

Boltzmann 方程求解方法综述*

陈伟芳 吴其芬

(国防科技大学航天技术系 长沙 410073)

摘要 本文论述了 Boltzmann 方程的求解方法, 在分析了各类求解方法的优缺点之后指出目前 Monte-Carlo 直接模拟方法是解决稀薄气体动力学问题的最佳方法。

关键词 稀薄气体动力学、Boltzmann 方程、Monte-Carlo 直接模拟方法

分类号 V211.25

Methods for Solving Boltzmann Equation

Chen Weifang Wu Qifen

(Department of Aerospace Technology, NUDT, Changsha, 410073)

Abstract Various methods for solving Boltzmann equation are discussed in this paper. After analyzing the advantages and shortcomings of each method, it is shown that at present the direct simulation Monte-Carlo method is the best approach to solving rarefied gas dynamic problems.

Key words rarefied gas dynamics, Boltzmann equation, direct simulation Monte-Carlo method

稀薄气体流动的控制方程是 Boltzmann 方程^[1]。由于非线性 Boltzmann 方程的复杂性, 解析求解极其困难, 时至今日仅得到以 Maxwell 平衡分布为代表的少数几个解析解^[1]。此外, 稀薄气体动力学领域的试验理论与手段尚不完备, 试验费用昂贵, 稀薄气体动力学问题的试验研究极为不易。如何快速有效地求解稀薄气体的流动问题, 一直是对流体力学研究工作者的挑战。

1 Boltzmann 方程的近似解法^[1, 2]

矩方程方法 这种方法假设分子速度分布函数 $f(t, X, \xi)$ 可展开为包含待求系数 $a_j(X, t)$ 的形式, 亦即 $f(t, X, \xi) = \sum_{j=1}^N a_j(X, t) \Psi_j(\xi)$, 其中 t 为时间, X 为位置坐标, ξ 为分子速度。将上述展开式代入 Boltzmann 方程便可得到由 N 个矩方程组成的求解 N 个未知函数 $a_j(X, t)$ 的封闭方程组。在一定条件下可用数值方法解此方程组, 得到分子速度分布函数展开式中待求系数的数值。Chapman-Enskog 解^[3]是矩方程方法中最重要的代表。Chapman-Enskog 解的最主要成果是: 其零阶解、一阶解和二阶解分别是 Euler 方程、Navier-Stokes 方程和 Burnett 方程, 并给出了气体输运系数的公式表达。这些结果充分说明 Boltzmann 方程对气体流动的描述的确比流体力学方程组深刻得多。其它的矩方程方法有 Grad 矩方程方法^[10]和 Mott-Smith 的双态矩方程方法^[12]等。矩方程方法是近似求解 Boltzmann 方程的一种有效方法, 并发挥过重要的作用, 但是由于方法本身固有的局限性, 应用并不广泛。矩方程方法的局限性主要在于: 一是预先假定的分子速度分布函数级数展开式的不可预测性和随意性; 二是由于大多数矩方程方法速度分布函数级数展开式中的待求系数物理意义不明确, 给确定待求系数方程组的定解条件带来了困难。

离散速度坐标方法 离散速度坐标方法的基本思想类似于矩方程方法。这一方法是将速度空间划分成 N 个区域 $\Delta\xi_i, i = 1, 2, \dots, N$, 且认为每一区域速度都用相应区域 $\Delta\xi_i$ 内的某一特定速度 ξ_i 代表, 并

* 1998 年 11 月 25 日修订

第一作者: 陈伟芳, 男, 1970 年生, 博士

用 $\psi_i = \delta(\xi - \xi_i) \Delta \xi_i$ 作为基函数, 然后采用与矩方程方法类似的解法求得 Boltzmann 方程的近似解。

模型方程方法 Boltzmann 方程右端的碰撞积分项不仅是非线性的, 而且积分是在三维无限速度空间和整个立体角上进行, 求解 Boltzmann 方程的最大困难就在于碰撞积分项的计算。于是, 构造一种简单合理的碰撞模型代替 Boltzmann 方程中的碰撞积分项, 便成为模型方程方法的基本思想。这其中最富盛名的就有 BGK 模型方程方法^[2]。理论上还可以建立包含更多待定参量的模, 使得 $M(f)$ 与 Boltzmann 方程的碰撞项有更多的矩相等。但由于模的形式太复杂, 实用价值不大。实际上, 模型方程方法中简化 Boltzmann 方程碰撞积分项的这种随意性导致了方法本身的不确定性。由模型方程方法得到的近似解是否与物理实际一致仍需要检验。能够使用模型方程方法求解 Boltzmann 方程的范围是有限的。

