

Shakhov-BGK 和 ES-BGK 模型松弛性能分析

高巍, 孙泉华

(中国科学院力学研究所高温气体动力学国家重点实验室, 北京海淀区 100190)

摘要 本文通过数值计算讨论了 Boltzmann 方程 Shakhov-BGK 模型和 ES-BGK 模型的松弛性能。选取了两个典型的非平衡松弛问题, 通过与直接模拟 Monte Carlo 方法 (DSMC) 的计算结果进行比较, 分析了 Shakhov-BGK 模型和 ES-BGK 模型的松弛性能。在非平衡不强烈时, Shakhov-BGK 模型对分布函数有较好的预测能力。相比 BGK 模型, Shakhov-BGK 模型能准确的预测质量半通量, 同时在偏离平衡态不远时, 对三阶矩、动量和能量半通量也有一定预测能力。在本文算例中, ES-BGK 模型对分布函数的预测相对 DSMC 有较大偏差, 主要原因是分量的分布函数过度依赖于另两个分量, 而对它自身的加权不足。

关键词 Shakhov-BGK 模型, ES-BGK 模型, BGK 模型, DSMC, 松弛性能

引言

玻尔兹曼 (Boltzmann) 方程描述分子运动的速度分布函数随时间和空间的演化, 通常认为是分析流体运动的微观控制方程[1]。玻尔兹曼方程在形式上是一个七维的微分积分方程, 而求解该方程的最大挑战是碰撞项难以精确求解。在实际应用中, 玻尔兹曼方程往往作简化处理, 目前最常用的简化模型是 BGK 模型[2]。在 BGK 模型中, 碰撞项由一个速度分布函数向平衡分布的松弛过程来描述, 大大降低了原始玻尔兹曼方程的求解难度。

然而 BGK 模型有一个固有缺陷, 由其推导得到的 Pr 数恒为 1, 这与实际情况不符。为此文献中提出了许多模型用以修正 BGK 模型的 Pr 数, 主要思想和方法是调整模型方程中的松弛平衡状态。如 ES-BGK 模型[3]用一个高斯分布取代麦克斯韦分布作为模型的松弛平衡状态。通过调整模型中的自由参数, ES-BGK 模型可以描述任意 Pr 数的流动。另外 ES-BGK 模型的高斯分布具有的保正性质使它很受欢迎。Shakhov-BGK 模型[4]是另一个被经常使用的修正 BGK 模型。它保持二阶及以下阶矩与 BGK 模型一致, 通过修正热流来得到正确的 Pr 数。

Shakhov-BGK 模型的一个明显缺陷是可能会出现负分布函数。

尽管 ES-BGK 模型和 Shakhov-BGK 模型能得到正确的 Pr 数, 但这两个模型在什么情况下是合理的, 碰撞项的误差是多少, 这些基本问题在文献中还没有得到回答。

本文工作采用数值模拟分析 Boltzmann 方程碰撞项随时间的松弛过程, 通过比较 ES-BGK、Shakhov-BGK 模型方程的数值解与直接模拟 Monte Carlo 方法的计算结果, 讨论 ES-BGK 模型与 Shakhov-BGK 模型的性能。

1 数值方法

1.1 ES-BGK 和 Shakhov-BGK 模型方程及离散忽略体积力和对流项的模型方程为

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{f_0 - f}{\tau}$$

当 $f_0 = f_M$ 为麦克斯韦分布时, 模型方程为 BGK 方程。

当 f_0 为高斯分布时, 为 ES-BGK 方程。高斯分布

$$f_0 = \pi^{-3/2} (\det A)^{1/2} \exp\left(-\sum_{i,j=1}^3 A_{ij} c_i c_j\right),$$

其中

$$A_{ij} = \left[(2RT/Pr)\delta_{ij} - 2(1-Pr)p_{ij}/(\rho Pr) \right]^{-1}$$

$p_{ij} = \rho \int c_i c_j f d\Xi$ 为压力张量。

对 Shakhov-BGK 模型方程

$$f_0 = f_M \left[1 + (1-Pr)\mathbf{c} \cdot \mathbf{q} \left(\frac{c^2}{RT} - 5 \right) \right] / (5PRT)$$

