

基于气体运动论的差分算法对管道 流动数值研究*

李志辉^{1,2}, 毕林¹, 唐志共¹

(1. 中国空气动力研究与发展中心 超高速研究所, 四川 绵阳 621000;
2. 国家计算流体力学实验室, 北京 100191)

(周哲玮推荐)

摘要: 从分析研究求解 Boltzmann 模型方程的气体运动论数值计算方法特点出发, 设计了几种求解离散速度分布函数不同精度的差分显式与隐式气体运动论数值格式. 通过对不同 Knudsen 数下一维非常激波管内流动、二维槽道流问题计算研究与应用测试, 分析了不同差分格式数值离散效应对计算结果的影响, 研究讨论了提高气体运动论数值算法计算效率的途径和差分离散处理所适用的计算准则等问题.

关键词: Boltzmann 模型方程; 气体运动论数值计算; 离散速度坐标法; 激波管问题; 槽道流问题

中图分类号: V211.3; O241.82; O356 文献标识码: A

DOI: 10.3879/j.issn.1000-0887.2009.07.008

引言

一维激波管、二维槽道流问题作为常用而典型的气体内流动算例, 往往被流体力学工作者用于对数值试验的可靠性与准确性论证, 从而判断和检验方法和离散格式的优劣^[1-6], 使其成为众多学者^[1-11]开展数值方法研究共同感兴趣的问题. 非定常激波管问题可描述为置于 $x = 0.5$ 的隔膜使一维流场一分为二, 如下图所示, $t = 0$ 时每个区域均处于常数平衡态:

对于该激波管问题, Sod 在文献[1]中进行了数值求解, 并由 Chu^[2]和 Reitz^[3]从运动论角度进行了研究, 该问题也由 Prendergast^[9]、Yang^[10]等通过使用基于气体分子运动论而建立起来的流体动力学数值格式而被模拟. 稀薄气体平面 Couette 热对流与压力驱

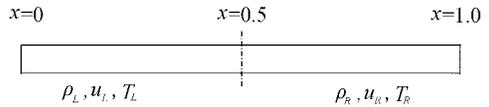


图 1 激波管内流动示意图

* 收稿日期: 2008-10-17; 修订日期: 2009-05-27

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10621062); 总装备部预研基金资助项目(9140A13050207KC29)

作者简介: 李志辉(1968—), 男, 四川眉山人, 研究员, 博士(联系人, Tel: + 86-10-82330957; E-mail: zh-li0097@x263.net);

毕林(1981—), 男, 江西瑞金人, 硕士;

唐志共(1965—), 男, 江苏南通人, 研究员, 博士.

动的 Poiseuille 等槽道流因涵盖了流体力学许多重要而基本的流动属性, 虽说目前还没有人利用标准 Boltzmann 方程对其进行精确分析, 但已有许多学者对该问题进行过理论与试验研究^[5-8, 11-15]. 如基于格子气自动机思想, 遵循各向同性原则, 沿仅有的几个离散速度方向, 对分子运动论 BGK(Bhatnagar-Gross-Krook) 模型方程进行形式积分得到宏观流动参数, 提出离散格子 Boltzmann 方法^[12-13](LBM), 用来模拟处于 Maxwell 或近 Maxwell 平衡态的连续流区或近连续流区低速管道内流问题. 也有学者基于硬球分子模型假设, 通过对 Boltzmann-BGK 方程碰撞算子进行进一步线性化处理, 开展起适合求解气体速度远低于声速的低速流动问题线性化 Boltzmann 方程数值研究^[14]等. 还有学者直接从 BGK 模型方程出发, 在网格界面基于通量守恒, 利用气体分子速度分布函数对于 Maxwell 分布的 Chapman-Enskog 二阶展开构造可模拟宏观流体力学 Burnett 方程的气体动力学 BGK-Burnett 格式, 用于模拟连续流或近连续滑移流区均匀槽道流问题^[15]. 对这类问题在不同 Knudsen 数低速条件下的求解不仅是检验新算法的基准问题, 而且是人们研究揭示不同流区各类管道内流动稀薄气体效应与流动现象具有代表性的问题.

文献[16-19]从研究描述各流域气体流动特征的 Boltzmann 模型方程数值计算方法出发, 提出求解稀薄流到连续流跨流域一维、二维、三维简单外形体绕流问题气体运动论统一算法, 该方法运用计算流体力学有限差分方法与气体运动论离散速度坐标法相结合, 使用非定常时间分裂显式推进方法, 将速度分布函数控制方程分裂为位置空间对流运动方程和碰撞松弛源项方程, 使用二阶精度的 NND 耗散差分格式^[20]和 Runge-Kutta 方法, 发展离散求解 Boltzmann 模型方程的气体运动论耦合迭代数值格式. 研究体会到, 该方法由于受显式差分稳定条件所限, 用于对连续介质流动问题迭代求解收敛过程较缓慢, 需要占用大量计算时间. 为了能精确剖析连续流区、近连续流区复杂流动现象、机理, 能否改进与发展高精度、高效率的气体分子运动论差分算法? 本文拟以一维激波管、二维槽道内流动问题为研究对象, 设计气体分子运动论高阶差分格式, 通过研究对不同的简化速度分布函数方程采用不同的差分离散方式, 开展对不同 Knudsen 数下管道内流动问题数值模拟, 研究揭示不同流区特殊流动现象、规律; 分析不同离散格式数值余项效应对计算结果的影响, 研究构造隐式气体运动论数值格式, 探讨提高气体运动论数值算法计算精度与效率的途径和差分离散处理所适用的计算准则.

1 气体运动论模型方程

考虑气体分子运动论 Boltzmann 模型方程^[16], 其无量纲形式为

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{V} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = \nu(f^N - f), \quad (1)$$

$$f^N = f_M \left\{ 1 + (1 - Pr) \mathbf{c} \cdot \mathbf{q} (2c^2/T - 5) (5PT/2) \right\}, \quad (2)$$

$$f_M = n / (\pi T)^{3/2} \exp[-c^2/T], \quad (3)$$

$$\nu = \frac{8nT^{1-x}}{5\pi^{3/2}Kn}, \quad Kn = \frac{\lambda_\infty}{L}, \quad (4)$$

其中, $f(\mathbf{r}, \mathbf{V}, t)$ 是依赖于位置空间 \mathbf{r} 、分子速度 \mathbf{V} 和时间 t 的气体分子速度分布函数, f^N 为基于 Shakhov 模型局部平衡态速度分布函数, ν 为分子碰撞频率, λ_∞ 是来流平均自由程, Kn 表示基于特征长度 L 的来流 Knudsen 数, 是划分各流域流动状态的控制参数; c 为分子热运动速度, Pr 为 Prandtl 数, x 是相关于分子模型的气体常数: $x = (\zeta + 3) / (2(\zeta - 1))$, ζ 是联系于分子间作用力大小 F 与分子间距离 r 的负幂律指数: $F = 1/r^\zeta$. 引入特征速度 $c_\infty = \sqrt{2RT_\infty}$, 时间 $t_\infty = L/c_\infty$, 动压 $mn_\infty c_\infty^2/2$ 及来流参数作为无量纲参考量.

气体宏观流动参数, 诸如气体密度、流动速度、温度、气体压力、粘性应力、热流矢量等, 均可通过分布函数基于速度空间取矩而得^[16-18].