2 Boltzmann 方程的 Monte-Carlo 解法^[2]

Monte-Carlo 有限差分方法 Nordstieck^[13] 和 Yen^[14] 等人提出应用 Monte-Carlo 抽样技术计算 Boltzmann 方程中的碰撞积分项, 应用有限差分离散 Boltzmann 方程的微分项, 建立了求解 Boltzmann 方程的 Monte-Carlo 有限差分方法。Monte-Carlo 有限差分方法要求在位置空间的每一个有限差分网格点上定义速度空间单元的划分。采用 Monte-Carlo 有限差分方法求解最简单的稀薄气体一维定常流动问题, 也需要存贮三维空间点的数据才能实行运算。这与三维流体力学的差分方法相当, 数值模拟是相当复杂的。在另一方面, 速度空间域是无限的, 需要对速度空间进行截断。这仅仅在预测到位于截断边界之外的分子数密度是可忽略时才能办到, 因此对速度空间的截断是困难的。采用 Monte-Carlo 有限差分方法求解 Boltzmann 方程将遇到的第三个困难是: 使用 Monte-Carlo 方法计算碰撞积分项所需要的计算机时正比于速度空间单元数的平方。仅从计算效率角度考虑, 采用 Monte-Carlo 有限差分方法求解 Boltzmann 方程至少在现阶段仍是不可取的。

质点 Monte-Carlo 方法 质点 Monte-Carlo 方法的基本思想是逐个地跟踪大量分子的运动轨迹, 然后根据分子运动状态的统计平均结果得到宏观量的变化规律。因此质点的 Monte-Carlo 方法也称为试验粒子法。质点 Monte-Carlo 方法在稀薄气体动力学问题的早期应用, 仅仅限于计算自由分子流向真空中膨胀、管道内的自由分子流动等这一类不需考虑分子间碰撞、分子速度分布函数沿分子轨道守恒的问题。由于分子间无碰撞, 不互相影响, 因此可以逐个随机抽样组成气体的分子, 并跟踪抽样得到的分子的运动轨迹, 最后对大数目的抽样分子行为进行统计, 实现对这一组元分子集体表现的描述。把质点 Monte-Carlo 方法应用于过渡区域稀薄气体动力学问题时将面临困难, 此时整个流场的速度分布函数 $f(t, X, \xi)$ 必须通过迭代方法得到, 因而需要巨大的计算机内存和机时。

分子动力学方法 Alder 和 Wainwright^[5] 在质点 Monte-Carlo 方法的基础上, 提出了适用于求解过渡流的分子动力学方法。它的基本思想是: 用大量的仿真分子的运动代替真实气体的运动, 且认为当两个运动分子间的距离小于一定值时将发生碰撞, 碰撞后分子运动速度按经典力学的规律计算得到。分子动力学方法对实验粒子方法的改进在于同时跟踪大量分子的运动, 并进行分子碰撞的计算。除了初始建立仿真分子的速度分布和空间分布采用了随机抽样技术之外, 分子动力学方法完全是决定论的。这种方法的优点在于: 只要气体的初始状态给定, 就能够计算所有的 Knudsen 数下的气体运动, 包括稠密气体和液体。但是采用这种方法模拟任意一个分子的运动时, 都要考虑到所有其余气体分子的运动以发现是否有可能与其发生碰撞, 于是模拟所需的计算机时正比于仿真分子数的平方, 因此通常分子动力学方法所用的仿真分子数都不能太大, 限制了这一方法的应用范围。

Monte-Carlo 直接模拟 (DSMC) 方法 Bird^[6] 注意到分子动力学方法的主要缺点在于采用了决定论方法判断分子间碰撞, 这种决定论方法即不是 Monte-Carlo 方法所需要的, 又耗费大量机时。Bird 提出采用概率论方法判断分子间碰撞, 建立了 DSMC 方法, 并首次应用于求解稀薄气体的松弛 (Relaxation) 问题。DSMC 方法的基本要点可以简述成: 用有限个仿真分子代替真实气体分子, 并在计算机中存储仿真分子的位置坐标、速度分量以及内能, 其值随仿真分子的运动、与边界的作用以及仿真分子之间的碰撞改变, 最后通过统计网格内仿真分子的运动状态实现对真实气体流动问题的模拟。所有

