ⓒ 应用数学和力学编委会,ISSN 1000-0887
http://www.applmathmech.cn

一种新型混合气体多松弛动理学模型方程及其验证分析*

彭傲平[1,2]，　吴俊林[1,2]，　李志辉[3]

(1. 中国空气动力研究与发展中心 超高速空气动力研究所, 四川 绵阳 621000;
2. 飞行器流体物理全国重点实验室, 四川 绵阳 621000;
3. 中国空气动力研究与发展中心, 北京流体动力科学研究中心, 北京 100011)

摘要： 为研究跨流域气体混合物输运现象的流动机理,从气体动理学理论的基本方程 Boltzmann 方程出发,发展了一种适于混合气体的多松弛碰撞模型方程,并建立了与 DSMC 方法相适应的碰撞松弛频率表达式.模拟了多组元混合气体一维激波结构问题,与 DSMC 结果的对比表明:发展的模型方程能较好地反映激波内部混合气体整体及各组元的宏观参数变化过程,能用于模拟和分析混合气体各组元的扩散规律,验证了该多松弛模型方程的有效性和正确性.模拟结果表明:分子质量最小的组元扩散效应最显著,但受其他组元的影响较小,且流动的非平衡效应主要由分子质量最大的组元产生;在激波内部因温度梯度引起的热扩散对分子质量大小更加敏感,同时,组元浓度梯度引起的质量扩散使组元分离,在激波下游产生显著的非平衡效应,且在多组元混合气体中,中等质量分子的加入增大了大质量分子的扩散,加大了分离效应.

关　键　词： 混合气体；　输运特性；　气体动理论统一算法；　激波结构

中图分类号： O354　　**文献标志码：** A　　DOI：10.21656/1000-0887.450175

Numerical Evaluation of a Novel Multi-Relaxation Kinetic Model for Gas Mixture Flows

PENG Aoping[1,2]，　WU Junlin[1,2]，　LI Zhihui[3]

(1. *Hypervelocity Aerodynamics Institute*, *China Aerodynamics Research and Development Center*, *Mianyang*, *Sichuan* 621000, *P.R.China*
2. *National Key Laboratory of Aerospace Physics in Fluids*, *Mianyang*, *Sichuan* 621000, *P.R.China*;
3. *Science Research Center for Fluid Dynamics*, *China Aerodynamics Research and Development Center*, *Beijing* 100011, *P.R.China*)

Abstract: To study the flow mechanism of the gas mixture transport phenomenon in all flow regimes, a multi relaxation collision model equation suitable for gas mixture was developed out of the Boltzmann equation as the basic equation in the gas kinetic theory, and the expression of the collision relaxation frequency pertinent to the DSMC method was established. Then under the framework of the gas kinetic unified algorithm, a multi-compo-

* **收稿日期：** 2024-06-14；**修订日期：** 2025-03-04
基金项目： 国家自然科学基金(12332013;11902339)
作者简介： 彭傲平(1984—),男,副研究员,博士,硕士生导师;
吴俊林(1985—),男,副研究员,博士(通讯作者. E-mail：wujunlin130@aliyun.com).
引用格式： 彭傲平, 吴俊林, 李志辉. 一种新型混合气体多松弛动理学模型方程及其验证分析[J]. 应用数学和力学, 2025, **46**(10): 1245-1255.

nent 1D shock wave structure problem with high particle mass and mole fraction ratios was simulated, and compared with the DSMC results. The comparison shows that, the proposed model equation can simulate the macroscopic parameter changes of the gas mixture and its components in the shock wave, and can analyze the diffusion rules of each component of the gas mixture. The validity and correctness of the multi relaxation model equation were verified. The simulation results indicate that, the diffusion effect of the components with the smallest molecular weight is the most significant, but the effect of other components is relatively small, and the flow non-equilibrium effect mainly comes from the component with the largest molecular weight; the thermal diffusion caused by temperature gradients is more sensitive to molecular mass in shock wave, and the mass diffusion caused by component concentration gradients makes components separate, which produces a significant non-equilibrium effect downstream of shock wave. At the same time, the addition of medium-mass molecules in the multi-component mixed gas increases the diffusion of large-mass molecules and magnifies the separation effect.

Key words: gas mixture; transport characteristic; gas kinetic unified algorithm; shock wave structure

0 引 言

自然界中一种物质(如原子、分子、中子、光子等)在其同种或其他介质中所产生的输运现象无处不在.尤其是在工业技术、环境科学、空间科学等领域,输运现象的实际应用更加广泛,例如:核反应堆或核武器中中子的输运,等离子体中离子和电子的输运,辐射传热中光子的输运,气体混合物或气固/气液混合物中不同组元的输运,星际尘埃颗粒的输运等.输运现象的本质是混合物组元间因相互作用产生质量、动量、能量交换,进而出现的浓度、速度和温度梯度问题.但是,由于不同物质粒子物性参数的差别,不同组元间的相互作用比单一组元要复杂得多,尤其是当混合物速度、温度较高时,其内部的输运过程更加复杂,导致对输运机理的认识及准确计算输运系数带来较大困难[1],特别是广泛存在于航空航天领域气体混合物中的输运现象,如高温气体发生化学反应生成的混合物[2]、发动机内部燃料与氧化剂预混燃烧产生的高温燃气混合物[3]等,对这些混合物输运性质准确模拟是研究其机理的有效途径之一,因此气体输运问题数值模拟一直是工程科学研究的重点和难点.

在连续流区,可采用适于混合气体的 Navier-Stokes(N-S)方程来模拟气体流动;在稀薄气体领域,可采用直接模拟气体分子微观运动及碰撞过程的直接模拟 Monte-Carlo(direct simulation Monte-Carlo,DSMC)方法.该方法对气体混合物模拟具有很强的适应性,在工程实际问题中得到广泛的应用.但 N-S 方程在混合气体输运性质的模拟方面,主要采用半经验公式,如计算黏性系数和热传导系数的 Wilke 混合律公式、Gupta-Yos 公式等[4].这些混合法则是对单组元输运系数的加权,属于唯像论模型,难以描述分子间相互作用对输运系数的影响.而通过气体动理学理论得到的输运系数理论值取决于所选用的分子间作用势模型,尤其是对于高温气体,其输运特性的试验测量比较困难,并且试验误差较大,因此唯像论半经验公式仅能在宏观层次给出相应的结果,但无法模拟分析气体混合物的微观输运机理.且随着模拟问题稀薄程度的增加,N-S 方程因连续性假设逐渐失效而不再适用[2].另一方面通常认为 DSMC 方法适用于稀薄流区.介于近连续流区和稀薄流区的过渡流区流动问题属于模拟难点,此时 N-S 方程的线性本构关系已失效,需要引入非线性本构关系,但适用范围仍有限,而 DSMC 方法因需要满足碰撞网格尺寸小于当地分子平均自由程、时间步长小于当地分子平均碰撞时间的计算准则导致计算效率降低.一条可行的途径是将这两种方法进行耦合,发展 N-S/DSMC 耦合算法来模拟过渡流区流动问题,目前耦合算法已得到了较好的应用[5-6].但从本质上看,这类耦合方法是因工程应用需求而建立起来的,需要从数学和物理机理上论证其有效性.另一条途径是从气体动理学理论出发,从数学上研究分析混合气体的输运性质,且能实现全流域的一体化模拟.近年来,国内外学者已经在该方面开展了大量研究工作(代表性工作见文献[7-14]),但由于混合气体动理学理论的复杂性,大部分工作主要采用较为简单的单松弛模型,多松弛模型也仅针对双组元气体,或者仅开展模型构造研究,未确定碰撞松弛速率.