对模型方程进行时间离散

$$\frac{f^{n+1} - f^n}{\Delta t} = \frac{f_0^n - f^n}{\tau}$$

整理得

$$f^{n+1} = (1 - \Delta t/\tau) f^n + \Delta t/\tau f_0^n$$

进一步可以得到各分量的分布函数

$$f_x^{n+1} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f^{n+1} dV dW = (1 - \Delta t/\tau) f_x^n + \Delta t/\tau f_{0,x}^n$$

1.2 直接模拟 Monte Carlo 方法

直接模拟 Monte Carlo (DSMC) 方法[6]从微观上跟踪模拟粒子的运动和碰撞,统计得到气体的流动行为。DSMC 方法是目前最常用也是最成功的模拟稀薄气体的模拟方法。对于单原子气体,DSMC 方法的模拟结果已被理论证明是与玻尔兹曼方程的解是一致的。因此可以认为 DSMC 模拟结果是玻尔兹曼方程的数值解。

本文计算中,模拟气体为氩气,分子间作用势采用变径硬球模型。为降低 DSMC 方法模拟结果的数值误差,每个网格的粒子数为 10000 个,时间步长为 0.01 个分子平均碰撞时间。这样模拟结果的数值误差基本可以忽略。

2 非平衡松弛问题的数值比较

本文选择了两个非平衡松弛问题。一个是双半正态分布的松弛问题,目的是为了观察间断在松弛过程中的变化。另一个与前一个算例相似,只是对两个半正态分布分别进行了处理,使得整个分布函数连续。

初始状态下,两个算例的温度都默认设为 273K,宏观速度设为为 0。通过调整其中一个半正态分布(或经过处理的半正态分布)的温度来产生非平衡,非平衡的强度取决于所取温差的大小。本文中取了四个不同的温度:373K, 546K, 1365K, 2730K。

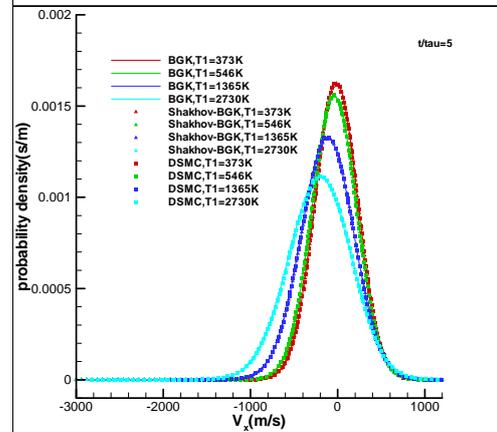
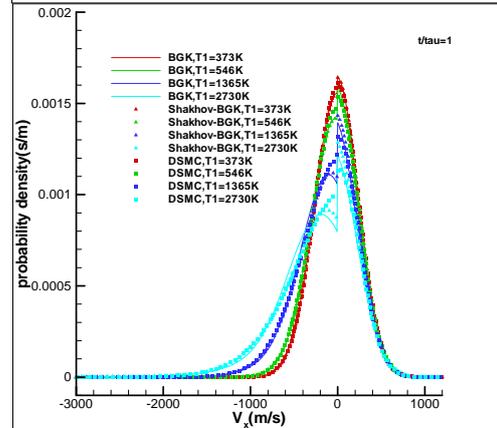
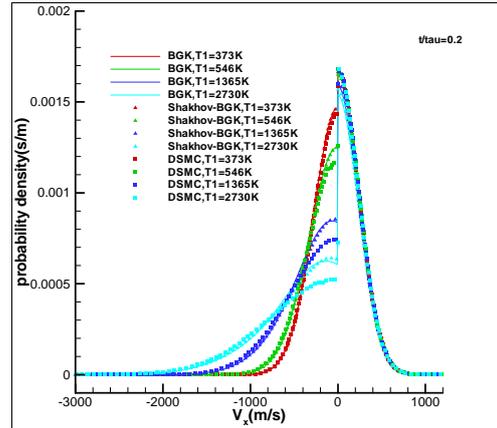
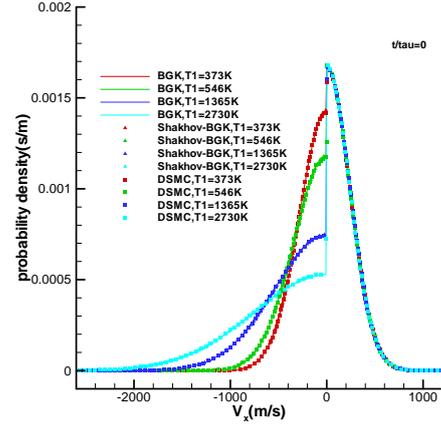


