中国科学:信息科学 2016年 第46卷 第10期:1465-1488

SCIENTIA SINICA Informationis

高性能科学计算若干前沿问题研究专刊



# 矩方法在动理学中的发展与应用

蔡振宁<sup>1</sup>,樊玉伟<sup>2</sup>,胡志成<sup>3</sup>,李若<sup>2</sup>,王何宇<sup>4\*</sup>

<sup>①</sup> Department of Mathematics, Duke University, Durham, NC 27708, USA

② 北京大学数学科学学院、应用物理和技术研究中心,北京 100871

③ 南京航空航天大学理学院数学系,南京 211106

④ 浙江大学数学科学学院, 杭州 310027

\* 通信作者. E-mail: wangheyu@zju.edu.cn

收稿日期: 2016-03-30; 接受日期: 2016-08-15; 网络出版日期: 2016-10-25 国家重点基础研究发展计划 (973 计划)(批准号: 2011CB309704) 资助项目

**摘要** 矩方法既是一种通过约简动理学方程获得宏观流体方程组的建模手段,又是求解动理学方程 本身的数值方法,近年来发展迅速、应用广泛.本文从模型、数值方法和应用 3 个方面回顾和总结了 动理学中矩方法的研究进展.首先讨论了矩方法的不足并总结了为弥补这些不足而提出的修正方法, 特别是介绍了其中广为关注的正则化方法和全局双曲正则化矩方法;然后探讨了各种求解矩方法的 数值方法,并重点介绍了针对于任意阶矩方程组的数值正则化方法.此外文章还回顾了矩方法在稀 薄流体、微流、电子输运、等离子体和密度泛函等领域的应用,并展望了矩方法的进一步发展方向.

关键词 气体动理学 矩方法 双曲性 正则化 模型约简 数值模拟 应用

# 1 引言

随着当今科技的逐步发展,数值计算被越来越多地应用于各项高科技领域以节省实验成本;而在 此同时,人们对数学建模以及数值计算的精准度要求也日渐提高.在这一背景下,曾被广泛应用的基 于集群行为 (collective behavior) 的数学模型的精度在一些情形下已无法满足实际的需求;与此同时, 在大多数具有一定规模的问题中,现有的计算能力又无法对所有个体行为 (individual behavior) 进行 完全的模拟.因此,介于二者之间的基于个体行为概率描述的模型则成为平衡模型精度与数值计算量 的一种可能的选择.以下我们将从描述气体状态的角度切入,逐步呈现该类数学模型的基本形式,并 引出矩方法在其中的发展历程.

#### 1.1 Boltzmann 方程与动理学

对于气体状态的描述, 经典的数学模型主要包括 Euler 方程组、Navier-Stokes 方程组等. 这些数 学模型基于连续介质模型假设, 直接对气体的密度、速度、温度等进行建模而得到, 而这些物理量事 实上是大量微小气体分子的运动所呈现出来的平均量或宏观量, 它们并未给出单个气体分子的具体行

ⓒ 2016《中国科学》杂志社

**引用格式:** 蔡振宁, 樊玉伟, 胡志成, 等. 矩方法在动理学中的发展与应用. 中国科学: 信息科学, 2016, 46: 1465–1488, doi: 10.1360/N112016-00098

为.因而这类模型可认为是基于集群行为的模型.然而在航天航空及微尺度流领域中,由于气体较为稀薄 (相对于我们所考虑问题的尺度),连续介质模型假设不再成立,这类模型给出的气体状态常常与 实际有较大的偏离.而对分子的位置和速度直接进行模拟的分子动力学模型却又由于计算量过大而无 法付诸应用.因而,如前文所述,一个折衷的模型即是一个基于"分布函数"的模型.具体而言,分布 函数定义为一个值非负的函数  $f(t, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{\xi})$ ,其中 t为时间,  $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^3$ 为空间坐标,  $\boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^3$ 为气体分子的运动速度.取位置 –速度空间中的一个小微元  $[\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} + d\boldsymbol{x}] \times [\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi} + d\boldsymbol{\xi}]$ ,那么  $f(t, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{x} d\boldsymbol{\xi}$ 则表示时刻 t 位置处于空间微元  $[\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} + d\boldsymbol{x}]$  内且运动速度恰好落在速度微元  $[\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi} + d\boldsymbol{\xi}]$ 中的分子数目.这一函数 的引入将气体分子的运动状态(位置和速度) 作为参变量,用统计物理的方式描述了分子在所有可能 的运动状态中的分布情况,这样既使得气体状态得到了更详尽的描述,又无需在数值模拟中具体考虑 每个分子.在这一框架下讨论气体状态的相关理论通常归入气体动理学领域.分布函数的控制方程为 德国数学家 Boltzmann 所提出,其形式如下:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla_{\boldsymbol{x}} f = Q(f, f). \tag{1}$$

这一方程主要描述了气体分子的两种物理过程:方程左端描述的是气体分子依自身速度在空间中的输运过程;而方程右端为一双线性算子,用来描述分子之间的相互作用.在 Boltzmann 方程中,分子间的相互作用以碰撞描述,而在各种碰撞中,仅考虑出现概率最多的两体碰撞,因而右端项最终呈现一二次形式.这一方程解的正则性理论曾被广泛研究,相关结果参见(但不限于)文献 [1,2].

由 Boltzmann 方程的形式可见,这一模型的原理并不复杂,仅由微观粒子自身的运动和互相之间的作用构成.因而动理学原理亦被广泛地应用于其他领域之中.例如,当微观粒子为电子和正离子,且 其相互作用以它们所形成的自治电场与磁场来描述时,我们可得到用于描述等离子体的 Vlasov 方程 组;当微观粒子为光子或声子时,亦可得到相应的输运方程.此外,这些"粒子"还可认为是行人、车 辆甚至行星,以用于描述行人流、交通流以及天体运动中的整体行为<sup>[3~5]</sup>.所得的这些模型虽各不相 同,但都与 Boltzmann 方程有着类似的形式,主要区别在于右端描述"粒子"相互作用的建模方式.下 文中亦将看到,由于这一相似性,矩方法在众多动理学领域中都具有应用前景.

#### 1.2 矩方法

如上所述,对于 Boltzmann 方程,求解分布函数所产生的计算量已经远小于分子动力学模拟的计 算量,但分布函数本身仍为一七维函数,若要直接进行求解,其计算量也仍然十分骇人.因而在早期, 有许多学者希望基于 Boltzmann 方程推导较为简单但精度高于 Navier-Stokes 方程组的流体模型.其 中一项代表性工作即为由 Grad 所提出的矩方法<sup>[6,7]</sup> (后称 Grad 矩方法).这一方法所推导得到的模 型中,最著名的是包含 13 个方程的 Grad 13 矩模型.然而这一方法自提出后数年,Grad 便发现了该模 型在求解激波结构时无法得到光滑解这一缺陷<sup>[8]</sup>,这使得 Grad 对此方法不再进行深入地研究,也因 此在大约 40 年的时间内,矩方法建模的进展较为缓慢,这其间的工作主要包括 Grad 方法在多原子、 相对论等其他情形下的推广,如文献 [9~14] 等.即便如此,在这段时期,Grad 矩方法也被大量运用于 各类流体行为的分析中,如文献 [15~17] 等.

但是随着对 Grad 矩方法的深入研究,其缺陷也逐渐暴露出来.其中对矩方法的应用影响较大的 主要是矩方法的双曲性问题.在文献 [18] 中, Grad 矩方程组在可降至一维情形下的双曲区域被画出, 由此可见其仅在平衡态附近的一小片区域内满足双曲性; 而文献 [19] 则进一步指出,在完整的三维方 程组中,平衡态附近的小扰动都有可能使双曲性不复存在.自 20 世纪 80 年代始,矩方法建模开始逐 渐有了新的思路,学者们从不同的角度考虑对 Grad 矩方法的改进,并有了许多重要的进展.在 80 年 代初, Eu 将热力学方法引入到矩方法的建模中<sup>[20,21]</sup>, 提出了修正矩方法 (modified moment method), 提高了在矩方法中"熵"这一概念的地位.更进一步的工作由 Dreyer 在文献 [22] 中给出, 考虑了在一 般的矩约束下, 熵极大的分布函数的形式及其与 Grad 矩方法的关系.基于这种分布函数的方法后来 被称为"极大熵方法", 而这一方法为人所熟知则始于文献 [23], 其中对该类矩方法的数学性质进行了 详尽的研究. 然而在大多数情形下, 这一方法无法给出具有显式数学表达式的数学模型, 因而对该类 模型的直接应用仍在探索之中<sup>[24~27]</sup>.由于该类模型的许多优秀性质, 近年来亦有许多学者尝试对该 类模型进行近似, 如文献 [28~32] 等.

对 Grad 矩方法的另一重要改进是对矩方法的正则化. 一般认为正则化矩方法首先由两位德国学者 Struchtrup 及 Torrilhon 于 2003 年在文献 [33] 中提出, 但事实上在前一作者所著文献 [34] 中己指出, 该建模思路事实上在 1958 年己由 Grad 在文献 [7] 中提出. 然而这一正则化模型在文献 [7] 中所占篇幅比例极小, 且 Grad 本人亦未给予重视, 因而该模型 (通常称为 R13 矩模型) 的具体研究在 40 多年后方见于文献 [33,35] 等. 正则化矩方法对 Grad 矩方法的改进类似于 Navier-Stokes 方程组对于 Euler 方程组的改进, 它利用渐近分析的方法给出了高阶矩与低阶矩之间的本构关系, 从而使流体方程组得到封闭. 最终方程组所呈现出来的形式中含有二阶导数项, 因此与正则化之前的矩方程组相比, 其解具有更好的正则性, 从而能够有效去除 Grad 矩方法中出现的非物理的 "子激波"现象. 该模型 最初只针对 Maxwell 气体, 而后被进一步推广到更一般的分子模型以及多原子气体、混合气体等情形中 <sup>[36~39]</sup>. 此外亦不乏对其他矩数情形下正则化矩方程组的探索和尝试 <sup>[40~42]</sup>. 相较于基于熵的矩方法, 这一系列方案均能为矩方程组提供显式的表达式, 因而更加适合于数值计算.

以上两类对 Grad 矩方法的改进主要针对于矩数不多的情形.从现有的为数不多的结果上看,基于熵的模型能够获得对真实物理较好的近似<sup>[26]</sup>,但由于"Junk 空间"的存在<sup>[43]</sup>,方程组具有解的定义域非凸、特征速度可任意大等性质,在一些情形下解的定义仍有疑问,数值计算的效率也并不高,而 对其近似所得的模型则仍有待进一步的检验.对于正则化矩方程组,目前已有较多的数值结果.对于 某些问题,该模型确实表现出了其优越性,尤其在对某些非平衡流体现象的定性描述上<sup>[35,44,45]</sup>.从这 些文献的数值结果上亦可看出,从定量角度看,正则化矩方程组的解与实验结果或对 Boltzmann 直接 模拟所得的结果仍有一定差距,尤其是当流体较为稀薄的时候.这也使得小矩数正则化矩方程组的应 用仍有相当大的局限性.而计算机技术的高速发展事实上已经使得我们有可能对大矩数情形下的矩方 程组进行数值模拟,因而这也成为近年来矩方法发展的一个新方向.

由于矩方程组本身的复杂性,在 20 世纪及 21 世纪初,对大矩数情形下矩方程组的研究十分有限, 主要集中于对一些模型问题和方程性质的讨论<sup>[46~49]</sup>.而真正对大矩数方程组的数值求解则始于文 献 [50],由此,矩方法以一个 Boltzmann 方程离散系统的面貌呈现出来,新的数值方法和传统的建模手 段相结合,开辟了矩方法的一个全新的研究思路.由于该思路实现了新旧研究方法的统一,我们将以 此为切入点,对矩方法的建模、数值及应用等方面展开回顾.