研究表明[14],多松弛模型可以用不同的松弛速率来表征分子间的自碰撞和互碰撞,比单松弛模型的相

同松弛速率更为合理,尤其是当分子特性有显著差异时,如质量、速度等.因此,本文从气体动理学理论的基本方程 Boltzmann 方程出发,发展了一种适于混合气体的多松弛模型方程,并建立了与 DSMC 方法相适应的碰撞松弛频率表达式.在气体动理论统一算法(gas kinetic unified algorithm,GKUA)[15-17]的框架下,通过模拟组元粒子质量比和摩尔分数比均很大的多组元一维激波结构问题,验证了混合气体多松弛模型方程的有效性和正确性,分析了混合气体的输运特性.

1　混合气体 Boltzmann 模型方程

1.1　多组元混合气体 Boltzmann 方程

将 Boltzmann 方程扩展至 N 组元混合气体[1],其中第 i 组元的速度分布函数 $f_i(\boldsymbol{v},\boldsymbol{x},t)$ 满足的方程形式可以写为

$$\frac{\partial f_i}{\partial t}+\boldsymbol{v}\cdot\frac{\partial f_i}{\partial \boldsymbol{x}}=\sum_k Q_{ik}, \tag{1}$$

$$Q_{ik}=\iint[f_i(\boldsymbol{v}')f_k(\boldsymbol{w}')-f_i(\boldsymbol{v})f_k(\boldsymbol{w})]g_{ik}\sigma\mathrm{d}\Omega\mathrm{d}\boldsymbol{w},\qquad i,k=1,2,\cdots,N, \tag{2}$$

其中,f_k 为组元 k 的速度分布函数,Q_{ik} 为组元 i 和 k 的碰撞项,t 为时间,$\boldsymbol{x}$ 为空间位置,$\boldsymbol{v}$ 和 $\boldsymbol{w}$ 分别为组元 i 和 k 碰撞前分子速度,$\boldsymbol{v}'$ 和 $\boldsymbol{w}'$ 分别为碰撞后分子速度,$g_{ik}=|\boldsymbol{v}-\boldsymbol{w}|$ 为碰撞对的相对速度,σ 为碰撞微分截面,Ω 为碰撞参数,同时设速度 $\boldsymbol{v}$ 的分量分别为 v_x,v_y,v_z.

定义

$$\langle f,h\rangle=\int f(\boldsymbol{v})h(\boldsymbol{v})\mathrm{d}\boldsymbol{v}. \tag{3}$$

则第 i 组元的数密度 n_i、速度 $\boldsymbol{u}_i$ 和温度 T_i 可以分别表示为

$$\begin{cases} n_i=\langle f_i,1\rangle,\ n_i\boldsymbol{u}_i=\langle f_i,\boldsymbol{v}\rangle,\ 3n_ik_\mathrm{B}T_i=m_i\langle f_i,|\boldsymbol{v}-\boldsymbol{u}_i|^2\rangle, \\ n_i=\int f_i\mathrm{d}\boldsymbol{v},\ n_i\boldsymbol{u}_i=\int\boldsymbol{v}f_i\mathrm{d}\boldsymbol{v},\ 3n_ik_\mathrm{B}T_i=m_i\int|\boldsymbol{v}-\boldsymbol{u}_i|^2f_i\mathrm{d}\boldsymbol{v},\ \varepsilon_i=\frac{3}{2}k_\mathrm{B}T_i,\ E_i=n_i\varepsilon_i+\frac{1}{2}\rho_i|\boldsymbol{u}_i|^2, \end{cases} \tag{4}$$

其中,k_B 为 Boltzmann 常数,m_i,ε_i,ρ_i 分别为第 i 组元的分子质量、分子内能、密度,E_i 为第 i 组元的总能量,并设速度 $\boldsymbol{u}_i$ 的分量分别为 $u_{i,x},u_{i,y},u_{i,z}$.混合气体的宏观数密度 n、密度 ρ、速度 $\boldsymbol{u}$ 和温度 T 分别为

$$\begin{cases} n=\sum_i n_i,\ \rho=\sum_i m_in_i=\sum_i\rho_i,\ \rho\boldsymbol{u}=\sum_i\rho_i\boldsymbol{u}_i,\ \varepsilon=\frac{3}{2}k_\mathrm{B}T,\ E=n\varepsilon+\frac{1}{2}\rho|\boldsymbol{u}|^2=\sum_i E_i, \\ \frac{3}{2}nk_\mathrm{B}T+\frac{1}{2}\rho|\boldsymbol{u}|^2=\sum_i\left(\frac{3}{2}n_ik_\mathrm{B}T_i+\frac{1}{2}\rho_i|\boldsymbol{u}_i|^2\right), \end{cases} \tag{5}$$

其中,ε,E 为混合气体的内能、总能量,同时设宏观速度 $\boldsymbol{u}$ 的分量分别为 u_x,u_y,u_z.平衡态时,第 i 组元的 Maxwell 分布 $f_{\mathrm{M}i}$ 为

$$f_{\mathrm{M}i}=\frac{n_i}{(2\pi k_\mathrm{B}T_i/m_i)^{3/2}}\exp\left(-\frac{m_i|\boldsymbol{v}-\boldsymbol{u}_i|^2}{2k_\mathrm{B}T_i}\right). \tag{6}$$

对于混合气体,其碰撞项满足整体的质量、动量和能量守恒,即

$$\sum_k\int m_iQ_{ik}\mathrm{d}\boldsymbol{v}=0,\ \sum_{i,k}\int m_i\boldsymbol{v}Q_{ik}\mathrm{d}\boldsymbol{v}=0,\ \sum_{i,k}\int m_i|\boldsymbol{v}|^2Q_{ik}\mathrm{d}\boldsymbol{v}=0, \tag{7}$$

而对于其中某一组元 i,有

$$\int m_iQ_{ik}\mathrm{d}\boldsymbol{v}=0,\ \int m_i\boldsymbol{v}Q_{ii}\mathrm{d}\boldsymbol{v}=0,\ \int m_i|\boldsymbol{v}|^2Q_{ii}\mathrm{d}\boldsymbol{v}=0. \tag{8}$$

1.2　多松弛模型方程及其数值求解方法

一般情况下 Boltzmann 方程的模型化可以写成如下形式:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t}+\boldsymbol{v}\cdot\frac{\partial f_i}{\partial \boldsymbol{x}}=\sum_k S_{ik},\qquad S_{ik}=\nu_{ik}(F_{ik}-f_i), \tag{9}$$

其中,S_{ik} 为碰撞模型,ν_{ik} 为碰撞松弛频率,F_{ik} 为碰撞松弛分布函数,其 BGK 形式可以写为

$$F_{ik}=\frac{n_{ik}}{(2\pi k_{\mathrm{B}}T_{ik}/m_i)^{3/2}}\exp\left(-\frac{m_i\,|\boldsymbol{v}-\boldsymbol{u}_{ik}|^2}{2k_{\mathrm{B}}T_{ik}}\right). \tag{10}$$

文献[18]针对 Maxwell 分子确定了参数 n_{ik},$\boldsymbol{u}_{ik}$,T_{ik},本文将结合气体动理论和 DSMC 方法[19-20]来推导确定这些参数.

