

Boltzmann-Rykov 模型的有限体积方法计算*

吴俊林¹, 李志辉^{1,2}, 彭傲平¹, 蒋新宇¹

(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. 国家计算流体力学实验室, 北京 100191)

摘要: 构建一种三阶精度的有限体积格式,数值求解考虑转动非平衡影响的 Boltzmann-Rykov 模型方程.针对模型方程的速度空间离散得到各个离散速度坐标点上彼此独立的控制方程组,运用高阶精度的半离散化有限体积格式在位置空间对离散控制方程进行数值求解,时间项采用三阶 Runge-Kutta 方法推进,方程右端二体碰撞项采用中心近似技术.该有限体积格式在气体分子对流运动项上具有三阶精度,同时保证了分布函数的正定性和流通量守恒.计算结果与有限差分方法数值模拟结果和连续流区非定常激波管问题的 Riemann 精确解均吻合较好,说明基于有限体积法的 Boltzmann-Rykov 模型方程数值求解过程是正确的.

关键词: Rykov 模型方程; 统一算法; 有限体积方法

中图分类号: O356; V211.25 **文献标志码:** A

doi: 10.3879/j.issn.1000-0887.2014.02.002

引言

稀薄气体动力学的研究主要有确定论方法和概率论方法两种.其中,基于概率统计规律的 Monte-Carlo 方法将分子运动与碰撞解耦,采用直接模拟仿真分子运动与相互作用规律的方法描述稀薄气体的流动特征,在稀薄流场数值计算中得到了非常广泛的应用,其代表是由 Bird 发展建立的直接模拟 Monte-Carlo 方法(即 DSMC 方法)^[1].

这种方法有很多优点:1) DSMC 方法的物理模拟本质使得它能够再现分子运动与碰撞过程,通过引入内能、化学反应、热辐射、电离复合反应等多种物理作用模型能够较为方便地实现对复杂物理化学过程的描述;2) 该方法并不需要速度空间的截取边界^[2],因此速度点能很好地独立于物理问题;3) 由于粒子总是集中于分布函数较大的地方,内存空间就不会浪费在实际分布函数接近于 0 的函数位置,使得基于仿真分子运动碰撞规律的 DSMC 方法在远离热力学平衡态的流动问题中具有极大的优势;4) 相对于基于 Boltzmann 方程直接求解的确定论方法来说,在同等离散自由度下 Monte-Carlo 方法的计算代价要小得多.

然而,虽然 DSMC 方法在稀薄气体动力学研究中具有非常广泛的市场,它的一些缺陷也限

* 收稿日期: 2013-07-01; 修订日期: 2013-12-09

基金项目: 国家自然科学基金(91016027);国家重点基础研究发展计划(973 计划)(2014CB744100)

作者简介: 吴俊林(1985—),男,四川会理人,硕士(Tel: +86-816-2465261; E-mail: wujunlin130@aliyun.com);

李志辉(1968—),男,四川眉山人,研究员,博士,博士生导师(通讯作者. E-mail: zhli0097@x263.net).

制了它的发展应用: 1) DSMC 方法受到时间步长(小于平均碰撞时间)和网格划分($\Delta x < \lambda$)的限制,难以对低 Kn 数的稀薄过渡流区(90 km 高度以下)开展数值仿真^[3]; 2) DSMC 方法经常出现统计噪声,因此为了得到好的流场结果必须选择大量参数(如网格大小、仿真分子数量、抽样数量等),这些都需要经验的积累^[4].因此,发展基于 Boltzmann 方程直接求解的确定论方法也同样重要.

Boltzmann 方程能够描述从稀薄流到连续流各个流域的气体流动现象,它是气体分子运动论的基本方程.遵循 DSMC 方法的规程能够导出 Boltzmann 方程^[5-6],因此二者在描述流动特征方面具有一致性.由于 Boltzmann 方程右端碰撞项具有非线性高维多重积分特征,这给直接求解 Boltzmann 方程带来了极大的困难.虽然一些学者(如 Filbet 等^[2], Bobylev 等^[7], Kolobov 等^[8], Cheremisin 等^[9])在直接求解 Boltzmann 方程或广义 Boltzmann 方程(generalized Boltzmann equation)方面取得了较大进展,但由于求解过程复杂,而且计算代价很大,导致其难以在工程实际中得到广泛应用.一种有效的实用手段是求解简化了碰撞积分项的模型方程.Li(李志辉)等^[10-11]在速度空间采用离散速度坐标法、位置空间应用 NND 有限差分格式,对 Boltzmann-Shakhov 模型方程开展数值模拟工作取得成功,在工程实践中得到了较好的应用.但 Shakhov 模型并不能保证分布函数的正定性^[12],有限差分格式也不能消除数值计算过程中可能出现的负分布函数值.相比之下,有限体积方法的网格平均思想能够有效地消除偶尔出现的负分布函数,保证模拟过程中分布函数的正定性.此外,有限体积法是对偏微分方程的积分形式进行数值求解,因此能保证流场的质量、动量和能量守恒.