1.1 气体运动论方程的一维简化

对于一维气体绕流(不妨设沿 x 方向), 所有物理量在其他两个方向上没有梯度变化(导数为 0), 且在这两个方向上的宏观气体流动速度分量 $V = 0, W = 0$, 运动论模型方程(1)式可写成

$$\frac{\partial f}{\partial t} + V_x \frac{\partial f}{\partial x} = \nu(f^N - f). \quad (5)$$

定义约化分布函数^[2, 16, 19]:

$$g(x, V_x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x, V_x, V_y, V_z, t) dV_y dV_z, \quad (6)$$

$$h(x, V_x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} (V_y^2 + V_z^2) f(x, V_x, V_y, V_z, t) dV_y dV_z. \quad (7)$$

分别以 1 和 $V_y^2 + V_z^2$ 为权因子, 对方程(5)从 $-\infty$ 到 $+\infty$ 积分, 可得到如下约化分布函数控制方程:

$$\begin{cases} \frac{\partial g}{\partial t} + V_x \frac{\partial g}{\partial x} = \nu(G^N - g), \\ \frac{\partial h}{\partial t} + V_x \frac{\partial h}{\partial x} = \nu(H^N - h), \end{cases} \quad (8)$$

其中

$$G^N = G_M \left\{ 1 + (1 - Pr)(V_x - U) q_x [2(V_x - U)^2/T - 3] / (5PT/2) \right\}, \quad (9)$$

$$H^N = H_M \left\{ 1 + (1 - Pr)(V_x - U) q_x [2(V_x - U)^2/T - 1] / (5PT/2) \right\}, \quad (10)$$

$$G_M = n / (\pi T)^{1/2} \exp[-(V_x - U)^2/T], \quad (11)$$

$$H_M = T \cdot G_M. \quad (12)$$

利用约化分布函数表示的宏观流动参数为^[16-17]

$$n = \int_{-\infty}^{\infty} g dV_x, \quad (13)$$

$$U = \frac{1}{n} \int_{-\infty}^{\infty} V_x g dV_x, \quad (14)$$

$$\frac{3}{2} nT = \int_{-\infty}^{\infty} (h + V_x^2 g) dV_x - nU^2, \quad (15)$$

$$p = nT, \quad (16)$$

$$\tau_{xx} = 2 \left[\int_{-\infty}^{\infty} V_x^2 g dV_x - nU^2 \right] - P, \quad (17)$$

$$q_x = \int_{-\infty}^{\infty} V_x (h + V_x^2 g) dV_x - 2U \int_{-\infty}^{\infty} V_x^2 g dV_x + nU \left[U^2 - \frac{3}{2} T \right]. \quad (18)$$

1.2 气体运动论方程的二维简化

对于二维流动问题, 引入约化分布函数^[10, 16, 18]:

$$g(t, x, y, V_x, V_y) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t, x, y, V_x, V_y, V_z) dV_z, \quad (19)$$

$$h(t, x, y, V_x, V_y) = \int_{-\infty}^{\infty} V_z^2 f(t, x, y, V_x, V_y, V_z) dV_z. \quad (20)$$

单一的运动论模型方程(1)可变换为两个如下形式的偏微分方程:

$$\begin{cases} \frac{\partial g}{\partial t} + V_x \frac{\partial g}{\partial x} + V_y \frac{\partial g}{\partial y} = \nu(G^N - g), \\ \frac{\partial h}{\partial t} + V_x \frac{\partial h}{\partial x} + V_y \frac{\partial h}{\partial y} = \nu(H^N - h), \end{cases} \quad (21)$$

式中

$$G^N = G_M[1 + (1 - Pr)(c_i q_i)(2c_i^2/T - 4)/(5PT/2)], \quad (22)$$

$$H^N = H_M[1 + (1 - Pr)(c_i q_i)(2c_i^2/T - 2)/(5PT/2)], \quad (23)$$

$$G_M = \frac{n}{\pi T} \exp(-c^2/V), \quad (24)$$

$$H_M = TG_M/2, \quad (25)$$

其中 $c_i^2 = (V_x - U)^2 + (V_y - V)^2$, $(c_i q_i) = (V_x - U)q_x + (V_y - V)q_y$.

2 简化气体运动论方程的离散求解

由于速度分布函数所依赖的自由变量数目较多,直接离散 Boltzmann 模型方程存在一定的困难. 气体运动论数值算法^[10, 16-19]根据速度空间与物理空间各自计算的相互独立性,将二者分开处理:首先对速度空间运用离散速度坐标法^[16],将方程转化为各个离散速度坐标点处基于时空空间双曲守恒方程;然后对物理空间直接差分离散,迭代求解离散速度分布函数,并使用文献[16, 18]所发展的经改进的 Gauss-Hermite 无穷积分方法^[21]确定各物理量的最终状态.

2.1 简化气体运动论方程的速度离散

对于一维流动问题,在气体运动论方程(8)式中,仅需要对一个速度分量 V_x 作离散处理. 采用改进的 Gauss-Hermite 积分方法确定速度离散坐标点,不妨分别记 $g_\sigma, h_\sigma, G_\sigma^N, G_{M\sigma}$ 和 $H_\sigma^N, H_{M\sigma}$ 为约化分布函数 g, h, G^N, G_M 和 H^N, H_M 在速度离散点 $V_{x\sigma}$ ($\sigma = -N_1, \dots, -1, 1, \dots, N_1$) 处的表达式. 经离散速度坐标法处理,控制方程(8)式化为 $4N_1$ 个关于自变量 x, t 的非齐次双曲型偏微分方程:

$$\begin{cases} \frac{\partial g_\sigma}{\partial t} + V_{x\sigma} \frac{\partial g_\sigma}{\partial x} = \nu(G_\sigma^N - g_\sigma) \\ \frac{\partial h_\sigma}{\partial t} + V_{x\sigma} \frac{\partial h_\sigma}{\partial x} = \nu(H_\sigma^N - h_\sigma) \end{cases} \quad (\sigma = -N_1, \dots, -1, 1, \dots, N_1). \quad (26)$$

同理,对于二维流动,为进一步消除约化分布函数与速度空间的连续依赖关系,使用文献[16-18]所发展的离散速度坐标法,建立在二维流动情况下的速度离散过程. 设通过离散速度坐标法在两个速度分量 V_x 和 V_y 上得到的离散速度坐标点分别为 $V_{x\sigma}$ ($\sigma = -N_1, \dots, N_1$) 和 $V_{y\delta}$ ($\delta = -N_2, \dots, N_2$),那么可将方程(21)式化为在这些点上关于时间和位置空间的 $2N_1 \times 2N_2$ 组非齐次双曲型偏微分方程:

$$\begin{cases} \frac{\partial g_{\sigma, \delta}}{\partial t} + V_{x\sigma} \frac{\partial g_{\sigma, \delta}}{\partial x} + V_{y\delta} \frac{\partial g_{\sigma, \delta}}{\partial y} = \nu(G_{\sigma, \delta}^N - g_{\sigma, \delta}), \\ \frac{\partial h_{\sigma, \delta}}{\partial t} + V_{x\sigma} \frac{\partial h_{\sigma, \delta}}{\partial x} + V_{y\delta} \frac{\partial h_{\sigma, \delta}}{\partial y} = \nu(H_{\sigma, \delta}^N - h_{\sigma, \delta}). \end{cases} \quad (27)$$

相应地,气体宏观流动参数关系式可采用相同的数值积分规则离散求解^[16-18].