模型方程作为 Boltzmann 方程的近似,其碰撞项 S_{ik} 应与 Q_{ik} 具备相同的各阶矩属性,即:

零阶矩

$$\int m_iQ_{ik}\mathrm{d}\boldsymbol{v}=\int m_iS_{ik}\mathrm{d}\boldsymbol{v}=0; \tag{11}$$

一阶矩

$$\int m_i\boldsymbol{v}Q_{ik}\mathrm{d}\boldsymbol{v}=\int m_i\boldsymbol{v}S_{ik}\mathrm{d}\boldsymbol{v}; \tag{12}$$

二阶矩

$$\int m_i\frac{|\boldsymbol{v}|^2}{2}Q_{ik}\mathrm{d}\boldsymbol{v}=\int m_i\frac{|\boldsymbol{v}|^2}{2}S_{ik}\mathrm{d}\boldsymbol{v}. \tag{13}$$

由式(11)可直接得到 $n_{ik}=n_i$.对于 Maxwell 分子,Boltzmann 方程的碰撞项与分子间相对速度无关,其各阶矩可直接积分得到精确表达式.对于非 Maxwell 分子,碰撞积分的一阶矩式(12)和二阶矩式(13)涉及整个速度空间的分布,且与具体的分子间相互作用模型有关.对于逆幂率分子,Kolodner[21]得到了部分阶数的碰撞项积分矩的有限级数展开式.若直接将这些展开式代入守恒式(12)和(13)的左边项,会导致得到的表达式极其复杂,难以实际应用.研究表明,出现在高阶矩二次项中的非对角项的系数相对较小,且仅与极端情形下才需要考虑的热扩散效应有关,因此可将其忽略,仅保留对角项,即与 Maxwell 分子相同的项,但系数仍采用逆幂率分子的值.由此根据式(12)和(13)可得

$$\int m_i\boldsymbol{v}S_{ik}\mathrm{d}\boldsymbol{v}=\boldsymbol{v}_{ik}\rho_i(\boldsymbol{u}_{ik}-\boldsymbol{u}_i)=-A\rho_i\rho_k(\boldsymbol{u}_i-\boldsymbol{u}_k), \tag{14}$$

$$\begin{aligned}\int m_i\frac{|\boldsymbol{v}|^2}{2}S_{ik}\mathrm{d}\boldsymbol{v}&=\rho_i\boldsymbol{v}_{ik}\left[\frac{|\boldsymbol{u}_{ik}|^2-|\boldsymbol{u}_i|^2}{2}+\frac{3k_{\mathrm{B}}}{2m_i}(T_{ik}-T_i)\right]=\\&-A\rho_i\rho_k\left[\boldsymbol{u}_i\cdot(\boldsymbol{u}_i-\boldsymbol{u}_k)+\frac{3k_{\mathrm{B}}(T_i-T_k)}{m_i+m_k}-\frac{m_k}{m_i+m_k}|\boldsymbol{u}_i-\boldsymbol{u}_k|^2\right],\end{aligned} \tag{15}$$

其中 A 是与分子间相互作用模型相关的系数.由式(14)、(15)得

$$\boldsymbol{u}_{ik}=(1-a_{ik})\boldsymbol{u}_i+a_{ik}\boldsymbol{u}_k,\ T_{ik}=(1-b_{ik})T_i+b_{ik}T_k+\gamma_{ik}|\boldsymbol{u}_i-\boldsymbol{u}_k|^2, \tag{16}$$

其中

$$a_{ik}=\frac{An_km_k}{\boldsymbol{v}_{ik}},\ b_{ik}=\frac{2a_{ik}m_i}{m_i+m_k},\ \gamma_{ik}=\frac{m_ia_{ik}}{3k_{\mathrm{B}}}\left(\frac{2m_k}{m_i+m_k}-a_{ik}\right),\qquad i,k=1,2,\cdots,N. \tag{17}$$

可以看出,上述表达式与文献[18]结果的形式一致,其关键在于确定系数 A 和碰撞松弛系数 $\boldsymbol{v}_{ik}$.

对于逆幂率分子,设分子间相互作用力为 χ_{ik}/r^{η},这里 χ_{ik} 和 η 为分子 i 和 k 的作用势参数,r 为两分子间的距离,则

$$A=\frac{8\sqrt{2\pi}}{3}\Gamma\left(\frac{5+\eta'}{2}\right)\alpha_1(\eta')(m_i+m_k)^{-1}\left(\frac{\chi_{ik}}{m_{ik}}\right)^{(1-\eta')/2}\left(\frac{k_{\mathrm{B}}T_i}{m_i}+\frac{k_{\mathrm{B}}T_k}{m_k}\right)^{\eta'/2}, \tag{18}$$

其中,$\eta'=(\eta-5)/(\eta-1)$,$\Gamma(\cdot)$为 Gamma 函数,$\alpha_1(\eta')$ 为碰撞截面积分(具体表达式参见文献[1],其给出了不同 η 值对应的 $\alpha_1(\eta')$ 值),m_{ik} 为分子 i 和 k 的约化质量,即 $m_{ik}=m_im_k/(m_i+m_k)$.当 $\eta=5$ 时,对应 Maxwell 分子,则有

$$A=\frac{8\sqrt{2\pi}}{3}\Gamma\left(\frac{5}{2}\right)\alpha_1(0)(m_i+m_k)^{-1}\left(\frac{\chi_{ik}}{m_{ik}}\right)^{1/2}; \tag{19}$$

当 $\eta=\infty$ 时,对应硬球分子,则有

$$A = \frac{8\sqrt{2\pi}}{3} d_{ik}^2 (m_i + m_k)^{-1} \sqrt{\frac{k_B T_i}{m_i} + \frac{k_B T_k}{m_k}}, \tag{20}$$

其中 d_{ik} 为分子 i 和 k 的平均直径.

Maxwell 分子模型和硬球分子模型属逆幂率模型的特例,可根据气体动理学推导得到各种输运系数的准确表达式,但这两个特例与实际分子相互作用模型相差甚远,在稀薄过渡流领域通常采用 DSMC 方法中的 VHS 模型[20].对于 VHS 模型,有

$$A = \frac{8\sqrt{2\pi}}{3} \Gamma(3.5 - \omega_{ik}) \alpha_1 (2 - 2\omega_{ik}) d_{\mathrm{ref},ik}^2 (m_i + m_k)^{-1} \left(\frac{2k_B T_{\mathrm{ref},ik}}{m_{ik}}\right)^{\omega_{ik}-0.5} \left(\frac{k_B T_i}{m_i} + \frac{k_B T_k}{m_k}\right)^{1-\omega_{ik}}, \tag{21}$$

其中,ω 为气体黏性系数相对于温度的幂指数,ω_{ik} 为分子 i 和 k 的 ω 平均值,下标 ref 为计算黏性系数时的参考值,且

$$\omega = \frac{1}{2}\frac{\eta + 3}{\eta - 1},\ \eta' = 2 - 2\omega,\ d_{\mathrm{ref},ik}^2 = \left(\frac{\chi_{ik}}{2k_B T_{\mathrm{ref}}}\right)^{2/(\eta-1)}, \tag{22}$$

当 ω_i 和 ω_k 均为 1($\eta = 5$) 时,式(21)退化成 Maxwell 分子的表达式,即式(19);当 ω_i 和 ω_k 均为 0.5($\eta = \infty$) 时,式(21)退化成硬球分子的表达式即式(20).