# 2 动理学中矩方法的发展

正如第1节所述,直接求解 Boltzmann 方程困难重重,矩方法作为一种从动理学方程推导宏观流体力学方程组的方法引起众多科研工作者的重视.动理学中的矩方法自从 Grad<sup>[6]</sup>于 1949年提出以来受到广泛重视.但是由于 Grad 矩方法自身的一些不足,包括在求解激波结构时无法得到光滑解和 双曲性的缺失,在理论分析和实际计算中举步维艰.本节首先简述 Grad 矩方程组的推导和 Grad 矩 方程组的不足,之后针对 Grad 矩方程组的不足提出相应的修正方案,最后给出边界条件的处理.

# 2.1 Grad 矩方程组的推导

对于 Boltzmann 方程 (1), 当气体处于平衡态 (equilibrium) 时, 分布函数为

$$f_{\rm eq} = \frac{\rho}{\sqrt{2\pi\theta}^D} \exp\left(-\frac{|\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{u}|^2}{2\theta}\right),\tag{2}$$

其中 D 为空间维数, 物理情形对应于 D = 3, 宏观量密度  $\rho$ 、速度 u 和温度  $\theta$  与分布函数关系为

$$\rho = \int_{\mathbb{R}^D} f \,\mathrm{d}\boldsymbol{\xi},\tag{3a}$$

$$\rho \boldsymbol{u} = \int_{\mathbb{R}^D} f \boldsymbol{\xi} \, \mathrm{d} \boldsymbol{\xi},\tag{3b}$$

$$D\rho\theta = \int_{\mathbb{R}^D} f|\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{u}|^2 \,\mathrm{d}\boldsymbol{\xi}.$$
 (3c)

类似地,可以定义压强张量和热通量为

$$p_{ij} = \int_{\mathbb{R}^D} f(\xi_i - u_i)(\xi_j - u_j) \,\mathrm{d}\boldsymbol{\xi}, \quad q_i = \int_{\mathbb{R}^D} f(\xi_i - u_i) |\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{u}|^2 \,\mathrm{d}\boldsymbol{\xi}.$$
(4)

应力张量  $\sigma_{ij} = p_{ij} - p$ , 其中  $p = \frac{1}{D} \sum_{d=1}^{D} p_{dd}$  为气体静压强.

在 Boltzmann 方程 (1) 中,碰撞项总是使得分布函数偏向平衡态分布. Grad 矩方法<sup>[6]</sup> 的基本思想是当碰撞不是很弱时,分布函数距离平衡态不远,故可将分布函数在平衡态附近做多项式展开,该展开称为 Grad 展开:

$$f \approx f_{\text{Grad}} = \sum_{\alpha \in \mathbb{N}^D} f_{\alpha}(t, \boldsymbol{x}) \mathcal{H}_{\alpha}^{[\boldsymbol{u}, \theta]}(\boldsymbol{\xi}),$$
(5)

其中  $\mathcal{H}^{[\boldsymbol{u},\theta]}_{\alpha}(\boldsymbol{\xi})$  为基函数, 定义为

$$\mathcal{H}_{\alpha}^{[\boldsymbol{u},\boldsymbol{\theta}]}(\boldsymbol{\xi}) = (-1)^{|\alpha|} \frac{\mathrm{d}^{\alpha} \omega^{[\boldsymbol{u},\boldsymbol{\theta}]}(\boldsymbol{\xi})}{\mathrm{d} \boldsymbol{\xi}^{\alpha}}, \quad \omega^{[\boldsymbol{u},\boldsymbol{\theta}]}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{f_{\mathrm{eq}}}{\rho}, \tag{6}$$

其中  $\alpha \in \mathbb{N}^D$  为多重指标,  $|\alpha| = \sum_{d=1}^{D} \alpha_d$ ,  $\frac{d^{\alpha_i}}{d\boldsymbol{\xi}^{\alpha}} = \prod_{d=1}^{D} \frac{d^{\alpha_d}}{d\boldsymbol{\xi}^{\alpha_d}}$ . 基函数  $\mathcal{H}^{[\boldsymbol{u},\theta]}_{\alpha}(\boldsymbol{\xi})$  可以分解为权函数  $\omega^{[\boldsymbol{u},\theta]}(\boldsymbol{\xi})$  和 Hermite 多项式的乘积. 直接计算可得  $i, j = 1, \dots, D$ ,

$$f_0 = \rho, \quad f_{e_i} = 0, \quad \sum_{d=1}^{D} f_{2e_d} = 0, \quad f_{e_i + e_j} = \frac{\sigma_{ij}}{1 + \delta_{ij}}, \quad q_i = 2f_{3e_i} + \sum_{d=1} f_{e_i + 2e_d}, \tag{7}$$

其中 e<sub>i</sub>, i = 1,...,D 为单位多重指标.

直接将 Grad 展开 (5) 代入 Boltzmann 方程 (1) 中, 直接计算并匹配基函数  $\mathcal{H}^{[u,\theta]}_{\alpha}(\boldsymbol{\xi})$  的系数便可 得到包含无数个方程的方程组. 这里仅给出结果, 详细的推导过程可参见文献 [51,52]:

$$\frac{\mathrm{d}f_{\alpha}}{\mathrm{d}t} + \sum_{d=1}^{D} \left( \theta \frac{\partial f_{\alpha-e_d}}{\partial x_d} + (\alpha_d+1) \frac{\partial f_{\alpha+e_d}}{\partial x_d} \right) + \sum_{k=1}^{D} f_{\alpha-e_k} \frac{\mathrm{d}u_k}{\mathrm{d}t} + \sum_{k,d=1}^{D} \frac{\partial u_k}{\partial x_d} \left( \theta f_{\alpha-e_k-e_d} + (\alpha_d+1) f_{\alpha-e_k+e_d} \right) + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{D} f_{\alpha-2e_k} \frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}t} + \sum_{k,d=1}^{D} \frac{1}{2} \frac{\partial \theta}{\partial x_d} \left( \theta f_{\alpha-2e_k-e_d} + (\alpha_d+1) f_{\alpha-2e_k+e_d} \right) = Q_{\alpha}, \quad \alpha \in \mathbb{N}^D,$$
(8)

其中  $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial}{\partial t} + \sum_{d=1} u_d \frac{\partial}{\partial x_d}$  为随体导数,且若  $\alpha$  存在元素为负,则约定  $f_{\alpha}$  为 0. 这里  $Q_{\alpha} = \int_{\mathbb{R}^D} Q(f, f) \mathcal{H}_{\alpha}^{[\boldsymbol{u}, \theta]} / \omega^{[\boldsymbol{u}, \theta]} \,\mathrm{d}\boldsymbol{\xi}$ ,满足  $Q_0 = 0, Q_{e_i} = 0, i = 1, \dots, D, \sum_{d=1}^D Q_{2e_d} = 0.$ 

上述方程组包含无数个方程, Grad 矩方法中仅关注前有限个矩, 对于高阶矩系数  $f_{\alpha}$ , 由于基函数  $\mathcal{H}^{[u,\theta]}_{\alpha}$ 的正交性而被令为 0.

# 2.1.1 Grad 13 矩方程组

Grad 13 矩方程组是 Grad 提出的第 1 个矩方程组 <sup>[6]</sup>, 也是 Grad 矩方法中最出名、最具代表性的方程组. 该方程组仅关注 D = 3 情形下的宏观密度  $\rho$ 、速度 u、温度  $\theta$ 、应力张量  $\sigma_{ij}$  和热通量  $q_i$ . 直接扔掉 (8) 中所有关于  $|\alpha| \ge 4$  的方程组, 便获得了包含 20 个方程的方程组, 此时  $|\alpha| = 3$  的方程中 包含  $f_{\alpha+e_a}$ , d = 1, 2, 3, 故该方程并不封闭. 此时由于基函数的正交性, Grad 矩封闭为  $f_{\alpha} = 0$ ,  $|\alpha| = 4$ . 由于该方程组包含 20 个方程, 仍含有较多的量, Grad 扔掉了  $|\alpha| = 3$  这些方程中的部分, 仅保留热通 量部分对应的方程. 由于基函数的正交性, 直接取

$$f_{e_i+e_j+e_k} = \frac{\delta_{ij}q_k + \delta_{ik}q_j + \delta_{jk}q_i}{5(\delta_{ij} + \delta_{jk} + \delta_{ik})},$$

将其代入上述的 20 矩方程组,便可得著名的 Grad 13 矩方程组,具体表达式可参见文献 [6] 等,这里 不再给出.

#### 2.1.2 任意阶 Grad 矩方程组

正如引言中所论述,小矩数矩方程组的应用有较大的局限性,仅能用于气体不太稀薄的情形.文献 [50] 首次真正对大矩数 Grad 矩方程组进行求解.实际上该文献中考虑了任意阶 Grad 矩方程组,并给出了统一的数值格式.并在文献 [52] 中给出了该方程组的详细的推导.这里对任意阶 Grad 矩方程组简单介绍.

由于 (8) 中包含无数个方程, 实际使用中需要进行截断. Grad 13 矩方程组关注 13 个宏观量. 类似 地, 给定正整数  $2 \leq M \in \mathbb{N}$ , 仅关注  $\rho$ , u,  $\theta \to f_{\alpha}$ ,  $|\alpha| \leq M$ , 扔掉 (8) 中所有  $|\alpha| > M$  的方程, 这样可得 到一个包含有限个方程的方程组. 但是由于 (8) 中关于  $|\alpha| = M$  的方程组里包含  $f_{\alpha+e_d}$ , d = 1, ..., D, 使得方程组不封闭. 由于基函数的正交性, 直接令

$$f_{\alpha} = 0, \quad |\alpha| > M,\tag{9}$$

便获得了封闭的 M 阶矩方程组.为后文叙述方便,这里列出 Grad M 阶矩方程组如下:

$$\frac{\mathrm{d}f_{\alpha}}{\mathrm{d}t} + \sum_{d=1}^{D} \left( \theta \frac{\partial f_{\alpha-e_d}}{\partial x_d} + (1 - \delta_{M,|\alpha|})(\alpha_d + 1) \frac{\partial f_{\alpha+e_d}}{\partial x_d} \right) + \sum_{k=1}^{D} f_{\alpha-e_k} \frac{\mathrm{d}u_k}{\mathrm{d}t} \\
+ \sum_{k,d=1}^{D} \frac{\partial u_k}{\partial x_d} \left( \theta f_{\alpha-e_k-e_d} + (\alpha_d + 1) f_{\alpha-e_k+e_d} \right) + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{D} f_{\alpha-2e_k} \frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}t} \\
+ \sum_{k,d=1}^{D} \frac{1}{2} \frac{\partial \theta}{\partial x_d} \left( \theta f_{\alpha-2e_k-e_d} + (\alpha_d + 1) f_{\alpha-2e_k+e_d} \right) = Q_{\alpha}, \quad |\alpha| \leq M.$$
(10)

由于 *M* 的选取是任意的, 该方程组称为任意阶 Grad 矩方程组. 特别地, 当 D = 3, M = 2 时对 应的方程组就是著名的 10 矩方程组 <sup>[53, 54]</sup>. 当 D = 3, M = 3 时对应的方程组为 Grad 20 矩方程组 <sup>[6]</sup>.

#### 2.1.3 碰撞项的处理

由于 Boltzmann 方程中的二元碰撞比较复杂,直接基于二元碰撞为 Grad 矩方程组构造碰撞项 极为困难,文献 [6] 为 Grad 13 矩方程组给出了针对 Maxwell 分子的二元碰撞项的近似模型,对于非 Maxwell 分子或为更高阶矩方程组构造碰撞模型将变得异常困难,理论分析和实际计算时也鲜有使用. 实际使用中往往使用一些近似碰撞模型来替代二元碰撞,如 BGK 模型<sup>[55]</sup>、Shakhov 模型<sup>[56]</sup>、ES-BGK 模型<sup>[57]</sup>和线性化的二元碰撞模型<sup>[58]</sup>.