2.2 基于气体分子运动论的差分格式构造

速度离散的简化气体运动论方程,在各个离散速度坐标点处求解分布函数的计算过程相互独立,考虑到方程组(26)、(27)式中各分量方程间的相似性和独立性,为方便起见,在下面讨

论气体运动论方程差分格式的建立和分析过程中, 仅针对一维气体流动简化速度分布函数方程式(26)中的单个方程为模型构造差分格式, 简单记为

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} = s, \tag{28}$$

此处 $f = au$, $s = \nu(U - u)$, u 指的是速度离散约化分布函数, U 是对应的速度离散局部平衡态分布函数. 对特征值 a 按正负方向分裂, 不妨记

$$a^+ = \max(a, 0) = (a + |a|)/2, \quad a^- = \min(a, 0) = (a - |a|)/2.$$

2.2.1 显式格式研究

文献[16-19]中所发展的气体运动论数值算法对分布函数 g_σ, h_σ 均是采用同样的差分方法进行求解, 以达到方便程序编制目的. 由于式(26)中 g_σ, h_σ 具有各自独立的特点, 本文通过设计几种色散、耗散格式, 探讨对 g_σ, h_σ 使用不同差分格式进行求解, 研究提高计算精度的途径. 做记号 GnHm 表示对方程(26)差分计算时, 分别对分布函数 g_σ, h_σ 的控制方程采用 n 阶和 m 阶迎风格式进行离散求解.

格式 1 使用一阶迎风插值,

$$\frac{\partial u}{\partial t} \Big|_i^n = -\frac{a^+}{\Delta x}(u_i^n - u_{i-1}^n) - \frac{a^-}{\Delta x}(u_{i+1}^n - u_i^n) + s_i^n; \tag{29}$$

格式 2 使用二阶迎风插值,

$$\frac{\partial u}{\partial t} \Big|_i^n = -\frac{a^+}{2\Delta x}(3u_i^n - 4u_{i-1}^n + u_{i-2}^n) - \frac{a^-}{2\Delta x}(-3u_i^n + 4u_{i+1}^n - u_{i+2}^n) + s_i^n; \tag{30}$$

格式 3 使用三阶迎风插值,

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} \Big|_i^n = & -\frac{a^+}{6\Delta x}(2u_{i+1}^n + 3u_i^n - 6u_{i-1}^n + u_{i-2}^n) - \\ & \frac{a^-}{6\Delta x}(-2u_{i-1}^n - 3u_i^n + 6u_{i+1}^n - u_{i+2}^n) + s_i^n; \end{aligned} \tag{31}$$

格式 4 使用 NND 格式差分离散^[20],

$$\frac{\partial u}{\partial t} \Big|_i^n = -\frac{1}{\Delta x}(f_{i+1/2}^n - f_{i-1/2}^n) + s_i^n, \tag{32}$$

$$f_{i\pm 1/2}^n = f_i^{n+} + f_{i\pm 1}^{n-} + \frac{1}{2} \min \text{mod}(\Delta f_{i-1/2}^{n+}, \Delta f_{i+1/2}^{n+}) - \frac{1}{2} \min \text{mod}(\Delta f_{i\pm 1/2}^{n-}, \Delta f_{i\pm 3/2}^{n-}).$$

2.2.2 隐式格式研究

按照 Crank-Nicolson 方法^[22-24]构造思想, 将 u_i^{n+1} 在 (x_i, t_n) 附近基于时间作 Taylor 展开:

$$u_i^{n+1} = u_i^n + \Delta t \left[\theta \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)_i^n + (1-\theta) \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)_i^{n+\frac{1}{2}} \right]. \tag{33}$$

将(28)式代入(33)式, 可得到如下隐式格式:

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \Delta t \left[\theta \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_i^n + (1-\theta) \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)_i^{n+\frac{1}{2}} \right] + \Delta t s_i^n. \tag{34}$$

将式(34)中空间导数分别采用式(29)~(32)所述格式离散处理, 可得到对应的隐式格式. 例如, 通过将式(34)中的空间导数运用(29)式所示一阶迎风插值格式数值离散, 其隐式格式为

$$a_i u_{i-1}^{n+1} + d_i u_i^{n+1} + c_i u_{i+1}^{n+1} = R_i^n, \tag{35}$$

其中

$$\begin{cases} a_i = - (1-\theta) \frac{a^+ \Delta t}{\Delta x}, & d_i = 1 + (1-\theta) \frac{a^+ \Delta t}{\Delta x} - (1-\theta) \frac{a^- \Delta t}{\Delta x}, \\ c_i = (1-\theta) \frac{a^- \Delta t}{\Delta x}, & R_i^n = u_i^n - \theta \Delta t \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)_i^n + (1+\theta) \Delta t s_i^n. \end{cases} \tag{36}$$

采用三对角线性代数方程组追赶法求解即可。

通过将式(34)中空间导数运用(31)式所述三阶迎风插值格式离散求解,可得到相应的隐式格式:

$$e_i u_{i-2}^{n+1} + a_i u_{i-1}^{n+1} + d_i u_i^{n+1} + c_i u_{i+1}^{n+1} + f_i u_{i+2}^{n+1} = R_i^n, \quad (37)$$

其中

$$\begin{cases} e_i = (1 - \theta) \frac{a^+ \Delta t}{6\Delta x}, \\ a_i = - (1 - \theta) \frac{a^+ \Delta t}{\Delta x} - (1 - \theta) \frac{a^- \Delta t}{3\Delta x}, \\ d_i = 1 + (1 - \theta) \frac{a^+ \Delta t}{2\Delta x} - (1 - \theta) \frac{a^- \Delta t}{2\Delta t}, \\ c_i = (1 - \theta) \frac{a^+ \Delta t}{3\Delta x} + (1 - \theta) \frac{a^- \Delta t}{\Delta x}, \\ f_i = - (1 - \theta) \frac{a^- \Delta t}{6\Delta x}, \\ R_i^n = u_i^n - \theta \Delta t \left[\frac{\partial u}{\partial t} \right]_i^n + (1 + \theta) \Delta t s_i^n. \end{cases} \quad (38)$$

采用五对角线性代数方程组追赶法求解即可。

如果将式(34)中空间导数运用(32)式所述NND差分格式离散求解,可得到NND隐式格式:

$$a_i \delta u_{i-1}^{n+1} + d_i \delta u_i^{n+1} + c_i \delta u_{i+1}^{n+1} = R_i^n, \quad (39)$$

其中

$$\begin{cases} a_i = - (1 - \theta) \frac{a^+ \Delta t}{\Delta x} C_\xi, \quad d_i = 1 + (1 - \theta) \frac{a^+ \Delta t}{\Delta x} C_\xi - (1 - \theta) \frac{a^- \Delta t}{\Delta x} D_\xi, \\ c_i = (1 - \theta) \frac{a^- \Delta t}{\Delta x} D_\xi, \quad R_i^n = - \theta \Delta t \left[\frac{\partial u}{\partial t} \right]_i^n + (1 + \theta) \Delta t s_i^n, \\ \delta u_i^{n+1} = u_i^{n+1} - u_i^n, \\ C_\xi = 1 + \frac{1}{2} \min \operatorname{mod} \left[\frac{\Delta f_{i+1/2}^{n+}}{\Delta f_{i-1/2}^{n+}}, 1 \right] - \frac{1}{2} \min \operatorname{mod} \left[\frac{\Delta f_{i-3/2}^{n+}}{\Delta f_{i-1/2}^{n+}}, 1 \right], \\ D_\xi = 1 - \frac{1}{2} \min \operatorname{mod} \left[\frac{\Delta f_{i-1/2}^{n-}}{\Delta f_{i+1/2}^{n-}}, 1 \right] + \frac{1}{2} \min \operatorname{mod} \left[\frac{\Delta f_{i+3/2}^{n-}}{\Delta f_{i+1/2}^{n-}}, 1 \right]. \end{cases} \quad (40)$$