本文基于有限体积方法的构造思想对速度点上彼此独立的离散化 Boltzmann-Rykov 模型方程进行数值模拟研究,应用三阶精度的有限体积重构格式和 Runge-Kutta 时间推进方法,对于碰撞项采用中心近似技术,计算非定常激波管内流动问题,并与有限差分格式结果和连续流区 Riemann 精确解作对比,验证了数值结果的正确性.

1 控制方程

采用约化速度分布函数方法^[11,13],基于宏观气体流动速度为 0 的方向(y, z 方向)对一维 Rykov 模型方程进行积分而消去相关速度分量对分布函数的影响,得到关于约化速度分布函数的一维流动问题无量纲控制方程为^[14-15]

$$\begin{cases} \frac{\partial g_1}{\partial t} + \xi_x \cdot \frac{\partial g_1}{\partial x} = \nu_r(g_1^r - g_1) + \nu_l(g_1^l - g_1), \\ \frac{\partial g_2}{\partial t} + \xi_x \cdot \frac{\partial g_2}{\partial x} = \nu_r(g_2^r - g_2) + \nu_l(g_2^l - g_2), \\ \frac{\partial g_3}{\partial t} + \xi_x \cdot \frac{\partial g_3}{\partial x} = \nu_r(g_3^r - g_3) + \nu_l(g_3^l - g_3), \end{cases} \quad (1)$$

$$\nu_r = \frac{8nT_l}{5\sqrt{\pi}\mu_l Kn_\infty} \frac{1}{Z}, \quad \nu_l = \frac{8nT_l}{5\sqrt{\pi}\mu_l Kn_\infty} \left(1 - \frac{1}{Z}\right), \quad (2)$$

$$g_M(T) = \frac{n}{\sqrt{\pi T}} \exp\left(-\frac{c_x^2}{T}\right), \quad (3)$$

$$c_x = \xi_x - U, \quad (4)$$

$$g_1^r = g_M(T) \left[1 + \frac{8}{15} \omega_0 \cdot \frac{q_x^l}{P} \cdot \frac{c_x}{T} \left(\frac{c_x^2}{T} - \frac{3}{2}\right)\right], \quad (5)$$

$$g_2^r = T g_M(T) \left[1 + \frac{8}{15} \omega_0 \cdot \frac{q_x^i}{P} \cdot \frac{c_x}{T} \left(\frac{c_x^2}{T} - \frac{1}{2} \right) \right], \quad (6)$$

$$g_3^r = T \left[g_1^r + 4\omega_1(1 - \delta) \cdot g_M(T) \frac{q_x^r c_x}{PT} \right], \quad (7)$$

$$g_1^i = g_M(T_i) \left[1 + \frac{8}{15} \cdot \frac{q_x^i}{P_i} \cdot \frac{c_x}{T_i} \left(\frac{c_x^2}{T_i} - \frac{3}{2} \right) \right], \quad (8)$$

$$g_2^i = T_i g_M(T_i) \left[1 + \frac{8}{15} \frac{q_x^i}{P_i} \cdot \frac{c_x}{T_i} \left(\frac{c_x^2}{T_i} - \frac{1}{2} \right) \right], \quad (9)$$

$$g_3^i = T_r \left[g_1^i + 4(1 - \delta) g_M(T_i) \frac{q_x^r c_x}{P_i T_r} \right], \quad (10)$$

其中约化分布函数 $g_1 = g_1(t, x, \xi_x)$, $g_2 = g_2(t, x, \xi_x)$, $g_3 = g_3(t, x, \xi_x)$, t 为时间, x 是位置空间坐标, ξ_x 是沿 x 方向的速度. 弹性碰撞频率 ν_1 和非弹性碰撞频率 ν_r 由宏观参数确定, T_i 为平动温度, T_r 是转动温度, Kn_∞ 为来流气体特征 Knudsen (克努森) 数, 表征气体流动稀薄程度. 粘性系数 μ_i 和非弹性碰撞比率 Z 由如下形式确定:

$$\mu_i = (T_i)^{2/3} \varphi(B) / \varphi(BT_i), \quad B = T_\infty / T_*, \quad (11)$$

$$\varphi(t) = 0.767 + 0.233t^{-1/6} \exp[-1.17(t - 1)], \quad (12)$$

$$Z(T_i, T_r) =$$

$$\frac{3}{4} \pi \frac{\varphi(BT_i)}{(BT_i)^{1/6}} \frac{9BT_i}{BT_i + 8} \left(\frac{T_r}{T_i} \right) \left[0.461 + 0.558 \ln \left(\frac{T_r}{T_i} \right) + 0.035 \ln \left(\frac{T_r}{T_i} \right)^2 \right]. \quad (13)$$