由于 BGK 模型、Shakhov 模型和 ES-BGK 模型形式上均非常简单, 基于 Grad 展开可推导任意 阶 Grad 矩方程组的碰撞模型, 详细的推导和结果见文献 [52,59,60]. 文献 [61] 给出了硬球和逆幂律模型的线性化二元碰撞模型的一组近似模型, 该模型既可看成是线性化二元碰撞的一个近似模型, 又可直接用来构造 Grad 矩方程组的碰撞模型. 综合 Grad 矩方程组的推导过程和碰撞项的处理, 便获得了封闭的 Grad 13 矩方程组和任意阶 Grad 矩方程组.

为了后文叙述方便,这里给出 BGK 碰撞模型下的  $Q_{\alpha}$  如下:

$$Q_{\alpha} = \begin{cases} 0, & |\alpha| = 0, 1, \\ -\frac{1}{\tau} f_{\alpha}, & |\alpha| \ge 2, \end{cases}$$
(11)

其中 τ 为弛豫时间.

# 2.2 Grad 矩方程组的不足

Grad 矩方程组自提出以来,受到广泛关注的同时也受到了各方面的质疑和指责. 文献 [62] 中列举 了一系列针对 Grad 矩方法的指责,包括方程组过于复杂、缺少适定的边界条件、缺少全局双曲性、无 法给出光滑激波结构、不满足熵条件和逼近非平衡态效率低等.下面对这些指责分别进行论述.

# 2.2.1 Grad 矩方程组过于复杂

相对于经典的流体力学方程组,如 Euler 方程组和 Navier-Stokes-Fourier(NSF)方程组,Grad 13 矩方程组由于有 13 个方程,且应力张量和热通量的方程项数很多而被指责方程组过于复杂.从(10) 可以看到任意阶矩方程组形式上也很复杂.这是这种指责的来源.文献 [50] 给出了一种任意阶 Grad 矩方程组的通用数值格式,该数值格式中并不需要显式地写出矩方程组的具体形式,只需 Grad 展开 中基函数的一些基本性质即可.该方法成功避开了 Grad 矩方程组的复杂带来的数值困难.文献 [51] 对任意阶 Grad 矩方程组进行了详细分析,研究了拟线性形式下的任意阶 Grad 矩方程组的系数矩阵, 揭示了该方程组的一些性质,并给出了一种全局双曲正则化矩方法,分析了特征波结构.该双曲正则 化矩方程组可以看成是 Euler 方程组的一个推广.所以全局双曲正则化矩方程组的性质类似于 Euler 方程组,本质上并不复杂.在文献 [63,64] 中分别对全局双曲正则化矩方程组进行了分析,可以将该方 程组写成非常简单的拟线性形式,矩方程组的形式也变得不再复杂.由于 Grad 矩方程组与全局正则 化矩方程组仅相差几项,所以基于文献 [63,64] 中分析,Grad 矩方程组可以通过较为简单的方式写出. 如今关于 Grad 矩方程组过于复杂的指责已不够客观.

# 2.2.2 缺少适定的边界条件

对于 Boltzmann 方程, Maxwell 边界条件<sup>[65]</sup> 通常被认为能够较好地处理稀薄流体的边界效应. 为 Grad 矩方程组构造边界条件的常用思路是文献 [6] 中提出的直接基于 Maxwell 边界条件为 Grad 矩

方程组构造边界条件. 在文献 [40,45] 中该方法分别被推广到正则化 13 矩方程组 (R13)<sup>[7,33]</sup> 和正则化 26 矩方程组 (R26)<sup>[40]</sup> 上. 文献 [59] 中更是将该思路推广到任意阶 Grad 矩方程组上. 但是这些边界 条件是否适定依然未知. 文献 [59,60,66] 中的数值结果证实基于上述的边界条件, 任意阶 Grad 矩方 程组的数值结果与实验结果和 DSMC<sup>[67]</sup> 的数值结果表现一致. 文献 [60] 证明了对于双曲正则化矩方 程组, 上述方式给定的边界条件的个数与矩方程组需要的边界条件个数相同. 关于边界条件的适定性 的理论分析还有待进一步研究, 从现有的结果来看边界条件是否适定并不是矩方法发展的核心问题.

## 2.2.3 缺少全局双曲性

Grad 矩方程组缺少全局双曲性最早可追溯至 Grad 矩方程组提出的第一篇文章 [6]. 该文献中, Grad 对 Grad 13 矩方程组的系数矩阵作了详细分析并给出了相应的特征多项式. 尽管 Grad 并未明 确指出该方程组缺少全局双曲性,但从文献 [6] 中给出的信息不难获得该结论. 故通常将 Grad 矩方程 组不全局双曲的发现归功于 Grad. 专著 [68] 中对一维流体情形下的 Grad 13 矩方程组的双曲性进行 了细致的研究,并给出了相应的双曲区域,如图 1(a) 所示. 从图中可以看出,方程组不是全局双曲的, 但平衡态 (Maxwellian) 在双曲区域内. 在文献 [69] 中,详细分析了 D = 1 情形下的任意阶 Grad 矩方 程组的双曲性,指出当  $M \ge 3$  时矩方程组均不是全局双曲的. Grad 矩方程组缺少双曲性是学界的共 识. 但文献 [70] 进一步指出,对于 Grad 13 矩方程组即使在平衡态附近都不是恒双曲的,即平衡态在 Grad 13 矩方程组双曲区域的边界上. 图 1(b) 中给出了 Grad 13 矩方程组双曲区域在  $\sigma_{12} - q_1$  平面过 平衡态的截面. 因此, Grad 矩方程组不仅缺少全局双曲性,即使在平衡态的任意小邻域内都不是恒双 曲的, Grad 矩方程组双曲性的缺失比前人的指责更严重. 在本节后面的部分将针对这项不足提出修 正方案,本质地解决双曲性缺失这一问题.

#### 2.2.4 无法给出光滑激波结构

Grad 在文献 [8] 中研究了 NSF 方程组和 Grad 13 矩方程组这两种模型对稳定激波结构的描述, 发现当激波的马赫数大于 1.65 时, Grad 13 矩方程组无法给出光滑的激波结构, 而会出现非物理子激 波. 他在文献 [7] 中论述说 Grad 13 矩方程组过于保守, 它拒绝给出可能不准确的预测结果. 这是 Grad 本人对非物理子激波的解释. 后人通过数值手段获得了 Grad 13 矩方程组对于马赫数大于 1.65 情形 下的激波结构<sup>[68]</sup>, 确实会出现非物理子激波现象. 由于 NSF 方程组对于任意强度的激波均能给出光 滑解, 所以 Grad 建议将 Grad 13 矩方程组修正为抛物方程, 从而解决该问题. 具体的做法将在本节的 后面部分给出.

#### 2.2.5 其他指责

除了上述几项指责外, Grad 矩方程组还受到其他方面的指责, 如不满足熵条件和逼近非平衡态效 率低等.这些指责有失偏颇.对于一般方程组来说, 满足熵条件自然是一个优良的性质, 但实际使用中 是否满足熵条件的重要性并不是本质的, 何况对于 Grad 矩方程组这样的模型, 由于 Grad 展开本身并 不能保正.在逼近非平衡态方面, 专著 [68] 中证实当矩数足够多时能够很好地描述非平衡态.

历史上对 Grad 矩方法的指责颇多, 通过上述分析, 真正困扰 Grad 矩方法发展的指责基本只有无法给出光滑激波结构、全局双曲性的丧失和缺少适定边界条件. 下面分这 3 个方面来论述.



#### 图 1 (网络版彩图) Grad 13 矩方程组的双曲区域

Figure 1 (Color online) Hyperbolicity region of Grad's 13 moment equations. (a) Hyperbolicity region for 1D flow; (b) the section of the hyperbolicity region by the  $\sigma_{12} - q_1$  plane crossing the Maxwellian

### 2.3 Grad 矩方程组的粘性正则化

针对 Grad 矩方程组对于高马赫数情形下无法给出光滑激波结构的不足, Grad 在文献 [7] 中给 出解释: Hermite 展开最可能给出的就是双曲型的微分方程组, 即传播速度有限的方程组; 相反地, Navier-Stokes 方程组以及其他所有由规范解导出的方程组 (Euler 方程组除外) 均是抛物的, 并表现出 无穷的传播速度. 为了数学上的简单以及为了易于对方程组的性质进行定性的描述, 人们常常更愿意 获得一个双曲方程组; 然而, 双曲方程组的解可能由于激波的出现而被破坏 (见第 33 节对 13 矩情形 的讨论), 因而为了某种目的人们似乎更愿意使用一个合适的抛物系统. 这样的系统可以通过某种插值 的方式获得, 即类似于在 Euler 方程组和 13 矩方程组之间插值出 Navier-Stokes 方程组的方法, 通过 一个平行的过程, 可从高阶矩的方程组中获得对四阶矩 (以及不含于 q<sub>i</sub> 的三阶矩) 的近似.

文献 [71] 对上述表述作了详细的数学解释. 除了上述表述外, 文献 [7] 中还从 13 矩方程组推导出 了一个抛物型方程组. 不过 Grad 对该方程组并不看重, 在之后的很长时间里鲜有关于该方程组的任 何论述公开发表. 直到 2003 年两位德国学者重新推导这一模型 <sup>[33]</sup>, 并详细研究该模型的性质. 他们 称该方法为 Grad 矩方法的正则化, 称该方法获得的方程组为正则化 13 矩方程组 (简称 R13 矩方程 组)<sup>[72]</sup>. 在文献 [35] 中, 作者采用一种称为 Order of Magnitude 的方法给出了 R13 矩方程组的另一种 推导 (所得结果形式上与原 R13 矩方程组稍有区别), 从而使之有更广泛的应用. 此后, 众多学者对这 一方程组的性质进行了深入的研究, 对于一些经典模型问题, 如激波结构、Couette 流等, 该模型表现 出了一定优越性, 尤其在对某些非平衡流体现象的定性描述上<sup>[44,45,72]</sup>. 不过由于 R13 矩方程组方程 个数较少, 在处理较为稀薄的流体时数值表现并不好, 数值结果与实验结果或 DSMC 方法所得结果有 一定差距. 在文献 [52] 中作者将该方法推广到了任意阶 Grad 矩方程组上, 并获得了相应的正则化矩 方程组. 这种方法在文献 [52] 中被称为 NRxx方法.

下面以正则化任意阶矩方程组为例来说明正则化方法的思路. 由式 (7) 可知, 矩系数  $f_{\alpha}$  满足一定约束关系, 所以可以从 u,  $\theta$  和  $f_{\alpha}$  中适当选取一组变量能表示所有 u,  $\theta$  和  $f_{\alpha}$ , 并将这组变量组成

一个向量记为 w. 记式 (8) 的左端为  $\mathcal{L}_{\alpha}(w)$ , 则式 (8) 可表示为

$$\mathcal{L}_{\alpha}(\boldsymbol{w}) = Q_{\alpha}$$

以 BGK 碰撞模型为例, 上式可重写为

$$f_{\alpha} = -\tau \mathcal{L}_{\alpha}(\boldsymbol{w}), \quad |\alpha| \ge 2.$$
(12)

方程 (12) 可看成是一个迭代格式, 且该迭代不改变 w 中的  $\rho$ , u 和  $\theta$ . 所以记迭代初值为  $w^{(0)}$ , 第 n 次迭代后的值记为  $w^{(n)}$ , 则有  $w^{(n)}$  中的  $\rho$ , u 和  $\theta$  与  $w^{(0)}$  中的相同. 取迭代初值为

$$f_{\alpha}^{(0)} = 0, \quad |\alpha| \ge 2$$

且假定  $\tau$  为小量,则通过迭代可以获得  $w^{(n)}$  中各个量的量级. 在文献 [52] 中通过分析得出

$$f_{\alpha}^{(n)} \sim \begin{cases} O(1), & |\alpha| = 0, \\ O(\tau), & |\alpha| = 2, 3, \\ O(\tau^{k}), & |\alpha| = 3k, 3k - 1 \ \vec{\mathfrak{U}} \ 3k - 2, \ 2 \leqslant k \leqslant n, \\ 0, & |\alpha| = 1 \ \vec{\mathfrak{U}} \ |\alpha| \geqslant 3n + 1. \end{cases}$$

对于给定正整数 2 ≤ *M* ∈ N, 选取足够大的 *n*, 扔掉  $f_{\alpha}^{(n)}$ ,  $|\alpha| = M + 1$  中的高阶项, 则可得  $f_{\alpha}$  的近似 表达式, 具体表达式从略 (详见文献 [52]). 使用该表达式替换 Grad 矩封闭 (9), 便可直接获得正则化 任意阶矩方程组. 由于  $|\alpha| = M$  对应的方程中含有二阶导数, 所以正则化矩方程组是一个抛物型系统.