采用三对角线性代数方程组追赶法求解即可。

对于二维流动问题,上述气体运动论差分格式构造过程同样地适用。

3 计算结果分析

为了验证所发展的气体分子运动论差分算法可行性,运用所设计的气体运动论数值格式差分求解离散速度分布函数,使用改进的 Gauss-Hermite 无穷积分方法确定宏观流动参数,对不同 Knudsen 数下非定常激波管、槽道内流动问题进行了数值模拟与结果分析。

3.1 算法验证

为了检验气体运动论高阶格式用于连续介质流动模拟的可靠性,拟定非定常 Sod 激波管

流动算例, 该问题可描述为 $t = 0$, 激波管中间位置 $x = 0.5$ 左右两边均匀充满不同状态相同成分的单原子硬球气体, 其左右各宏观物理参数分别记为

$$(\rho_L, u_L, T_L) = (1.0, 0.0, 1.0), (\rho_R, u_R, T_R) = (0.1, 0.0, 0.8).$$

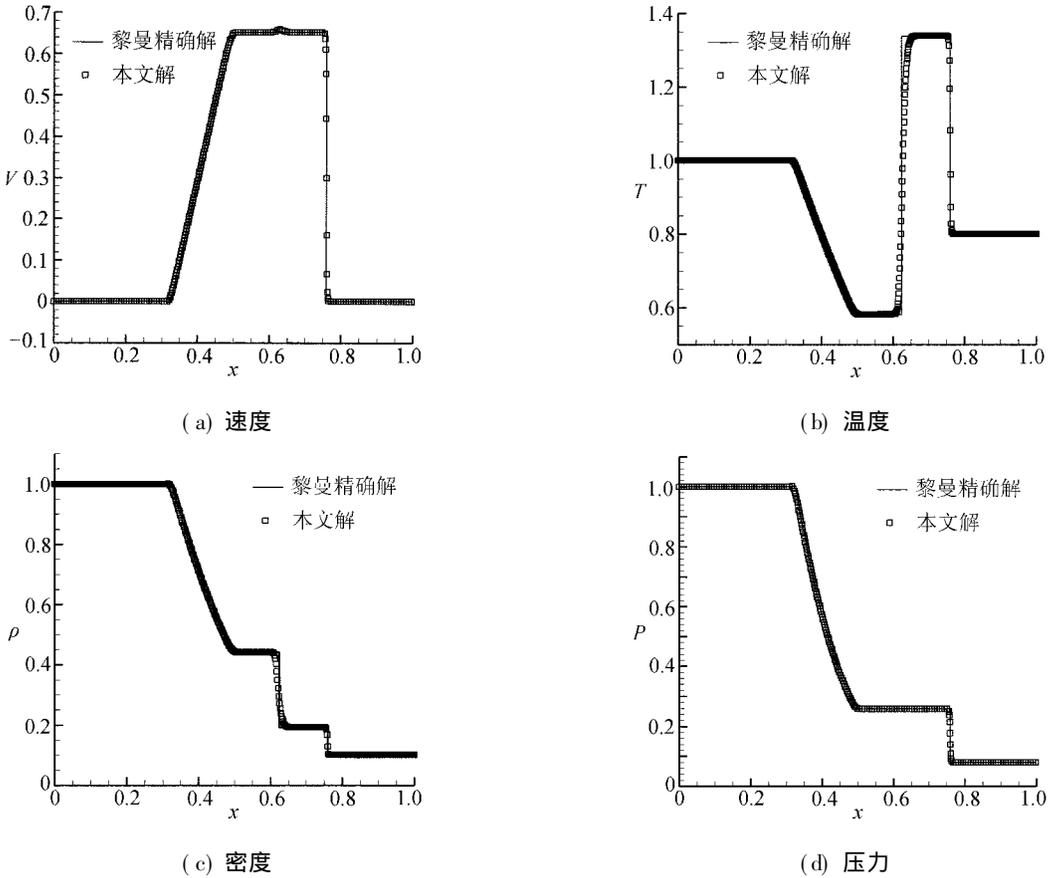


图 2 以 G3H3 格式计算 $Kn = 10^{-4}$ 的 Sod 激波管流动速度、温度、密度与压力分布

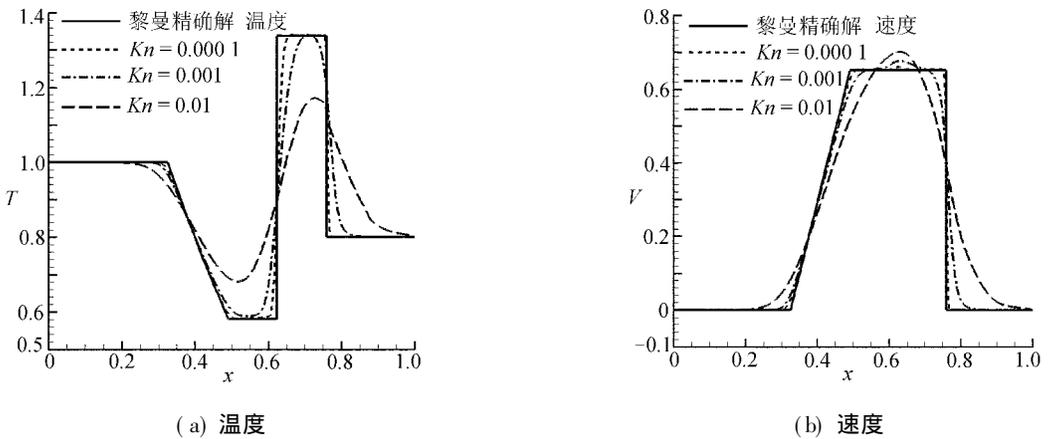


图 3 不同 Kn 数下 Sod 激波管流动温度与速度分布计算比较

在网格尺度 $dx = 0.001$ 设置下, 采用 2.2.1 节介绍的 G3H3 格式对相应于连续流区流动状态 $Kn = 0.0001, Pr = 2/3, \gamma = 5/3$ 计算研究. 图 2(a)~ 图 2(d) 分别绘出 Sod 激波管内流动在 $t = 0.191$ 的速度、温度、密度和压力分布计算结果与无粘气体动力学 Euler 方程 Riemann

精确解比较情况. 可看出, 两者吻合较好, 证实本文研究设计的 G3H3 高阶耗散型格式的计算精度与可行性. 为了反映稀薄效应对激波管流动的影响, 图 3(a) 和图 3(b) 分别绘出运用 G3H1 格式计算不同 Kn 数下 Sod 激波管内气体温度与流动速度变化情况. 由图看出, 在连续流状态 ($Kn = 0.0001$), 求解分子运动论方程得到的计算结果逼近于理想情况下的 Euler 极限解; 随着 Kn 数由 $Kn = 0.0001$ 逐渐增大, 稀薄气体效应明显增强, 激波、膨胀波逐渐变厚, 流场参数分布曲线变得越来越平缓, 在 Kn 数增大到 0.01, 整个激波管内除了由于初始时刻存在压差与密度差产生一种光滑过渡, 激波已经不存在了. 数值试验结果与理论分析完全一致, 再现了 Kn 数由大变小, 气体流动由稀薄流逼近连续流的变化过程.