参数 ω_0 和 ω_1 依赖于所研究的气体, 可以把模型方程中得到的热传导率与实验数据作对比而得到. 对于一维氮气流动问题:

$$T_* = 91.5 \text{ K}, \quad \omega_0 = 0.5, \quad \omega_1 = 0.286, \quad 1/\delta = 1.55. \quad (14)$$

由约化分布函数 g_1, g_2, g_3 确定宏观流动参数的求积公式为

$$n = \int g_1 d\xi_x, \quad nU = \int \xi_x g_1 d\xi_x, \quad \frac{3}{2} nT_1 + nU^2 = \int (\xi_x^2 g_1 + g_2) d\xi_x, \quad (15)$$

$$nT_r = \int g_3 d\xi_x, \quad q_x^i = \int \left(\frac{c_x^3}{2} g_1 + \frac{c_x}{2} g_2 \right) d\xi_x, \quad 2q_x^r = \int c_x g_3 d\xi_x, \quad (16)$$

$$\frac{5}{2} T = \frac{3}{2} T_1 + T_r, \quad P_1 = nT_1, \quad P = nT, \quad q_x = q_x^i + q_x^r. \quad (17)$$

方程(1)~(17)是一个自封闭系统. 运用离散速度坐标方法^[10-11,13]把速度空间 ξ_x 数值离散成有限数目的离散速度坐标点, 去掉约化速度分布函数对速度空间的连续依赖性. 这样, 将速度空间连续的速度分布函数模型方程(1), 转化成为在各个离散速度坐标点处彼此独立的、具有非线性源项的非齐次偏微分方程组:

$$\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial t} + \xi_x \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial x} = \nu_r \mathbf{G}^r + \nu_i \mathbf{G}^i - (\nu_r + \nu_i) \mathbf{G}, \quad (18)$$

其中 $\mathbf{G} = [g_{1\sigma}(x, t), g_{2\sigma}(x, t), g_{3\sigma}(x, t)]^T$, $\mathbf{G}^r = [g_{1\sigma}^r, g_{2\sigma}^r, g_{3\sigma}^r]^T$, $\mathbf{G}^i = [g_{1\sigma}^i, g_{2\sigma}^i, g_{3\sigma}^i]^T$, σ 为离散速度坐标点的序号. 宏观流动参数能够通过速度空间上相应的积分规则得到.

2 数值求解方法

2.1 半离散化有限体积格式的构造

对于方程(18)采用半离散化的有限体积法构造空间离散格式. 一维空间离散为均匀网格

$\{x_i | x_i = x_0 + i \cdot \Delta x, i = 0, 1, 2, \dots, N\}$, Δx 为网格间距. 那么 $x_{i+1/2} = (x_i + x_{i+1})/2$, $x_{i-1/2} = (x_i + x_{i-1})/2$, $\Delta x = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}$.

对式(18)在位置空间范围 $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ 上积分可得

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial t} dx + \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \xi_x \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial x} dx = \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} (\nu_r \mathbf{G}^r + \nu_l \mathbf{G}^l - (\nu_r + \nu_l) \mathbf{G}) dx. \quad (19)$$

令

$$\bar{\mathbf{G}}_i = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \mathbf{G} dx$$

代表分布函数在空间范围 $[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ 内的网格平均值, 则半离散化分布函数控制方程为

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{G}}_i}{\partial t} + \frac{\mathbf{F}(x_{i+1/2}) - \mathbf{F}(x_{i-1/2})}{\Delta x} = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} (\nu_r \mathbf{G}^r + \nu_l \mathbf{G}^l - (\nu_r + \nu_l) \mathbf{G}) dx, \quad (20)$$

其中 $\mathbf{F}(x_{i+1/2}) = \xi_x \cdot \mathbf{G}(x_{i+1/2})$ 无法准确得到, 只能用 $\tilde{\mathbf{F}}_{i+1/2}$ 近似求得. 而 $\tilde{\mathbf{F}}_{i+1/2}$ 采用 Steger-Warming 流通矢量分裂技术可得 (网格基或权重偏向上游)

$$\tilde{\mathbf{F}}_{i+1/2} = \tilde{\mathbf{F}}_{i+1/2}^+ + \tilde{\mathbf{F}}_{i+1/2}^- = \frac{\xi_x + |\xi_x|}{2} \mathbf{G}_{i+1/2}^L + \frac{\xi_x - |\xi_x|}{2} \mathbf{G}_{i+1/2}^R. \quad (21)$$

有限体积法的数值求解可以表述为这样一个过程:

$$\bar{\mathbf{G}}_i^n \xrightarrow{\text{A}} \tilde{\mathbf{G}}_h^n(x) \xrightarrow{\text{B}} \tilde{\mathbf{F}}_{i+1/2}^n \xrightarrow{\text{C}} \bar{\mathbf{G}}_i^{n+1}, \quad (22)$$

其中 A 是重构过程, C 是反演.