模拟都是在时间进程中实现,定常流是长时间模拟后稳定状态的统计平均结果。与 Boltzmann 方程一样,DSMC 方法同样要求分子浑沌和稀薄气体假设,并通过相同的物理机理得到。Bird^[6]应用数学推导论证了 DSMC 方法与 Boltzmann 方程的一致性。发端于分子动力学方法的 DSMC 方法,并不直接求解 Boltzmann 方程,而是模拟该方程所描述的物理过程。由于 DSMC 方法的物理模拟本质,使得在 DSMC 方法中能够较为容易地引入更真实的模型实现对复杂的物理化学过程的描述。因此 DSMC 方法不仅能够较为容易地模拟直到三维稀薄气体流动的复杂流场,而且能够真实地模拟包括有热化学非平衡反应以及热辐射等物理化学过程在内的稀薄气体流动问题。这是直接数值求解 Boltzmann 方程方法所不能比拟的。经过近 30 年的研究,DSMC 方法在稀薄气体动力学学科中获得了广泛的应用,DSMC 方法也趋于成熟,成为数值求解稀薄气体力学问题唯一获得巨大成功的方法。

3 高温稀薄气体热化学反应流动 DSMC 方法的研究现状

高温稀薄气体流动中存在着丰富多采的热化学反应现象,构造分子内自由度能量激发和松弛以及各类化学反应的 DSMC 方法模拟模型,成为稀薄气体动力学最为重要的研究课题。经过多年的不懈努力,在热化学反应流 DSMC 方法的研究方面获得了相当丰硕的成果。

在分子作用势的模拟方面,最先采用的是硬球 (Hard Sphere) 模型,它所定义的分子称为硬球分子。硬球分子恒定不变的分子直径和碰撞截面简化了理论分析与数值计算,但它与真实分子碰撞截面随分子间相对运动速度变化而变化的物理事实并不符合。由此,也给 DSMC 方法的数值模拟带来误差。针对硬球模型的缺陷,Bird^[15]提出可变硬球 (Variable Hard Sphere) 模型,保持硬球模型具有的简单散射律的特点,而允许分子碰撞截面随碰撞分子的相对运动速度变化而变化。VHS 模型没有考虑到气体分子结构中大量存在的非对称性所导致的分子散射的非对称性,分子扩散碰撞截面与粘性碰撞截面之比仍遵循硬球模型值。Koura^[16]等人提出可变软球 (Variable Soft Sphere) 模型克服了 VHS 模型的缺陷,使得分子扩散碰撞截面与粘性碰撞截面之比值同实际值相等。虽然 VHS 模型和 VSS 模型相对于硬球模型来说,在仿真分子作用势方面前进了一步,采用负幂律分子作用势取代了硬球分子作用势,但它们与硬球模型相类似,都没有考虑到气体分子间吸引力的影响。为了更精确地模拟气体分子之间的作用势,Hassan^[17]等人在 VHS 模型和 VSS 模型的基础上提出了广义硬球 (Generalized Hard Sphere) 模型,它仍然保持 VHS 模型或 VSS 模型的散射分布律,但分子碰撞截面依相对运动速度的变化却相应于 Lennard-Jones 分子作用势。

在气体分子转动和振动自由度激发和松弛的模拟方面,大多采用与 VHS 模型相适应的 Larsen-Bergnakke (L-B) 模型^[7],模拟碰撞过程中平动、转动、振动自由度间的能量交换。由于振动自由度 ζ_{ib} 为温度的函数,在采用 L-B 模型单独考察振动能松弛时存在有奇异性。为了解决模型奇异性带来的困难,沈青等人^[4]发展了一种推广的集累分布—取舍联合抽样方法,给出了有单奇异性或双奇异性分布的抽样方法,克服了上述困难。McDonald^[11]提出模拟碰撞传能的另一种方法。他将平动能与振动能间的能量传递分解为平动能与转动能传能和转动能与振动能传能两个能量传递过程,实现了平动能与振动能间能量传递的 DSMC 方法模拟。在 McDonald 构造的平动能与振动能的传能模型中,气体分子所有自由度的能量都参与了能量交换。在 DSMC 方法仿真分子转动能、分子振动能激发与松弛的早期阶段,通常将气体分子转动能及振动能激发的抽样几率处理成常数。这与它们依赖于温度和压力的实际不相符。Boyd^[8,9]发展了分子平动与转动、平动与振动之间的能量交换模型,将转动能激发与振动能激发的抽样几率都处理成分子相对运动速度 g 的函数,并使得由 DSMC 方法模拟得到的转动能与振动能的松弛时间与实验数据一致。但是这种与相对运动速度 g 相关的抽样几率函数导致了能量分布函数的偏移,破坏了气体分子的能量均分原理。于是在 DSMC 方法模拟中要求将本质上为瞬态的转动能或振动能激发抽样几率对时间步长中一个网格内的所有碰撞分子对求平均。