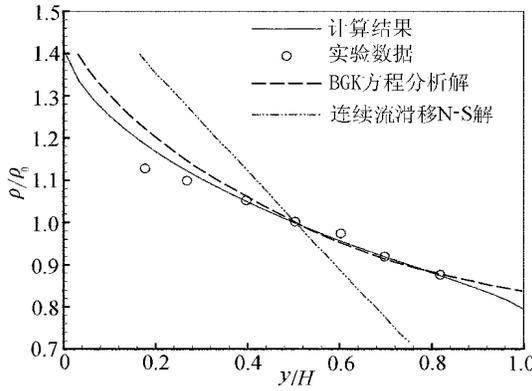


图 4 温度差引起平行板间热对流 $Kn = 0.399$ 密度分布计算与实验比较

为了检验气体分子运动论数值算法对过渡区槽道流问题模拟能力, 对由于平板温度差导致板间气体热传导形成非线性定常 Couette 热对流问题进行计算研究, 设置相距 H 的冷热两平行平板温度分别为 $T_C = 79\text{ K}$, $T_H = 294\text{ K}$, 以氦气 (He) 作为板间模拟气体, $Pr = 2/3$, $\gamma = 5/3$, 以两平板温度的平均值作为气体流动参考温度 $T_{ref} = 186.5\text{ K}$, 定义气体流动的 Knudsen 数为板间中央位置气体分子平均自由程与板间距离之比. 图 4 绘出 $Kn = 0.399$ 的 Couette 热对流板间气体密度分布 $\rho/\rho_0 \sim y/H$ 计算与实验比较, 这里 ρ_0 表示平板间中央位置的气体密度, 其中实线表示

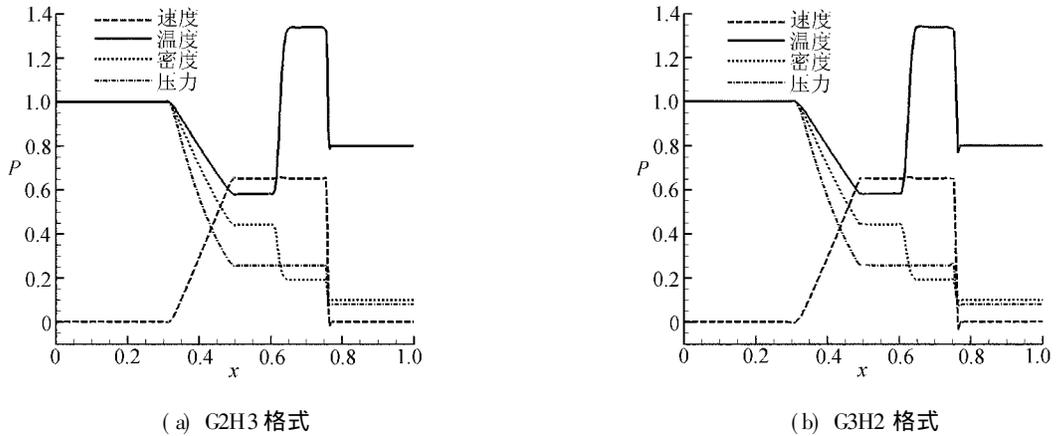


图 5 不同差分格式数值余项效应对激波管流动速度、温度、密度与压力分布计算结果的影响

本文气体分子运动论二阶 NND 格式计算结果, 符号“ \circ ”表示来自文献[7]的实验数据, 长虚线表示文献[6]基于标准的 BGK 模型方程计算分析值, 虚双点划线绘出来自文献[25]的连续流滑移 N-S 解预测值. 图 4 表明, 对于过渡流区 $Kn = 0.399$ 的流动状态, 本文计算结果与实验数据吻合较好, 只是在靠近温度较低的冷平板所计算的密度值稍高于实验数据, 这可能是实验测量中为了转换数据需要使用冷壁面热适应调节系数 α_c , 对于氦气, α_c 应随流动状态不同而进行调整, 取值范围为 0.4 ~ 0.58, 而文献[7]提供的实验数据将 α_c 取值为 $\alpha_c = 0.58$, 这会导致较高 Kn 数流动状态引起冷壁面附近测试数据存在一定的转换误差; 可看出本文计算结果比文献[6]基于 BGK 模型方程得到的研究结果更能吻合实验数据, 这是由于使用 Chapman-

Enskog 矩方法从标准 BGK 方程得不到正确的粘性系数 μ 和热传导系数 K 的表达式, 而导致 BGK 模型得到的 Prandtl 数为 $Pr = 1$, BGK 模型可用于模拟 Maxwell 平衡态或近 Maxwell 平衡态动量交换起主导作用的流动而对能量交换起主要作用的热传导问题具有较大局限性; 图中也看出基于滑移边界条件的 N-S 解对 $Kn = 0.399$ 的过渡区流动, 与实验数据、本文计算结果相差太大, 可以说是完全失效, 这说明即使带滑移边界的 N-S 解算器也只能用于 Knudsen 数较低的近连续流, 对于 Knudsen 数稍高的近连续过渡流, 滑移边界 N-S 解算器将无能为力或不再可靠. 相比之下, 本文方法计算结果更能准确描述槽道内流动密度分布变化规律.