文献[2]利用原函数重构思想构建了一种具有三阶精度、能保证函数正定性和最大值定理的斜率修正重构格式. 该格式应用于本文中的控制方程可写为

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{G}}_h^n(x) = & \bar{\mathbf{G}}_i^n + \frac{\theta_i^+}{6\Delta x^2} [2(x - x_i)(x - x_{i-3/2}) + \\ & (x - x_{i-1/2})(x - x_{i+1/2})] (\bar{\mathbf{G}}_{i+1}^n - \bar{\mathbf{G}}_i^n) - \\ & \frac{\theta_i^-}{6\Delta x^2} [2(x - x_i)(x - x_{i+3/2}) + (x - x_{i-1/2})(x - x_{i+1/2})] (\bar{\mathbf{G}}_i^n - \bar{\mathbf{G}}_{i-1}^n), \end{aligned} \quad (23)$$

其中, 斜率修正因子为

$$\theta_i^\pm = \begin{cases} \min\left(1, \frac{2\bar{\mathbf{G}}_i^n}{\bar{\mathbf{G}}_{i\pm 1}^n - \bar{\mathbf{G}}_i^n}\right), & (\bar{\mathbf{G}}_{i\pm 1}^n - \bar{\mathbf{G}}_i^n) > 0, \\ \min\left(1, \frac{-2(\bar{\mathbf{G}}_\infty^n - \bar{\mathbf{G}}_i^n)}{\bar{\mathbf{G}}_{i\pm 1}^n - \bar{\mathbf{G}}_i^n}\right), & (\bar{\mathbf{G}}_{i\pm 1}^n - \bar{\mathbf{G}}_i^n) < 0, \end{cases} \quad (24)$$

其中 $\bar{\mathbf{G}}_\infty^n = \max\{\bar{\mathbf{G}}_i^n\}$.

这种重构技术得到的近似分布函数 $\tilde{\mathbf{G}}_h^n(x)$ 满足以下关系:

1) 平均值守恒: 对于所有的空间位置 i 满足

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \tilde{\mathbf{G}}_h^n(x) dx = \Delta x \bar{\mathbf{G}}_i^n;$$

2) 最大值理论: 对于所有的 $x \in [x_{\min}, x_{\max}]$ 而言,

$$0 \leq \tilde{\mathbf{G}}_h^n(x) \leq \bar{\mathbf{G}}_\infty^n.$$

因此式(21)中的 $\mathbf{G}_{i+1/2}^L$ 和 $\mathbf{G}_{i+1/2}^R$ 可以这样计算:

$$\mathbf{G}_{i+1/2}^L = \tilde{\mathbf{G}}_h^n(x_{i+1/2}), \mathbf{G}_{i+1/2}^R = \tilde{\mathbf{G}}_h^n(x_{i+1/2}). \quad (25)$$

式(20)的右端碰撞项采用中心近似技术^[4]进行处理:

$$\frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} (\nu_r \mathbf{G}^r + \nu_l \mathbf{G}^l - (\nu_r + \nu_l) \mathbf{G}) dx = \nu_{r,i} \mathbf{G}_i^r + \nu_{l,i} \mathbf{G}_i^l - (\nu_{r,i} + \nu_{l,i}) \tilde{\mathbf{G}}_h^n(x_i). \quad (26)$$

这样,半离散化的有限体积格式为

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{G}}_i^n}{\partial t} = \text{RHS}(\bar{\mathbf{G}}_i^n) = - \frac{\tilde{\mathbf{F}}_{i+1/2}^n - \tilde{\mathbf{F}}_{i-1/2}^n}{\Delta x} + \nu_{r,i} \mathbf{G}_i^r + \nu_{l,i} \mathbf{G}_i^l - (\nu_{r,i} + \nu_{l,i}) \tilde{\mathbf{G}}_h^n(x_i). \quad (27)$$