实际的数值模拟证实, 正则化后的矩方程组在计算大马赫数情形下的激波结构时依然能给出光滑 的激波结构. 文献 [73] 详细研究了 R13 矩方程组的激波结构, 该文献的图 9 给出了 Grad 13 矩方程 组的非光滑激波结构和 R13 矩方程组的光滑激波结构. 当马赫数增加时, R13 矩方程组依然可以获得 光滑的激波结构, 且与 DSMC 的结果一致, 如文献 [73] 中的图 10 所示. 文献 [52] 详细研究了 R20 矩 方程组的激波结构, 并指出 R20 矩方程组不论是在较低马赫数还是对较高马赫数情形下, 都可获得光 滑的激波结构, 且数值结果与 DSMC 和离散速度的结果均一致.

# 2.4 Grad 矩方程组的全局双曲正则化

本文多次强调 Grad 矩方程组缺少全局双曲性.事实上,正如第 2.2 小节所指出的那样, Grad 13 矩方程组即使在平衡态的任意一个小领域内都不是恒双曲的<sup>[70]</sup>,这导致 Grad 13 矩方程组即使在平衡态附近都不是适定的.为弥补该缺陷,众多学者尝试了各种对矩方法的修正.美国数学家 Levermore 总结前人的一系列工作<sup>[18,22,74,75]</sup>,在文献 [23] 中提出了基于极大熵封闭的矩模型. 该模型性质优良, 是全局双曲的.但由于 Junk's line<sup>[43]</sup> 的存在,平衡态落在解的定义域的边界上,使得方程组弱解难以 定义.又因为包含热通量的极大熵模型在计算通量时需要求解一个带约束的优化问题,且该优化问题 可能是病态的,计算量极大.这使得极大熵模型迄今鲜有成功的数值应用.在这之后,文献 [76] 中提出 了基于 Pearson-IV 函数的矩封闭模型,该模型在一维微观空间下是全局双曲的,但对于三维情形还未 有全局双曲的矩模型提出.文献 [30] 提出了极大熵 14 矩模型的一个近似模型,该模型相比于极大熵 模型易于计算,但却丧失了部分双曲性,在计算强激波问题时解会跑出双曲区域<sup>[30]</sup>.

Grad 矩方程组双曲性缺失的问题困扰了学界 60 多年,直到近年来全局双曲正则化矩方法<sup>[51,69]</sup>的提出. 文献 [69] 中考察了一维微观空间下的任意阶 Grad 矩方程组,对其拟线性形式的系数矩阵进



图 2 无碰撞激波管问题的数值解. 其中"Grad"代表 Grad 矩方程组的数值解,"HME"代表全局双曲正则化矩 方程组的数值解

Figure 2 Numerical results for shock tube problem without collision term. "Grad" represents the numerical results of Grad's moment equations, and "HME" represents the numerical results of the globally hyperbolic moment equations. (a) Numerical solution of Grad moment equations; (b) numerical solution of global hyperbolic moment equations

行深入研究发现其特征多项式竟能使用非常简单的表达式写出,且该特征多项式仅依赖于平衡态变量 (密度、速度和温度)和最后两阶矩展开系数.通过对系数矩阵的结构进行分析,阐释了其特征多项式 具有如此良好性质的数学原因 (详见文献 [69]).基于该发现,为一维微观空间下的任意阶 Grad 矩方 程组提出了一个全局双曲正则化,该正则化在一定意义下<sup>1)</sup>是存在且唯一的,所得的矩方程组是全局 双曲的.文献 [77]中从离散速度<sup>[78]</sup>的角度给出了双曲正则化矩方程组的一个解释,并指出正则化矩 方程组可以看成是一种"智能"的离散速度方法.在文献 [51]中通过对于多维任意阶 Grad 矩方程组 进行研究,将一维情形下的双曲正则化矩方法推广到了多维情形,得到如下方程组:

$$\frac{\mathrm{d}f_{\alpha}}{\mathrm{d}t} + \sum_{d=1}^{D} \left( \theta \frac{\partial f_{\alpha-e_d}}{\partial x_d} + (1-\delta_{M,|\alpha|})(\alpha_d+1)\frac{\partial f_{\alpha+e_d}}{\partial x_d} \right) + \sum_{k=1}^{D} f_{\alpha-e_k} \frac{\mathrm{d}u_k}{\mathrm{d}t} \\
+ \sum_{k,d=1}^{D} \frac{\partial u_k}{\partial x_d} \left( \theta f_{\alpha-e_k-e_d} + (1-\delta_{M,|\alpha|})(\alpha_d+1)f_{\alpha-e_k+e_d} \right) + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{D} f_{\alpha-2e_k} \frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}t} \\
+ \sum_{k,d=1}^{D} \frac{1}{2} \frac{\partial \theta}{\partial x_d} \left( \theta f_{\alpha-2e_k-e_d} + (1-\delta_{M,|\alpha|})(\alpha_d+1)f_{\alpha-2e_k+e_d} \right) = Q_{\alpha}, \quad |\alpha| \leq M.$$
(13)

该矩方程组依然是全局双曲的. 通常称该方法为全局双曲正则化矩方法, 称所得方程组为全局双曲矩 方程组. 图 2 给出了无碰撞情形下 Grad 矩方程组和全局双曲正则化矩方程组关于激波管问题的数值 解. 计算时间约为 *t* = 0.11. 可以看出 Grad 矩方程组双曲性的缺少导致当解跑出双曲区域时解不稳 定, 使得温度接近于零. 全局双曲正则化矩方程组修正了该问题, 不会出现解的不稳定.

从式 (13) 可以看出, 全局双曲正则化只对 Grad 矩方程组做了非常小的改动, 所以在文献 [51] 中 证明了, 如果随着截断阶 M 的增加, 任意阶 Grad 矩方程组对 Boltzmann 方程有逼近性, 则全局双 曲正则化矩方程组也有相应逼近性且收敛率与任意阶 Grad 矩方程组相同. 此外, 文献 [51,69] 中还分 别对一维和多维情形下全局双曲矩方程组的特征波进行了分析, 所有特征波都是基本波且判定条件与 Euler 方程组的特征波判定条件一致, 方程组的性质也与 Euler 方程组的一致, 所以全局双曲正则化矩

<sup>1)</sup> 保证特征多项式仅依赖于平衡态变量, 详细讨论见文献 [69].





方程组可以看成是 Euler 方程组的一个推广.

自此困扰学界 60 多年的 Grad 矩方程组双曲性缺失的问题得到了一个不错的解决.此外,受文献 [69] 启发,文献 [79] 中采用基于积分的思路给出了一个一维情形下的类似的正则化方法,得到的方程组也是全局双曲的.文献 [80] 中给出了一种推广到多维的方式,但所得矩方程组不满足 Galilean 变换不变性.在文献 [64] 中通过采用下一小节中将介绍的模型约简框架获得了既满足全局双曲又满足 Galilean 变换不变的矩方程组.

#### 2.5 动理学方程模型约简框架

文献 [51,69] 中提出的全局双曲正则化矩方法本质地解决了 Grad 矩方程组双曲性缺失的问题. 但 是全局双曲正则化能将 Grad 矩方程组修正为双曲的原因依然未知. 文献 [63,64] 中分别从不同的角 度出发来探索全局双曲正则化的本质,并将其推广为了一种从动理学方程约简获得流体力学方程组的 方法.

文献 [63] 中重点研究了离散速度方法和全局双曲性正则化方法的相同点. 这两种方法都是全局 双曲的, 且乘速度算子 *ξ*·和空间微分算子 ∇*f* 都是解耦的. 基于这种认识, 将 Boltzmann 方程推广到 了一般的动理学方程上, 将 Grad 展开拓展为一般的对分布函数的 ansatz, 通过在计算空间微分算子 后添加一次截断, 使得乘速度算子与空间微分算子解耦, 从而获得了一种从一般动理学方程获得宏观 流体力学方程组的方法. 文献 [63] 中指出通常情况下基于这种框架获得的方程组都是全局双曲的, 并 给出了双曲性的判定条件. 基于该框架, 可以直接给出 Grad 13 矩方程组的双曲正则化.

文献 [64] 中重点研究了 Grad 矩方法和全局双曲正则化矩方法的不同. 图 3 中给出了一维情况下 Grad 矩方程组的推导过程. 分布函数所属的空间记为 Ⅲ, 对分布函数的 ansatz (如 *M* 阶 Grad 展开) 所属的空间记为 Ⅲ<sub>sub</sub>, 这里的投影定义为

$$\mathbb{H} \to \mathbb{H}_{sub}, \quad \mathcal{P}: f \to f_{ansatz}.$$

故图 3 中灰色大方框部分左侧的 Projection 对应于分布函数展开, Derivative 分别对应于计算时间和空间微分, Multiply velocity 对应于将乘速度算子作用到空间微分上, 图中两部分各自右侧的 Projection 代表着仅在 Elsub 中考虑方程的发展. 基于图 3 的方式便可直接获得 Grad 矩方程组, 因此一维情形下 Grad 矩方程组本质上在求解

$$\mathcal{P}\frac{\partial \mathcal{P}f}{\partial t} + \mathcal{P}\xi\frac{\partial \mathcal{P}f}{\partial x} = \mathcal{P}Q(\mathcal{P}f,\mathcal{P}f),\tag{14}$$

其中这里并不关注碰撞项的处理.但是从图 3 可以看出两个灰色大方框部分并不相同,这意味着 Grad 矩方法处理时间和空间导数的方式并不相同.若使用相同的方式处理时间和空间导数,便可将图 3 变





Figure 4 Diagram for the globally hyperbolic moment equations for the 1D Boltzmann equation



图 5 矩方程组边界条件构造思路 Figure 5 The strategy for constructing the boundary condition for moment equations

成图 4. 事实上,图 4 给出的是一维情形下全局双曲正则化矩方程组的推导.因此,全局双曲正则化矩 方法和 Grad 矩方法的本质区别在于是否使用相同的方式处理时间和空间导数.类似于 Grad 矩方法, 全局双曲正则化矩方法本质上在求解

$$\mathcal{P}\frac{\partial \mathcal{P}f}{\partial t} + \mathcal{P}\xi \mathcal{P}\frac{\partial \mathcal{P}f}{\partial x} = \mathcal{P}Q(\mathcal{P}f, \mathcal{P}f).$$
(15)

基于上述认识, 文献 [64] 给出了另一种从动理学方程组推导宏观流体力学方程组的一般性框架. 基于 该框架获得的方程组一般也是双曲的, 并给出了双曲性的判定条件.