图 1 双半正态分布松弛过程中 X-速度分量的分布函数 Shakhov-BGK 与 BGK、DSMC 的对比

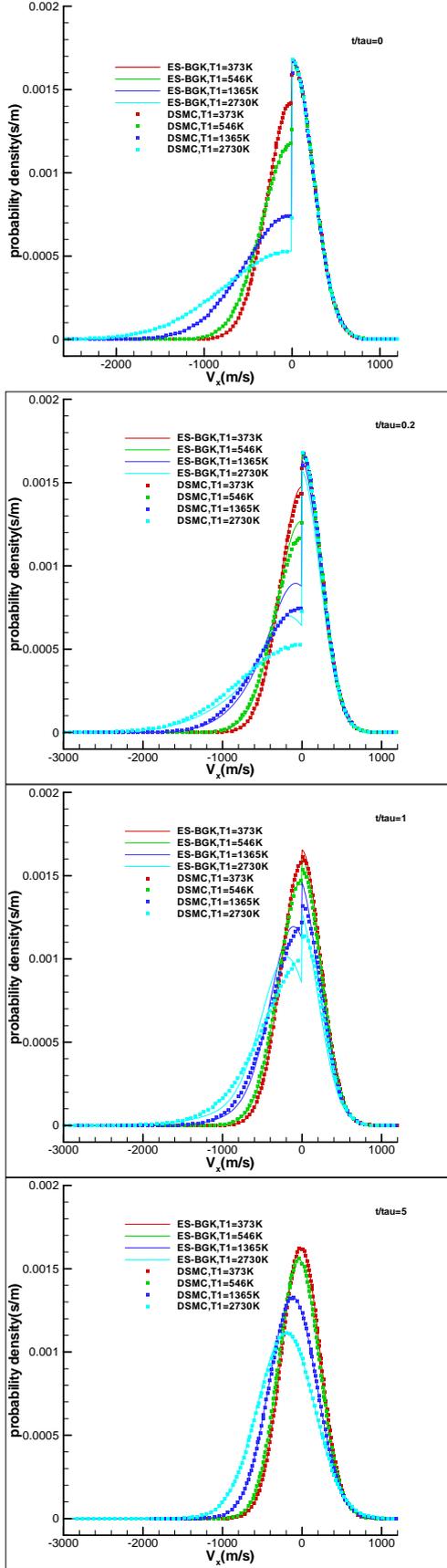


图2 双半正态分布松弛过程中 X-速度分量的分布函数 ES-BGK 与 DSMC 的对比

2.1 双半正态分布问题

双半正态分布问题设为

$$f(0) = \left(\frac{\beta_1}{\sqrt{\pi}} \exp(-\beta_1^2 u^2) \Big|_{u<0} + \frac{\beta_2}{\sqrt{\pi}} \exp(-\beta_2^2 u^2) \Big|_{u>0} \right) \frac{\beta_2}{\sqrt{\pi}} \exp(-\beta_2^2 v^2) \frac{\beta_1}{\sqrt{\pi}} \exp(-\beta_1^2 w^2)$$

其中 $\beta_i = \sqrt{\frac{m}{2kT_i}}$ 。该分布函数的宏观速度为

$$U = \sqrt{\frac{k}{2\pi m}} (\sqrt{T_2} - \sqrt{T_1}), \text{ 宏观温度为}$$

$$T = \frac{1}{3} \left(\frac{T_1 + T_2}{2} \left(1 - \frac{1}{\pi} \right) + \frac{\sqrt{T_1 T_2}}{\pi} + 2T_2 \right)。$$