在 Boltzmann 模型方程中,通常假定碰撞松弛频率与分子速度无关,这样可极大程度地简化各类矩的计算,但也导致需要对建立的模型方程进行 Chapman-Enskog 展开[1]分析来确定碰撞松弛频率.对于简单的单组元气体,分析过程较为简单明确.但对于混合气体,因涉及分子间的相互作用,分析过程变得极为复杂,且混合气体的黏性系数和热传导系数分别与速度梯度、温度梯度之间的关系并不像单组元气体那样明晰,因此这里采用 DSMC 方法中平衡混合气体的碰撞松弛频率表达式结合单组元气体相关的结果来确定.

对于单组元气体,根据 Chapman-Enskog 展开分析可得到碰撞松弛频率 $\upsilon_{\mathrm{kinetic}}$ 与压力 p、黏性系数 μ 的关系为

$$\upsilon_{\mathrm{kinetic}} = \frac{p}{\mu}, \tag{23}$$

在 DSMC 方法中,有

$$\upsilon_{\mathrm{DSMC}} = \frac{30}{(7 - 2\omega)(5 - 2\omega)} \frac{p}{\mu}. \tag{24}$$

在混合气体中,当各组元相同时,模型方程及其参数退化成单组元的情形,这里假定对于混合气体,碰撞松弛频率之间的关系与单组元相同.在 DSMC 方法中,混合气体的碰撞松弛频率为

$$\upsilon_{ik,\mathrm{DSMC}} = 2\sqrt{\pi} n_k (d_{\mathrm{ref},ik})^2 (2k_B T_{\mathrm{ref},ik}/m_{ik})^{1/2} (T/T_{\mathrm{ref},ik})^{1-\omega_{ik}}, \tag{25}$$

根据气体动理论中单组元气体碰撞松弛频率(式(23))与 DSMC 结果(式(24))的关系,可得

$$\upsilon_{ik,\mathrm{kinetic}} = \frac{(7 - 2\omega_{ik})(5 - 2\omega_{ik})}{30} 2\sqrt{\pi} n_k (d_{\mathrm{ref},ik})^2 \left(\frac{2k_B T_{\mathrm{ref},ik}}{m_{ik}}\right)^{1/2} \left(\frac{T}{T_{\mathrm{ref},ik}}\right)^{1-\omega_{ik}}. \tag{26}$$

此外,式(16)中的 T_{ik} 需大于 0,则碰撞松弛频率需满足的表达式为

$$\upsilon_{ik,\mathrm{kinetic}} \geqslant \frac{1}{2} A (m_i + m_k) n_k, \tag{27}$$

即需满足

$$C_{ik} = \frac{\upsilon_{ik,\mathrm{kinetic}}}{A(m_i + m_k) n_k} = \frac{(7 - 2\omega_{ik})(5 - 2\omega_{ik})}{40\Gamma(3.5 - \omega_{ik}) \alpha_1 (2 - 2\omega_{ik}) 2^{\omega_{ik}-1/2} \left(\frac{m_{ik}}{T}\left(\frac{T_i}{m_i} + \frac{T_k}{m_k}\right)\right)^{1-\omega_{ik}}} \geqslant \frac{1}{2}. \tag{28}$$

同时,定义混合气体中组元 i 及总的平均自由程 $(\lambda_i)_0$ 和 $\lambda_{\mathrm{mix},0}$ 分别为

$$(\lambda_i)_0 = \left(\sum_{k=1}^{N} (\pi (d_{\mathrm{ref}})_{ik}^2 n_k (T_{\mathrm{ref},ik}/T)^{\omega_{ik}-1} (1 + m_i/m_k)^{1/2})\right)^{-1}, \tag{29}$$

$$\lambda_{\mathrm{mix},0} = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{n_i}{n} (\lambda_i)_0\right). \tag{30}$$

至此,式(9)、(10)、(16)、(17)、(26)构成了本文的混合气体多松弛可计算模型.除多松弛模型外,还有一类模型是以文献[13]为代表的单松弛模型,其表达式可写为

$$\frac{\partial f_i}{\partial t}+\boldsymbol{v}\cdot\frac{\partial f_i}{\partial \boldsymbol{x}}=\upsilon_i(F_m^i-f_i),\qquad \upsilon_i=\sum_{k=1}^{N}\upsilon_{ik},\tag{31}$$

其中 F_m^i 的表达式与式(10)类似,见文献[13].在混合气体中,气体组元因存在浓度、压强、温度梯度而产生相对扩散、热扩散等现象,其微观本质是组元分子间的碰撞松弛,与分子间相互作用力密切相关,因此,在模型方程中考虑组元间碰撞松弛项,可更好地表征混合气体内部各种扩散过程.对比式(9)和(31)可知,本文模型在理论上更具优势.

数值求解控制方程时需要对其进行无量纲化.设数密度、速度、温度、质量、长度、分布函数、时间的无量纲参考量分别为 n_∞, $\sqrt{2k_{\mathrm{B}}T_\infty/m_\infty}$, T_∞, m_∞, L_{ref}, $n_\infty/(\sqrt{2k_{\mathrm{B}}T_\infty/m_\infty})^3$, $L_{\mathrm{ref}}/\sqrt{2k_{\mathrm{B}}T_\infty/m_\infty}$, 则有

$$\frac{\partial \hat f_i}{\partial \hat t}+\hat{\boldsymbol{v}}\cdot\frac{\partial \hat f_i}{\partial \hat{\boldsymbol{x}}}=\sum_k \hat\upsilon_{ik}(\hat F_{ik}-\hat f_i),\ \hat F_{ik}=\frac{\hat n_i}{(\pi\hat T_{ik}/\hat m_i)^{3/2}}\exp\left(-\frac{\hat m_i|\hat{\boldsymbol{v}}-\hat{\boldsymbol{u}}_{ik}|^2}{\hat T_{ik}}\right),\tag{32}$$