上述两个框架给出了从一般动理学方程推导宏观流体力学方程组的方法.这些框架功能强大,已 经证实各种常见的全局双曲模型均可纳入这两个框架,如 Levermore 的极大熵模型<sup>[23]</sup>、离散速度方 法<sup>[78]</sup>、全局双曲正则化矩方法<sup>[51,69]</sup>、基于求积公式的矩方程组 [79] 和辐射输运领域的 *P<sub>N</sub>* 模型<sup>[81]</sup>、 *M<sub>N</sub>* 模型<sup>[82]</sup>等;基于这些框架,可以为不双曲的矩方程组提出正则化方案,如 Grad 13 矩方程组等; 更进一步地,可以基于这些框架推导新的模型,如满足 Galilean 变换不变的多维基于积分的矩方程 组<sup>[64]</sup>、全局双曲各向异性矩方程组<sup>[83]</sup>等.这些模型约简框架为动理学方程模型约简提供了新的策 略,对矩方法的广泛应用具有推动作用.

# 2.6 边界条件

气体动理学的很多问题涉及气体与固壁的相互作用,尤其是微流领域中,这一作用尤为重要.对于 Boltzmann 方程,通常使用的固壁边界条件为 Maxwell 提出的边条件,通常称为 Maxwell 边条件. 该边条件的思路是将气体与固壁的相互作用看成镜面反射和漫反射两种特殊情形的一个组合.

为矩方程组提供边界条件一般沿用文献 [6] 中为 Grad 13 矩方程组提供边条件的思路, 该思路如 图 5 所示. 首先基于 Grad 展开重构出相应的分布函数, 将矩方程组对应到 Boltzmann 方程, 然后使

用 Maxwell 边条件, 从而获得边界处的分布函数, 再根据分布函数与矩之间的关系从而获得矩方程组的边条件.

从上述构造思路可以看出矩方程组中的矩和分布函数展开本质地决定着最终的边界条件的构造, 矩方程组的矩封闭形式却并不影响边界条件的构造.这样做的优点在于为一个方程组构造的边界条件 可以直接适用于基于该方程组的正则化矩方程组上,如 Grad 13 矩方程组的边界条件可应用到 R13 矩 方程组上.缺点在于不同的矩方程组的边界处理一般也不同,尤其是对流方程,边条件取决于波的传 播方向,所以边界条件的适定性是无法保证的.事实上,由于 Grad 13 矩方程组本身不适定,其边条件 是否适定更难以论述.对于 R13 矩方程组,已有的结果证实文献 [84,85] 基于图 5 中思路构造的边界 条件在描述一些常见问题时具有不错的表现.

由于小矩数矩方程组在模拟较为稀薄的流体时效果不佳, 文献 [59] 中基于图 5 中思路为任意阶 Grad 矩方程组提出了相应的边界条件.由于全局双曲正则化矩方程组和粘性正则化矩方程组都是对 任意阶 Grad 矩方程组进行修正获得,所以该边界条件对于这两个方程组依然成立.关于边界条件的 适定性, 文献 [59] 中数值验证了使用该边条件 Grad 矩方程组能够描述 Couette 流、Poiseuille 流等常 见问题.对于全局双曲正则化矩方程组, 文献 [60,66] 中证明了该边条件的个数与全局双曲正则化矩 方程组需要的边条件个数是相同的,并数值验证了使用该边条件, 全局双曲矩方程组能够很好地描述 Couette 流、Poiseuille 流和二维方腔流等问题.

# 3 矩方法的数值方法

针对大矩数的矩方法,一个重要的突破在于快速数值方法的提出<sup>[50]</sup>.该方法的提出一方面使得对 于含有大矩数的矩方法的数值计算成为了可能,另一方面,从数值结果上,矩方法的许多性质一目了 然,对其研究和发展具有重大意义.本节主要介绍这一方面的相关工作.

# 3.1 大矩数矩方程组快速算法的一般框架

矩方程组可以认为是对于 Boltzmann 方程中的速度进行离散得到的结果, 而当考虑矩方程组的数 值格式时, 则是进一步对时间和空间进行离散. 在文献 [50] 中, 作者则考虑采用了另外一种思路, 即首 先对时间和空间进行离散, 然后再对速度变量进行离散, 这样同样可以得到矩方程组的数值格式. 为 叙述方便, 假定  $\boldsymbol{\xi} = (\xi_x, \xi_y, \xi_z)^{\mathrm{T}}, \boldsymbol{x} = (x, y, z),$  且分布函数  $f(t, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{\xi})$  仅与  $t, x, \boldsymbol{\xi}$  有关, 故下文中简记为  $f(t, x, \boldsymbol{\xi})$ . 对 x 的离散, 我们假定采用网格大小为  $\Delta x$  的均匀网格, 那么针对 Boltzmann 方程的一个 "数值格式"为

$$f_{j}^{n+1}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{2} [f_{j-1}^{n}(\boldsymbol{\xi}) + f_{j+1}^{n}(\boldsymbol{\xi})] - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \xi_{x} [f_{j+1}^{n}(\boldsymbol{\xi}) - f_{j-1}^{n}(\boldsymbol{\xi})] + \Delta t \cdot Q(f_{j}^{n}, f_{j}^{n})(\boldsymbol{\xi}).$$
(16)

上述格式为有限体积方法中常见的 Lax-Friedrichs 格式 (这里以此为例), 其中  $\Delta t$  为时间步长,  $f_j^n(\boldsymbol{\xi})$  为如下函数的近似:

$$\frac{1}{\Delta x} \int_{(j-1/2)\Delta x}^{(j+1/2)\Delta x} f(t_n, x, \boldsymbol{\xi}) \,\mathrm{d}x.$$

考虑 Grad 方程组,为进一步对速度进行离散,我们只需在式 (16) 中假定右端项中每个  $f_i^n(\boldsymbol{\xi})$  在空间

$$\mathbb{H}_{sub}^{[\boldsymbol{u}_{j}^{n},\theta_{j}^{n}]} = \operatorname{span}\left\{ \left. \mathcal{H}_{\alpha}^{[\boldsymbol{u}_{j}^{n},\theta_{j}^{n}]} \right| \left| \alpha \right| \leqslant M \right\}$$

中,同时在每个时间步后,将得到的  $f_j^{n+1}(\boldsymbol{\xi})$  投影至  $\mathbb{H}_{sub}^{[\boldsymbol{u}_j^{n+1}, \theta_j^{n+1}]}$  中,从而在新的时间步上,每个分布 函数也处于相应的有限维空间中.上式中的 M 同式 (9) 中的 M,因而整个过程恰好是 Grad 矩方法 在离散格式中的应用.

接下来讨论投影的实现.由于投影算子为线性算子,只需将其应用于式 (16) 右端中的每一项.而式 (16) 右端中的每一项皆可较容易地使用基函数  $\mathcal{H}^{[u_k^n, \theta_k^n]}_{\alpha}$  进行展开,其中针对不同的项, k 可为 j = 1, j, 或 j + 1.因而为实现这一投影过程,只需考虑如下问题:对于给定的  $u_1, u_2 \in \mathbb{R}^3$  以及  $\theta_1, \theta_2 \in \mathbb{R}^+$ , 已知

$$f(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{lpha \in \mathbb{N}^3} f_{lpha} \mathcal{H}^{[\boldsymbol{u}_1, \theta_1]}_{lpha}(\boldsymbol{\xi}),$$

求  $f \in \mathbb{H}_{sub}^{[u_2,\theta_2]}$ 中的投影

$$g(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{|\alpha| \leqslant M} g_{\alpha} \mathcal{H}_{\alpha}^{[\boldsymbol{u}_2, \theta_2]}(\boldsymbol{\xi})$$

中的展开系数  $g_{\alpha}$ . 由基函数的正交性不难得知,  $f \in \mathbb{H}_{sub}^{[u_2,\theta_2]}$ 中的投影等同于 f的截断

$$\sum_{|\alpha|\leqslant M} f_{\alpha} \mathcal{H}_{\alpha}^{[\boldsymbol{u}_1,\theta_1]}(\boldsymbol{\xi})$$

在  $\Pi_{sub}^{[u_2,\theta_2]}$  中的投影. 如果直接对上述展开式中的每一项进行投影, 则总计算量为  $O(N_M^2)$ , 其中  $N_M$  为上述展开式中基函数的个数, 为  $O(M^3)$  量级, 这样的计算量在 M 的值较大时难以接受. 文献 [50] 中提出了一种同伦算法, 令

$$F(\tau, \boldsymbol{\xi}) = \sum_{\alpha \in \mathbb{N}^3} F_{\alpha}(\tau) \mathcal{H}_{\alpha}^{[\boldsymbol{u}(\tau), \boldsymbol{\theta}(\tau)]}(\boldsymbol{\xi}), \qquad \tau \in [0, 1],$$
(17)

其中函数  $u(\tau)$  和  $\theta(\tau)$  为光滑函数, 且满足

 $\boldsymbol{u}(0) = \boldsymbol{u}_1, \quad \boldsymbol{u}(1) = \boldsymbol{u}_2, \quad \boldsymbol{\theta}(0) = \boldsymbol{\theta}_1, \quad \boldsymbol{\theta}(1) = \boldsymbol{\theta}_2.$ 

同时, 令  $F_{\alpha}(0) = f_{\alpha}$ 且

$$\partial_{\tau} F(\tau, \boldsymbol{\xi}) = 0, \qquad \forall \tau \in (0, 1), \quad \boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^3,$$
(18)

不难看出  $F_{\alpha}(1)$  即为所求的  $g_{\alpha}$ . 将展开式 (17) 代入 (18) 即可获得关于系数  $F_{\alpha}(\tau)$  的常微分方程 组,这一方程组的右端项量级为  $O(|u_1 - u_2| + |\theta_1 - \theta_2|)$ ,由式 (16) 可知在解光滑时,其大小事实上是  $O(\Delta t + \Delta x)$ ,因而采用高阶 Runge-Kutta 方法求解一步即可得到较好的近似解.此外,通过计算可以 得知,该方程组的右端项是一个稀疏矩阵乘向量的形式,因此这一问题求解的整体计算量仅为  $O(N_M)$ , 实现了计算效率上的巨大飞跃.这一同伦算法由文献 [50] 提出,而后文献 [66] 对其进行了改进,将方 程组写为常系数线性方程组,并提出了直接求解该方程组且计算量为  $O(MN_M)$  的算法,供解有间断 之处局部使用.在文献 [86] 中,该算法进一步被推广到更加一般的展开中.而这一系列工作之前,对大 矩数方程组的数值算法主要仅为一般的有限体积算法 <sup>[46,87]</sup>,计算量为  $O(N_M^2/M)$ .

由于各类正则化方法均可看作是 Grad 矩方法的某种修正,因而对于不同的正则化方法,只需对 上述算法稍加调整即可.对于粘性正则化方法,首先提出的是针对 R13 方程组的数值算法<sup>[88]</sup>,其中详 细地讨论了特征速度的计算和粘性项的处理; 文献 [50,89] 将文献 [88] 中的算法与上述同伦算法结合 在一起并运用到了大矩数粘性正则化的方程组中,同样的思路亦可应用于多原子气体中<sup>[90]</sup>.全局双曲 正则化的数值方法首见于文献 [60], 其中对正则化引入的非守恒部分使用了文献 [91] 中基于 DLM 理论 <sup>[92]</sup> 的方式进行求解.而文献 [86] 对此做出了进一步改进, 提出了对于一般的动理学方程模型约简 框架所对应的数值方法, 并不再需要基于路径选取的 DLM 理论.对于边界条件的处理通过 ghost 网格方法亦可方便地进行实现 <sup>[59]</sup>.此外, 当使用 BGK 类型的碰撞模型时, 对低维问题还可使用降维的方式进一步减少计算量 <sup>[66]</sup>.

# 3.2 稳态问题的数值方法

在许多情形下, 求解动理学方程 (组)的主要目的是为了获得方程 (组)的稳态解. 对此, 一个常用的方法是给定某个初值, 在此基础上使用时间向前发展的格式迭代至稳态. 然而对于一些问题, 收敛 至稳态的过程极其缓慢 (如文献 [93]), 这使得对直接求解稳态方程 (组)数值算法的研究成为了必要. 本节将对矩方法稳态问题数值求解的相关研究工作进行回顾.