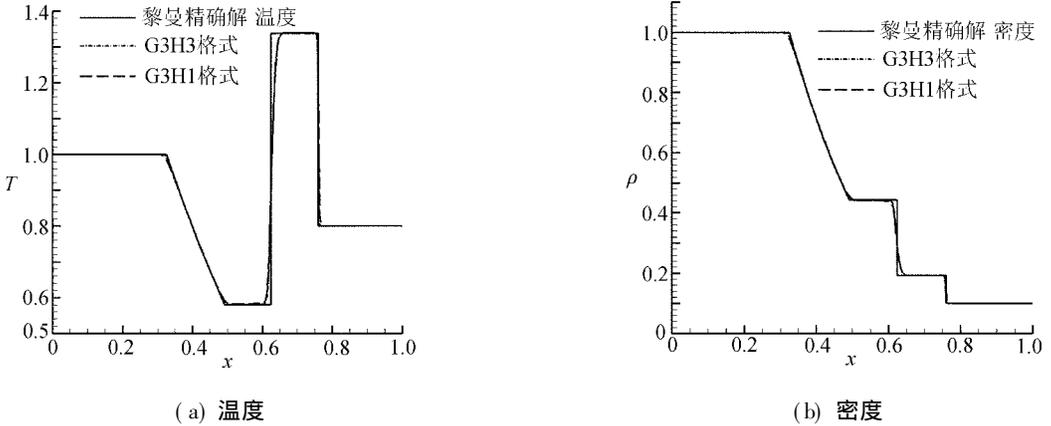


图 6 G3H3 格式和 G3H1 格式对 $Kn = 10^{-4}$ 激波管内流动温度与密度分布计算比较

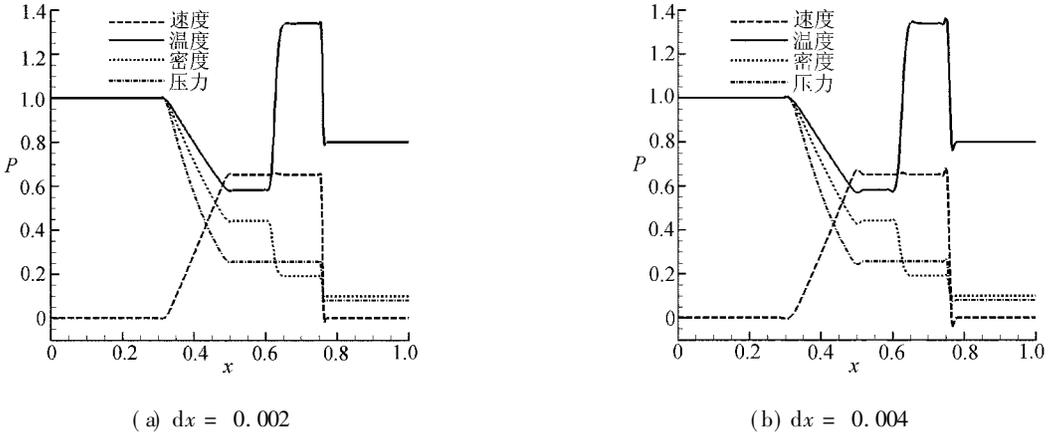


图 7 不同网格尺度对激波管流动速度、温度、密度与压力分布计算结果的影响

3.2 不同差分格式对激波管内流动问题计算影响

为了分析数值耗散与数值色散效应对计算结果的影响, 拟定 $Kn = 0.0001$ 对应的激波管流动算例, 取相同网格设置 $dx = 0.001$, 分别运用耗散型三阶迎风格式与色散型二阶迎风格式进行计算研究, 分析比较数值余项效应对计算结果的影响, 图 5(a) 与图 5(b) 分别绘出了使用 G2H3 与 G3H2 格式计算 Sod 激波管 $t = 0.191$ 宏观流动参数(速度、温度、密度、压力)分布轮廓线. 将图 5 与图 2(a)~ 图 2(d) 所示 G3H3 高阶耗散型格式计算结果对比分析表明, 如果约化分布函数 g, h 的控制方程均采用三阶耗散型格式, 计算结果和连续流理想状态下 Euler 方程精确解吻合很好; 而对分布函数 g 的控制方程采用二阶色散型格式所得到的计算结果相对于对分布函数 h 的控制方程采用二阶色散型格式的计算结果, 在激波和膨胀波附近出现更为严重的色散效应, 产生明显的数值奇异, 这表明分布函数 g 的控制方程数值余项效应对计算

结果影响比 h 大. 图 6(a) 和图 6(b) 分别绘出了 $Kn = 0.0001$ 对应的 Sod 激波管流动在同样网格设置下 $dx = 0.001$, 分别使用 G3H3 格式和 G3H1 格式计算得到的温度和密度分布轮廓线与黎曼精确解的比较情况. 可看出, 两种格式得到的计算结果完全一致, 然而 G3H1 格式的计算量要比 G3H3 格式的计算量小很多. 说明使用 G3H1 格式在减少计算量的同时, 能得到与 G3H3 格式同样的计算精度和效果. 因此, 在格式选取时, 在不影响整体计算精度的同时, 对分布函数 h 的控制方程可采用低阶耗散格式, 而对分布函数 g 的控制方程应使用高阶耗散格式更好些.

为了展示不同网格尺度对计算结果的影响, 对照图 2 所示网格设置 $dx = 0.001$ 所得研究结果, 计算中采用 G3H3 格式对 $Kn = 0.0001, Pr = 2/3$ 激波管问题进行计算, 图 7(a) 和图 7(b) 分别绘出了网格单元长度取 $dx = 0.002$ 与 $dx = 0.004$ 计算得到的激波管宏观流动参数分布. 图中比较表明, 随着网格尺度增大, 数值耗散已不能掩盖由于各种因素导致的数值色散现象, 在激波和膨胀波附近出现小扰动; 而且, 网格划分越粗, 数值余项效应会变得越显著, 导致计算结果出现严重失真, 如图 7(b) 所示. 这与差分格式构造中的频谱控制原则是相一致的.

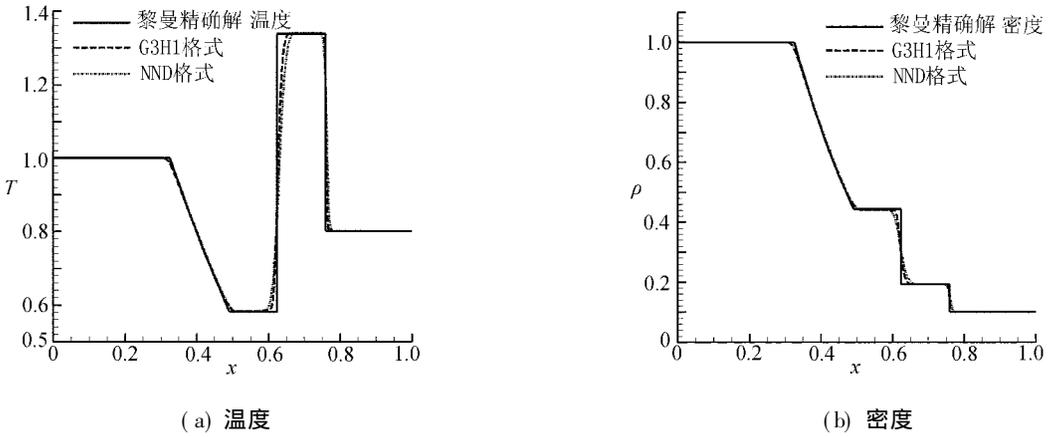


图 8 以不同精度差分格式对 $Kn = 10^{-4}$ 的 Sod 激波管内气体温度、密度分布

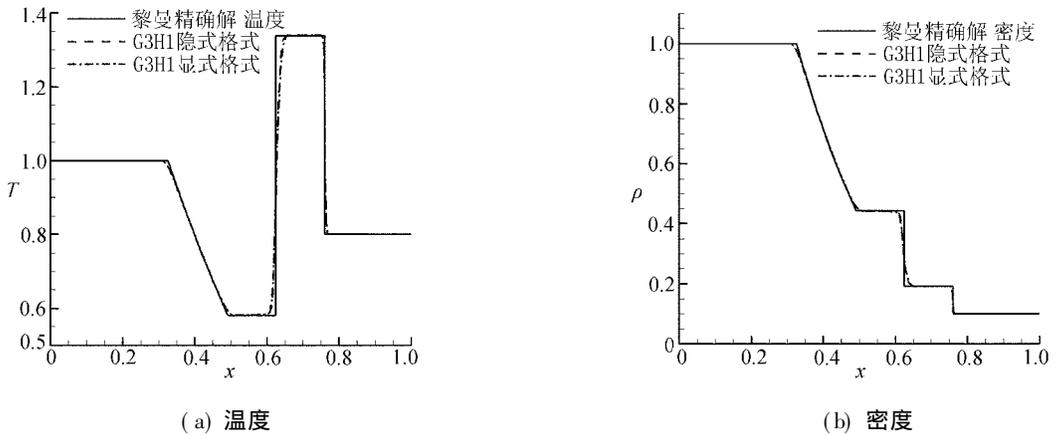


图 9 显式与隐式格式对 $Kn = 10^{-4}$ 激波管内流动温度与密度分布计算比较

图 8(a) 与图 8(b) 绘出 $Kn = 0.0001$ 对应的 Sod 激波管流动在同样网格设置 $dx = 0.001$ 下, 分别使用 G3H1 格式和 NND 格式计算得到的温度和密度分布轮廓线与黎曼精确解比较情况. 可看出, 对此连续流状态, G3H1 格式计算结果比 NND 格式更能吻合黎曼精确解, 说明同

样是耗散型格式, 计算模板相同, 计算量相当的情况下, G3H1 格式的计算精度要高于 NND 格式. 之所以要选择高精度差分格式, 主要是为了减小数值耗散对计算结果的影响, 使得计算结果更能真实反应物理耗散效应.