其中

$$\hat{\boldsymbol{u}}_{ik}=(1-a_{ik})\hat{\boldsymbol{u}}_i+a_{ik}\hat{\boldsymbol{u}}_k,\ \hat T_{ik}=(1-b_{ik})\hat T_i+b_{ik}\hat T_k+\hat\gamma_{ik}|\hat{\boldsymbol{u}}_i-\hat{\boldsymbol{u}}_k|^2,$$

$$a_{ik}=\frac{\hat A\hat n_k\hat m_k}{\hat\upsilon_{ik,\mathrm{kinetic}}},\ b_{ik}=\frac{2a_{ik}\hat m_{ik}}{\hat m_k},\ \hat\gamma_{ik}=\frac{2\hat m_i a_{ik}}{3}\left(\frac{2\hat m_{ik}}{\hat m_i}-a_{ik}\right),$$

$$\hat\upsilon_{ik,\mathrm{kinetic}}=\frac{(7-2\omega_{ik})(5-2\omega_{ik})}{30}2\sqrt{\pi}\hat n_k\left(\frac{\hat T_{\mathrm{ref},ik}}{\hat m_{ik}}\right)^{1/2}\left(\frac{\hat T}{\hat T_{\mathrm{ref},ik}}\right)^{1-\omega_{ik}}n_\infty(d_{\mathrm{ref},ik})^2L_{\mathrm{ref}},$$

$$\hat n_i=\int\hat f_i\mathrm{d}\hat{\boldsymbol{v}},\ \hat n_i\hat{\boldsymbol{u}}_i=\int\hat{\boldsymbol{v}}\hat f_i\mathrm{d}\hat{\boldsymbol{v}},\ 3\hat n_i\hat T_i=2\hat m_i\int|\hat{\boldsymbol{v}}-\hat{\boldsymbol{u}}_i|^2\hat f_i\mathrm{d}\hat{\boldsymbol{v}},$$

$$\frac{3}{2}\hat n\hat T+\hat\rho|\hat{\boldsymbol{u}}|^2=\sum_i\left(\frac{3}{2}\hat n_i\hat T_i+\hat\rho_i|\hat{\boldsymbol{u}}_i|^2\right),\ \frac{3}{2}\hat n\hat T=\sum_i\left(\frac{3}{2}\hat n_i\hat T_i+\hat\rho_i|\hat{\boldsymbol{u}}_i-\hat{\boldsymbol{u}}|^2\right),$$

顶标“^”表示该量的无量纲量.为简便起见,在下述中将省略无量纲顶标.

为求解模型方程,首先将其进行约化.对于一维流动问题,因为 y,z 方向的宏观流动量对流动的模拟没有任何影响,因此可以通过约化的方法消除分子速度分布函数对 y,z 方向分子速度的依赖.引入两个约化速度分布函数 $f_{1,i}$, $f_{2,i}$, 并设

$$f_{1,i}=\iint_{-\infty}^{+\infty}f_i\mathrm{d}v_y\mathrm{d}v_z,\ f_{2,i}=\iint_{-\infty}^{+\infty}(v_y^2+v_z^2)f_i\mathrm{d}v_y\mathrm{d}v_z,\tag{33}$$

则组元 i 的数密度 n_i、速度 $u_{i,x}$ 和温度 T_i 可以分别表示为

$$n_i=\int_{-\infty}^{+\infty}f_{1,i}\mathrm{d}v_x,\ n_iu_{i,x}=\int_{-\infty}^{+\infty}v_xf_{1,i}\mathrm{d}v_x,\ 3n_iT_i=2m_i\int_{-\infty}^{+\infty}[(v_x-u_{i,x})^2f_{1,i}+f_{2,i}]\mathrm{d}v_x,\tag{34}$$

其他参量可类似得到,且

$$F_{1,ik}=\frac{n_i}{\sqrt{\pi T_{ik}/m_i}}\exp\left(-\frac{|v_x-u_{ik,x}|^2}{T_{ik}/m_i}\right),\ F_{2,ik}=F_{1,ik}\cdot T_{ik}/m_i.\tag{35}$$

无量纲后的方程求解方法可参见文献[22],这里不再赘述.

2 混合气体多松弛模型方程的验证与分析

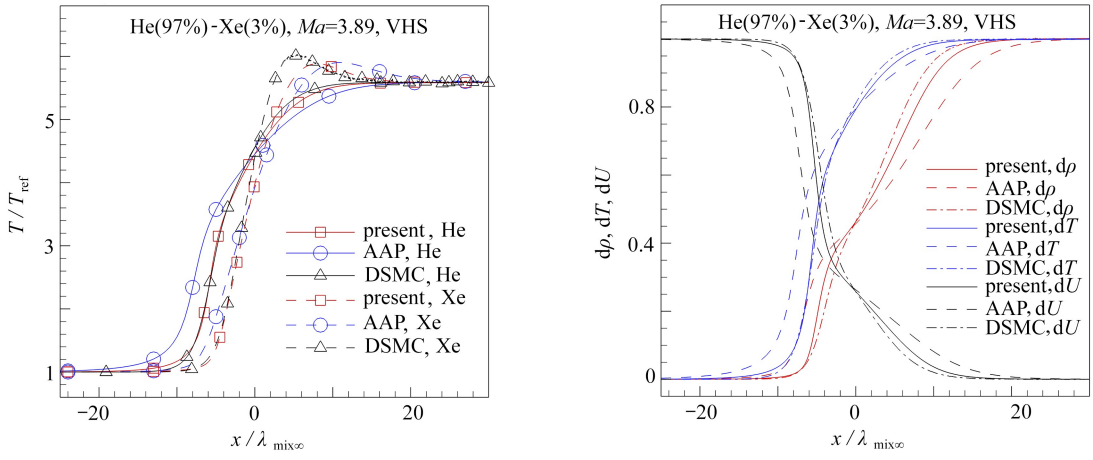
为验证本文模型方程的正确性,拟定如下三个一维混合气体激波结构算例:算例 1,He(97%)-Xe(3%),来流分子数密度 1.0×10^{22} m^{-3}、温度 310 K,速度 2 882.59 m/s,激波 Mach 数 3.89;算例 2,He(91%)-Xe(9%),来流分子数密度 1.0×10^{22} m^{-3}、温度 310 K,速度 2 530.24 m/s,激波 Mach 数 4.8;算例 3,He(91%)-Xe(3%)-Ar(6%),来流分子数密度 1.0×10^{22} m^{-3}、温度 310 K,速度 3 149.435 m/s,激波 Mach 数 4.8.分子模型均为 VHS 模型,其中百分数为摩尔分数.激波上下游的关系可通过 Rankine-Hugoniot 关系得到.

式(30)计算得到的对应的上游混合气体平均分子自由程为无量纲参考长度;根据摩尔分数加权的分子质量为参考质量;上游温度为参考温度;上游的最可几热运动速度为参考速度;$T_{\mathrm{ref},ik}$ 取 273.15 K,$(d_{\mathrm{ref}})_{ik}$ 取 DSMC 中 VHS 模型对应的分子参考直径的算术平均.由于 DSMC 方法直接模拟分子间的碰撞过程,通过统计平均得到气体的宏观参数,从唯象论的角度来看更符合分子相互作用的实际情形,在稀薄过渡流领域得到了广泛的应用和验证,因此,本文中将其结果作为标准解来考核模型方程的可行性和可靠性.

上述算例中各组元气体分子质量和摩尔分数差别都较大,能较好地验证模型方程在极端情形下的正确性.定义如下无量纲量表征激波轮廓:

$$\mathrm{d}\rho = \frac{\rho - \rho_{\mathrm{upstream}}}{\rho_{\mathrm{downstream}} - \rho_{\mathrm{upstream}}},\ \mathrm{d}T = \frac{T - T_{\mathrm{upstream}}}{T_{\mathrm{downstream}} - T_{\mathrm{upstream}}},\ \mathrm{d}U = \frac{u - u_{\mathrm{upstream}}}{u_{\mathrm{downstream}} - u_{\mathrm{upstream}}}.$$

图 1 给出了针对算例 1 采用本文模型(图中 present)、常用的 AAP 模型[13](图中 AAP)及 DSMC 方法(图中 DSMC)所得结果的对比.从图中可以看出,在激波内部大部分区域,无论是组元温度分布还是混合气体整体参数分布,本文模型都更接近 DSMC 模拟结果,从数值上验证了理论分析结论,即模型方程中考虑各组元间的碰撞松弛过程能更好地模拟混合气体中的扩散现象.



