒子间的剧烈碰撞防止了粒子在微团间的穿透。微团间的相互作用以挤压和摩擦的形式存在，换言之，是一种波动，在 Fourier 提出的模型中，热流的扩散定律事实上引入了对温度场的无限传播速度，也使其无法准确描述稀薄流^[91] 中的非平衡传热现象。事实上，NS 方程和流体微团在理论上是缺乏定量、清晰的尺度描述的，其适用性的边界也没有被明确定义。与之对应的，Boltzmann 方程的建模尺度是精确定义的，即粒子平均自由程和碰撞时间。也仅仅在这个尺度上，我们可以用算子分裂的方式有效地描述粒子的自由输运和碰撞过程。因此，这也限制了 Boltzmann 方程在其他尺度上的应用。盲目地声称 Boltzmann 方程的多尺度适用性是没有太大意义的，除非将所有尺度的问题都解析到平均自由程和粒子碰撞时间尺度上分析，并假设在该问题里不会出现多体碰撞等更复杂的情况^[92]。

在物理上讲，特定的气体动力学方程是根据我们所关心物理量，对复杂系统提取信息后的粗粒度近似，其有效性建立在清晰的尺度分离上，如 NSF 和 Boltzmann 方程的适用性问题。事实上，这可能也是气体分子系统相对容易进行分析的原因，而在一些更复杂的问题，例如颗粒流 (Granular Flow)，是缺乏这样清晰的尺度分离的^[93]。然而，对于一个处于外力场作用下的系统，相应的流动物理学可能会从位于其上层的稀薄气体动力学持续变化到底部稠密层的宏观流体动力学。从理论上讲，为了研究跨尺度流动物理，一个有效的工具应当在动理学和流体动力学之间提供一个平滑的尺度变化描述。由于在理论上建立多尺度建模方程的困难性，采用多尺度的计算方法对这样一个系统进行直接数值模拟，获取从稀薄流到连续流的连续谱，应当是一个最优选择。在前一章提出的外力场下的细致平衡统一气体动力学方案 (Well-Balanced Unified Gas-Kinetic Scheme, WBUGKS) 就提供了这样一种选择。在本章中，我们将使用这个算法，结合相应的理论分析，研究气体在外力作用下的多尺度、非平衡演化过程。

在最简单的几何条件下，驱动方腔内的流动依然呈出复杂的多尺度流体力学现象，包括剪切层、旋涡、二次流、传热、流体动力不稳定性、层流-湍流转捩等。针对这个问题，研究者针对不同流态下的流动物理进行了大量的研究。在 Navier-Stokes 的流域内，方腔流是验证数值格式的标准算例^[94-98]，其中 Ghia^[96] 等人基于涡量-流函数

方法计算的数值解是现在普遍认可的二维参考解。在稀薄流问题中，直接模拟 Monte Carlo(DSMC)^[64] 和直接 Boltzmann 求解器^[54] 提供了标准解。Naris 等人^[99] 离散了一个线性化的 BGK 方程，并用其研究了全部克努森数范围内的流型和物理量的稀薄效应。Mizzi 等人^[100] 对滑动边界条件下的 NSF 方程组和 DSMC 对方腔驱动问题的模拟结果进行了比较。John 等人^[101] 使用 DSMC 方法，发现了过渡流中存在的反 Fourier 定律热传导，并研究了膨胀冷却和粘性耗散对热输运动态过程的影响。但在以往的工作中，关于外力场作用下的方腔流动的研究很少。伴随外力的作用，腔内流动的多尺度、非平衡特性会使得流动变得愈加复杂。通过本研究，我们观察到了一些新的物理现象，包括传热与外力的定性关系，以及可能存在的温度场的波动传播特性。

本章的组织如下。首先给出了基本的动理学理论框架，并基于动理学模型方程给出外力对宏观流动运输的定量分析。其后对不同流动状态下的非平衡流动运输和传热进行了数值实验和讨论。最后是结论部分。

3.2 关于外力物理效应的分析

在对 Boltzmann 方程 (3.1) 的 Chapman-Enskog 展开中，粒子分布函数可以基于一个小参量在平衡态附近以级数展开的形式表示，

$$f = f^{(0)} + f^{(1)}\epsilon + f^{(2)}\epsilon^2 + \dots, \quad (3.2)$$

其中不同的截断阶数可以对应不同的流体动力学方程。考虑零级近似，此时的分布函数是精确的 Maxwellian 分布，碰撞项恒等于零，因此方程 (3.2) 的矩系统就是 Euler 方程，

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho U_i) &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho U_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_i U_j + p \delta_{ij}) &= -\rho \phi_i, \\ \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(e + \frac{1}{2} U_i U_i \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho U_j \left(e + \frac{1}{2} U_i U_i \right) + U_i p \delta_{ij} \right] &= -\rho U_j \phi_i. \end{aligned} \quad (3.3)$$

为了便于之后的分析，在这里我们使用简并的张量运算符。这里的 δ_{ij} 是 Kronecker 符号， e 是内能密度， ϕ_i 是外力作用在流体上的加速度。

由于完整的 Boltzmann 碰撞积分的复杂性，在这里我们将使用 BGK 方程进行分布函数在外力场下的渐近展开。在 BGK 方程中，碰撞算子被一个松弛项所代替，即

$$\frac{\partial f}{\partial t} + u_i \frac{\partial f}{\partial x_i} + \phi_i \frac{\partial f}{\partial u_i} = \frac{f^+ - f}{\tau}. \quad (3.4)$$

根据动理学的描述可以确定这里的碰撞时间 $\tau = \mu/p$ ，其中 μ 是气体的动力学粘性系

数, p 是压力。对于单原子气体分子, 其 Maxwellian 分布是,

$$f^+ = \mathcal{M} = \rho \left(\frac{\lambda}{\pi} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\lambda [(u_i - U_i)^2]}, \quad (3.5)$$

其中 $\lambda = m/2kT$, m 是分子质量, k 是 Boltzmann 常数。在近平衡区, 对 BGK 方程可以基于粒子平均碰撞时间 τ 或对应的克努森数执行方程 (3.2) 的 Chapman-Enskog 展开, 可以将其写成以下的逐次形式,

$$f = f^+ - \tau \frac{D}{Dt} f^+ + \tau \frac{D}{Dt} \left(\tau \frac{D}{Dt} f^+ \right) + \dots, \quad (3.6)$$

其中 D/Dt 表示分布函数在相空间对时间的全导数。对于方程 (3.6), 考虑对碰撞时间的一阶截断项, 分布函数具有相应的展开形式,

$$f = f^+ - \tau (f_t^+ + u_i f_{x_i}^+ + \phi_i f_{u_i}^+) + O(\tau^2). \quad (3.7)$$

可以将分布函数在物理空间的导数看作是依赖于宏观量分布的隐函数形式。由式 (3.5) 中 Maxwellian 分布的链式法则, 可以得到分布函数在物理空间和速度空间的导数, 即

$$\begin{aligned} \frac{\partial f^+}{\partial t} &= \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} f^+ + \frac{3}{2\lambda} \frac{\partial \lambda}{\partial t} f^+ + (-u_i^2 + 2u_i U_i - U_i^2) \frac{\partial \lambda}{\partial t} f^+ + (2u_i \lambda - 2U_i \lambda) \frac{\partial U_i}{\partial t} f^+, \\ \frac{\partial f^+}{\partial x_i} &= \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x_i} f^+ + \frac{3}{2\lambda} \frac{\partial \lambda}{\partial x_i} f^+ + (-u_j^2 + 2u_j U_j - U_j^2) \frac{\partial \lambda}{\partial x_i} f^+ + (2u_j \lambda - 2U_j \lambda) \frac{\partial U_j}{\partial x_i} f^+, \\ \frac{\partial f^+}{\partial u_i} &= -2\lambda(u_i - U_i)f^+. \end{aligned}$$

在 Chapman-Enskog 的方法中, 关键性的一步在于用低阶的宏观方程迭代计算高阶展开的时间导数。在这里, 时间导数项可以基于欧拉方程中的空间导数代替,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= -\frac{\partial \rho U_i}{\partial x_i}, \\ \frac{\partial U_i}{\partial t} &= -U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \phi_i, \\ \frac{\partial T}{\partial t} &= -U_i \frac{\partial T}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial U_i}{\partial x_j}, \\ \frac{\partial \lambda}{\partial t} &= U_i \frac{\partial \lambda}{\partial x_i} - \frac{4k_B \lambda^2}{3m} \frac{\partial U_i}{\partial x_j}. \end{aligned} \quad (3.8)$$

将展开后的分布函数形式代入原 BGK 方程, 对守恒量取速度空间上的矩, 即得到相应的 Navier-Stokes 方程,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho U_i) &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho U_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_i U_j + P_{ij}) &= -\rho \phi_i, \\ \frac{\partial}{\partial t} \left[\rho \left(e + \frac{1}{2} U_i U_i \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho U_j \left(e + \frac{1}{2} U_i U_i \right) + U_i P_{ij} + q_j \right] &= -\rho U_j \phi_j. \end{aligned} \quad (3.9)$$

应力张量 P_{ij} 和热流 q_i 是不为零的粒子碰撞时间和动理学输运效应在宏观尺度上的体现 [102]，

$$P_{ij} = p\delta_{ij} - \mu \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial U_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right), q_i = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x_i},$$

其中 μ 和 κ 分别是粘性和热传导系数，并和粒子碰撞时间 τ 成正比。

在上述的 Chapman-Enskog 框架中，宏观流体的流动和传热和动理学尺度上的粒子输运现象相对应。在 Euler 方程 (3.3) 中，只有流体速度的演化受到外力场影响，而其对密度、温度等热力学变量没有贡献。在保守力势 Φ 存在下的稳态欧拉极限问题理，假定势与时间和分子速度无关，其对应的动理学方程为，

$$u_i \frac{\partial f}{\partial x_i} - \frac{\partial \Phi}{\partial x_i} \frac{\partial f}{\partial u_i} = 0. \quad (3.10)$$

方程 (3.10) 具有以下形式的通解，

$$f(x_i, u_i) = \mathcal{F}(\Phi + \frac{1}{2} u_i u_i),$$

其中 \mathcal{F} 是一个任意函数。在这里，温度变成了函数 $(\Phi + \frac{1}{2} u_i u_i)$ 的一个恒定的乘子，同时其隐含了一个等温的静力学平衡解，这个平衡解也是宏观 Euler 系统 (3.3) 的解，

$$\rho = \rho(x_i), U = 0, \frac{\partial p}{\partial x_i} = -\rho \frac{\partial \Phi}{\partial x_i}.$$

对一个恒定的重力加速度 $\phi_i = -\partial \Phi / \partial x_i$ ，相应的解变成了，

$$\rho = \rho_0 \exp \left(\frac{\phi_i x_i}{RT} \right), u = 0, p = p_0 \exp \left(\frac{\phi_i x_i}{RT} \right), \quad (3.11)$$

其中 R 是气体常数。由于考虑静力学解，在这里并不存在宏观速度及其导数，因此实际上 Euler 和 Navier-Stokes 系统都允许这样的解存在。

然而，没有证据表明，对于有限的粒子平均自由程和碰撞时间下的非平衡气体动力学，在外力场下的分布函数会严格遵循式 (3.6) 中确定的 Chapman-Enskog 形式。事实上，Chapman-Enskog 渐近系统是一个构造巧妙的阐释模型，而在落实到具体的物理问题上依旧是唯象的，不具有足够的普适性。这个问题可以用动理学模型定性地说明。如图3.1所示，考虑一个封闭在两个无限的平行平板间的气体柱。上下板保持恒定的温度 T_u 和 T_d 。气体处处是静止的，没有宏观流动。构想一个区域内的和 x 轴垂直的虚拟界面 I ，我们可以进行以下的思想实验来说明在有限粒子平均自由程下外力对气体输运的影响。

问题 A: 没有外力场的均匀分布

假设在两个平板间，所有的密度、速度、压力和温度的分布都是均匀的。两个平板的温度和初始气体的温度是相等的，即 $T_u = T_d = T$ 。现在我们考虑分子向上和向下穿过界面 I 的情形。一类向下传递的分子叫做 A，分布在粒子平均自由程 ℓ_A 内。相应的，向上运动的分子群称为 B，平均自由程为 ℓ_B 。因为流场是均匀的，所以它们是相同的，

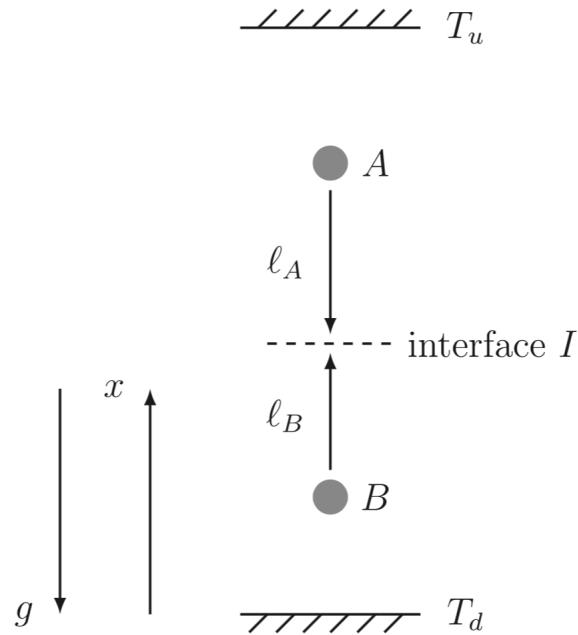


图 3.1 两平板间的粒子示意图

从 A 和 B 穿过界面的分子的几率数量是相等的，运输的平均速度和温度的根号成正比， $c \propto \sqrt{RT}$ 。因此，在界面 I 上没有净粒子通量，所有的流体动力学通量也均为零。

问题 B: 外力作用下的流体静力学分布

在这里，我们在系统内引入一个沿 x 轴负向的恒定外力 $\Phi_x = -g$ 。假设初始分布为式 (3.11) 对应密度和压力的 Maxwellian 分布，其中压力梯度被外力加速度精确平衡。由于密度分层，现在 B 处的粒子数密度大于 a 处。根据静力学平衡解，温度是均匀的 $T_A = T_B$ ，因此两类分子的初始平均速度相同。然而，从 A/B 点到界面 I 的运动过程中，A (B) 类粒子在一个碰撞时间内受到外力 g 的加速 (减速) 作用。因此，在界面上，较少的高速分子 c_A 从上往下运输，而较多的低速分子 c_B 从下往上运输。这样可以保证界面上的净质量通量为零，从而不存在宏观速度。然而，对于分子 A 和分子 B 所携带的能量而言，前者有更大的通量密度，这是因为能量通量是与粒子速度的高阶矩相关的。由于在此时没有宏观的流体流动，能量传递的速率就等于热流的大小，和粒子热运动速度的三次方正相关。因此，界面 I 下方的温度会逐渐升高，而上方的温度则逐渐降低。外力场的存在打破了粒子在相邻碰撞间分子运动的对称性，导致了流场温度的非均匀分布。在粒子的运动过程中，势能、动能和热能之间的能量转换是动态发生的。

问题 C: 外力场下的热传导问题

在此问题中，我们考虑边界温度为 $T_b > T_u$ 时的静止导热问题，初始分布为 Fourier 流动的理论解，宏观速度处处为零，稳态的热流沿温度梯度的负方向。在没有外力的情况下，两板之间的压力是均匀分布的。温度沿 x 方向降低，密度相应增加。粒子密度满足 $\rho_A > \rho_B$ ，平均速度满足 $c_A < c_B$ ，从而满足了界面 I 上零净质量通量为零的要

求。现在让我们突然添加一个 $\Phi_x = -g$ 的外力场。由于与问题 B 中描述的相同的粒子加速和减速的机制，在界面 I 的粒子平均速度相应变化为 $c'_A > c_A$ ，以及 $c'_B < c_B$ 。因此，初始的 Fourier 热流被削弱。当外力的量级较小时，其作用是对原有的热流进行了较小的修正。然而，如果外力非常大，它甚至可能在热流的决定中起主导作用。在这样一个强外场中会发生非常复杂的非平衡动力学。而显然的是，如果引入的外力的方向沿 x 的正方向，与最初的热流方向相同，则会导致相应的热流的增大。

以上对粒子在外力作用下的输运机理和能量输运机理的分析是基于粒子在平均自由程尺度内的自由输运现象。这种物理效应在存在有限的粒子平均自由程和碰撞时间的流场中均存在。在 NS 方程中，粘性系数和热传导系数对应的是粒子的平均自由程 $\mu, \kappa \propto \rho c \ell$ ，其中 ρ 是密度， c 是粒子平均速度， ℓ 是粒子平均自由程。因此，即使在普遍认为的 NS 流域内，也会存在外力对于非平衡热流的贡献项，尤其是在非定常的流动问题中。

利用动理学微分方程也可以对上述的物理图像进行等价的分析。为简便起见，让我们先考虑一维情况，即，

$$\frac{Df}{Dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + u \frac{\partial f}{\partial x} + \phi_x \frac{\partial f}{\partial u} = \frac{f^+ - f}{\tau},$$

其对应的 Maxwellian 分布是 f^+ 是

$$f^+ = \rho \left(\frac{\lambda}{\pi} \right)^{\frac{K+1}{2}} e^{-\lambda [(u-U)^2 + \xi^2]}, \quad (3.12)$$

在这里我们将其他两维方向的自由度模拟为粒子运动的内自由度 ξ ，其自由度由 K 表示。对于单原子气体的一维运动， $K = 2$ ；对于双原子分子，在低温时需考虑两个额外的转动自由度 $K = 4$ ，而在高温时还需要考虑其振动自由度及其量子化描述的问题。

在一个很小的时间间隔内，我们可以合理的将碰撞时间 τ 看作为局部常数，然后 BGK 方程具有以下形式的从任意初始状态 (x^0, t^0, u^0, ξ) 演化的特征线解，即

$$f(x, t, u, \xi) = \frac{1}{\tau} \int_{t^0}^t f^+(x', t', u', \xi) e^{-(t-t')/\tau} dt' + e^{-(t-t^0)/\tau} f_0(x^0, t^0, u^0, \xi), \quad (3.13)$$

其中 $x' = x - u'(t - t') - \frac{1}{2} \phi_x (t - t')^2$, $u' = u - \phi_x (t - t')$ 是粒子在相空间的运动轨迹，而 $(x^0, u^0) = (x - (u - \phi_x t)t - \frac{1}{2} \phi_x t^2, u - \phi_x t)$ 则是分布函数在相空间的初值。简单期间，我们将 (x, t^0) 记作 $(0, 0)$ ，相应的解变为，

$$\begin{aligned} f(0, t, u, \xi) &= \frac{1}{\tau} \int_0^t f^+(x', t', u', \xi) e^{-(t-t')/\tau} dt' + e^{-t/\tau} f_0(-(u - \phi_x t)t - \frac{1}{2} \phi_x t^2, 0, u - \phi_x t, \xi) \\ &= \tilde{f}^+ + \tilde{f}_0. \end{aligned} \quad (3.14)$$

第一项 \tilde{f} 来源于不同位置的 Maxwellian 平衡分布沿特征线的积分，其作用等价于 Navier-Stokes-Fourier 系统中由粘性系数和热传导系数确定的近非平衡态分布函数的

Chapman-Enskog 展式^[103]。同时，后一项 \tilde{f}_0 表示粒子从初始分布函数 f_0 自由输运来的贡献。基于 Taylor 展开，我们将其展开到演化时间 t 的一阶项，

$$\tilde{f}_0 = e^{-t/\tau} \left[f_0(0, 0, u, \xi) - \frac{\partial f_0}{\partial x} ut - \frac{\partial f_0}{\partial u} \phi_x t \right] + O(t^2). \quad (3.15)$$

在上述解中，空间梯度相关项描述了由于空间场的非均匀性和粒子在物理空间中的自由输运。同时，外力加速度对速度空间分布函数的变形与后一项的贡献有关，在这里我们着重分析此项的作用。

由于宏观变量可以通过粒子速度空间的矩与微观分布函数一一对应，

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho U \\ \rho E \end{pmatrix} = \int \psi f d\Sigma,$$

$$p = \frac{1}{3} \int ((u - U)^2 + \xi^2) f d\Sigma,$$

$$q = \frac{1}{2} \int (u - U) ((u - U)^2 + \xi^2) f d\Sigma,$$

其中 $d\Sigma = du d\xi$, p 是压力, q 是热流, 以及 $\psi = (1, u, \frac{1}{2}(u^2 + \xi^2))^T$ 包含碰撞不变量的矢量。这三个公式给出了微观分布 (3.15) 对于宏观流动物理的作用。如式 (3.15) 中 \tilde{f}_0 的表达式所示，分布函数的形式取决于具体的初始流动条件。为简单期间，我们考虑一个最简单的均匀问题，并因此假定空间导数为零设初始粒子分布函数 f_0 是精确的 Maxwellian 分布 f^+ (即高斯分布或正态分布)，因此其对应的速度空间的矩 $\int u^\alpha \xi^\beta f^+ d\Sigma = \rho < u^\alpha \xi^\beta >$ 具有性质，

$$< u^\alpha \xi^\beta > = < u^\alpha > < \xi^\beta >,$$

而高斯分布的积分有解析的结果，

$$< u^0 > = 1, \quad < u^1 > = U,$$

...

$$< u^{n+2} > = U < u^{n+1} > + \frac{n+1}{2\lambda} < u^n >, \quad < \xi^2 > = \frac{K}{2\lambda},$$

其中 n 是整数。由于在这里没有空间导数项的贡献，所以外力对于宏观输运的净贡献可以表示为，

$$\Delta \mathbf{W} = \begin{pmatrix} \Delta \rho \\ \Delta \rho U \\ \Delta \rho E \end{pmatrix} = e^{-t/\tau} \int \psi (-t \phi_x f_u^+) d\Sigma,$$

$$\Delta p = \frac{e^{-t/\tau}}{3} \int ((u - U)^2 + \xi^2) (-t \phi_x f_u^+) d\Xi,$$

$$\Delta q = \frac{e^{-t/\tau}}{2} \int (u - U) ((u - U)^2 + \xi^2) (-t \phi_x f_u^+) d\Xi.$$

如果把外力项 ϕ_x 和演化时间 t 看成局部常数，在分部积分后，有如下关系，

$$\Delta \mathbf{W} = \begin{pmatrix} \Delta \rho \\ \Delta \rho U \\ \Delta \rho E \end{pmatrix} = e^{-t/\tau} t \phi_x \rho \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ U \end{pmatrix}, \quad (3.16)$$

$$\Delta p = \frac{e^{-t/\tau}}{3} t \phi_x \rho (2 \langle u^1 \rangle - 2U \langle u^0 \rangle) = 0, \quad (3.17)$$

$$\Delta q = \frac{e^{-t/\tau}}{2} \tau \phi_x \rho (3 \langle u^2 \rangle - 6U \langle u \rangle + 3U^2 \langle u^0 \rangle) = \frac{(K+3)e^{-t/\tau}}{4} \frac{t \phi_x \rho}{\lambda}. \quad (3.18)$$

方程 (3.16), (3.17) 和 (3.18) 给出了在当前展开阶数下外力场对宏观流动演化的定量贡献。这种贡献来源于微观尺度连续两次碰撞之间的粒子自由输运过程中外力所起的作用。由于碰撞项总是使得系统向平衡态趋近，因此这里的演化时间 t 并不能任意取值，而只能小于一个与碰撞时间 τ 相同量级的物理参数。可以看到，在 Taylor 展开的当前阶数中，各向同性压力不受外界场的影响。但是，很明显的是，即使在一阶展开下，依然存在外力项对热流的非平衡贡献。沿外力加速度方向上的热流呈现增强的趋势，反之亦然。换句话说，外力场会在加速度的方向上贡献热流。

上述分析与文献^[90] 中的分析结果是一致的，其中利用一阶的渐近摄动法对重力引起的热流进行了分析。在 Navier-Stokes 的截断意义下，有限的粒子碰撞时间对应非零的粘性和热传导效应。因此，即便在宏观描述的意义下，依然存在外力项对于热输运的非平衡贡献。随着外力的增大和流体稀薄程度的加大，预计会出现更加非平衡的效应。在这种情况下，基于平衡态分布函数展开的渐近解的适用性就不再可靠了。幸运的是，针对这种问题，我们可以使用已发展的 UGKS 方法数值模拟各种流域中的外力场下的非平衡热输运。

3.3 非平衡流动和传热研究

在这一节中，我们将介绍和讨论几个典型的数值实验，以研究在外力场下的非平衡动力学。在所有情况下均采用细致平衡的统一气体动理论格式 (WBUGKS)。

3.3.1 外力驱动 Poiseuille 流动

在第一个数值实验中，我们首先研究两个无限平行平板间，由单向外力驱动的稀薄气体的稳态流动^[104-110]。在静止的两个板块位于 $y = \pm L/2$ 和保持在温度 T_0 。静止气体初始密度为 ρ_0 ，温度为 T_0 ，在 x 的正方向上受到均匀的外力作用，亦即平行于平板的方向。考虑的粒子是 Maxwell 分子，初始流场处处满足麦克斯韦分布函数，在 x 方向上也不存在压力梯度。如果我们在 Navier-Stokes 方程的宏观框架内考虑这个问题，那么它实质是一个简单的一维问题。然而，在气体动理论的框架下，我们可以采用外力作用下适用于 Maxwell 分子的稳态 BGK 模型方程描述该系统内的气体演化，

$$v \frac{\partial f}{\partial y} + \phi_x \frac{\partial f}{\partial u} = A_c \rho (f^+ - f), \quad (3.19)$$

其中 A_c 是一个常数，碰撞频率是 $1/\tau = A_c \rho$ 。在这个算例中，我们使用 Maxwell 的漫反射边界条件。

引入如下的无量纲物理量，

$$\begin{aligned} \hat{x} &= \frac{x}{L_0}, \hat{y} = \frac{y}{L_0}, \hat{\rho} = \frac{\rho}{\rho_0}, \hat{T} = \frac{T}{T_0}, \\ \hat{u}_i &= \frac{u_i}{(2RT_0)^{1/2}}, \hat{U}_i = \frac{U_i}{(2RT_0)^{1/2}}, \hat{f} = \frac{f}{\rho_0(2RT_0)^{3/2}}, \\ \hat{P}_{ij} &= \frac{P_{ij}}{\rho_0(2RT_0)}, \hat{q}_i = \frac{q_i}{\rho_0(2RT_0)^{3/2}}, \hat{\phi}_i = \frac{\phi_i}{2RT_0/L_0}, \end{aligned}$$

其中 u_i 是微观粒子运动速度， U_i 是宏观流动速度， P_{ij} 是应力张量， q_i 是热流， ϕ_i 是外力加速度。这样，我们可以将无量纲的 BGK 方程写作，

$$\hat{v} \frac{\partial \hat{f}}{\partial \hat{y}} + \hat{\phi}_x \frac{\partial \hat{f}}{\partial \hat{u}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{Kn} \hat{\rho} (\hat{f}^+ - \hat{f}),$$

其中 Kn 是系统的参考克努森数。对无量纲的系统，碰撞常数可以被吸收进克努森数中，即 $A_c = 1$ 。为了简化符号，在下文中除非特殊说明，我们之后将省略尖帽符号，直接表示无量纲量。

为了描述这个基本系统，Aoki 等利用渐近理论^[107] 在小克努森数下进行了分析，推导出了一个展开至二阶精度的流体动力型方程组及其边界条件。这个方法基于 $\epsilon = (\sqrt{2}/\pi)Kn$ 的 Hilbert 展开，及其在 Knudsen 层内的修正，外力加速度被设置为 $\phi_x = \alpha Kn$ 。显然，当克努森数较大时，渐近理论失效，或至少需要涵盖更高阶项的贡献。根据直接的有限差分法对 BGK 方程 (3.19) 进行数值模拟，Aoki 等人使用了不同的 Kn 和 α 进行了大量数值实验。下面，我们使用 $[-0.5, 0.5]$ 中的 100 个均匀物理网格和 $[-5, 5]$ 中的 41 个均匀速度网格的 WBUGKS 来模拟 $Kn = 0.02, 0.05, 0.1$ 和 $\alpha = 1, 2, 3$ 的情况，并将 UGKS 结果与 Aoki 等人的渐近解和有限差分解进行了比较。

图3.2, 3.3, 3.4显示了在流场的上半部分 ($0 \leq y \leq 0.5$) 中， x 方向速度 U 和温度的分布。图3.5, 3.6, 3.7是应力张量的应力张量分量 P_{xx} , P_{xy} 和 P_{yy} 和热流 q_x 和 q_y 的结

果。直线(实线、虚线、点画线)为 WBUGKS 的计算结果, 圆为渐近解, delta 为 Aoki 等人的有限差分的参考解。可以看出, 在克努森数较小的情况下, UGKS 解与渐近结果吻合较好。在 $\alpha = 2$ 和 3 时, 数值解和渐近解之间有些许的差异。造成这种偏差的原因是渐近分析解仅截断至克努森数的二阶项。当克努森数和外力变大时, 高阶希尔伯特展开式不能反映真实的物理流动。因此, 在 $Kn = 0.1$ 的情况下, 补充图中“FD result”标示的有限差分解作为基准结果, 与细致平衡的 UGKS 解完全一致。

正如之前的研究中报告的结果, 在这个简单的外力驱动系统中一个有趣的非平衡现象, 即沿 y 方向的双峰分布的温度剖面, 在靠近两板间中心附近的位置有一个极小值。Malek 等人首先用 DSMC 方法计算并报告了这种效应, 并通过动理学的模拟和理论结果恢复了这种效应。由 UGKS 和渐近解计算得到的局域温度分布如图3.8所示。一般来说, 这种情况下的温度最小值可以归因于非平衡态的高阶项的贡献, 也因此在一定范围内可以使用更高阶宏观方程来求解, 如 super-Burnett 方程^[108]。虽然在图中 Aoki 的二阶渐近分析过高地估计了中心位置温度极小值的程度, 但很明显, 即使在这种几何形状为矩形、外力均匀且较小的简单情况下, Navier-Stokes 方程也不能准确描述气体的演化过程。因此, 对于更复杂的非平衡流动研究, 就更需采用基于动理学的模型分析和计算方法。同时, 这个算例也验证了细致平衡统一气体动理学格式在外力场作用下模拟非平衡气体动力学的能力。

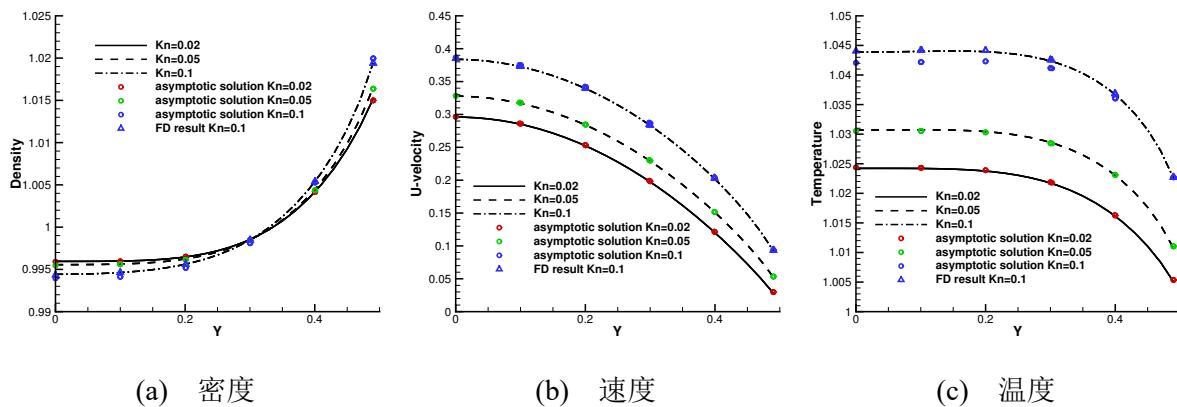
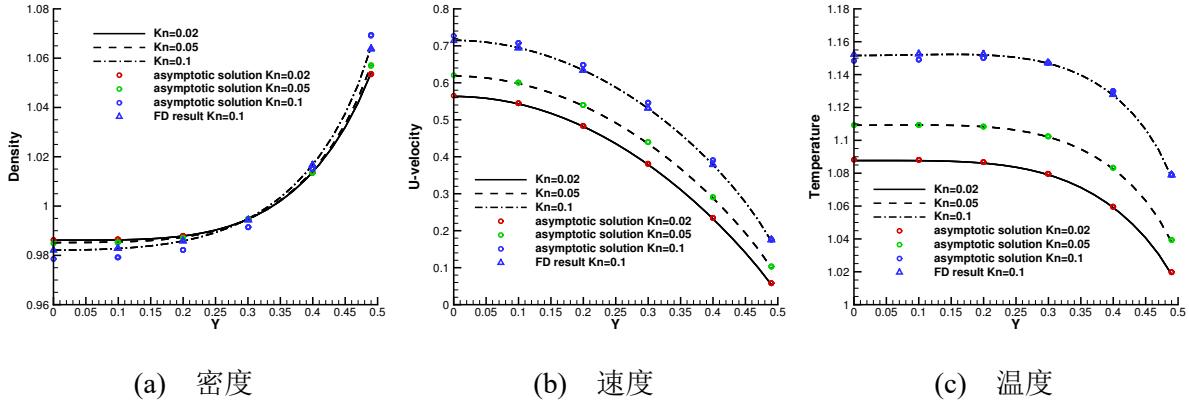
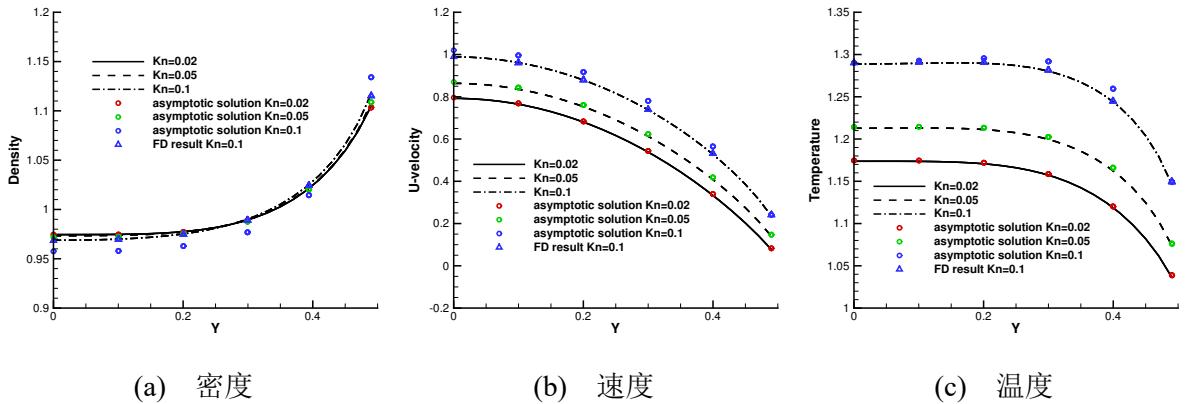


图 3.2 $\alpha = 1$ 时的密度、速度和温度的剖面图

3.3.2 静止热传导问题

考虑一个被封闭在两个无限平行的平板 $x = 0$ 和 $x = 1$ 之间的气体, 在垂直于两个平板的恒定外力场下, 两个平板保持着不同的温度。这是一个典型的 Rayleigh-Bénard 对流问题设定^[111, 112], 但在里我们仅研究静止的热传导问题, 来评估由于外力场热流的贡献。这在一些参数接近其临界值之前是可能的, 例如在不可压缩极限下的瑞利数 $Ra < Ra_c \simeq 1700$ 。

图 3.3 $\alpha = 2$ 时的密度、速度和温度的剖面图图 3.4 $\alpha = 3$ 时的密度、速度和温度的剖面图

在这种情况下，可以用两种方法来描述流体的演化过程。这个静止系统里，一维 Navier-Stokes-Fourier 方程在外力为 x 方向的情况下退化成，

$$\frac{\partial}{\partial y} p = \rho \phi_x, \quad (3.20)$$

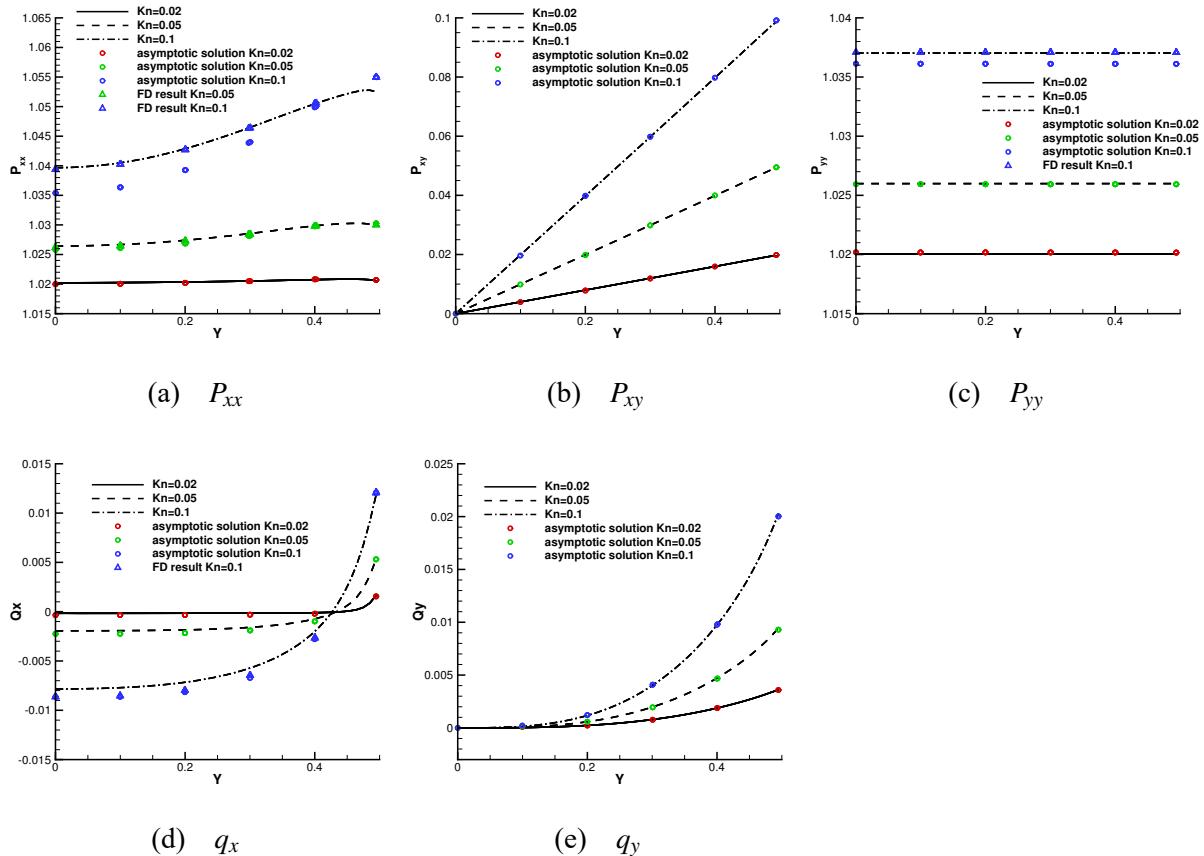
$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa(y) \frac{\partial}{\partial x} T \right) = 0, \quad (3.21)$$

其中 κ 是流体的热传导系数。与此同时，定常的一维 BGK 方程可以写成，

$$u \frac{\partial f}{\partial x} + \phi_x \frac{\partial f}{\partial u} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{Kn} \rho (f^+ - f), \quad (3.22)$$

其中平均碰撞频率是 $1/\tau = 2\rho/\sqrt{\pi}Kn$. 这里所有的流动物理量已经默认是无量纲的。正如在第 2 节中分析的，来自外力项的共享将影响气体会内的传热过程，使得区域内的温度分布有别于 NSF 系统 (3.21) 给出的解析解。

我们使用 WBUGKS 方法进行数值模拟，在 $[0, 1]$ 的物理空间使用 100 个均匀网格，在 $[-5, 5]$ 的速度空间使用 201 个均匀速度网格，并考虑 Newton-Cotes 数值积分公式。


 图 3.5 $\alpha = 1$ 时应力和热流的剖面图

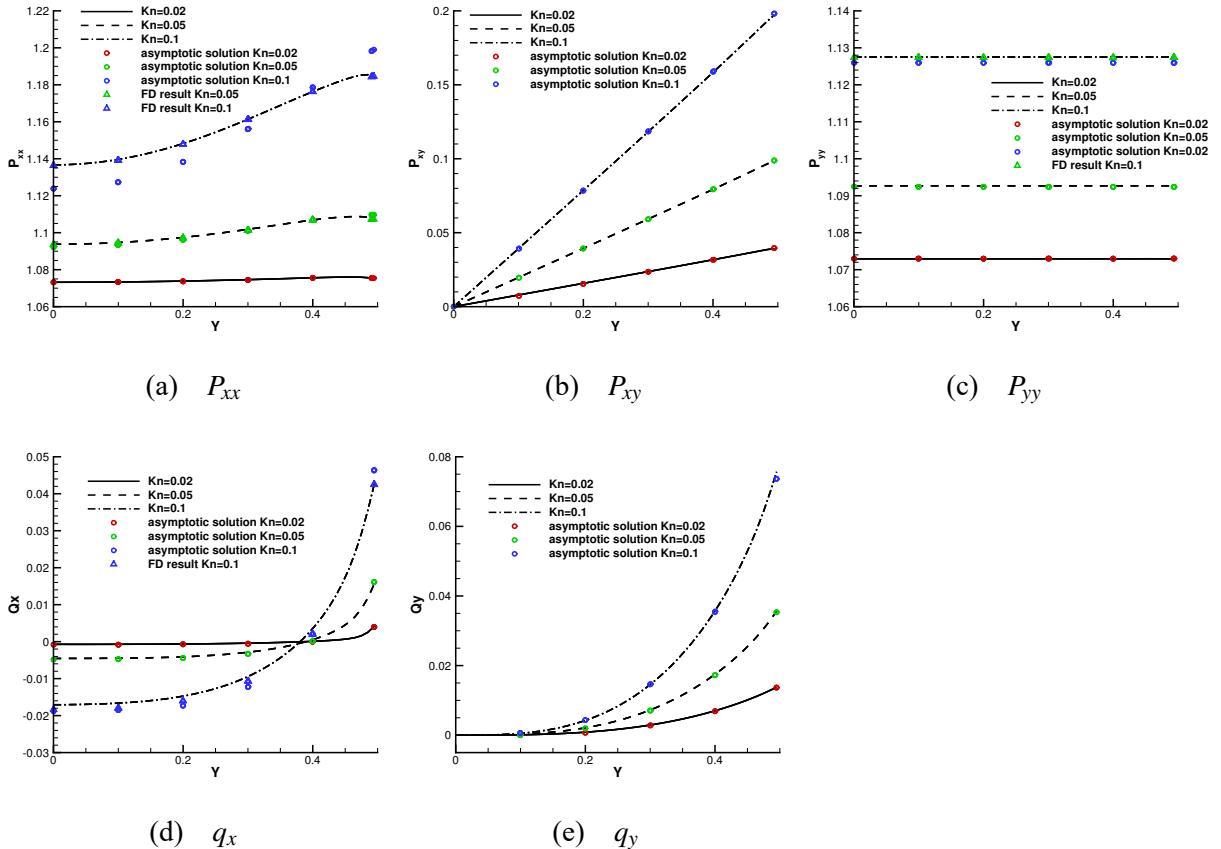
冷壁与热壁的温度比设为 $r = T_c/T_h = 0.9$ 。初始的气体处于处处均匀的静止状态，温度与热壁温度相同。不同大小的外力加速度 ϕ_x 在沿着温度梯度的方向被加入到该系统，其值为 $\phi_x = \pm 0.001 \pm 0.002 \pm 0.003 \pm 0.005 \pm 0.01, \pm 0.02 \pm 0.05 \pm 0.1 \pm 0.2 \pm 0.5 \pm 1.0$ 。这里外力的方向与壁面温差引起的热流方向一致。设置的两壁面温度比和外力的绝对值均较小的原因是为壁免出现对流，以获得静止的热传导解。

当考虑外力对热流的净贡献时，为了尽量减少边界对于结果的影响，我们使用流场中心 $x = 0.5$ 的解进行分析没有宏观流动的定常解。参考状态下的克努森数设置为 $Kn = 0.001, 0.01$ 和 0.1 。根据式 (3.22) 中 BGK 方程隐含的普朗特数 $Pr = 1$ 的近似，我们可以可以通过 $\kappa = c_p/Pr = \tau p c_p/Pr$ 计算气体的导热系数，其中 c_p 是定压比热。动理学和 Fourier 定律给出的热流定义分别是

$$\vec{q}_{Kinetic} = \frac{1}{2} \int (u - U) ((u - U)^2 + \xi^2) f d\Xi, \vec{q}_{Fourier} = -\kappa \nabla T,$$

其偏差可以用 $\Delta q = |\vec{q}_{Kinetic} - \vec{q}_{Fourier}|$ 表示。

表 3.1, 3.2, 和 3.3 给出了不同克努森数 $Kn = 0.001, 0.01$ 和 0.1 下的收敛解，收敛判据设置为守恒量的平均残差小于 1.0×10^{-8} 。可以看到，热流的量级随着克努森数 Kn_{ref} 增加，与碰撞时间 $\tau \propto Kn$ ，以及相应的热导系数 κ 成正相关关系。 $\vec{q}_{Kinetic}$ 和

图 3.6 $\alpha = 2$ 时应力和热流的剖面图

$\vec{q}_{Fourier}$ 与外力之间的偏差如图所示。很明显，随着外力的增大(减小)，热流沿其方向相应被增大(抑制)。在外力相对较弱的近平衡状态下，热流的改变量似乎与外力的大小直接成正比。这些数值模拟的结果与第 2 节中的理论结果一致。根据模拟的结果，即使在 Navier-Stokes 的宏观体系中，我们可以提出一个由外力诱导的热流贡献项，

$$\vec{q}_{force} = \frac{(K+3)e^{-\sigma/\tau}}{4} \frac{\sigma \vec{\phi} \rho}{\lambda}, \quad (3.23)$$

其中 $K=2$ 是单原子气体分子的内自由度， $\vec{\phi}$ 是外力加速度。如理论分析部分提到的，这里的演化时间 σ 可以看作是一个气体的物理参数，用以评估气体分子在其平均自由程内对热量的输运能力。这一定义方法类似于热传导系数 κ 的定义，即在宏观水平上评价流体导热的能力。我们可以采用以下方法来评价特征时间 σ ，

$$\sigma = C\tau, \quad (3.24)$$

其中 C 是一个和特定气体、流动状态和方程 (3.15) 中截断阶数相关的物性参数。在这个例子中，我们选取 $C=6.6$ ，基于上面的公式，我们可以计算出相应的理论解，在图3.9中由实线表示。可以看出，在较小的外力作用下，数值解与理论解吻合情况很好。

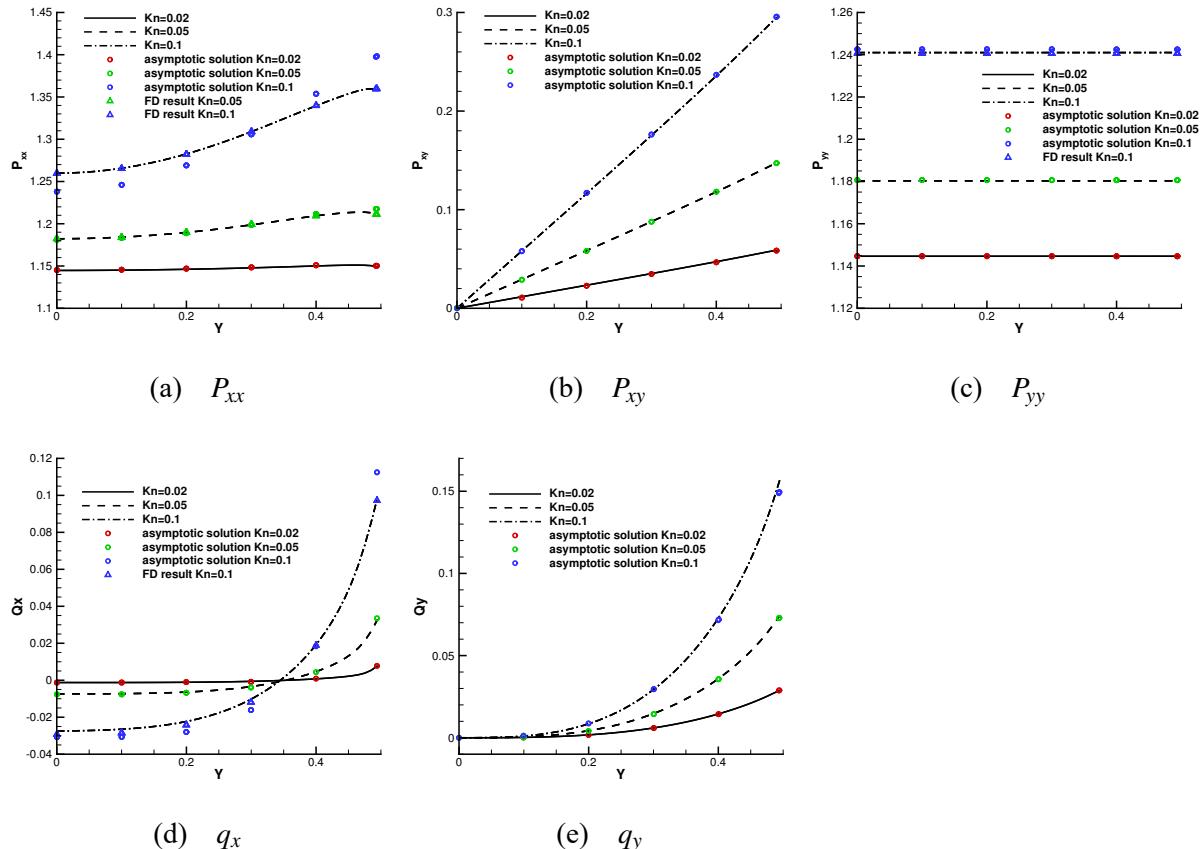


图 3.7 $\alpha = 3$ 时应力和热流的剖面图

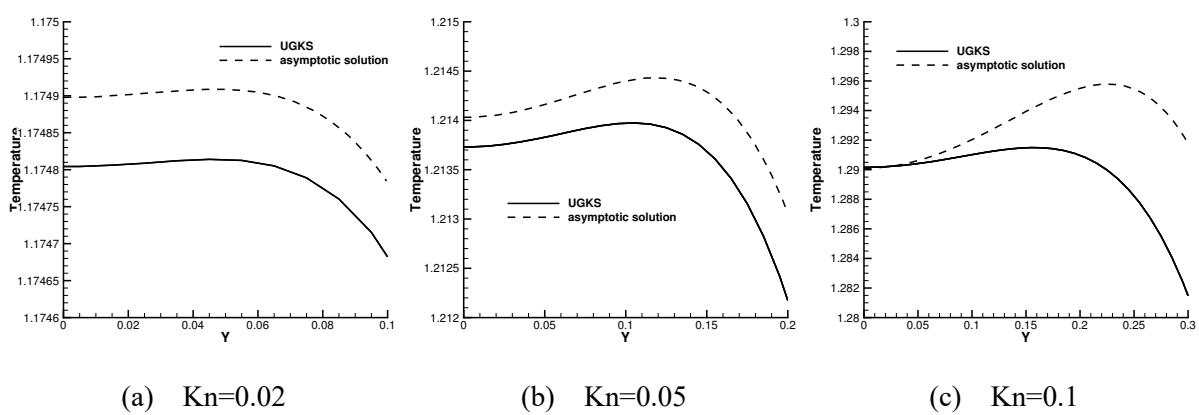


图 3.8 在 $\alpha = 3$ 时中心位置的温度剖面图

因此，在当前的一维传热问题中，热流应包含有外力的贡献项，

$$\vec{q}_{Kinetic} = \vec{q}_{Fourier} + \vec{q}_{force} + O(\tau^2), \quad (3.25)$$

其中 $\vec{q}_{Fourier}$ 是温度梯度驱动的 Fourier 热流。随着克努森数和外力量级的增大，数值模拟的结果与理论解之间的偏差逐渐增加。这并不奇怪。如图3.9所示，随着克努森数和碰撞时间 τ 的增加，方程 (3.25) 中基于流体连续性的建模逐渐失去了其有效性。而在高度非平衡的情况下，气体分布函数是远离 Maxwellian 平衡分布的。在现有的统计力学框架下，我们很难找出这种差异的根源。例如，在驱动方腔问题里，即使没有外力的热量，热量依然可以从低温区输运到高温区。幸运的是，我们可以通过数值模拟定量地研究非平衡状态气体的演化规律。

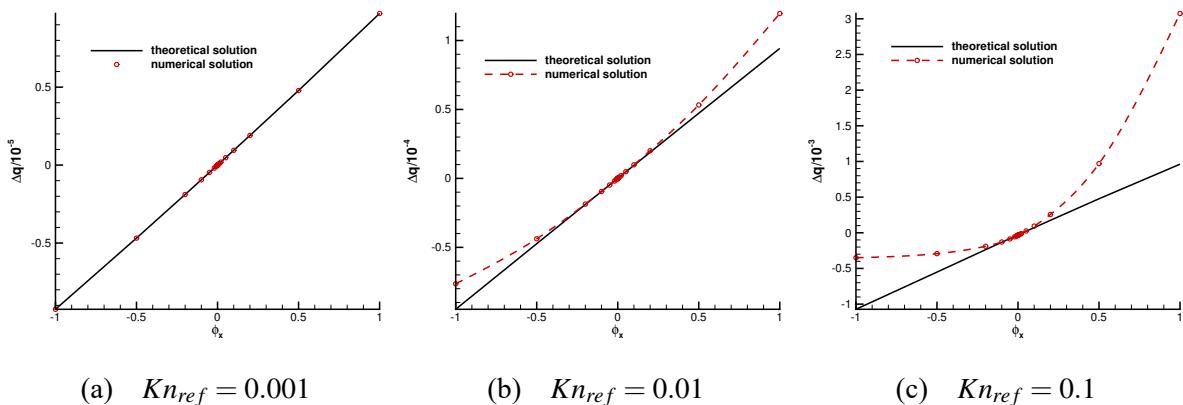


图 3.9 $\Delta q = |\vec{q}_{Kinetic} - \vec{q}_{Fourier}|$ 随外力加速度 ϕ_x 的变化。红圈为数值模拟结果，红虚线为样条拟合线，黑线为线性理论给出的解析解

3.3.3 外力场下的驱动方腔流动

和之前外力下的一维问题相比，驱动方腔是一个更复杂的系统。上板的驱动作用将在腔体内部引入剪应力主导的横场耗散结构。在这个问题中，考虑一个正方形方腔，其四边长度均为 $L = 1$ 。其上壁面沿切向匀速移动 (x 正方向)，速度为 $U_w = 0.15$ 。在 y 的负方向上存在一系列的外力加速度 ϕ_y 。将力的大小 ϕ_y 表示为 g 。在此系统中，我们可以定义无量纲的弗劳德数，来量化上板驱动的速度和外力作用的重要性。

$$Fr = \frac{U_w}{\sqrt{gL}}. \quad (3.26)$$

流场的初始密度和压力根据外力下的流体静力学精确解给定，

$$\rho(x, y, t=0) = \exp(2\phi_y y), p(x, y, t=0) = \exp(\phi_y y), U(x, y, t=0) = 0.$$

初始的速度分布函数，在流场中处处是基于当地密度和温度的 Maxwellian 分布。壁面温度保持在 $T_w = 1$ ，采用完全的 Maxwell 漫反射边界条件。基于 Shakhov 模型方程，我