在文献 [94] 中, Weiss 较早地对于激波结构问题的稳态数值解法进行了研究. 该文献研究了矩数 为 13, 14, 20 和 21 情形下的 Grad 矩方程组. 在这些情形下, 对于平面激波结构问题, 相应的模型均可化简为如下形式:

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{F}(\boldsymbol{w})}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{r}(\boldsymbol{w}),\tag{19}$$

其中 w 至多含有 4 个分量.因而可使用非线性方程组的迭代算法进行求解.类似的方法见于文献 [85] 对 Couette 流的研究.文献 [72] 对 R13 矩方程组激波结构进行了数值模拟,该方程组化简后得到仅包含两个变量的方程组,但较式 (19) 多出一粘性项.对该方程组离散后,亦可高效地使用拟牛顿迭代进行求解.Emerson 及其合作者在文献 [95] 中使用 R13 矩方程组对更加复杂的问题进行了求解,其基本方案首先仍是将方程组写为对流项、粘性项和源项 3 部分的组合,而对其中速度和压强的更新,则是假定其他物理量已知 (使用上一步迭代得到的结果),然后使用求解 Navier-Stokes 方程组时常用的SIMPLE 算法进行更新,而对其他物理量的更新则可根据更新后速度和压强求解一线性方程组获得.类似的方法在对于正则化 20 矩和 26 矩方程组中也可得到应用<sup>[40,42]</sup>.文献 [45] 针对更精细的边界条件给出了 R13 方程组的稳态求解器,其中并未对变量区别对待,但对于碰撞项则区分为了齐次部分与非齐次部分,在迭代时使用不同的方式处理.这一算法在文献 [44] 中被推广至二维情形.

对于大矩数方程组,由于变量个数多,迭代不易收敛,因而直接构造稳态求解器更加困难.但这方面的研究目前也获得了初步进展.在文献 [96] 中,作者提出了对于空间一维问题的基于非线性对称 Gauss-Seidel 和局部 Newton 迭代 (SGS-Newton) 的多重网格求解器,大大提升了求解的效率.对于包含系数  $f_{\alpha}$ ,  $|\alpha| \leq M$  的矩方程组, SGS-Newton 迭代的算法求解形如

$$R_{\alpha}(\boldsymbol{w}_{j-1}, \boldsymbol{w}_j, \boldsymbol{w}_{j+1}) = 0, \qquad j = 1, \dots, N, \quad |\alpha| \leq M$$

$$\tag{20}$$

的非线性代数方程组.不难看出式 (20) 即为矩方程组进行空间一阶离散后的形式. SGS-Newton 方法 的基本步骤如下:

(1) 给定初始猜测  $w_i^{(0)}$ , 并令 m = 0.

(2) 对于 j = 1 至 N, 依次通过 Newton 迭代法求解

$$R_{\alpha}(\boldsymbol{w}_{j-1}^{(m*)}, \boldsymbol{w}_{j}^{(m*)}, \boldsymbol{w}_{j+1}^{(m)}) = 0, \qquad |\alpha| \leqslant M.$$

这一步仅求解  $w_j^{(m*)}$ , 而  $w_{j-1}^{(m*)}$  和  $w_{j+1}^{(m)}$  已知, 当 j = 0 时使用边值条件.





(3) 对于  $j = N \cong 1$ , 依次通过 Newton 迭代法求解

$$R_{\alpha}(\boldsymbol{w}_{j-1}^{(m*)}, \boldsymbol{w}_{j}^{(m+1)}, \boldsymbol{w}_{j+1}^{(m+1)}) = 0, \qquad |\alpha| \leq M.$$

这一步仅求解  $w_j^{(m+1)}$ , 而  $w_{j-1}^{(m*)}$  和  $w_{j+1}^{(m+1)}$  已知, 当 j = N 时使用边值条件.

(4) 进行守恒量的校正.

(5) 计算残量  $R_{\alpha}(\boldsymbol{w}_{j-1}^{(m+1)}, \boldsymbol{w}_{j+1}^{(m+1)}),$ 当残量足够小时判定收敛, 并结束迭代; 否则令 m 为 m+1, 并返回步骤 (2).

上述算法可以很好地与多重网格方法结合在一起,在多重网格算法中,上述方法作为前后光滑子, 只需在每层网格上迭代少数几步.多重网格算法的整体框架与一般的多重网格方法相同,值得注意的 是,在细网格解向粗网格投影和粗网格解向细网格回代的过程中,文献 [96] 中的算法利用矩系数表达 的是分布函数这一特殊性质,使用上节中所介绍的同伦算法进行分布函数的投影,从而在投影前后有 效保持了所有守恒量的守恒性.

在文献 [97] 中, 上述 SGS-Newton 迭代被改进为 SGS-Richardson 迭代 (即将上述算法中的 Newton 迭代改为 Richardson 迭代), 并应用于半导体器件的模拟中, 在多重网格算法中获得了更高的效率. 同时, 作者发现使用完全多重网格 (FMG) 方法可以获得更好的加速效果. FMG 方法即对每一层网格上的解都使用一个 W 型多重网格方法进行求解, 图 6 显示了一个四层网格方法的示意图. 文献 [97] 中的算例展示了 FMG 方法在计算效率上的巨大提升.

此外,对于大矩数情形下的矩方法,还可在速度离散的方向上应用多重网格方法. 文献 [98] 实现了 这一方案,即把  $M = m_l$  的情形当作细网格解,而把  $M = m_{l-1}$  的情形当成粗网格解,其中  $m_{l-1} < m_l$ . 该方法的基本思路与谱多重网格方法<sup>[99]</sup> 类似,但实现中仍需使用同伦投影算法,这一方案在矩方法中 是极具特色的一项应用. 文献 [98] 中经过大量实验,给出  $m_{l-1}$  的一个较为合理的选取方式为  $[m_l/2]$ , 图 7 显示了该方法的加速效果.

# 4 数值正则化矩方法的应用

如前文所述,随着数值正则化矩方法,对矩方法在理论、模型框架、数值算法等各方面作出的改进,原先制约矩方法应用的诸如全局双曲化、一般性的正则化方法和边界条件处理等问题,有的已经得到较为完整和系统的解决,而有的尽管尚在继续研究探索,但初步的结果也已经足以支持比以往更



图 7 (网络版彩图) M = 10 时多重矩方法与单矩方法迭代效率比较,其中 L + 1 为总层数

Figure 7 (Color online) Efficiency comparison of the multilevel moment solver and the single level solver for M = 10, where L + 1 is the total levels

高矩数更大规模的矩方法计算.因此尽管数值正则化矩方法在理论和计算方法上都还有很大的提升空间,但它已经在稀薄流体<sup>[52,66]</sup>、微流<sup>[59,60,96]</sup>、电子输运<sup>[97,100~104]</sup>、等离子体<sup>[105,106]</sup>、密度泛函<sup>[107]</sup>等诸多领域产生了丰富的应用结果,现一一列举如下.

#### 4.1 稀薄流体

稀薄流体的数值模拟是矩方法最早关注的应用之一. 很多矩方法的早期工作,如 Grad 13 矩方 法<sup>[6]</sup>等,都是针对稀薄气体. 数值正则化矩方法同样也最先应用到了这个领域. 其初期的理论和计算 方法的工作如文献 [50,51,69,89] 也大都用稀薄流体计算作为数值算例. 而文献 [52] 在这些工作的基础 上,通过对矩系统的正则化方法的改进,将矩方法应用发展到了高速稀薄流体的数值计算和模拟. 文 献 [52] 首先将 Maxwell 迭代应用在无限矩系统上,并以此来确定在具体的 Kn 数下的矩系数大小; 然 后在对矩做截断的时候用保留的低阶矩对舍弃的高阶矩的误差主项进行了估计,完成了对矩系统的封 闭;并且,为便于在实际应用中实现,上述较为复杂的正则化项都做了线性化处理. 文献 [90] 则给出了 在多原子情形下的应用. 数值实验结果表明,在一维激波管和激波结构的数值模拟中,该正则化方法 对即便在马赫数高达 6.1 的情况下,仅用 24 矩模型即可给出令人满意的计算结果,参见文献 [90] 中的 图 7 和 8.

#### 4.2 微流

类似于稀薄流体的情形,在微流领域,当流体处于过渡区域 (0.1 < Kn < 10)时,传统的流体动力 学模型如 Euler 方程组和 Navier-Stokes 方程组很难准确地描述流体的状态,而矩方法作为 Boltzmann 方程的一种有效离散方式,在微流的情形下也可以看作是一种传统流体方程组的扩展模型.正和所有 的微流数值模型一样,有两个重要的问题必须得到解决,保双曲性和边界条件的处理.保双曲性问题在 之前的一系列矩方法的理论和计算方法的工作<sup>[50~52,69,89]</sup>中已经有较为完整的讨论,而在文献 [59,60] 中,矩方法作为对 Shakhov 模型 Boltzmann 方程的离散方式被引入了微流计算领域,并且较为详细地 讨论了对相应的边界条件的处理.以上这些工作在文章 [108]中进行了总结,此外,文献 [108]在这些 工作的基础上,提出了一个基于 Strang 分裂的二阶计算格式,使得计算效率大大提高.在文章 [108] 中,对边界条件的处理也再一次被提及,并且被重新表述为更容易理解的形式.从文献 [108] 中的图 4 和 5 可以看到, 随着矩阶数 M 的提高, 不论温度还是法向张力都有收敛的趋势. 而从文献 [60] 中相同的测试可知收敛值和 DSMC 模拟的结果一致.

#### 4.3 电子输运

描述电子在半导体材料中行为的一个重要方程是 Wigner 方程<sup>[109]</sup>, 它可看作是 Boltzman 方程的 一个推广.由于其和 Boltzmann 方程的相似性,将针对 Boltzman 方程求解的矩方法推广到对 Wigner 方程的求解也成为一个自然的想法.事实上,在矩方法建立的初期,和矩方法的双曲正则化工作<sup>[69]</sup> 几乎是同步的,就已将这一结果发展到了 Wigner 方程的离散求解和双曲正则化当中<sup>[100]</sup>.随着矩方 法正则化研究的深入<sup>[51]</sup>,以及受到矩方法在微流<sup>[60]</sup>、稀薄流体<sup>[52]</sup>等方向上取得进展的启发,在文 献 [60,100] 等工作的基础上,矩方法的研究工作在电子输运方向上也陆续有了突破.文献 [104] 得到 了在硅纳米线材 (SNW) 的电子输运问题中的计算结果;文献 [101] 使用正则化矩方法对 *n*<sup>+</sup> - *n* - *n*<sup>+</sup> 型二极管做了数值模拟,结果表明高阶矩模型计算方法能显著改善漂移 – 扩散模型的计算结果.以上 结果均和 DSMC 的数值结果进行了比较,并取得了一致.文献 [97] 增强了高阶矩模型计算方法模拟电 子输运问题的稳定性,并将文献 [96] 的工作推广到了电子输运领域,提出了针对硅半导体数值模拟的 非线性多重网格求解器.而文献 [103] 则进一步讨论了应用矩方法对一维的电子 – 光学声子散射模型 的离散.该文分析了采用结合了矩方法的守恒型有限体积数值离散下散射矩阵的数学性质,发现散射 矩阵的代数重数和相应的有向图的强连接个数是相同的,并给出了判断来自网格剖分的散射矩阵是否 不可约的判据,从而为进一步理解散射算子离散开辟了新的思路.