(a) 组元温度激波轮廓线对比

(a) Comparison of shock profiles of temperatures

(b) 混合气体密度、温度、速度激波轮廓线对比

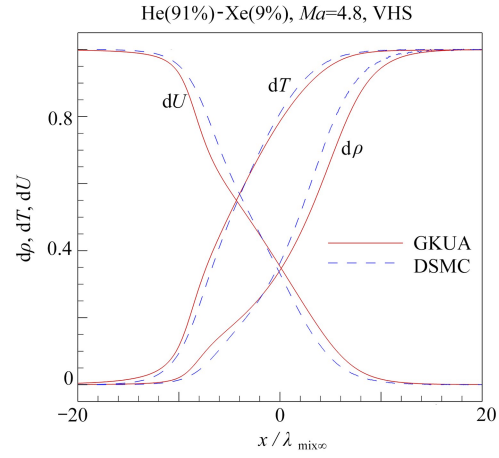
(b) Comparison of shock profiles of density, temperature and velocity

图 1　不同模型结果的对比

Fig. 1　Comparison of results from different models

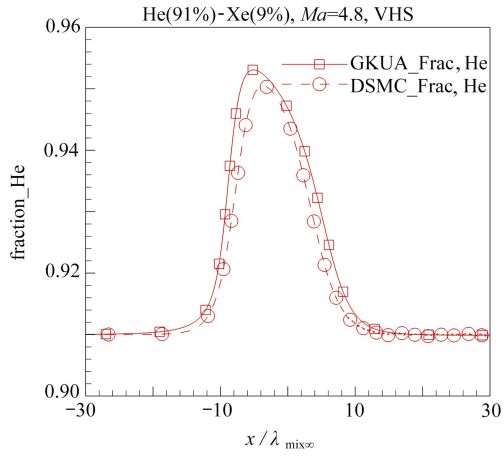
注　为了解释图中的颜色,读者可以参考本文的电子网页版本,后同.

图 2 给出了算例 2 的本文计算结果(图中 GKUA)与 DSMC 方法结果(图中 DSMC)的对比.图 2(a)是混合气体的密度、温度、速度的轮廓线比较.从图中可以看出两者变化趋势一致,符合较好,但 DSMC 结果更陡,主要原因是动理学模型方程方法是通过碰撞松弛频率和松弛模型来模拟分子碰撞的松弛过程,没有考虑碰撞松弛频率随分子速度的变化等情形[1],且本文所用的松弛模型类似于 BGK 模型,而 BGK 模型对单组元气体而言存在固有的缺陷,即 Prandtl 数为 1,与实际不符,推广到混合气体时仍会存在某些缺陷.图 2(b)和 2(c)是混合气体中 He 摩尔分数及组元扩散速度(组元速度与混合气体整体速度之差)的变化曲线对比.从图中可以看出两种趋势一致,He 摩尔分数的极大值分别为 0.953 07(本文,约位于 x 轴-5 处)和 0.950 5(DSMC,约位于 x 轴-3.717 3 处),$x=-5$ 处的误差为 0.424%,扩散速度在极值处的误差较大,变化规律与前述一致.但本文计算结果始终大于 DSMC 结果,说明本文模型方程模拟的扩散过程略高于 DSMC 方法.图 2(d)是各组元温度变化的对比.从图中可以看出,对分子质量小的气体,温度符合很好,且很好地模拟了激波内部分子质量大的气体的非平衡特性,即激波结构轮廓上的凸起部分,但与 DSMC 相比相对位置存在较大误差.图 3 给出了双组元中式(28)的变化趋势,显然本文设计的碰撞松弛频率满足数学上的正定性要求.