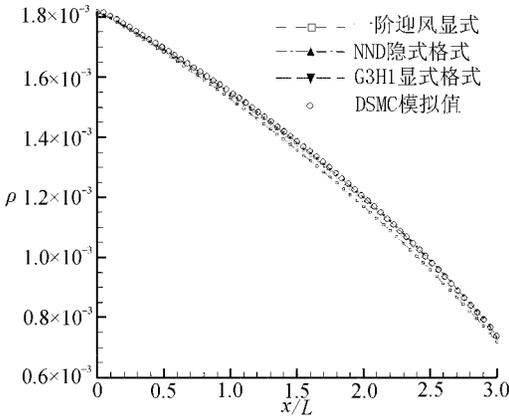


图 10 不同差分格式对 Poiseuille 槽道流 ($Kn = 0.1$) 轴向密度分布计算比较

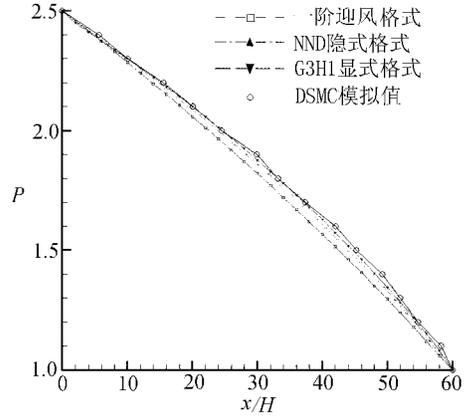


图 11 不同差分格式对 $Kn = 0.02$ 槽道流轴向压力分布计算比较

表 1 相同网格尺度 ($dx = 0.001$) 设置下显式与隐式格式计算收敛时间比较

Kn 数	差分格式	计算收敛时间 t / s
10^{-5}	显式 G3H1	89.1
10^{-5}	隐式 G3H1	122.6
10^{-4}	显式 G3H1	29.7
10^{-4}	隐式 G3H1	12.6
10^{-3}	显式 G3H1	16.0
10^{-3}	隐式 G3H1	1.1

为了初步探讨气体运动论隐式格式计算效率, 将隐式格式(34)中的空间导数使用 G3H1 格式进行差分离散, 即对关于约化分布函数 g_{σ} 的空间导数采用三阶迎风插值格式, 对关于 h_{σ} 的空间导数使用一阶迎风格式, 利用所得到的该隐式 G3H1 格式对不同 Kn 数的 Sod 激波管问题计算研究. 其中, 图 9(a) 和图 9(b) 分别绘出该隐式格式计算 $Kn = 0.0001$ 激波管气体温度与密度分布轮廓线(见虚线所示), 为了便于比较, 图中还用点划线绘出相应于显式 G3H1 格式计算结果, 实线绘出该激波管连续流区黎曼精确解, 可看出, 两种格式得到的计算曲线完全重合, 且均与黎曼精确解吻合很好, 证实本文发展的显式与隐式格式的准确可靠性. 为了比较显式与隐式两类格式的计算效率, 表 1 描述使用隐式 G3H1 格式和显式 G3H1 格式分别计算处于近连续流与连续介质流区 $Kn = 10^{-3}$, $Kn = 10^{-4}$ 和 $Kn = 10^{-5}$ 对应的 3 种激波管流动状态, 计算收敛所需要的时间开支情况. 不难看出, 连续流区 $Kn = 10^{-5}$ 对应的计算, 本文发展的隐式格式并不比显式格式效率高, 计算收敛需要的时间反而高于显式格式计算时间, 这是由于本文发展的隐式计算格式仅对对流项做了隐式处理, 碰撞松弛源项在计算过程中依然采用 n 时间层的显式表示, 然而连续流区碰撞松弛时间远小于 CFL 条件允许的格式稳定时间, 导致碰撞松弛时间成为制约计算时间步长的主要因素. 与此相反, 在较高 Kn 数的近连续、过渡流区, 碰撞松弛时间大于 CFL 条件允许的格式稳定时间, 使得 CFL 约束条件成为决定时间步长的主要因素, 于是本文发展的隐式格式能够发挥无条件稳定的优越性, 如表 1 所示, $Kn = 10^{-3}$ 与

$Kn = 10^{-4}$ 对应的计算状态, 隐式格式计算效率就明显高于显式格式计算效率. 计算体会到, 曾经使用来自文献[16-17] 气体运动论耦合迭代数值格式求解上述 $Kn = 10^{-4}$ 连续介质流动问题的计算收敛时间差不多是本文气体运动论隐式格式计算时间的 10 倍, 显示出发展求解 Boltzmann 模型方程的气体运动论隐式格式的先进性与高效率.

3.3 跨流区槽道内流动计算分析

为了考察不同显、隐式差分格式计算精度, 图 10 绘出 $Kn = 0.1$ 的压力驱动二维 Poiseuille 槽道流中心轴线密度分布变化情况, 可看出, 槽道内流动参数轴向分布呈现较强的非线性效应, 几种格式得到的计算结果和来自文献[11] 的 DSMC 模拟值变化趋势相同, 细致比较表明一阶迎风格式(带符号 □ 的虚线) 因有较大的耗散效应, 其计算结果存在一定的系统误差, 而高阶 G3H1 显式格式(带符号 ▼ 的长虚线) 与 NND 隐式格式(带符号 ▲ 的点划线) 均能得到和 DSMC 模拟值(符号 °) 相当吻合的计算结果, 但 NND 隐式格式比 G3H1 显式格式具有更高的计算速度, 如同条件下, NND 隐式格式的计算收敛时间差不多是 G3H1 显式格式所需计算时间的五分之一. 显示出对于低速定常槽道流, 采用气体运动论隐式格式可获得比显式格式高得多的计算效率, 而一阶格式因其较强的数值耗散, 导致计算结果偏差较大. 图 11 绘出入口与出口压力比 $P_{in}/P_{out} = 2.5$ 、入口 Knudsen 数 $Kn = 0.02$ 的近连续滑移流区二维槽道氧气流动算例 $L = 31.8 \mu\text{m}$, $H = 0.53 \mu\text{m}$, 轴向压力分布本文算法计算结果与来自文献[26] 的 DSMC 模拟值(带符号 ° 的实线) 比较情况, 同样看出, 除了一阶迎风格式(带符号 □ 的实线), 由于数值耗散性过强, 计算结果偏差较大外, 其它格式如 G3H1 格式(带符号 ▼ 的实线) 与 NND 隐式格式(带符号 ▲ 的实线) 都和 DSMC 模拟值较好地吻合在一起, 并且本文算法结果消除了 DSMC 模拟低速流动问题因随机抽样带来的统计误差, 能够较光滑地描述沿槽道中心轴线气体流动压力变化规律. 通过上述跨流区二维槽道内流动问题计算看出, 求解 Boltzmann 模型方程的气体运动论隐式格式对处于近连续、滑移过渡流区压力驱动的管道内流动问题模拟研究具有很好的适应性.