最后, 文献 [102] 系统地提出了用于求解 Wigner 方程的矩模型数值方法, 并和传统的离散速度模型的计算进行了比较. 其中对网格密度和矩阶数的系列数值收敛性测试, 参见文献 [102] 中的图 14. 该图是分别用 5 至 15 阶矩求解带量子加速而不带散射项的一维 Wigner 方程的数值收敛性结果. 相比 经典方法, 当矩数小的时候, 我们同样能观察到数值结果的振荡, 但随着矩展开阶数的增加, 这些振荡 会渐渐消失, 并且矩模型的结果也关于矩展开阶数的增加而趋于离散速度模型得到的参考解. 这些数 值实验验证了矩方法用于数值求解 Wigner 方程的可行性和相对离散速度模型的高效性.

#### 4.4 在等离子体和密度泛函领域的探索性工作

在等离子体计算领域,由于 Vlasov 方程和 Boltzmann 方程具有相同的对流项,因此当矩方法在 Boltzmann 方程的数值求解获得突破之后,继续将其推广应用到求解 Vlasov 方程是一个自然的想法. 特别是当文献 [51,69] 等一系列工作解决了守恒格式和全局双曲性之后,当计算处于强列的非平衡 态时,用充分高阶矩数进行计算也成为可能.这一点在 Vlasov 方程的数值求解中显得格外重要.文 献 [105] 成功地将矩方法扩展到了求解 Vlasov 方程,并且保证了质量和动量的守恒.在 Vlasov-Poisson 和 Vlasov-Poisson-Boltzmann 方程的数值模拟中,都能成功地捕捉到线性化朗道阻尼现象.而在含碰 撞项的例子中,更有趣的现象是当采用了不同宽度的空间网格 Δ*x* 之后,计算结果得到的数值衰减率 和空间网格宽度呈几乎严格的线性关系,以至于文献能通过一系列计算结果精确地预报出和理论结果 非常吻合的衰减率.

之后的工作<sup>[106]</sup>进一步将基于矩方法的数值模拟扩展到了 Vlasov-Maxwell 方程,并且在计算方法上保证了电荷、动量和能量的守恒以及数值稳定性,为矩方法进一步在等离子物理领域开展工作奠定了基础.

在电子输运和半导体材料计算的工作开展的同时,另一个研究的方向是考虑对稳态 Wigner 方程

的数值算法,这个问题是 DFT 和密度泛函领域的核心问题之一. 文献 [107] 在之前电子输运领域针对带时间项 Wigner 方程矩方法离散的基础上,完成了针对量子动理学矩系统的离散和封闭,并且保证了系统的全局双曲性. 在这个双曲矩系统下, Kohn-Sham 势能成为了该系统的一个非线性源项. 因此有可能成为在 DFT 领域研究中一个代替求解 Kohn-Sham 方程的新思路.

#### 4.5 应用领域研究的小结

总体而言,数值正则化矩方法在实际领域的应用还处于起步和初期阶段,但正如之前所述,在一些 对传统方法而言具有挑战性的重要研究问题上,如微流、稀薄流体、半导体计算乃至等离子体和 DFT 问题上,该方法都已经有了初步的结果,并表现出强大的生命力.有理由相信,随着矩方法本身理论和 数值方法的完善,以及各领域研究者对矩方法关注度的提高,数值正则化矩方法作为一种全新的数值 化自动建模手段和计算方法,势必在越来越多的实际问题和研究领域作出有意义的贡献.

# 5 小结与展望

如今矩方法在动理学领域不论是在模型发展上还是在数值模拟上都取得了一些进展,但距广泛的 工程应用还有较长距离.在模型方面,粘性正则化和全局双曲正则化分别解决了 Grad 矩方程组无光 滑激波结构的不足和双曲性缺失的不足,但构造能同时解决这两个不足的方法有待研发<sup>2)</sup>;对于任意 阶 Grad 矩方程组及其各种正则化矩方程组,在 Kn → 0 极限意义下的解的收敛性和在截断阶趋于无 穷向 Boltzmann 方程的逼近性都有待研究;现有的动理学模型约简框架能保证所得方程组的双曲性, 但其他性质,如稳定性、守恒性、熵条件等都仍缺乏有效的判定条件;极大熵模型数学性质优良,但数 值求解困难,是否能构造极大熵近似模型,在保留部分极大熵的数学性质的前提下使数值计算量可接 受,也是一个有意义的研究方向.

在数值方法方面,已有的数值格式已经能用于模拟各类模型问题,但这些格式大都是低阶格式,如 何构造高效、可靠的高阶或高分辨率格式还是一个难题;实际问题中不同区域流体稀薄程度可能相差 很大,需要的矩方程组的方程个数也不相同,构造根据流体稀薄程度自适应选择矩方程组的数值方法, 和矩方程组与其他模型,如 DSMC 等耦合的数值方法在工程应用中将有实际意义;动理学模型约简框 架提供了推导双曲矩方程组的一般性方法,构造针对该框架的数值方法框架可以将模型推导和数值格 式构造一体化.

矩方法如今已在稀薄流体、微流、电子输运、等离子体和密度泛函等领域取得一定进展,但这些 领域的进一步深入研究将是矩方法能否成功应用的关键,如电子输运领域,全局双曲正则化矩方法已 取得相当多的成果,但在等离子体领域,如何描述电磁场的作用还有待进一步的研究;在其他领域,如 颗粒流和量子气等领域,矩方法都可能有广阔的应用前景.

#### 参考文献 -

<sup>1</sup> Diperna R J, Lions P L. On the cauchy problem for boltzmann equations: global existence and weak stability. Ann Math, 1989, 130: 321–366

<sup>2</sup> Ukaij S. On the existence of global solutions of mixed problem for non-linear boltzmann equation. Proc Japan Academy, 1974, 50: 179–184

<sup>2)</sup> 粘性正则化方程组在无碰撞极限意义下, 退化为 Grad 矩方程组依然面临双曲性缺失的不足.

- 3 Arlottia L, Bellomob N, Lachowiczc M. Kinetic equations modelling population dynamics. Transport Theory Stat Phys, 2000, 29: 125–139
- 4 Barnes J E, Hernquist L. Transformations of galaxies. II. gasdynamics in merging disk galaxies. Astrophys J, 1996, 471: 115–142
- 5 Waldeer K T. The direct simulation Monte Carlo method applied to a boltzmann-like vehicular traffic flow model. Comput Phys Commun, 2003, 156: 1–12
- 6 Grad H. On the kinetic theory of rarefied gases. Commun Pure Appl Math, 1949, 2: 331–407
- 7 Grad H. Principles of the kinetic theory of gases. Handbuch der Physik, 1958, 12: 205–294
- 8 Grad H. The profile of a steady plane shock wave. Commun Pure Appl Math, 1952, 5: 257–300
- 9 Anderson J L, Spiegel E A. The moment method in relativistic radiative transfer. Astrophys J, 1972, 171: 127–138
- 10 Jenkins J T, Richman M W. Grad's 13-moment system for a dense gas of inelastic spheres. In: The Breadth and Depth of Continuum Mechanics. Berlin: Springer, 1986. 647–669
- 11 Kranyš M. Non truncated relativistic Chernikov-Grad 13-moment equations as an approach to nonstationary thermodynamics. Phys Lett A, 1970, 33: 77–78
- 12 McCormack F J. Kinetic equations for polyatomic gases: the 17-moment approximation. Phys Fluids, 1968, 11: 2533–2543
- 13 Truesdell C, Muncaster R G. Fundamentals of Maxwell's Kinetic Theory of a Simple Monatomic Gas: Treated as a Branch of Rational Mechanics. Manhattan: Academic Press, 1980
- 14 Zhdanov V M. The kinetic theory of a polyatomic gas. Zh Eksp Teor Fiz, 1968, 53: 2099–2108
- Ai D K. Cylindrical Couette flow in a rarefied gas according to Grad's equations. Hypersonic Research Project No. 56, California Insitute of Technology. 1960
- 16 Meador W E. A Critical Analysis of the Grad Approximation for Closing out the Magnetohydrodynamic Equations for Plasmas. NASA Technical Report R-325, National Aeronautic and Space Administration, 1969
- 17 Moses G A, Duderstadta J J. Improved treatment of electron thermal conduction in plasma hydrodynamics calculations. Phys Fluids, 1977, 20: 762–770
- 18 Müller I, Ruggeri T. Extended Thermodynamics. In: Springer Tracts in Natural Philosophy. New York: Springer-Verlag, 1993. 37
- 19 Cai Z, Fan Y, Li R. On hyperbolicity of 13-moment system. Kinetic Related Models, 2014, 7: 415-432
- 20 Eu B C. A modified moment method and irreversible thermodynamics. J Chem Phys, 1980, 73: 2958–2969
- 21 Eu B C. The modified moment method, irreversible thermodynamics, and the nonlinear viscosity of a dense fluid. J Chem Phys, 1981, 74: 6362–6372
- 22 Dreyer W. Maximisation of the entropy in non-equilibrium. J Phys A General Phys, 1987, 20: 6505-6517
- 23 Levermore C D. Moment closure hierarchies for kinetic theories. J Stat Phys, 1996, 83: 1021–1065
- 24 Alldredge G W, Hauck C D, Tits A L. High-order entropy-based closures for linear transport in slab geometry ii: a computational study of the optimization problem. SIAM J Sci Comput, 2012, 34: B361–B391
- 25 Alldredge G W, Schneider F. A realizability-preserving discontinuous Galerkin scheme for entropy-based moment closures for linear kinetic equations in one space dimension. J Comput Phys, 2015, 295: 665–684
- 26 Schaerer R, Bansal P, Torrilhon M. Entropy-based moment closures for gas dynamics. In: Proceedings of the 2nd European Conference on Non-equilibrium Gas Flows, Eindhoven, 2015. 15–63
- 27 Tallec P L, Perlat J P. Numerical Analysis of Levermore's Moment System. Rapport de recherche 3124, INRIA Rocquencourt. 1997
- 28 Abdel-Malik M R A, van Brummelen E H. Moment closure approximations of the Boltzmann equation based on  $\phi$ -divergences. J Stat Phys, 2016, 164: 77–104
- 29 Alldredge G W, Li R, Li W. Approximating the  $M_2$  method by the extended quadrature method of moments for radiative transfer in slab geometry. Kinetic Related Models, 2016, 9: 237–249
- 30 McDonald J, Torrilhon M. Affordable robust moment closures for CFD based on the maximum-entropy hierarchy. J Comput Phys, 2013, 251: 500–523
- 31 Pichard T, Alldredge G W, Brull S, et al. An approximation of the m<sub>2</sub> closure: application to radiotherapy dose simulation. http://stephane.brull.pagesperso-orange.fr/M2.pdf
- 32 Schaerer R P, Torrilhon M. On singular closures for the 5-moment system in kinetic gas theory. Commun Comput