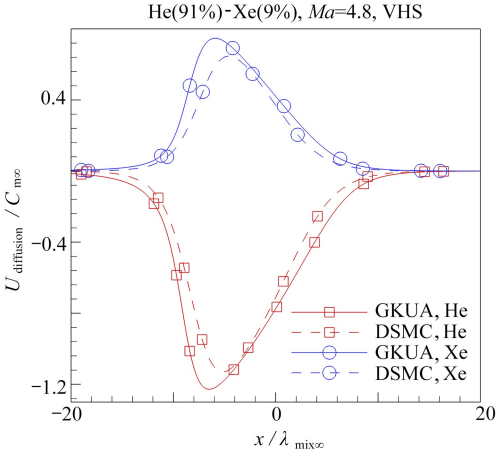
(a) 密度、温度、速度激波轮廓线对比

(a) Comparison of shock profiles of density, temperature and velocity



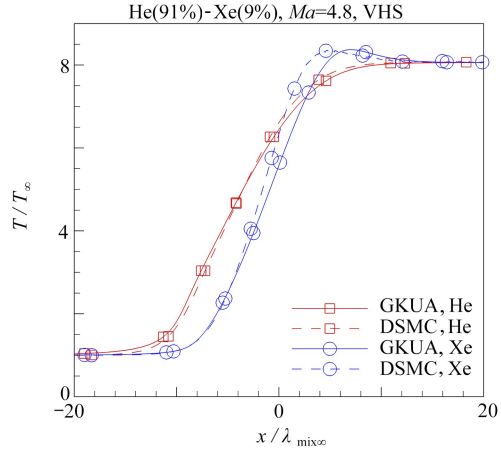
(b) He 摩尔分数分布对比

(b) Comparison of Mole fraction distributions of He



(c) 各组元扩散速度对比

(c) Comparison of diffusion velocities of each component



(d) 各组元温度分布对比

(d) Comparison of temperature distributions of each component

图 2 He-Xe 模拟结果对比

Fig. 2 Comparison of He-Xe simulation results

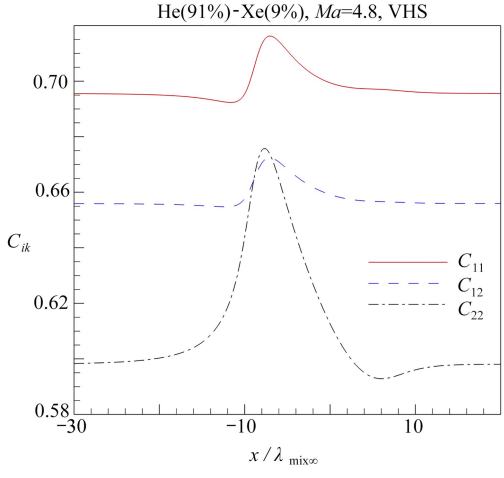


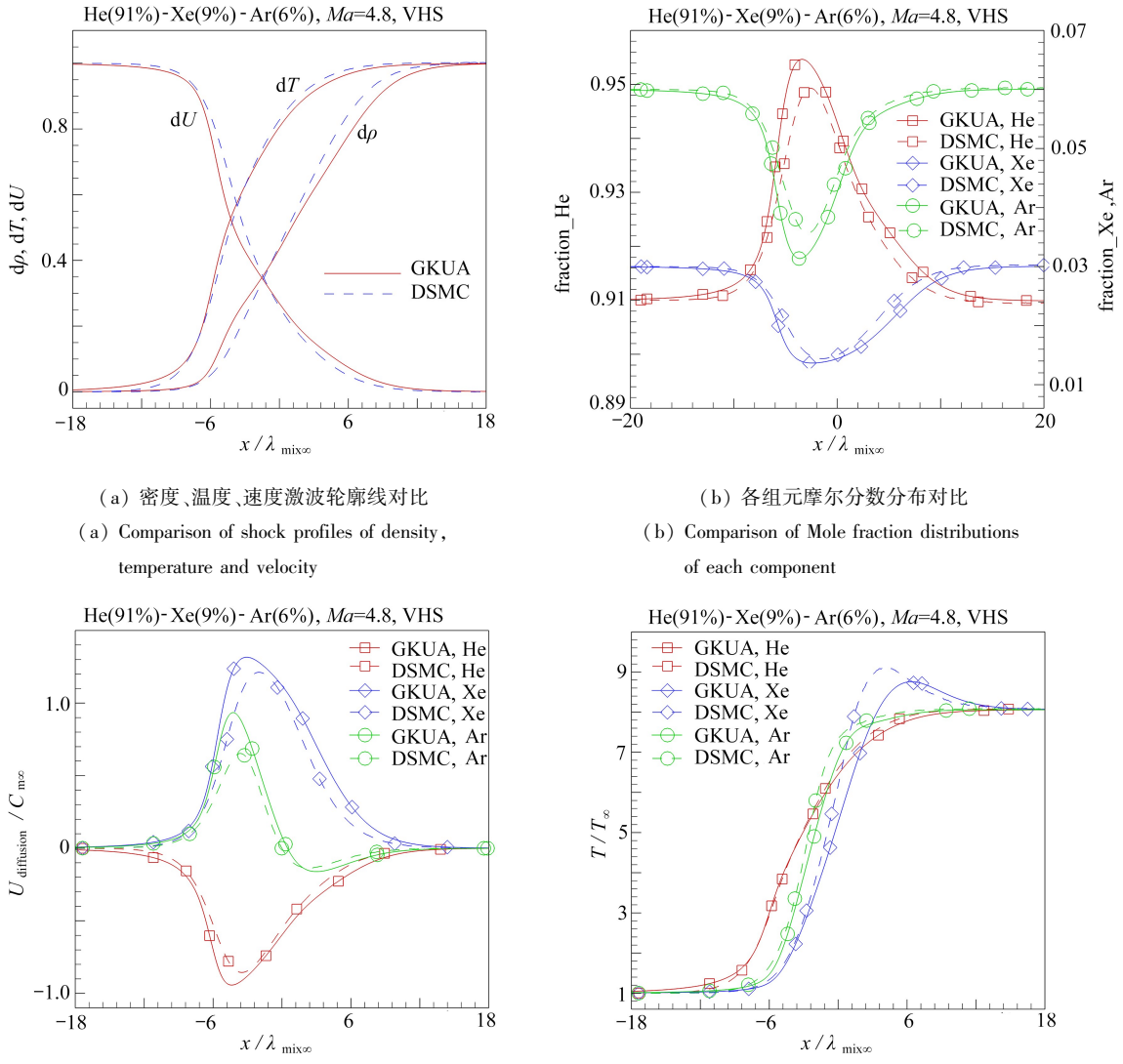
图 3 He-Xe 混合气体 C_{ik} 变化曲线

Fig. 3 C_{ik} curves for He-Xe

从该算例的模拟结果对比来看,本文建立的类 BGK 型多松弛模型方程继承了单组元 BGK 模型的缺陷,

即在合理选择碰撞松弛频率的情况下无法使黏性系数和热传导系数同时取正确数值,难以解决动量和能量交换同等重要的问题.但与 DSMC 结果的对比来看,本文计算结果较好地反映了混合气体整体的宏观参数变化规律,在不涉及输运系数的情况下能模拟各组元的输运特性,且具备全流域一体化模拟的特点,仍可用于混合气体输运特性机理模拟与研究分析.

图 4 给出了采用本文模型方程模拟的三组元 He-Xe-Ar 混合气体激波结构与 DSMC 结果的对比,从图中可以看出,本文结果仍然与 DSMC 结果变化趋势一致、整体符合较好.



(a) 密度、温度、速度激波轮廓线对比

(a) Comparison of shock profiles of density, temperature and velocity

(b) 各组元摩尔分数分布对比

(b) Comparison of Mole fraction distributions of each component

(c) 各组元扩散速度对比

(c) Comparison of diffusion velocities of each component

(d) 各组元温度分布对比

(d) Comparison of temperature distributions of each component

图 4　He-Xe-Ar 模拟结果对比

Fig. 4　Comparison of He-Xe-Ar simulation results

图 4(a)为混合气体的密度、温度、速度轮廓线对比图.对比双组元的情形图 2(a),加入中等分子质量的 Ar 后,降低了大分子质量比对碰撞松弛的影响,使得计算结果更接近 DSMC 结果.图 4(b)和 4(c)是混合气体中各组元摩尔分数及组元扩散速度的变化曲线对比.从图中可以看出,扩散程度与分子质量反相关,分子质量越小,扩散越显著.对比双组元的情形(图 2(b)和 2(c)),从 He 摩尔分数的极大值位置和大小来看,位置从 $x=-5$ 处变化到 $x=-3.4$ 处,极大值从 0.953 07 变为 0.954 65,这是由于 Xe 与其他组元碰撞后的平均速度残留比接近 1,而速度残留比越大碰撞后的速度变化越小,当部分大质量的 Xe 被小质量的 Ar 取代后,减小了平均速度残留比,导致混合气体激波整体右移.对扩散速度而言,由于 Ar-He 之间的碰撞对 He 扩散的

影响小于 Xe-He 之间的碰撞,导致 He 的扩散速度减小,Xe 的扩散相反.图 4(d)给出了各组元的温度轮廓线.引入 Ar 后增强了 Xe 的非平衡特性,即激波下游的凸起更显著,图 1(a)、图 2(d)中在激波下游大质量分子气体 Xe 的温度同样出现约 10%凸起的现象,与理论分析相符[20],因为在激波内部因温度梯度引起的热扩散对气体分子质量大小更加敏感[20],同时组元浓度梯度引起的质量扩散使组元分离,产生非平衡效应.图 2(c)、图 4(c)的扩散速度即是这种分离效应的直观反映,进而导致浓度发生变化(图 2(b)、图 4(b)).相比于二组元混合气体,在其中加入中等质量分子(Ar)后,增加了大质量分子气体 Xe 的扩散,在激波中心位置扩散速度更大、激波下游温度凸起更大,产生更显著的非平衡效应.

图 5 给出了三组元中式(28)的变化趋势, C_{ik} 均大于 0.5,表明对于三组元混合气体本文构造的碰撞松弛频率同样满足正定性.