图1是X方向速度分布函数在四个不同时刻 Shakhov-BGK 与 BGK、DSMC 的对比图。在间断附近, Shakhov-BGK 与 DSMC 有明显差别, 尤其在间断左侧, DSMC 的分布函数随速度单调增加, 而 Shakhov-BGK 取决于温度的大小。当 $T_1 = 373K$ 时, Shakhov-BGK 与 DSMC 符合得很好; 但当 $T_1 = 1365K$ 或 $2730K$ 时, Shakhov-BGK 在间断附近有明显的单调递减。这与 BGK 的结果定性一致。

图2是X方向速度分布函数在四个不同时刻 ES-BGK 与 DSMC 的对比图。随着温度的增加, ES-BGK 与 DSMC 之间的差别逐渐变大。在间断附近, 当 $T_1 = 1365K$ 或 $2730K$ 时, ES-BGK 在间断附近也有明显的单调递减, 且递减程度相比 BGK 和 Shakhov-BGK 更大。

2.2 经过连续化处理的双半正态分布问题

经过连续化处理的双半正态分布设为

$$f(0) = \frac{2\beta_2}{\beta_1 + \beta_2} \left(\frac{\beta_1}{\sqrt{\pi}} \exp(-\beta_1^2 u^2) \Big|_{u<0} + \frac{\beta_1}{\sqrt{\pi}} \exp(-\beta_2^2 u^2) \Big|_{u>0} \right) \frac{\beta_2}{\sqrt{\pi}} \exp(-\beta_2^2 v^2) \frac{\beta_1}{\sqrt{\pi}} \exp(-\beta_1^2 w^2)$$

该分布函数的宏观速度为 $U = \sqrt{\frac{2k}{\pi m}} (\sqrt{T_2} - \sqrt{T_1})$,

$$\text{宏观温度为 } T = \frac{1}{3} \left[\left(1 - \frac{2}{\pi} \right) (T_1 + T_2) + \left(\frac{4}{\pi} - 1 \right) \sqrt{T_1 T_2} + 2T_2 \right]。$$

图3是X方向速度分布函数在四个不同时刻 Shakhov-BGK 与 BGK、DSMC 的对比图。Shakhov-BGK 与 DSMC 的结果吻合得很好, 尤其在温度较高 ($T_1 = 1365K$ 或 $2730K$) 时, 性能相比 BGK 有了明显提升。原因可能是初始分布函数的连续化处理降低了问题的非平衡强度。可见在非平衡不太强烈时, Shakhov-BGK 模型整体上能比较好的预测分布函数。当然必须注意, Shakhov-BGK 可能会出现负温度, 如图5在 $T_1 = 1365K$ 和 $2730K$ 时出现了负温度。