2.2 Runge-Kutta 时间推进方法

半离散化的有限体积格式在时间上采用 TVD 型三阶 Runge-Kutta 方法推进^[16]:

$$\mathbf{G}_i^1 = \bar{\mathbf{G}}_i^n + \Delta t \cdot \text{RHS}(\bar{\mathbf{G}}_i^n), \quad (28)$$

$$\mathbf{G}_i^2 = \frac{3}{4} \bar{\mathbf{G}}_i^n + \frac{1}{4} [\mathbf{G}_i^1 + \Delta t \cdot \text{RHS}(\mathbf{G}_i^1)], \quad (29)$$

$$\bar{\mathbf{G}}_i^{n+1} = \frac{1}{3} \bar{\mathbf{G}}_i^n + \frac{2}{3} [\mathbf{G}_i^2 + \Delta t \cdot \text{RHS}(\mathbf{G}_i^2)]. \quad (30)$$

该数值计算格式的稳定性条件为

$$\Delta t \cdot \left(\max(\nu_{r,i} + \nu_{l,i}) + \max\left(\frac{|\xi_x|}{\Delta x}\right) \right) < 1. \quad (31)$$

3 数值计算结果分析

为了验证有限体积格式在考虑转动非平衡影响的 Boltzmann-Rykov 模型方程数值计算中的适应性,作者开展一维非定常激波管氮气内流动问题模拟研究.

首先,氮气的激波管内流动问题可以这样描述:在(0,1)的计算区域内, $x = 0.5$ 处设置一个隔膜使整个流场一分为二,左右两边初始状态不一样但均处于平衡状态, $t = 0$ 时刻隔膜突然破裂,计算此后任意时刻的流场状态.

| | |
|-----------------------|--------------------|
| $0.0 \leq x \leq 0.5$ | $0.5 < x \leq 1.0$ |
|-----------------------|--------------------|

对于 Sod 问题,设置初始时刻激波管内的宏观量为

当 $0.0 \leq x \leq 0.5$ 时, $\rho = 10.0, T = 1.667, U = 0.0,$

当 $0.5 < x \leq 1.0$ 时, $\rho = 1.0, T = 1.333, U = 0.0.$

所关心的时刻设置在 $t = 0.1912$.

Knudsen 数 $Kn = \lambda/L$ 表征气体流动的稀薄程度, $Kn = 0.1$ 对应于稀薄过渡流动,而 $Kn = 0.001$ 时可认为流动处于连续流区.整个流动过程是非定常运动过程,残差收敛趋势可以间接表明数值计算的稳定性.图 1 给出了 $Kn = 0.1$ 和 $Kn = 0.001$ 时数值模拟过程的残差收敛曲线,其中残差‘residual-error’为相继两步计算密度变化的平均值.图 1 中残差随着时间推进是稳定而缓慢地减少,这说明整个数值计算过程是稳定的.图 2 详细描述了 $t = 0.1912$ 时刻 $x = 0.5$ 位置处分布函数值随速度的变化情况,能够看到分布函数值集中在一定速度范围内,在速度的绝对值较大时趋近于 0,且不会有负分布函数值,因此分布函数的正定性得到保证.

图 3 给出了 $Kn = 0.1$ 和 $Kn = 0.01$ 时有限体积与有限差分两种数值格式计算得到 $t = 0.1912$ 时刻一维激波管内的无量纲密度分布,而图 4 中则是 $Kn = 0.001$ 的连续流区密度分布曲线,其

中有限体积与有限差分方法均采用相同的时间步长和空间网格划分(如当 $Kn = 0.1$ 时,取满足格式稳定条件的时间步长 $\Delta t = 2.0 \times 10^{-5}$;当 $Kn = 0.001$ 时,取 $\Delta t = 0.8 \times 10^{-5}$;空间网格距离 $\Delta x = 5.0 \times 10^{-3}$)。可以看出,随着气体稀薄程度的降低,激波管内密度分布曲线越来越趋近于连续流区的 Riemann 理论解,说明流动随着 Knudsen 数的减小体现出更多的连续流动特征:激波厚度越来越小,密度曲线斜率变化更加剧烈,同时,有限差分格式与有限体积格式的计算结果基本一致,在 $Kn = 0.001$ 的连续流区与 Riemann 理论解非常接近,说明二者的数值求解过程均正确再现了一维 Boltzmann-Rykov 模型方程所描述的物理现象,且实现过程是正确的。图 4 中的局部放大图能够看到有限体积格式的计算结果更接近 Riemann 理论值,说明采用三阶重构方法与中心近似技术的有限体积格式对一维问题的计算精度略高于二阶精度的有限差分 NND 格式。这种差异应该是格式精度提高引起的(高精度格式对于捕捉激波等间断特征更加有效),因为对于间断特征不明显的状态(如图 3 所示)有限体积与有限差分格式的计算结果完全一致。