表 3.1 在 $x = 0.5$ 和 $Kn_{ref} = 0.001$ 时的定常热传导解

ϕ_x	$q_x/10^{-5}$ (Kinetic)	$q_x/10^{-5}$ (Fourier)	$\Delta q/10^{-5}$	$\kappa/10^{-4}$	$\nabla T/10^{-2}$
-1.0	2.972591	3.897530	-0.924939	5.146952	7.572480
-0.5	4.891944	5.360283	-0.468339	5.282272	10.14770
-0.2	5.084255	5.272859	-0.188604	5.283241	9.980360
-0.1	5.158110	5.252662	-0.094552	5.277817	9.952346
-0.05	5.202174	5.249522	-0.047348	5.273871	9.953838
-0.02	5.230964	5.250001	-0.019037	5.271195	9.959797
-0.01	5.241005	5.250429	-0.009424	5.270205	9.962479
-0.005	5.246134	5.250869	-0.004735	5.269701	9.964267
-0.003	5.248152	5.251060	-0.002908	5.269498	9.965012
-0.002	5.249229	5.251114	-0.001885	5.269395	9.965310
-0.001	5.250274	5.251248	-0.000974	5.269292	9.965757
0	5.251317	5.251304	0.000013	5.269192	9.966055
0.001	5.252173	5.251324	0.000849	5.269291	9.965906
0.002	5.253001	5.251110	0.001891	5.269391	9.965310
0.003	5.253776	5.250895	0.002881	5.269490	9.964714
0.005	5.255487	5.250781	0.004706	5.269691	9.964118
0.01	5.259658	5.250244	0.009414	5.270177	9.962181
0.02	5.267780	5.248820	0.018960	5.271113	9.957711
0.05	5.291033	5.243666	0.047367	5.273672	9.943108
0.1	5.326649	5.231825	0.094824	5.276869	9.914646
0.2	5.382336	5.192234	0.190102	5.282511	9.829114
0.5	5.565373	5.087006	0.478367	5.283018	9.628990
1.0	7.600921	6.628320	0.972601	5.145493	12.88177

表 3.2 在 $x = 0.5$ 和 $Kn_{ref} = 0.01$ 时的定常热传导解

ϕ_x	$q_x/10^{-4}$ (Kinetic)	$q_x/10^{-4}$ (Fourier)	$\Delta q/10^{-4}$	$\kappa/10^{-3}$	$\nabla T/10^{-2}$
-1.0	4.159400	4.923694	-0.764294	5.285504	9.315470
-0.5	4.671721	5.109767	-0.438046	5.276438	9.684125
-0.2	4.960925	5.147284	-0.186359	5.271861	9.763697
-0.1	5.054733	5.149716	-0.094983	5.270331	9.771148
-0.05	5.101326	5.149271	-0.047945	5.269553	9.771744
-0.02	5.129215	5.148576	-0.019361	5.269082	9.771297
-0.01	5.138495	5.148263	-0.009768	5.268923	9.771000
-0.005	5.143113	5.148028	-0.004915	5.268844	9.770701
-0.003	5.144938	5.147840	-0.002902	5.268812	9.770403
-0.002	5.145862	5.147825	-0.001963	5.268797	9.770403
-0.001	5.146787	5.147810	-0.001023	5.268781	9.770403
0	5.147720	5.147716	0.000004	5.268766	9.770254
0.001	5.148651	5.147704	0.000947	5.268753	9.770254
0.002	5.149587	5.147692	0.001895	5.268740	9.770254
0.003	5.150518	5.147599	0.002919	5.268727	9.770105
0.005	5.152359	5.147494	0.004865	5.268699	9.769956
0.01	5.156859	5.147195	0.009664	5.268633	9.769509
0.02	5.166055	5.146598	0.019457	5.268504	9.768615
0.05	5.193455	5.144636	0.048819	5.268104	9.765634
0.1	5.238829	5.140213	0.098616	5.267432	9.758481
0.2	5.328186	5.127297	0.200889	5.266018	9.736577
0.5	5.585669	5.053397	0.532272	5.261136	9.605148
1.0	5.975517	4.779735	1.195782	5.247476	9.108642

表 3.3 在 $x = 0.5$ 和 $Kn_{ref} = 0.1$ 时的定常热传导解

ϕ_x	$q_x/10^{-3}$ (Kinetic)	$q_x/10^{-3}$ (Fourier)	$\Delta q/10^{-3}$	$\kappa/10^{-2}$	$\nabla T/10^{-2}$
-1.0	3.325840	3.675841	-0.349999	5.364258	6.852468
-0.5	3.806697	3.959946	-0.292500	5.333717	7.424362
-0.2	4.128662	4.317960	-0.189298	5.292371	8.158840
-0.1	4.216921	4.346055	-0.129135	5.278889	8.232900
-0.05	4.257409	4.343608	-0.086200	5.272100	8.238860
-0.02	4.280470	4.336932	-0.056461	5.267998	8.232602
-0.01	4.287953	4.333683	-0.045730	5.266625	8.228578
-0.005	4.291654	4.331940	-0.040286	5.265938	8.226343
-0.003	4.293129	4.331243	-0.038114	5.265663	8.225449
-0.002	4.293863	4.330894	-0.037031	5.265525	8.225002
-0.001	4.294597	4.330467	-0.035870	5.265387	8.224406
0	4.295335	4.330040	-0.034705	5.265249	8.223810
0.001	4.296064	4.330467	-0.033705	5.265111	8.223512
0.002	4.296792	4.329264	-0.032472	5.264974	8.222767
0.003	4.297520	4.328916	-0.031396	5.264836	8.222320
0.005	4.298975	4.328062	-0.029087	5.264560	8.221128
0.01	4.302596	4.326083	-0.023487	5.263871	8.218446
0.02	4.309760	4.321574	-0.011815	5.262488	8.212038
0.05	4.330614	4.305378	0.025236	5.258318	8.187748
0.1	4.363158	4.269412	0.093746	5.251281	8.130230
0.2	4.419476	4.162659	0.256817	5.236785	7.948883
0.5	4.504970	3.535368	0.969598	5.188042	6.814457
1.0	4.233966	1.159689	3.074266	5.073368	2.285840

们使用普朗特数等于 $Pr = 0.67$ 的单原子气体进行数值模拟。参考克努森数的选取为 $Kn_{ref} = 0.001, 0.075, 1.0$, 相应的特征量由方腔底部的初始量的数值确定 $\rho_{ref} = 1.0$ and $p_{ref} = 1.0$ 。气体参考状态下的动力学粘性系数可以通过变径硬球模型 (Variable Hard Sphere) 确定,

$$\mu_{ref} = \frac{5(\alpha+1)(\alpha+2)\sqrt{\pi}}{4\alpha(5-2\omega)(7-2\omega)} Kn_{ref}. \quad (3.27)$$

这里我们选用 $\alpha = 1.0$ and $\omega = 0.5$ 来恢复硬球模型单原子分子的结果, 其对应的粘性模型是

$$\mu = \mu_{ref} \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^\theta, \quad (3.28)$$

其中 T_{ref} 是参考温度, θ 是硬球模型的指数。在这个算例里, 我们取 $\theta = 0.72$ 。当地的碰撞时间可以通过动理学的关系得到 $\tau = \mu/p$ 。在物理计算域中, 我们使用 45×45 的均匀网格, 在 $Kn_{ref} = 0.001$ 时, 我们将速度空间离散为 28×28 , 并考虑高斯积分^[113], 而在 $Kn_{ref} = 0.075, Kn_{ref} = 1.0$ 时, 则使用 89×89 的非均匀网格^[114,115], 以捕捉非平衡流动结构。

3.3.3.1 近平衡流

对于驱动方腔问题, 其上表面的驱动和外力项的存在是流体运动和能量输运的两个来源。在 $Kn_{ref} = 0.001$ 时, 于外力场作用下的初始流体静力学分布解受到来自上壁面突然运动的扰动。由于剪应力的贡献, 腔内流体开始运动。在这里, 由于在外力方向上存在的初始流体密度和局部克努森数的变化, 相应的流动规律也会比没有外力的情况要复杂得多在本研究中, 我们取 y 负方向上的外力加速度, $\phi_y = 0.0, -0.1, -0.3, -0.5, -1.0$ 。图3.10中给出了在近连续介质流动极限下, 即 $Kn_{ref} = 0.001$ 时方腔中心线上的流体速度分布。图3.11给出了 $\phi_y = 0, -0.1, -0.3$ 时方腔内的速度等值面, 矢量场和流线图。如图所示, 在外力较小的情况下, 存在一个几乎覆盖整个方腔区域的大涡, 而在角点处有两个小的角涡。 U -速度沿垂直中心线的分布是单调曲线。然而, 随着外力的增加, 可以看到流态发生了巨大的变化。在强外力的作用下, 涡旋被逐渐限制在腔体的上半部分, 而下部高密度区域形成了一个较弱的沿相反方向流动的旋涡。同时, 沿方腔中心线的 U -速度曲线上出现了拐点, 其中方腔下半部分的流体几乎是静止的。实际上, 如图3.12a 所示, 在一个相对大的外力场下, 在竖直中心线存在明显的密度变化。因此, 随着局部克努森数的显著增加, 方腔上部的流动可能已经处于过渡流域, 沿竖直中心线的克努森数分布如图3.12b 所示。

方腔内的热量与流动输运是密切耦合的。图3.13给出了 $Kn_{ref} = 0.001$ 时不同的外力下的温度等值面和热流结果。在无外力的情况下, 右上角的粒子碰撞会导致宏观层面的粘性升温效应, 结果参见图3.13a。由于粒子间的剧烈碰撞, 此时左上角的膨胀冷

却效应不明显，其他三个边界附近的温度几乎是均匀的。这与连续介质流动下的 NS 解是一致的。随着外力大小的增加，局域的热区和冷区不再停留在拐角区域，而是逐渐传播到方腔内部。其穿透的深度与主涡的尺度有关。从图中3.13和图3.10中的结果可以看出，热区的中心在负向 U -速度接近其最大值的位置附近，而冷区的中心位置比热区稍高。在当前的克努森 $Kn_{ref} = 0.001$ 下，靠近方腔底部的粒子分布函数不会和 Maxwellian 分布之间有太大的偏差。由于存在明显的不均匀温度分布，热流矢量在方腔上部和温度梯度的方向一致。而在无明显温差的下部近静止区，热流呈现出逐渐与外力场方向对齐的趋势。除了温度梯度的热传导，外力场对于粒子分布函数的调制提供了丰富的非平衡热量输运机制。

3.3.3.2 非平衡流

现在让我们将注意力转移到 $Kn_{ref} = 0.075$ 和 $Kn_{ref} = 1.0$ 的稀薄流域的问题里。在这里，外力加速度从 $\phi_y = 0.0$ 连续变化至 $\phi_y = -1.0$ ，均沿 y 轴负方向。如图3.14和3.18所示，过渡流域中的粒子穿透和更显著的掺混使得在所有外力情况下均存在一个覆盖整个方腔的主涡结构。在这里，由外力场引起的稳定效应表现为降低涡流的旋转速度。随着外力的增加，中心线上的速度分布曲线变平，表明涡旋运动较弱。

在非平衡的流动问题里，外力场会对传热过程产生更大的影响。如图3.15和3.19所示，在没有外力场的情况下，膨胀冷却和粘性加热的机制均对热流有明显的贡献，其中可以观察到从冷区到热区的反 Fourier 热流。这一观察结果与 DSMC 和 UGKS 的参考解^[17,116]一致。随着外力的增加，热量传递的结构逐渐转向竖直方向，和外力方向平行。如之前阐明的，即使有来自等温上壁的粘性加热作用，由于外力驱动的能量传输，使得温度降低，导致上部近壁区域的冷却。

在图3.16中，我们首先展示在 $Kn_{ref} = 0.075$ 时沿水平中心线上的 y 方向热流分布。由于在腔体中心附近的垂直方向上几乎没有温度变化，热流的贡献可以主要归因于外力的作用。可以观察到，外力的增加在相同方向上增加了热通量 q_y 的大小。图3.17a 显示了腔体中心附近 q_y 的水平分布。在较弱的力场中，所有曲线几乎彼此平行，它们之间的间隔与力的大小相关。在图3.17b 中，我们绘制了腔体中心 $x = y = 0.5$ 的热流 $q_y - q_0$ ，其中 q_0 是由傅里叶定律计算的 y 方向热流 $q_0 = -\kappa \partial T / \partial y$ 。数值结果用红色圆圈表示，红色线条是离散数值结果的样条拟合曲线。基于第 2 节中的理论分析，我们也用黑线画出了基于局部碰撞时间、密度和温度的外力诱导热流的理论结果，即 $\vec{q}_{force} = K + 3e^{-\sigma/\tau} \sigma \vec{\phi}_y \rho / 4\lambda$ ，其中内部自由度 $K = 1$ ，特征时间 $\sigma = 3.5\tau$ 。可以看出，在力相对较小的线性区域中，这两种解决方案彼此一致。随着外力的增加，高度非平衡的气体动力学使得外力驱动热流偏离线性理论解。

图3.18和3.19显示了在克努森数 1.0 时流场中的速度、温度等值面和热流分布。

图3.20给出了沿水平中心线的 y 方向的热流分布。在这里，所有热流曲线在不同的外力加速度下相互交叉。随着外力的增加， q_y 曲线逐渐变平，最终发展成沿 x 方向的单调递减曲线。在克努森数 $Kn_{ref} = 1.0$ 时，腔内气体处于高度非平衡态。例如，在 $\phi_y = -0.5$ 的情况下，热流在腔体下半部分几乎与外力方向平行，并且热量以非 Fourier 形式从上部冷区传递到底部热区。这种现象和天体物理中的重力-热不稳定性是一致的，其中热能在重力系统中积聚到中央的核心区域。在非平衡状态下，温度梯度、应力张量和外力以高度非线性方式促进气体演化，这已经超出了第 2 节给出的线性理论适用的范围。幸运的是，UGKS 是一种可靠的数值实验工具，可以用来捕捉这个复杂的物理现象。

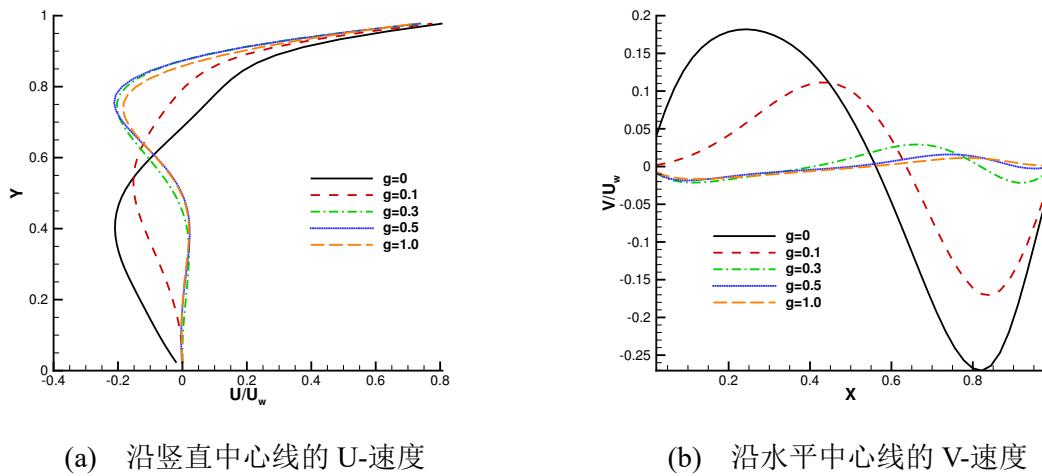


图 3.10 $Kn_{ref} = 0.001$ 时沿方腔中心线的速度分布

3.4 小结

由于存在的较大的密度和局部克努森的变化，外力场下的气体动力学本质上是一个多尺度的流动问题。本章在气体动理论和多尺度细致平衡统一气体动理论格式的基础上，研究了在不同量级外力下非平衡流动中的流体和热量输运问题。对于近似平衡流动，基于动理论输运方程的线性渐近理论和数值模拟，我们给出了沿外力方向的附加诱导热流的定量定义，并对其进行了验证。基于驱动方腔流动，本章系统地研究了非平衡流在外力场作用下的演化规律。在所有的克努森流域中，我们解释了外力对于流态和传热的动态作用。在数值实验的基础上，我们提出了外力诱导热流与加速度之间的关系，即， $\vec{q}_{force} \propto \vec{\phi}$ ，并在所有流态下进行了定量评估。它可以作为一个增广的本构关系，为 Navier-Stokes 方程提供更加完整的能量输运的补充。值得一提的是，在稀薄和高度非平衡的状态下，外力项的强化传热很容易超过原始 Fourier 热扩散的贡献。这种外力驱动的热流可以用来解释从高引力势区的冷区到低引力势的热量传递及其引起的重力-热不稳定性现象。研究外力作用下的多尺度非平衡流动现象，对于理解

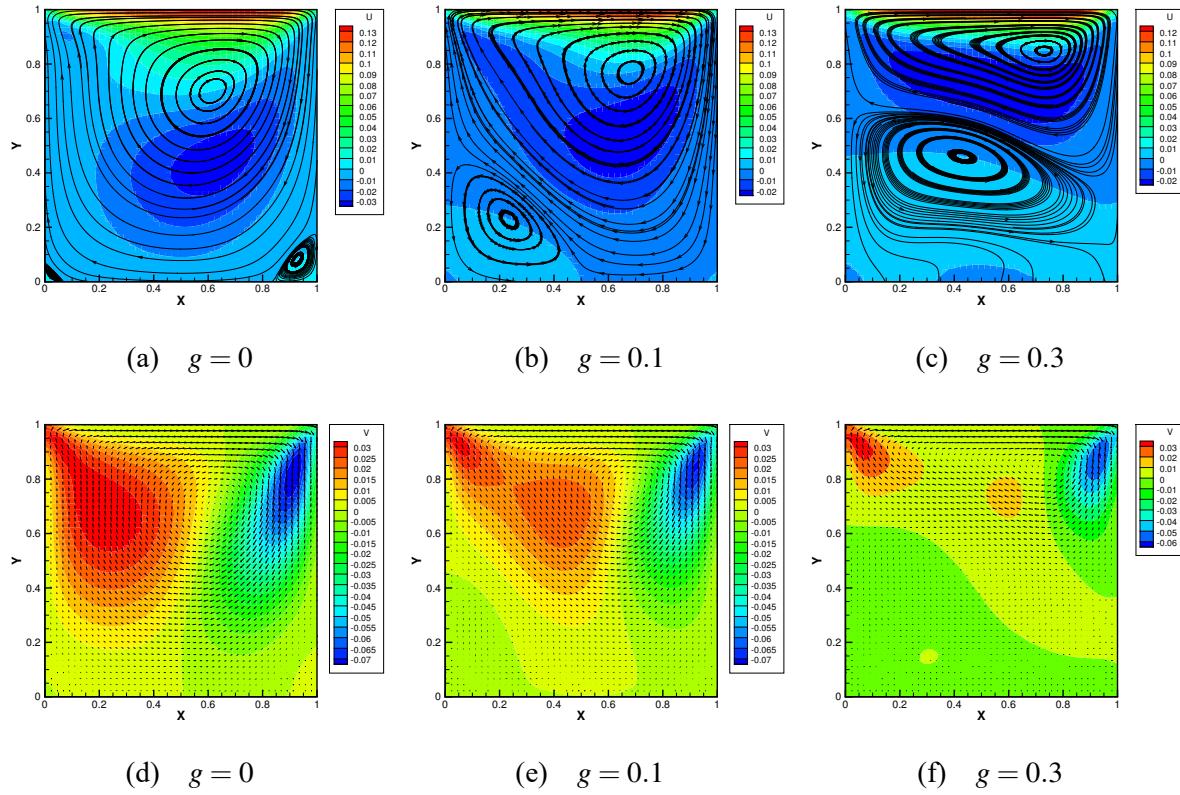


图 3.11 $Kn_{ref} = 0.001$ 时方腔内的速度 (U,V), 流线和速度矢量

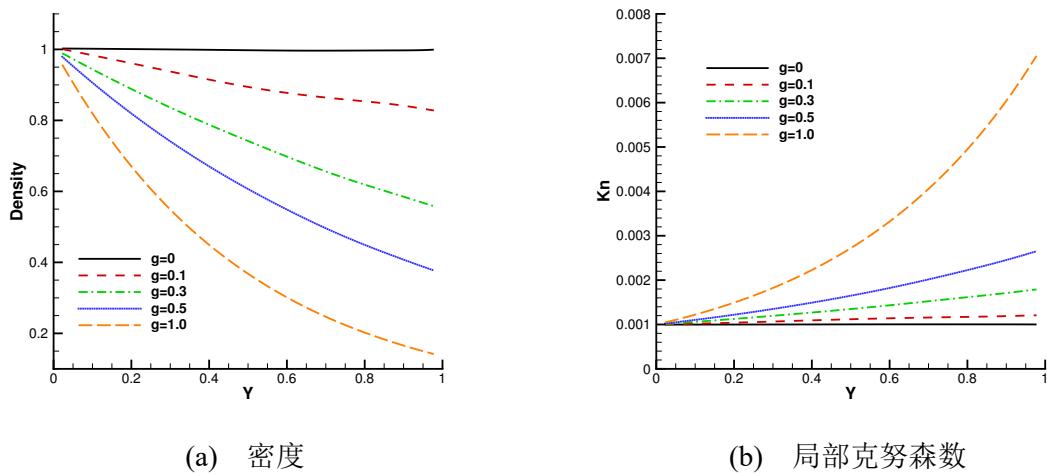
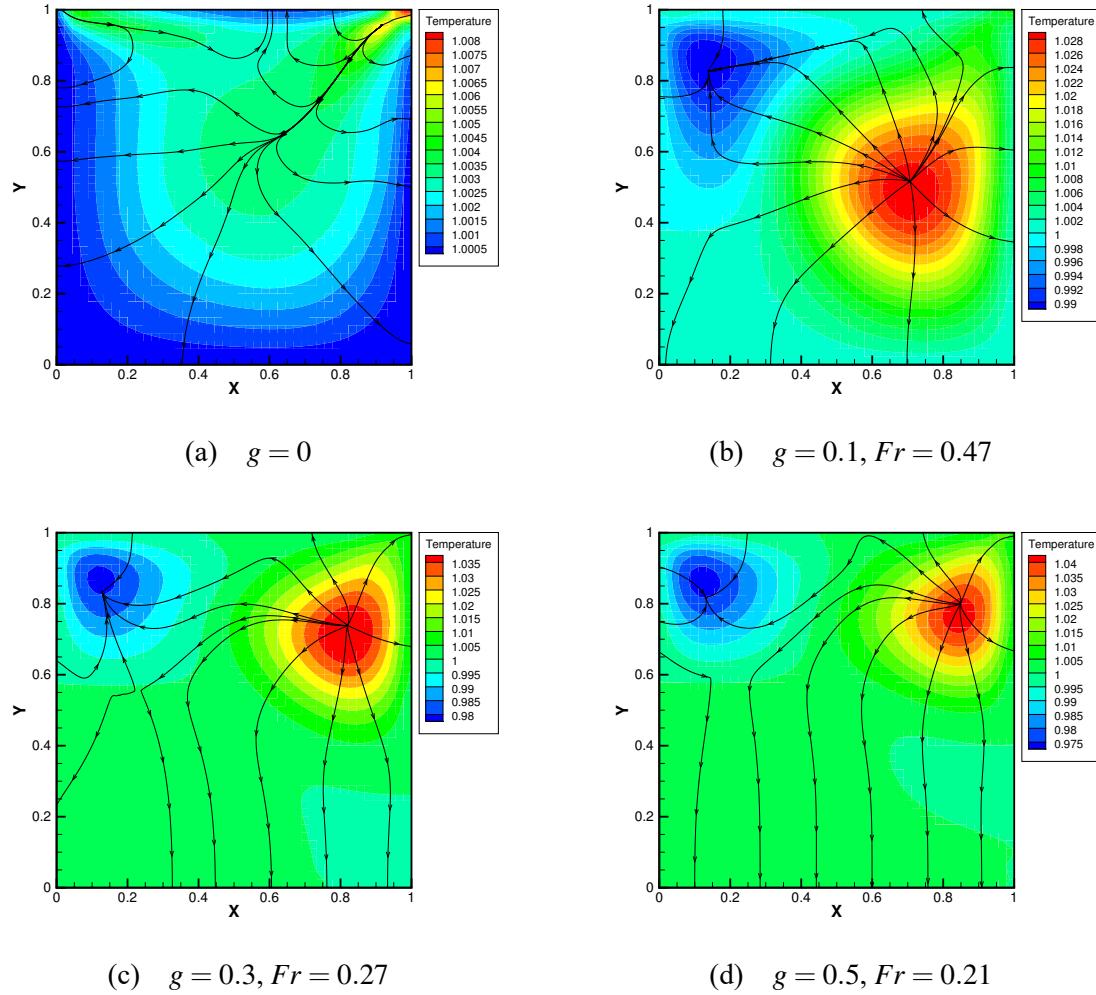
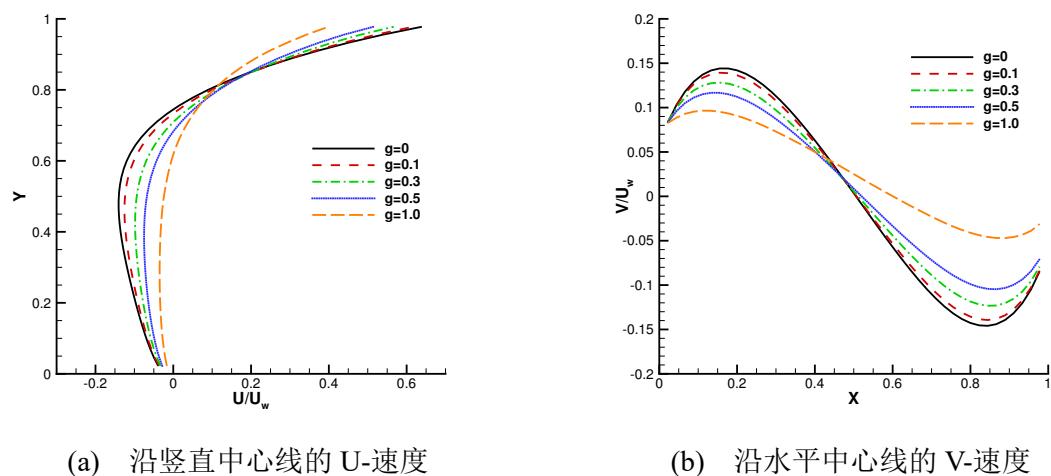


图 3.12 $Kn_{ref} = 0.001$ 时沿方腔竖直中心线的密度和局部克努森数分布

图 3.13 $Kn_{ref} = 0.001$ 时方腔内的温度和热流分布图 3.14 $Kn_{ref} = 0.075$ 时沿方腔中心线的速度分布

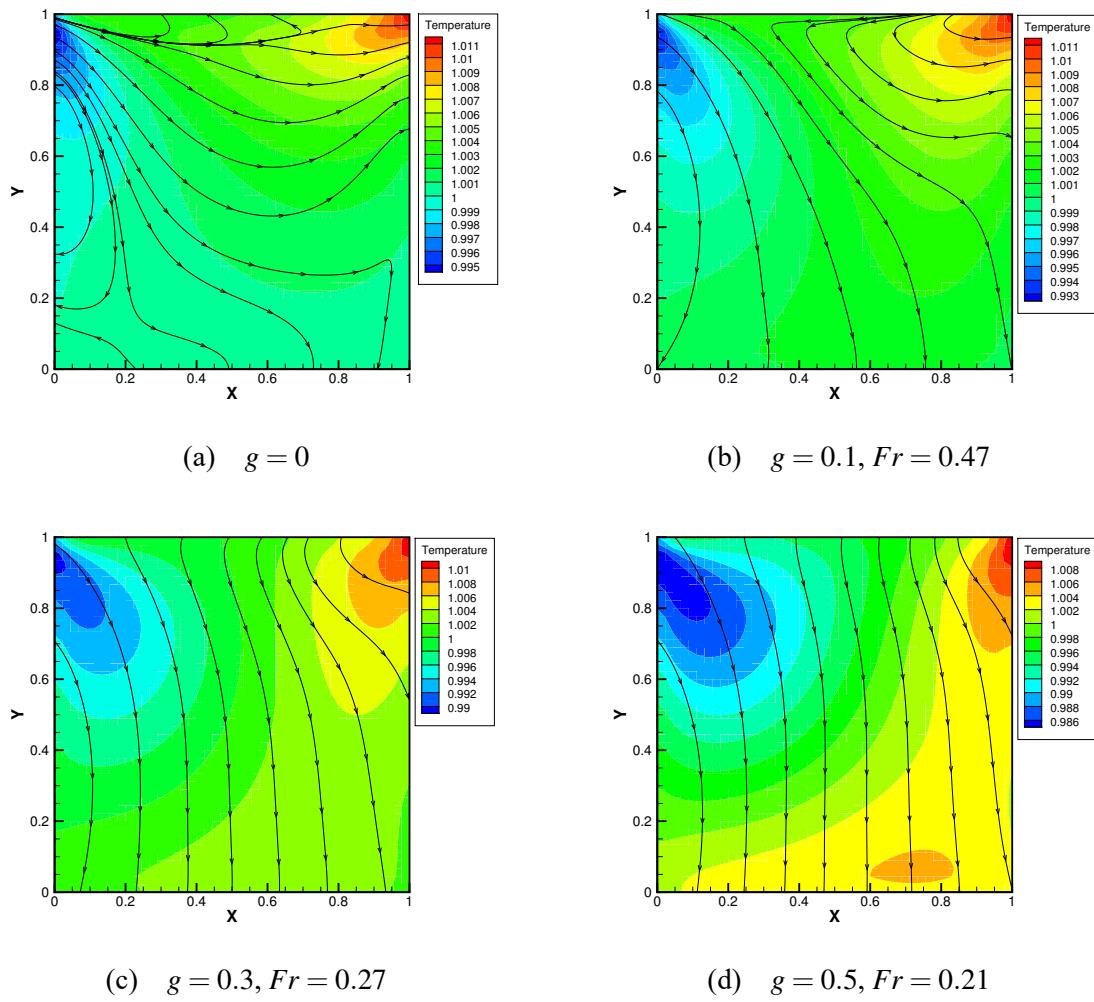


图 3.15 $Kn_{ref} = 0.075$ 时方腔内的温度和热流分布

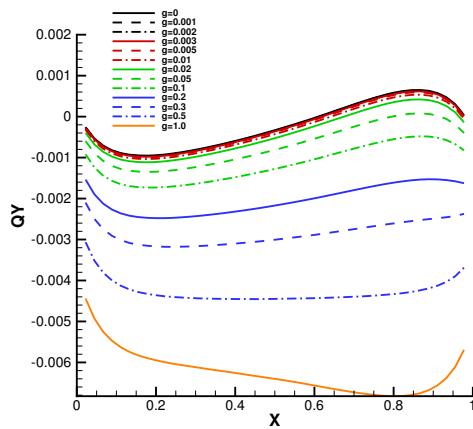
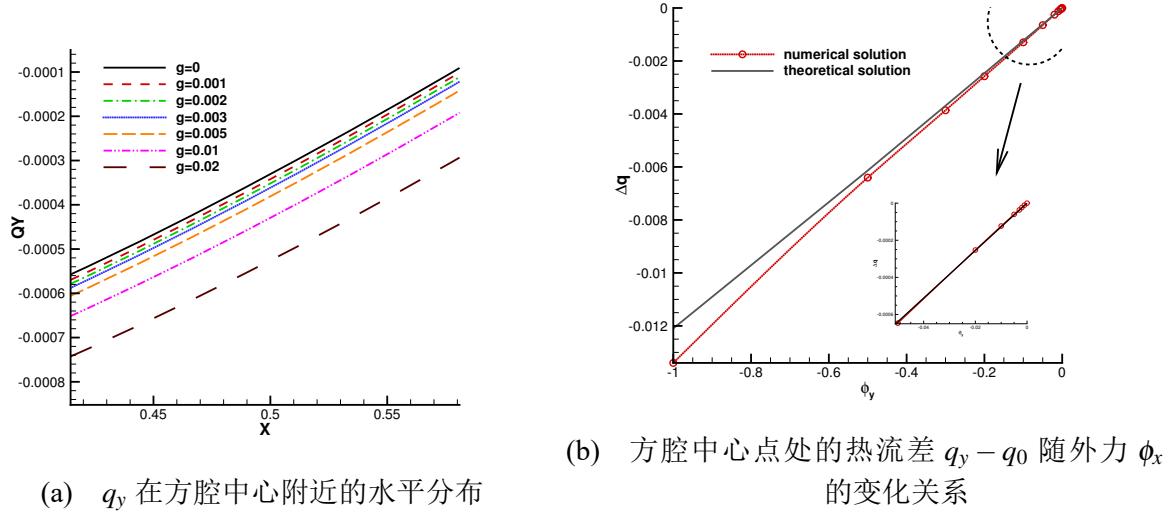
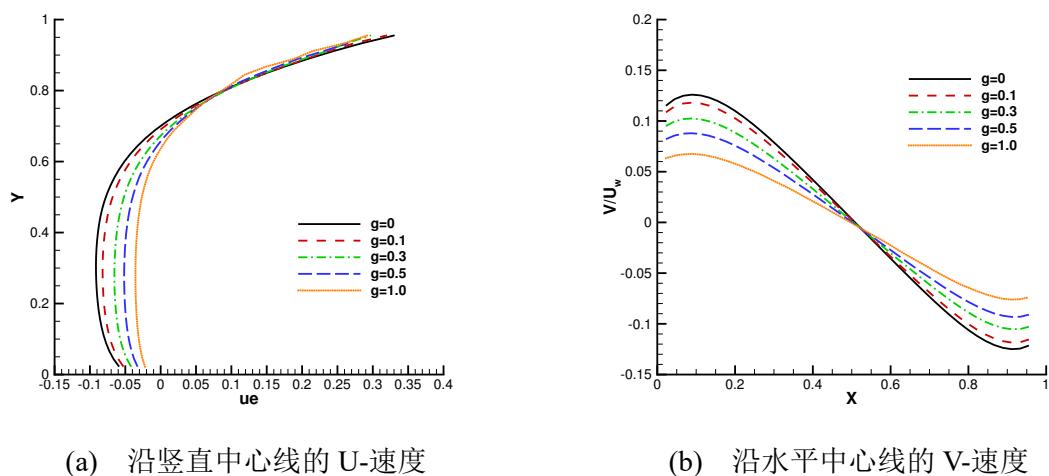


图 3.16 $Kn_{ref} = 0.075$ 时热流沿方腔水平中心线的分布

大尺度大气环流具有重要意义。


 图 3.17 $Kn_{ref} = 0.075$ 时方腔中心附近的热流分布

 图 3.18 $Kn_{ref} = 1.0$ 时沿方腔中心线的速度分布

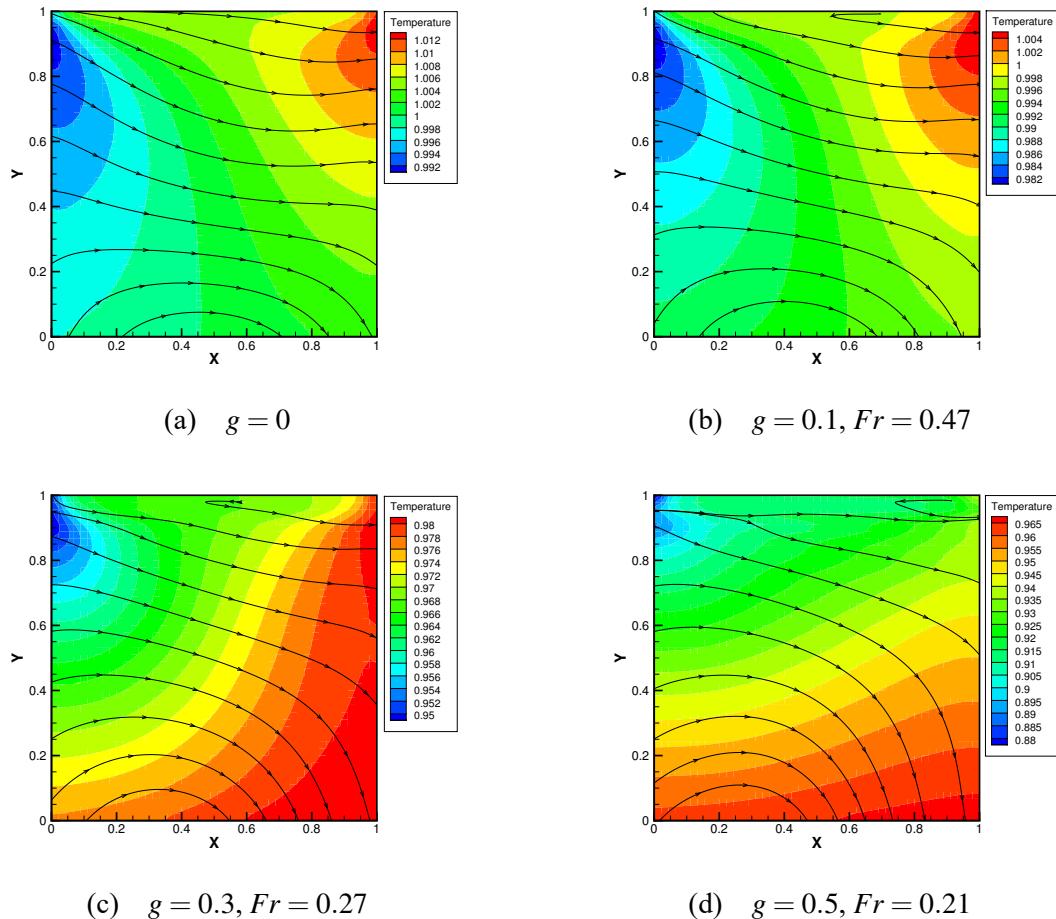


图 3.19 $Kn_{ref} = 1.0$ 时方腔内的温度和热流分布

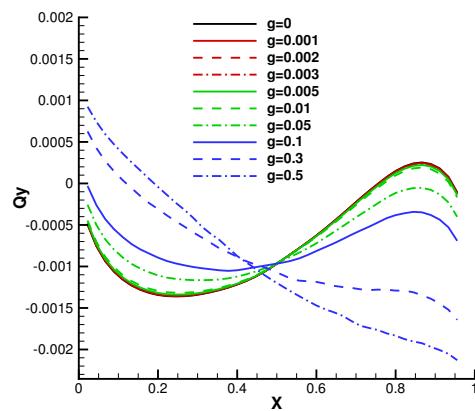


图 3.20 $Kn_{ref} = 1.0$ 时热流沿方腔水平中心线的分布

第四章 速度空间自适应的统一气体动理学格式

4.1 简介

气体流动在不同的特征尺度上呈现显著不同的行为，并可以通过不同的控制方程和相应的数值算法进行描述。在平均自由程尺度，粒子传输和碰撞可以在 Boltzmann 方程中基于算子分裂的形式进行描述。求解 Boltzmann 方程最常用的数值方法是直接的 Boltzmann 求解器^[54] 和直接模拟 Monte Carlo(DSMC) 方法^[64]。在前一种方法中，一个离散的粒子速度空间（相空间）被构造，使用自由迁移和碰撞两个分裂的算子以更新粒子分布函数；另一方面，DSMC 方法模拟的是和上面相同的物理过程，但在这里大量的试验粒子被用来表征分布函数，而碰撞项的处理是基于概率论的。由于粒子输运和碰撞过程的分裂处理，数值模拟的网格尺寸和时间步长应受平均自由程和碰撞时间的限制，计算资源消耗与使用的离散速度点或测试粒子的数量成正比。与此同时，Euler 和 Navier-Stokes 方程通常用于描述宏观尺度的流动演化。可压缩 Navier-Stokes 方程的求解器主要基于无粘流的 Riemann 求解器和粘性项的中心格式的耦合。在计算中更新的是宏观的流动物理量。因此，和动理学方法相比，连续介质流动求解器的计算成本大大降低。

近年来航空航天工业的迅猛发展对复杂流场的精确和高效数值模拟提出了全新的挑战。在空间飞行器的再入问题中，从稀薄的大气层上部到着陆的连续介质区域，其周围的气体密度越来越大。换句话说，以飞船为参考系，在这一过程中观察到的是跨尺度的流动物理。此外，在高超声速巡航过程中，由于飞行器的几何效应，局部的非平衡流动结构往往出现在飞行器周围，如激波、稀疏波、边界层、尾迹湍流等。根据数值模拟的结果^[117]，在近空间通过高超声速飞行器的气流的局部克努森数甚至可以包括五个数量级的变化范围。为了有效地计算这样多尺度问题中的气动力和热效应，在不同的流域内相应地采用不同的数值方法是一个很自然的想法。因此，一些将连续介质和动理学的方法相结合的混合算法被开发出来，并用于模拟连续和稀薄流动物理在单一流动模拟中可能共存的多尺度问题^[6, 52, 118-127]。在这些数值算法中，流场的主流结构通过针对连续流的算法高效地模拟，而动理学方法仅用于解析高度耗散的非平衡区域。由于 Boltzmann 方程中存在的复杂五重碰撞积分给计算带来的困难，目前用于混合算法的主要动理学求解器仍然是 DSMC 方法。在模拟中，需要确定一个动态的判据来判断连续介质描述失效的位置并对流场进行分区。由于在大规模 CPU 并行计算中，由于计算域已经被分为不同计算节点上的块结构，因此这样的混合算法的数值实现也是直接的。

在动理学理论中, Chapman-Enskog 展开^[37]提供了连接 Navier-Stokes 和 Boltzmann 方程的解的桥梁。尽管这种基于流场时空连续性的渐近展开类方法在数学上很有吸引力, 但其基本没有给出有关宏观方程适应性尺度的有效信息, 例如对 NS 模型中流体微团的定量描述。通过引入包含 Burnett 和 Super-Burnett 等高阶项得到的增广流体动力学方程仅在一些特定的流动问题中取得了一些成功, 但这些方程依然缺乏明确的建模尺度信息。此外, 尽管根据一般经验性的结果, NS 方程在 $Kn \leq 0.01$ 时是有效的, 但由于在克努森数定义中特征尺度选取的不唯一性, 想要提出一个普适的对 Chapman-Enskog 展开和 NS 解失效情况的判据相当困难。在粒子平均自由程和碰撞时间尺度上, 动理学方法在对于气体分布函数演化的描述中包含有更多的自由度, 而在缓冲区中这些信息需要收缩为简并的宏观流动变量, 如密度, 动量, 能量, 应力和热通量。基于离散的粒子方法和基于连续微分方程的方法之间固有的不相容性也给混合算法的数值实现带来巨大的困难。通常, 需要在动理学适用区域和连续介质适用区域构造一个缓冲区用于信息交换, 而这个区域在复杂流动的非定常演化过程中很难被精确定义。

如前文所述, 尽管 UGKS 是一种渐近保持 (Asymptotic-Preserving, AP) 格式, 在数值模拟中的时间步长不受微观粒子碰撞时间的限制, 但由于统一的离散速度空间的存在, 巨额的计算成本和内存需求仍然限制了该方法在航空航天工业中更广泛的应用。在本章中, 我们提出一种在统一框架内实现连续和离散粒子速度空间动态耦合的自适应统一气体动理学格式 (Adaptive Unified Gas-Kinetic Scheme, AUGKS)。在近平衡区, Chapman-Enskog 展开可以在连续的速度空间里构造分布函数的形式, 而在需要时, 相应的离散分布函数也可以根据展开式重构出来。因而在这些区域的数值模拟中, 我们仅需要存储和更新宏观的守恒量。随着非平衡效应的增大, 离散速度空间被引入以直接跟踪分布函数的演化过程。基于 Chapman-Enskog 展开的形式, 我们提出了一种定量的连续-离散速度空间的切换准则, 并通过数值实验对其进行了验证。与原有的 UGKS 方法相比, 当前的自适应方法在近平衡流态下释放了大量的内存负载, 加快了计算速度, 但仍能提供相同精度的物理解。由于在整个流场中统一地使用了粒子分布函数, 即离散更新或连续重构, AUGKS 避免了传统方法基于区域分解实现区分和连接宏观流体和微观动理学求解器的做法。换句话说, 在 AUGKS 中不需要传统的缓冲区匹配来自宏观方法和微观方法的流场解。

本章首先介绍自适应统一气体动理学格式的数值实现和速度空间切换判据, 之后提供了一些的数值实验以验证该方法的表现, 最后给出结论。

4.2 速度空间自适应的统一气体动理学格式

在本节中, 我们将介绍速度空间自适应的统一气体动力学格式 (AUGKS) 的原理和数值实现方案。首先介绍了在连续速度空间和离散速度空间的气体动理学格式。之后,

我们详细讨论了连续介质与动理学描述方法的耦合以及速度空间变换的切换准则。为了简单起见，下面的介绍基于二维的情况，而扩展到三维是直接的。

4.2.1 离散速度空间的统一气体动理学格式

考虑控制体内的网格平均量，

$$\mathbf{W}_{x_i,y_j,t^n} = \mathbf{W}_{i,j}^n = \frac{1}{\Omega_{i,j}(\mathbf{x})} \int_{\Omega_{i,j}} \mathbf{W}(x, y, t^n) dx dy,$$

$$f_{x_i,y_j,t^n,u_l,v_m} = f_{i,j,l,m}^n = \frac{1}{\Omega_{i,j}(\mathbf{x})\Omega_{l,m}(\mathbf{u})} \int_{\Omega_{i,j}} \int_{\Omega_{l,m}} f(x, y, t^n, u, v) dx dy du dv,$$

其中 $\Omega_{i,j}$ 和 $\Omega_{l,m}$ 是离散物理空间和速度空间的网格面积。在 UGKS 中，宏观守恒量和微观粒子分布函数的更新是耦合的，

$$\mathbf{W}_{i,j}^{n+1} = \mathbf{W}_{i,j}^n + \frac{1}{\Omega_{i,j}} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \sum_r \mathbf{F}_r \Delta L_r dt, \quad (4.1)$$

$$f_{i,j,l,m}^{n+1} = f_{i,j,l,m}^n + \frac{1}{\Omega_{i,j}} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \sum_r u_r f_r \Delta L_r dt + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega_{i,j}} Q(f) dt, \quad (4.2)$$

其中 \mathbf{F}_r 是宏观守恒量的通量， f_r 是界面处的时变粒子分布函数， ΔL_r 是网格界面的长度。

在 UGKS 中，通量函数 \mathbf{F}_r 是通过界面分布函数计算出的，而其可以根据 Shakhov 模型方程的演化解构造，

$$f(\mathbf{x}, t, \mathbf{u}) = \frac{1}{\tau} \int_{t^0}^t f^+(\mathbf{x}', t', \mathbf{u}) e^{-(t-t')/\tau} dt' + e^{-(t-t^0)/\tau} f_0(\mathbf{x}^0, t^0, \mathbf{u}), \quad (4.3)$$

其中 $\mathbf{x}' = -\mathbf{u}(t-t')$ 是粒子运动轨迹， f_0 是在初始时刻 $t=t^0$ 的分布函数形式。使用网格界面 $x_{i+1/2}=0, y_j=0$ 和初始时刻 $t^n=0$ 的简化记法，并考虑碰撞时间 τ 为局部常数，则方程 (4.3) 中的积分分解可以写作，

$$f(0, 0, t, u_l, v_m, \xi) = \frac{1}{\tau} \int_0^t f^+(x', y', t', u_l, v_m, \xi) e^{-(t-t')/\tau} dt' + e^{-t/\tau} f_0(x^0, y^0, 0, u_l, v_m, \xi), \quad (4.4)$$

其中 $x' = -u_l(t-t')$ 和 $y' = -v_m(t-t')$ 是粒子运动轨迹， x^0, y^0 是 t 时刻穿过网格界面粒子在上一时间步的位置。这里 f_0 表示的是第 n 时间步的粒子分布函数。由于考虑的是单原子分子，内自由度 ξ 在这里表示粒子在 z 方向的随机热运动。这里的尺度自适应的演化解给出了式 (4.2) 中 f_r 的形式，并提供了一个多尺度的演化模型，其中来自于宏观流体动力学平衡态和微观动理学非平衡态的流动物理被统一地描述。

在具体的数值实现中，考虑二阶精度，初始的粒子分布函数 f_0 被重构至

$$f_0(x, y, 0, u_l, v_m, \xi) = \begin{cases} f_{i+1/2,j,l,m}^L + \sigma_{i,j,l,m} x + \theta_{i,j,l,m} y, & x \leq 0, \\ f_{i+1/2,j,l,m}^R + \sigma_{i+1,j,l,m} x + \theta_{i+1,j,l,m} y, & x > 0, \end{cases} \quad (4.5)$$

其中 $f_{i+1/2,j,l,m}^L$ 和 $f_{i+1/2,j,l,m}^R$ 重构出的界面左右两端的初始分布函数的值，而 σ 和 θ 分别是其在 x 和 y 方向上的斜率。此外，平衡态分布函数被构造为，

$$f^+ = f_0^+ [1 + (1 - H[x])\bar{a}^L x + H[x]\bar{a}^R x + \bar{b}y + \bar{A}t] = f_0^+ (1 + \bar{a}^{L,R} x + \bar{b}y + \bar{A}t), \quad (4.6)$$

其中 f_0^+ 是 $(x=0, y=0, t=0)$ 时的初始平衡分布函数， $H[x]$ 是 Heaviside 阶梯函数。系数 $(\bar{a}^{L,R}, \bar{b}, \bar{A})$ 是平衡态分布函数在时空方向上的导数，其可以展开成以下的形式，

$$\begin{aligned}\bar{a}^{L,R} &= \bar{a}_1^{L,R} + \bar{a}_2^{L,R} u + \bar{a}_3^{L,R} v + \bar{a}_4^{L,R} \frac{1}{2}(u^2 + v^2 + \xi^2) = \bar{a}_\alpha^{L,R} \psi_\alpha, \\ \bar{b} &= \bar{b}_1 + \bar{b}_2 u + \bar{b}_3 v + \bar{b}_4 \frac{1}{2}(u^2 + v^2 + \xi^2) = \bar{b}_\alpha \psi_\alpha, \\ \bar{A} &= \bar{A}_1 + \bar{A}_2 u + \bar{A}_3 v + \bar{A}_4 \frac{1}{2}(u^2 + v^2 + \xi^2) = \bar{A}_\alpha \psi_\alpha.\end{aligned}$$

界面上的平衡分布函数 f_0^+ 取决于相应的宏观量 \mathbf{W}_0 ，并通过相容性条件确定，

$$\int (f^+ - f)|_{x=0,t=0} \psi dudvd\xi = 0,$$

具体的有，

$$\int f_0^+ \psi_\alpha dudvd\xi = \mathbf{W}_0 = \sum_{u_l > 0} f_{i+1/2,j,l,m}^L \psi dudvd\xi + \sum_{u_l < 0} f_{i+1/2,j,l,m}^R \psi dudvd\xi.$$

在界面处的平衡态确定后，其空间导数 \bar{a}^L, \bar{a}^R 可以根据对应守恒量的斜率得到，

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x}\right)^L &\simeq \frac{\mathbf{W}_0 - \mathbf{W}_i}{\Delta x^-} = \int \bar{a}^L f_0^+ \psi dudvd\xi = \bar{M}_{\alpha\beta}^0 \bar{a}_\beta^L, \\ \left(\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x}\right)^R &\simeq \frac{\mathbf{W}_{i+1} - \mathbf{W}_0}{\Delta x^+} = \int \bar{a}^R f_0^+ \psi dudvd\xi = \bar{M}_{\alpha\beta}^0 \bar{a}_\beta^R,\end{aligned}$$

其中 $\bar{M}_{\alpha\beta}^0 = \int f_0^+ \psi_\alpha \psi_\beta dudvd\xi$ 是一个由已知量构成的矩阵，而 $\bar{\mathbf{a}}^{L,R} = (\bar{a}_1^{L,R}, \bar{a}_2^{L,R}, \bar{a}_3^{L,R}, \bar{a}_4^{L,R})^T$ 。这里 $\Delta x^+ = x_{i+1} - x_{i+1/2}$ 和 $\Delta x^- = x_{i+1/2} - x_i$ 是网格界面到左右网格中心的距离。关于切向导数 \bar{b} ，其可以根据下面的关系得到，

$$\int \bar{b} \psi f_0^+ dudvd\xi = \sum_{l,m} (\theta_{i,j,l,m} H[u_l] + \theta_{i+1,j,l,m} (1 - H[u_l])) \psi.$$

时间导数 \bar{A} 和守恒量的时间变化率对应，

$$\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial t} = \int \bar{A} f_0^+ \psi dudvd\xi,$$

其可以根据相容性关系的导数确定，

$$\frac{d}{dt} \int (f^+ - f) \psi dudvd\xi|_{x=0,t=0} = 0.$$

基于 Euler 方程的迭代关系，可以给出

$$-\int u \frac{\partial f^+}{\partial x} \psi dudvd\xi - \int v \frac{\partial f^+}{\partial y} \psi dudvd\xi = \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial t} = \int \bar{A} f_0^+ \psi dudvd\xi,$$

其中空间导数已经从初始平衡态重构 (4.6) 中得到, 然后有

$$\int \bar{A} f_0^+ \psi dudvd\xi = - \int (\bar{a}^{L,R} u + \bar{b} v) f_0^+ \psi dudvd\xi,$$

从中我们可以确定 $\bar{A} = (\bar{A}_1, \bar{A}_2, \bar{A}_3, \bar{A}_4)^T$ 的值。

在所有的系数确定后, 时间演化的界面分布函数可以写作,

$$\begin{aligned} f(0, 0, t, u_l, v_m, \xi) = & \left(1 - e^{-t/\tau}\right) f_0^+ \\ & + \left(\tau(-1 + e^{-t/\tau}) + te^{-t/\tau}\right) \bar{a}^{L,R} u_l f_0^+ \\ & + \left(\tau(-1 + e^{-t/\tau}) + te^{-t/\tau}\right) \bar{b} v_m f_0^+ \\ & + \tau \left(t/\tau - 1 + e^{-t/\tau}\right) \bar{A} f_0^+ \\ & + e^{-t/\tau} \left[\left(f_{i+1/2,j,l,m}^L - u_l t \sigma_{i,j,l,m} - v_m t \theta_{i,j,l,m}\right) H[u_l] \right. \\ & \quad \left. + \left(f_{i+1/2,j,l,m}^R - u_l t \sigma_{i+1,j,l,m} - v_m t \theta_{i+1,j,l,m}\right) (1 - H[u_l]) \right] \\ = & \tilde{f}_{i+1/2,j,k,l}^+ + \tilde{f}_{i+1/2,j,k,l}, \end{aligned} \quad (4.7)$$

其中 $\tilde{f}_{i+1/2,j,k,l}^+$ 是平衡态积分相关项, $\tilde{f}_{i+1/2,j,k,l}$ 是来自初始分布的贡献。随着演化时间 t (亦即计算中所用的时间步长) 和碰撞时间 τ 比值的变化, 以上的界面分布函数提供了一个自适应的多尺度演化模型, 可以适用于不同的流域内。在界面分布函数确定后, 相应的宏观通量可以通过其在速度空间的矩确定,

$$\mathbf{F}_r = \int u_l f(0, 0, t, u_l, v_m, \xi) \psi dudvd\xi.$$

在每个控制体内, 需要计算碰撞项 $Q(f)$, 并用于式 (4.2) 中粒子分布函数的更新。在统一气体动理论格子中, $Q(f)$ 的数值处理可以基于精确的 Boltzmann 碰撞项和 Shakhov 模型。

4.2.2 碰撞项的计算方法

近年来, 随着计算资源和能力的快速进步, 已有一些计算方法以确定论的方式求解 Boltzmann 碰撞积分。1989 年, Goldstein 等^[55] 使用固定的离散速度空间, 在速度网格上模拟离散的碰撞动力学。这种方法非常直观, 但由于碰撞后的粒子速度仍需落在固定的 Euler 网格上, 对计算资源的要求很高。Bobylev 等^[128] 证明了这种方法的计算资源消耗大约是 $O(N^7)$, 其中 N 是每方向上使用的离散速度网格数目, 而这种方法仅具有半阶的收敛精度, 和 DSMC 方法类似。类似地, Sone、Ohwada 和 Aoki 等^[59, 60] 提出了基于有限差分方法的 Boltzmann 求解器, 能够有效计算正激波结构等问题。

与此同时, 另一种思路是通过 Fourier 变换的方法, 在谱空间对 Boltzmann 方程碰撞项进行求解。1988 年, Bobylev^[61] 进行了在空间均匀分布的流场中计算 Maxwell 分子的 Boltzmann 方程的初步尝试, 之后 Pareschi 和 Perthame^[129] 将这种方法拓展到更一

般的碰撞核中，计算消耗在 $O(N^6)$ 量级。在 2006 年，Mouhot 和 Pareschi 提出了一种基于 Carleman^[130] 形式 Boltzmann 碰撞算子的快速谱方法，具有 $O(M^2 N^3 \log N)$ 的计算消耗和谱精度。这里 M 是离散极角需要的网格点数目，在实际计算中其远小于每方向上使用的离散速度网格数，因此这也是目前最方便快捷的 Boltzmann 算法之一，近年来被进一步拓展演绎^[131–133]，广泛应用于非平衡气体的研究中。在这里，我们简要介绍这种方法的基本思路。

首先可以将 Boltzmann 碰撞项写成以下的形式，

$$\begin{aligned} Q(f) &= \int_{\mathcal{R}^3} \int_{\mathcal{S}^2} \Theta g [f(\mathbf{u}') f(\mathbf{u}'_1) - f(\mathbf{u}) f(\mathbf{u}_1)] d\Omega d\mathbf{u}_1 \\ &= \int_{\mathcal{R}^3} \int_{\mathcal{S}^2} \Theta g \left[f(\mathbf{u} + \frac{g\Omega - \mathbf{g}}{2}) f(\mathbf{u}_1 - \frac{g\Omega - \mathbf{g}}{2}) - f(\mathbf{u}) f(\mathbf{u}_1) \right] d\Omega d\mathbf{u}_1 \\ &= 2 \int_{\mathcal{R}^3} \int_{\mathcal{R}^3} \Theta \delta(2\mathbf{y} \cdot \mathbf{g} + \mathbf{y}^2) \left[f(\mathbf{u} + \frac{\mathbf{y}}{2}) f(\mathbf{u}_1 - \frac{\mathbf{y}}{2}) - f(\mathbf{u}) f(\mathbf{u}_1) \right] d\mathbf{y} d\mathbf{u}_1 \quad (4.8) \\ &= 4 \int_{\mathcal{R}^3} \int_{\mathcal{R}^3} \Theta \delta(\mathbf{y} \cdot \mathbf{g} + \mathbf{y}^2) [f(\mathbf{u} + \mathbf{y}) f(\mathbf{u}_1 - \mathbf{y}) - f(\mathbf{u}) f(\mathbf{u}_1)] d\mathbf{y} d\mathbf{u}_1 \\ &= 4 \int_{\mathcal{R}^3} \int_{\mathcal{R}^3} \Theta \delta(\mathbf{y} \cdot \mathbf{z}) [f(\mathbf{u} + \mathbf{y}) f(\mathbf{u} + \mathbf{z}) - f(\mathbf{u}) f(\mathbf{u} + \mathbf{y} + \mathbf{z})] d\mathbf{y} d\mathbf{z}, \end{aligned}$$

其中 $\Theta = \mathcal{B}/g$, $\mathbf{y} = (g\Omega - \mathbf{g})/2$, $\mathbf{z} = \mathbf{u}_1 - \mathbf{u} - \mathbf{y} = -\mathbf{g} - \mathbf{y}$.