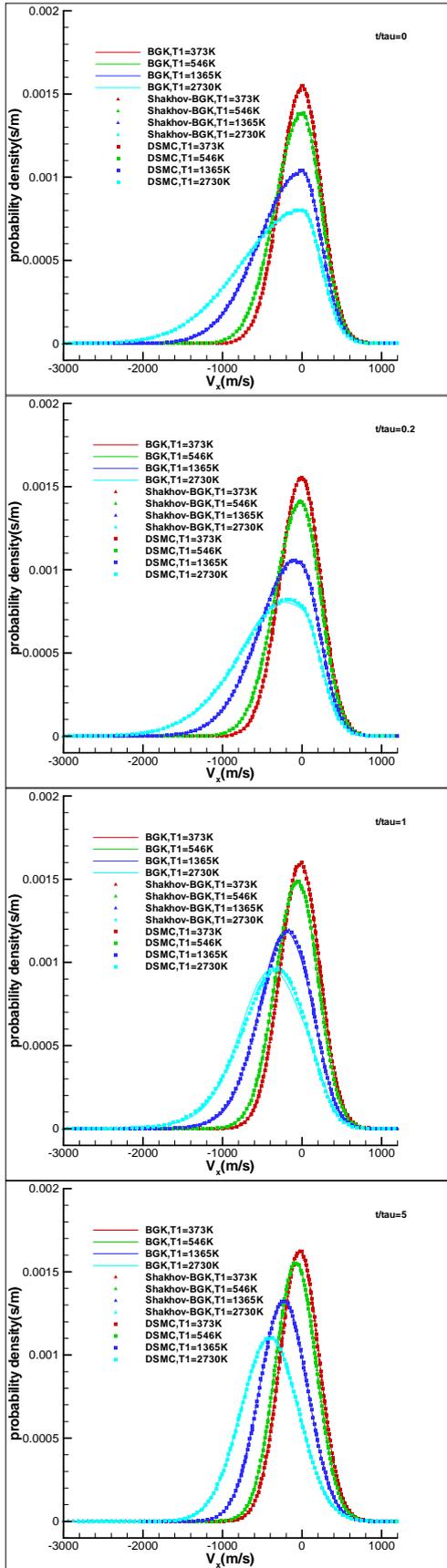


图 3 连续化处理的双半正态分布松弛过程中 X-速度分量的分布函数, Shakhov-BGK 与 BGK、DSMC 的对比

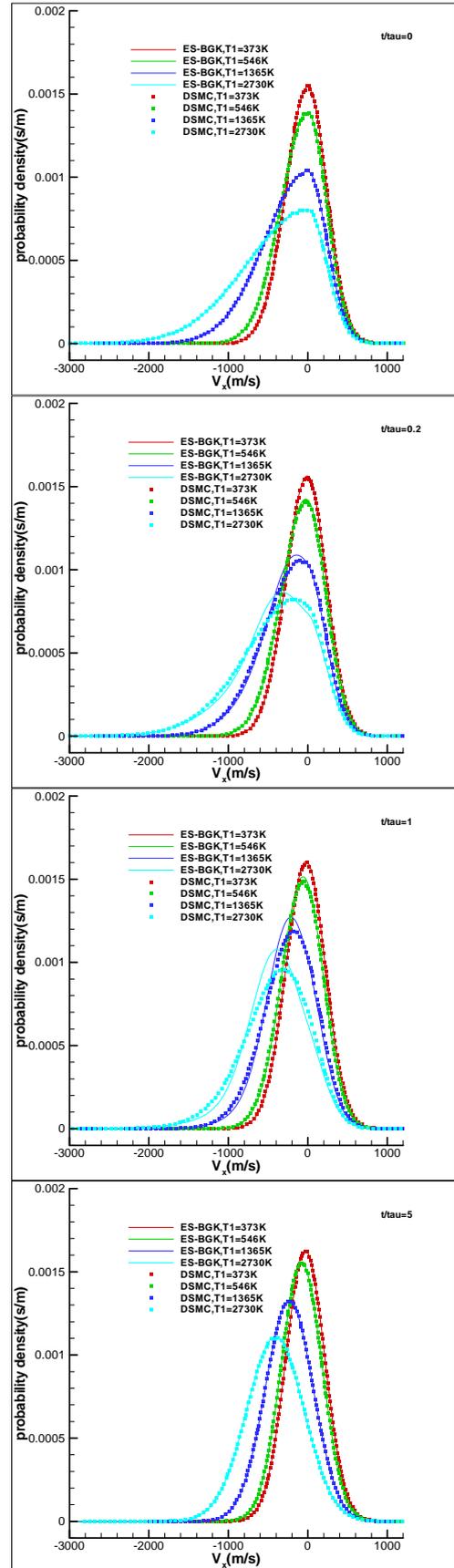


图 4 连续化处理的双半正态分布松弛过程中 X-速度分量的分布函数, ES-BGK 与 DSMC 的对比

图 4 是 X 方向速度分布函数在四个不同时刻 ES-BGK 与 DSMC 的对比图。随着温度的增加, ES-BGK 在宏观速度 U 附近分布函数远大于 DSMC。

简便起见, 这里只分析初始时刻。在初始时刻, $f_{0,x}^1 = \sqrt{\frac{m}{2\pi kT_2}} \exp\left(-\frac{m}{2kT_2}(u-U)^2\right)$, 当 $T_1 > T_2$ 时, $T > T_2$, 则在宏观速度 U 附近, $f_{0,x}^1 > f_M$, 由此显而易见在宏观速度 U 附近 ES-BGK 的分布函数相比 BGK 偏大。BGK 模型的一个局限在于分量的分布函数只与其初值和最后的平衡值 f_M 有关, 与其它分量没有直接关系; 而 ES-BGK 模型的问题是分量的分布函数过度依赖于另两个分量, 在初始时刻仅与 T_2 相关, 而对它自身的加权不足。