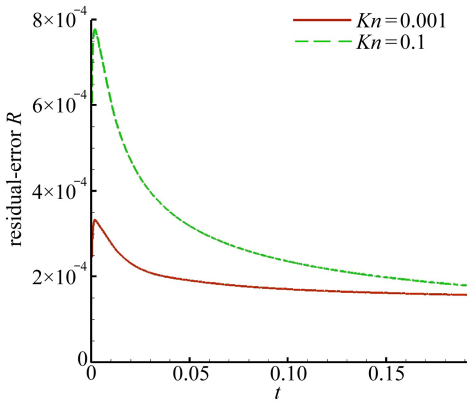


图 1 $Kn = 0.1$ 和 $Kn = 0.001$ 时有限体积数值计算的残差收敛曲线

Fig.1 Convergences curves of residual errors by finite volume scheme when $Kn = 0.1$ and $Kn = 0.001$

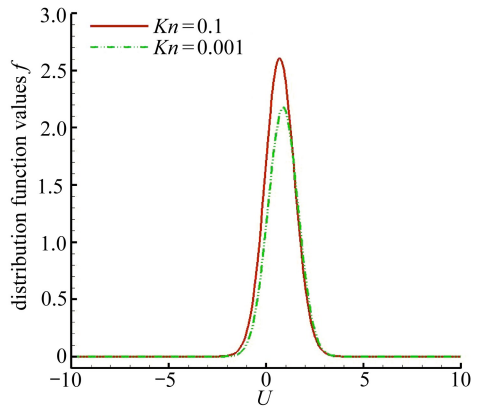
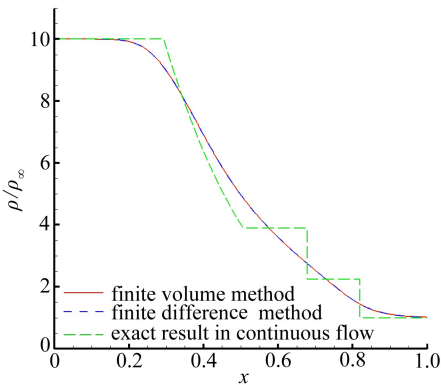
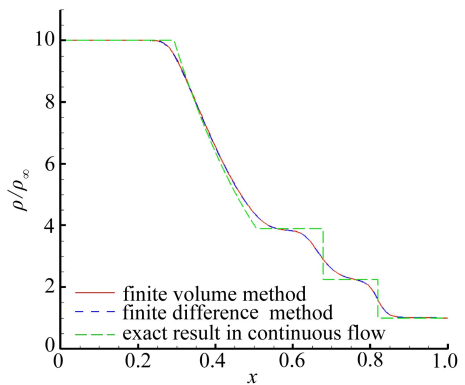


图 2 $t = 0.191 2$ 时刻 $x = 0.5$ 位置处的分布函数值随速度的变化情况

Fig.2 Variation of distribution function with velocity values at $x = 0.5$ when $t = 0.191 2$



(a) $Kn = 0.1$



(b) $Kn = 0.01$

图 3 $Kn = 0.1$ 和 $Kn = 0.01$ 时有限体积与有限差分格式得到激波管内密度分布

Fig.3 Density distribution in the shock-tube by finite volume scheme and finite difference scheme when $Kn = 0.1$ and $Kn = 0.01$

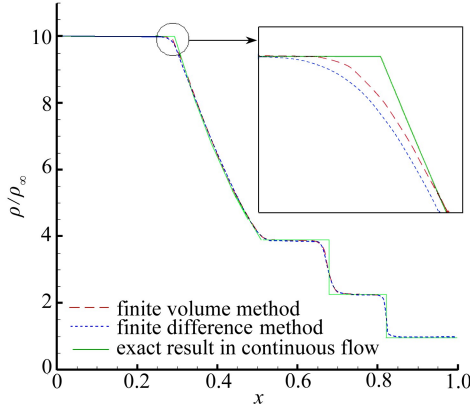


图4 $Kn = 0.001$ 时有限体积与有限差分格式得到激波管内密度分布比较

Fig.4 Density distribution in the shock-tube by finite volume scheme and finite difference scheme when $Kn = 0.001$