在 Boltzmann 方程里，碰撞核的定义是 $\mathcal{B}(\cos \theta, g) = \Theta g$ ，其中 Θ 是微分碰撞截面。对于硬球分子而言，偏转角可以根据 $b = d \cos(\theta/2)$ 的关系确定，其中 b 是两个分子的目标距离， d 是分子直径。因此微分碰撞截面是 $\Theta = b|db|/\sin \theta |d\theta| = d^2/4$ ，碰撞核则是 $\mathcal{B} = gd^2/4$ 。对于一个广义的球对称分子作用势 $\phi(r)$ ，其偏转角是

$$\theta(b, g) = \pi - 2 \int_0^{W_1} \left[1 - W^2 - \frac{4\phi(r)}{mg^2} \right]^{-1/2} dW, \quad (4.9)$$

其中 $W = b/r$ 和 W_1 是方括号内部分的正根。特别地，反幂次势满足以下关系，

$$\mathcal{B} = \frac{b|db|}{\sin \theta |d\theta|} g = c_\alpha(\theta) g^\alpha, \alpha = \frac{\eta - 5}{\eta - 1}, \quad (4.10)$$

其中 $\eta - 1$ 势幂次关系的指数。一个广义的碰撞核可以定义为

$$\mathcal{B} = C''_{\alpha, \gamma} \sin^{\alpha+\gamma-1} \left(\frac{\theta}{2} \right) \cos^{-\gamma} \left(\frac{\theta}{2} \right) g^\alpha, \quad (4.11)$$

其中

$$C''_{\alpha, \gamma} = \frac{\Gamma[(7+\alpha)/2]}{6\Gamma[(3+\alpha+\gamma)/2]\Gamma(2-\gamma/2)} C_\alpha, \quad (4.12)$$

这里 C_α 是在文献^[64] 中给出的数字因子。

在快速谱方法中，分布函数在 $D_L = [-L, L]^3$ 的区域内用每方向上的均匀速度点

$N = (N_1, N_2, N_3)$ 周期化，然后展开成离散的 Fourier 级数形式。

$$\begin{aligned} f(\mathbf{u}) &= \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} \hat{f}_k \exp(i\zeta_k \cdot \mathbf{u}), \\ \hat{f}_k &= \frac{1}{(2L)^3} \int_{D_L} f(\mathbf{u}) \exp(-i\zeta_k \cdot \mathbf{u}) d\mathbf{u}, \end{aligned} \quad (4.13)$$

其中 $\zeta_k = k\pi/L$ 是频率组分。同样地将碰撞算子展开可以得到，

$$\hat{Q}_j = \sum_{l,m=-N_k/2, (l+m=j)}^{N_k/2-1} \hat{f}_l \hat{f}_m [\beta(l,m) - \beta(m,m)], \quad (4.14)$$

其中 $l = (l_1, l_2, l_3), m = (m_1, m_2, m_3)$ ，而核模态是，

$$\begin{aligned} \beta(l,m) &= 4 \int_{\mathcal{R}^3} \int_{\mathcal{R}^3} \delta(\mathbf{y} \cdot \mathbf{z}) \Theta \exp(i\zeta_l \cdot \mathbf{y} + i\zeta_m \cdot \mathbf{z}) d\mathbf{y} d\mathbf{z} \\ &= \int \int \delta(\mathbf{e} \cdot \mathbf{e}') \Theta \left[\int_{-R}^R \rho \exp(i\rho \zeta_l \cdot \mathbf{e}) d\rho \right] \left[\int_{-R}^R \rho' \exp(i\rho' \zeta_m \cdot \mathbf{e}') d\rho' \right] d\mathbf{e} d\mathbf{e}' \\ &= 4 \int \left[\int_0^R \rho \cos(\rho \zeta_l \cdot \mathbf{e}) d\rho \right] \left[\int \delta(\mathbf{e} \cdot \mathbf{e}') \int_0^R \rho' \Theta \cos(\rho' \zeta_m \cdot \mathbf{e}') d\rho' d\mathbf{e}' \right] d\mathbf{e}. \end{aligned} \quad (4.15)$$

l 和 m 模态的分离可以通过数值求积方法实现。之后 Boltzmann 碰撞积分可以在频率空间使用快速 Fourier 变化对卷积进行求解。

上面的谱方法是完全显式的。为了克服 Boltzmann 碰撞项的刚性问题（特别是连续介质极限下），这里我们引入了包含 Shakhov 松弛模型的显-隐混合算子，

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{\Omega_{i,j}} Q(f_{i,j,l,m}) dt = \beta^n Q(f_{i,j}^n, f_{i,j}^n)_{l,m} + (\Delta t - \beta^n) \frac{f_{i,j,l,m}^{(n+1)+} - f_{i,j,l,m}^{n+1}}{\tau_{i,j}^{n+1}}. \quad (4.16)$$

在计算中，先求解方程 (4.1)，之后其在 t^{n+1} 时刻的更新解可以用来构造隐式的 Shakhov 平衡态。如方程 (4.7) 中分析的，来自初始分布和平衡分布的贡献分别正比于因子 $e^{-t/\tau}$ 和 $1 - e^{-t/\tau}$ ，对应于非平衡态向平衡态演化的过程。因此，这里的调节系数可以定义为

$$\beta = \Delta t \exp(-\Delta t / \tau_{i,j}),$$

其中 Δt 是时间步长， $\tau_{i,j}$ 是当地的碰撞时间。这个步骤发挥的作用类似于 Filbet 和金石^[134] 提出的罚方法，它的收敛性和稳定性在文献^[116] 中已有分析。

4.2.3 连续速度空间的统一气体动理论学格式

在分子间剧烈碰撞的连续流中，粒子分布函数接近于局部平衡态，此时 Navier-Stokes 方程是描述宏观流体运动的有效方程。在这种情况下，利用一阶 Chapman-Enskog 展开在每个时间步上构造对应的分布函数是直观的，因而只需要在计算中存储和更新宏观守恒量。

在 Chapman-Enskog 展开中，粒子分布函数基于平衡态和小参数 ϵ 被展成级数形

式,

$$f = f^{(0)} + f^{(1)}\varepsilon + f^{(2)}\varepsilon^2 + \dots,$$

这与 BGK 类松弛模型的迭代形式是等价的^[135],

$$f = f^+ - \tau \frac{D}{Dt} f^+ + \tau \frac{D}{Dt} \left(\tau \frac{D}{Dt} f^+ \right) + \dots, \quad (4.17)$$

其中 $D/Dt = \partial/\partial t + u\partial/\partial x + v\partial/\partial y$ 是相空间的全导数。对于展式 (4.17) 相对碰撞时间 τ 的一阶截断, 分布函数 f 有如下形式,

$$f = f^+ - \tau(f_t^+ + u f_x^+ + v f_y^+) + O(\tau^2).$$

在气体动理学格式中, 按照这个策略, 我们可以将界面上的平衡分布函数在连续的速度空间内展开,

$$f^+(x, t) = f^+(x=0, t=0) \left(1 + a^{l,r}x + b^{l,r}y + At \right),$$

其中 f_0^+ 是 $(x=0, y=0, t=0)$ 时的平衡分布函数。而在式 (4.4) 中每一时间步内的初始分布函数 f_0 可以展开成^[103],

$$f_0 = \begin{cases} f_0^{+(l)} \left(1 + a^l x + b^l y - \tau(a^l u + b^l v + A^l) \right), & x \leq 0 \\ f_0^{+(r)} \left(1 + a^r x + b^r y - \tau(a^r u + b^r v + A^r) \right), & x > 0 \end{cases} \quad (4.18)$$

其中 $f_0^{+(l)}$ 和 $f_0^{+(r)}$ 是对应于界面两侧重构宏观量 $\mathbf{W}_{i+1/2}^{l,r}$ 的平衡态分布函数。其时空导数 $(a^{l,r}, b^{l,r}, A^{l,r})$ 取决于重构的宏观量斜率 $\nabla \mathbf{W}^{l,r}$, 并可以通过和前面 UGKS 相同的方法确定。在平衡态分布函数确定之后, 其空间导数满足性质,

$$\begin{aligned} \int a^l f_0^{+(l)} \psi dudvd\xi &= \nabla_x \mathbf{W}^l, \\ \int a^r f_0^{+(r)} \psi dudvd\xi &= \nabla_x \mathbf{W}^r, \\ \int b^l f_0^{+(l)} \psi dudvd\xi &= \nabla_y \mathbf{W}^l, \\ \int b^r f_0^{+(r)} \psi dudvd\xi &= \nabla_y \mathbf{W}^r. \end{aligned}$$

之后时间导数 $A^{l,r}$ 通过以下计算得到,

$$\begin{aligned} \int A^{l,r} f_0^{+(l,r)} \psi dudvd\xi &= - \int \left(u \frac{\partial f^{+(l,r)}}{\partial x} + v \frac{\partial f^{+(l,r)}}{\partial y} \right) \psi dudvd\xi \\ &= - \int (a^{l,r} u + b^{l,r} v) f_0^{+(l,r)} \psi dudvd\xi. \end{aligned}$$

由于网格界面附近的平衡态分布函数 f^+ 可以用方程 (4.6) 的同样方法构造, 则相应的

网格界面上的分布函数变成,

$$\begin{aligned}
 f(0,0,t,u,v,\xi) = & \left(1 - e^{-t/\tau}\right) f_0^+ \\
 & + \left(\tau(-1 + e^{-t/\tau}) + te^{-t/\tau}\right) (\bar{a}^{L,R} u + \bar{b} v) f_0^+ \\
 & + \tau \left(t/\tau - 1 + e^{-t/\tau}\right) \bar{A} f_0^+ \\
 & + e^{-t/\tau} \left\{ [1 - (t + \tau)(ua^l + vb^l)] H[u] f_0^{+(l)} \right. \\
 & \quad \left. + [1 - (t + \tau)(ua^r + vb^r)] [1 - H[u]] f_0^{+(r)} \right\} \\
 & + e^{-t/\tau} \left[-\tau A^l H[u] f_0^{+(l)} - \tau A^r (1 - H[u]) f_0^{+(r)} \right].
 \end{aligned} \tag{4.19}$$

这里的界面分布函数是关于粒子速度 (u, v) 的连续函数, 不需要使用离散的速度网格对其进行描述。相应的宏观量的通量可以通过其在速度空间的矩给出其理论形式。

4.2.4 自适应的统一气体动理学格式

在多尺度流动问题中, 为了克服大量离散速度网格带来的计算效率降低和内存负载问题, 将连续流和稀薄流求解器耦合, 发展一个具有动态连续-离散速度空间变换的统一框架是可行的。如图4.1所示, 在接近平衡流动区域, 基于 Chapman-Enskog 展开用连续速度空间表示粒子分布函数 (PDF), 从而只需更新宏观流动变量。在非平衡流动区域, AUGKS 自动切换到离散的速度空间来跟踪粒子分布函数的演化。连续和离散的速度空间在一个自适应的界面上连接, 分布函数也由连续解适配到离散的速度网格上。

在具体的数值方法中, 使用式 (4.1) 更新宏观守恒量, 而在非平衡区域, 式 (4.2) 被用来显式地更新粒子分布函数。在自适应的界面附近, 考虑每个时间步 t^n , 如果这里没有记录的 t^{n-1} 时刻的离散速度分布函数, 则其被判断为新生成的非平衡流动网格 (i, j) , 一个相应的局部离散速度空间将被生成, 其中在速度网格 (l, m) 上的粒子分布函数由 Chapman-Enskog 展开的离散形式确定,

$$f_{i,j,l,m} = f_{0(i,j,l,m)}^+ [1 - \tau(a u_l + b v_m + A)], \tag{4.20}$$

其中空间导数 (a, b) 和重构的宏观平均斜率相关 $\nabla \mathbf{W} = (\nabla \mathbf{W}^l + \nabla \mathbf{W}^r)/2$, 而之后 (a, b, A) 的确定方法和前面几节叙述的相同。在当前的算法中, 速度空间的网格生成范围是

$$u \in [U - 3\sqrt{RT}, U + 3\sqrt{RT}], v \in [V - 3\sqrt{RT}, V + 3\sqrt{RT}],$$

其中 (U, V) 是宏观流体速度, T 是温度, R 是气体常数。

为了在自适应界面的相邻单元内更新离散的速度分布函数, 从连续速度空间气体

动理学格式构造的界面分布函数 (4.19) 可以写成离散的形式,

$$\begin{aligned}
 f(0, 0, t, u_l, v_m, \xi) = & \left(1 - e^{-t/\tau}\right) f_0^+ \\
 & + \left(\tau(-1 + e^{-t/\tau}) + te^{-t/\tau}\right) (\bar{a}^{L,R} u_l + \bar{b} v_m) f_0^+ \\
 & + \tau \left(t/\tau - 1 + e^{-t/\tau}\right) \bar{A} f_0^+ \\
 & + e^{-t/\tau} \left\{ [1 - (t + \tau)(u_l a^l + v_m b^l)] H[u_l] f_0^{+(l)} \right. \\
 & \quad \left. + [1 - (t + \tau)(u_l a^r + v_m b^r)] [1 - H[u_l]] f_0^{+(r)} \right\} \\
 & + e^{-t/\tau} \left[-\tau A^l H[u_l] f_0^{+(l)} - \tau A^r (1 - H[u_l]) f_0^{+(r)} \right],
 \end{aligned} \tag{4.21}$$

之后其可以用来计算宏观量和微观分布函数的通量。这样，自适应界面上的通量被完全确定，并可以用来更新宏观流动变量 (4.1) 和粒子分布函数 (4.2)。

在算法中，时间步长由 CFL 条件确定，

$$\Delta t = \text{CFL} \frac{\Delta x \Delta y}{u_{max} \Delta y + v_{max} \Delta x}, \tag{4.22}$$

其中 CFL 是 Courant–Friedrichs–Lewy 数， (u_{max}, v_{max}) 是在 x 和 y 方向上的最大粒子速度。

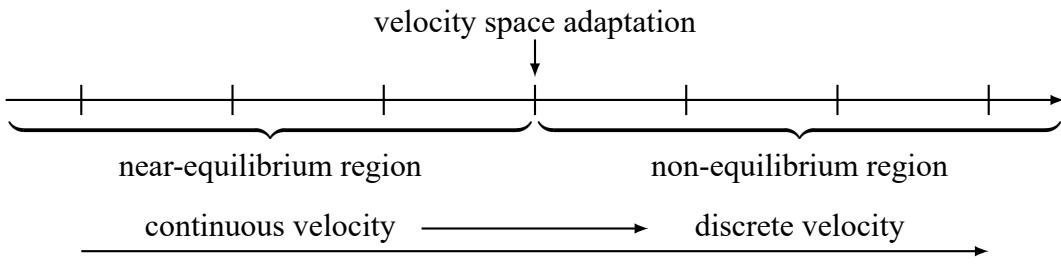


图 4.1 适用于多尺度流动的自适应算法原理示意图

4.2.5 速度空间变换准则

当前自适应算法的精度和效率取决于对速度空间自适应位置的合理选择。从离散速度空间到连续速度空间的过渡位置必须位于连续速度空间气体动理学格式提供的 Navier-Stokes 解仍然有效的区域。针对这个问题，已有研究者提出了一些判断连续介质描述失效的经验参数。Bird^[64] 提出了一个参数 $P = D(\ln \rho)/Dt/v$ 用于 DSMC 对于膨胀流的数值模拟，其中 ρ 为气体密度， v 为碰撞频率，而根据 P 确定的分子平动平衡态描述失效的临界值为 0.05。Boyd 等^[136] 将上述概念推广到基于局部梯度尺度的克努森数 $Kn_{GLL} = \ell |\nabla Q|/Q$ ，其中 ℓ 是局部平均自由程， Q 为感兴趣的宏观量，其临界值同样是 0.05。考虑分布函数的 Chapman-Enskog 展开项，Garcia 等^[137] 提出了一个基于无量纲应力和热流的失效判据 $B = \max(|\tau^*|, |q^*|)$ ，其切换准则是 0.1。Levermore 等^[138] 从分布函数的矩发展出了一个无量纲矩阵。转换参数 ΔV 被定义为这个矩阵的特征值

与它们的平衡态对应值间的偏差，临界值为 0.25。

由于在连续的 GKS-NS 求解器中分布函数在气体演化过程中服从的是 Chapman-Enskog 展开给定的形式，这里我们直接基于 Chapman-Enskog 展开提出一个可供选择的速度空间切换准则。简单起见，用一维情况来说明其原理。当流场中没有间断结构时，式 (4.18) 中 Chapman-Enskog 展开的形式可以退化为，

$$f(x_0, u, t) = f_0^+[1 - \tau(au + A)], \quad (4.23)$$

其时空导数 a, A 可以基于碰撞不变量展开，

$$\begin{aligned} a &= a_1 + a_2 u + a_3 \frac{1}{2}(u^2 + \xi^2) = a_\alpha \psi_\alpha, \\ A &= A_1 + A_2 u + A_3 \frac{1}{2}(u^2 + \xi^2) = A_\alpha \psi_\alpha. \end{aligned}$$

平衡态分布函数 f_0^+ 对应局部的宏观流动量，它的斜率 a 的计算方法前文已有叙述，即

$$\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x} = \int a f_0^+ \psi dud\xi = M_{\alpha\beta} a_\beta,$$

其中 ψ 是碰撞不变量构成的矢量， $M_{\alpha\beta} = \int f_0^+ \psi_\alpha \psi_\beta dud\xi$ ， $\mathbf{a} = (a_1, a_2, a_3)^T$ 。 \mathbf{a} 在一维情况下的解写作，

$$\begin{aligned} a_3 &= 4 \frac{\lambda^2}{3\rho} \left[2 \frac{\partial(\rho E)}{\partial x} - 2U \frac{\partial(\rho U)}{\partial x} + \frac{\partial \rho}{\partial x} \left(U^2 - \frac{3}{2\lambda} \right) \right], \\ a_2 &= 2 \frac{\lambda}{\rho} \left[2 \frac{\partial(\rho U)}{\partial x} - U \frac{\partial \rho}{\partial x} \right] - U a_3, \\ a_1 &= \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} - U a_2 - \frac{1}{2} \left[U^2 + \frac{3}{2\lambda} \right] a_3. \end{aligned}$$

在当前的算法中，空间导数通过下面来确定，

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x} &= \max \left[\left(\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x} \right)^L, \left(\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x} \right)^R \right], \\ \left(\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x} \right)^L &\simeq \frac{\mathbf{W}_i - \mathbf{W}_{i-1}}{\Delta x^-}, \quad \left(\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x} \right)^R \simeq \frac{\mathbf{W}_{i+1} - \mathbf{W}_i}{\Delta x^+}, \end{aligned} \quad (4.24)$$

其中 $\Delta x^+ = x_{i+1} - x_i$ 和 $\Delta x^- = x_i - x_{i-1}$ 是相邻网格中心的距离。时间导数 A 对应于宏观守恒量的时间导数，并可以通过下式确定，

$$\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial t} = \int A f_0^+ \psi d\mathbf{u} = - \int u \frac{\partial f_0^+}{\partial x} \psi d\mathbf{u} = - \int a u f_0^+ \psi dud\xi.$$

总之，Navier-Stokes 方程适用于 Chapman-Enskog 展开是对分布函数在近平衡态的良好近似的基础上。因此，基于无量纲的碰撞时间和时空变化率，一个速度空间的变换准则可以有以下定义，

$$B = \hat{\tau} \max(|\hat{a}|, |\hat{A}|), \quad (4.25)$$

无量纲量的定义为,

$$\hat{\tau} = \frac{\tau(2RT_0)^{1/2}}{L_0}, \hat{a} = aL_0, \hat{A} = \frac{AL_0}{(2RT_0)^{1/2}}, \quad (4.26)$$

其中 R 是气体常数, L_0 和 T_0 是系统的全局参考长度和温度。在数值算例中, 我们将测试现有速度空间切换准则 B 的表现。

4.2.6 算法概述

自适应统一气体动理学格式的数值算法总结如下。在 AUGKS 中, 我们关心的是守恒变量和粒子分布函数的演化过程。在近平衡流动区域里, 粒子分布函数由基于连续速度空间的 Chapman-Enskog 展开表示, 仅需在式 (4.1) 中更新宏观量; 对于非平衡流, 则使用式 (4.2) 显式地更新粒子分布函数。多尺度的通量函数由界面处的粒子分布函数确定, 该分布由方程 (4.3) 中动理学模型方程的积分解构造。在每一个时间步长中, 相应的具有连续速度空间和离散速度空间的流场由式 (4.25) 判定, 而对应的数值通量由离散速度空间 (4.7), 连续速度空间通量 (4.19) 和变换界面通量 (4.21) 确定。AUGKS 的具体数值步骤如图4.2所示。

4.3 数值实验

在本节中, 我们将测试自适应统一气体动理学格式的计算性能和表现。为了阐明算法的多尺度特性, 从 Euler 和 Navier-Stokes 到自由分子流动的不同流域下的数值模拟均有展示。在计算中, 流动变量的无量纲方法如下,

$$\begin{aligned}\hat{x} &= \frac{x}{L_0}, \hat{y} = \frac{y}{L_0}, \hat{\rho} = \frac{\rho}{\rho_0}, \hat{T} = \frac{T}{T_0}, \hat{u}_i = \frac{u_i}{(2RT_0)^{1/2}}, \\ \hat{U}_i &= \frac{U_i}{(2RT_0)^{1/2}}, \hat{f} = \frac{f}{\rho_0(2RT_0)^{3/2}}, \hat{P}_{ij} = \frac{P_{ij}}{\rho_0(2RT_0)}, \hat{q}_i = \frac{q_i}{\rho_0(2RT_0)^{3/2}},\end{aligned}$$

其中 u_i 是粒子速度, U_i 是流体宏观速度, P_{ij} 是应力张量, q_i 是热流。下表 0 表示参考状态的量。简单起见, 在下文的叙述中我们省略尖帽符号直接指代无量纲量。所有的计算中均使用变径硬球模型描述的氩气分子, 其动力学粘性系数和参考克努森数的关系如下,

$$\mu_{ref} = \frac{5(\alpha+1)(\alpha+2)\sqrt{\pi}}{4\alpha(5-2\omega)(7-2\omega)} Kn_{ref}.$$

在数值模拟中, 我们选取 $\alpha = 1.0$ 和 $\omega = 0.5$ 来恢复硬球模型的粘性系数, 此时粘性随温度变化的关系是

$$\mu = \mu_{ref} \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^\theta,$$

其中 T_{ref} 是参考温度, $\theta = 0.81$ 是硬球模型的指数因子。

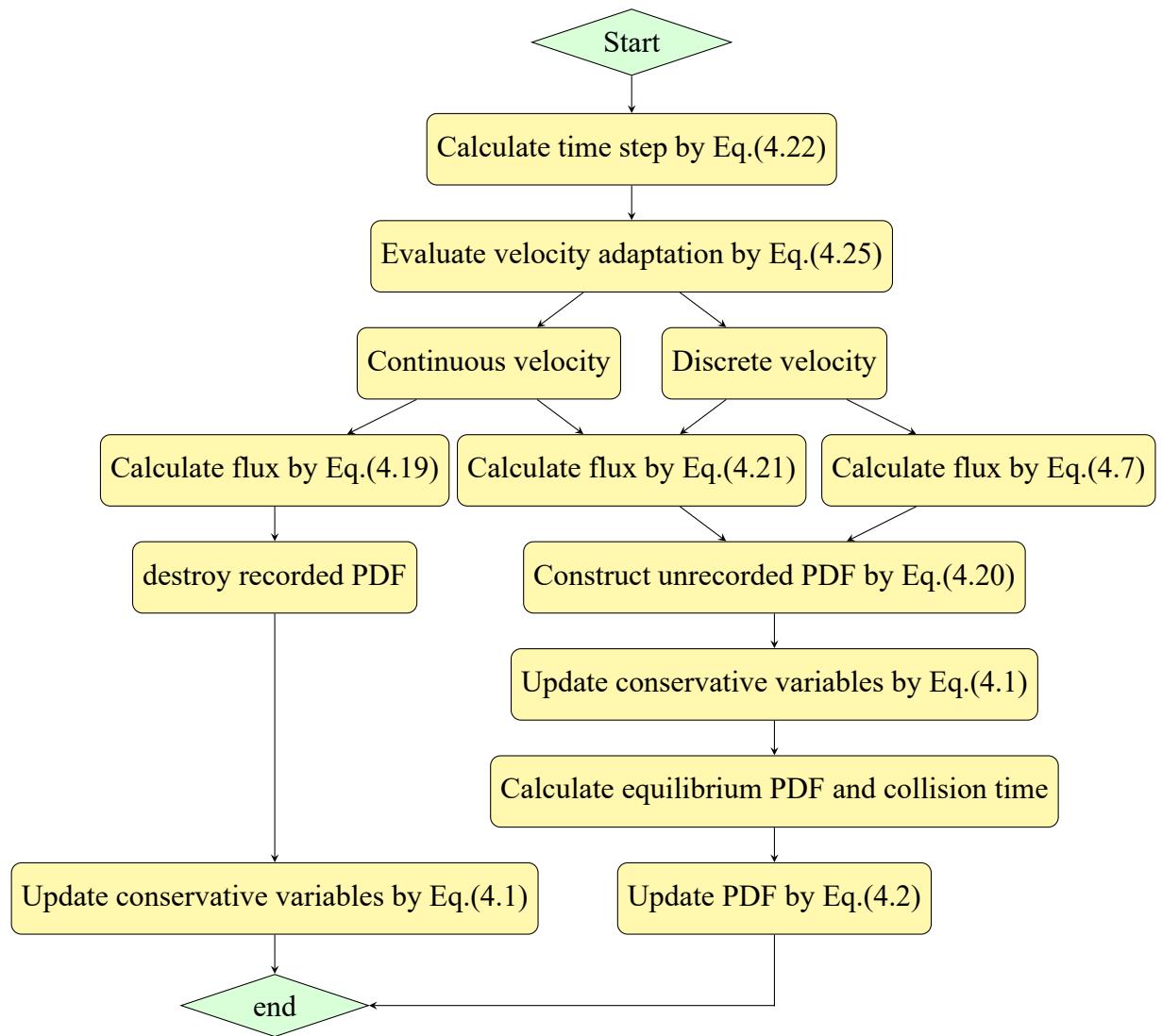


图 4.2 AUGKS 在每一个更新步里的算法步骤

4.3.1 密度波传播问题

第一个例子是密度波传播问题。初始条件设置为，

$$\rho = 1.0 + 0.1 \sin(2\pi x), U = 1.0, p = 0.5.$$

流场 $x \in [0, 1]$ 被划分为 200 个均匀网格，并考虑周期边界条件。模拟使用的参考克努森数从 $Kn = 0.0001$ 到 0.1，对应不同的流域。现有的速度空间切换准则设置为 $B = 0.0005$ ，同时离散速度空间使用 48 个均匀速度网格更新分布函数。在 AUGKS 和 UGKS 中，碰撞项根据式 (4.16) 进行求解。 $t = 1.0$ 时的密度分布展示在图4.3中，同时展示了无粘流的行波解作为参考。如图所示，在所有的情况下 AUGKS 和原始 UGKS 计算的数值解符合情况很好。在 $Kn = 0.0001$ 的连续流中，数值格式给出了和无粘理论相同的解。而当克努森数增加后，非平衡的效应使得流场中密度不均匀分布导致的耗散作用大幅加快。因此，密度波的幅值逐渐减小，偏离无粘的行波解。在 $Kn = 0.1$ 的稀薄情况下，输

出时刻的波幅仅为初始值的 0.65%。

图4.4给出了不同克努森数下输出瞬间流场内部的速度空间自适应情况。如图所示，在 $Kn = 0.0001$ 时，可以用连续速度空间模拟整个流场。随着克努森数的增加，非平衡区域逐渐增大，伴随着离散速度空间的使用。在 $Kn = 0.001$ 时，流场被划分为若干子区域，其中用离散速度空间解析大梯度区域的粒子分布函数演化。在相对平坦密度分布的波峰和波谷位置，在一个局部的连续速度空间中采用 Chapman-Enskog 展开构造分布函数的形式随着克努森数和稀疏效应的增加，Navier-Stokes 解逐渐失去其有效性，非平衡区域在 $Kn = 0.01$ 时占据了整个计算域。

表4.1展示了现在的自适应方法和原始 UGKS 的 CPU 运算时间和内存负载。如表所示，在 $Kn = 0.0001$ 时 AUGKS 的计算速度是原始 UGKS 的 157 倍，同时节约了 94% 的内存。由于计算资源消耗正比于速度空间内网格的数目，因此计算效率与非平衡区域的大小密切相关。当参考克努森数增加到 $Kn = 0.001$ 时，AUGKS 的 CPU 时间和内存负载也相应增加，但仍然比原始的 UGKS 效率更高。随着稀薄程度在 $Kn = 0.01$ 和 0.1 时的继续增加，计算域中处处使用了离散速度空间，这种情况下 AUGKS 中的计算成本与原始 UGKS 是相当的。

表 4.1 密度波传播问题中 $t = 1$ 时的 CPU 计算时间和内存负载

	CPU time (s)		Memory (kB)	
	AUGKS	UGKS	AUGKS	UGKS
Kn=0.0001	117.39	18451.00	15976	282592
Kn=0.001	12560.71	18510.30	223678	280564
Kn=0.01	18407.97	18570.53	278590	281632
Kn=0.1	18024.64	18339.93	280992	282012

4.3.2 激波管问题

接下来考虑 Sod 激波管问题。流场 $x \in [0, 1]$ 被均匀划分为 200 个物理网格。初始条件设置为，

$$\rho = 1.0, U = 0.0, p = 1.0, x \leq 0.5,$$

$$\rho = 0.125, U = 0.0, p = 0.1, x > 0.5.$$

在计算中采用的参考克努森数变化范围是从 $Kn = 0.0001$ 到 $Kn = 1.0$ ，对应不同的特征流域。现有的速度空间切换准则设置为 $B = 0.0005$ 。在离散的速度空间中使用 80 个均匀速度网格更新分布函数。在 AUGKS 和 UGKS 中，Boltzmann 碰撞积分根据式 (4.16) 进行求解。图4.5, 4.6, 4.7和4.8展示了不同克努森数下 $t = 0.2$ 时激波管内的解。连续介

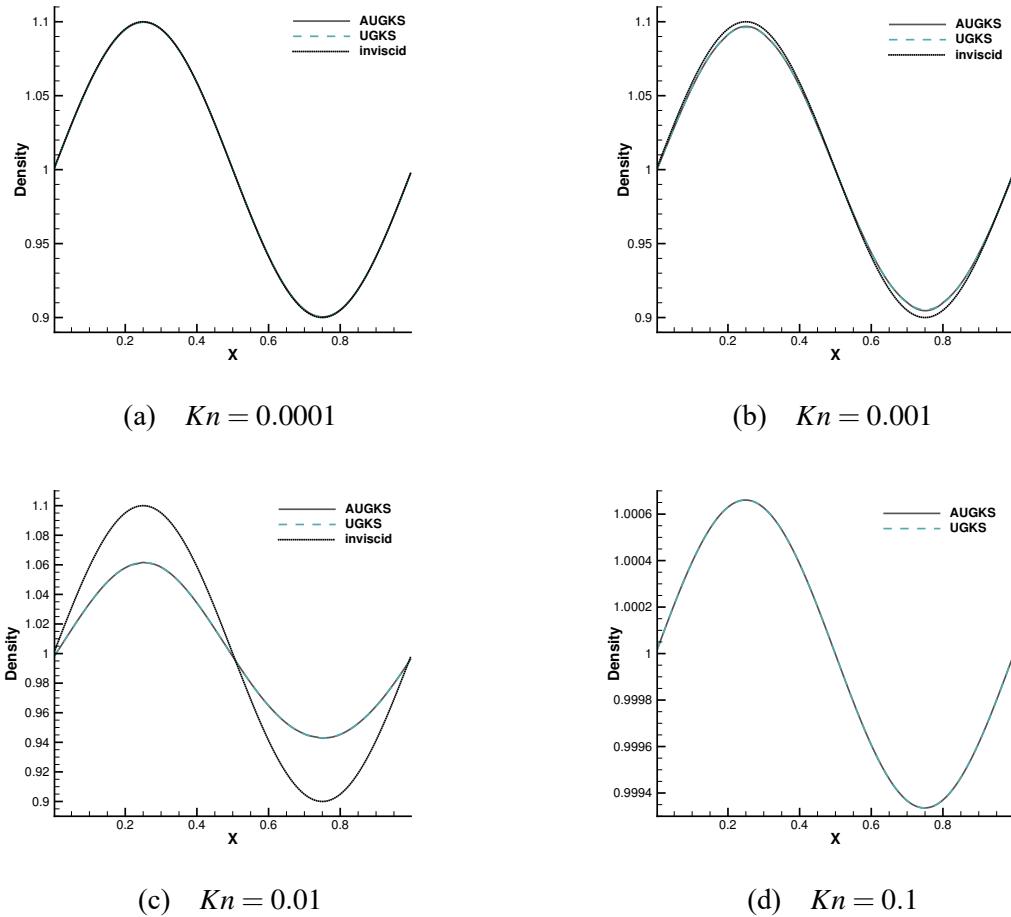
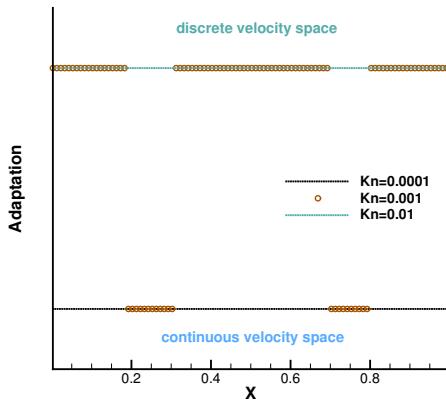
图 4.3 不同参考克努森数下 $t = 1.0$ 时流场中的密度分布

图 4.4 密度波传播问题在输出时刻的速度空间自适应情况

质极限下的参考解是通过针对连续流的 GKS 求解器使用 1000 个网格计算得到的，而自由分子流的参考解可以通过无碰撞的 Boltzmann 方程推导出来。

在初始时刻，除了中心位置的间断需要采用离散速度模拟外，所有的物理量均是均匀分布的，可以采用连续速度空间表示。随着流场的时间演化，非平衡的区域逐渐

扩大，伴随这离散速度空间的引入。如图4.9所示，在 $Kn = 0.0001$ 和 $t = 0.2$ 时，流场可以划分为几个子区，其中在稀疏波、接触间断和激波内的非平衡粒子分布函数被离散速度空间解析，而在剩余的近平衡区域中使用 Chapman-Enskog 展开在连续速度空间内进行表征。AUGKS 在 $Kn = 0.0001$ 和 $t = 0.2$ 时的解如图4.5a, 4.5b 和4.5c 所示，并和连续介质流动参考解和原始 UGKS 的解精确符合。当参考克努森数等于 $Kn = 0.001$ 时，如图4.9b 所示，近平衡区被限制在靠近激波管左边界的小一部分区域内，其中分布函数具有连续的形式。随着稀薄效应的增加，流场分布逐渐偏离连续极限下的解，并向无碰撞 Boltzmann 方程的解趋近。当 $Kn = 1.0$ 时，数值解接近于自由分子流的解，如图4.7 和4.8所示。

这个例子说明了 AUGKS 捕捉不同流域内流动特征的能力。在两个极限情况下，格式的渐近保持性质被验证。随着参考克努森数的增加，流场内呈现从 Euler 方程的 Riemann 问题向无碰撞 Boltzmann 方程的连续变化。表4.2展示了在输出时刻 $t = 0.2$, AUGKS 和原始 UGKS 的 CPU 运算时间和内存负载。如图所示，在 $Kn = 0.0001$ 时 AUGKS 的计算速度是原始 UGKS 的 3.63 倍，同时节约 48% 的内存负载。当稀薄程度增加后，AUGKS 的 CPU 时间和内存负载相应增加，但仍比原始的 UGKS 更加高效。

表 4.2 Sod 激波管问题中 $t = 0.2$ 时的 CPU 计算时间和内存负载

	CPU time (s)		Memory (kB)	
	AUGKS	UGKS	AUGKS	UGKS
$Kn=0.0001$	2042.98	7421.70	98960	190448
$Kn=0.001$	3537.73	7430.82	154988	188428
$Kn=0.01$	4692.52	7547.99	186860	188420
$Kn=0.1$	5694.46	7275.40	184836	188432

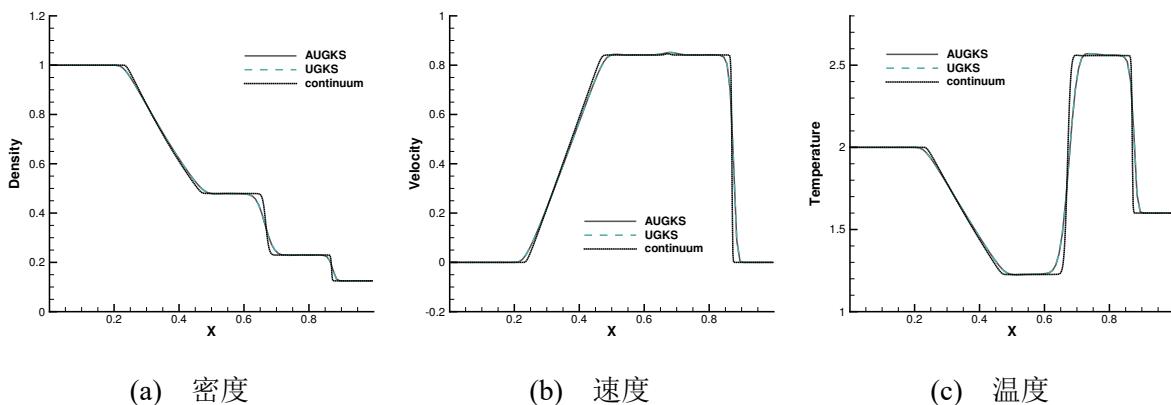
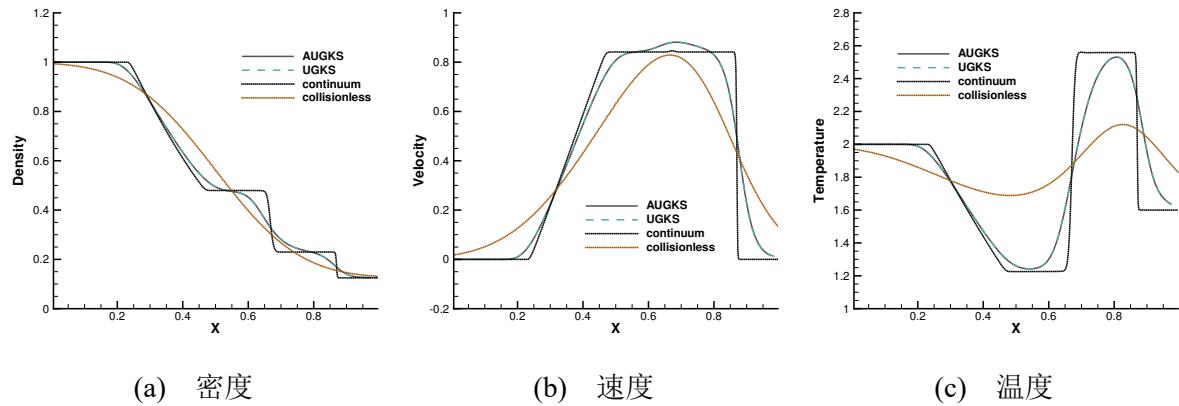
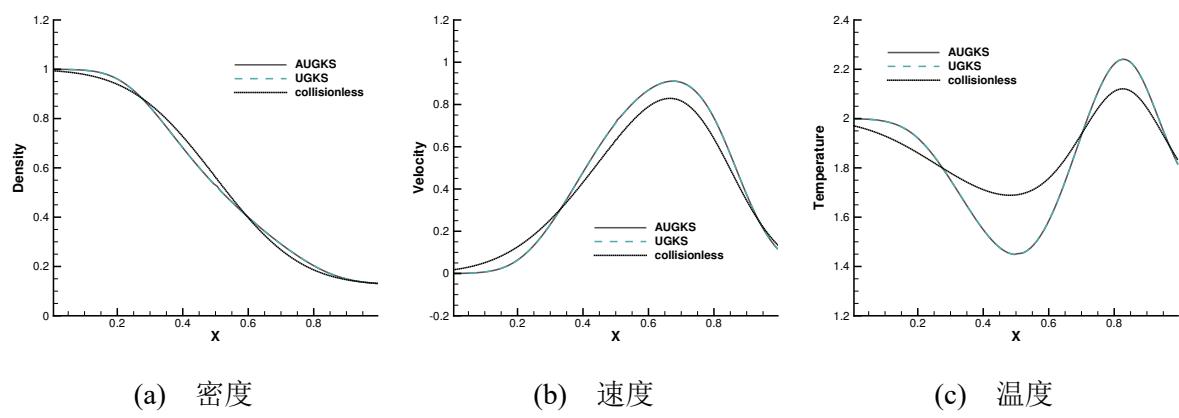
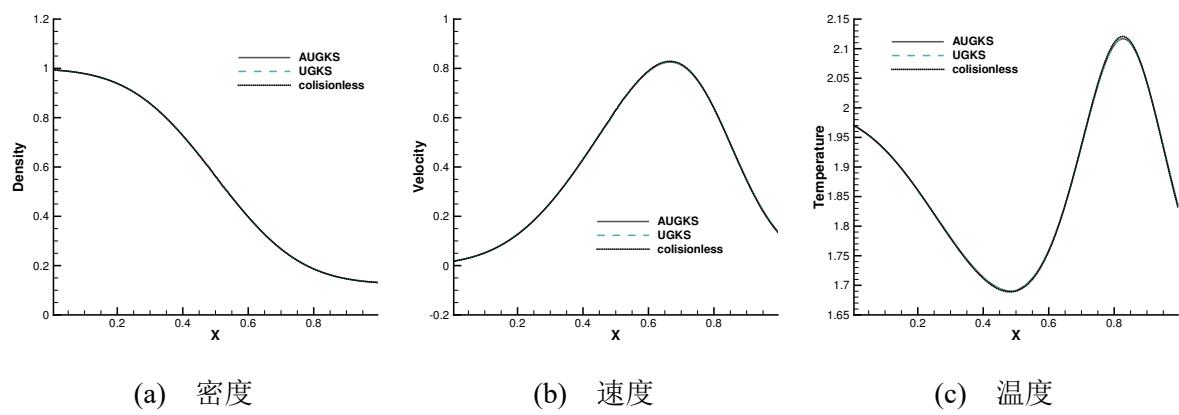
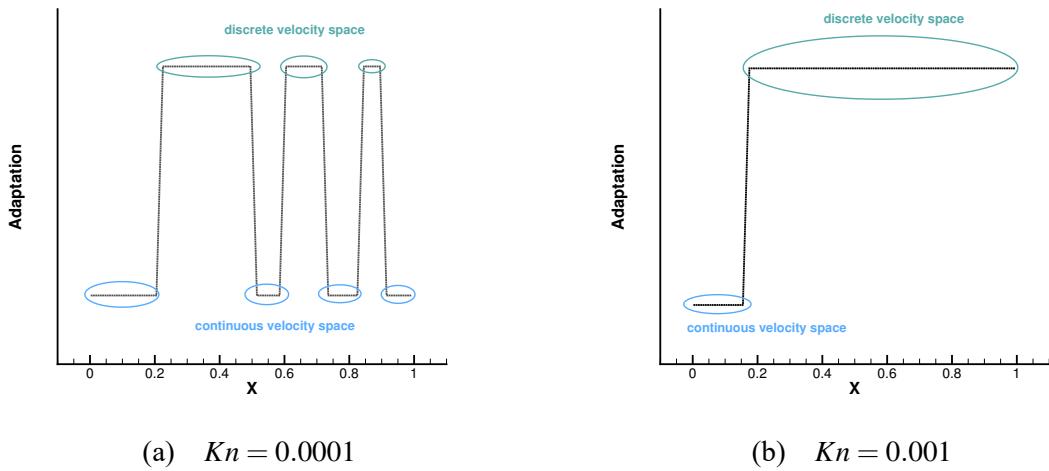


图 4.5 参考克努森数 $Kn = 0.0001$ 下 $t = 0.2$ 时 Sod 激波管问题的解

图 4.6 参考克努森数 $Kn = 0.001$ 下 $t = 0.2$ 时 Sod 激波管问题的解图 4.7 参考克努森数 $Kn = 0.01$ 下 $t = 0.2$ 时 Sod 激波管问题的解图 4.8 参考克努森数 $Kn = 1.0$ 下 $t = 0.2$ 时 Sod 激波管问题的解

图 4.9 Sod 激波管问题在 $t = 0.2$ 时的速度空间自适应情况

4.3.3 Rayleigh 问题

考虑一个突然启动的热平板，即形成一个 Rayleigh 问题。在这个例子里，我们采用孙泉华提出的计算设置^[139]。如图4.10所示，氩气在初始状态下是均匀、等温和静止的。当 $t > 0$ ，平板突然得到一个恒定速度 $U_w = 0.0296$ 和恒定温度 $T_w = 1.36$ 。在之后的非定常过程中，动量和能量通过剪切作用被输送进流场。在数值模拟中，流场 $y \in [0, 1]$ 被划分为 100 个均匀物理网格，而对于需要显式更新分布函数的区域，在离散的速度空间内使用 32 个均匀速度网格。在这个算例中，AUGKS 和 UGKS 中 Boltzmann 碰撞积分是通过快速谱方法计算得到的。速度空间的切换准则设置为 $B = 0.0001$ 。

在这里我们模拟了一系列克努森下的 Rayleigh 流动，在相同输出时刻的解展示在图4.11, 4.12, 4.13 和 4.14中。除 AUGKS 的解外，DSMC 和原始 UGKS 计算的结果同样作为标准解展示出来。同时，考虑完全的 Maxwell 漫反射边界条件，Bird^[64] 基于无碰撞 Boltzmann 方程在输出时间远小于例子平均碰撞时间 $\tau_0 = \ell_0/v_0$ 的情况下提出了一个理论解析解。我们同样画出这个解析解作为参照。

如图4.11, 4.12, 4.13 和 4.14所示，对于 $Kn = 2.66$ 和 $t = 0.1\tau_0$ 的情况，AUGKS 精确地恢复无碰撞 Boltzmann 方程的解。在过渡流 $Kn = 0.266$ 和 $Kn = 0.0266$ 的相应输出时间 $t = \tau_0$ 和 $t = 10\tau_0$ ，由于逐渐增加的分子间相互碰撞，数值解逐渐偏离无碰撞的理论解。在 $Kn = 0.00266$ 和 $t = 100\tau_0$ 时，对应于近平衡流动，当前的自适应格式恢复了 Navier-Stokes 解。如图展示的，在所有的算例中 AUGKS 的结果均与 DSMC 和 UGKS 的参考解一致。值得一提的是，与 DSMC 方法相比，基于确定论 Boltzmann 方程的自适应统一算法中没有统计噪声，这对低速流动的计算是有极为有益的。

图4.15 为输出时刻流域内的速度空间自适应情况。在 $Kn = 0.00266$ 的情况下，在宏观量斜率较大的近壁区，AUGKS 采用离散速度空间，而在外部区域采用连续速度

空间。随着克努森数的增加，无量纲粘性和导热系数的增强导致了较大的非平衡效应。因此，非平衡的区域迅速扩大。对于 $Kn = 0.266$ 的情况，在所有的计算域里，分布函数均偏离 Chapman-Enskog 展开给出的形式，其演化过程必须使用离散速度空间来刻画。表4.3给出了 AUGKS 和 UGKS 的计算消耗。当 $Kn = 0.00266$ 时，AUGKS 比原始的 UGKS 快 7.45，内存减少 66%。当 Knudsen 数增加时，扩大的非平衡区域增加了 AUGKS 的计算代价。从目前的数值实验可以看出，AUGKS 在兼顾精度和效率的前提下，提供了一种从连续流到稀薄流的自适应算法。

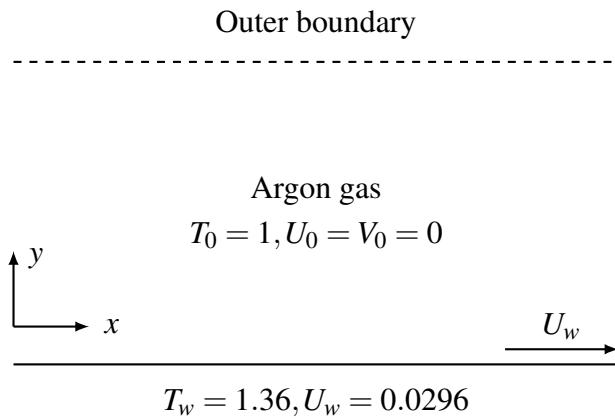


图 4.10 Rayleigh 问题示意图

表 4.3 Rayleigh 问题中输出时刻的 CPU 计算时间和内存负载

	CPU time (s)		Memory (kB)	
	AUGKS	UGKS	AUGKS	UGKS
Kn=0.00266	1003.59	7477.10	184937	543232
Kn=0.0266	2223.62	7460.21	358828	539140
Kn=0.266	3751.75	7438.06	544128	540796
Kn=2.66	4637.19	7457.87	537760	543828

4.3.4 喷管流动

连接不同流域的喷管流动问题是测试 AUGKS 捕捉多尺度流动动力学能力的理想情况。喷嘴问题的示意图在4.16展示。氩气处于在一个封闭的长方形的腔体内，其中 $x \in [0, 2.2]$, $y \in [-0.5, 0.5]$ 。在离散的速度空间中使用 28×28 的均匀速度网格更新粒子分布函数。在这个例子中，速度空间的切换准则为 $B = 0.0005$ 。AUGKS 和 UGKS 中的碰撞项的计算基于 Shakhov 模型。计算域分为两个部分，通过一个喷管连接。左边的气体密度是右边气体密度的 100 倍，相应的初始克努森数分别为 $Kn_L = 0.0001$ 和 $Kn_R = 0.01$ 。除此之外，初始气体处于静止状态，在两个子域内具有相同的温度，并与