4 结 论

从研究求解 Boltzmann 简化速度分布函数方程的气体运动论数值计算方法特点出发, 对气体运动论高阶显式格式和隐式格式进行了构造设计与研究分析. 通过对不同的约化速度分布函数采用不同的差分离散方式, 发展了几种求解离散速度分布函数的差分格式, 验证了气体运动论数值格式的准确性和可行性, 计算分析了不同精度差分格式的数值离散效应对计算结果的影响和开展气体运动论高阶格式研究的必要性. 通过对求解 Boltzmann 模型方程的气体运动论隐式格式的研究设计和不同 Knudsen 数下一维非定常激波管、二维槽道内流动问题应用测试与计算分析, 表明发展气体分子运动论高阶格式与隐式格式是提高求解 Boltzmann 模型方程的气体运动论数值算法计算效率与精度的有效途径. 这为进一步构造含有非线性碰撞松弛源项的气体运动论隐式格式, 发展不仅适用于稀薄过渡流区、近连续滑移流区而且能可靠用于连续流区求解 Boltzmann 模型方程的高精度、高效率气体运动论隐式格式统一算法, 指明了方向.

本文仅是求解 Boltzmann 模型方程的气体运动论高阶格式与隐式格式的初步研究及在一维激波管、二维槽道流问题验证与应用, 上述格式的深入研究和在各类管道内流动, 特别是飞行器姿控发动机内外连续流到稀薄流混合流动问题应用研究, 均有待进一步研究展开.

[参 考 文 献]

- [1] Sod G A. A survey of several finite difference methods for systems of non-linear hyperbolic conservation laws[J]. *Journal of Computational Physics*, 1978, **27**(1): 1-31.
- [2] Chu C K. Kinetic-theoretic description of the formation of a shock wave[J]. *Physics of Fluids*, 1965, **8**(1): 12-22.
- [3] Reitz R D. One-dimensional compressible gas dynamics calculations using the Boltzmann equations [J]. *Journal of Computational Physics*, 1981, **42**(1): 108-123.
- [4] Shu C W, Osher S. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock capturing schemes I [J]. *Journal of Computational Physics*, 1988, **77**(2): 439-471.
- [5] Gorelov S L, Kogan M N. Solution of linear problem of rarefied gas dynamics by the Monte Carlo method[J]. *Fluid Dynamics*, 1968, **3**(2): 96-98.
- [6] Huang A B, Hwang P F. Test of statistical models for gases with and without internal energy states [J]. *Physics of Fluids*, 1973, **16**(4): 466-575.
- [7] Aloffs D J, Flagan R C, Springer G S. Density distribution measurements in rarefied gases contained between parallel plates at high temperature differences[J]. *Physics of Fluids*, 1971, **14**(3): 529-533.
- [8] Tritton D J. *Physical Fluid Dynamics* [M]. Oxford: Oxford University Press, 1988.
- [9] Prendergast K H, Xu K. Numerical hydrodynamics from gas-kinetic theory[J]. *Journal of Computational Physics*, 1993, **109**(1): 53-66.
- [10] Yang J Y, Huang J C. Rarefied flow computations using nonlinear model Boltzmann equations[J]. *Journal of Computational Physics*, 1995, **120**(2): 323-339.
- [11] Zheng Y, Garcia A L, Alder B J. Comparison of kinetic theory and hydrodynamics for poiseuille flow [J]. *Journal of Statistical Physics*, 2002, **109**(3/4): 495-505.
- [12] Luo L S, Chen H, Chen S, et al. Generalized hydrodynamic transport in lattice gas automata[J]. *Physical Review A*, 1991, **43**(12): 7097-7100.
- [13] Chen S, Doolen G D. Lattice Boltzmann method for fluid flows[J]. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 1998, **30**(1): 329-364.
- [14] Sone Y, Takata S, Ohwada T. Numerical analysis of the plane Couette flow of a rarefied gas on the basis of the linearized Boltzmann equation for hard-sphere molecules[J]. *European Journal of Mechanics-B/Fluids*, 1990, **9**(3): 449-456.
- [15] Xu K, Li Z H. Microchannel flow in the slip regime: gas-kinetic BGK-Burnett solutions[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2004, **513**: 87-110.
- [16] 李志辉. 从稀薄流到连续流的气体运动论统一数值算法研究[D]. 博士论文. 四川绵阳: 中国空气动力研究与发展中心研究生部, 2001.
- [17] Li Z H, Zhang H X. Numerical investigation from rarefied flow to continuum by solving the Boltzmann model equation[J]. *International Journal of Numerical Methods in Fluids*, 2003, **42**(4): 361-382.
- [18] 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.
- [19] Li Z H, Zhang H X. Gas-kinetic description of shock wave structures by solving Boltzmann model equation[J]. *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, 2008, **22**(9): 623-638.
- [20] Zhang H X, Zhuang F G. NND Schemes and Their Applications to Numerical Simulation of Two- and Three-Dimensional Flows [M]. In: Hutchinson J W, Wu T Y, Eds. *Advances in Applied Mechanics*. **29**. Holland: Academic Press, 1992, 193-256.

- [21] Shizgal B. A Gaussian quadrature procedure for use in the solution of the Boltzmann equation and related problems[J]. *Journal of Computational Physics*, 1981, **41**(2): 309-328.
- [22] Yee H C. Construction of explicit and implicit symmetric TVD schemes and their applications[J]. *Journal of Computational Physics*, 1987, **68**(1): 151-179.
- [23] 张涵信, 沈孟育. 计算流体力学 差分方法的原理和应用[M]. 北京: 国防工业出版社, 2003.
- [24] 刘儒勋, 舒其望. 计算流体力学的若干新方法[M]. 北京: 科学出版社, 2003.
- [25] Schlichting H. *Boundary-Layer Theory* [M]. Chap XII. New York McGraw-Hill, 1968.
- [26] Nance R P, Hash D B, Hassan H A. Role of boundary conditions in Monte Carlo simulation of microelectromechanical systems[J]. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 1998, **12**(3): 447-449.

Study of Gas Kinetic Numerical Schemes for One- and Two-Dimensional Inner Flows

LI Zhi-hui^{1,2}, BI Lin¹, TANG Zhi-gong¹

(1. China Aerodynamics Research and Development Center, HAI, Mianyang, Sichuan 621000, P. R. China;

(2. National Laboratory for Computational Fluid Dynamics, Beijing 100083, P. R. China)

Abstract: Several kinds of explicit and implicit finite-difference schemes directly solving the discretized velocity distribution functions were designed with different-order precision by analyzing the inner characteristic of the gas kinetic numerical algorithm for Boltzmann model equation. The peculiar flow phenomena and mechanism from various flow regimes were revealed by the numerical simulation of the unsteady Sod shock-tube problems and the two-dimensional channel flows with different Knudsen numbers, and the numerical remainder-effects of the difference schemes were investigated and analyzed on computed results. The ways of improving the computational efficiency of the gas-kinetic numerical method and the computing principles of difference discretization were discussed on the Boltzmann model equation.

Key words: Boltzmann model equation; gas-kinetic numerical schemes; discrete velocity ordinate method; shock-tube problems; channel flows