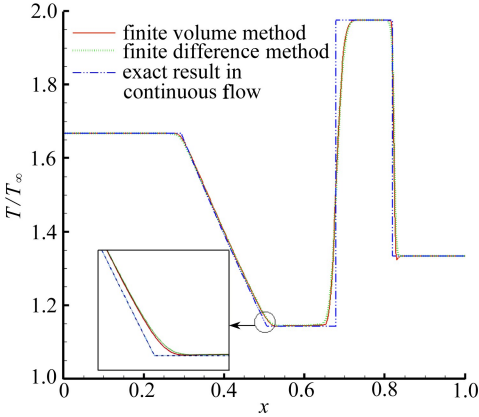


图5 $Kn = 0.001$ 时激波管内温度分布

Fig.5 Temperature distribution in the shock-tube when $Kn = 0.001$

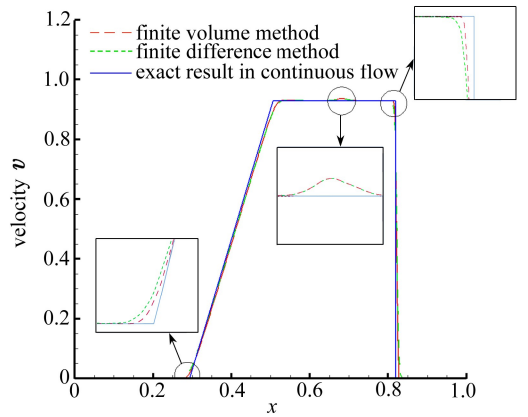


图6 $Kn = 0.001$ 时激波管内速度分布

Fig.6 Velocity distribution in the shock-tube when $Kn = 0.001$

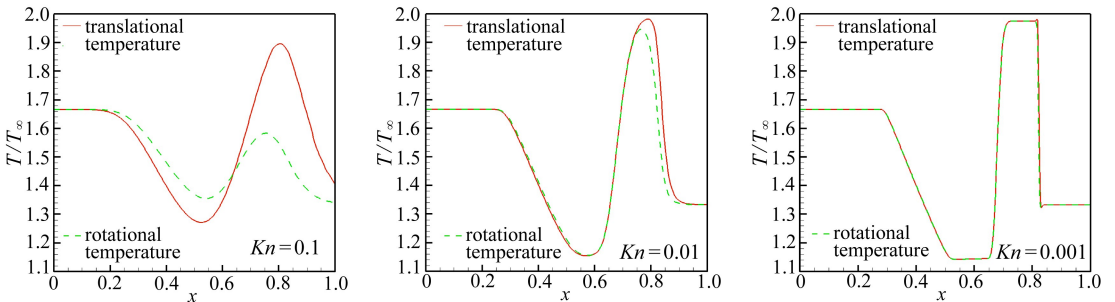


图7 有限体积格式计算不同 Kn 数激波管内流场的平动、转动温度分布

Fig.7 Translational and rotational temperature distributions in the shock-tube by finite volume scheme with different Knudsen numbers

图5、图6中分别描述了 $Kn = 0.001$ 的连续流区一维激波管内流动无量纲温度、速度分布曲线,与 Riemann 理论解的比较也体现了有限体积格式实现的正确性,同时说明本文采用的三阶有限体积格式计算精度优于二阶有限差分 NND 格式.图7列出不同 Knudsen 数条件下有限体积格式计算得到的激波管内流动平动温度 T_t 和转动温度 T_r 的分布.平动温度和转动温度的

分布曲线体现了流动的非平衡特性,从图 7 中看出, $Kn = 0.1$ 时的稀薄流动中平动温度与转动温度分布曲线差异较大,表现出较大的转动非平衡特性,而随着 Knudsen 数的减小,气体流动趋近于连续流,此时流场中的转动非平衡效应越来越弱,流动趋近于平衡状态.因此,在稀薄过渡流区双原子气体流动中考虑转动非平衡效应的影响格外重要.此外,图中明显看出稀薄过渡流区的转动温度变化略滞后于平动温度,这是气体分子相互作用的特性.

4 结 论

引入有限体积方法数值计算 Boltzmann-Rykov 模型方程,应用离散速度坐标方法对速度空间进行积分离散,在位置空间采用三阶精度重构格式的有限体积方法,碰撞项采用重构以后的中心近似技术,时间上应用 Runge-Kutta 时间推进方法,数值计算非定常激波管内流动特性.流场参数与连续流区 Riemann 理论解和有限差分 NND 格式数值计算结果对比吻合较好,说明在稀薄流到连续流的气体运动论统一算法中应用有限体积格式是正确的.计算结果正确体现了激波管的内部流动特征,且该三阶有限体积方法精度略高于二阶 NND 差分格式,并保证了分布函数的正定性和守恒定律.