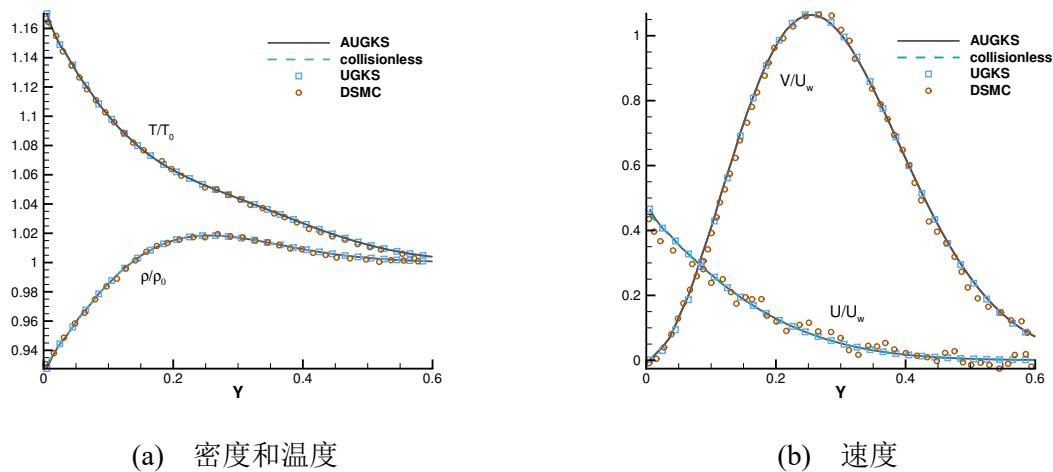


图 4.11 参考克努森数 $Kn = 2.66$ 下 $t = 0.1\tau_0$ 时的 Rayleigh 问题数值解

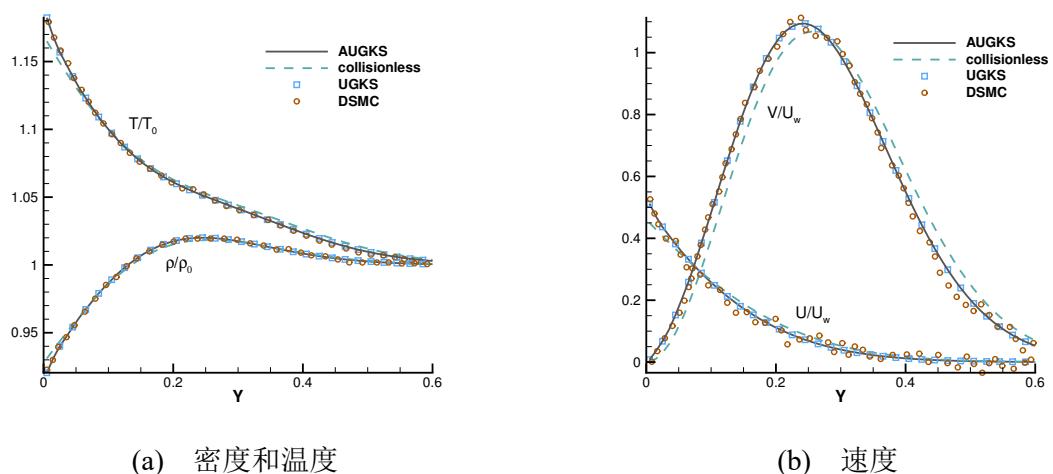


图 4.12 参考克努森数 $Kn = 0.266$ 下 $t = \tau_0$ 时的 Rayleigh 问题数值解

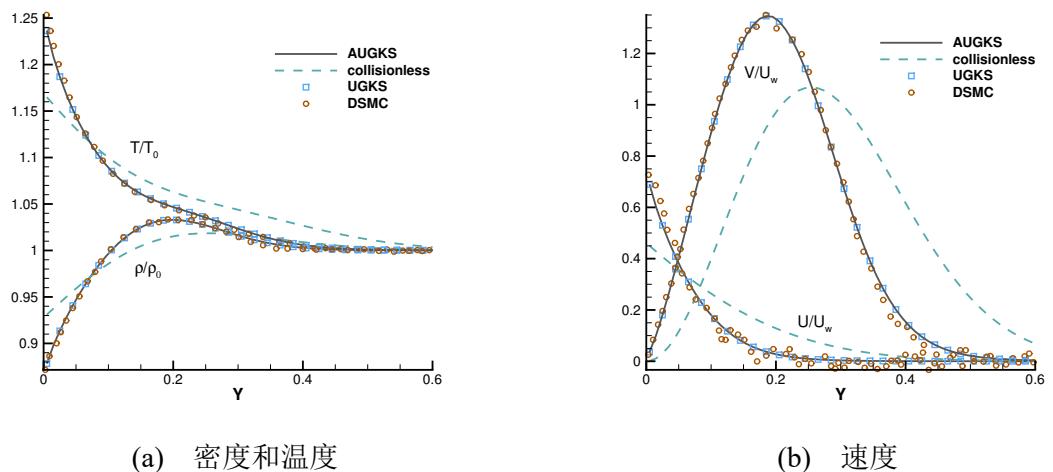


图 4.13 参考克努森数 $Kn = 0.0266$ 下 $t = 10\tau_0$ 时的 Rayleigh 问题数值解

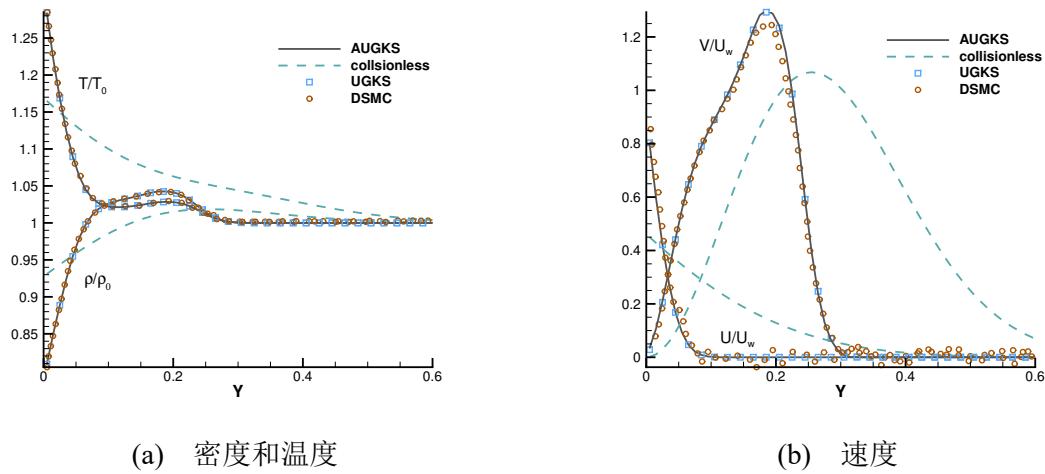
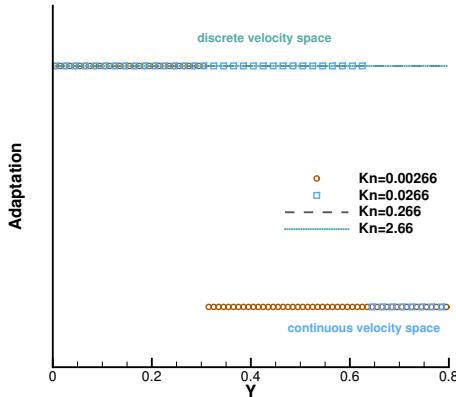
图 4.14 参考克努森数 $Kn = 0.00266$ 下 $t = 100\tau_0$ 时的 Rayleigh 问题数值解

图 4.15 Rayleigh 问题在输出时刻的速度空间自适应情况

壁温相同。所有的边界条件均使用 Maxwell 的完全漫反射边界。喷管有两个喷口，截面尺寸分别为 $\Delta y_L = 0.13$ 和 $\Delta y_R = 0.33$ ，其长度为 $\Delta x = 0.14$ ，由此形成射流问题。对此问题进行数值模拟到 $t = 50\tau_0$ ，其中 $\tau_0 = \ell_0/v_0$ 是初始气体在右边区域的平均碰撞时间。

图4.17和4.18展示了两个输出时刻 $t = 5\tau_0$ 和 $t = 20\tau_0$ 时喷管内的 x 方向流速 U 和温度等值面。图中上半部分是 AUGKS（等值面）和 UGKS（等值线）的计算结果，而下半部分是基于完全连续速度空间的 GKS 提供的 Navier-Stokes 解。如图所示，在两种方法均可以捕捉到弓形激波和碰撞冷却的区域。然而很明显的，在 $Kn = 0.01$ 时，Navier-Stokes 方程不再能有效描述右边区域内的非平衡流动演化过程，此时必须使用基于动理学的描述对其进行刻画，以得到更精确的流动问题的解。图4.19和4.20展示了 $t = 5\tau_0$ 和 $t = 20\tau_0$ 两个时刻沿腔体水平中心线上的解。显然，AUGKS 在近平衡的左边区域提供和 NS 方程等价的解，而在右边的非平衡区域自动给出 Boltzmann 方程的解。该算例证明了 AUGKS 方法在相应流态下获得特征物理解的多尺度模拟能力。

图4.21, 4.22和4.23展示了三个不同时刻 $t = \tau_0, 5\tau_0, 20\tau_0$ 下, 速度空间切换准则中所使用的空间斜率 a 的组分, 平均碰撞时间和相应的速度空间的划分情况。如图所示,

如图所示, 激波和膨胀波是流场内存在的物理量大梯度的主要来源。随着高密度的射流进入右侧区域, 射流经过区域的平均碰撞时间减小。随着时间的演化, 局部的流动结构变得更加复杂, 导致增大的非平衡流动区域。因此, 在出现强非平衡效应的地方, Chapman-Enskog 展开失效, 必须在 AUGKS 中使用离散的速度空间进行描述。表4.4给出了在该问题中, AUGKS、UGKS 和 GKS 的计算资源消耗情况。在使用当前的网格设置下, 连续速度空间内的 GKS 求解器计算赌约为离散速度空间的 25 倍。AUGKS 比原始的 UGKS 快 1.7 倍。在模拟的初始阶段, AUGKS 的内存成本与 GKS 相近, 大约是 UGKS 的 $1/30$ 。随着流动的演化发展, 与离散速度空间相关的网格数量增加, 相应的内存负载也随之增加。在最终时刻 $t = 50\tau_0$ 时, 在 914 个物理网格中大约有 429 个使用连续速度空间, 相应的内存负担是原始 UGKS 的 53%。

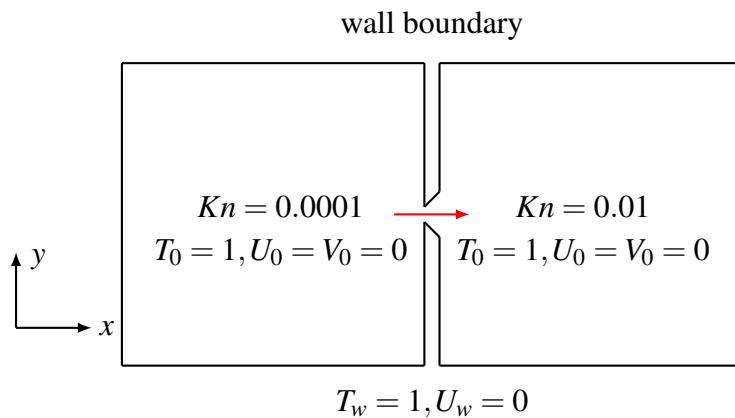


图 4.16 喷管问题示意图

表 4.4 喷管流动中不同时刻的 CPU 计算时间和内存负载

	AUGKS	UGKS	GKS
CPU time (s)	526.25	898.69	35.25
Memory (kB) ($t = 0$)	3614	74828	2636
Memory (kB) ($t = 50\tau_0$)	35125	74836	2640

4.3.5 圆柱绕流问题

在之前的问题中, AUGKS 模拟非平常流动的表现被充分验证。在这个算例中, 我们使用圆柱绕流问题测试当前自适应算法对于定常流动的表现。考虑马赫数 $Ma = 5$, 温度 $T = 273K$ 的均匀来流, 其中温度与圆柱表面的温度相同。参考克努森数设置为 $Kn = 0.001$ 和 $Kn = 0.01$, 其中参考长度是圆柱半径, 相应的无量纲粘性系数为

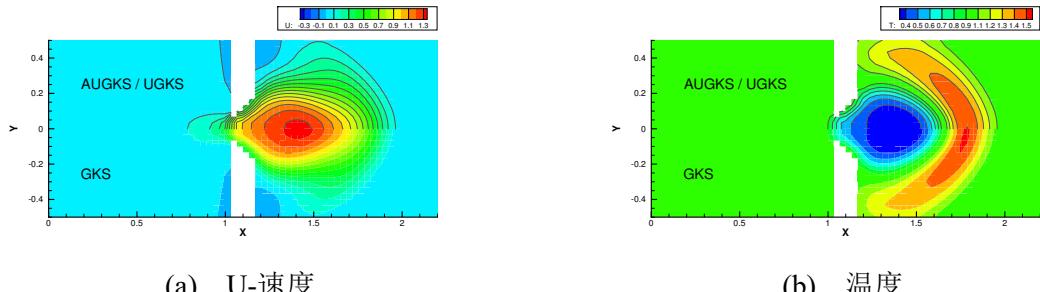


图 4.17 $t = 5\tau_0$ 时喷管流动的密度和温度等值面图

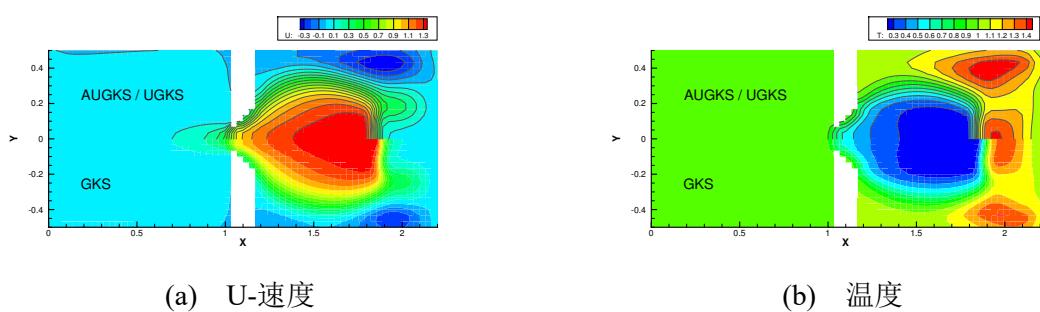


图 4.18 $t = 20\tau_0$ 时喷管流动的密度和温度等值面图

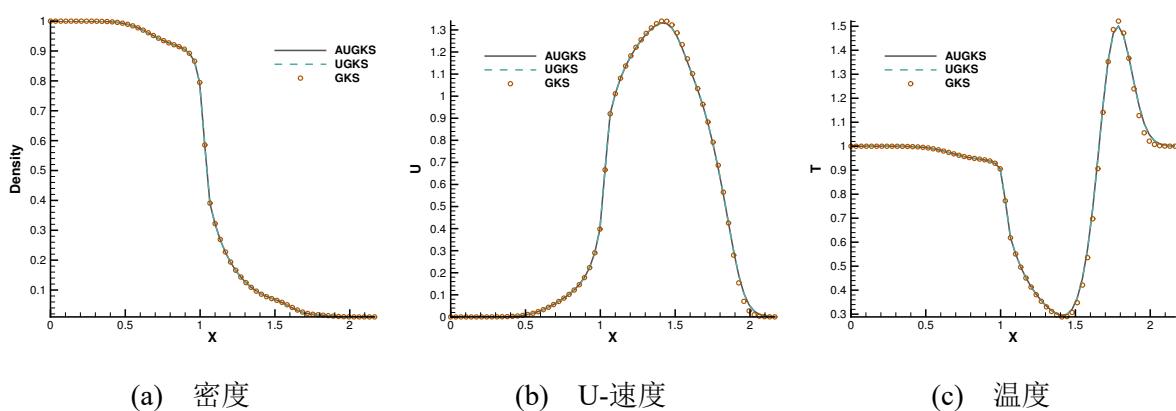


图 4.19 $t = 5\tau_0$ 时喷管流动的沿水平中心线的密度, 速度和温度分布

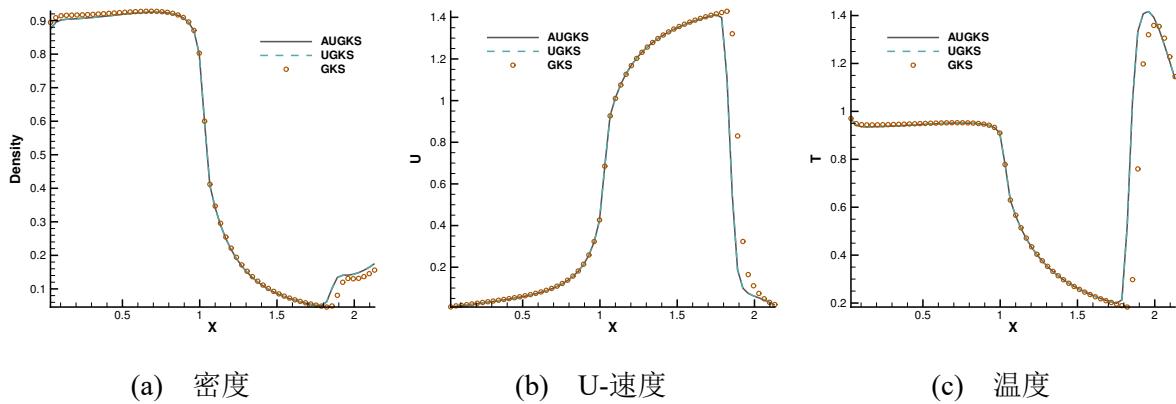


图 4.20 $t = 20\tau_0$ 时喷管流动的沿水平中心线的密度, 速度和温度分布

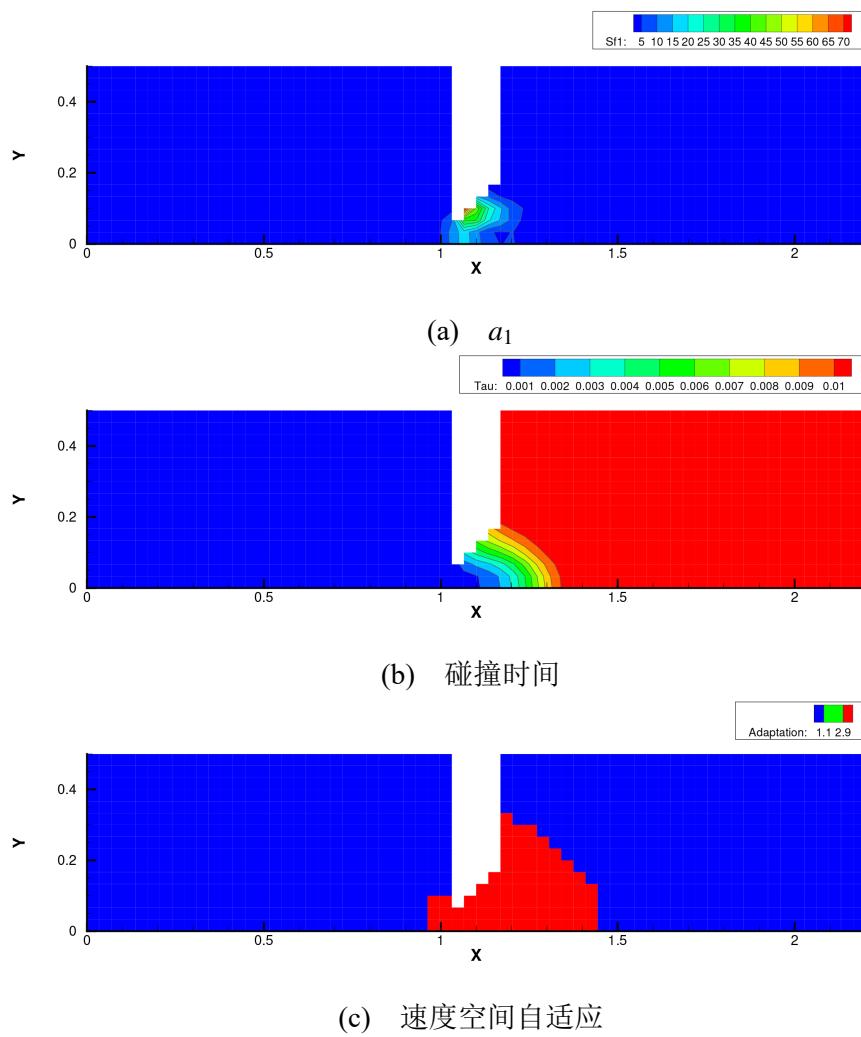
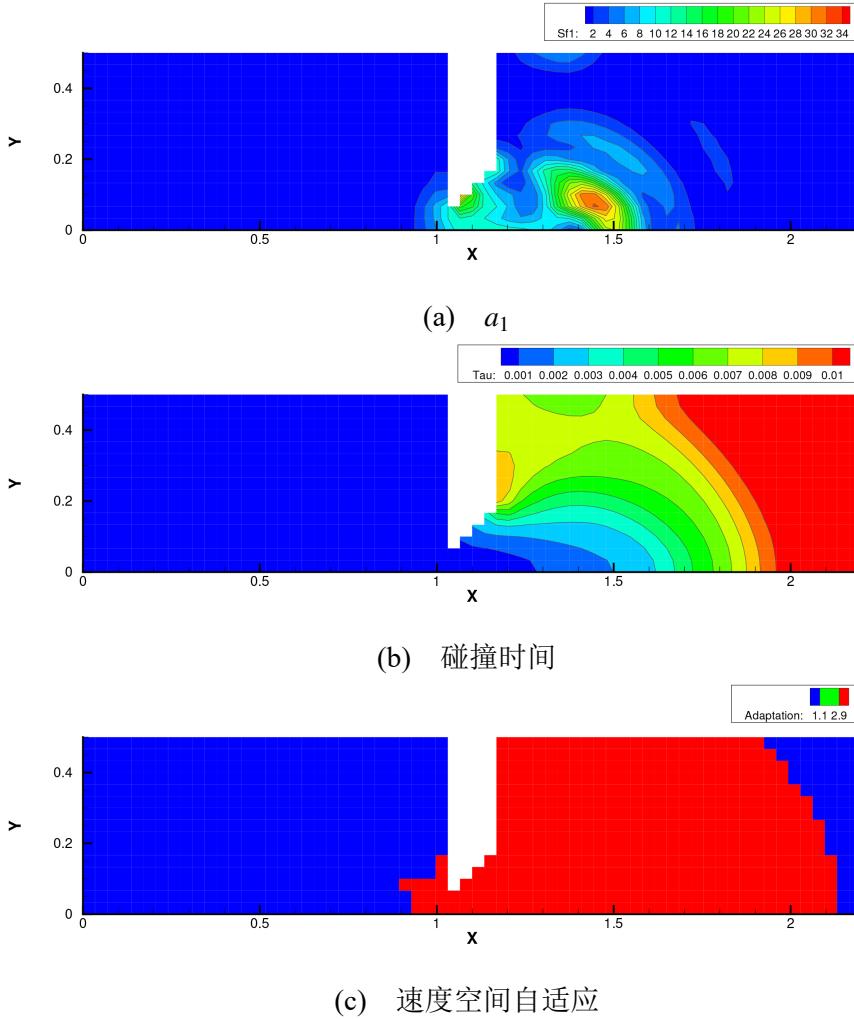


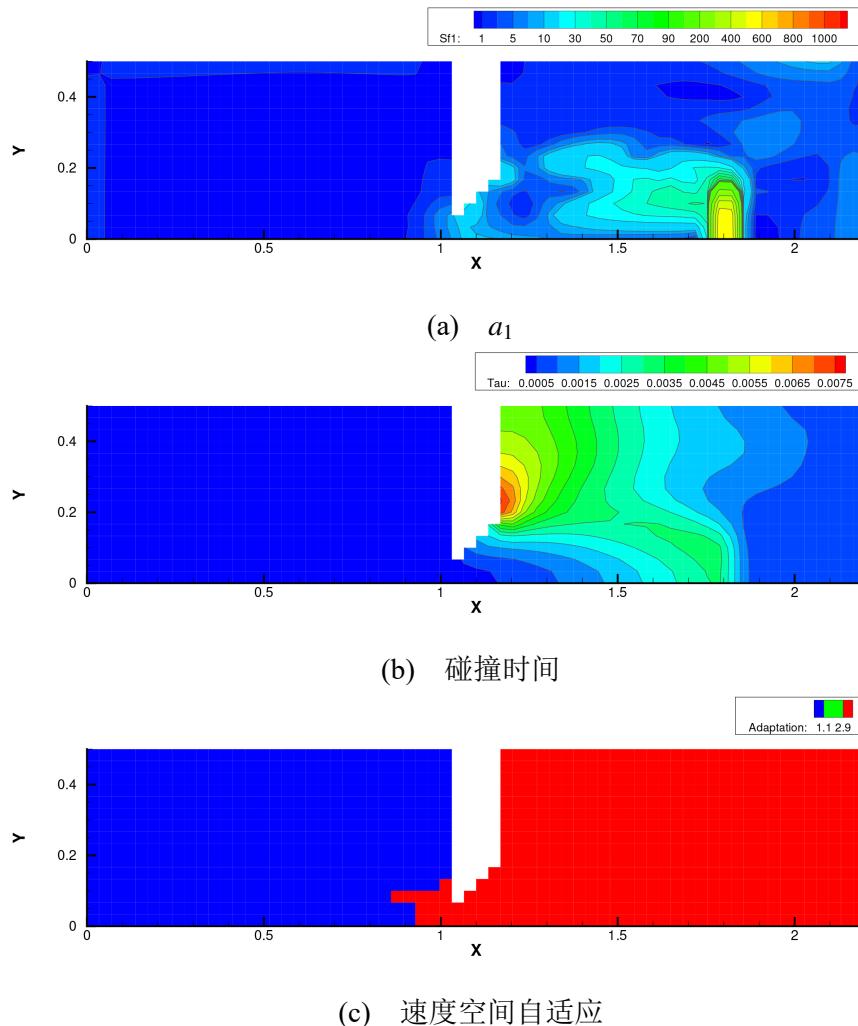
图 4.21 $t = \tau_0$ 时的速度空间自适应情况

图 4.22 $t = 5\tau_0$ 时的速度空间自适应情况

$\mu_{ref} = 7.313 \times 10^{-4}$ 和 $\mu_{ref} = 7.313 \times 10^{-4}$ 。在计算中，径向使用 60 个均匀网格，周向使用 100 个均匀网格进行离散。对于离散的速度空间，其被划分为 41×41 的速度网格，并使用 Newton-Cotes 数值积分方法。碰撞项的计算基于 Shakhov 模型方程。圆柱表面的壁面设置为完全的 Maxwell 漫反射边界。速度空间的切换准则为 $B = 0.0005$ 。

对于定常问题，基于连续速度空间的 GKS 的帮助，可以进一步缩短计算时间。这里首先使用 GKS 得到一个收敛的流场，然后将其作为自适应算法的初始状态。定常流场的计算方法如下。

- (1) 从初始条件开始，使用连续速度空间的 GKS 求解器得到流场的收敛解
- (2) 以得到的收敛流场为初始流动条件，通过式 (4.20) 得到离散化的 Chapman-Enskog 形式的分布函数
- (3) 根据式 (4.25) 中的切换准则调整速度空间
- (4) 在近平衡区使用连续速度空间，在非平衡流区使用离散速度空间，经数次迭代后


 图 4.23 $t = 20\tau_0$ 时的速度空间自适应情况

重新进行速度空间自适应，直到得到收敛流场

图4.24和4.25展示了由 AUGKS, UGKS 和 GKS 计算的 x 方向速度 U 和温度的等值面图，其中上半部分的解是 AUGKS（等值面）和 UGKS（等值线）的结果，下半部分是 GKS 的解。如图所示，所有方法均能很好地捕捉到激波后的弓激波和膨胀冷却区域。

图4.26, 4.27, 4.28和4.29展示了圆柱前方和后方水平线上的解。在 $Kn = 0.001$ 时，计算中使用的网格尺度和时间步长大于粒子的平均自由程和碰撞时间。由于有限的时空分辨率，所有的三种方法均退化成激波捕捉格式，一个陡峭的激波界面在圆柱前方被计算得到，如图4.26。在近壁区，由气体-界面相互作用导致的非平衡气体动力学，在 UGKS 和 GKS 的解中存在较小的区别。与此同时在4.27中，由于圆柱的几何效应的存在，气体密度在尾迹区大幅降低，由此产生在 UGKS 和 GKS 解的显著区别。

当参考克努森数达到 $Kn = 0.01$ 时，一个较大的粒子平均自由程导致一个更宽的激波结构。这种非平衡演化的机制在 AUGKS 和 UGKS 中是通过使用尺度相关的界面

演化解确定的。然而，在基于连续空间的 GKS 求解器中，Chapman-Enskog 展开只能提供关于这个过程的部分信息。因此，与图4.28中的 AUGKS 和 UGKS 结果相比，GKS 呈现出更狭窄的激波结构。在尾迹区域，由于在 $Kn = 0.01$ 时粒子的碰撞时间增大，GKS 提供的结果与 AUGKS 和 UGKS 解存在显著差异。基于连续速度空间的 GKS 无法精确预测这些区域的物理理解，在 AUGKS 中粒子分布函数基于离散速度空间被显式更新。显然，当前的自适应算法在近平衡区域恢复等效的 NS 解，而在非平衡区域提供和 UGKS 等价的解。

图4.30和4.31展示了用于速度空间切换判据 B 中的空间导数 \mathbf{a} 的两个组分，粒子平均碰撞时间和速度空间自适应的情况。如图所示，激波和边界是高梯度存在的两个来源，导致了 Chapman-Enskog 展开和 Navier-Stokes 解的失效。在圆柱后方，低密度尾流区域导致显著增加的粒子碰撞时间，这种情况展示在图4.30c 和4.31c 中。因此，一个速度空间的自使用相应地被确定，如图4.30d 和4.31d。连续的速度空间被用以计算均匀来流以及弓形激波与圆柱间的小区域，而其余的非平衡区域采用离散速度空间来模拟。由于粒子碰撞时间的增加，采用离散粒子速度空间的非平衡区域在 $Kn = 0.01$ 时比在 $Kn = 0.001$ 时相应地扩大。

表4.5展示了在 $Kn = 0.001$ 和 $Kn = 0.01$ 时 AUGKS, UGKS 和 GKS 的计算资源要求。在现有的物理网格和速度空间设置下，基于连续速度空间的 GKS 比 UGKS 的计算速度快约 30 倍，同时 AUGKS 在这个定常流问题中比原始的 UGKS 快约 3.3 倍。在收敛状态下，所使用的 6000 个物理网格中，约有 3196 个网格 ($Kn = 0.001$) 和 1992 个网格 ($Kn = 0.01$) 使用连续的速度空间设置，对应的内存负担约为原 UGKS 的 47% 和 67%。

表 4.5 圆柱绕流问题中的 CPU 计算时间和内存负载

	CPU time (s)			Memory (kB)		
	AUGKS	UGKS	GKS	AUGKS	UGKS	GKS
Kn=0.001	36130.68	117371.67	2975.07	452508	857520	14652
Kn=0.01	22145.10	75510.33	2536.55	614542	856944	12636

4.4 小结

由于流动结构的密度和特征尺度存在的较大变化，气体动力学本质上具有多尺度性质。本章基于 Boltzmann 模型方程的尺度自适应的时间演化解，发展了一种速度空间自适应的统一气体动理论格式，可以用于多尺度流动输运的模拟。目前的自适应算法是基于速度空间的动态切换，其中粒子速度在近平衡区域是连续分布的，而在非平

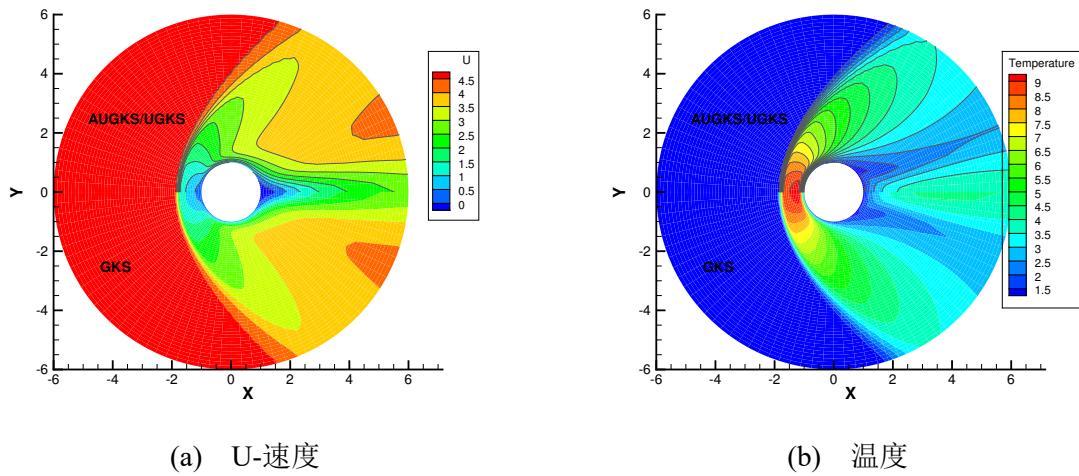


图 4.24 $Kn = 0.001$ 时圆柱绕流的速度和温度等值面图（上方等值面：AUGKS，上方等值线：UGKS，下方等值面：GKS）

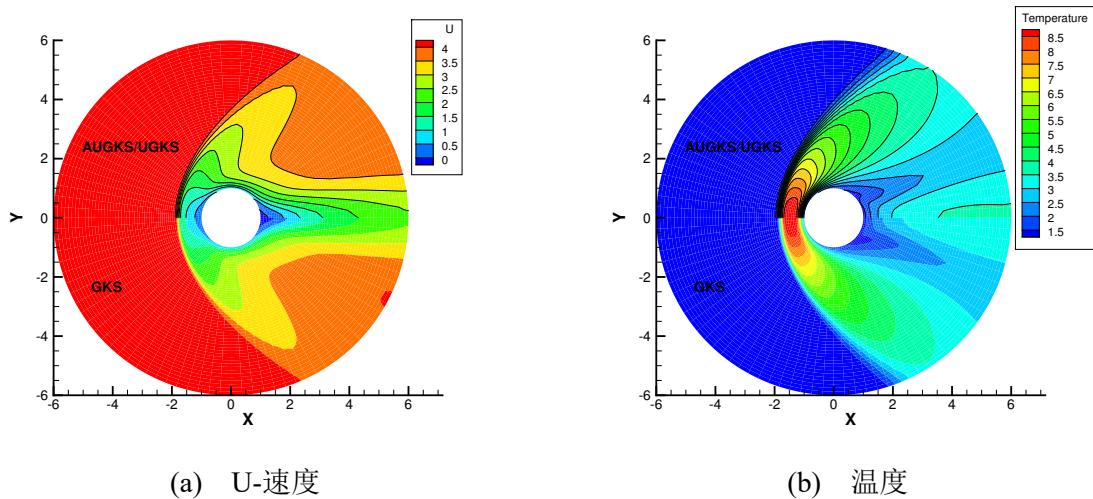


图 4.25 $Kn = 0.01$ 时圆柱绕流的速度和温度等值面图（上方等值面：AUGKS，上方等值线：UGKS，下方等值面：GKS）

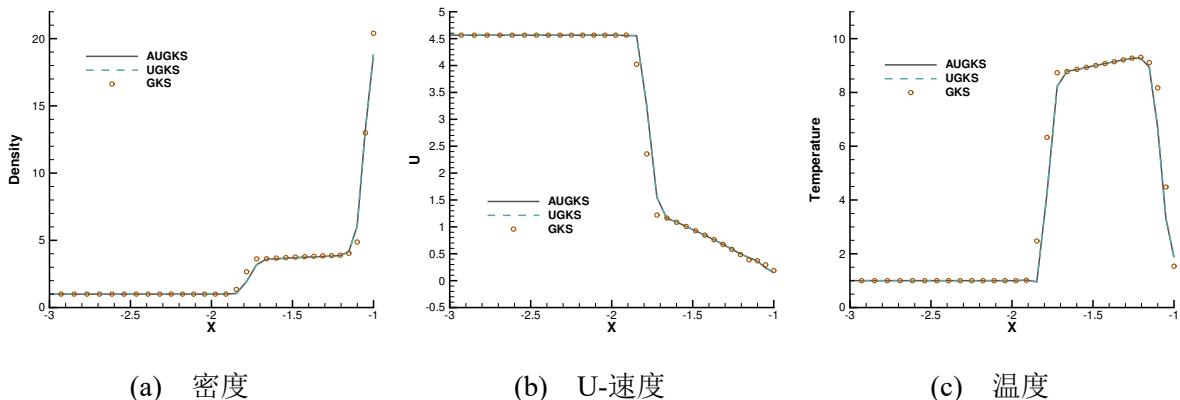
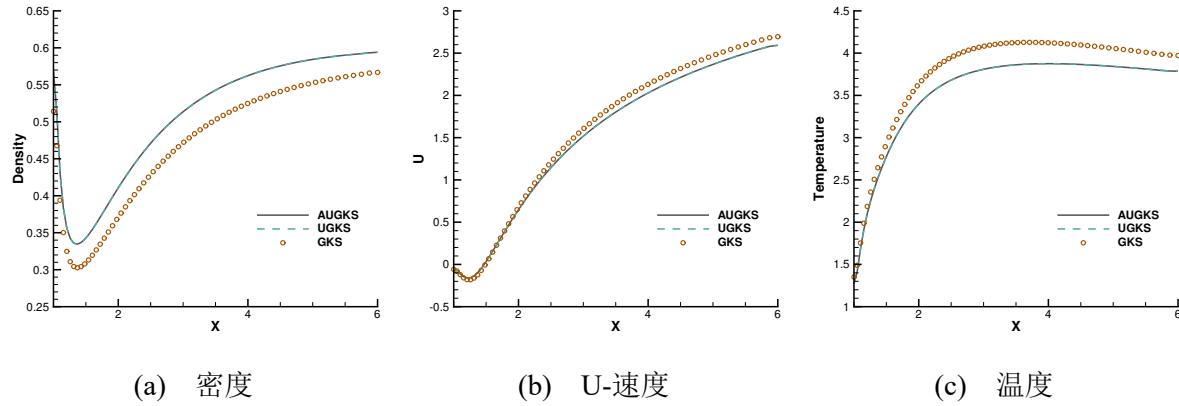
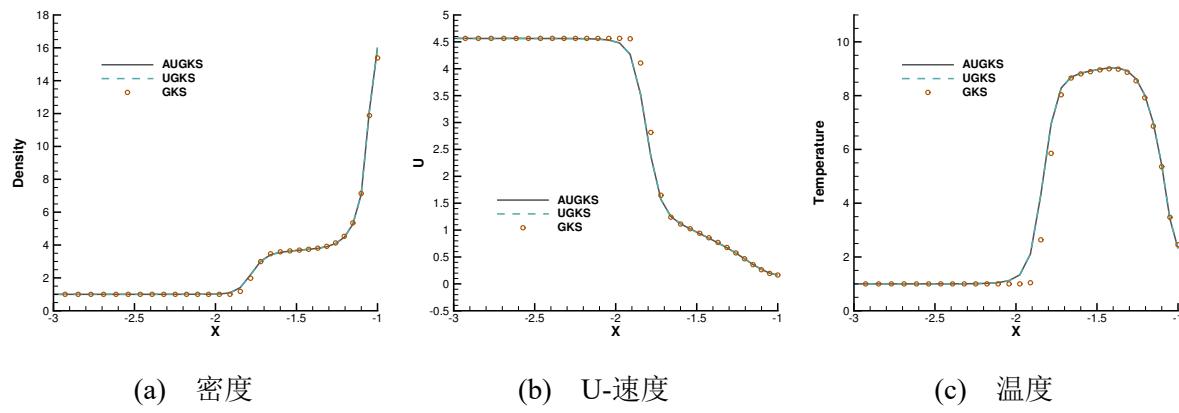
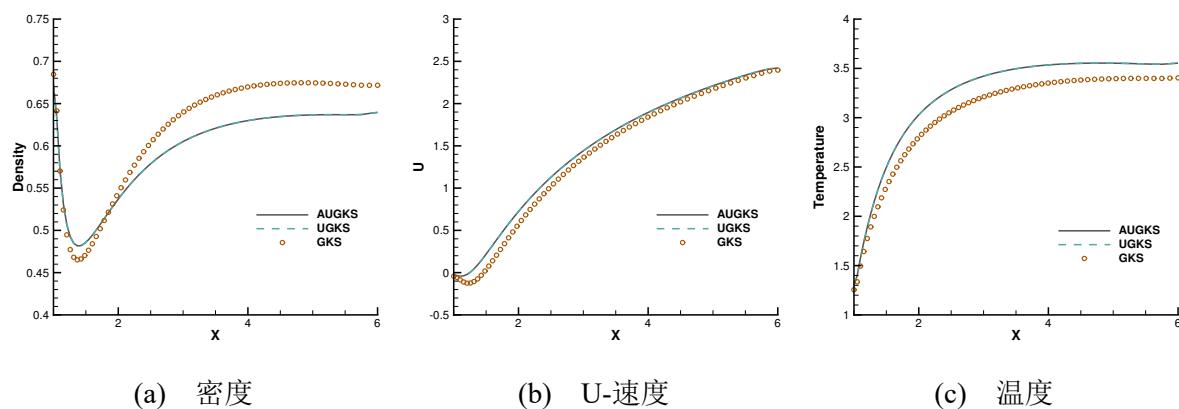


图 4.26 $Kn = 0.001$ 时沿圆柱前方水平中心线的密度，速度和温度分布

图 4.27 $Kn = 0.001$ 时沿圆柱后方水平中心线的密度, 速度和温度分布图 4.28 $Kn = 0.001$ 时沿圆柱前方水平中心线的密度, 速度和温度分布图 4.29 $Kn = 0.001$ 时沿圆柱后方水平中心线的密度, 速度和温度分布

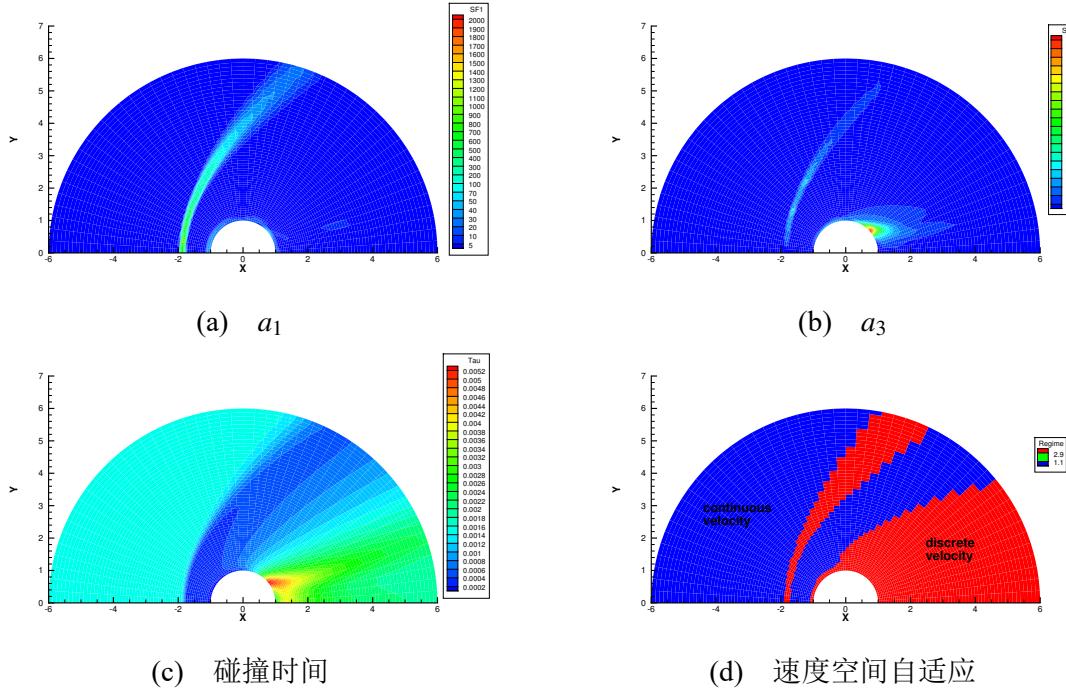


图 4.30 $Kn = 0.001$ 时圆柱绕流的速度空间自适应情况

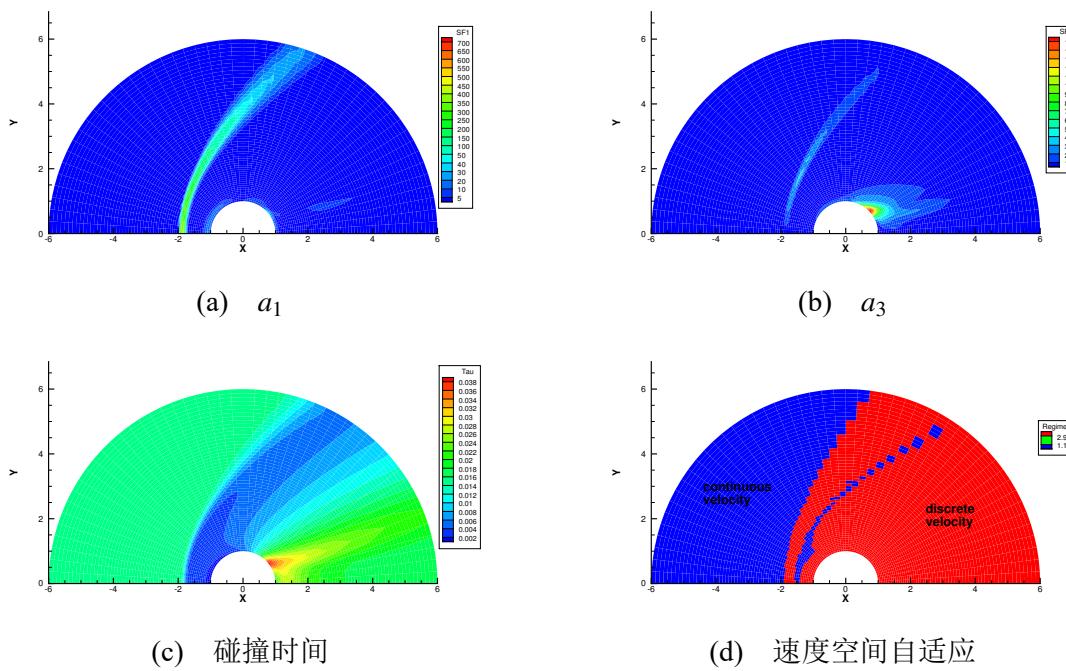


图 4.31 $Kn = 0.01$ 时圆柱绕流的速度空间自适应情况

衡区域则是离散的。基于 Chapman-Enskog 展开，我们提出了一种严格的粒子速度空间切换准则，并通过数值实验验证了其有效性。在速度空间自适应的统一框架下，连续介质流动和动理学解之间并不需要缓冲区进行桥接。这种紧致特性为具有复杂几何外形、非定常的多尺度流动模拟提供了一种行之有效的方法。和原始基于统一离散速度空间的 UGKS 相比，AUGKS 在多尺度输运问题的计算中具有更高的计算效率和更低的内存需求。AUGKS 为非平衡流动研究提供了一种有效的工具，并可以和现有成熟的隐式迭代与多重网格技术进一步结合。

第五章 多组分气体和等离子输运的统一气体动理学格式

5.1 简介

地球大气至少应被看作氮气和氧气的二元混合物。不同气体组分之间的相互作用引入了额外的自由度，因而使气体动力学系统变得更加复杂。不同种的气体分子质量不同，因而以不同的惯性和平均速度运动。在两种粒子质量差很大时，这种情况表现的更加显著，例如在等离子体物理中电子绕离子的回转运动。考虑组分内的自碰撞和组分间的碰撞，Boltzmann 方程可以推广到混合物的情况，以追踪每种粒子分布函数的演化。同时，从宏观尺度上看，分子间频繁的碰撞是流体微团建模成立的前提，即微团间仅通过挤压和摩擦相互作用，而相互没有粒子穿透。流体微团携带着不同的组分的粒子，因而所有的组分此时在混合物中表现出一致的行为。在宏观流体动力学描述中，对于混合物系统，需要引入附加的体积分数^[140]、质量分数^[141]或绝热指数比^[142]的方程对系统进行封闭。由于时空分辨率的限制，需要在宏观流体动力学尺度上对不同气体组分在动理学尺度上的相互作用信息进行提取和建模，这当然是一件很困难的工作。

如果存在一个具有完备定义的尺度层次结构，那么动理学和流体动力学方程和相应的算法均能适用于各自对应的流域。然而，在真实气体流动中，很可能并不存在一个如此清晰的尺度分离。一个典型的例子是大气层。随着高度的增加，气体密度不断减小，粒子平均自由程也不断减小，大气层可以相应地被划分为对流层、平流层、中间层、暖层和逃逸层等。因此，大气环境具有内禀的多尺度性质。随着从上层大气到下层近地流动的特征尺度变化，不同的物理机制，如宏观波动和微观粒子输运的性质，可能在不同层内的流动演化中发挥不同的作用。考虑一个固定的特征尺度，例如数值模拟中的网格尺寸，在一个多尺度流动问题中网格克努森数 Kn_c 可能在流场中发生显著变化。因此，数值格式必须具有多尺度性质，才能准确捕捉不同状态下的非平衡物理效应，提供从稀薄到连续介质动力学的连续谱。为了实现这一目标，一个可行的选择是在局部时空分辨率下对流体的演化进行建模和模拟，例如单元大小与粒子平均自由路径的比值 $\Delta x/\ell$ ，以及时间步长超过碰撞时间 $\Delta t/\tau$ 。当 $\Delta t \sim \tau$ 和 $\Delta x \sim \ell$ 时，自由输运(粒子性质)占主导作用，导致了显著的输运现象，而在 $\Delta t \gg \tau$ 和 $\Delta x \gg \ell$ 这种情况下，在一个时间步长内频繁的粒子碰撞(波的性质)占主导地位，从而展示出集体流动的物理特性。换句话说，为了发展一种可靠的多尺度流动输运模拟的数值算法，网格尺寸和时间步长需要作为动态参量直接参与流体演化。

统一气体动理学格式 (Unified Gas-Kinetic Scheme, UGKS) 的出现为多尺度、多物理的输运问题提供了一种选择。在 UGKS 中，建模尺度是网格尺度和时间步长，我们

把在此基础上直接构造离散气体动力学控制方程的方法称为直接建模方法。随着时间步长与当地粒子碰撞时间（或网格尺度与当地粒子平均自由程）比值的变化，其可以在不同的局部流态下自动恢复不同尺度的流动演化机制。在之前的研究中，已有针对气体混合物^[143] 和完全电离等离子体模型^[144] 拓展 UGKS 方法的初步尝试。本章在统一气体动理学格式的框架下，将这种构造方法拓展至更广泛的多尺度中性气体混合物和等离子体输运问题。对于气体混合物，加入了完整 Boltzmann 碰撞项的求解方法，拓展了 UGKS 在高度稀薄流下的精度和适用性；对于多组分等离子体，引入了化学反应模型，通过求解从动理学尺度连续变化至宏观磁流体力学尺度的离散控制方程，实现了对动态电离等离子体系统的定量刻画，这也是从未被学界系统研究过的重要物理问题。

本章的组织如下。首先介绍描述气体混合物和等离子体演化的动理论的基本内容。其后，我们将介绍统一气体动理学格式在气体和等离子体混合物中的构造方法和数值实现。第四部分介绍了相关的数值实验用以验证该方法的表现。最后是结论部分。

5.2 气体动理学建模

5.2.1 混合物的动理学描述

气体动理学描述粒子分布函数在相空间内的演化过程。在动理学尺度上考虑分裂的粒子输运和碰撞算子，在气体混合物中每个组分 α 的演化方程可以写作，

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \mathbf{u}_\alpha \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_\alpha + \phi_\alpha \cdot \nabla_{\mathbf{u}} f_\alpha = Q_\alpha, \quad (5.1)$$

其中 $f(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$ 是组分 α 的分布函数， $\mathbf{x} \in \mathcal{R}^3$ 是空间变量， $\mathbf{u} \in \mathcal{R}^3$ 是粒子速度， ϕ_α 是可能存在的外力或内力作用项。Boltzmann 方程的碰撞算子是，

$$Q_\alpha = \sum_{r=1}^N Q_{\alpha r}(f_\alpha, f_r) = \sum_{r=1}^N \int \int [f'_\alpha f'_r - f_\alpha f_r] g_{\alpha r} \sigma_{\alpha r} d\Omega d\mathbf{u}_r, \quad (5.2)$$

其中 f' 是碰撞后分布函数， r 指代气体组分。 $g_{\alpha r}$ 是两类分子 α 和 r 的相对运动速度， $\sigma_{\alpha r} d\Omega$ 是考虑特定碰撞的微分碰撞截面。这里 $Q_{\alpha\alpha}(f_\alpha, f_\alpha)$ 是同种分子的碰撞项， $Q_{\alpha r}(f_\alpha, f_r)$ 是不同分子间的碰撞。

组分 α 的宏观流体物理量一一对应于粒子分布函数在速度空间的矩，

$$\mathbf{W}_\alpha = \begin{pmatrix} \rho_\alpha \\ \rho_\alpha \mathbf{U}_\alpha \\ \rho_\alpha \mathcal{E}_\alpha \end{pmatrix} = \int m_\alpha f_\alpha \psi d\mathbf{u},$$

其中 $\psi = (1, \mathbf{u}, \frac{1}{2}\mathbf{u}^2)$ 是由碰撞组成的矢量。如果我们对方程 (5.1) 在速度空间整体求矩，考虑没有外力场的情况，可以得到每个组分相应的质量守恒，动量和能量的平衡律：

(a) 质量守恒

$$\frac{\partial n_\alpha}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (n_\alpha \mathbf{U}_\alpha) = 0,$$

(b) 动量平衡

$$\frac{\partial (\rho_\alpha \mathbf{U}_\alpha)}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho_\alpha \mathbf{U}_\alpha \mathbf{U}_\alpha) = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{P}_\alpha + \int \mathbf{u} Q_\alpha d\mathbf{u},$$

(c) 能量平衡

$$\frac{\partial (\rho_\alpha \mathcal{E}_\alpha)}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho_\alpha \mathcal{E}_\alpha \mathbf{U}_\alpha) = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{P}_\alpha \mathbf{U}_\alpha) - \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{q}_\alpha + \int \frac{1}{2} \mathbf{u}^2 Q_\alpha d\mathbf{u}.$$

这里 \mathbf{P}_α 是应力张量, \mathbf{q}_α 是热流。值得注意的是, 由于不同组分间的动量和能量交换, 对于单组分的碰撞积分 $\int \mathbf{u} Q_\alpha d\mathbf{u}$ 和 $\int \frac{1}{2} \mathbf{u}^2 Q_\alpha d\mathbf{u}$ 在气体演化过程中不再为零, 而混合物总质量、动量和能量仍然是守恒的。

碰撞项 Q_α 的作用是在碰撞对重新分配动量和能量, 从而驱动系统朝平衡态趋近。在介观尺度上, 即粒子平均自由程的数倍至数十倍, 这一效应可以通过简化的松弛模型表征, 例如对于单组分的 BGK^[47], Shakhov^[82] 和 ES-BGK^[81] 模型。对于多组分气体而言, 上面的松弛模型推广起来不容易, 如何设计兼顾精度和效率的多组分气体松弛模型依然是近年来研究的热门内容。在这里, 我们介绍一种由 Andries, Aoki 和 Perthame^[145] 提出的 BGK 类松弛模型。在这个模型中, 组分 α 的松弛项被定义为

$$Q_\alpha = \frac{f_\alpha^+ - f_\alpha}{\tau_\alpha}. \quad (5.3)$$

这里的平衡态分布函数的定义基于局部的虚拟宏观量, 其作用是驱动所有的组分以和宏观方程相同的变化率向平衡态趋近, 即,

$$f_\alpha^+ = n_\alpha \left(\frac{m_\alpha}{2\pi k_B \bar{T}_\alpha} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{m_\alpha}{2k_B \bar{T}_\alpha} (\mathbf{u}_\alpha - \bar{\mathbf{U}}_\alpha)^2 \right), \quad (5.4)$$

其中 n_α 是数密度, m_α 是分子质量, k 是 Boltzmann 常数。对于弹性碰撞而言, 修正的温度 \bar{T}_α 和速度 $\bar{\mathbf{U}}_\alpha$ 的定义方式可以参见^[146]。其核心思想是对于 Maxwell 分子, 可以通过理论积分得到其宏观量的变化率, 再通过在局部平衡态中修正的宏观量, 使得 BGK 方程能够恢复与宏观方程相同的变换率。其定义方法为,

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{U}}_\alpha &= \mathbf{U}_\alpha + \tau_\alpha \sum_r \frac{2m_r}{m_\alpha + m_r} v_{\alpha r} (\mathbf{U}_r - \mathbf{U}_\alpha), \\ \frac{3}{2} k_B \bar{T}_\alpha &= \frac{3}{2} k_B T_\alpha - \frac{m_\alpha}{2} (\bar{\mathbf{U}}_\alpha - \mathbf{U}_\alpha)^2 \\ &+ \tau_\alpha \sum_r \frac{4m_\alpha m_r}{(m_\alpha + m_r)^2} v_{\alpha r} \left[\frac{3}{2} k_B T_r - \frac{3}{2} k_B T_\alpha + \frac{m_r}{2} (\mathbf{U}_r - \mathbf{U}_\alpha)^2 \right], \end{aligned} \quad (5.5)$$

其中 $v_{\alpha r}$ 分子间相互作用的频率, 并由其决定松弛时间,

$$\tau_\alpha = \frac{\beta}{\sum_r^N v_{\alpha r}}. \quad (5.6)$$

这里的 β 是一个常数，简单起见可以取 $\beta = 1$ ，而要在所有组分均为同种气体时可以取 $\beta = 6/5$ 恢复单组分气体的碰撞频率。碰撞频率的定义方法取决于不同的分子模型，例如对于 Maxwell 分子而言，有

$$v_{\alpha r} = 0.422 \pi n_r \left(\frac{a_{\alpha r}(m_\alpha + m_r)}{m_\alpha m_r} \right), \quad (5.7)$$