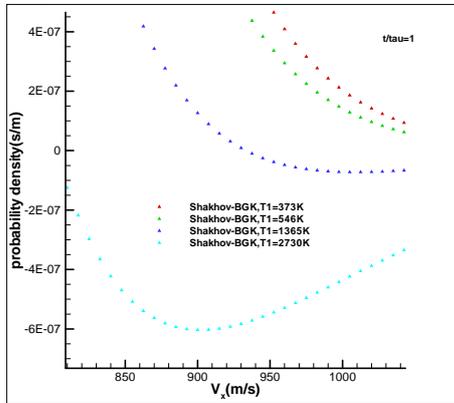


图 5 连续化处理的双半正态分布放大图

3 结果分析

3.1 速度分布函数的形状

速度分布函数的形状可由分布函数的矩来表征。如果知道了分布函数的所有矩, 那么就相当于得到了整个分布函数。这里只探讨二阶、三阶和四阶矩, 定义如下:

$$\sigma = \int_{-\infty}^{+\infty} (u')^2 f(u') du', \quad S = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} (u')^3 f(u') du'}{\sigma^{1.5}},$$

$$K = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} (u')^4 f(u') du'}{\sigma^2}$$

σ 用来表征分布函数的相对宽度, S 用来表征分布函数的不均匀性程度, K 用来表征分布函数尾部所占面积的大小。

图 6 显示, Shakhov-BGK 与 BGK、DSMC 的二阶矩完美吻合。理论上 Shakhov-BGK 模型保持前两阶矩与 BGK 一致, 仅对三阶及以上阶矩进行调整。BGK 相比 DSMC 松弛到对称状态较快, 而 Shakhov-BGK 松弛到对称状态相

比比 DSMC 偏慢。Shakhov-BGK 的四阶矩与 BGK 一致, 大于 DSMC, 且差别随着温度增加而变大。同时注意在松弛过程的后半段, Shakhov-BGK 的三阶矩非常接近 DSMC, 这表明在偏离平衡态不远且仅对分布函数的前三阶矩感兴趣的情形下, Shakhov-BGK 模型是很好的选择。