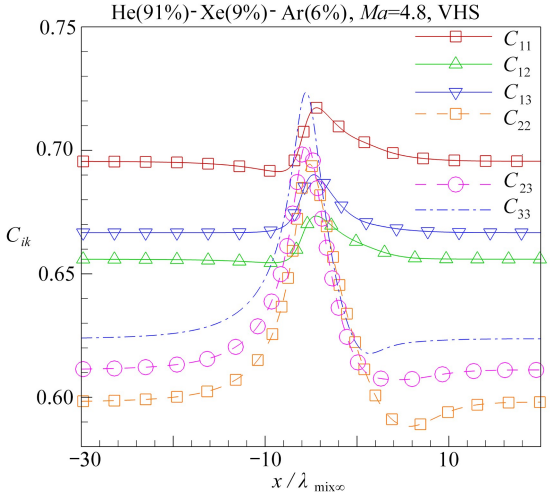


图 5 He-Xe-Ar 混合气体 C_{ik} 变化曲线

Fig. 5 C_{ik} curves for He-Xe-Ar

3 结 论

本文从混合气体的 Boltzmann 方程出发,将碰撞项模型化,根据混合气体的质量、动量和能量守恒关系发展了一种新的多松弛模型方程,并根据逆幂律分子作用模型,确定了与 DSMC 方法中 VHS 模型相适应的碰撞松弛频率表达式.将该模型引入到前期建立的气体动理论统一算法体系,模拟了组元粒子质量比和摩尔分数比均很大的多组元一维激波结构问题,并与 DSMC 结果进行了对比分析.结果表明,本文发展的模型方程能较好地反映激波内部混合气体整体及各组元的宏观参数变化过程,能用于模拟和分析混合气体各组元的扩散规律,验证了该多松弛模型方程的有效性和正确性.

从本文计算结果来看,分子质量最小的组元的扩散效应最显著,但受其他组元的影响较小,主要是由于其与其他组元碰撞后的平均速度残留比很小,碰撞后速度变化较大,碰撞松弛频率最快,能很快达到平衡;而流动的非平衡效应主要由分子质量最大的组元产生,这是由于分子质量越大碰撞松弛频率越小,达到平衡所需时间越长,其与其他组元的碰撞始终影响平衡过程.而在多组元混合气体中,因温度梯度引起的热扩散对气体分子质量大小更加敏感,导致中等质量分子的加入增大了大质量分子气体的扩散.此外,本文所发展的多松弛模型保留了 BGK 类模型的缺陷,下一步将发展多松弛多项式模型方程,以更准确地模拟分析跨流域混合气体扩散机理.

参考文献(References):

[1] 查普曼 S, 考林 T G. 非均匀气体的数学理论[M]. 刘大有, 王伯懿, 译. 北京: 科学出版社, 1985. (CHAPMAN S, COWLING T G. *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*[M]. LIU Dayou, WANG Boyi, transl. Beijing: Science Press, 1985. (Chinese version))

[2] BOYD I D, SCHWARTZENTRUBER T E. *Nonequilibrium Gas Dynamics and Molecular Simulation*[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2017.

[3] 秦文瑾, 韩天祥, 张振东, 等. 喷雾碰壁燃烧数值模拟研究[J]. 应用数学和力学, 2023, **44**(9): 1087-1096. (QIN Wenjin, HAN Tianxiang, ZHANG Zhendong, et al. Numerical simulation study of spray wall impingement combustion[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2023, **44**(9): 1087-1096. (in Chinese))

[4] 卞荫贵, 徐立功. 气动热力学[M]. 2 版. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 2010. (BIAN Yingui, XU Ligong. *Aerothermodynamics*[M]. 2nd ed. Hefei: University of Science and Technology of China Press, 2010. (in Chinese))

[5] HASH D, HASSAN H. A decoupled DSMC/Navier-Stokes analysis of a transitional flow experiment[C]//*34th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*. Reno, NV, USA: AIAA, 1996: AIAA1996-353.

[6] 李中华, 党雷宁, 李志辉, 等. 天宫飞行器过渡流区高超声速绕流 N-S/DSMC 耦合计算[J]. 载人航天, 2020, **26**(5): 543-549. (LI Zhonghua, DANG Leining, LI Zhihui, et al. N-S/DSMC hybrid numerical simulation for hypersonic transitional flow around disintegrated objects of Tiangong vehicle[J]. *Manned Spaceflight*, 2020, **26**(5): 543-549. (in Chinese))

[7] BAILO R, REY T. Projective and telescopic projective integration for non-linear kinetic mixtures[J]. *Journal of Computational Physics*, 2022, **458**: 111082.

[8] LIU C, XU K. Unified gas-kinetic wave-particle methods Ⅳ: multi-species gas mixture and plasma transport [J]. *Advances in Aerodynamics*, 2021, **3**(1): 9.

[9] BRULL S. An ellipsoidal statistical model for a monoatomic and a polyatomic gas mixture[J]. *Communications in Mathematical Sciences*, 2021, **19**(8): 2177-2194.

[10] BRULL S. An ellipsoidal statistical model for gas mixtures[J]. *Communications in Mathematical Sciences*, 2015, **13**(1): 1-13.

[11] LIU S, LIANG Y. Asymptotic-preserving Boltzmann model equations for binary gas mixture[J]. *Physical Review E*, 2016, **93**(2): 023102.

[12] BARANGER C, DAUVOIS Y, MAROIS G, et al. A BGK model for high temperature rarefied gas flows[J]. *European Journal of Mechanics B: Fluids*, 2020, **80**: 1-12.

[13] ANDRIES P, AOKI K, PERTHAME B. A consistent BGK-type model for gas mixtures[J]. *Journal of Statistical Physics*, 2002, **106**(5): 993-1018.

[14] TODOROVA B N, WHITE C, STEIJL R. Numerical evaluation of novel kinetic models for binary gas mixture flows[J]. *Physics of Fluids*, 2020, **32**: 016102.

[15] LI Z H, ZHANG H X. Study on gas kinetic unified algorithm for flows from rarefied transition to continuum [J]. *Journal of Computational Physics*, 2004, **193**(2): 708-738.

[16] PENGA P, LI Z H, WU J L, et al. Implicit gas-kinetic unified algorithm based on multi-block docking grid for multi-body reentry flows covering all flow regimes[J]. *Journal of Computational Physics*, 2016, **327**: 919-942.

[17] 吴俊林, 李志辉, 彭傲平, 等. Boltzmann-Rykov 模型的有限体积方法计算[J]. 应用数学和力学, 2014, **35**(2): 121-129. (WU Junlin, LI Zhihui, PENG Aoping, et al. Calculation of Boltzmann-Rykov model equation by finite volume method[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2014, **35**(2): 121-129. (in Chinese))

[18] BOBYLEV A V, BISI M, GROPPI M, et al. A general consistent BGK model for gas mixtures[J]. *Kinetic &Related Models*, 2018, **11**(6): 1377-1393.

[19] 沈青. 稀薄气体动力学[M]. 北京: 国防工业出版社, 2003. (SHEN Qing. *Rarefied Gas Dynamics*[M]. Beijing: National Defense Industry Press, 2003. (in Chinese))

[20] BIRD G A. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*[M]. Oxford: Oxford University Press, 1994.

[21] KOLODNER I. Moment description of gas mixture-Ⅰ: 7980[R]. New York University Report, 1957.

[22] 彭傲平. 大型航天器跨流域非平衡玻尔兹曼模型方程统一算法应用研究[D]. 绵阳: 中国空气动力研究与发展中心, 2017. (PENG Aoping. Application and study of gas-kinetic unified algorithm based on non-equilibrium Boltzmann model equation for large-scale spacecraft covering all flow regimes[D]. Miangyang: China Aerodynamics Research and Development Center, 2017 (in Chinese))