其中 a^{sr} 分子间相互作用的幂指数。而对硬球分子，则有

$$v_{\alpha r} = \frac{4\sqrt{\pi}}{3} n_r \left(\frac{2kT_\alpha}{m_\alpha} + \frac{2kT_r}{m_r} \right)^{1/2} \left(\frac{d_\alpha + d_r}{2} \right)^2, \quad (5.8)$$

其中 d_α, d_r 是分子直径。

根据所定义的松弛模型算子，可以写出 BGK 类的演化方程，

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \mathbf{u}_\alpha \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_\alpha + \phi_\alpha \cdot \nabla_{\mathbf{u}} f_\alpha = \frac{f^+ - f_\alpha}{\tau_\alpha}. \quad (5.9)$$

考虑一个局部常数的碰撞时间 τ_α ，则式 (5.9) 沿特征线的形式演化解可以写作，

$$f_\alpha(\mathbf{x}, t, \mathbf{u}) = \frac{1}{\tau_\alpha} \int_{t^n}^t f^+(\mathbf{x}', t', \mathbf{u}') e^{-(t-t')/\tau_\alpha} dt' \\ + e^{-(t-t')/\tau_\alpha} f_\alpha(\mathbf{x}^n, t^n, \mathbf{u}^n), \quad (5.10)$$

其中 $\mathbf{x}' = \mathbf{x} - \mathbf{u}'(t - t') - \frac{1}{2}\phi_\alpha(t - t')^2$ 以及 $\mathbf{u}' = \mathbf{u} - \phi_\alpha(t - t')$ 是粒子在相空间的运动轨迹，而 $f_\alpha(\mathbf{x}^n, t^n, \mathbf{u}^n)$ 是组分 α 在第 n 时间步上的分布函数。

5.2.2 等离子体的动理学描述

对于多组分的等离子体动力学而言，其加速度作用项 ϕ_α 需要考虑电场力和洛伦兹力的作用，相应的分布函数演化方程变为，

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \mathbf{u}_\alpha \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_\alpha + \frac{q_\alpha}{m_\alpha} (\mathbf{E} + \mathbf{u}_\alpha \times \mathbf{B}) \cdot \nabla_{\mathbf{u}} f_\alpha = C_\alpha, \quad (5.11)$$

其中下标 $\alpha = i, e, n$ 表示特定的离子、电子和中性粒子组分， (q_α, m_α) 是粒子电荷和质量， (\mathbf{E}, \mathbf{B}) 是电场和磁场。

首先考虑完全电离的等离子体。在这种情况下，对于 Boltzmann 碰撞项内的小偏转角的 Coulomb 相互作用，可以得到其极限情况下的 Fokker-Planck-Landau 型碰撞项，

$$C_{\alpha e} = \sum_{\beta}^N \left\{ \nabla_{\mathbf{u}} \cdot \int \Phi(\mathbf{u} - \mathbf{u}') [f_\beta(\mathbf{u}') \nabla_{\mathbf{u}} f_\alpha(\mathbf{u}) - f_\alpha(\mathbf{u}) \nabla_{\mathbf{u}} f_\beta(\mathbf{u}')] d\mathbf{u}' \right\}, \quad (5.12)$$

其中 $\Phi(\mathbf{u}) = (|\mathbf{u}|^2 \mathbf{I}_3 - \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) / |\mathbf{u}|^3$ 是一个 3×3 的矩阵。而如果考虑惰性、无化学反应的部分电离等离子体，这里还需要考虑与中性粒子的弹性碰撞作用。对于中性粒子的情形，原始的 Boltzmann 方程的碰撞积分是

$$C_{\alpha n} = \sum_{\beta}^N \int_{\mathcal{R}^3} \int_{\mathcal{S}^2} [f_\alpha(\mathbf{u}') f_\beta(\mathbf{u}'_1) - f_\alpha(\mathbf{u}) f_\beta(\mathbf{u}_1)] \mathcal{B} d\Omega d\mathbf{u}_1, \quad (5.13)$$

其中 N 是参与碰撞的组分数。

由于碰撞项的复杂性，我们在这里可以同样使用 BGK 模型方程 (5.9) 在偏离平衡态不远处模拟碰撞项的作用，相应的宏观方程可以通过在速度空间取矩得到，即

$$\frac{\partial n_\alpha}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (n_\alpha \mathbf{U}_\alpha) = 0, \quad (5.14)$$

$$\frac{\partial (\rho_\alpha \mathbf{U}_\alpha)}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho_\alpha \mathbf{U}_\alpha \mathbf{U}_\alpha) = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{P}_\alpha + n_\alpha q_\alpha (\mathbf{E} + \mathbf{U}_\alpha \times \mathbf{B}) + \mathbf{R}_\alpha, \quad (5.15)$$

$$\frac{\partial (\rho_\alpha \mathcal{E}_\alpha)}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho_\alpha \mathcal{E}_\alpha \mathbf{U}_\alpha) = \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{P}_\alpha \mathbf{U}_\alpha) - \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{q}_\alpha + \mathbf{U}_\alpha \cdot (n_\alpha q_\alpha \mathbf{E} + \mathbf{R}_\alpha) + H_\alpha, \quad (5.16)$$

其中源项 \mathbf{R}_α 和 H_α 来自碰撞项的矩，

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_\alpha &= \int \mathbf{u} m_\alpha \frac{f_\alpha^+ - f_\alpha^-}{\tau_\alpha} d\mathbf{u} = \sum_r \frac{2m_\alpha m_r}{m_\alpha + m_r} n_\alpha v_{\alpha r} (\mathbf{U}_r - \mathbf{U}_\alpha), \\ H_\alpha &= \int \frac{1}{2} (\mathbf{u} - \mathbf{U})^2 m_\alpha \frac{f_\alpha^+ - f_\alpha^-}{\tau_\alpha} d\mathbf{u} \\ &= \sum_r \frac{4m_\alpha m_r}{(m_\alpha + m_r)^2} n_\alpha v_{\alpha r} \left[\frac{3}{2} k_B T_r - \frac{3}{2} k_B T_\alpha + \frac{m_r}{2} (\mathbf{U}_r - \mathbf{U}_\alpha)^2 \right], \end{aligned} \quad (5.17)$$

这个结果和 Braginskii^[147] 提出的部分电离等离子体模型方程是一致的。

5.2.3 电离和复合反应的动理论学建模

考虑一个单电离和复合反应的等离子体，即系统内仅有两种中性气体和由其产生的电子和离子。因此，电子撞击造成的电离反应和辐射复合反应可以写作，



在这里，电离势 ε_{ion} 指的是电离过程中的能量损失，而 $\varepsilon_{rec} = h\nu$ 描述复合反应中光子的逃逸。对于一个理想情况的光学薄系统，辐射能量 ε_{rec} 将完全从等离子体系统中损失，而对于实际的系统，光子吸收速率可以用比尔-朗伯定律定性的描述，也可以和辐射传递方程耦合求解。

在这种情况下，碰撞项包括弹性碰撞，Coulomb 碰撞和化学反应的贡献，即 $C_\alpha = C_{\alpha n} + C_{\alpha e} + C_{\alpha c}$ 。特别地，上述的电离和复合反应 $C_{ic} = C_i^{ion} + C_i^{rec}$ 对于离子的作用可以用类似 Fokker-Planck 的算子模拟，

$$C_i^{ion} = f_n \int f_e \sigma_{ion} g d\mathbf{u}, \quad (5.19)$$

$$C_i^{rec} = -f_i \int f_e \sigma_{rec} g d\mathbf{u}, \quad (5.20)$$

这里 g 是碰撞粒子的相对速度, σ 是电离和复合过程中的微分碰撞截面, 在 Fokker-Planck 方程中其被假设仅与相对速度有关。

为了得到相应的宏观方程, 碰撞项的 0^{th} , 1^{st} 和 2^{nd} 阶矩需要确定。对于离子的化学反应项的零阶矩是,

$$\int C_i^{ion} d\mathbf{u} = \int f_n(\mathbf{u}') \int f_e(\mathbf{u}) \sigma_{ion} g d\mathbf{u} d\mathbf{u}'. \quad (5.21)$$

一般而言, 电子质量远小于离子和中性分子, 例如电子是氢核质量的 $1/1836$, 所以电子的运动速度要比中性气体分子和宏观流体速度快得多。因此可以近似将相对速度 $g = |\mathbf{u} - \mathbf{u}'|$ 看作电子的热运动速度 $w = |\mathbf{w}| = |\mathbf{u} - \mathbf{U}_e|$, 之后我们就可以理论地求解碰撞积分,

$$\Gamma_i^{ion} = \int f_n(\mathbf{u}') \int f_e(\mathbf{u}) \sigma_{ion}(u) g d\mathbf{u} d\mathbf{u}' \approx \int f_n(\mathbf{u}') \int f_e(\mathbf{w}) \sigma_{ion}(w) w d\mathbf{w} d\mathbf{u}' = n_n n_e \langle \sigma_{ion} v_e \rangle, \quad (5.22)$$

其中 $\langle \cdot \rangle$ 表示在速度空间取平均。相似地, 复合反应可以模拟为,

$$\int C_i^{rec} d\mathbf{v} \approx \Gamma_i^{rec} \equiv -n_i n_e \langle \sigma_{rec} v_e \rangle, \quad (5.23)$$

当然地, $\Gamma_n^{ion} = -\Gamma_i^{ion}$ 和 $\Gamma_n^{rec} = -\Gamma_i^{rec}$ 是质量守恒要求满足的基本关系。

相应的考虑化学反应的宏观守恒律可以通过对动理学方程在速度空间取矩得到。方程 (5.11) 的零阶、一阶和二阶矩分别为连续性方程,

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (n_i \mathbf{U}_{\alpha}) &= \Gamma_i^{ion} - \Gamma_n^{rec}, \\ \frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (n_e \mathbf{U}_{\alpha}) &= \Gamma_i^{ion} - \Gamma_n^{rec}, \\ \frac{\partial n_n}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (n_n \mathbf{U}_{\alpha}) &= \Gamma_n^{rec} + \Gamma_i^{ion}, \end{aligned} \quad (5.24)$$

动量方程,

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\rho_i \mathbf{U}_i)}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho_i \mathbf{U}_i \mathbf{U}_i) &= \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{P}_i + n_i q_i (\mathbf{E} + \mathbf{U}_i \times \mathbf{B}) + \mathbf{R}_i + \Gamma_i^{ion} m_i \mathbf{U}_n - \Gamma_n^{rec} m_i \mathbf{U}_i, \\ \frac{\partial (\rho_e \mathbf{U}_e)}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho_e \mathbf{U}_e \mathbf{U}_e) &= \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{P}_e + n_e q_e (\mathbf{E} + \mathbf{U}_e \times \mathbf{B}) + \mathbf{R}_e + \Gamma_e^{ion} m_e \mathbf{U}_n - \Gamma_n^{rec} m_e \mathbf{U}_e, \\ \frac{\partial (\rho_n \mathbf{U}_n)}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho_n \mathbf{U}_n \mathbf{U}_n) &= \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{P}_n + \mathbf{R}_n + \Gamma_n^{rec} (m_i \mathbf{U}_i + m_e \mathbf{U}_e) - \Gamma_i^{ion} m_n \mathbf{U}_n, \end{aligned} \quad (5.25)$$

能量方程,

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial(\rho_i \mathcal{E}_i)}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho_i \mathcal{E}_i \mathbf{U}_i) &= \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{P}_i \mathbf{U}_i) - \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{q}_i + n_i q_i \mathbf{E} \cdot \mathbf{U}_i + H_i \\
 &\quad + \frac{m_i}{m_n} (\Gamma_i^{ion} \frac{1}{2} m_n v_n^2 + Q_n^{ion}) - \Gamma_n^{rec} m_i U_i^2 - Q_i^{rec}, \\
 \frac{\partial(\rho_e \mathcal{E}_e)}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho_e \mathcal{E}_e \mathbf{U}_e) &= \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{P}_e \mathbf{U}_e) - \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{q}_e + n_e q_e \mathbf{E} \cdot \mathbf{U}_e + H_e \\
 &\quad + \frac{m_e}{m_n} (\Gamma_i^{ion} \frac{1}{2} m_n U_n^2 + Q_n^{ion}) - \Gamma_i^{ion} \phi_{ion} - \Gamma_n^{rec} \frac{1}{2} m_e U_e^2 - Q_e^{rec}, \\
 \frac{\partial(\rho_n \mathcal{E}_n)}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\rho_n \mathcal{E}_n \mathbf{U}_n) &= \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\mathbf{P}_n \mathbf{U}_n) - \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{q}_n + H_n \\
 &\quad + \Gamma_n^{rec} (\frac{1}{2} m_i U_i^2 + \frac{1}{2} m_e U_e^2) + Q_i^{rec} + Q_e^{rec} - (\Gamma_i^{ion} \frac{1}{2} m_n U_n^2 + Q_n^{ion}),
 \end{aligned} \tag{5.26}$$

其中 $Q_n^{ion} = \Gamma_i^{ion} \frac{3}{2} k_B T_n$, $Q_i^{rec} = \Gamma_n^{rec} \frac{3}{2} k_B T_i$, $Q_e^{rec} = \Gamma_n^{rec} \frac{3}{2} k_B T_e$ 。

5.2.4 部分电离等离子体的 BGK 类松弛模型

使用和式 (5.3) 相同的策略, 考虑电离和复合反应过程, 修正的宏观流体物理量可以被定义。其中数密度的定义是,

$$\begin{aligned}
 \bar{n}_i &= n_i + \tau_i (\Gamma_i^{ion} - \Gamma_n^{rec}), \\
 \bar{n}_e &= n_e + \tau_e (\Gamma_i^{ion} - \Gamma_n^{rec}), \\
 \bar{n}_n &= n_n + \tau_n (\Gamma_n^{rec} - \Gamma_i^{ion}).
 \end{aligned} \tag{5.27}$$

速度,

$$\begin{aligned}
 \bar{\mathbf{U}}_i &= \mathbf{U}_i + \tau_i \left[\frac{2m_e v_{ie}}{m_i + m_e} (\mathbf{U}_e - \mathbf{U}_i) + \frac{2m_n v_{in}}{m_i + m_n} (\mathbf{U}_n - \mathbf{U}_i) + \frac{\Gamma_i^{ion}}{n_i} (\mathbf{U}_n - \mathbf{U}_i) \right], \\
 \bar{\mathbf{U}}_e &= \mathbf{U}_e + \tau_e \left[\frac{2m_i v_{ei}}{m_e + m_i} (\mathbf{U}_i - \mathbf{U}_e) + \frac{2m_n v_{en}}{m_e + m_n} (\mathbf{U}_n - \mathbf{U}_e) + \frac{\Gamma_i^{ion}}{n_e} (\mathbf{U}_n - \mathbf{U}_e) \right], \\
 \bar{\mathbf{U}}_n &= \mathbf{U}_n + \tau_n \left[\frac{2m_i v_{ni}}{m_n + m_i} (\mathbf{U}_i - \mathbf{U}_n) + \frac{2m_e v_{ne}}{m_n + m_e} (\mathbf{U}_e - \mathbf{U}_n) + \frac{\Gamma_n^{rec}}{n_n} \left(\frac{m_i}{m_n} \mathbf{U}_i + \frac{m_e}{m_n} \mathbf{U}_e - \mathbf{U}_n \right) \right],
 \end{aligned} \tag{5.28}$$

和温度,

$$\begin{aligned}
\frac{3}{2}k_B\bar{T}_i &= \frac{3}{2}k_BT_i - \frac{m_i}{2}(\bar{\mathbf{U}}_i - \mathbf{U}_i)^2 \\
&\quad + \frac{4\tau_i m_i m_e v_{ie}}{(m_i + m_e)^2} \left[\frac{3}{2}k_BT_e - \frac{3}{2}k_BT_i + \frac{m_e}{2}(\mathbf{U}_e - \mathbf{U}_i)^2 \right] \\
&\quad + \frac{4\tau_i m_i m_n v_{in}}{(m_i + m_n)^2} \left[\frac{3}{2}k_BT_n - \frac{3}{2}k_BT_i + \frac{m_n}{2}(\mathbf{U}_n - \mathbf{U}_i)^2 \right], \\
&\quad + \frac{\tau_i}{n_i} \left[\Gamma_i^{ion} \frac{m_i}{2}(\mathbf{U}_i - \mathbf{U}_n)^2 + \frac{m_i}{m_n} Q_n^{ion} - Q_i^{rec} \right], \\
\frac{3}{2}k_B\bar{T}_e &= \frac{3}{2}k_BT_e - \frac{m_e}{2}(\bar{\mathbf{U}}_e - \mathbf{U}_e)^2 \\
&\quad + \frac{4\tau_e m_e m_i v_{ei}}{(m_e + m_i)^2} \left[\frac{3}{2}k_BT_i - \frac{3}{2}k_BT_e + \frac{m_i}{2}(\mathbf{U}_i - \mathbf{U}_e)^2 \right] \\
&\quad + \frac{4\tau_e m_e m_n v_{en}}{(m_e + m_n)^2} \left[\frac{3}{2}k_BT_n - \frac{3}{2}k_BT_e + \frac{m_n}{2}(\mathbf{U}_n - \mathbf{U}_e)^2 \right] \\
&\quad + \frac{\tau_e}{n_e} \left[\Gamma_i^{ion} \frac{m_e}{2}(\mathbf{U}_i - \mathbf{U}_n)^2 - \Gamma_i^{ion} \phi_{ion} + \frac{m_e}{m_n} Q_n^{ion} - Q_e^{rec} \right], \\
\frac{3}{2}k_B\bar{T}_n &= \frac{3}{2}k_BT_n - \frac{m_n}{2}(\bar{\mathbf{U}}_n - \mathbf{U}_n)^2 \\
&\quad + \frac{4\tau_n m_n m_i v_{ni}}{(m_n + m_i)^2} \left[\frac{3}{2}k_BT_i - \frac{3}{2}k_BT_n + \frac{m_i}{2}(\mathbf{U}_i - \mathbf{U}_n)^2 \right] \\
&\quad + \frac{4\tau_n m_n m_e v_{ni}}{(m_n + m_e)^2} \left[\frac{3}{2}k_BT_i - \frac{3}{2}k_BT_n + \frac{m_e}{2}(\mathbf{U}_e - \mathbf{U}_n)^2 \right] \\
&\quad + \frac{\tau_n}{n_n} \left[\Gamma_n^{rec} \left(\frac{m_i}{2} \mathbf{U}_i^2 + \frac{m_e}{2} \mathbf{U}_e^2 + \frac{m_n}{2} \mathbf{U}_n^2 - m_i \mathbf{U}_n \cdot \mathbf{U}_i - m_e \mathbf{U}_n \cdot \mathbf{U}_e \right) \right. \\
&\quad \left. + Q_i^{rec} + Q_e^{rec} - Q_n^{ion} \right].
\end{aligned} \tag{5.29}$$

在确定了所有宏观流场变量后，即可以确定相应的 BGK 型松弛模型，用以演化粒子分布函数，

$$C_\alpha = \frac{f_\alpha^+ - f_\alpha^-}{\tau_\alpha}. \tag{5.30}$$

5.2.5 Maxwell 方程组

Maxwell 方程组简洁优美地描述了电磁现象的根源。对于一个自演化的等离子体动力学问题，电场和磁场 (\mathbf{E}, \mathbf{B}) 的演化过程是和带电粒子的运动耦合的。宏观电磁场的存在会驱动带电粒子的输运，而其输运效应也会反作用于宏观场。真空中的 Maxwell

方程具有以下形式,

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - c^2 \nabla_{\mathbf{x}} \times \mathbf{B} &= -\frac{1}{\epsilon_0} \mathbf{J}, \\ \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \times \mathbf{E} &= 0, \\ \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{E} &= \frac{\sigma}{\epsilon_0}, \\ \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{B} &= 0.\end{aligned}\tag{5.31}$$

其中 $\sigma = e(n_i - n_e)$ 是静电荷密度, \mathbf{J} 是电流, 而光速和真空磁导率和电容率相联系 $c = (\mu_0 \epsilon_0)^{-1/2}$ 。根据 Maxwell 方程的形式, 如果初始磁场散度为零, 则在电磁场的演化过程中应始终保持这一性质。然而对于数值计算而言, 数值误差的存在可能破坏这一性质, 而这对电磁场长期演化的影响是巨大的。为了保证散度限制, 这里我们引入 Munz 等人^[148] 提出的完全双曲型 Maxwell 方程组 (perfectly hyperbolic Maxwell's equations, PHM) 来演化电磁场, 即

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - c^2 \nabla_{\mathbf{x}} \times \mathbf{B} + \chi c^2 \nabla_{\mathbf{x}} \phi &= -\frac{1}{\epsilon_0} \mathbf{J}, \\ \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \times \mathbf{E} + \gamma \nabla_{\mathbf{x}} \psi &= 0, \\ \frac{1}{\chi} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{E} &= \frac{\sigma}{\epsilon_0}, \\ \frac{\epsilon_0 \mu_0}{\gamma} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{B} &= 0,\end{aligned}\tag{5.32}$$

这里 ϕ, ψ 是两个人为给定的修正势函数, 相应的磁场和电场散度误差的运动速度是 γc 和 χc 。在条件给定合适的情况下, 散度误差会以光速传出流场。

5.3 统一气体动理论学格式

5.3.1 更新方法

在本节中, 我们将介绍适用于多组分气体和等离子体的统一气体动理论学格式的原理和数值实现方法。考虑网格单元内的平均宏观量和粒子分布函数,

$$\begin{aligned}(\mathbf{W}_\alpha)_i &= \frac{1}{\Omega_i(\mathbf{x})} \int_{\Omega_i} \mathbf{W}_\alpha d\mathbf{x}, \\ (f_\alpha)_{i,j} &= \frac{1}{\Omega_i(\mathbf{x}) \Omega_j(\mathbf{u})} \int_{\Omega_i} \int_{\Omega_j} f_\alpha d\mathbf{x} d\mathbf{u},\end{aligned}\tag{5.33}$$

其中 $\Omega_i(\mathbf{x})$ 和 $\Omega_j(\mathbf{u})$ 是离散物理空间和速度空间的网格面积。在 UGKS 中，宏观量和微观量是耦合更新的，

$$(\mathbf{W}_\alpha)_i^{n+1} = (\mathbf{W}_\alpha)_i^n + \frac{1}{\Omega_i} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \sum_r \Delta \mathbf{S}_r \cdot (\mathbf{F}_\alpha)_r^W dt + \int_{t^n}^{t^{n+1}} (\mathbf{Q}_\alpha)_i^W dt + \int_{t^n}^{t^{n+1}} (\mathbf{G}_\alpha)_i^W dt, \quad (5.34)$$

$$(f_\alpha)_{i,j}^{n+1} = (f_\alpha)_{i,j}^n + \frac{1}{\Omega_i} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \sum_r \Delta S_{r,j} (F_\alpha)_{r,j}^f dt + \int_{t^n}^{t^{n+1}} (Q_\alpha)_{i,j}^f dt + \int_{t^n}^{t^{n+1}} (G_\alpha)_{i,j}^f dt, \quad (5.35)$$

其中 \mathbf{F}_r^W 是守恒量通过网格界面 $\Delta \mathbf{S}_r$ 的通量， $F_{r,j}^f$ 则是分布函数的通量。 $(\mathbf{Q}_\alpha)_i^W$ 是由不同组分的分子间碰撞引起的源项，

$$(\mathbf{Q}_\alpha)_i^W = \int (Q_\alpha)_{i,j}^f \psi d\mathbf{u}_j, \quad (5.36)$$

而 $(\mathbf{G}_\alpha)_i^W$ 和 $(G_\alpha)_{i,j}^f$ 是可能存在的加速度作用项，

$$\begin{aligned} (G_\alpha)_{i,j}^f &= -\phi \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} (f_\alpha)_{i,j} \\ (\mathbf{G}_\alpha)_i^W &= \int (G_\alpha)_{i,j}^f \psi d\mathbf{u}_j. \end{aligned} \quad (5.37)$$

在等离子体的输运问题中，除流场外，需要同时更新控制体内电磁场的演化，

$$\mathbf{M}_i^{n+1} = \mathbf{M}_i^n + \frac{1}{\Omega_i} \int_{t^n}^{t^{n+1}} \sum_r \Delta \mathbf{S}_r \cdot \mathbf{F}_r^M dt + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \mathbf{S}_i dt, \quad (5.38)$$

其中 \mathbf{F}_r^M 是电磁场在网格界面的通量，而 \mathbf{S}_i 是式 (5.32) 中的源项。

5.3.2 界面分布函数的构造

在统一气体动理论格式里，网格界面上的分布函数同样由 BGK 方程的积分演化解 (5.9) 构造得到，并随后用于数值通量的计算。简单起见，下面的介绍基于二维结构网格，而其向三维情况和非结构网格的扩展是直接的。

使用简化标记 $(x_{i+1/2}, y_j, t^n) = (0, 0, 0)$ ，并假设一个为局部常数的碰撞时间 τ_α ，则界面上的时空演化分布函数可以写作，

$$\begin{aligned} f_\alpha(0, 0, t, u_k, v_l, \xi) &= \frac{1}{\tau_\alpha} \int_0^t f^+(x', y', t', u'_k, v'_l, \xi) e^{-(t-t')/\tau_\alpha} dt' \\ &\quad + e^{-t/\tau_\alpha} f_\alpha(x^0, y^0, 0, u_k^0, v_l^0, \xi), \end{aligned} \quad (5.39)$$

其中 $x' = x - u'(t-t') - \frac{1}{2}\phi_x(t-t')^2$, $y' = y - v'(t-t') - \frac{1}{2}\phi_y(t-t')^2$, $u' = u - \phi_x(t-t')$, $v' = v - \phi_y(t-t')$ 是粒子在相空间的轨迹，而 (x^0, y^0, u^0, v^0) 在 t 时刻穿过网格界面的粒子在 $t=0$ 时的初始位置。

在数值算法中，组分 α 的初始分布函数在界面两侧被重构至二阶精度，

$$f_\alpha(x^0, y^0, 0, u_k^0, v_l^0, \xi) = \begin{cases} (f_\alpha)_{i+1/2,j,k,l}^L + (\sigma_\alpha)_{i,j,k,l} x + (\theta_\alpha)_{i,j,k,l} y, & x \leq 0, \\ (f_\alpha)_{i+1/2,j,k,l}^R + (\sigma_\alpha)_{i+1,j,k,l} x + (\theta_\alpha)_{i+1,j,k,l} y, & x > 0, \end{cases} \quad (5.40)$$

其中 $(f_\alpha)_{i+1/2,j,k,l}^L$ 和 $(f_\alpha)_{i+1/2,j,k,l}^R$ 是重构出的界面左侧和右侧的初始分布函数。 f_α 在 (i,j) 物理网格和 (k,l) 速度网格中的重构 x 和 y 方向的斜率是 $(\sigma_\alpha)_{i,j,k,l}$ 和 $(\theta_\alpha)_{i,j,k,l}$ 。

界面两侧的修正后的平衡分布函数由 Taylor 级数展开至时空二阶精度，

$$f^+ = f_0^+ [1 + (1 - H[x])a_\alpha^L x + H[x]a_\alpha^R x + b_\alpha y + A_\alpha t], \quad (5.41)$$

其中 f_0^+ 是 $(x=0, t=0)$ 处的修正平衡分布函数，而 $H[x]$ 是 Heaviside 阶梯函数。界面处的守恒量可以根据总系统的相容性条件确定，

$$\sum_\alpha \int (f^+ - f_\alpha)|_{x=0,t=0} \psi dudvd\xi = 0. \quad (5.42)$$

在一个时间步长里，界面两侧的网格内的总质量始终守恒，因此我们可以在界面上假设碰撞时间 τ_α 为局部常数，其可以通过式 (5.6) 确定。

在确定了网格界面的宏观量和平衡态分布函数后，其时空导数 $a_\alpha^L, a_\alpha^R, b_\alpha, A_\alpha$ 可以展开为

$$\begin{aligned} a_\alpha^{L,R} &= a_1^{L,R} + a_2^{L,R} u + a_3^{L,R} v + a_4^{L,R} \frac{1}{2}(u^2 + v^2 + \xi^2) = a_\alpha^{L,R} \psi_\alpha, \\ A_\alpha &= A_1 + A_2 u + A_3 v + A_4 \frac{1}{2}(u^2 + v^2 + \xi^2) = A_\alpha \psi_\alpha. \end{aligned}$$

平衡态分布函数的空间分布 $(a_\alpha^L, a_\alpha^R, b_\alpha)$ 可以根据界面两边修正守恒量的斜率得到，

$$\left(\frac{\partial \bar{\mathbf{W}}_\alpha}{\partial x} \right)^L = \int a_\alpha^L f_0^+ \psi dudvd\xi, \quad \left(\frac{\partial \bar{\mathbf{W}}_\alpha}{\partial x} \right)^R = \int a_\alpha^R f_0^+ \psi dudvd\xi, \quad \frac{\partial \bar{\mathbf{W}}_\alpha}{\partial y} = \int b_\alpha f_0^+ \psi dudvd\xi.$$

f^+ 的时间导数 A_α 根据宏观量的时间变化率得到，

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{W}}_\alpha}{\partial t} = \int A_\alpha f_0^+ \psi dudvd\xi,$$

同时其可以近似地通过相容性条件的导数为零得到，

$$\frac{d}{dt} \sum_\alpha \int (f^+ - f_\alpha)|_{x=0,t=0} \psi dudvd\xi = 0.$$

在所有系数确定后，相应的界面分布函数可以写作，

$$\begin{aligned}
f_\alpha(0,0,t,u_k,v_l,\xi) = & \left(1 - e^{-t/\tau_\alpha}\right) f_0^+ \\
& + \left(\tau_\alpha(-1 + e^{-t/\tau_\alpha}) + te^{-t/\tau_\alpha}\right) a_{\alpha}^{L,R} u_k f_0^+ \\
& - \left[\tau_\alpha \left(\tau_\alpha(-1 + e^{-t/\tau_\alpha}) + te^{-t/\tau_\alpha}\right) + \frac{1}{2} t^2 e^{-t/\tau_\alpha}\right] a_{\alpha}^{L,R} \phi_x f_0^+ \\
& + \left(\tau_\alpha(-1 + e^{-t/\tau_\alpha}) + te^{-t/\tau_\alpha}\right) b_\alpha v_l f_0^+ \\
& - \left[\tau_\alpha \left(\tau_\alpha(-1 + e^{-t/\tau_\alpha}) + te^{-t/\tau_\alpha}\right) + \frac{1}{2} t^2 e^{-t/\tau_\alpha}\right] b_\alpha \phi_y f_0^+ \\
& + \tau_\alpha \left(t/\tau_\alpha - 1 + e^{-t/\tau_\alpha}\right) A_\alpha f_0^+ \\
& + e^{-t/\tau_\alpha} \left[\left((f_\alpha)_{i+1/2,j,k^0,l^0}^L + \left(-(u_k - \phi_x t)t - \frac{1}{2} \phi_x t^2\right) (\sigma_\alpha)_{i,j,k^0,l^0}\right.\right. \\
& + \left.\left. \left(-(v_l - \phi_y t)t - \frac{1}{2} \phi_y t^2\right) (\theta_\alpha)_{i,j,k^0,l^0}\right) H[u_k - \frac{1}{2} \phi_x t] \right. \\
& + \left.\left. \left((f_\alpha)_{i+1/2,j,k^0,l^0}^R + \left(-(u_k - \phi_x t)t - \frac{1}{2} \phi_x t^2\right) (\sigma_\alpha)_{i+1,j,k^0,l^0}\right.\right. \\
& + \left.\left. \left(-(v_l - \phi_y t)t - \frac{1}{2} \phi_y t^2\right) (\theta_\alpha)_{i+1,j,k^0,l^0}\right) (1 - H[u_k - \frac{1}{2} \phi_x t])\right] \\
= & \tilde{f}_{i+1/2,j,k,l}^+ + \tilde{f}_{i+1/2,j,k,l}, \tag{5.43}
\end{aligned}$$

其中 $\tilde{f}_{i+1/2,j,k,l}^+$ 是平衡态积分的贡献项，而 $\tilde{f}_{i+1/2,j,k,l}$ 是初始分布函数的相关项。在界面分布函数确定后，相应的宏观和微观通量对应为，

$$\begin{aligned}
\mathbf{F}_\alpha^W &= \frac{1}{\Delta L_{i+1/2}} \int_{x_{i+1/2}} \int u_k f_\alpha(0,0,t,u_k,v_l,\xi) \psi du dv d\xi dy. \\
(\mathbf{F}_\alpha)_k^f &= \frac{1}{\Delta L_{i+1/2}} \int_{x_{i+1/2}} u_k f_\alpha(0,0,t,u_k,v_l,\xi) dy. \tag{5.44}
\end{aligned}$$

其中 $\Delta L_{i+1/2}$ 是网格界面的切向长度，而其在每一个更新步 $[0, \Delta t]$ 中的贡献可以通过时间 t 的显式积分确定。

5.3.3 碰撞项的计算方法

在前一章的内容中，我们介绍了计算 Boltzmann 碰撞积分的快速谱方法。这种方法同样可以适用于混合物碰撞项的计算^[149, 150]。在这里，我们简要介绍这种方法的原理。

对于描述混合物中组分 α 演化过程的 Boltzmann 方程

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \mathbf{u}_\alpha \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_\alpha + \phi_\alpha \cdot \nabla_{\mathbf{u}} f_\alpha = \sum_r Q(f_\alpha, f_r), \tag{5.45}$$

其每组碰撞项可以写成

$$Q(f_\alpha, f_r) = \int_{\mathcal{R}^3} \int_{\mathcal{S}^2} [f_\alpha(\mathbf{u}') f_r(\mathbf{u}'_1) - f_\alpha(\mathbf{u}) f_r(\mathbf{u}_1)] \mathcal{B}_{\alpha r}(\cos \theta, g) d\Omega d\mathbf{u}_1, \tag{5.46}$$

其中 \mathbf{u}, \mathbf{u}_1 是碰撞前两族粒子的速度，而 $\mathbf{u}', \mathbf{u}'_1$ 是相应的碰撞后速度。碰撞核 $\mathcal{B}_{\alpha r}(\cos \theta, g)$ 是不同方向碰撞概率的量度，其中 θ 是碰撞偏移角， $g = |\mathbf{g}| = |\mathbf{u} - \mathbf{u}_1|$ 是碰撞前相对速度的大小。 Ω 是碰撞后相对速度 $\mathbf{u}' - \mathbf{u}'_1$ 的单位矢量，而偏移角满足 $\cos \theta = \Omega \cdot \mathbf{g}/g$ 。通过碰撞的动量守恒，我们可以得到，

$$\begin{aligned}\mathbf{u}' &= \mathbf{u} + \frac{m_r}{m_\alpha + m_r}(g\Omega - \mathbf{g}), \\ \mathbf{u}'_1 &= \mathbf{u}_1 - \frac{m_r}{m_\alpha + m_r}(g\Omega - \mathbf{g}),\end{aligned}\quad (5.47)$$

其中 m_α and m_r 是碰撞分子的质量。组分间碰撞项 (5.46) 可以改写成 Carleman 形式，即

$$\begin{aligned}\mathcal{Q}(f) &= \int_{\mathcal{R}^3} \int_{\mathcal{S}^2} \Theta(\cos \theta, g) g [f_\alpha(\mathbf{u}') f_r(\mathbf{u}'_1) - f_\alpha(\mathbf{u}) f_r(\mathbf{u}_1)] d\Omega d\mathbf{u}_1 \\ &= 4 \int_{\mathcal{R}^3} \int_{\mathcal{R}^3} \Theta(\cos \theta, g) \delta(\mathbf{y} \cdot \mathbf{g} + \mathbf{y}^2) [f_r(\mathbf{u} + a_{\alpha r} \mathbf{y}) f_\alpha(\mathbf{u}_1 - (1 - b_{\alpha r}) \mathbf{y}) - f_\alpha(\mathbf{u}) f_r(\mathbf{u}_1)] d\mathbf{y} d\mathbf{u}_1 \\ &= 4 \int_{\mathcal{R}^3} \int_{\mathcal{R}^3} \Theta(\cos \theta, g) \delta(\mathbf{y} \cdot \mathbf{z}) [f_r(\mathbf{u} + a_{\alpha r} \mathbf{y}) f_\alpha(\mathbf{u} + \mathbf{z} + b_{\alpha r} \mathbf{y}) - f_\alpha(\mathbf{u}) f_r(\mathbf{u} + \mathbf{y} + \mathbf{z})] d\mathbf{y} d\mathbf{z},\end{aligned}\quad (5.48)$$

其中 $\Theta(\cos \theta, g) = \mathcal{B}(\cos \theta, g)/g$ 是微分碰撞界面， $\mathbf{y} = (g\Omega - \mathbf{g})/2$, $\mathbf{z} = \mathbf{u}_1 - \mathbf{u} - \mathbf{y} = -\mathbf{g} - \mathbf{y}$ ，以及

$$a_{\alpha r} = \frac{2m_r}{m_\alpha + m_r}, \quad b_{\alpha r} = \frac{m_r - m_\alpha}{m_\alpha + m_r}.$$

分布函数和其组成的碰撞积分均可以展开成 Fourier 级数，其中第 k 模态的形式可以写作，

$$\begin{aligned}\hat{f}_k^\alpha &= \frac{1}{(2L)^3} \int_{D_L} f_\alpha(\mathbf{u}) \exp(-i\xi_k \cdot \mathbf{u}) d\mathbf{u}, \\ \hat{\mathcal{Q}}_k^{\alpha r} &= \sum_{l,m}^{N/2-1} \hat{f}_l^\alpha \hat{f}_m^r \beta_1^{\alpha r}(l, m) - \hat{f}_l^\alpha \hat{f}_m^r \beta_2(m, m),\end{aligned}\quad (5.49)$$

其中 $\xi_k = k\pi/L$ 是频率组元，而核模态写作

$$\beta_1^{\alpha r}(l, m) = 4 \int \int \delta(\mathbf{y} \cdot \mathbf{z}) \Theta \exp[i a^{\alpha r} \xi_l \cdot \mathbf{y} + i \xi_m \cdot (\mathbf{z} + b^{\alpha r} \mathbf{y})] d\mathbf{y} d\mathbf{z}. \quad (5.50)$$

这样，通过离散的快速 Fourier 变换 (FFT)，我们就可以在谱空间计算 Carleman 形式的卷积项。

在式 (5.35) 表示的微观分布函数更新中，基于快速谱方法的完整 Boltzmann 碰撞积分是一个纯显式的计算方法。为了克服其在连续介质极限下的刚性问题，这里我们引入一个和单组分气体处理方法相同的显-隐式混合碰撞项，并引入 BGK 松弛算子作为隐式碰撞项，

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} (\mathcal{Q}_\alpha)_{i,j} dt = \eta^n \sum_r \mathcal{Q}((f_\alpha)_{i,j}^n, (f_r)_{i,j}^n) + (\Delta t - \eta^n) \frac{(f_\alpha)_{i,j}^{(n+1)+} - (f_\alpha)_{i,j}^{n+1}}{\tau_{i,j}^{n+1}}. \quad (5.51)$$

在数值计算过程中，先对方程 (5.34) 进行求解，其更新后得到的解可以用来构造 t^{n+1} 时刻的平衡态分布函数，并求解式 (5.51) 中的隐式松弛项。如式 (5.43) 中所示的，在气体演化过程中，初始分布函数和平衡态分布函数的贡献分别对应于因子 $e^{-t/\tau}$ 和 $1 - e^{-t/\tau}$ 。因此，这里的调节系数可以定义为，

$$\eta = \Delta t \exp(-\Delta t / (\tau_\alpha)_i),$$

其中 Δt 是时间步长， $(\tau_\alpha)_i$ 是 α 组分气体在 i 单元内的局部平均碰撞时间。

5.3.4 Maxwell 方程组的波传播方法

对于等离子体的问题，其演化过程和电磁场的演化互相耦合，形成一个复杂的自洽问题。如果求解不当或精度不够，可能在数值解中得到非物理的磁岛现象。如方程 (5.31) 所示，Maxwell 方程组是一个描述电磁波演化，由波动性质主导的方程。针对双曲守恒律问题，Leveque^[42] 发展了一系列高精度的波传播方法。Hakim 等^[151] 将这种方法的思路拓展到了完全双曲的 Maxwell 方程组 (5.32)，并发展了相应的波传播算法。这里我们简要介绍这一方法的原理和实现。

Maxwell 方程可以写成以下的矢量形式，

$$\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{f} = \mathbf{s} \quad (5.52)$$

对于通量部分，考虑完全的双曲系统，则基于有限体积法的守恒律给出

$$M_{ij}^{n+1} = M_{ij}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left([\mathcal{F}_1]_{i+1/2,j}^{n+1/2} - [\mathcal{F}_1]_{i-1/2,j}^{n+1/2} \right) - \frac{\Delta t}{\Delta y} \left([\mathcal{F}_2]_{i,j+1/2}^{n+1/2} - [\mathcal{F}_2]_{i,j-1/2}^{n+1/2} \right), \quad (5.53)$$

其中 $[\mathcal{F}_{1,2}]$ 是网格界面的数值通量。

在 Leveque 的波传播方法中，界面处的 Riemann 问题被分裂成一系列的线性波进行求解。令 l^p, r^p 和 s^p 为通量 Jacobi 矩阵的左特征向量，右特征向量和特征值。由于系统是双曲的，因此特征值必须都是实数，并且假设特征向量是正交的。对系统乘以左特征向量 l^p ，可以得到一个非耦合的波方程组，

$$\frac{\partial w^p}{\partial t} + s^p \frac{\partial w^p}{\partial x} = 0, \quad (5.54)$$

其中 $w^p \equiv l^p \cdot \mathbf{m}$ 。这个问题有精确解 $w^p(x, t) = w_0^p(x - s^p t)$ 。一旦 $w^p(x, t)$ 被确定，则可以确定 Riemann 问题的解 $\mathbf{m}(x, t) = \sum_p w^p r^p$ 。

在一阶情况下，界面通量可以写成，

$$[\mathcal{F}_1]_{i-1/2,j} = \frac{1}{2} ([\mathbf{f}_1]_{ij} + [\mathbf{f}_1]_{i-1,j}) - \frac{1}{2} (\mathcal{A}_1^+ \Delta Q_{i-1/2,j} - \mathcal{A}_1^- \Delta Q_{i-1/2,j}). \quad (5.55)$$

分别在 x 和 y 方向上构造通量，得到以下的守恒律

$$M_{ij}^{n+1} = M_{ij}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} [\mathcal{A}_1^+ \Delta M_{i-1/2,j} + \mathcal{A}_1^- \Delta M_{i+1/2,j}] - \frac{\Delta t}{\Delta y} [\mathcal{A}_2^+ \Delta M_{i,j-1/2} + \mathcal{A}_2^- \Delta M_{i,j+1/2}], \quad (5.56)$$

在这些表达式中，波动 $\mathcal{A}_1^\pm \Delta Q_{i-1/2}$ 代表，

$$\begin{aligned}\mathcal{A}_1^- \Delta Q_{i-1/2} &= \sum_{p: s_{i-1/2}^p < 0} \mathcal{Z}_{i-1/2}^p + \frac{1}{2} \mathbb{Z}_{i-1/2}, \\ \mathcal{A}_1^+ \Delta Q_{i-1/2} &= \sum_{p: s_{i-1/2}^p > 0} \mathcal{Z}_{i-1/2}^p + \frac{1}{2} \mathbb{Z}_{i-1/2},\end{aligned}\quad (5.57)$$

其中

$$\mathcal{Z}_{i-1/2}^p = l_{i-1/2}^p \cdot ([\mathbf{f}_1]_i - [\mathbf{f}_1]_{i-1}) r_{i-1/2}^p, \quad (5.58)$$

和

$$\mathbb{Z}_{i-1/2} = \sum_{p: s_{i-1/2}^p = 0} \mathcal{Z}_{i-1/2}^p. \quad (5.59)$$

方程 (5.56) 仅有一阶精度。为了实现二阶精度，可以增加高分辨率修正。通过考虑守恒量的泰勒展开中的二阶项来导出这些修正。宏观量的更新被修正为，

$$\begin{aligned}Q_{ij}^{n+1} &= Q_{ij}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} [\mathcal{A}_1^+ \Delta Q_{i-1/2,j} + \mathcal{A}_1^- \Delta Q_{i+1/2,j}] - \frac{\Delta t}{\Delta y} [\mathcal{A}_2^+ \Delta Q_{i,j-1/2} + \mathcal{A}_2^- \Delta Q_{i,j+1/2}] \\ &\quad - \frac{\Delta t}{\Delta x} ([\tilde{\mathcal{F}}_1]_{i+1/2,j} - [\tilde{\mathcal{F}}_1]_{i-1/2,j}) - \frac{\Delta t}{\Delta y} ([\tilde{\mathcal{F}}_2]_{i,j+1/2} - [\tilde{\mathcal{F}}_2]_{i,j-1/2}),\end{aligned}\quad (5.60)$$

其中 $[\tilde{\mathcal{F}}_1]_{i-1/2,j}$ 和 $[\tilde{\mathcal{F}}_2]_{i,j-1/2}$ 是修正通量，其定义为

$$[\tilde{\mathcal{F}}_1]_{i-1/2} = \frac{1}{2} \sum_p \text{sign}(s_{i-1/2}^p) \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta x} |s_{i-1/2}^p| \right) \mathcal{Z}_{i-1/2}^p. \quad (5.61)$$

通过这种修正，波传播方法在完全连续的情况下等同于标准的 Lax-Wendroff 方法。

在上面的一阶和二阶方法里，都隐含了波在网格界面沿法向传播的假设。然而，在多维问题中，波同样可以在切向方向上传播。基于这一点，可以在界面 $(i-1/2, j)$ 上对 Riemann 问题增加相应的扰动解。在二维问题中，在当前精度下，其影响来自于 $(i-1, j-1), (i-1, j+1), (i, j+1)$ 和 $(i, j-1)$ 网格。来自这些网格的影响可以处理为，

$$\mathcal{A}_1^\pm \Delta Q_{i-1/2}^* \equiv \mathcal{A}_1^\pm \Delta Q_{i-1/2} \mp \sum_p \text{sign}(s_{i-1/2}^p) \left(1 - \frac{\Delta t}{\Delta x} |s_{i-1/2}^p| \right) \tilde{\mathcal{Z}}_{i-1/2}^p. \quad (5.62)$$

接下来，为了确定每个波动在横向上传播距离，使用另一个坐标方向上的通量雅可比对波动进行分解。例如，左行和右行（ $\pm x$ 方向）波动使用 y 方向的通量雅可比波分解，反之亦然，即

$$\mathcal{A}_1^\pm \Delta Q_{i-1/2,j}^* = \mathcal{A}_2^+ \mathcal{C}_1^\pm \Delta Q_{i-1/2,j}^* + \mathcal{A}_2^- \mathcal{C}_1^\pm \Delta Q_{i-1/2,j}^*. \quad (5.63)$$

在这里， $\mathcal{A}_2^+ \mathcal{C}_1^\pm \Delta Q_{i-1/2,j}^*$ 表示右行波动向上传播的程度，而 $\mathcal{A}_2^- \mathcal{C}_1^\pm \Delta Q_{i-1/2,j}^*$ 表示其下行的程度。这里同样需要特征值和特征向量，因此可以理解为切向的 Riemann 问题。

在切向 Riemann 问题求解后，方程 (5.60) 中的修正通量相应被替换为，

$$\begin{aligned} [\tilde{\mathcal{F}}_2]_{i,j+1/2} &= [\tilde{\mathcal{F}}_2]_{i,j+1/2} - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \mathcal{A}_2^+ \mathcal{A}_1^+ \Delta Q_{i-1/2,j}^*, \\ [\tilde{\mathcal{F}}_2]_{i,j-1/2} &= [\tilde{\mathcal{F}}_2]_{i,j-1/2} - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \mathcal{A}_2^- \mathcal{A}_1^+ \Delta Q_{i-1/2,j}^*, \\ [\tilde{\mathcal{F}}_2]_{i-1,j+1/2} &= [\tilde{\mathcal{F}}_2]_{i-1,j+1/2} - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \mathcal{A}_2^+ \mathcal{A}_1^- \Delta Q_{i-1/2,j}^*, \\ [\tilde{\mathcal{F}}_2]_{i-1,j-1/2} &= [\tilde{\mathcal{F}}_2]_{i-1,j-1/2} - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \mathcal{A}_2^- \mathcal{A}_1^- \Delta Q_{i-1/2,j}^*. \end{aligned} \quad (5.64)$$

而在 Maxwell 方程组的源项问题上，这里使用算子分裂的处理，即在解通量输运后，再解包含源项的常微分方程。

$$\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} = \mathbf{s}. \quad (5.65)$$

为了实现二阶精度，可以采用 Strang 分裂的处理方法。在每一个时间步 Δt 中，首先使用半时间步长 $\Delta t/2$ 求解常微分方程组 (5.65)。之后使用完整的 Δt 求解波动问题。最后再使用 $\Delta t/2$ 再次求解 ODE。在每一步中，前一步的结果均被用作初始条件。

5.3.5 算法概述

在多组分气体和等离子体输运的统一气体动理论格式中，时间步长由物理空间和速度空间的 CFL 条件决定

$$\Delta t = \text{CFL} \min \left\{ \frac{\Delta x \Delta y}{u_{max} \Delta y + v_{max} \Delta x}, \frac{\Delta u \Delta v}{|\phi_x| \Delta v + |\phi_y| \Delta u} \right\}, \quad (5.66)$$

其中 CFL 是 Courant–Friedrichs–Lewy 数。对于多组分气体， $u_{max} = \max(|u_k|)$ 和 $v_{max} = \max(|v_l|)$ 是在 x 和 y 方向上最大的离散粒子速度，而 ϕ_x 和 ϕ_y 是可能存在的重力项；对于等离子体问题， $u_{max} v_{max} = c$ 等于光速，而 ϕ_x 和 ϕ_y 是电场力和 Lorentz 力 $\frac{q_\alpha}{m_\alpha} (\mathbf{E} + \mathbf{u}_\alpha \times \mathbf{B})$ 在 x 和 y 方向上的投影。在实际计算中，通常取光速为粒子最可几速度的十倍至二十倍。

多组分气体和等离子体输运的统一气体动理论格式总结如下。在 UGKS 中，守恒量、分布函数和电磁场分别在方程 (5.34), (5.35) 和 (5.38) 中更新。在网格界面处，流场的多尺度通量通过分布函数的积分演化解 (5.43) 确定，而电磁场方程的通量根据波传播方法计算。UGKS 的具体计算步骤如图 5.1 所示。

5.4 数值实验

5.4.1 正激波结构

首先考虑一个对两组分混合物的正激波结构算例^[152]。在数值模拟中，我们使用两种模型分子。它们具有相同的分子直径 $d^A = d^B$ ，但分子质量不同 $m^A > m^B$ 。激波上、

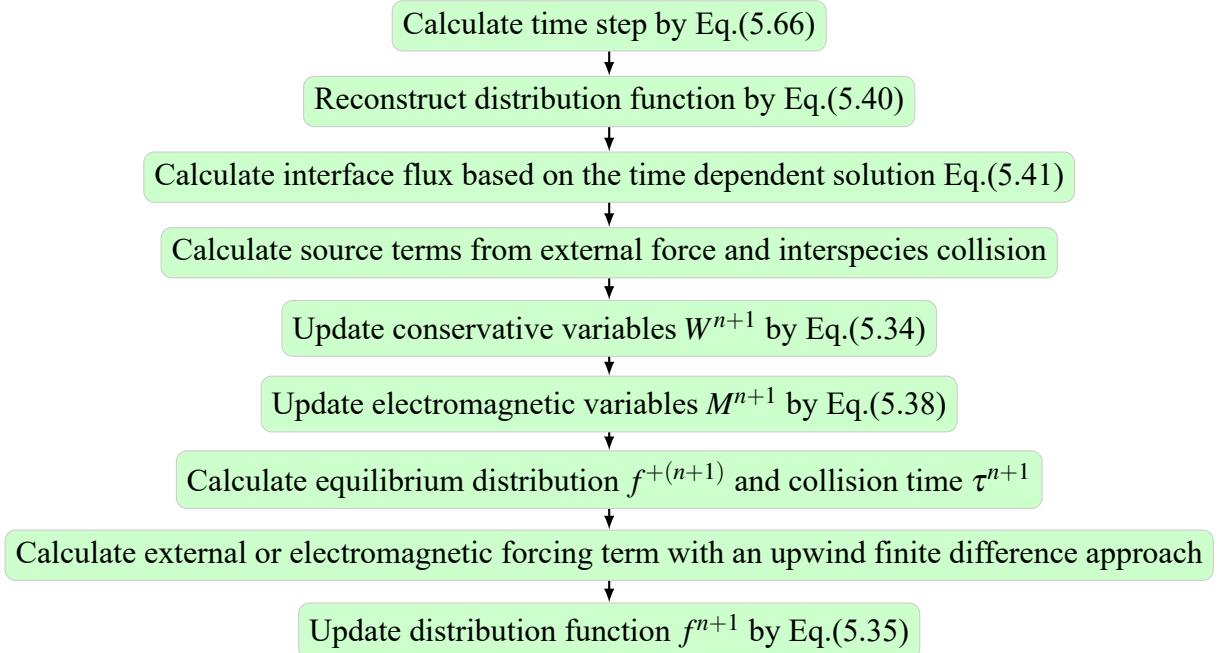


图 5.1 UGKS 在每一个更新步里的算法步骤

下游的气体混合物处于均匀的平衡态。上游的速度为 U_- , 温度为 T_- , 粒子数密度分别为 n_-^A (A 组分) 和 n_-^B (B 组分), 而下游对应的物理量分别为 U_+ , T_+ , n_+^A 和 n_+^B 。根据激波的 Rankine-Hugoniot 间断跳跃条件^[153], 我们可以得到

$$\begin{aligned}\frac{n_+^{A,B}}{n_-^{A,B}} &= \frac{(\gamma+1)Ma_-^2}{(\gamma-1)Ma_-^2 + 2}, \\ \frac{U_+^{A,B}}{U_-^{A,B}} &= \frac{(\gamma-1)Ma_-^2 + 2}{(\gamma+1)Ma_-^2}, \\ \frac{T_+}{T_-} &= \frac{[(\gamma-1)Ma_-^2 + 2](2\gamma Ma_-^2 - \gamma + 1)}{(\gamma+1)^2 Ma_-^2},\end{aligned}\quad (5.67)$$

其中单原子分子的绝热指数为 $\gamma = 5/3$, 上游的激波马赫数定义为

$$Ma_- = \frac{U_-}{(\gamma k_B T_- / m_0)^{1/2}}. \quad (5.68)$$

假设两种气体分子在上、下游的密度分数是相同的,

$$\chi_-^{A,B} = \chi_+^{A,B}. \quad (5.69)$$

参考气体平均自由程是,

$$\ell_0 = \frac{1}{\sqrt{2\pi d_A^2 n_-}}, \quad (5.70)$$

其中 $n_- = n_-^A + n_-^B$ 。

在数值模拟中, 物理空间设置为 50 个上游分子平均自由程 $x \in [-25\ell_0, 25\ell_0]$, 并均匀划分为 100 个网格。粒子速度空间设置为 $[-8\sqrt{2k_B T_- / m_0}, 8\sqrt{2k_B T_- / m_0}]$, 并使用 100