相比 Shakhov-BGK 只修正 BGK 模型的二阶及以上阶矩, ES-BGK 同时改变了二阶矩, 舍得二阶矩也与 DSMC 发生了偏离, 如图 7。

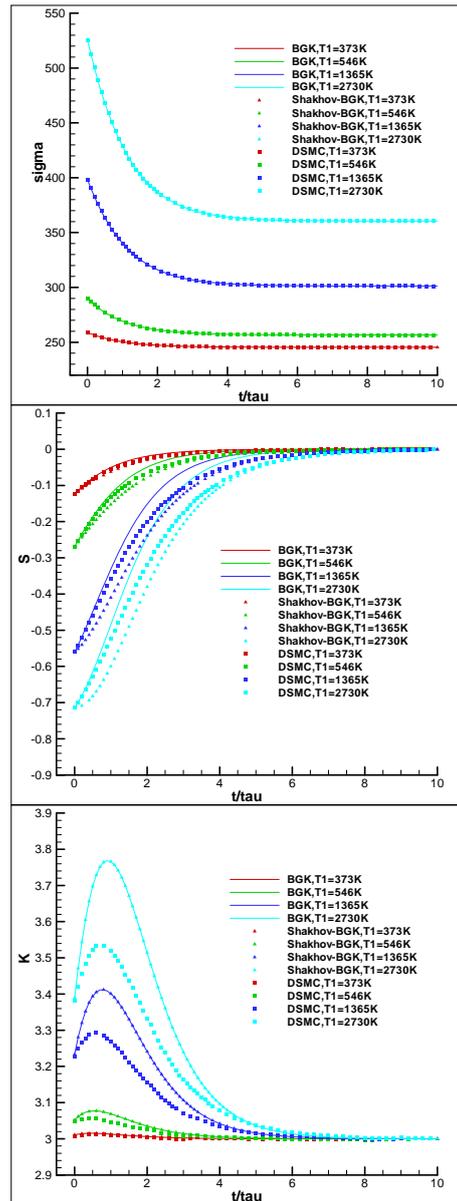


图 6 分布函数二阶、三阶和四阶矩随时间的变化, Shakhov-BGK 与 BGK、DSMC 的对比

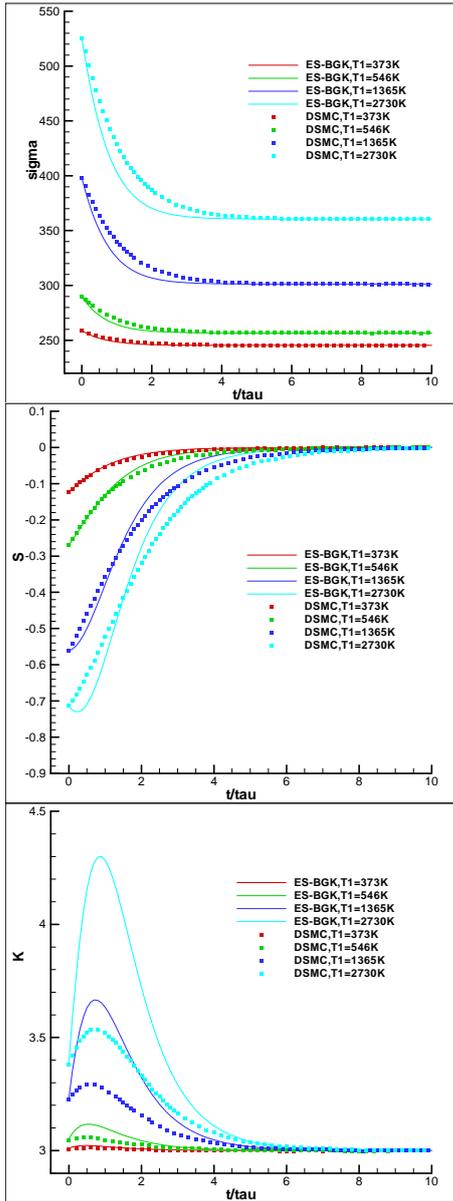


图7 分布函数二阶、三阶和四阶矩随时间的变化, ES-BGK 与 DSMC 的对比

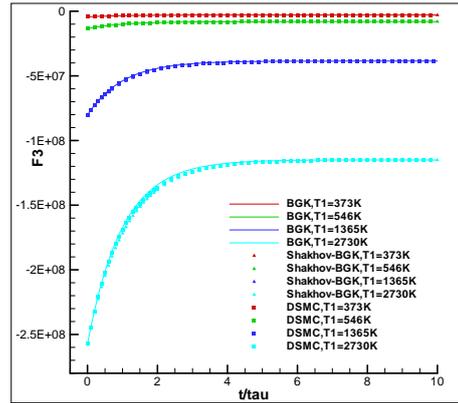
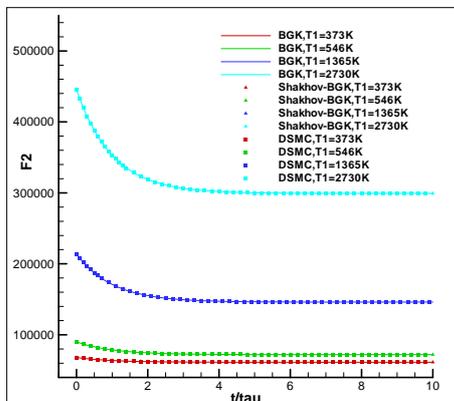


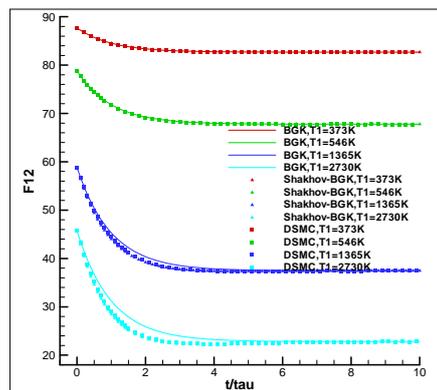
图8 X-方向的动量和能量通量在松弛过程中的变化 (算例2)

3.2 通量和半通量

对于许多计算来说, 通量计算是关键。对于动理论格式来说, 还需要考虑半通量。

质量通量在松弛过程中不变。X-方向动量和能量通量随时间变化如图 8 所示。Shakhov-BGK 模型能非常好的预测动量通量; 能量通量也仅有微小的误差, 主要来源于三阶矩。