参考文献 (References):

- [1] Bird G A. Approach to translational equilibrium in a rigid sphere gas[J]. *Phys Fluids*, 1963, **6**: 1518-1519.
- [2] Filbet F, Russo G. High order numerical methods for the space non-homogeneous Boltzmann equation[J]. *Journal of Computational Physics*, 2003, **186**(2): 457-480.
- [3] 李志辉, 吴振宇. 阿波罗指令舱稀薄气体动力学特征的蒙特卡罗数值模拟[J]. 空气动力学学报, 1996, **14**(2): 230-233. (LI Zhi-hui, WU Zhen-yu. Monte-Carlo numerical simulation of rarefied aerodynamic characters for Apollo spacecraft[J]. *Acta Aerodynamica Sinica*, 1996, **14**(2): 230-233. (in Chinese))
- [4] Mieussens L. Discrete velocity model and implicit scheme for the BGK equation of rarefied gas dynamics[J]. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 2000, **10**(8): 1121-1150.
- [5] Bird G A. *Molecular Gas Dynamics*[M]. Oxford: Clarendon Press, 1976.
- [6] 沈青. DSMC 方法与稀薄气流计算的发展[J]. 力学进展, 1996, **26**(1): 1-13. (SHEN Qing. DSMC method and the calculation of rarefied gas flow[J]. *Advances in Mechanics*, 1996, **26**(1): 1-13. (in Chinese))
- [7] Bobylev A V, Cergignani C. Exact eternal solutions of the Boltzmann equation[J]. *Journal of Statistical Physics*, 2002, **106**(5/6): 1019-1038.
- [8] Kolobov V I, Bayuk S A. Construction of a unified continuum/kinetic solver for aerodynamic problems[J]. *Journal of Spacecraft and Rockets*, 2005, **42**(4): 598-606.
- [9] Cheremisin F G, Agarwal R K. Computation of hypersonic shock structure in diatomic gases with rotational and vibrational relaxation using the generalized Boltzmann equation[C]//46th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, 2008. doi: 10.2514/6.2008-1269.
- [10] LI Zhi-hui, ZHANG Han-xin. Study on gas kinetic unified algorithm for flows from rarefied transition to continuum[J]. *Journal of Computational Physics*, 2004, **193**(2): 708-738.
- [11] LI Zhi-hui, ZHANG Han-xin. Numerical investigation from rarefied flow to continuum by solving the Boltzmann model equation[J]. *International Journal for Numerical Methods in Flu-*

- ids*, 2003, **42**(4): 361-382.
- [12] ZHENG Ying-song, Struchtrup H. Ellipsoidal statistical Bhatnagar-Gross-Krook model with velocity-dependent collision frequency[J]. *Physics of Fluids*, 2005, **17**(12): 103-127.
- [13] 李志辉, 张涵信. 稀薄流到连续流的气体运动论统一数值算法初步研究[J]. 空气动力学学报, 2000, **18**(3): 255-263. (LI Zhi-hui, ZHANG Han-xin. Study on gas kinetic algorithm for flows from rarefied transition to continuum[J]. *Acta Aerodynamica Sinica*, 2000, **18**(3): 255-263. (in Chinese))
- [14] Rykov V A. Model kinetic equation of a gas with rotational degrees of freedom[J]. *Fluid Dynamics*, 1975, **10**(6): 959-966.
- [15] Rykov V A, Titarev V A, Shakhov E M. Shockwave structure in a diatomic gas based on a kinetic model[J]. *Fluid Dynamics*, 2008, **43**(2): 316-326.
- [16] 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. (ZHANG Han-xin, SHEN Meng-yu. *Computational Fluid Dynamics: Principles of Differential Methods and Applications* [M]. Beijing: National Defence Industry Press, 2003. (in Chinese))

Calculation of Boltzmann-Rykov Model Equation by Finite Volume Method

WU Jun-lin¹, LI Zhi-hui^{1,2}, PENG Ao-ping¹, JIANG Xin-yu¹

- (1. *Hypervelocity Aerodynamics Institute, China Aerodynamics Research and Development Center, Mianyang, Sichuan 621000, P.R.China;*
2. *National Laboratory for Computational Fluid Dynamics, Beijing 100191, P.R.China*)

Abstract: A three order precision finite volume scheme was formulated to numerically solve the Boltzmann-Rykov model equation in which rotational energy was considered. This model equation was discretized into a series of equations at each discrete velocity point, and then a high order half-discretization finite volume scheme was used to compute these equations. Three order Runge-Kutta method was introduced for time marching, and central value in each cell was taken to approximate the average collision term. This finite volume scheme was of three order precision in convection term, while positive definiteness of the distribution functions and flux conservation were ensured. Results were compared with those of finite difference method and Riemann exact solution in continuum regime. The good coincidence shows validity of the solving process for the model equation by finite volume method.

Key words: Rykov model equation; gas kinetic unified algorithm; finite volume method

Foundation item: The National Natural Science Foundation of China (91016027); The National Basic Research Program of China (973 Program) (2014CB744100)