个离散速度点。CFL 数设置为 0.7。这个例子的碰撞项设置为完整的 Boltzmann 碰撞积分。在计算中我们考虑不同的上游马赫数 $Ma_- = 1.5, 3.0$, 分子质量比 $m_B/m_A = 0.5, 0.25$, 和数密度分布 $n_A/(n_A + n_B) = 0.1, 0.5, 0.9$ 。在计算后, 我们将得到的数值解通过以下的归一化方法进行后处理,

$$\hat{n}^{A,B} = \frac{n^{A,B} - n_-^{A,B}}{n_+^{A,B} - n_-^{A,B}}, \quad \hat{T}^{A,B} = \frac{T^{A,B} - T_-}{T_+ - T_-}, \quad (5.71)$$

坐标原点 $x = 0$ 的定义为密度的平均值所在处 $n|_{x=0} = (n_- + n_+)/2$ 。

在不同上游 Mach 数和气体分数时的数值模拟结果如图5.2至5.10所示, 其中的参考解是由 Boltzmann 方程的数值核方法给出的^[60], 同时我们也画出了完全由 BGK 松弛项代替 Boltzmann 碰撞积分的结果。如图所示, 在所有的算例情况中, 当前的 UGKS 方法能够提供和 Boltzmann 方程等价的数值解。从图5.2到5.4, 在上游 Mach 数为 $Ma_- = 1.5$ 和分子质量比为 $m_B/m_A = 0.5$ 时, UGKS, Boltzmann 和 BGK 的解在不同的数密度分数下 $n_A/(n_A + n_B) = 0.1, 0.5, 0.9$, 均表现一致。在这些非平衡效应相对较弱的情况下, BGK 模型可以视作对于 Boltzmann 碰撞项的合理近似。

然而, 当质量比来到 $m_B/m_A = 0.25$, 在固定的 Mach 数 $Ma_- = 1.5$ 下, Boltzmann 和 BGK 碰撞项的差异逐渐显露。如图5.5至5.7所示, 随着轻组分 B 的数密度分数不断减小, Boltzmann 和 BGK 的解的差异逐渐增大。当 Mach 数增加到 $Ma_- = 3.0$, 且 $m_B/m_A = 0.5$ 时, 在图5.8, 5.9和5.10中, 激波结构逐渐变窄, 并伴随强烈的非平衡效应。尽管密度曲线仍然在可接受的范围内, BGK 模型给出的温度曲线在激波上游有一个更早的抬升, 而这是一个众所周知的 BGK 模型固有的缺陷。这一现象可以归因为 BGK 松弛模型缺乏描述分子输运过程所需的自由度。因此, 在强非平衡效应的作用下, 它不能提供正确的激波内部输运系数。对于分子平均热运动速度较大的轻质气体组分 B (从而导致了更为显著的粒子自由输运现象) 来说, 这种温度早起的现象更为严重, 这也是并不奇怪的。换言之, 尽管对于多组分气体混合物相互作用的建模仍是气体动理学界的热点问题^[154,155], 想要精确计算激波结构内部的特征量分布情况, Boltzmann 碰撞积分的引入和求解可能是不可或缺的。

5.4.2 激波管问题

第二个例子是 Sod 激波管问题。计算域 $x \in [0, 1]$ 被均匀划分为 100 个物理网格。在速度空间则使用 100 个均匀速度点对粒子分布函数进行更新。初始场设置为

$$\rho = 1.0, U = 0.0, p = 1.0, x \leq 0.5,$$

$$\rho = 0.125, U = 0.0, p = 0.1, x > 0.5.$$

为了验证当前统一气体动理学格式的多尺度特性, 我们使用不同的参考 Knudsen

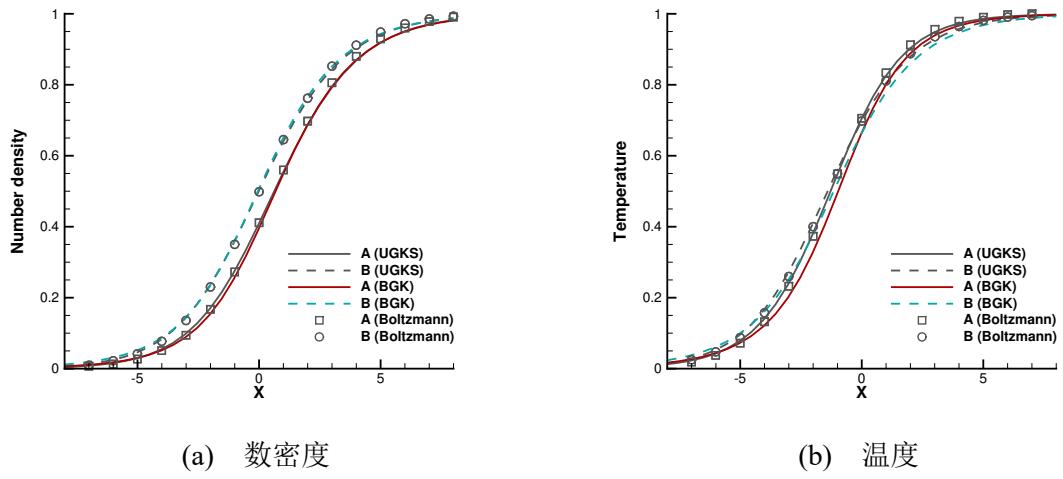


图 5.2 $Ma = 1.5, m_B/m_A = 0.5, n_A/(n_A + n_B) = 0.1$ 时的正激波结构

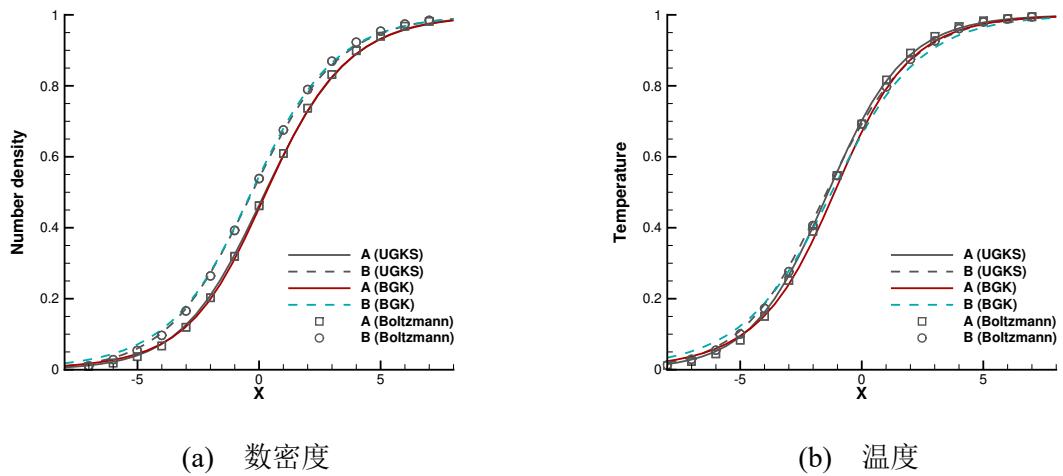


图 5.3 $Ma = 1.5, m_B/m_A = 0.5, n_A/(n_A + n_B) = 0.5$ 时的正激波结构

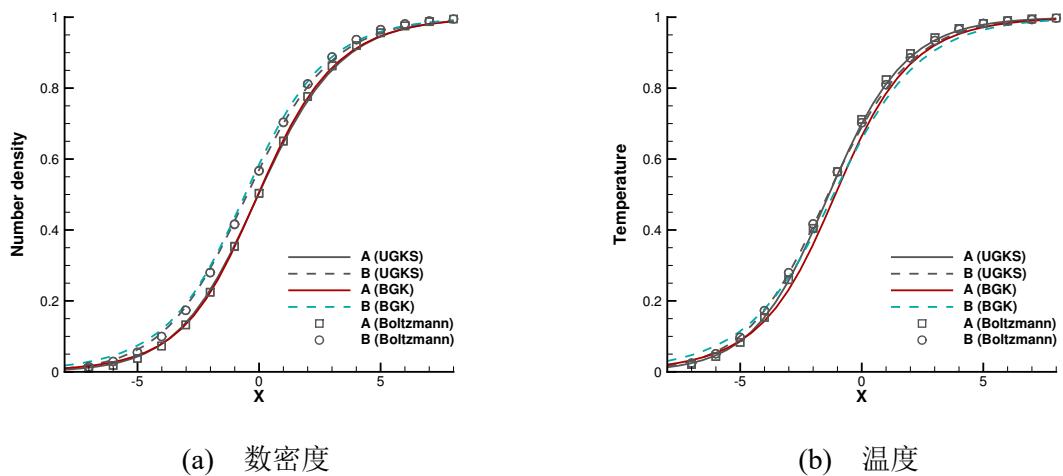
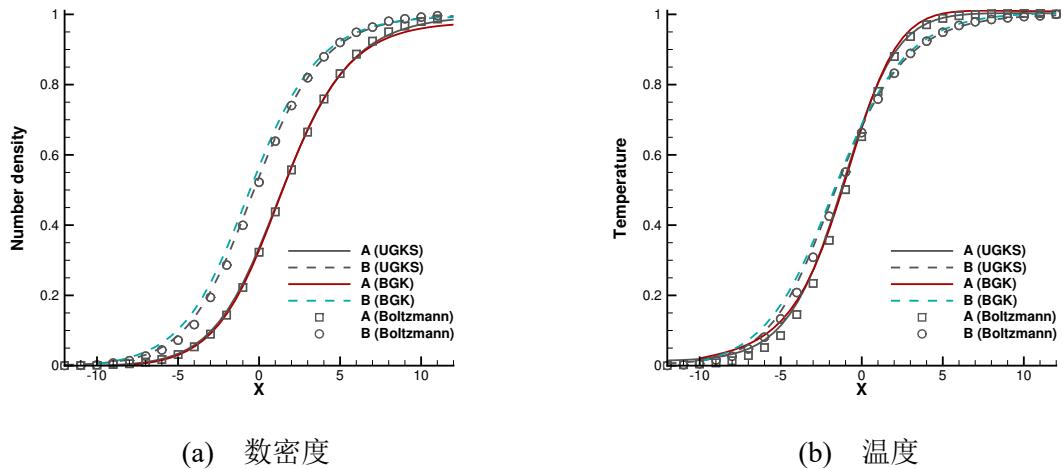
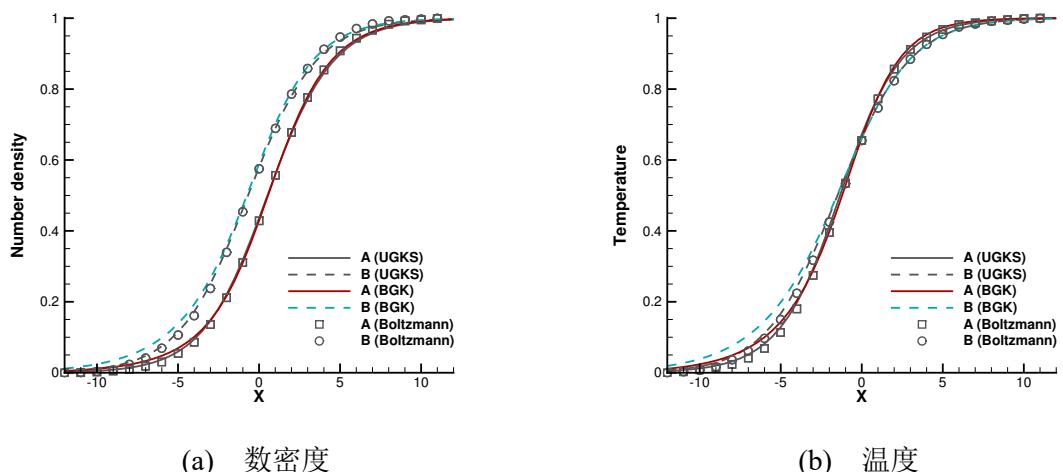
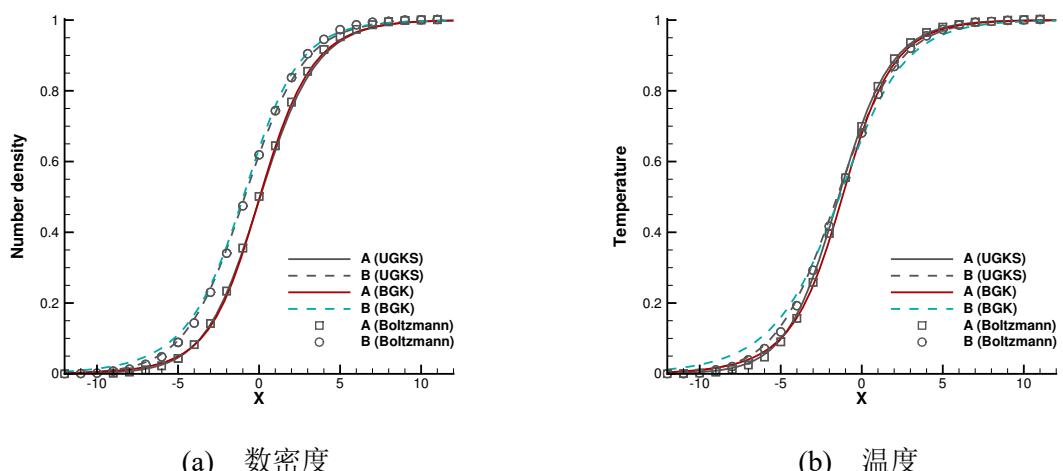


图 5.4 $Ma = 1.5, m_B/m_A = 0.5, n_A/(n_A + n_B) = 0.9$ 时的正激波结构

图 5.5 $Ma = 1.5, m_B/m_A = 0.25, n_A/(n_A + n_B) = 0.1$ 时的正激波结构图 5.6 $Ma = 1.5, m_B/m_A = 0.25, n_A/(n_A + n_B) = 0.5$ 时的正激波结构图 5.7 $Ma = 1.5, m_B/m_A = 0.25, n_A/(n_A + n_B) = 0.9$ 时的正激波结构

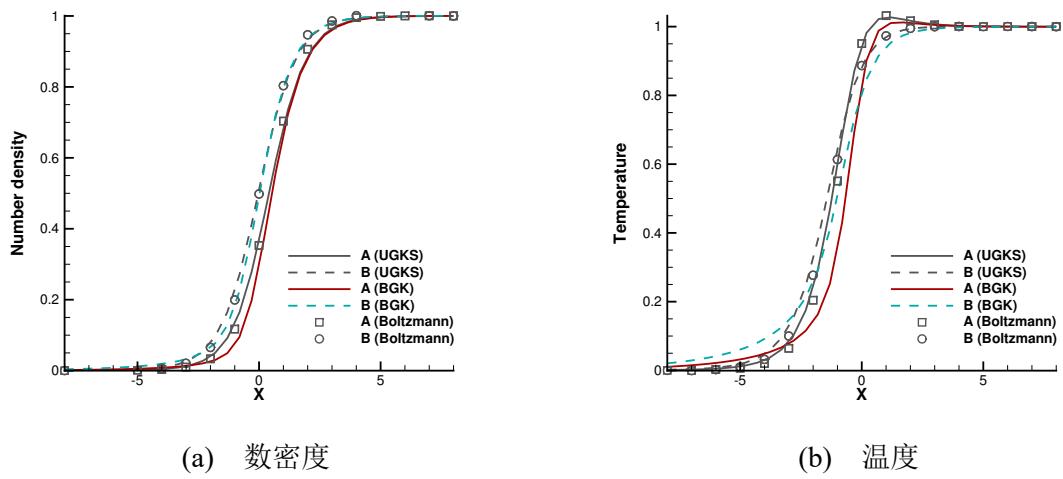


图 5.8 $Ma = 3.0, m_B/m_A = 0.5, n_A/(n_A + n_B) = 0.1$ 时的正激波结构

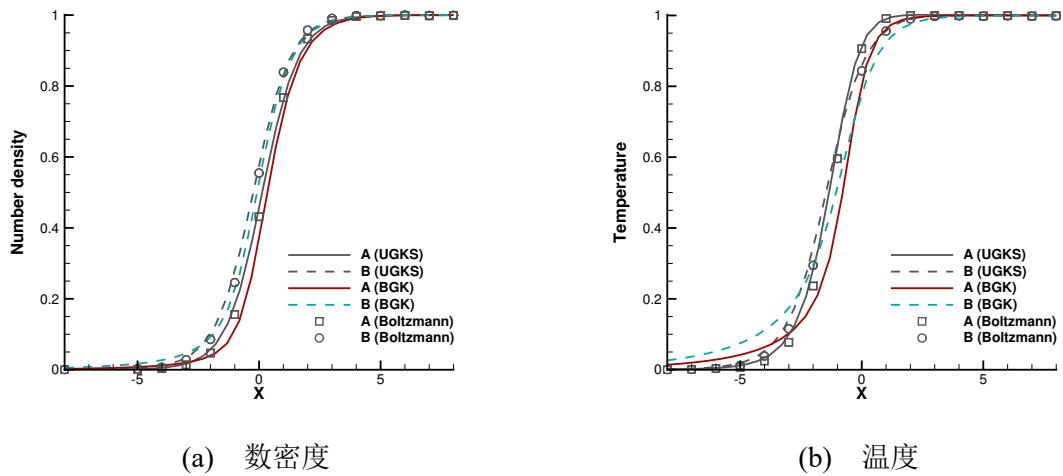


图 5.9 $Ma = 3.0, m_B/m_A = 0.5, n_A/(n_A + n_B) = 0.5$ 时的正激波结构

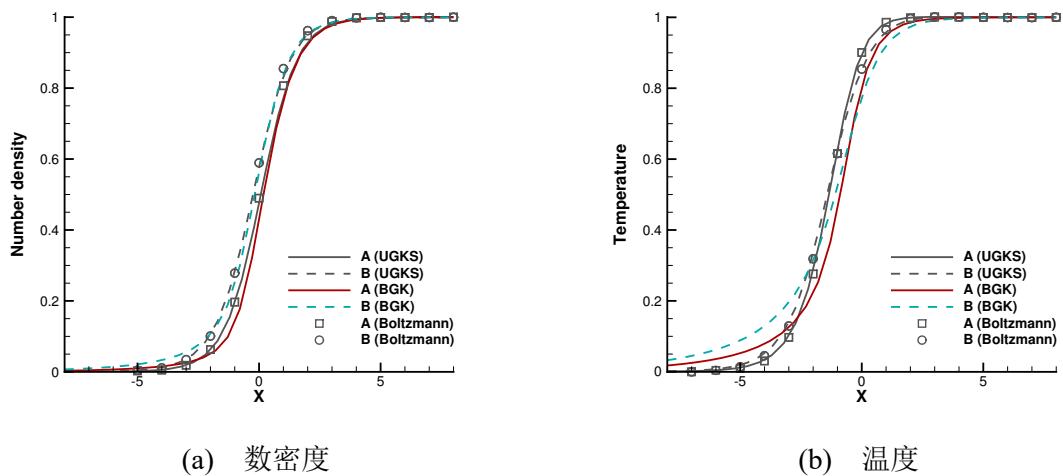


图 5.10 $Ma = 3.0, m_B/m_A = 0.5, n_A/(n_A + n_B) = 0.9$ 时的正激波结构

数进行计算，即 $Kn = 0.0001$, $Kn = 0.01$ 和 $Kn = 1.0$ ，分别对应典型的连续流，过渡流和自由分子流域。计算使用了两种分子气体分子质量和数密度比。在第一个例子里，计算设置为 $m_B/m_A = 0.5$, $n_A/(n_A + n_B) = 0.5$ ，而第二个例子则设置其为 $m_B/m_A = 0.25$, $n_A/(n_A + n_B) = 0.75$ 。

图5.11到5.16展示了 $t = 0.15$ 时刻激波管内的解分布情况。连续介质流动的参考解是通过针对 Navier-Stokes 流动的 GKS 求解器^[156] 使用 1000 个均匀网格求得的，而自由分子流参考解可以通过无碰撞 Boltzmann 方程推导得出。在数值模拟中，Boltzmann 碰撞项的求解基于式5.51给出的混合方法。

在连续介质流域下 $Kn = 0.0001$ ，碰撞时间远小于计算中使用的时间步长。在这种情况下，由于有限的时空分辨率，当前的统一算法变成了激波捕捉格式，并给出双组分 Euler 方程的数值解。如图5.11和5.14所示，频繁的分子碰撞限制了粒子的自由输运过程，因而两种组分呈现一致的动力学行为，可以理解为一种新的单组分气体。

随着 Knudsen 数和碰撞时间的增加，粒子运动的自由度随之增大，相应的流体物理也显著改变。如图5.12至5.13和5.15至5.16所示，激波管内逐渐呈现从 Euler 方程的 Riemann 问题到无碰撞 Boltzmann 方程的解的过渡。由于不同的气体分子具有的特定分子质量，轻质分子相对于重分子具有更大的热运动速度，从而导致不同的密度和温度剖面，如图5.13b 和5.16b 所示。因此，我们可以合理地认为，随着气体质量比和轻质分子数密度分数的减小，两组分流动动力学呈现显著的变化，这也正是图5.13和5.16所呈现的。这个算例清晰地说明了当前统一气体动理论格式在不同流域内模拟多尺度、多组分的流动物理的能力。

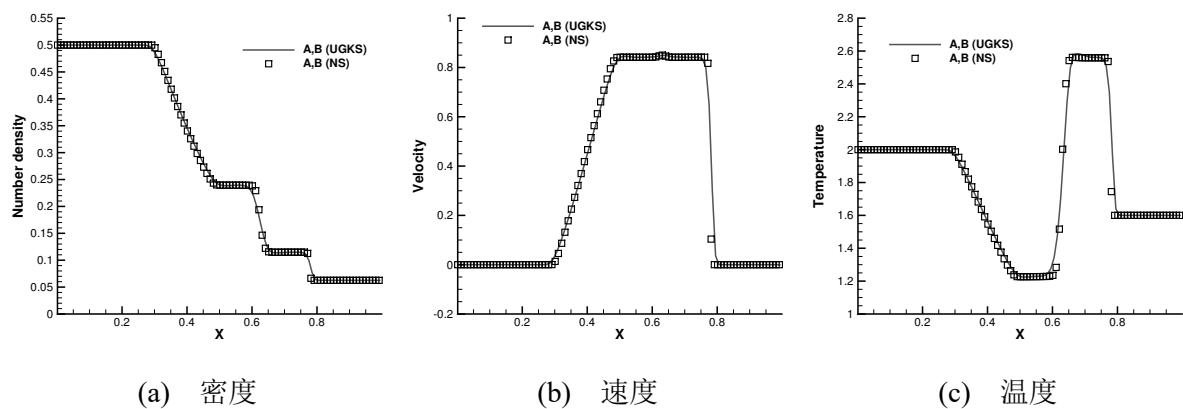


图 5.11 $m_B/m_A = 0.5, n_A/(n_A + n_B) = 0.5, Kn = 0.0001$ 时激波管问题的解

5.4.3 Landau 阻尼

Landau 阻尼是由 Landau^[157]首先根据理论推导预测的物理现象，即无碰撞等离子体中电磁波的指数衰减效应。在无粒子碰撞引起的能量消耗时发生的波阻尼是等离

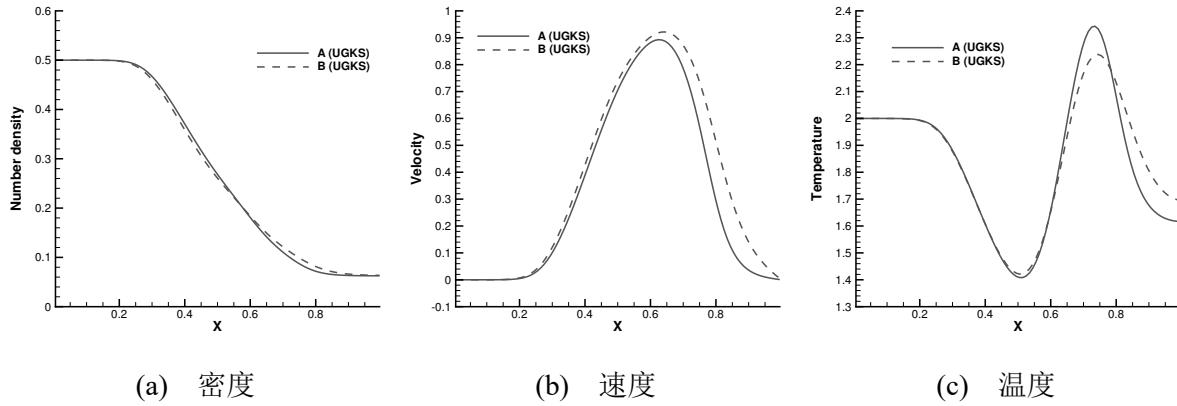


图 5.12 $m_B/m_A = 0.5, n_A/(n_A + n_B) = 0.5, Kn = 0.01$ 时激波管问题的解

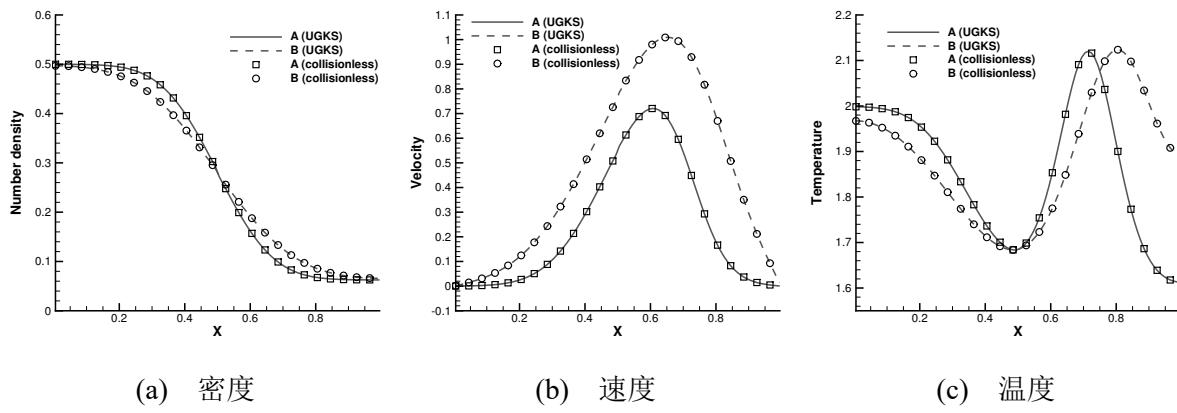


图 5.13 $m_B/m_A = 0.5, n_A/(n_A + n_B) = 0.5, Kn = 1.0$ 时激波管问题的解

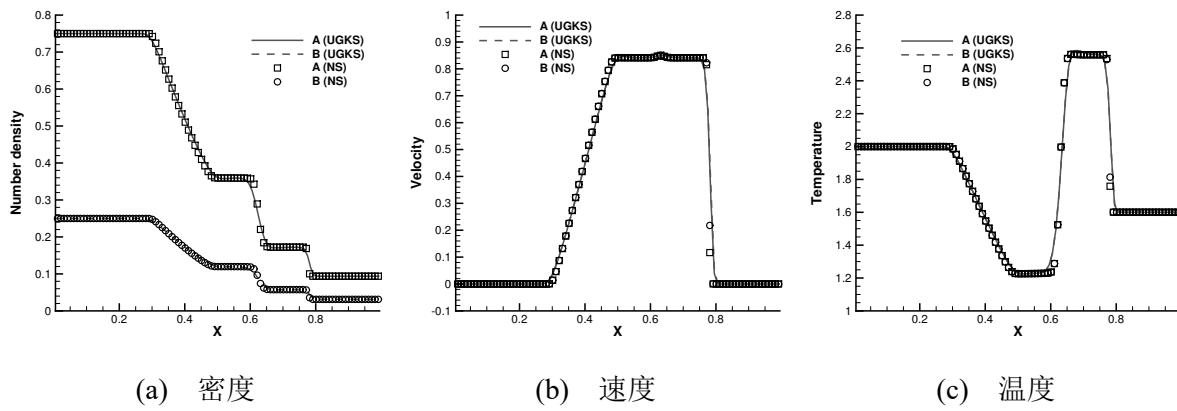
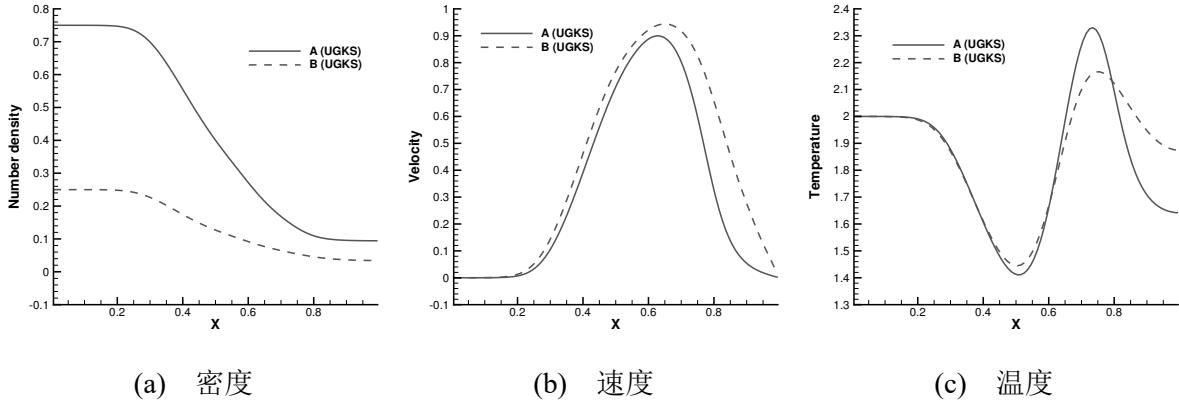
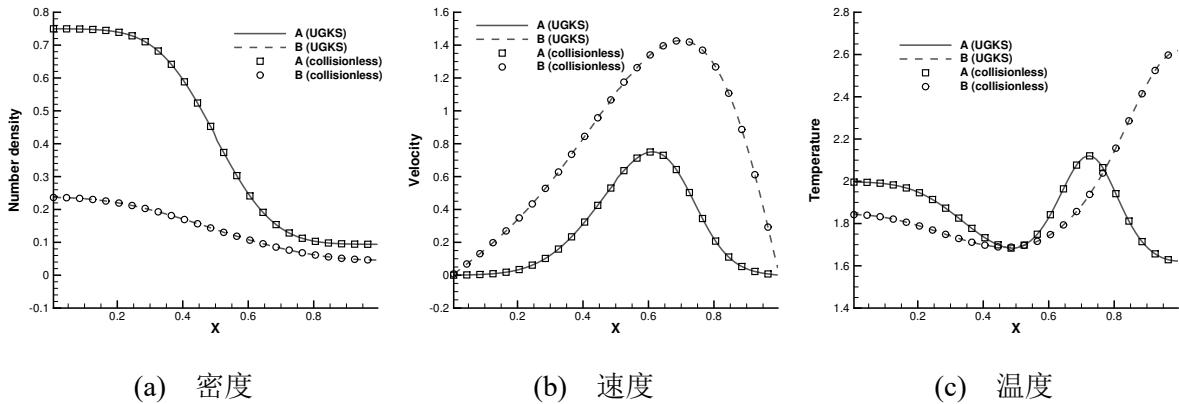


图 5.14 $m_B/m_A = 0.25, n_A/(n_A + n_B) = 0.75, Kn = 0.0001$ 时激波管问题的解

图 5.15 $m_B/m_A = 0.25, n_A/(n_A + n_B) = 0.75, Kn = 0.01$ 时激波管问题的解图 5.16 $m_B/m_A = 0.25, n_A/(n_A + n_B) = 0.75, Kn = 1.0$ 时激波管问题的解

子体物理研究中一项令人震惊的结果，因而 Landau 阻尼具有重要的意义，在理论分析^[158]，实验研究^[159]，和数值模拟^[160]上均有令人瞩目的工作。在这里，我们用 Landau 阻尼的例子验证统一气体动理论格式对无碰撞等离子体数值模拟的性能。简单起见，我们考虑一维的情况，此时静电场的 Maxwell 方程将退化为电势的 Poisson 方程。

5.4.3.1 线性情况

考虑初始电子分布如下的 Vlasov-Poisson 系统，

$$f_0(x, u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} [1 + \alpha \cos(kx)] \exp\left(-\frac{u^2}{2}\right), \quad (5.72)$$

其中计算域是 $x \in [0, 2\pi/k]$, $\alpha = 0.01$, $k = 0.5$ 。离子在空间上均匀分布，系统内的总电荷密度为零。由于扰动参数 α 很小，现有的 Vlasov-Poisson 系统可以看作 Maxwellian 平衡附近的线性展开，因此电场能量的阻尼速率可以通过理论推导求得^[161, 162]，其关系近似满足

$$E(x, t) \simeq 4\alpha \times 0.3677 e^{-0.1533t} \sin(kx) \cos(1.4156t - 0.536245). \quad (5.73)$$

在数值模拟中，相空间的离散网格为 $N_x \times N_u = 128 \times 128$ ，截断的粒子速度空间是 $x \in [-5, 5]$ 。电场能的演化如图5.17所示，其中数值解与理论的阻尼速率 $\gamma = -0.1533$ 相符合。与此同时，电磁波的振荡频率同样对应于其理论值 $\omega = 1.4156$ 。区域中心处的电子速度分布函数 $f(x=0, u, t)$ 如图5.18所示，其清晰地阐明了相速度附近的粒子从电磁波中吸收能量的过程。

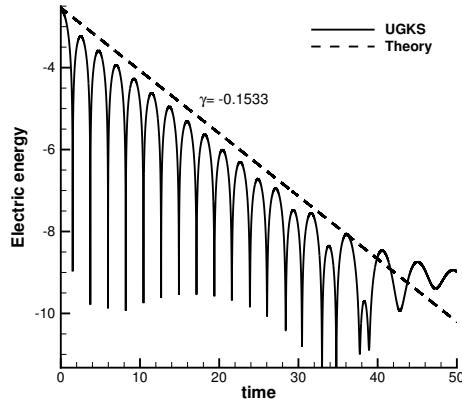


图 5.17 弱 Landau 阻尼中电场能随时间的演化

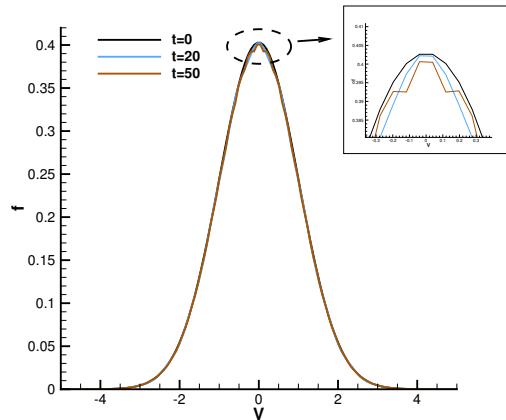


图 5.18 弱 Landau 阻尼中 $x = 0$ 处电子分布函数随时间的演化

5.4.3.2 非线性情况

考虑和方程5.72相同的初始条件，但此时扰动参数 $\alpha = 0.5$ 。随着电磁波波幅的增大，相应的非线性效应会伴随出现。在这个例子里，为精确捕捉非线性效应，我们使用 $N_x \times N_u = 256 \times 256$ 的网格。电场能随时间的演化如图5.19所示。可以看到，数值模拟的结果和 Heath 等人^[163] 提供的参考解相一致，其中给出线性衰减率 $\gamma_1 = -0.287$ 以及随后的增长率 $\gamma_2 = 0.0746$ 。图5.20给出了电子分布函数在相空间的时间演化情况。

图5.21给出了 $x = 0$ 处的电子速度分布函数在不同时刻的形态，从中可以明显看出非线性效应的影响。

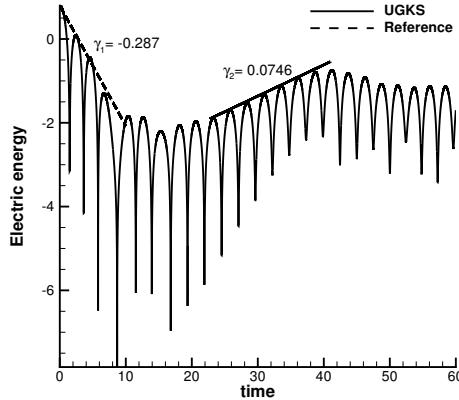


图 5.19 强 Landau 阻尼中电场能随时间的演化

5.4.4 双流不稳定性

双流不稳定性也是等离子体物理中一种常见的现象。在某种意义上，其也可以被看作 Landau 阻尼的逆现象。

5.4.4.1 线性情况

考虑一个具有如下初始电子分布的 Vlasov-Poisson 系统，

$$f_0(x, u) = \frac{2}{7\sqrt{2\pi}}(1 + 5u^2) \left[1 + \alpha \left(\frac{\cos(2kx) + \cos(3kx)}{1.2} + \cos(kx) \right) \right] \exp\left(-\frac{u^2}{2}\right), \quad (5.74)$$

其中计算域是 $x \in [0, 2\pi/k]$ ，同时 $\alpha = 0.001$ ， $k = 0.5$ 。与此同时，区域内分布着均匀的离子，总电荷密度为零。在数值模拟中，相空间被离散为 $N_x \times N_u = 512 \times 512$ ，其中截断的速度空间是 $x \in [-5, 5]$ 。电场能的演化过程如图5.22所示，可以看到，数值解和理论的增长率 $\gamma = 0.2258$ 符合得很好。图5.23展示了区域中心 $x = L/k$ 处的电子分布函数在相空间的演化。

5.4.4.2 非线性情况

接下来让我们考虑非线性的情况，其中电子的初始分布满足，

$$f_0(x, u) = \frac{1}{2u_{th}\sqrt{2\pi}} \left[\exp\left(-\frac{(u-U)^2}{2u_{th}^2}\right) + \exp\left(-\frac{(u+U)^2}{2u_{th}^2}\right) \right] [1 + \alpha \cos(kx)], \quad (5.75)$$

其中 $\alpha = 0.05$ ， $U = 0.99$ ， $u_{th} = 0.3$ ， $k = 2/13$ 。计算网格设置为 $N_x \times N_u = 512 \times 512$ 。在这个例子中，电子分布函数在相空间和物理空间的中心 $x = L/k$ 的分布情况如图 5.24所示。

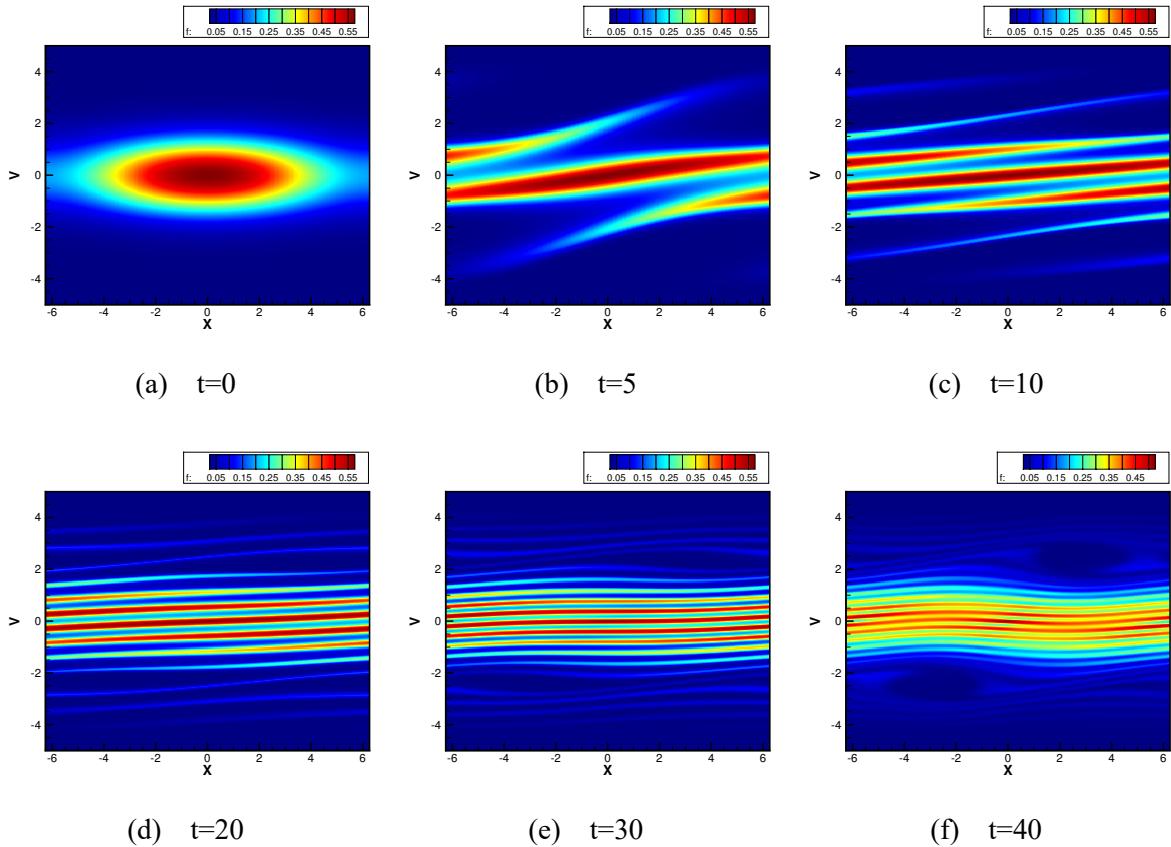


图 5.20 强 Landau 阻尼中电子分布函数在相空间随时间的演化

5.4.5 Brio-Wu 激波管

在测试了统一气体动理论学格式对无碰撞等离子体演化的数值性能后，我们考虑另一个极限情况，即连续介质描述下的磁流体输运问题。Brio-Wu 激波管问题^[164] 是一个针对一维理想 MHD 方程的标准算例。其初始流场和 Sod 激波管问题一致，并附加有一个额外的磁场间断，

$$n_i = n_e = 1.0, U = 0.0, T = 1.0, x \leq 0.5,$$

$$n_i = n_e = 0.125, U = 0.0, T = 0.8, x > 0.5.$$

随着时间的推进，间断处会逐渐演化出流场和电磁场的波系结构，并向激波管两侧扩展。

这个例子中，我们使用 500 个均匀网格对物理空间 $x \in [0, 1]$ 进行离散。离子的速度空间为 $[-5, 5]$ ，相应的电子速度空间为 $[-5\sqrt{1836}, 5\sqrt{1836}]$ 。将速度空间离散为 33 个速度点，并使用 Newton-Cotes 公式进行数值积分。考虑氢气分子，则其电子和氢核质量比为 $1/1836$ 。考虑磁流体流域的物理，我们设置参考 Knudsen 数为 $Kn = 10^{-4}$ 。初始的修正势 ϕ 和 ψ 设置为零，无量纲光速设为 100。Debye 长度设置为 0.01，并取不

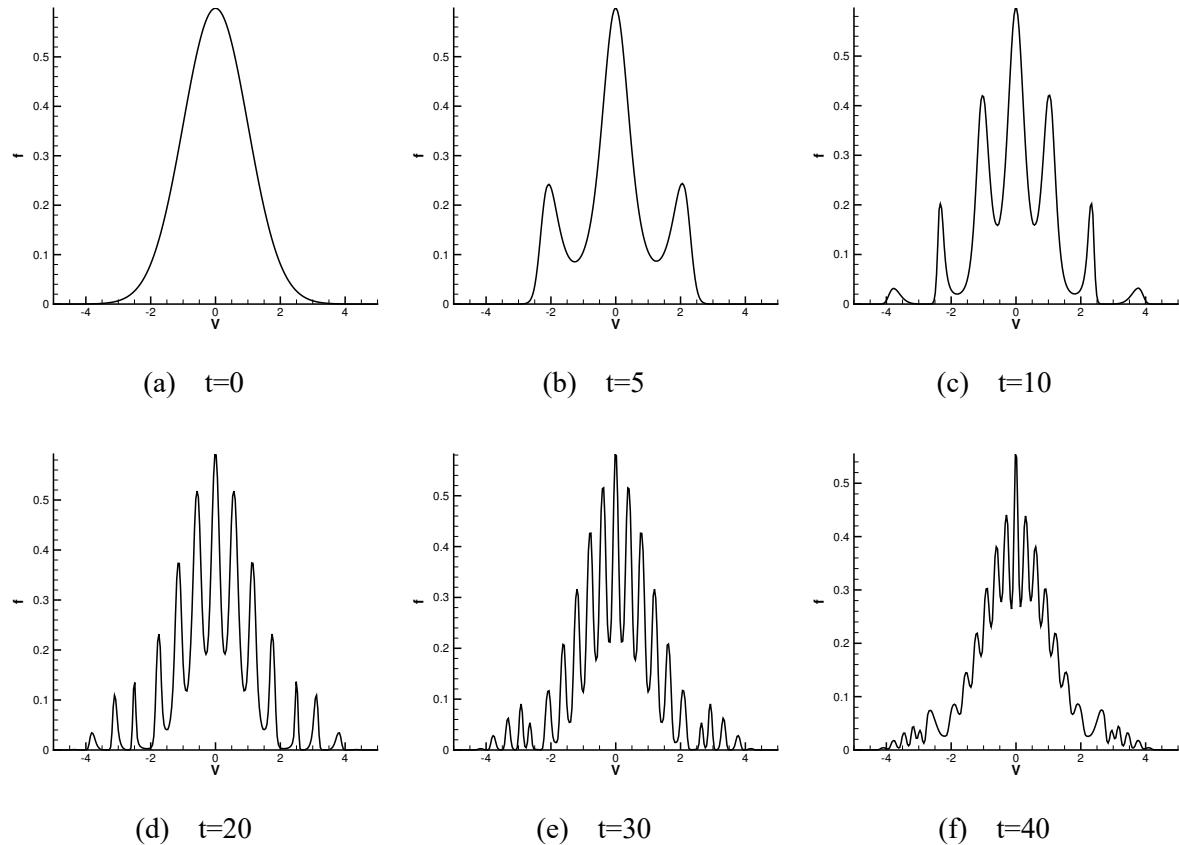


图 5.21 强 Landau 阻尼中 $x = 0$ 处的电子分布函数随时间的演化

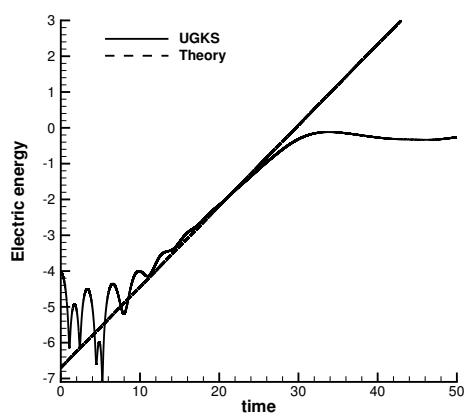


图 5.22 弱双流不稳定性中电场能随时间的演化

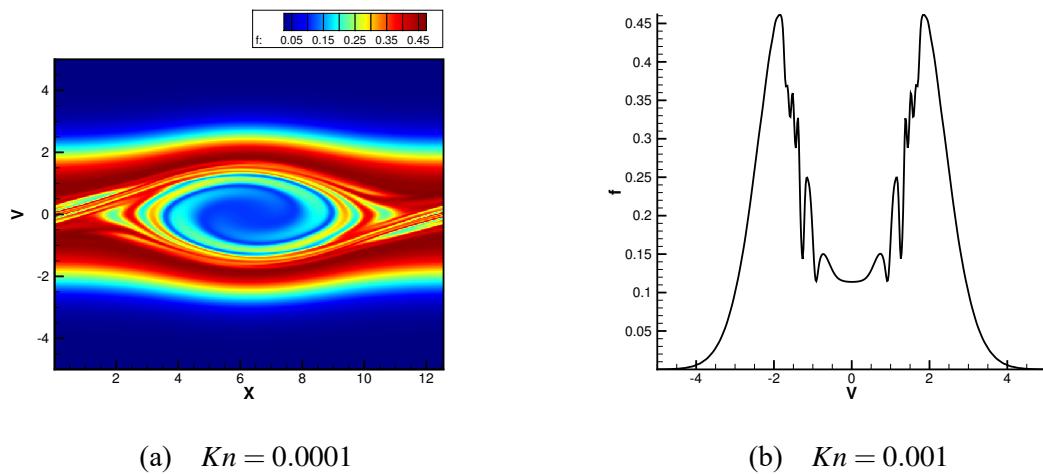


图 5.23 弱双流不稳定性中电子分布函数随时间的演化

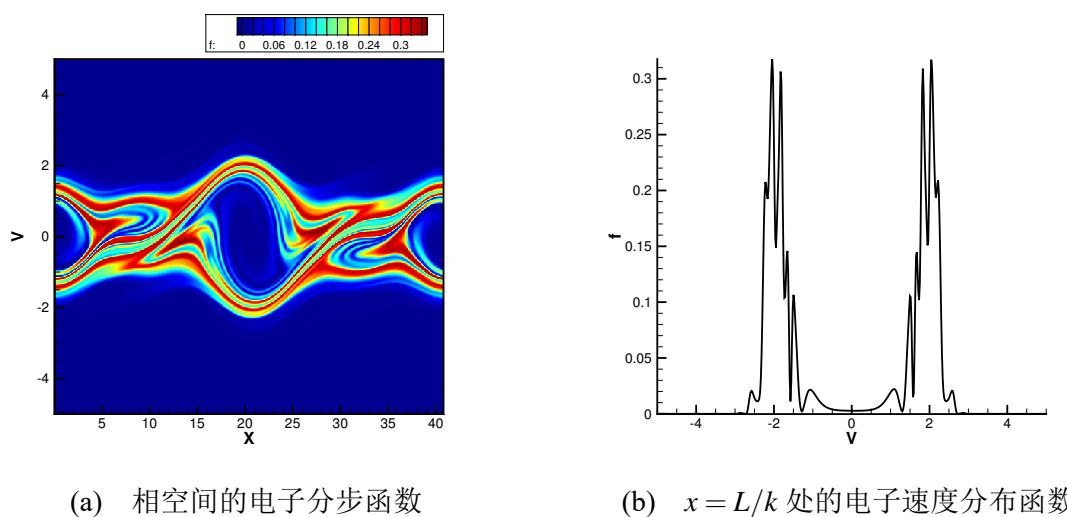


图 5.24 强双流不稳定性中 $t = 70$ 时电子在相空间和区域中心的分布

同的 Larmor 半径 $r_L = 0.003, 0.01, 100$ 作为参量。

在 $t = 0.1$ 时激波管内离子和电子的数密度、速度和温度的分布如图5.25所示。管内的解由不同的波结构和分片常数状态组成。当 $r_L = 0.003$ 时，经典的 Sod 激波管结构同样出现，即左行的快速稀疏波 (Fast Rarefaction Wave, FR)，接触间断 (Contact Discontinuity, C) 和右行的慢激波 (Slow Shock, SS)。此外，激波管中央处还存在一个复合波结构 (Slow Compound Wave, SM)。Brio 和 Wu 在原始算例中对这个结构做出了解释^[164]，即这个结构的出现是由 MHD 方程的非凸性导致，初始的磁场间断面诱导流场形成了复合波结构。可以看到，当 r_L 很小时，此时等离子体的演化规律可以由理想磁流体方程描述，而 UGKS 给出的解和 MHD 方程的数值解^[165] 相符合。随着 r_L 的增大，洛伦兹力相应减小，电荷分离效应 (Charge Separation) 变得更加显著，而理想 MHD 和 Hall-MHD 方程均认为等离子体 $n_i = n_e$ 处处处存在，因而不再能描述这种情况下的等离子体演化。当 $r_L = 100$ 时，此时 r_L 远大于激波管的特征长度，等离子体表现为中性气体的性质，Brio-Wu 激波管退化为 Sod 激波管问题，如图5.25(g-i) 所示。

5.4.6 Orszag-Tang 磁流体涡

考虑 Orszag 和 Tang 提出的磁流体模型湍流问题^[166]。考虑方形流场 $[0, 2\pi] \times [0, 2\pi]$ ，初始条件设置为

$$\begin{aligned} n_- &= n_e = \gamma^2, p_i = p_e = \gamma, B_y = \sin(2x), \\ U_i &= U_e = -\sin(y), V_i = V_e = \sin(x), \end{aligned} \quad (5.76)$$

其中单原子分子的绝热指数为 $\gamma = 5/3$ 。初始时刻的离子动能、流线、磁压和磁场线分布如图5.26所示。

离子和电子的质量比设置为 $m_i/m_e = 25$ ，克努森数为 $Kn = 10^{-5}$ ，Larmor 半径设置为 $r_L = 0.05$ ，离子和电子间相互作用频率 $v_{ie} = 0$ 。物理空间被划分为 200×200 的均匀网格。离子速度截断为 $[-5, 5]$ ，电子速度空间为 $[-5\sqrt{5}, 5\sqrt{5}]$ ，使用 25×25 的均匀速度点离散，并考虑 Newton-Cotes 数值积分公式。在流场的四个边界均使用周期边界条件。

图5.27, 5.28和5.29展示了不同时刻流场中的离子数密度、压力、动能和磁压分布。可以看到，随着时间演化，流场中原始的主涡结构被电磁场作用驱动，形成越来越复杂的小涡结构。

5.4.7 部分电离等离子体

考虑由5.18所描述的包含电离和复合反应的部分电离等离子体系统。此时混合物系统由离子、电子和其复合而成的中性气体组成。

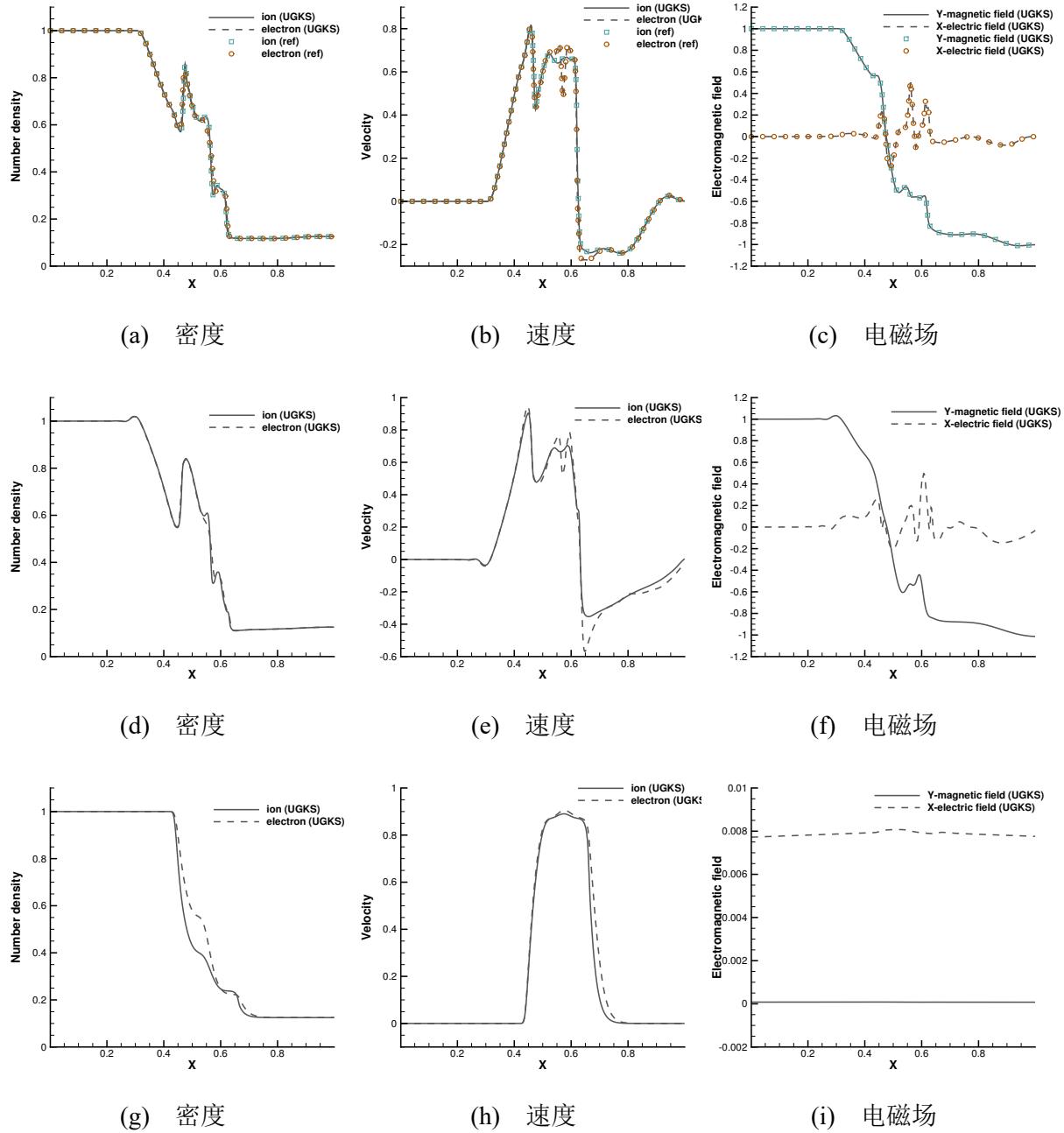


图 5.25 Brio-Wu 激波管问题在不同参考 Larmor 半径下 $t = 0.1$ 时管内离子和电子的数密度、速度和 X 方向电场分量和 Y 方向磁场分量，其中第一行 $r_L = 0.003$ ，第二行 $r_L = 0.01$ ，第三行 $r_L = 100.0$