空间技术和化学工艺过程遇到的稀薄气体流动往往包含很复杂的化学反应,如高温空气中就包含有 N_2 、 O_2 、 NO 、 N 、 O 等成分离解、复合、置换、合并式电离、电子碰撞电离、电荷交换反应等。在 DSMC 方法模拟中,化学反应通常是与分子内自由度松弛过程耦合在 VHS (或 VSS, GHS) 模型以

及 L-B 模型的基础上加以模拟。基于分子碰撞引起的化学反应的随机性本质, Bird^[6]率先提出了处理化学反应的位阻因子 (或称化学反应几率方法), 并获得成功。在该方法中, 碰撞分子发生化学反应的几率由化学反应速率推导得到。这种基于化学反应碰撞理论的位阻因子方法, 只能再现连续介质中得到的化学反应速率常数实验数据, 不可能反映所描述现象的更为本质的物理机制。最近, 沈青^[4]等人发展了一种依赖气体分子空间取向的化学反应模型, 考察了双原子分子在碰撞中作用于化学键的力的平衡, 并导出了化学反应速率常数表达式。

应用 DSMC 方法模拟高温稀薄气体热化学非平衡流动的研究取得了长足的进展, 模型和方法日趋成熟。也必须看到, 由于热化学非平衡过程物理机理的复杂性、模型的唯一论特征以及一些参数的任意性, 现有的仿真分子热化学非弹性碰撞的 DSMC 方法还存在许多缺陷。因此通过在分子水平上的碰撞物理过程的深入分析, 改进已有的和重新设计一些模拟内能松弛、化学反应和电离的模型将是 DSMC 方法发展中非常活跃的内容。

4 结束语

DSMC 方法除了在航天技术领域的应用之外, 还可以在激光技术、原子能技术、高温等离子体化工等高技术领域的许多研究中起重要的数值实验作用。DSMC 方法对物理现象的直接模拟而不是从某一数学物理方程出发求解的思想, 现在看来已不是缺点, 反而使得 DSMC 方法在求解许多目前尚无明确数学提法的问题时发挥越来越重要的作用。

参考文献

- 1 黄祖洽、丁鄂江. 输运理论. 北京: 科学出版社, 1987
- 2 应纯同. 气体输运理论及应用. 北京: 清华大学出版社, 1990
- 3 查普曼 S. 和考林 T. G., 非均匀气体中的数学理论. 刘大有、王伯懿译. 北京: 科学出版社, 1985
- 4 沈青. DSMC 方法与稀薄气流计算的发展, 力学进展, 1996, 26 (1)
- 5 Alder B J and Wainwright T E. Transport Processes In: Prigogine I. ed. Statistical Mech. 1958: 99-131
- 6 Bird G A. Molecular Gas Dynamics. Clarendon Press, Oxford, 1976
- 7 Borgnakke C and Larsen P S. Statistical Collision Model for Monte Carlo Simulation of Polyatomic Gas Mixture. Journal of Computational Physics 1975. 18: 405~420
- 8 Boyd I D. Rotational-Translational Energy Transfer in Rarefied Nonequilibrium Flows. Physics of Fluids A 2 1990: 447~452
- 9 Boyd I D. Analysis of Vibrational-Translational Energy Transfer Using the Direct Simulation Monte Carlo Method. Physics of Fluids A3 1991: 1785~1791
- 10 Grad H. On the Kinetic Theory of Rarefied Gases. Pure Appl. Math., 1949, 5
- 11 McDonal J D. A Computationally Efficient Particle Simulation Method Suited to Vector Computer Architectures. Ph. D. Thesis, Dept of Aeronautics and Astronautics, Stanford University, 1989
- 12 Mott-Smith H M. The Solution of the Boltzmann Equation for a Shock Wave, Phys. Rev., 1952, 82: 885-892
- 13 Nordsieck A and Hicks B L. Monte-Carlo Evaluation of the Boltzmann Collision Integral, In: Rarefied Gas Dynamics, ed. Brundin C L. Academic Press, New York: 695~710
- 14 Yen S M. Monte Carlo Solutions of Nonlinear Boltzmann Equation for Problems of Heat Transfer in Rarefied Gases, Int. J. Heat Mass Transfer, Vol. 14: 1865~1869
- 15 Bird G A. AIAA paper 1986: 86~1310
- 16 Koura K and Matsumoto H. Phys. Fluids, 1991, A3: 2459~65
- 17 Hassan H A and Hash D B. Phys. Fluids, 1993, A5: 738~744