半通量只考虑一半分布函数的贡献。图 9 显示 BGK 模型预测半通量有一定困难, 而 Shakhov-BGK 模型在各个温度下都能完美的预测质量半通量。同时 Shakhov-BGK 对动量和能量半通量的预测有一定改进。随着温度变大, Shakhov-BGK 对动量和能量半通量的预测能力逐渐下降。这进一步证明在非平衡并不强烈时, Shakhov-BGK 有比较好的性能。



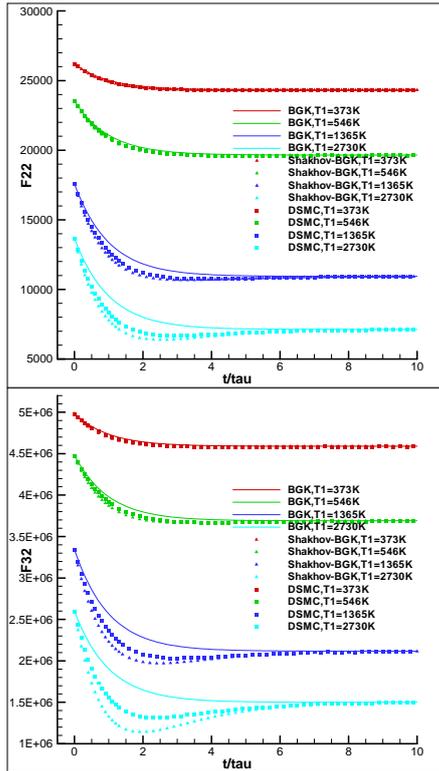


图9 X-方向的质量、动量和能量半通量在松弛过程中的变化(算例2)

4 结论

本文对 Shakhov-BGK 模型和 ES-BGK 模型的松弛性能进行了评估, 得到如下主要结果:

1、Shakhov-BGK 模型在非平衡不强烈时, 对分布函数有较好的预估性能。

2、除了能准确预估二阶矩外, Shakhov-BGK 模型在偏离平衡状态不远时, 三阶矩也能较准确预估。

3、Shakhov-BGK 模型对半通量的预测相对 BGK 有很大提升, 尤其能准确的预估质量半通量。对动量和能量半通量的预估能力随着非平衡程度的加强而下降。

4、ES-BGK 模型对本文中的算例性能不太好, 分布函数的预测不如 Shakhov-BGK 和 BGK。主要原因是分量的分布函数过度依赖于另两个分量, 而对它自身的加权不足。

参考文献

- 1 Cercignani C. The Boltzmann equation and its applications. New York: Springer-Verlag, 1988.
- 2 P.L. Bhatnagar, E.P. Gross, and M. Krook, A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems, Phys Rev. 94, 511(1954).
- 3 L.H. Holway, Jr., New statistical models for kinetic theory: Methods of construction, Phys. Fluids 9, 1658(1966).
- 4 E. M. Shakhov, Generalization of the Krook Kinetic Equation, Fluid. Dyn. 3, 95(1968).
- 5 孙泉华, 高巍, 樊菁, 波尔兹曼方程BGK模型的有效性分析, CSTAM 2012-D01-0061.
- 6 Bird GA. Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows. Oxford: Clarendon Press, 1994

RELAXATION PERFORMANCE ANALYSIS OF SHAKHOV-BGK AND ES-BGK MODEL

GAO Wei SUN Quanhua

(Key Laboratory of High Temperature Gas Dynamics, Institute of Mechanics, C A S, No.15 Beisihuanxi Road, Beijing 100190, China)

Abstract The Shakhov-BGK and ES-BGK model are investigated on the collision term approximation. The numerical analysis is based on two typical relaxation problems, and by comparison of the result of the direct simulation Monte Carlo method, the Shakhov-BGK model can predict satisfactory history of velocity distribution function during relaxation when the flow is not in strong non equilibrium. The Shakhov-BGK model can give accurate half mass flux, and for flow which is not far from Maxwellian, third-order central moment, momentum and energy flux could be achieved. ES-BGK model does not behave well on the two cases in this paper. The main reason is probably that the excessive emphasis of the one component of distribution on the other two.

Key words Shakhov-BGK model, ES-BGK model, BGK model, DSMC, relaxation performance