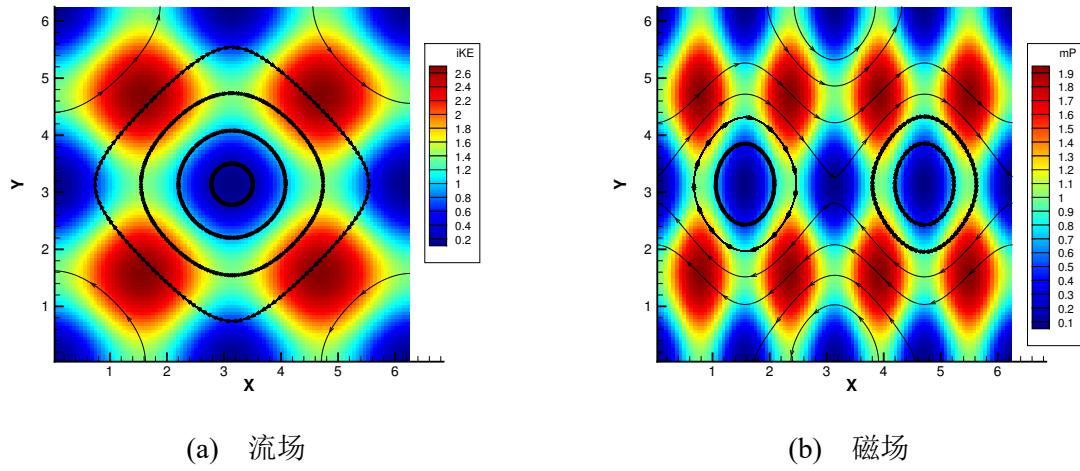
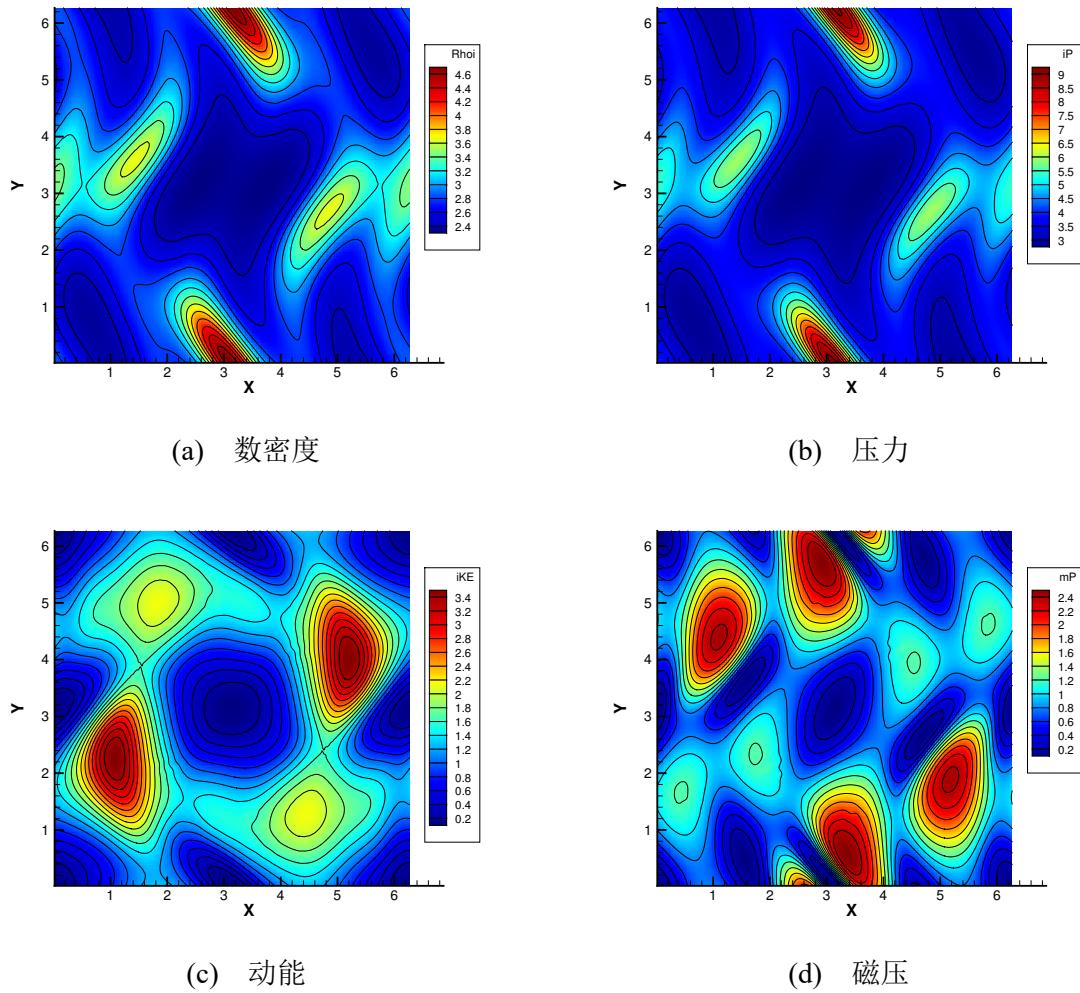
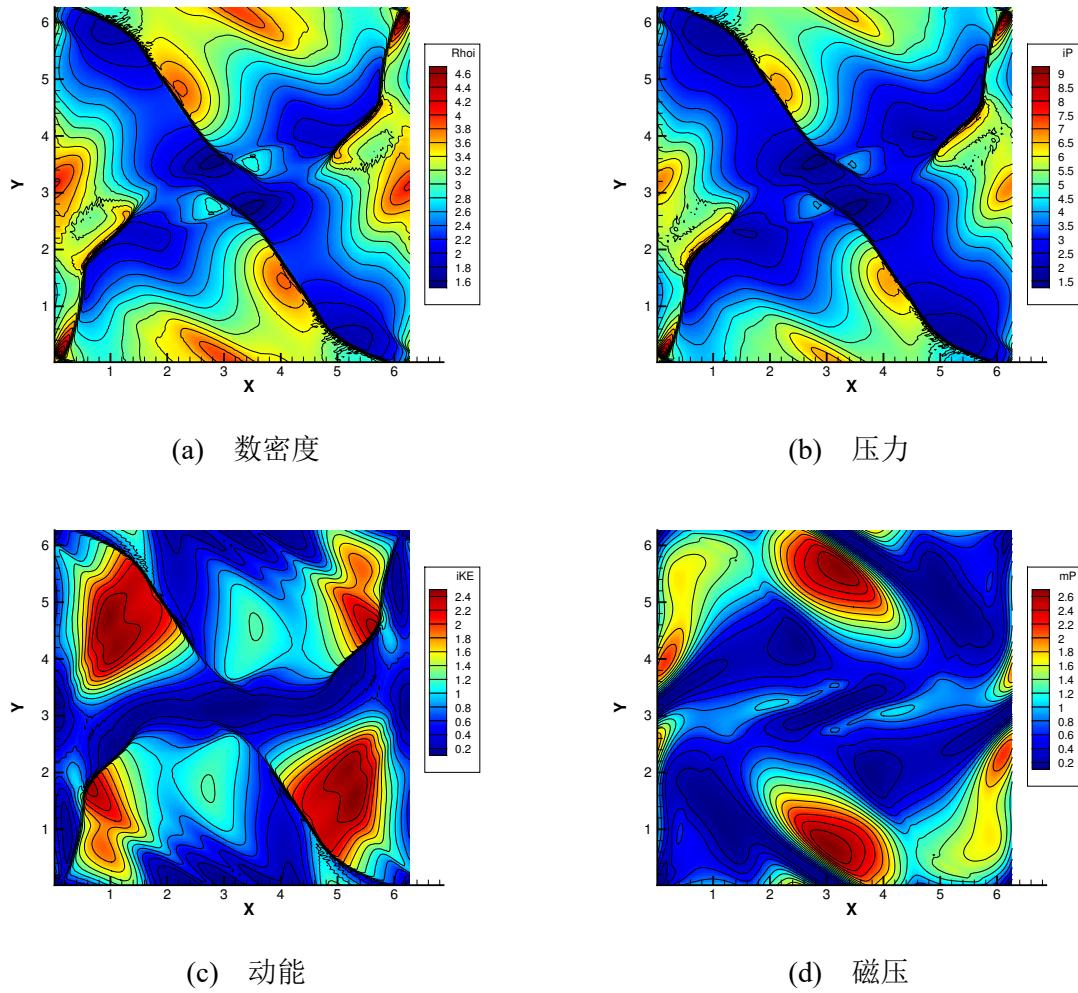


图 5.26 Orszag-Tang 磁流体湍流问题初始时刻的流场和磁场分布

图 5.27 Orszag-Tang 磁流体湍流问题 $t = 0.5$ 时的离子数密度、压力、动能和磁压分布

图 5.28 Orszag-Tang 磁流体湍流问题 $t = 2.0$ 时的离子数密度、压力、动能和磁压分布

5.4.7.1 Brio-Wu 激波管

考虑和前文相同参数设置的 Brio-Wu 激波管问题，此时系统包含离子、电子和中性分子等三组分。假设激波管是一个理想的光学薄系统，即即复合反应辐射出的光子全部逃逸出系统。

首先考虑无化学反应的三组分激波管问题。取不同的参考 Larmor 半径 $r_L = 0.001, 0.003, 0.01, 100$ 作为参量，并考虑不同的中性气体占比 $n_n = 0.22n_i, 1.0n_i$ 。图5.30到5.33展示了 $n_n = 0.22n_i$ 时不同参考 Larmor 半径下 $t = 0.1$ 时激波管内流场数密度和速度的分布情况。参考解是不含中性气体的双流体模型计算出的结果。可以看出，由于中性气体不会与电磁场耦合响应，激波管中央由于电磁场存在引起的复合波结构相对于双流体模型有所减弱。随着 Larmor 半径的增大，激波管中央由于电磁场存在引起的复合波结构不断减弱，流场结构由 MHD 方程的解逐渐向标准 Sod 激波管问题的解过渡。图5.34到5.35展示了 $n_n = n_i$ 时 Brio-Wu 激波管问题的数值解。与前例相比，

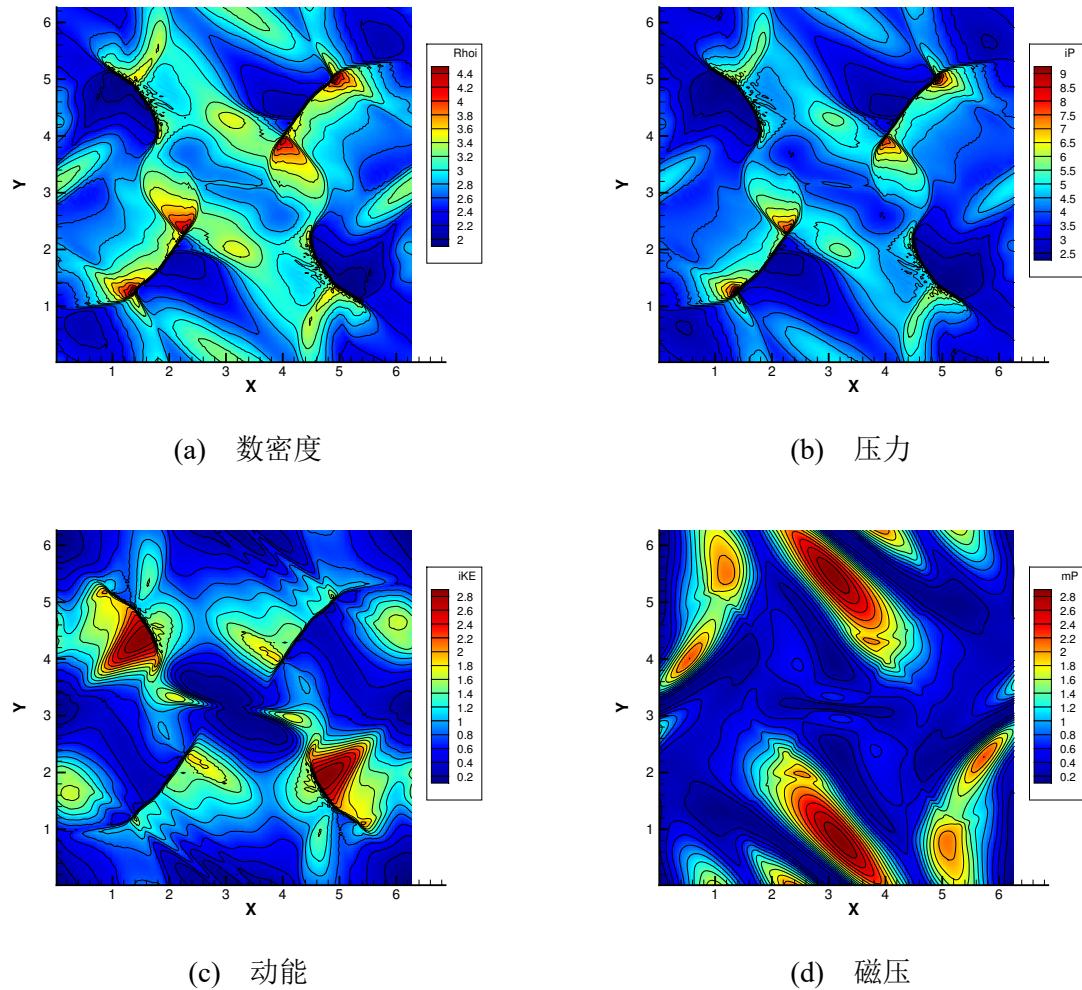


图 5.29 Orszag-Tang 磁流体湍流问题 $t = 3.0$ 时的离子数密度、压力、动能和磁压分布

$r_L = 0.001$ 时激波管内的解与 $n_n = 0.22n_i$ 下 $r_L = 0.003$ 的解类似，而 $r_L = 0.003$ 的解则趋向于 $n_n = 0.22n_i$ 下 $r_L = 0.01$ 的流场结构。中性气体的存在表现为等效的增广 Larmor 半径效应，这是符合物理规律的自洽现象。

之后考虑由电离和复合化学反应的三组分激波管，其中初始中性气体满足 $n_n = n_i = n_e$ 。考虑一个实验分子，其在 A.2 中的电离反应参数取值为 $A = 0.02$, $P = 0$, $X = 0.232$, $K = 0.39$ ，而复合反应 A.3 取值为 $B = 0.0127$ 。图 5.36 给出了 $t = 0.1$ 时激波管内的流场和电磁场的分布情况。可以看到，由于复合反应辐射的光子不断逸出，系统不断损失能量。动能相比无化学反应的情况有所减小，同时系统的温度不断降低。与此同时，激波管中心位置由流场和电磁场耦合作用形成的复合波结构有所增强。

为理解这一现象，我们给出激波管内不同时刻的数值解，如图 5.37 所示。明显地，管内的密度并非单调变化的。从式 A.2 上定性地看，电离反应和温度呈正相关的关系，温度越高，电离过程相对于复合过程而言越占优。因此在初始温度下，管内的电离反应占主导，离子和电子的密度增加，中性气体的密度降低。此时混合物更多地表现等

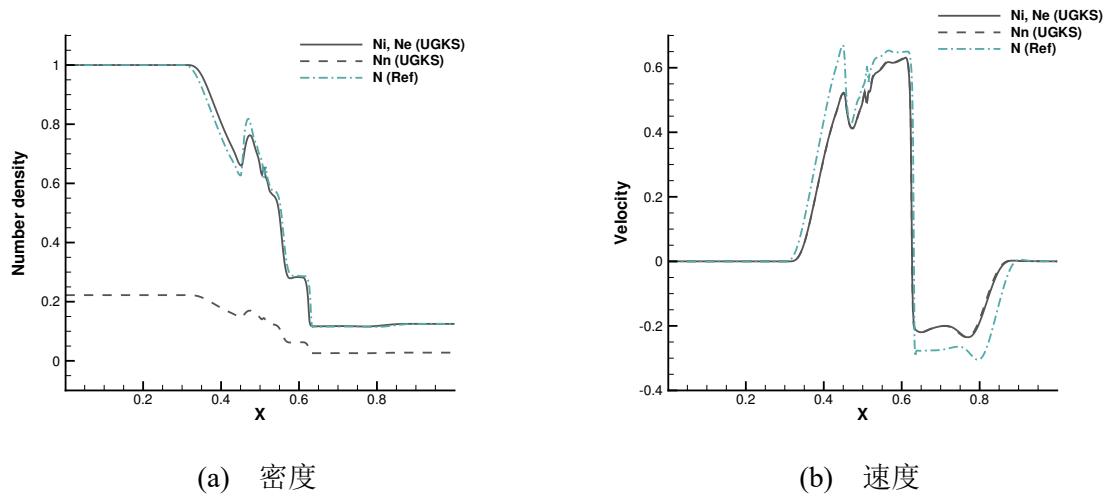


图 5.30 无化学反应的 Brio-Wu 激波管问题在参考 Larmor 半径 $r_L = 0.001$, 中性气体占比 $n_n = 0.22$ 和 $t = 0.1$ 时管内的粒子数密度和速度分布

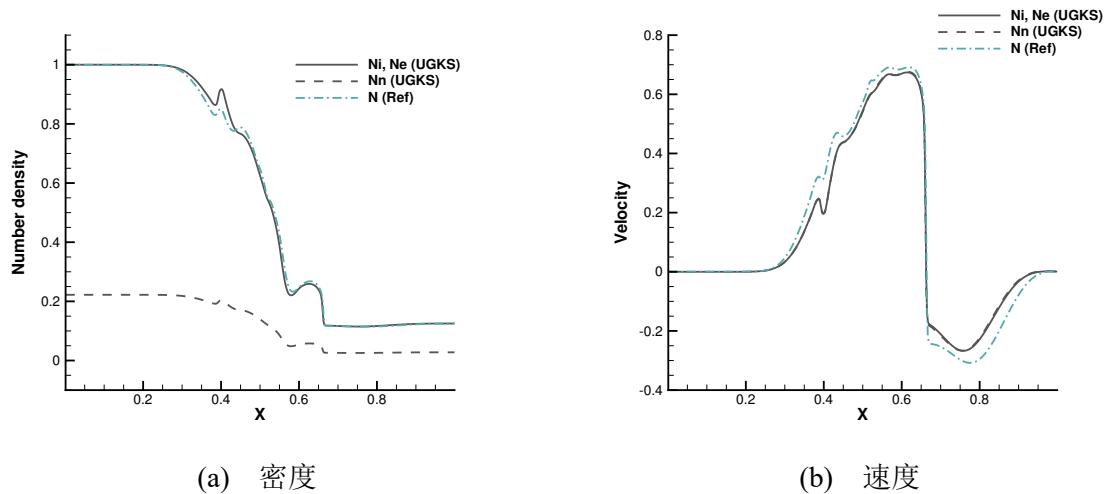


图 5.31 无化学反应的 Brio-Wu 激波管问题在参考 Larmor 半径 $r_L = 0.003$, 中性气体占比 $n_n = 0.22$ 和 $t = 0.1$ 时管内的粒子数密度和速度分布

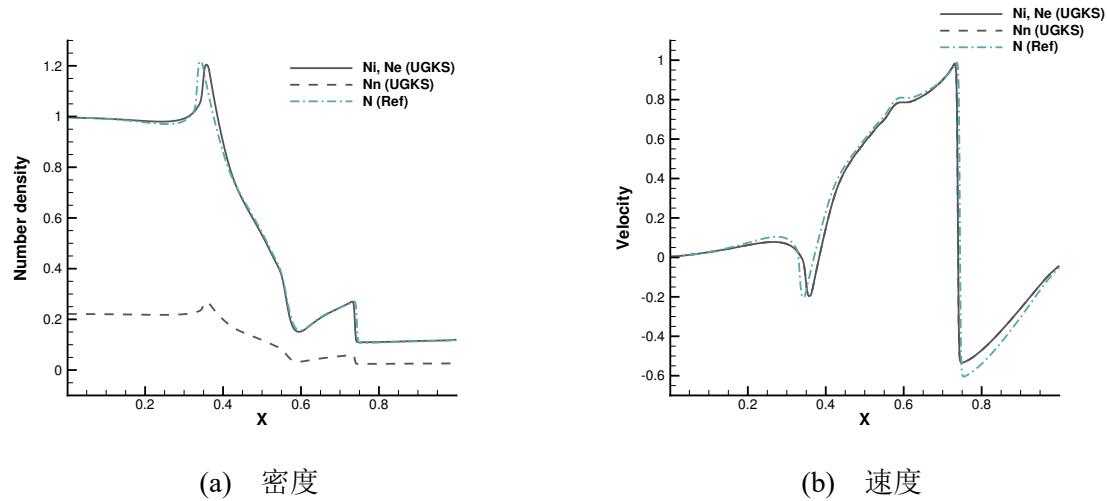


图 5.32 无化学反应的 Brio-Wu 激波管问题在参考 Larmor 半径 $r_L = 0.01$, 中性气体占比 $n_n = 0.22$ 和 $t = 0.1$ 时管内的粒子数密度和速度分布

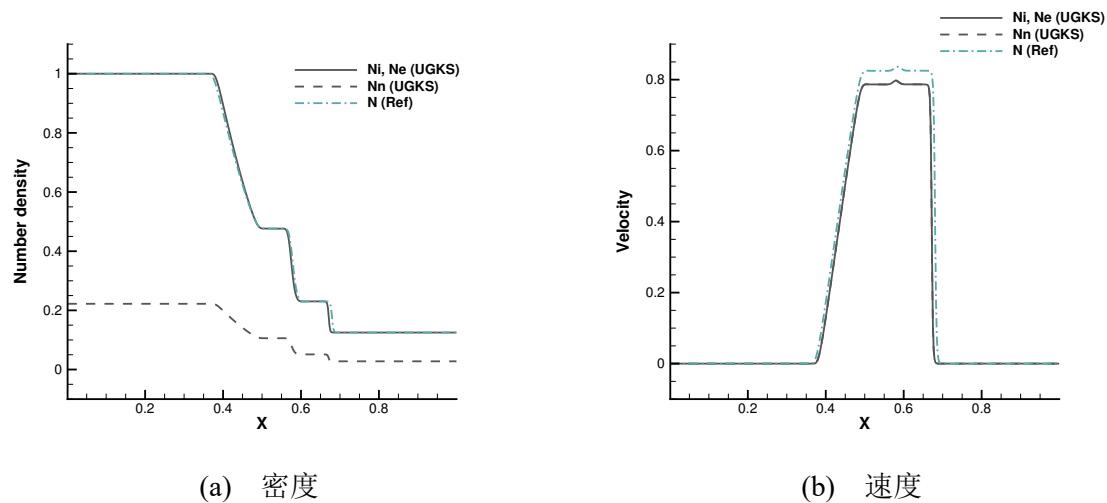


图 5.33 无化学反应的 Brio-Wu 激波管问题在参考 Larmor 半径 $r_L = 100$, 中性气体占比 $n_n = 0.22$ 和 $t = 0.1$ 时管内的粒子数密度和速度分布

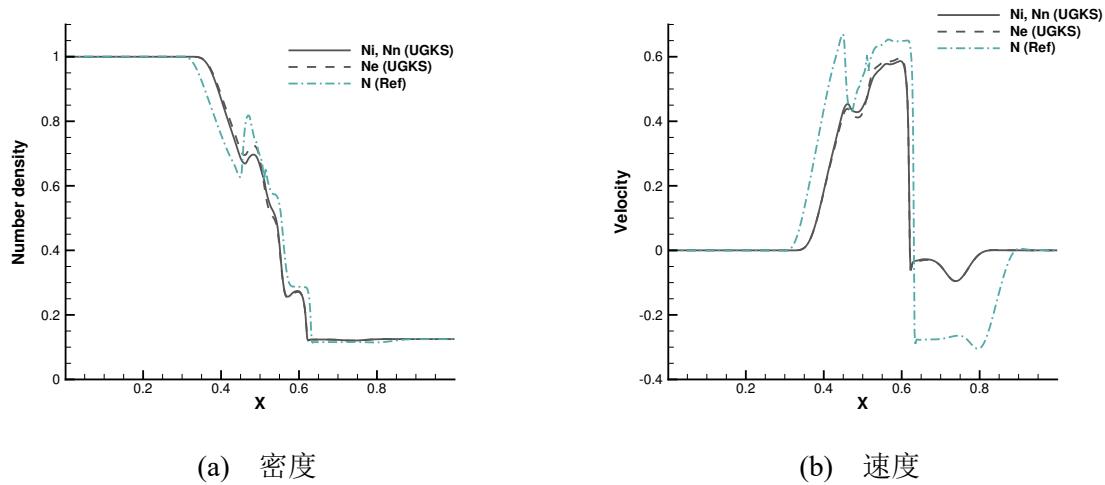


图 5.34 无化学反应的 Brio-Wu 激波管问题在参考 Larmor 半径 $r_L = 0.001$, 中性气体占比 $n_n = 1$ 和 $t = 0.1$ 时管内的粒子数密度和速度分布

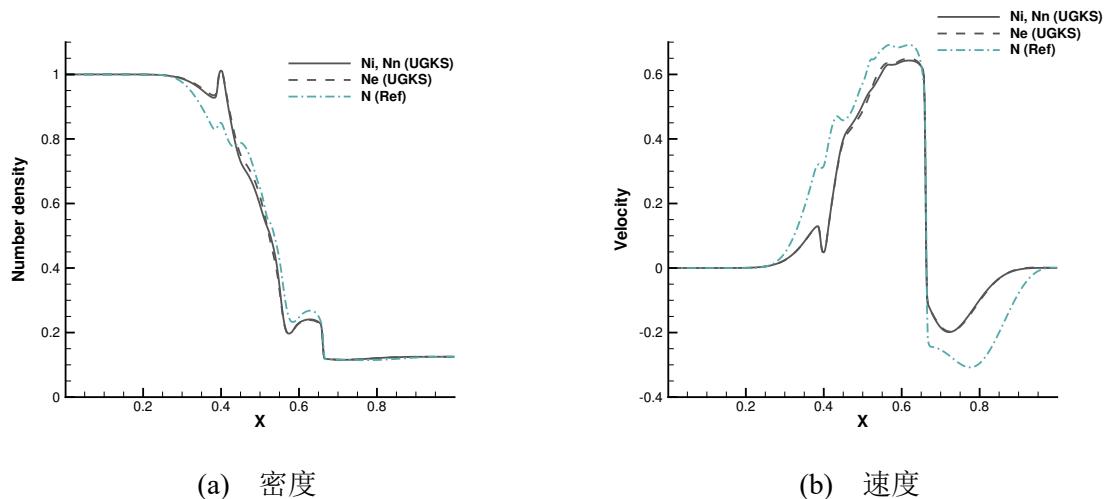


图 5.35 无化学反应的 Brio-Wu 激波管问题在参考 Larmor 半径 $r_L = 0.003$, 中性气体占比 $n_n = 1$ 和 $t = 0.1$ 时管内的粒子数密度和速度分布

离子体的行为，因而激波管中心处的复合波有所增强。随着时间演化的过程，温度不断降低，同时离子和电子密度增多，在越过一临界点后，激波管内变为复合反应主导，此后离子和电子密度下降，温度继续降低，直至达到输出时刻 $t = 0.1$ 。在激波管内，离子和电子的数目呈现先增加后减少的趋势，中性气体的变化规律与之相反。

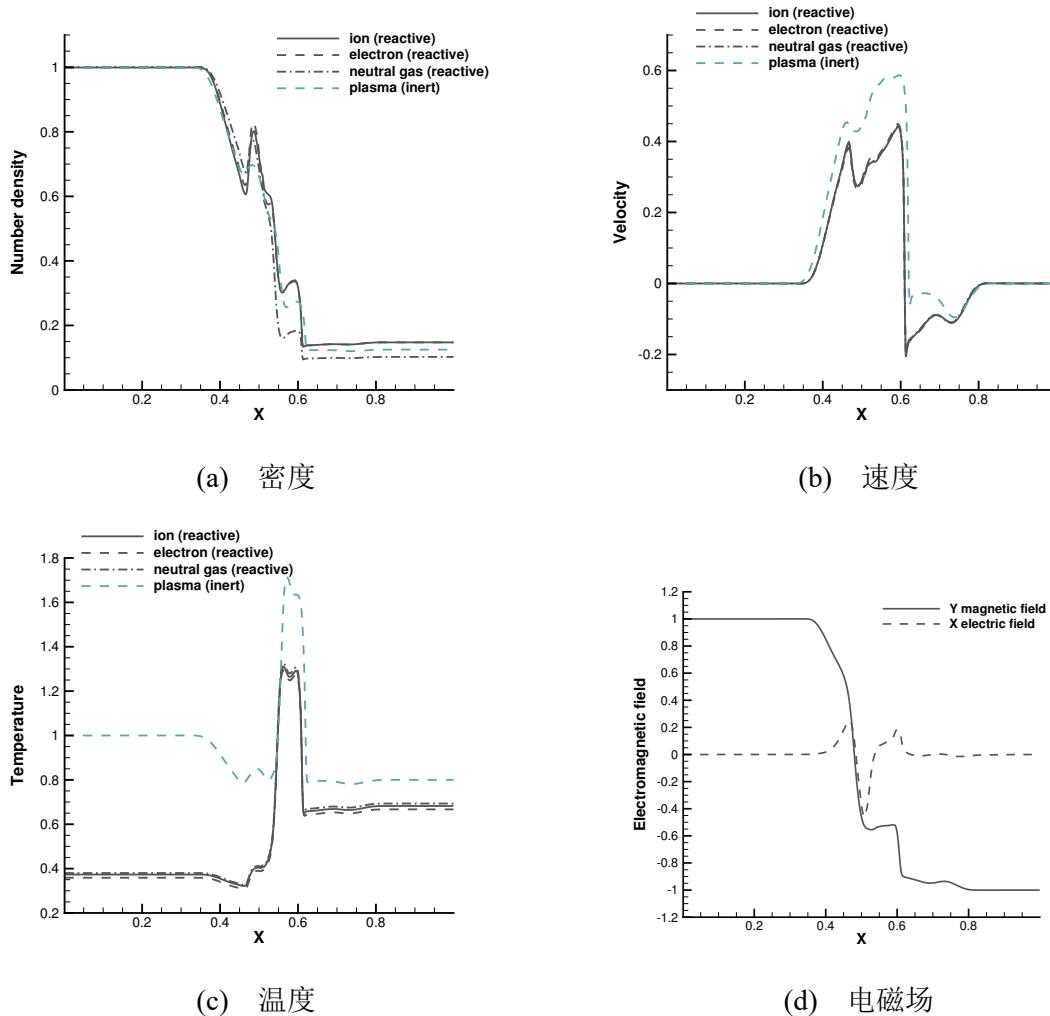


图 5.36 有化学反应的 Brio-Wu 激波管问题在参考 Larmor 半径 $r_L = 0.001$, 中性气体占比 $n_n = 1$ 和 $t = 0.1$ 时管内的粒子数密度、速度、温度和电磁场

5.4.7.2 Orszag-Tang 磁流体涡

考虑和前文相同的 Orszag-Tang 磁流体模型湍流问题，此时系统包含离子、电子和中性分子等三组分。这里假设磁流体是一个理想的光学厚系统，即复合反应辐射出的光子全部被吸收回系统。设置离子和电子质量比为 $m_i/m_e = 5$ ，克努森数为 $Kn = 0.01$ ，Larmor 半径为 $r_L = 0.05$ ，不同粒子间的相互作用频率由 AAP 模型规定。物理空间划分为 100×100 ，速度空间为 25×25 。

首先考虑无化学反应的三组分 Orszag-Tang 问题，其中中性气体占比为 $n_n = 0.5n_i$ 。

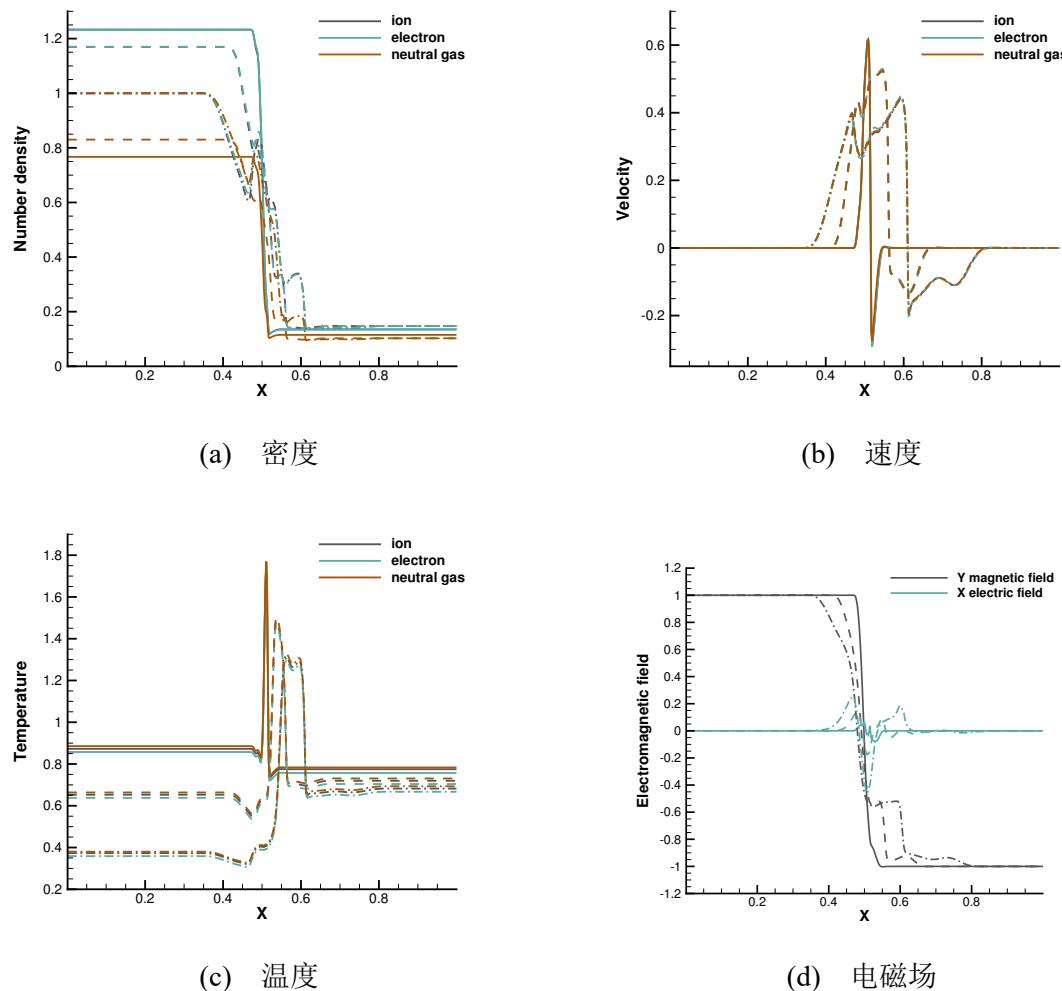


图 5.37 有化学反应的 Brio-Wu 激波管问题在参考 Larmor 半径 $r_L = 0.001$, 中性气体占比 $n_n = 1$ 时管内的时间演化解 (实线: $t = 0.01$, 虚线: $t = 0.05$, 点画线 $t = 0.1$)

图5.38到5.40展示了不同时刻流场中的粒子数密度、压力、动能和磁压分布。由于不同组分间相互作用引入的电阻项，流场动能和电场能的相互转化受到阻滞，流体的电磁性质减弱，相应的等离子体动能随之减小。与 MHD 方程相比，此时磁场的演化方程中存在耗散作用项^[167]，磁压也随之降低。

随后我们加入化学反应作用项，分别考虑电离反应占优 ($A = 0.1, B = 0.01$) 和复合反应占优 ($A = 0.001, B = 0.01$) 的情形。如图5.41到5.43，在电离反应的支配下，流场中离子和电子的有所增加，中性气体的密度相应降低，混合物系统的性质更趋近于磁流体物理。此时流场中出现更多的复杂小涡结构。而在复合反应占主导时，如图5.44到5.46，由于增加的等效 Larmor 半径效应，此时磁场受到很大的耗散，在 $t = 3.0$ 时仅余留初始状态约三分之一的磁压峰值，等离子体的动能也随之大幅减少。

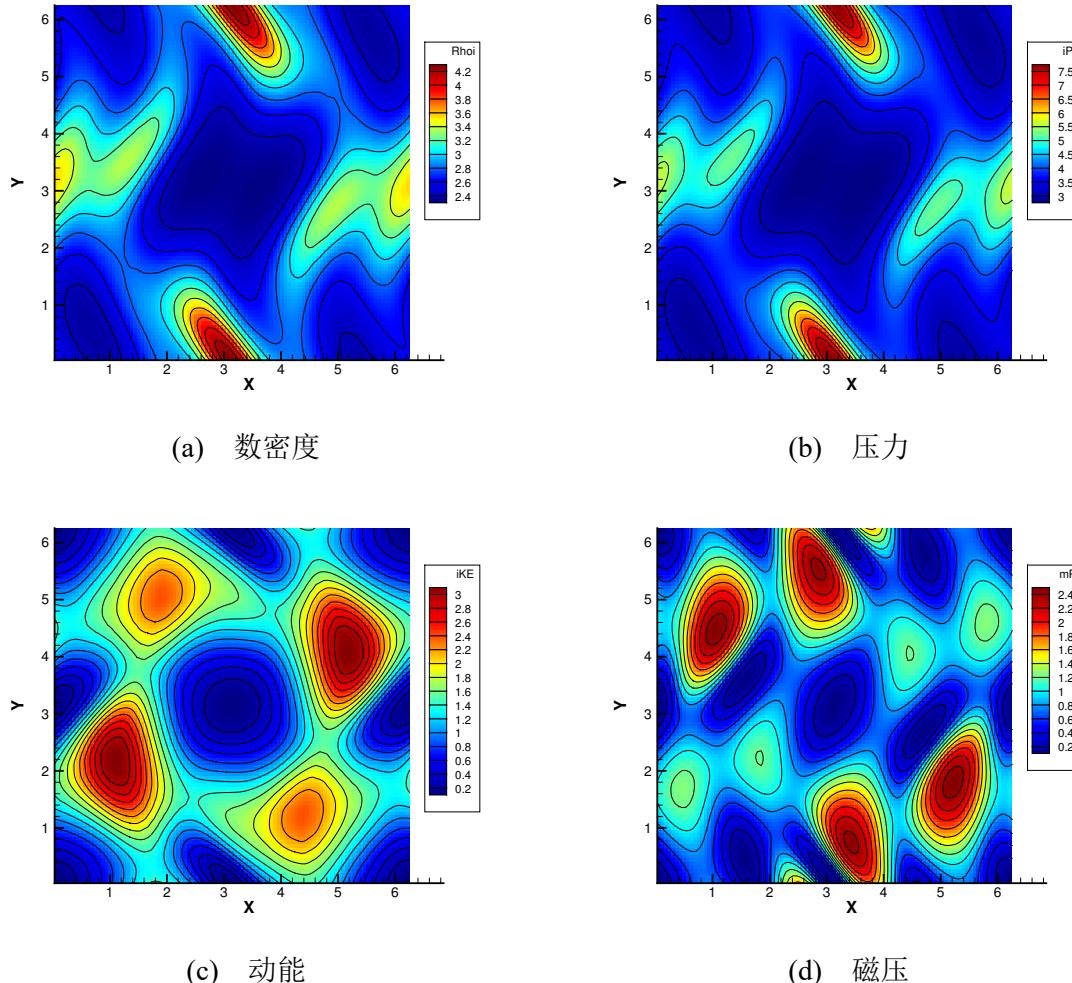


图 5.38 三组分惰性 Orszag-Tang 磁流体湍流问题 $t = 0.5$ 时的离子数密度、压力、动能和磁压分布

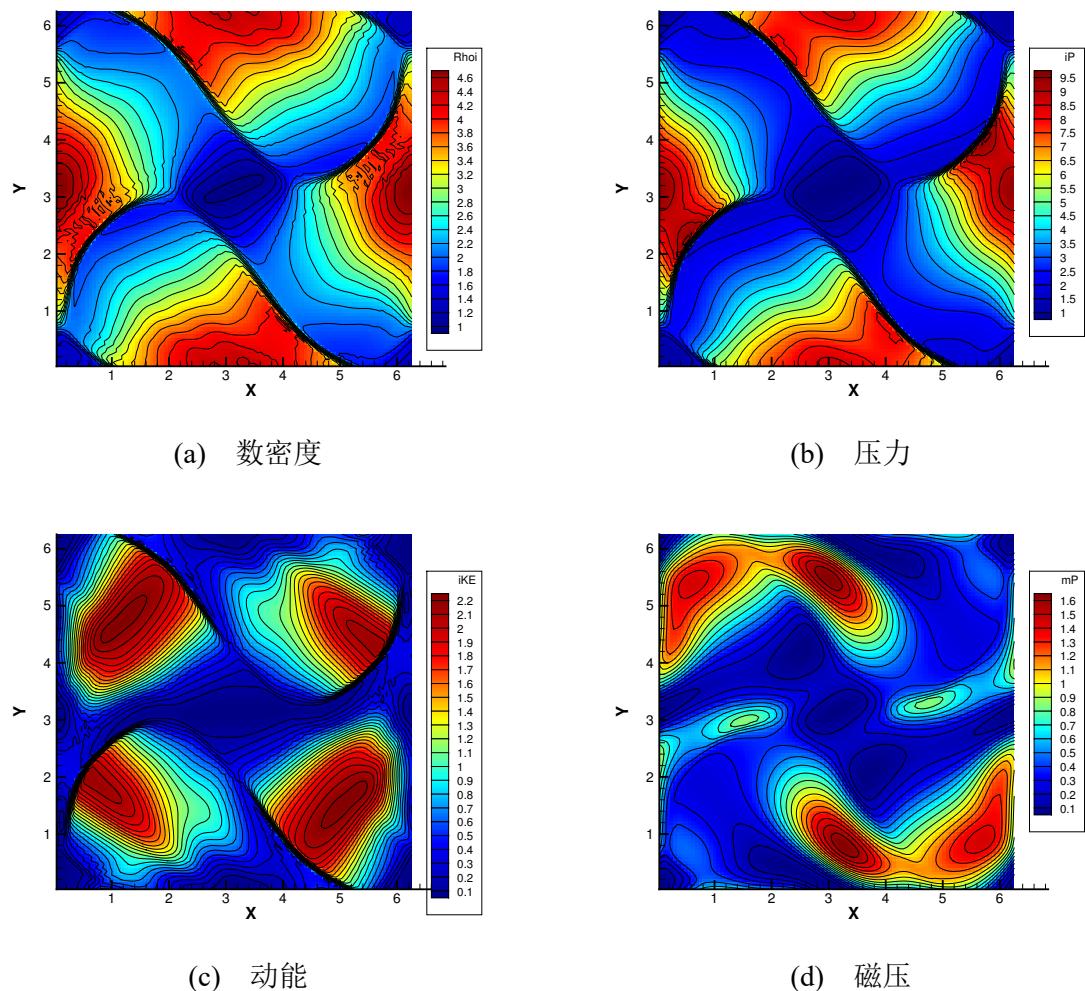


图 5.39 三组分惰性 Orszag-Tang 磁流体湍流问题 $t = 2.0$ 时的离子数密度、压力、动能和磁压分布

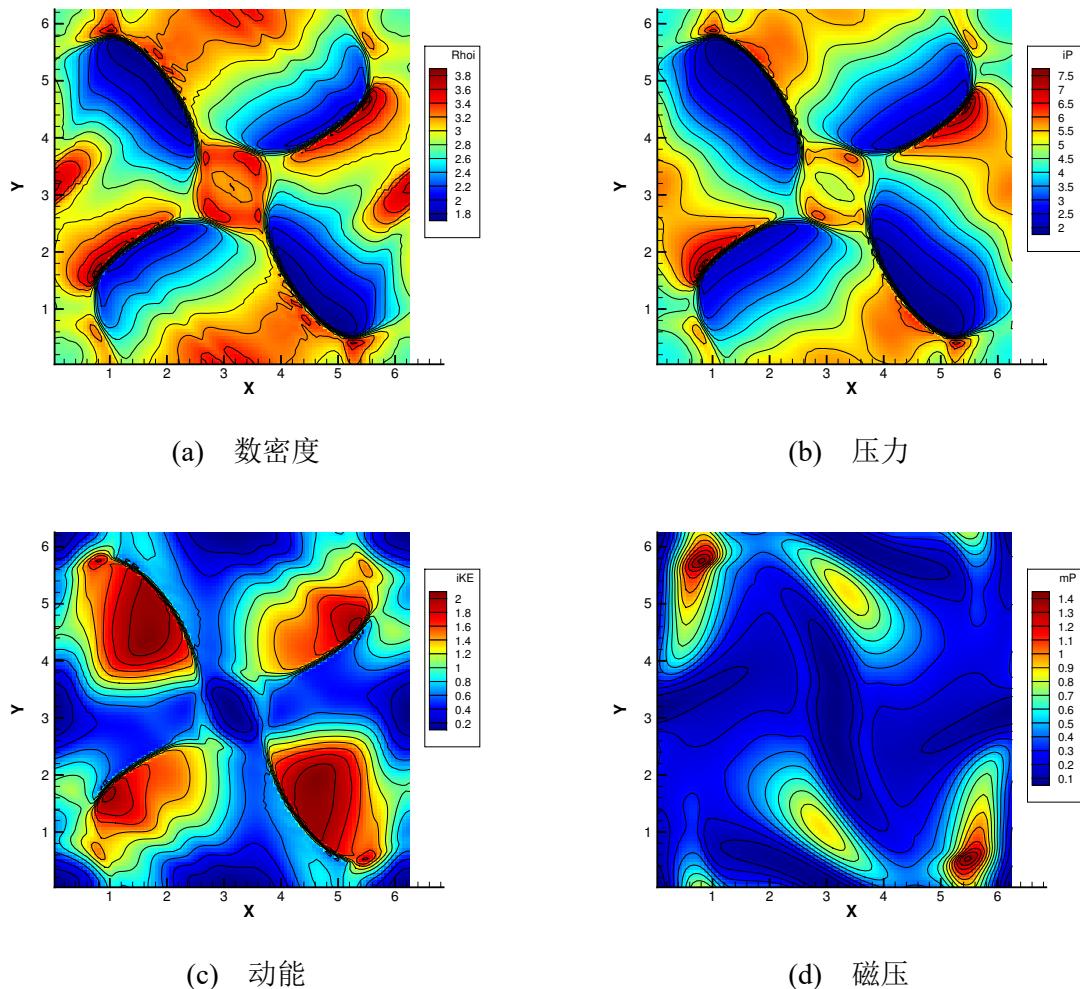


图 5.40 三组分惰性 Orszag-Tang 磁流体湍流问题 $t = 3.0$ 时的离子数密度、压力、动能和磁压分布

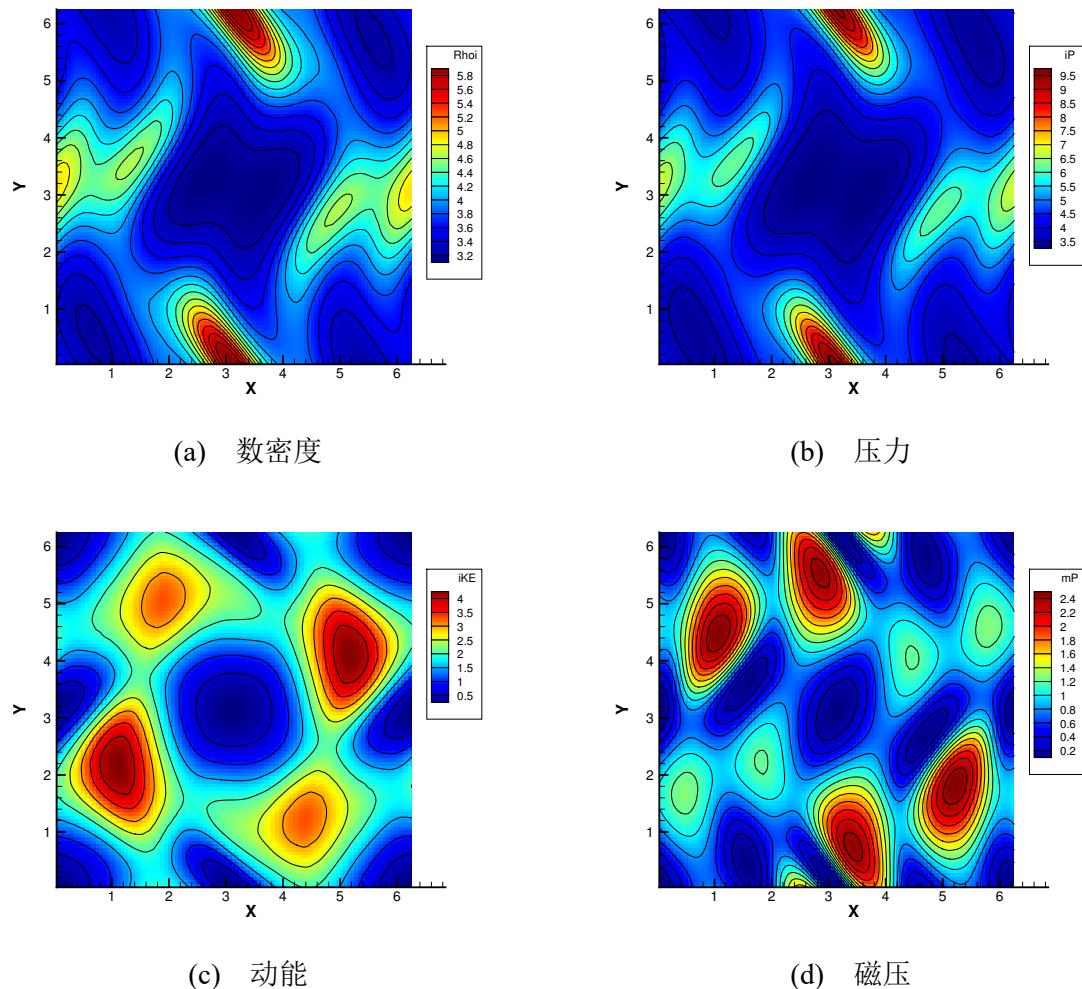


图 5.41 电离反应占优的 Orszag-Tang 磁流体湍流问题 $t = 0.5$ 时的离子数密度、压力、动能和磁压分布

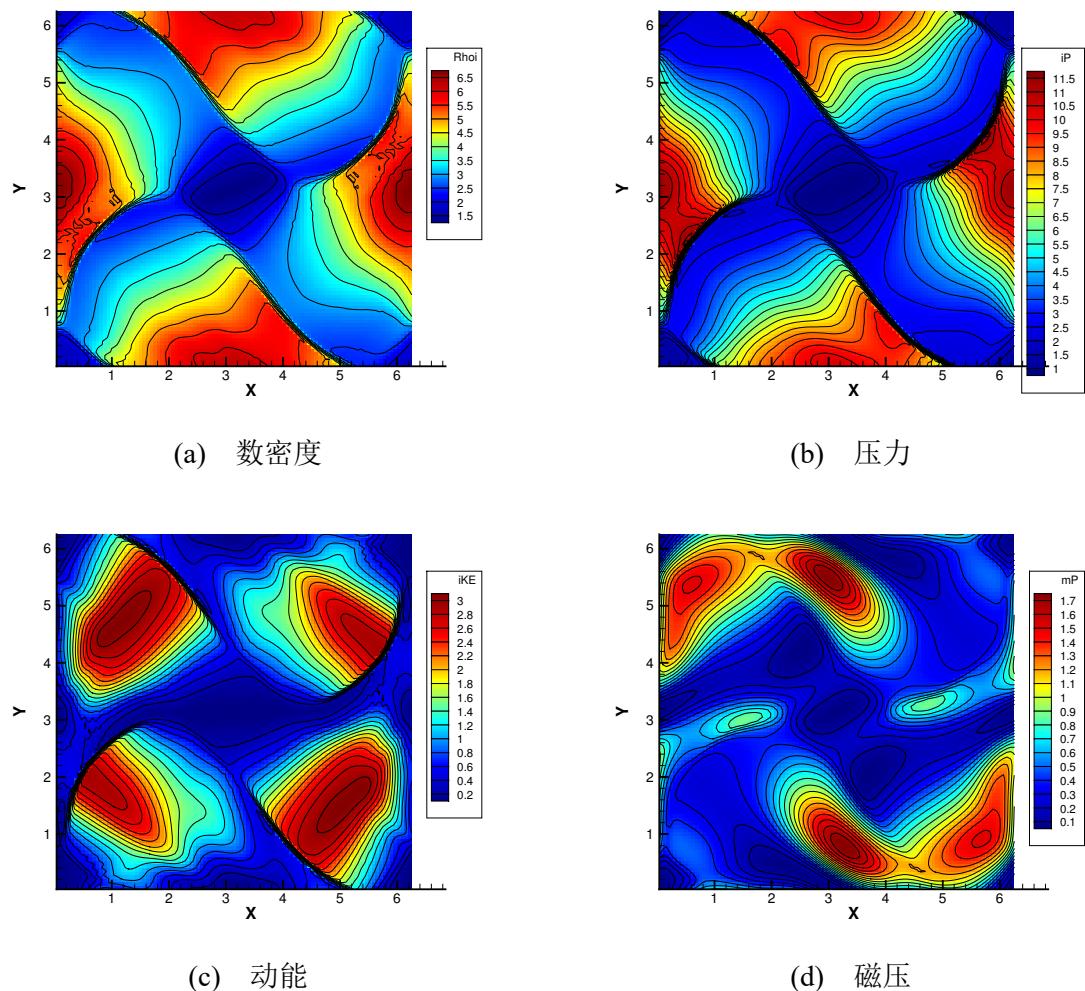


图 5.42 电离反应占优的 Orszag-Tang 磁流体湍流问题 $t = 2.0$ 时的离子数密度、压力、动能和磁压分布

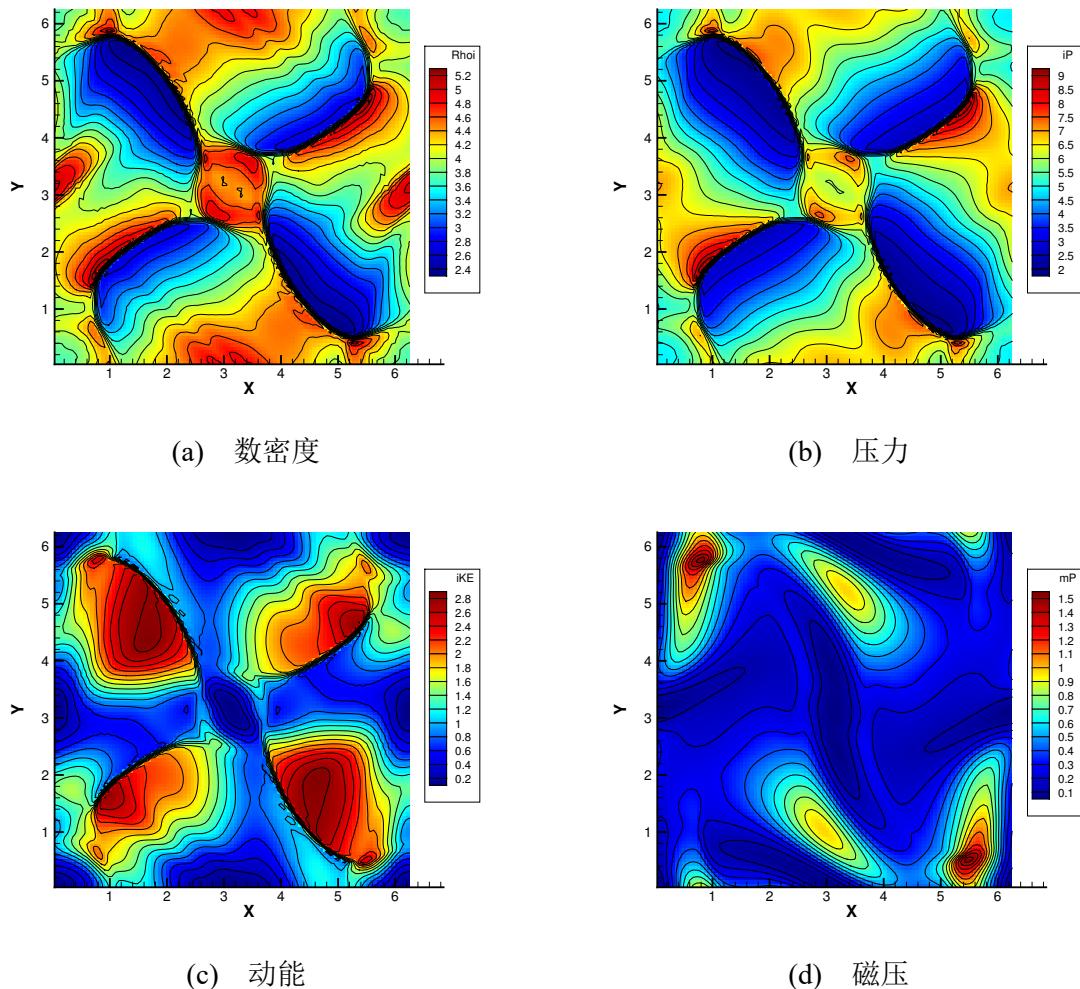


图 5.43 电离反应占优的 Orszag-Tang 磁流体湍流问题 $t = 3.0$ 时的离子数密度、压力、动能和磁压分布

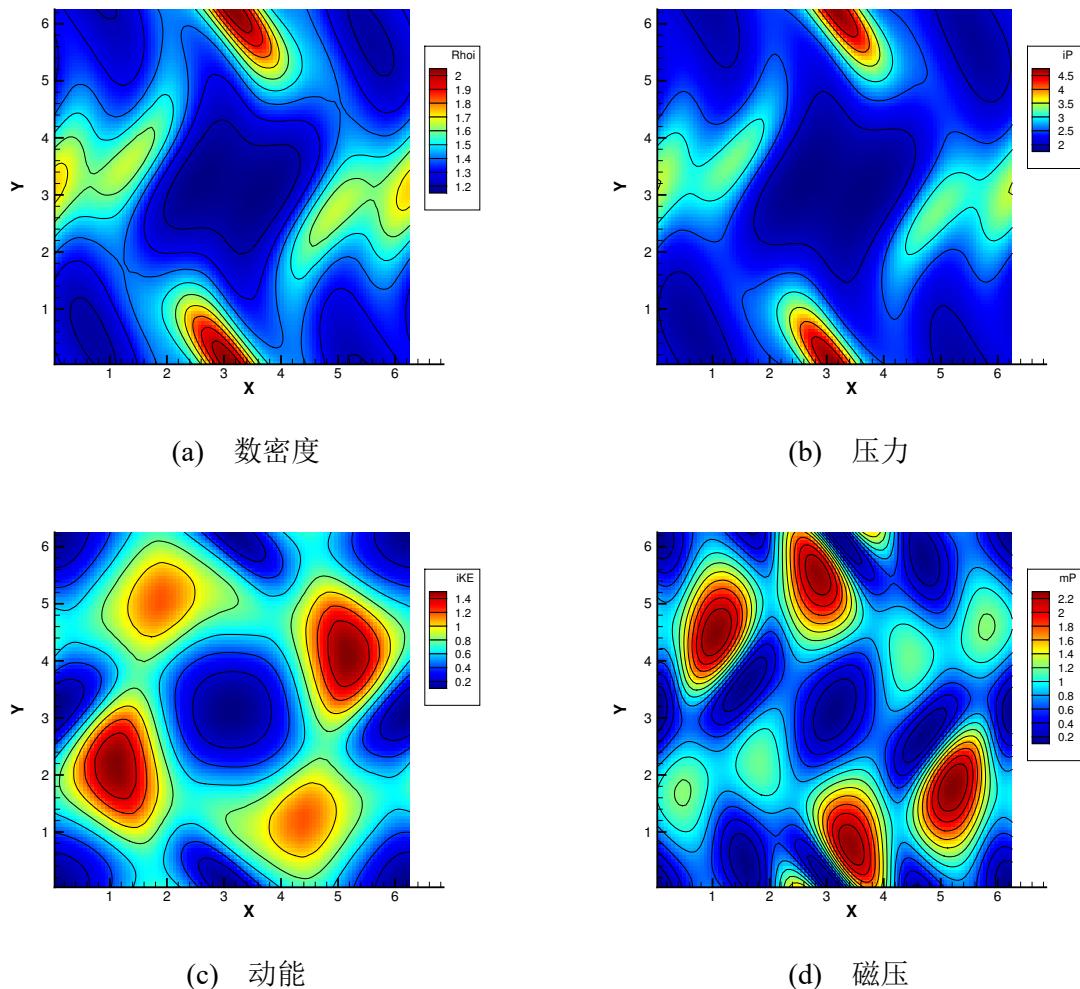


图 5.44 复合反应占优的 Orszag-Tang 磁流体湍流问题 $t = 0.5$ 时的离子数密度、压力、动能和磁压分布

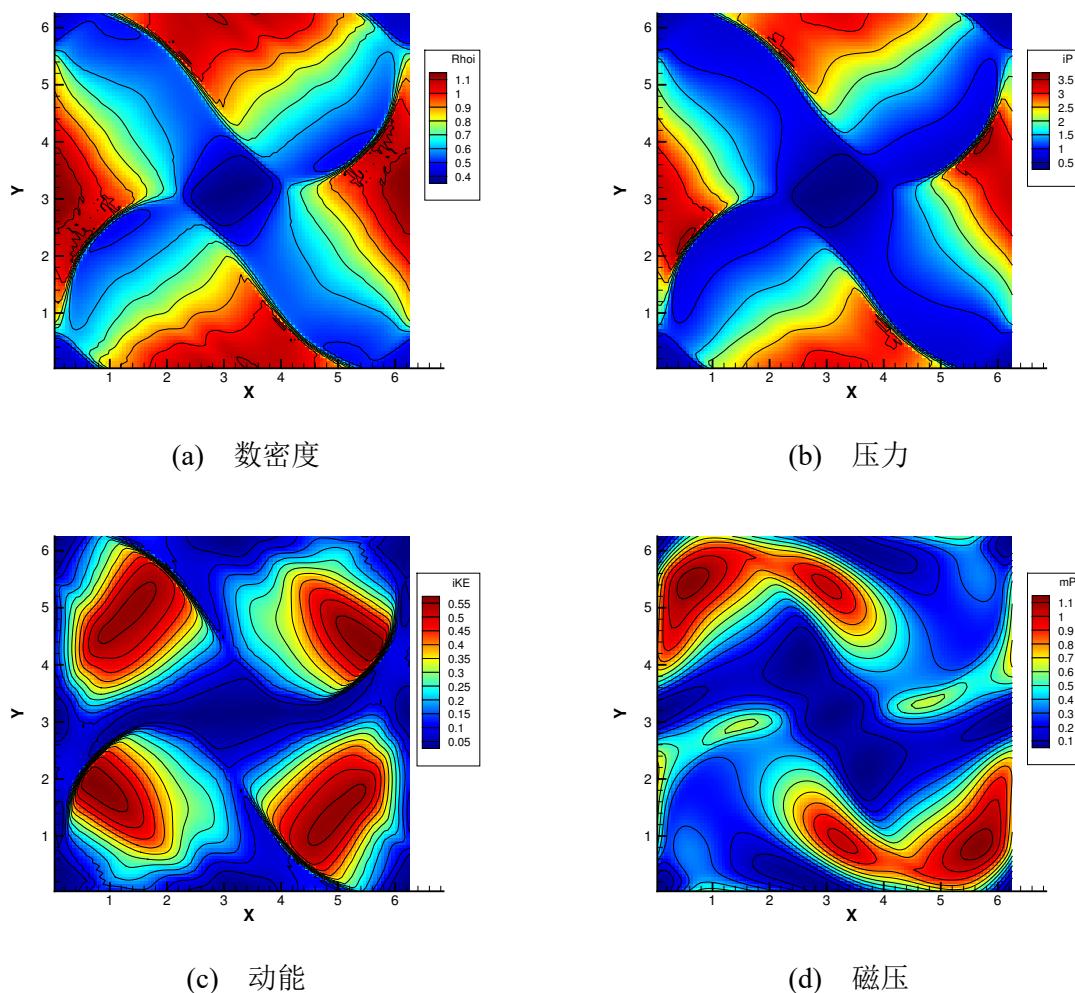


图 5.45 复合反应占优的 Orszag-Tang 磁流体湍流问题 $t = 2.0$ 时的离子数密度、压力、动能和磁压分布

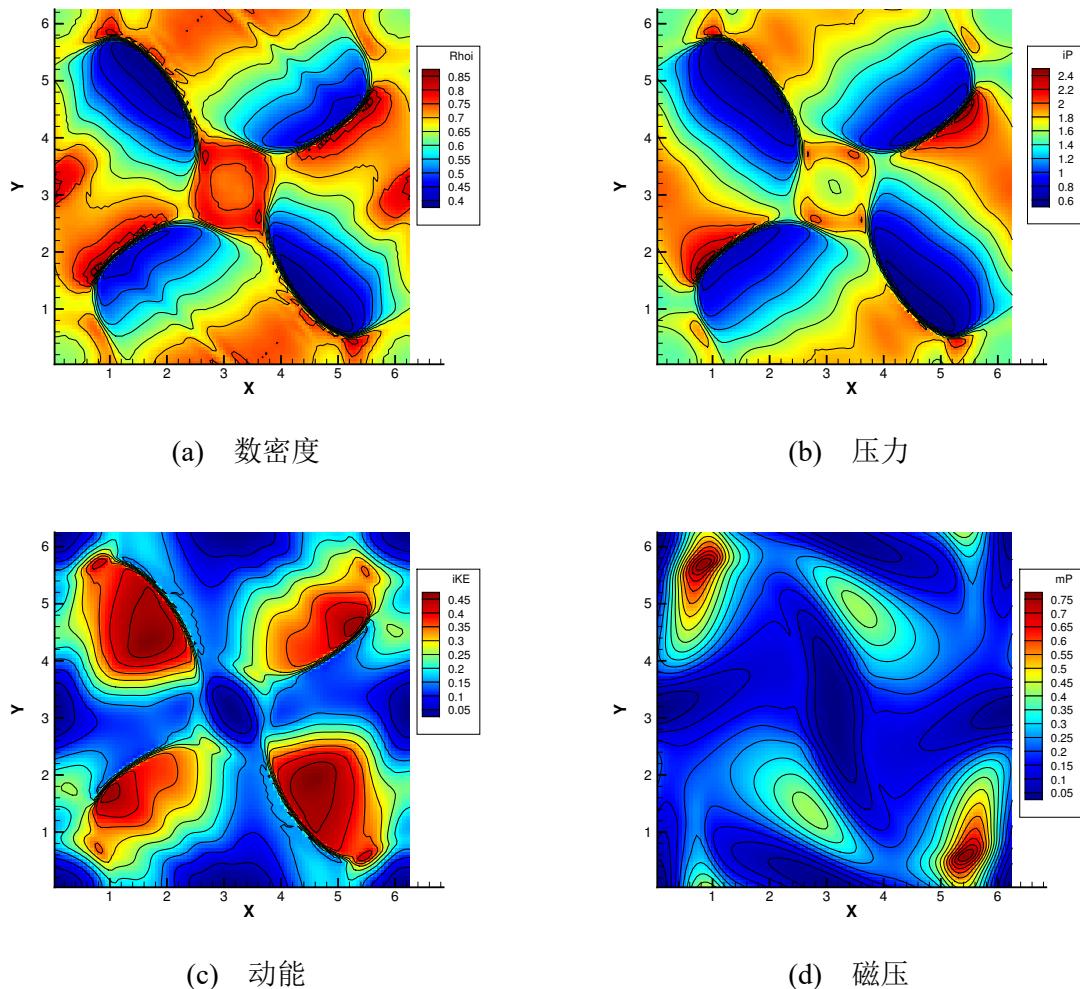


图 5.46 复合反应占优的 Orszag-Tang 磁流体湍流问题 $t = 3.0$ 时的离子数密度、压力、动能和磁压分布

5.5 小结

正如 F. F. Chen 在他的论著^[168] 中提到的，“等离子体涵盖了如此大的密度和温度范围，这使得对其的分析十分困难。大部分时间里，它的密度落在一个中间的范围，这使得它有时表现得像是流体，有时又像是一些独立粒子运动的总和。”由于不同组分运动规律的差异，和其相互作用引入的额外自由度，多组分气体和等离子体动力学是一个典型的多尺度问题。本章基于混合物的 Boltzmann 方程、动理论松弛模型和 Maxwell 方程的耦合问题，发展了适用于多尺度、多物理的多组分气体和等离子体的气体动理论学格式。相比于现有的单尺度回旋动理论学 (Gyrokinetic)、PIC (Particle-In-Cell) 方法和理想 MHD、Hall-MHD、双流体模型等单尺度适用型方法，UGKS 是一种内禀多尺度的计算方法，在不同的尺度上和物理问题中，能够统一、自动地恢复从 Vlasov-Fokker-Planck 物理到各类磁流体方程的数值解。UGKS 为非平衡气体和等离子体混合物的流动研究提供了一种强有力的研究工具。

第六章 结论

随着现代航空航天和微尺度元器件工业的持续发展，发展新型跨尺度数值方法的需求与日俱增。本文以统一气体动理学格式 (Unified Gas-Kinetic Scheme, UGKS) 的发展和其在跨尺度、非平衡流动问题中的应用研究为核心，构造了针对三种典型输运问题的多尺度算法。

基于存在外力项的气体动理学模型方程，我们发展了针对外力场下多尺度流动的细致平衡 (Well-Balanced) 统一气体动理学格式。通过对粒子自由迁移和碰撞过程的直接建模方法，我们完整地考虑了外力加速度对粒子运动轨迹的影响。细致平衡的 UGKS 方法能够给出孤立引力系统从任意初始状态沿正确的物理轨迹自演化至流体静力学平衡态的完整过程，并精确保持其终态解。这是 CFD 领域首次基于多尺度气体动力学描述提出的细致平衡格式，有望应用于广泛的大气环流和天体物理研究中。随后，我们使用该方法对一些实际流动问题进行了研究。通过线性理论分析和数值模拟，我们发现了一种由外力引起的非平衡热流，并定量研究了这种热流在流动和传热问题中的作用。研究表明，即使在 Navier-Stokes 方程适用的连续介质流域，依然存在由外力项贡献的非平衡热流，而这一点在长久以来的气体动力学研究中是被忽略的。这一研究结果提供了更加普适的本构关系，能够为 Navier-Stokes 和稀薄流动提供更加完整的能量输运理论。

随后，针对当前离散速度方法在高超声速流动中普遍遭遇的计算效率低和内存负载过高的问题，我们新发展了一种速度空间自适应统一气体动理学格式。和原始的 UGKS 方法相比，这里的粒子分布函数在连续-离散速度空间动态分配和切换。由于在近平衡区的分布函数采取连续速度空间描述，新的自适应气体动理学格式大幅降低了多尺度流动问题中数值模拟对于计算资源的消耗，提高了计算效率。基于快速谱方法，完整的 Boltzmann 碰撞项被考虑进现有的自适应算法，使得该算法能够提供从自由分子流到连续介质 Euler 方程和 Navier-Stokes 方程的连续变化谱。同时，基于严格 Chapman-Enskog 渐近展开，我们提出了一个新的速度空间切换准则，并通过数值算例验证了其有效性。

最后，我们将 UGKS 推广至更复杂的混合物系统。耦合了混合物 Boltzmann 方程、松弛模型和描述电磁场演化规律的 Maxwell 方程组，该方法能够描述多组分气体和等离子体动力学。随着特征尺度的连续变化，UGKS 能够无缝衔接描述不同尺度物理规律的控制方程，例如对于中性气体的多组分 Boltzmann 方程到 Euler 方程和 Navier-Stokes 方程，以及等离子体的 Vlasov-Fokker-Planck 方程到双流体方程、Hall 磁流体方程和理

想磁流体方程。不同于眼花缭乱的各类控制方程，UGKS 提供了一个统一、简洁、符合直观物理的建模和计算思路。此外，基于 Fokker-Planck 类碰撞项，电离和复合反应被定量地包含在 UGKS 的框架内，这是等离子体研究领域首次出现能够基于动理学尺度直接描述动态电离等离子体演化的数值方法。

统一气体动理学格式提供了一种针对多尺度输运问题建模和计算的通用框架。在未来的工作中，我们将继续着眼于 UGKS 算法的改进与发展，例如引入粒子化的描述方法，进一步释放算法在高超声速流动、化学反应流等问题中的适用性和灵活性。与此同时，我们期待将 UGKS 应用于湍流、颗粒流等关键性的多尺度物理问题中，深入研究从小尺度到大尺度连续变化的流动物理规律，并将数值结果应用于湍流模型等关键物理问题的理解和建模上。鉴于其在当前全流域数值实验测试中精确和高效的数值表现，我们期待这种新型数值算法在科学的研究和工业生产实际中扮演更加重要的角色。

本文主要创新成果总结如下：

1. 发展了具有细致平衡特性的统一气体动理学格式。这是首个基于离散速度方法针对多尺度气体动力学提出的细致平衡算法。基于线性理论分析和数值模拟，首次对外力场下非平衡流动演化和热量输运过程给出了系统、定量的阐释。
2. 发展了具有连续-离散速度空间动态自适应的气体动理学格式。基于严格的 Chapman-Enskog 渐近展开，提出了具有普适性的速度空间切换准则。新的自适应方法在保持相同精度和多尺度适用性的前提下，大幅降低了原有统一气体动理学格式在多尺度模拟中对计算资源的消耗。
3. 发展了适用于多组分气体和等离子体输运的统一气体动理学格式。除完全电离的等离子体之外，从直接建模方法出发，建立了从动态电离等离子体物理到磁流体力学的多尺度数值模拟框架。这是首次通过直接求解动理学尺度上的演化方程，对部分电离等离子体演化进行定量研究的方法。

参考文献

- [1] Bertin J J, Cummings R M. Critical hypersonic aerothermodynamic phenomena. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 2006, 38:129–157.
- [2] Blazek J. Computational fluid dynamics: principles and applications. Butterworth-Heinemann, 2015.
- [3] PILAND R. Apollo program evolution and background. *Heterogeneous Combustion Conference*, 1963. 1451.
- [4] 沈海军, 程凯, 杨莉. 近空间飞行器. 航空工业出版社, 2012.
- [5] THORNTON E, Dechaumphai P. Finite element prediction of aerothermal-structural interaction of aerodynamically heated panels. *22nd Thermophysics Conference*, 1987. 1610.
- [6] Boyd I D, Deschenes T R. Hybrid particle-continuum numerical methods for aerospace applications. Technical report, Michigan Univ Ann Arbor Dept of Aerospace Engineering, 2011.
- [7] Li Z H, Peng A P, Ma Q, et al. Gas-kinetic unified algorithm for computable modeling of boltzmann equation and application to aerothermodynamics for falling disintegration of uncontrolled tiangong-no. 1 spacecraft. *Advances in Aerodynamics*, 2019, 1(1):4.
- [8] Rodgers S T, Jensen K F. Multiscale modeling of chemical vapor deposition. *Journal of applied physics*, 1998, 83(1):524–530.
- [9] Kleijn C, Dorsman R, Kuijlaars K, et al. Multi-scale modeling of chemical vapor deposition processes for thin film technology. *Journal of Crystal Growth*, 2007, 303(1):362–380.
- [10] Aktas O, Aluru N. A combined continuum/dsmc technique for multiscale analysis of microfluidic filters. *Journal of Computational Physics*, 2002, 178(2):342–372.
- [11] Titov E, Zeifman M, Levin D. Application of the kinetic and continuum techniques to the multi-scale flows in mems devices. *43rd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*, 2005. 1399.
- [12] Woodruff A E. William crookes and the radiometer. *Isis*, 1966, 57(2):188–198.
- [13] Chen H, Kandasamy S, Orszag S, et al. Extended boltzmann kinetic equation for turbulent flows. *Science*, 2003, 301(5633):633–636.
- [14] Tsien H S. Superaerodynamics, mechanics of rarefied gases. *Journal of the Aeronautical Sciences*, 1946, 13(12):653–664.
- [15] 吴望一. 流体力学. 北京: 北京大学出版社, 1983.
- [16] Fourier J. Theorie analytique de la chaleur, par M. Fourier. Chez Firmin Didot, père et fils, 1822.
- [17] John B, Gu X J, Emerson D R. Investigation of heat and mass transfer in a lid-driven cavity under nonequilibrium flow conditions. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 2010, 58(5):287–303.
- [18] Xiao T, Xu K, Cai Q, et al. An investigation of non-equilibrium heat transport in a gas system under external force field. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2018, 126:362–379.
- [19] Onsager L. Reciprocal relations in irreversible processes. i. *Physical review*, 1931, 37(4):405.
- [20] Landau L, Lifshitz E. Course of theoretical physics. vol. 6: Fluid mechanics. London, 1959.

-
- [21] Cercignani C, et al. *Ludwig Boltzmann: the man who trusted atoms*. Oxford University Press, 1998.
 - [22] Hilbert D. *Grundzuge einer allgemeinen Theorie der linearen Integralgleichungen*. 1912.
 - [23] Chapman S, Cowling T G, Burnett D. *The mathematical theory of non-uniform gases: an account of the kinetic theory of viscosity, thermal conduction and diffusion in gases*. Cambridge university press, 1990.
 - [24] Burnett D. The distribution of molecular velocities and the mean motion in a non-uniform gas. *Proceedings of the London Mathematical Society*, 1936, 2(1):382–435.
 - [25] Shavaliyev M S. Super-burnett corrections to the stress tensor and the heat flux in a gas of maxwellian molecules. *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*, 1993, 57(3):573–576.
 - [26] Agarwal R K, Yun K Y, Balakrishnan R. Beyond navier–stokes: Burnett equations for flows in the continuum–transition regime. *Physics of Fluids*, 2001, 13(10):3061–3085.
 - [27] Bobylev A. The chapman-enskog and grad methods for solving the boltzmann equation. *Akademii Nauk SSSR Doklady*, volume 262, 1982. 71–75.
 - [28] Zhong X, MacCormack R W, Chapman D R. Stabilization of the burnett equations and application to hypersonicflows. *AIAA journal*, 1993, 31(6):1036–1043.
 - [29] Chambre P A, Schaaf S A. *Flow of rarefied gases*, volume 4971. Princeton University Press, 2017.
 - [30] Levermore C D. Moment closure hierarchies for kinetic theories. *Journal of statistical Physics*, 1996, 83(5-6):1021–1065.
 - [31] Frank M, Dubroca B, Klar A. Partial moment entropy approximation to radiative heat transfer. *Journal of Computational Physics*, 2006, 218(1):1–18.
 - [32] Sone Y. *Kinetic theory and fluid dynamics*. Springer Science & Business Media, 2012.
 - [33] Eu B C. A modified moment method and irreversible thermodynamics. *The Journal of Chemical Physics*, 1980, 73(6):2958–2969.
 - [34] Myong R. A computational method for eu’s generalized hydrodynamic equations of rarefied and microscale gasdynamics. *Journal of Computational Physics*, 2001, 168(1):47–72.
 - [35] Grad H. Principles of the kinetic theory of gases. *Thermodynamik der Gase/Thermodynamics of Gases*. Springer, 1958: 205–294.
 - [36] Torrilhon M. Modeling nonequilibrium gas flow based on moment equations. *Annual review of fluid mechanics*, 2016, 48:429–458.
 - [37] Cercignani C. *The Boltzmann Equation and Its Applications*. Springer, 1988.
 - [38] Godunov S K. A difference method for numerical calculation of discontinuous solutions of the equations of hydrodynamics. *Matematicheskii Sbornik*, 1959, 89(3):271–306.
 - [39] Roe P L. Approximate riemann solvers, parameter vectors, and difference schemes. *Journal of computational physics*, 1981, 43(2):357–372.
 - [40] Roe P L. Characteristic-based schemes for the euler equations. *Annual review of fluid mechanics*, 1986, 18(1):337–365.
 - [41] Osher S, Sethian J A. Fronts propagating with curvature-dependent speed: algorithms based on hamilton-jacobi formulations. *Journal of computational physics*, 1988, 79(1):12–49.

-
- [42] LeVeque R J. Finite volume methods for hyperbolic problems, volume 31. Cambridge university press, 2002.
 - [43] Steger J L, Warming R. Flux vector splitting of the inviscid gasdynamic equations with application to finite-difference methods. *Journal of computational physics*, 1981, 40(2):263–293.
 - [44] Harten A, Lax P D, Leer B v. On upstream differencing and godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws. *SIAM review*, 1983, 25(1):35–61.
 - [45] Toro E F, Spruce M, Speares W. Restoration of the contact surface in the hll-riemann solver. *Shock waves*, 1994, 4(1):25–34.
 - [46] Chu C. Kinetic-theoretic description of the formation of a shock wave. *The Physics of Fluids*, 1965, 8(1):12–22.
 - [47] Bhatnagar P L, Gross E P, Krook M. A model for collision processes in gases. i. small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. *Physical review*, 1954, 94(3):511.
 - [48] Huang A, Giddens D, Bagnal C. Rarefied gas flow between parallel plates based on the discrete ordinate method. *The physics of fluids*, 1967, 10(3):498–502.
 - [49] Sharipov F, Subbotin E. On optimization of the discrete velocity method used in rarefied gas dynamics. *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik ZAMP*, 1993, 44(3):572–577.
 - [50] Reider M B, Sterling J D. Accuracy of discrete-velocity bgk models for the simulation of the incompressible navier-stokes equations. *Computers & fluids*, 1995, 24(4):459–467.
 - [51] Mieussens L. Discrete-velocity models and numerical schemes for the boltzmann-bgk equation in plane and axisymmetric geometries. *Journal of Computational Physics*, 2000, 162(2):429–466.
 - [52] Kolobov V, Arslanbekov R, Aristov V, et al. Unified solver for rarefied and continuum flows with adaptive mesh and algorithm refinement. *Journal of Computational Physics*, 2007, 223(2):589–608.
 - [53] Li Z H, Zhang H X. Gas-kinetic numerical studies of three-dimensional complex flows on spacecraft re-entry. *Journal of Computational Physics*, 2009, 228(4):1116–1138.
 - [54] Aristov V V. Direct methods for solving the Boltzmann equation and study of nonequilibrium flows, volume 60. Springer Science & Business Media, 2012.
 - [55] Goldstein D, Sturtevant B, Broadwell J. Investigations of the motion of discrete-velocity gases. *Progress in Astronautics and Aeronautics*, 1989, 117:100–117.
 - [56] Tcheremissine F. Direct numerical solution of the boltzmann equation. *AIP Conference Proceedings*, volume 762. AIP, 2005. 677–685.
 - [57] Tcheremissine F. Solution to the boltzmann kinetic equation for high-speed flows. *Computational mathematics and mathematical physics*, 2006, 46(2):315–329.
 - [58] Korobov N. Trigonometric sums and their applications. Nauka, Moscow (in Russian), 1989.
 - [59] 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. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, 1989, 1(2):363–370.
 - [60] Ohwada T. Structure of normal shock waves: Direct numerical analysis of the boltzmann equation for hard-sphere molecules. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, 1993, 5(1):217–234.
 - [61] Bobylev A. The theory of the nonlinear spatially uniform boltzmann equation for maxwell molecules. *Mathematical physics reviews*, 1988, 7:111–233.

- [62] Pareschi L, Russo G. Numerical solution of the boltzmann equation i: Spectrally accurate approximation of the collision operator. *SIAM journal on numerical analysis*, 2000, 37(4):1217–1245.
- [63] Mouhot C, Pareschi L. Fast algorithms for computing the boltzmann collision operator. *Mathematics of computation*, 2006, 75(256):1833–1852.
- [64] Bird G A. Molecular gas dynamics and the direct simulation of gas flows. 1994.
- [65] Wagner W. A convergence proof for bird’s direct simulation monte carlo method for the boltzmann equation. *Journal of Statistical Physics*, 1992, 66(3-4):1011–1044.
- [66] Shen C. Rarefied gas dynamics: fundamentals, simulations and micro flows. Springer Science & Business Media, 2006.
- [67] Pope S B, Pope S B. Turbulent flows. Cambridge university press, 2000.
- [68] Sagaut P. Multiscale and multiresolution approaches in turbulence: LES, DES and hybrid RANS/LES methods: applications and guidelines. World Scientific, 2013.
- [69] Muntz E, Harnett L. Molecular velocity distribution function measurements in a normal shock wave. *The Physics of Fluids*, 1969, 12(10):2027–2035.
- [70] Harnett L N, Muntz E. Experimental investigation of normal shock wave velocity distribution functions in mixtures of argon and helium. *The Physics of Fluids*, 1972, 15(4):565–572.
- [71] Xu K, Huang J C. A unified gas-kinetic scheme for continuum and rarefied flows. *Journal of Computational Physics*, 2010, 229(20):7747–7764.
- [72] Xu K. Direct modeling for computational fluid dynamics: construction and application of unified gas-kinetic schemes. World Scientific, 2015.
- [73] Jin S. Asymptotic preserving (ap) schemes for multiscale kinetic and hyperbolic equations: a review. Lecture notes for summer school on methods and models of kinetic theory (M&MKT), Porto Ercole (Grosseto, Italy), 2010. 177–216.
- [74] LeVeque R J, Bale D S. Wave propagation methods for conservation laws with source terms. *Hyperbolic problems: theory, numerics, applications*. Springer, 1999: 609–618.
- [75] Botta N, Klein R, Langenberg S, et al. Well balanced finite volume methods for nearly hydrostatic flows. *Journal of Computational Physics*, 2004, 196(2):539–565.
- [76] Xing Y, Shu C W. High order well-balanced weno scheme for the gas dynamics equations under gravitational fields. *Journal of Scientific Computing*, 2013, 54(2-3):645–662.
- [77] Gallagher I. From newton to navier–stokes, or how to connect fluid mechanics equations from microscopic to macroscopic scales. *Bulletin of the American Mathematical Society*, 2019, 56(1):65–85.
- [78] Xu K. A well-balanced gas-kinetic scheme for the shallow-water equations with source terms. *Journal of Computational Physics*, 2002, 178:533–562.
- [79] Tian C, Xu K, Chan K, et al. A three-dimensional multidimensional gas-kinetic scheme for the navier–stokes equations under gravitational fields. *Journal of Computational Physics*, 2007, 226(2):2003–2027.
- [80] Maxwell J C. Iv. on the dynamical theory of gases. *Philosophical transactions of the Royal Society of London*, 1867, (157):49–88.
- [81] Holway Jr L H. New statistical models for kinetic theory: methods of construction. *Physics of Fluids (1958-1988)*, 1966, 9(9):1658–1673.

-
- [82] Shakhov E. Generalization of the krook kinetic relaxation equation. *Fluid Dynamics*, 1968, 3(5):95–96.
 - [83] Kogan M N. Rarefied gas dynamics. 1969. Google Scholar. 693.
 - [84] Toro E F. Riemann solvers and numerical methods for fluid dynamics: a practical introduction. Springer Science & Business Media, 2013.
 - [85] Roe P. Multidimensional upwinding. *Handbook of Numerical Analysis*. Elsevier, 2017: 53–80.
 - [86] Luo J, Xu K, Liu N. A well-balanced symplecticity-preserving gas-kinetic scheme for hydrodynamic equations under gravitational field. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2011, 33(5):2356–2381.
 - [87] Lin C C, Segel L A. Mathematics applied to deterministic problems in the natural sciences, volume 1. Siam, 1988.
 - [88] Doi T. Plane poiseuille flow of a rarefied gas in the presence of strong gravitation. *Physical Review E*, 2011, 83(2):026311.
 - [89] Doi T. Plane thermal transpiration of a rarefied gas in the presence of gravitation. *Vacuum*, 2012, 86(10):1541–1546.
 - [90] Tij M, Garzó V, Santos A. On the influence of gravity on the thermal conductivity. arXiv preprint cond-mat/0002397, 2000.
 - [91] Hak M. The fluid mechanics of microdevices—the freeman scholar lecture. *Journal of Fluids Engineering*, 1999, 121(1):5–33.
 - [92] Cercignani C. Rarefied gas dynamics: from basic concepts to actual calculations, volume 21. Cambridge University Press, 2000.
 - [93] Kadanoff L P. Built upon sand: Theoretical ideas inspired by granular flows. *Reviews of Modern Physics*, 1999, 71(1):435.
 - [94] Shankar P, Deshpande M. Fluid mechanics in the driven cavity. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 2000, 32(1):93–136.
 - [95] Schreiber R, Keller H. Driven cavity flows by efficient numerical techniques. *Journal of Computational Physics*, 1983, 49(2):310 – 333.
 - [96] Ghia U, Ghia K N, Shin C. High-re solutions for incompressible flow using the navier-stokes equations and a multigrid method. *Journal of computational physics*, 1982, 48(3):387–411.
 - [97] Vanka S P. Block-implicit multigrid solution of navier-stokes equations in primitive variables. *Journal of Computational Physics*, 1986, 65(1):138–158.
 - [98] Hou S, Zou Q, Chen S, et al. Simulation of cavity flow by the lattice boltzmann method. arXiv preprint comp-gas/9401003, 1994.
 - [99] Naris S, Valougeorgis D. The driven cavity flow over the whole range of the knudsen number. *Physics of Fluids* (1994-present), 2005, 17(9):097106.
 - [100] Mizzi S, Emerson D R, Stefanov S K, et al. Effects of rarefaction on cavity flow in the slip regime. *Journal of computational and theoretical nanoscience*, 2007, 4(4):817–822.
 - [101] John B, Gu X J, Emerson D R. Effects of incomplete surface accommodation on non-equilibrium heat transfer in cavity flow: a parallel dsmc study. *Computers & fluids*, 2011, 45(1):197–201.

- [102] Vincenti W G, Kruger C H. Introduction to physical gas dynamics. *Introduction to physical gas dynamics*, by Vincenti, Walter Guido; Kruger, Charles H. New York, Wiley [1965], 1965, 1.
- [103] Xu K. A gas-kinetic bgk scheme for the navier–stokes equations and its connection with artificial dissipation and godunov method. *Journal of Computational Physics*, 2001, 171(1):289–335.
- [104] Esposito R, Lebowitz J L, Marra R. Hydrodynamic limit of the stationary boltzmann equation in a slab. *Communications in mathematical physics*, 1994, 160(1):49–80.
- [105] Tij M, Santos A. Perturbation analysis of a stationary nonequilibrium flow generated by an external force. *Journal of statistical physics*, 1994, 76(5):1399–1414.
- [106] Mansour M M, Baras F, Garcia A L. On the validity of hydrodynamics in plane poiseuille flows. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 1997, 240(1):255–267.
- [107] Aoki K, Takata S, Nakanishi T. Poiseuille-type flow of a rarefied gas between two parallel plates driven by a uniform external force. *Physical Review E*, 2002, 65(2):026315.
- [108] Xu K. Super-burnett solutions for poiseuille flow. *Physics of Fluids*, 2003, 15(7):2077–2080.
- [109] Uribe F, Garcia A L. Burnett description for plane poiseuille flow. *Physical Review E*, 1999, 60(4):4063.
- [110] Hess S, Mansour M M. Temperature profile of a dilute gas undergoing a plane poiseuille flow. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 1999, 272(3):481–496.
- [111] Sone Y, Aoki K, Sugimoto H. The bénard problem for a rarefied gas: Formation of steady flow patterns and stability of array of rolls. *Physics of Fluids (1994-present)*, 1997, 9(12):3898–3914.
- [112] Stefanov S, Roussinov V, Cercignani C. Rayleigh–bénard flow of a rarefied gas and its attractors. i. convection regime. *Physics of Fluids (1994-present)*, 2002, 14(7):2255–2269.
- [113] Shizgal B. A Gaussian quadrature procedure for use in the solution of the Boltzmann equation and related problems. *Journal of Computational Physics*, 1981, 41(2):309–328.
- [114] Wu L, Reese J M, Zhang Y. Solving the boltzmann equation deterministically by the fast spectral method: application to gas microflows. *Journal of Fluid Mechanics*, 2014, 746:53–84.
- [115] Su W, Lindsay S, Liu H, et al. Comparative study of the discrete velocity and lattice Boltzmann methods for rarefied gas flows through irregular channels. *Physical Review E*, 2017, 96(2):023309.
- [116] Liu C, Xu K, Sun Q, et al. A unified gas-kinetic scheme for continuum and rarefied flows iv: Full boltzmann and model equations. *Journal of Computational Physics*, 2016, 314:305–340.
- [117] 江定武. 基于模型方程解析解的气体动理论算法研究 [D]. 中国空气动力研究与发展中心, 2016.
- [118] Bourgat J F, Le Tallec P, Tidriri M. Coupling boltzmann and navier–stokes equations by friction. *Journal of Computational Physics*, 1996, 127(2):227–245.
- [119] Tiwari S, Klar A. An adaptive domain decomposition procedure for boltzmann and euler equations. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 1998, 90(2):223–237.
- [120] Tiwari S. Coupling of the boltzmann and euler equations with automatic domain decomposition. *Journal of Computational Physics*, 1998, 144(2):710–726.
- [121] Burt J M, Boyd I D. A hybrid particle approach for continuum and rarefied flow simulation. *Journal of Computational Physics*, 2009, 228(2):460–475.

- [122] Wijesinghe H, Hornung R, Garcia A, et al. Three-dimensional hybrid continuum-atomistic simulations for multiscale hydrodynamics. *Transactions of the ASME-I-Journal of Fluids Engineering*, 2004, 126(5):768–777.
- [123] Schwartzenruber T E, Scalabrin L C, Boyd I D. A modular particle–continuum numerical method for hypersonic non-equilibrium gas flows. *Journal of Computational Physics*, 2007, 225(1):1159–1174.
- [124] Dimarco G, Pareschi L. Hybrid multiscale methods ii. kinetic equations. *Multiscale Modeling & Simulation*, 2008, 6(4):1169–1197.
- [125] Degond P, Liu J G, Mieussens L. Macroscopic fluid models with localized kinetic upscaling effects. *Multiscale Modeling & Simulation*, 2006, 5(3):940–979.
- [126] Roveda R, Goldstein D B, Varghese P L. Hybrid euler/particle approach for continuum/rarefied flows. *Journal of Spacecraft and Rockets*, 1998, 35(3):258–265.
- [127] 李诗一. 高效统一气体动理论格式及可压缩湍流小尺度特性研究 [D]. 清华大学, 2018.
- [128] Bobylev A V, Palczewski A, Schneider J. On approximation of the boltzmann equation by discrete velocity models. *Comptes rendus de l'Académie des sciences. Série I, Mathématique*, 1995, 320(5):639–644.
- [129] Pareschi L, Perthame B. A fourier spectral method for homogeneous boltzmann equations. *Transport Theory and Statistical Physics*, 1996, 25(3-5):369–382.
- [130] Carleman T. L’ intégrale de fourier et questions que s’ y rattachent, volume 1 of publications scientifiques de l’ institut mittag-leffler. Almqvist & Wiksell, Uppsala, 1944.
- [131] Wu L, White C, Scanlon T J, et al. Deterministic numerical solutions of the boltzmann equation using the fast spectral method. *Journal of Computational Physics*, 2013, 250:27–52.
- [132] Gamba I M, Haack J R, Hauck C D, et al. A fast spectral method for the boltzmann collision operator with general collision kernels. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2017, 39(4):B658–B674.
- [133] Jaiswal S, Alexeenko A A, Hu J. A discontinuous galerkin fast spectral method for the full boltzmann equation with general collision kernels. *Journal of Computational Physics*, 2019, 378:178–208.
- [134] Filbet F, Jin S. A class of asymptotic-preserving schemes for kinetic equations and related problems with stiff sources. *Journal of Computational Physics*, 2010, 229(20):7625–7648.
- [135] Ohwada T, Xu K. The kinetic scheme for the full-burnett equations. *Journal of computational physics*, 2004, 201(1):315–332.
- [136] Boyd I D, Chen G, Candler G V. Predicting failure of the continuum fluid equations in transitional hypersonic flows. *Physics of Fluids*, 1995, 7(1):210–219.
- [137] Garcia A L, Alder B J. Generation of the chapman–enskog distribution. *Journal of Computational Physics*, 1998, 140(1):66–70.
- [138] Levermore C D, Morokoff W J, Nadiga B. Moment realizability and the validity of the navier–stokes equations for rarefied gas dynamics. *Physics of Fluids*, 1998, 10(12):3214–3226.
- [139] Sun Q. Information preservation methods for modeling micro-scale gas flows. 2003.
- [140] Abgrall R. How to prevent pressure oscillations in multicomponent flow calculations: A quasi conservative approach. *Journal of Computational Physics*, 1996, 125(1):150–160.
- [141] Fedkiw R P, Aslam T, Merriman B, et al. A non-oscillatory eulerian approach to interfaces in multi-material flows (the ghost fluid method). *Journal of Computational Physics*, 1999, 152(2):457–492.

- [142] Saurel R, Abgrall R. A simple method for compressible multifluid flows. *Siam Journal on Scientific Computing*, 1999, 21(3):1115–1145.
- [143] Wang R, Xu K. Unified gas-kinetic scheme for multi-species non-equilibrium flow. *AIP Conference Proceedings*, volume 1628. AIP, 2014. 970–975.
- [144] Liu C, Xu K. A unified gas kinetic scheme for continuum and rarefied flows v: multiscale and multi-component plasma transport. *Communications in Computational Physics*, 2017, 22(5):1175–1223.
- [145] Andries P, Aoki K, Perthame B. A consistent bgk-type model for gas mixtures. *Journal of Statistical Physics*, 2002, 106(5):993–1018.
- [146] Morse T. Energy and momentum exchange between nonequipartition gases. *The Physics of Fluids*, 1963, 6(10):1420–1427.
- [147] Braginskii S. Transport processes in a plasma. *Reviews of plasma physics*, 1965, 1.
- [148] Munz C D, Omnes P, Schneider R, et al. Divergence correction techniques for maxwell solvers based on a hyperbolic model. *Journal of Computational Physics*, 2000, 161(2):484–511.
- [149] Wu L, Zhang J, Reese J M, et al. A fast spectral method for the Boltzmann equation for monatomic gas mixtures. *Journal of Computational Physics*, 2015, 298:602–621.
- [150] Xiao T, Xu K, Cai Q. A unified gas-kinetic scheme for multiscale and multicomponent flow transport. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2019. 1–18.
- [151] Hakim A, Loverich J, Shumlak U. A high resolution wave propagation scheme for ideal two-fluid plasma equations. *Journal of Computational Physics*, 2006, 219(1):418–442.
- [152] Kosuge S, Aoki K, Takata S. Shock-wave structure for a binary gas mixture: finite-difference analysis of the boltzmann equation for hard-sphere molecules. *European Journal of Mechanics-B/Fluids*, 2001, 20(1):87–126.
- [153] Wang R. Unified gas-kinetic scheme for the study of non-equilibrium flows[D]. Hong Kong University of Science and Technology, 2015.
- [154] Bobylev A V, Bisi M, Groppi M, et al. A general consistent bgk model for gas mixtures. *Kinetic & Related Models*, 2018, 11(6).
- [155] Groppi M, Aoki K, Spiga G, et al. Shock structure analysis in chemically reacting gas mixtures by a relaxation-time kinetic model. *Physics of Fluids*, 2008, 20(11):117103.
- [156] Lian Y, Xu K. A gas-kinetic scheme for multimaterial flows and its application in chemical reactions. *Journal of Computational Physics*, 2000, 163(2):349–375.
- [157] Landau L. On the vibration of the electronic plasma. *Journal of Physics*, 1946, 10(1):25 – 34.
- [158] Mouhot C, Villani C. On landau damping. *Acta mathematica*, 2011, 207(1):29–201.
- [159] Malmborg J, Wharton C. Collisionless damping of electrostatic plasma waves. *Physical Review Letters*, 1964, 13(6):184.
- [160] Filbet F, Sonnendrücker E, Bertrand P. Conservative numerical schemes for the vlasov equation. *Journal of Computational Physics*, 2001, 172(1):166–187.
- [161] Crouseilles N, Respaud T, Sonnendrücker E. A forward semi-lagrangian method for the numerical solution of the vlasov equation. *Computer Physics Communications*, 2009, 180(10):1730–1745.

- [162] Sonnendrücker E. Approximation numérique des équations de vlasov-maxwell. Notes du Cours M, 2010, 2.
- [163] Heath R E, Gamba I M, Morrison P J, et al. A discontinuous galerkin method for the vlasov–poisson system. *Journal of Computational Physics*, 2012, 231(4):1140–1174.
- [164] Brio M, Wu C C. An upwind differencing scheme for the equations of ideal magnetohydrodynamics. *Journal of computational physics*, 1988, 75(2):400–422.
- [165] Tang H Z, Xu K. A high-order gas-kinetic method for multidimensional ideal magnetohydrodynamics. *Journal of Computational Physics*, 2000, 165(1):69–88.
- [166] Orszag S A, Tang C M. Small-scale structure of two-dimensional magnetohydrodynamic turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 1979, 90(1):129–143.
- [167] Ji H, Yamada M, Hsu S, et al. Experimental test of the sweet-parker model of magnetic reconnection. *Physical Review Letters*, 1998, 80(15):3256.
- [168] Chen F F. Introduction to plasma physics. Springer Science & Business Media, 2012.
- [169] Voronov G. A practical fit formula for ionization rate coefficients of atoms and ions by electron impact: $Z=1\text{--}28$. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 1997, 65(1):1–35.
- [170] Huddlestone R H, Leonard S L. Plasma diagnostic techniques. *Plasma Diagnostic Techniques*, 1965.

附录 A 电离和复合反应碰撞截面近似

对于第五章中给出的电离和复合反应模型而言，最重要的是对于化学反应质量源项 Γ^{ion} 和 Γ^{rec} 的衡量。可以将其写成微分碰撞截面积分的形式，即

$$\begin{aligned}\Gamma_i^{ion} &= n_n n_e \langle \sigma_{ion} v_e \rangle, \\ \Gamma_i^{rec} &= -n_i n_e \langle \sigma_{rec} v_e \rangle,\end{aligned}\quad (\text{A.1})$$

针对这个问题，Voronov^[169] 测量了元素周期表前 28 个元素 (H-Ni) 的电离速率，并给出了以下的拟合公式，

$$\langle \sigma_{ion} v_e \rangle = A \frac{1 + P \sqrt{\varepsilon_{ion}/T_e}}{X + \varepsilon_{ion}/T_e} \left(\frac{\varepsilon_{ion}}{T_e} \right)^K e^{-\varepsilon_{ion}/T_e}, \quad (\text{A.2})$$

其中 ε_{ion} 是电离能， T_e 是电子温度， A, P, X, K 是需要针对每种元素进行标定的常数参数。这里 T_e 使用的是等离子体中的能量标度，即等同于以 Boltzmann 常数 k 乘以开氏温度，因此上式的单位即为 A 的单位。文献^[169] 给出的 A 单位为 cm^3/s ，得到 SI 单位制需乘以 10^{-6} ，此后可以做相应的无量纲化处理。

对于携带有 Z 个正电荷的离子复合至 $Z-1$ 态，McWhirter^[170] 给出了一个拟合公式，

$$\langle \sigma_{ion} v_e \rangle = B \frac{Z^2}{\sqrt{T_e}}, \quad (\text{A.3})$$

其中 T_e 的单位是电子伏特 eV ，系数 B 的有量纲数值为 $2.6 \times 10^{-19} m^3/s$ 。根据他的阐述，这个公式在电子温度为 1 到 $15eV$ 的范围内是可靠的。

博士期间发表和完成的论文

- [1] **Xiao, T. B.**, Cai, Q. D., & Xu, K., A well-balanced unified gas-kinetic scheme for multiscale flow transport. *Journal of Computational Physics*, 2017. 332: 475-491.
- [2] **Xiao, T. B.**, Xu, K., Cai, Q. D., & Qian, T. Z., An investigation of non-equilibrium heat transport in a gas system under external force field. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2018. 126: 362-379.
- [3] **Xiao, T. B.**, Xu, K., & Cai, Q. D., A unified gas-kinetic scheme for multiscale and multicomponent flow transport. *Applied Mathematics and Mechanics (English Edition)*, 2019. 40(3): 355-372.
- [4] **Xiao, T. B.**, Xu, K., & Cai, Q. D., A velocity-space adaptive unified gas kinetic scheme for continuum and rarefied flows. *Journal of Computational Physics* (in review).

致谢

当我在 2014 年入学时告诉亲友预计 2019 年毕业时，这个时间节点在人生旅途里显得遥远、漫长而安全，仿佛永远不会被触及。而当日历终于翻到 2019 年的时候，时间也像是忽然过去。当年无法预料到这天来临时情景的我，现在转过身也能看见那个觉得事事新奇又一无所知的一年级新生。

感谢蔡庆东老师。在蔡老师的指导和帮助下，我从一个全无基础的初学者走到今天。蔡老师待人真诚和善，对待学生非常关心，从没有拒绝过我的合理请求。在读博期间，蔡老师给予了我十分自由的学习环境，鼓励我广泛地了解和学习不同方向的研究进展，培养自己的研究兴趣，发展自己独立的科研能力。蔡老师对待学术工作十分认真，每周组织课题组进行交流和讨论，耐心指导我们的科研工作，帮助我们解决遇到的问题。此外，蔡老师非常鼓励我们的学术交流。在他的支持下，在博士学习期间我前往英国、澳门和全国各地参加计算流体力学的相关会议，增长了知识，开拓了眼界，也得以认识了学术圈的老师和朋友们。我会永远珍惜在这里和蔡老师一起学习、工作的五年时光。

感谢徐昆老师。在直博的五年期间，徐老师向我提供了三次在香港科技大学数学系进行学术访问的机会，在那里我得以开始对统一气体动理论格式和多尺度输运问题的研究。徐老师学识渊博，对于气体动理论和计算流体力学如数家珍。每当我在学术工作上遇到困惑，和徐老师的聊天总会让我重新燃起精神。在学术研究上，徐老师抓大放小，在研究方向上指导我们前进，但在具体细节上鼓励我们自己进行思考和探索。在香港的学习生活中，我经常看见徐老师夜深时分依然在办公室工作。这种几十年如一日对所从事工作的热爱和坚持，让我很受鼓舞。同时也感谢徐老师的夫人——沈洁师母在我学习期间对我的关心和照顾。

感谢所有评阅人对我的博士论文初稿提出的宝贵意见。感谢任玉新老师、孙泉华老师、许爱国老师、陶建军老师、苏卫东老师、杨越老师和杨延涛老师在百忙中参加我的博士论文答辩。感谢肖左利老师、史一蓬老师和康炜老师对我学习和研究上的帮助。感谢刘畅师兄在学习和发展气体动理论格式上对我的帮助。向他学习和一起讨论的过程让我获益良多。感谢陈松泽师兄在细致平衡算法研究上给予我的指导和帮助。感谢吴雷老师无私地帮助我学习 Boltzmann 方程的快速谱方法，并慷慨地传授计算程序供我学习。感谢盖杰、程吉祥、张磐、刘泽宇、黄文娟和陈洋在北大学习期间对我的帮助。感谢任晓栋、王瑞洁、潘亮、李蔚明、朱亚军、王昭、刘华林、姬兴、曹贵瑜、谢青、陈亿沛、赵丰祥和赵文金在香港科技大学学习期间的帮助。

在找工作的过程中接受了很多热心帮助，熟识的，陌生的，都让我心存感激。

感谢李存标教授和刘锋教授帮助我联系美国的博士后职位。感谢罗礼诗教授和钱铁铮教授向我提供的北京计算科学研究中心，孙文俊研究员和李杰权研究员提供的北京应用物理与计算数学研究所，和张俊教授提供的北京航空航天大学的博士后职位。感谢 Luis Chacon 向我提供的 Los Alamos 国家实验室的面试机会。感谢 Alejandro L. Garcia 帮助我联系 Lawrence Berkeley 国家实验室的工作职位，感谢 Ann Almgren 为我提供的工作信息。感谢 Cory D. Hauck 帮助我联系 Oak Ridge 国家实验室的工作机会，感谢 Pierre-Emmanuel Jabin 建议我申请马里兰大学数学系的博士后职位。感谢 Sharath S. Girimaji 和 Lorenzo Pareschi 对我研究工作的兴趣，并在申请博士后经费事宜上付出的精力。感谢 Benoit Perthame 和 Raphael Loubere 帮助我询问潜在的工作机会。感谢 Luc Mieussens 给我的申请建议，感谢 Michail A. Gallis 和 Francois Bouchut 对我的鼓励。感谢 Manuel Torrilhon 在申请 Humboldt 基金上给予我的帮助。感谢 Yasuaki Yutani 一直以来的热心鼓励和帮助，并向劉紫園博士推荐我联系未来可能的工作机会。最后感谢 Martin Frank 为我提供的博士后职位，我也已经准备好迎接下一段的人生旅程。这些素不相识的慷慨与真诚，让我明白在未来应该怎样对待来自他人的求助，如何更勇敢地面对世界，与之每日相处。

最后谢谢我的家人和女朋友在学习期间对我无私的爱、鼓励和支持。尽管我不是最好的儿子，但我想我拥有全世界最好的父亲，永远是如此。

北京大学学位论文原创性声明和使用授权说明

原创性声明

本人郑重声明：所呈交的学位论文，是本人在导师的指导下，独立进行研究工作所取得的成果。除文中已经注明引用的内容外，本论文不含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的作品或成果。对本文的研究做出重要贡献的个人和集体，均已在文中以明确方式标明。本声明的法律结果由本人承担。

论文作者签名：肖玉娟 日期：2019年5月21日

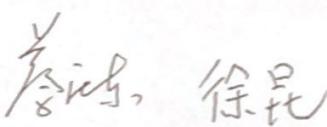
学位论文使用授权说明

(必须装订在提交学校图书馆的印刷本)

本人完全了解北京大学关于收集、保存、使用学位论文的规定，即：

- 按照学校要求提交学位论文的印刷本和电子版本；
- 学校有权保存学位论文的印刷本和电子版，并提供目录检索与阅览服务，在校园网上提供服务；
- 学校可以采用影印、缩印、数字化或其它复制手段保存论文；
- 因某种特殊原因需要延迟发布学位论文电子版，授权学校一年/两年/三年以后，在校园网上全文发布。

(保密论文在解密后遵守此规定)

论文作者签名：肖玉娟 导师签名：

日期：2019年5月21日