Phys, 2015, 17: 371–400

- 33 Struchtrup H, Torrilhon M. Regularization of Grad's 13 moment equations: derivation and linear analysis. Phys Fluids, 2003, 15: 2668–2680
- 34 Struchtrup H. Macroscopic Transport Equations for Rarefied Gas Flows. Berlin: Springer, 2005
- 35 Struchtrup H. Stable transport equations for rarefied gases at high orders in the Knudsen number. Phys Fluids, 2004, 16: 3921–3934
- 36 Gupta V K. Mathematical modeling of rarefied gas-mixtures. Dissertation for Ph.D. Degree. Aachen: RWTH Aachen University, 2015
- 37 Rahimi B, Struchtrup H. Capturing non-equilibrium phenomena in rarefied polyatomic gases: a high-order macroscopic model. Phys Fluids, 2014, 26: 052001
- 38 Struchtrup H. Derivation of 13 moment equations for rarefied gas flow to second order accuracy for arbitrary interaction potentials. Multiscale Model Simul, 2005, 3: 221–243
- 39 Struchtrup H, Torrilhon M. Regularized 13 moment equations for hard sphere molecules: linear bulk equations. Phys Fluids, 2013, 25: 052001
- 40 Gu X J, Emerson D R. A high-order moment approach for capturing non-equilibrium phenomena in the transition regime. J Fluid Mech, 2009, 636: 177–216
- 41 McDonald J G, Groth C P T. Towards realizable hyperbolic moment closures for viscous heat-conducting gas flows based on a maximum-entropy distribution. Continuum Mech Thermodyn, 2013, 25: 573–603
- 42 Mizzi S, Gu X J, Emerson D R, et al. Computational framework for the regularized 20-moment equations for non-equilibrium gas flows. Int J Num Meth Fluids, 2008, 56: 1433–1439
- 43 Junk M. Domain of definition of Levermore's five-moment system. J Stat Phys, 1998, 93: 1143-1167
- 44 Rana A, Torrilhon M, Struchtrup H. A robust numerical method for the R13 equations of rarefied gas dynamics: application to lid driven cavity. J Comput Phys, 2013, 236: 169–186
- 45 Torrilhon M, Struchtrup H. Boundary conditions for regularized 13-moment-equations for micro-channel-flows. J Comput Phys, 2008, 227: 1982–2011
- 46 Au J D, Torrilhon M, Weiss W. The shock tube study in extended thermodynamics. Phys Fluids, 2001, 13: 2423–2432
- 47 Boillat G, Ruggeri T. Moment equations in the kinetic theory of gases and wave velocities. Continuum Mech Thermodyn, 1997, 9: 205–212
- 48 Müller I, Reitebuch D, Weiss W. Extended thermodynamics consistent in order of magnitude. Continuum Mech Thermodyn, 2002, 15: 113–146
- 49 Ruggeri T. Breakdown of shock-wave-structure solutions. Phys Rev E, 1993, 47: 4135–4140
- 50 Cai Z, Li R. Numerical regularized moment method of arbitrary order for Boltzmann-BGK equation. SIAM J Sci Comput, 2010, 32: 2875–2907
- 51 Cai Z, Fan Y, Li R. Globally hyperbolic regularization of Grad's moment system. Commun Pure Appl Math, 2014, 67: 464–518
- 52 Cai Z, Li R, Wang Y. Numerical regularized moment method for high Mach number flow. Commun Comput Phys, 2012, 11: 1415–1438
- 53 Brown S L. Approximate Riemann solvers for moment models of dilute gases. Dissertation for Ph.D. Degree. Ann Arbor: The University of Michigan, 1996
- 54 Holway L H. Kinetic Theory of Shock Structure Using an Ellipsoidal Distribution Function. Manhattan: Academic Press, 1966. 1: 193–215
- 55 Bhatnagar P L, Gross E P, Krook M. A model for collision processes in gases. I. small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. Phys Rev, 1954, 94: 511–525
- 56 Shakhov E M. Generalization of the Krook kinetic relaxation equation. Fluid Dyn, 1968, 3: 95–96
- 57 Andries P, Bourgat J F, Tallec P L, et al. Numerical comparison between the Boltzmann and ES-BGK models for rarefied gases. Comput Methods Appl Mech Engrg, 2002, 191: 3369–3390
- 58 Cercignani C. The Boltzmann Equation. Berlin: Springer, 1988
- 59 Cai Z, Li R, Qiao Z. NRxx simulation of microflows with Shakhov model. SIAM J Sci Comput, 2012, 34: A339–A369
- 60 Cai Z, Li R, Qiao Z. Globally hyperbolic regularized moment method with applications to microflow simulation. Comput Fluids, 2013, 81: 95–109

- 61 Cai Z, Torrilhon M. Approximation of the linearized Boltzmann collision operator for hard-sphere and inverse-powerlaw models. J Comput Phys, 2015, 295: 617–643
- 62 Torrilhon M. Special issues on moment methods in kinetic gas theory. Continuum Mech Thermodyn, 2009, 21: 341–343
- 63 Cai Z, Fan Y, Li R. A framework on moment model reduction for kinetic equation. SIAM J Appl Math, 2015, 75: 2001–2023
- 64 Fan Y, Koellermeier J, Li J, et al. Model reduction of kinetic equations by operator projection. J Stat Phys, 2016, 162: 457–486
- 65 Maxwell J C. On stresses in rarefied gases arising from inequalities of temperature. Proc Royal Soc London, 1878, 27: 304–308
- 66 Cai Z, Fan Y, Li R, et al. Dimension-reduced hyperbolic moment method for the Boltzmann equation with BGK-type collision. Commun Comput Phys, 2014, 15: 1368–1406
- 67 Bird G A. Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows. Oxford: Clarendon Press, 1994
- 68 Müller I, Ruggeri T. Rational Extended Thermodynamics. 2nd ed. In: Springer Tracts in Natural Philosophy. New York: Springer-Verlag, 1998. 37
- 69 Cai Z, Fan Y, Li R. Globally hyperbolic regularization of Grad's moment system in one dimensional space. Commun Math Sci, 2013, 11: 547–571
- 70 Cai Z N, Fan Y W, Li R. On hyperbolicity of 13-moment system. Kinetic Related Models, 2014, 7: 415-432
- 71 Torrilhon M. Characteristic waves and dissipation in the 13-moment-case. Continuum Mech Thermodyn, 2000, 12: 289–301
- 72 Torrilhon M, Struchtrup H. Regularized 13-moment equations: shock structure calculations and comparison to Burnett models. J Fluid Mech, 2004, 513: 171–198
- 73 Torrilhon M. Regularization of Grad's 13-Moment-Equations in Kinetic Gas Theory. Technical report, DTIC Document. 2011
- 74 Gorbin A N, Karlin I V. Thermodynamic parameterization. Phys A Stat Mech Appl, 1992, 190: 393–404
- 75 Gorbin A N, Karlin I V. Method of invariant manifolds and the regularization of acoustic spectra. Trans Theory Stat Phys, 1994, 23: 559–632
- 76 Torrilhon M. Hyperbolic moment equations in kinetic gas theory based on multi-variate Pearson-IV-distributions. Commun Comput Phys, 2010, 7: 639–673
- 77 Cai Z N, Fan Y W, Li R. From discrete velocity model to moment method. J Comput Math, in press [蔡振宁, 樊玉 伟, 李若. 从离散速度模型到矩方法. 计算数学, 待出版]
- 78 Broadwell J E. Study of rarefied shear flow by the discrete velocity method. J Fluid Mech, 1964, 19: 401-414
- 79 Koellermeier J, Schaerer R, Torrilhon M. A framework for hyperbolic approximation of kinetic equations using quadrature-based projection methods. Kinet Relat Mod, 2014, 7: 531–549
- 80 Koellermeier J, Torrilhon M. Hyperbolic moment equations using quadrature-based projection methods. In: Proceedings of the 29th International Symposium on Rarefiel Gas Dynamics, Xi'an, 2014. 1628: 626–633
- 81 Brunner T A, Holloway J P. One-dimensional Riemann solvers and the maximum entropy closure. J Quant Spectrosc Radiative Trans, 2001, 69: 543–566
- 82 Hauck C D. High-order entropy-based closures for linear transport in slab geometry. Commun Math Sci, 2011, 9: 187–205
- 83 Fan Y W, Li R. Globally hyperbolic moment system by generalized Hermite expansion. Sci Sin Math, 2015, 45: 1635–1676 [樊玉伟, 李若. 基于广义 Hermite 展开的全局双曲矩方程组. 中国科学: 数学, 2015, 45: 1635–1676]
- 84 Struchtrup H. Kinetic schemes and boundary conditions for moment equations. Z Angew Math Phys, 2000, 51: 346–365
- 85 Thatcher T, Zheng Y, Struchtrup H. Boundary conditions for Grad's 13 moment equations. Progress Comput Fluid Dyn, 2008, 8: 69–83
- 86 Cai Z, Torrilhon M. Numerical simulation of microflows using moment methods with linearized collision operator. submitted
- 87 Torrilhon M, Au J, Reitebuch D, et al. The Riemann-problem in extended thermodynamics. In: Hyperbolic Problems: Theory, Numerics, Applications. Basel: Birkhäuser, 2001. 140: 79–88

- 88 Torrilhon M. Two dimensional bulk microflow simulations based on regularized Grad's 13-moment equations. SIAM Multiscale Model Simul, 2006, 5: 695–728
- 89 Cai Z, Li R, Wang Y. An efficient NRxx method for Boltzmann-BGK equation. J Sci Comput, 2012, 50: 103–119
- 90 Cai Z, Li R. The NRxx method for polyatomic gases. J Comput Phys, 2014, 267: 63–91
- 91 Rhebergen S, Bokhove O, van der Vegt J J W. Discontinuous Galerkin finite element methods for hyperbolic nonconservative partial differential equations. J Comput Phys, 2008, 227: 1887–1922
- 92 Dal Maso G, LeFloch P G, Murat F. Definition and weak stability of nonconservative products. J Math Pures Appl, 1995, 74: 483–548
- 93 Aoki K, Degond P, Mieussens L. Numerical simulations of rarefied gases in curved channels: thermal creep, circulating flow, and pumping effect. Commun Comput Phys, 2009, 6: 919–954
- 94 Weiss W. Continuous shock structure in extended thermodynamics. Phys Rev E, 1995, 52: R5760-R5763
- 95 Gu X J, Emerson D R. A computational strategy for the regularized 13 moment equations with enhanced wallboundary equations. J Comput Phys, 2007, 255: 263–283
- 96 Hu Z C, Li R. A nonlinear multigrid steady-state solver for 1D microflow. Comput Fluids, 2014, 103: 193–203
- 97 Hu Z C, Li R, Qiao Z. Extended hydrodynamic models and multigrid solver of a silicon diode simulation. Commun Comput Phys, 2016, 20: 551–582
- 98 Hu Z C, Li R, Qiao Z. Acceleration for microflow simulations of high-order moment models by using lower-order model correction. arXiv:1608.08790
- 99 Rønquist E M, Patera A T. Spectral element multigrid. I. formulation and numerical results. J Sci Comput, 1987, 2: 389–406
- 100 Cai Z N, Fan Y W, Li R, et al. Quantum hydrodynamic model by moment closure of wigner equation. J Math Phys, 2012, 53: 103503
- 101 Hu Z C, Li R, Lu T, et al. Simulation of an n<sup>+</sup>-n-n<sup>+</sup> diode by using globally-hyperbolically-closed high-order moment models. J Sci Comput, 2014, 59: 761–774
- 102 Li R, Lu T, Wang Y, et al. Numerical validation for high order hyperbolic moment system of wigner equation. Commun Comput Phys, 2014, 15: 569–595
- 103 Li R, Lu T, Yao W. Discrete kernel preserving model for 1d electron–optical phonon scattering. J Sci Comput, 2015, 62: 317–335
- 104 Yao W Q, Li R, Lu T, et al. Globally hyperbolic moment method for BTE including phonon scattering. In: International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD), Glasgow, 2013. 300–303
- 105 Cai Z, Li R, Wang Y. Solving Vlasov equation using NRxx method. SIAM J Sci Comput, 2013, 35: A2807–A2831
- 106 Di Y N, Kou Z Z, Li R. High order moment closure with global hyperbolicity of Vlasov-Maxwell equations. Front Math China, 2015, 10: 1087–1100
- 107 Cai Z N, Fan Y W, Li R, et al. Quantum hydrodynamic model of density functional theory. J Math Chem, 2013, 51: 1747–1771
- 108 Cai Z N. Numerical simulation of microflows with moment method. In: Proceedings of the 4th Micro and Nano Flow Conference, Brunel, 2014. ID218
- 109 Wigner E. On the quantum correction for thermodynamic equilibrium. Phys Rev, 1932, 40: 749–759

# The development and application of the moment method in the gas kinetic theory

Zhenning CAI<sup>1</sup>, Yuwei FAN<sup>2</sup>, Zhicheng HU<sup>3</sup>, Ruo LI<sup>2</sup> & Heyu WANG<sup>4\*</sup>

1 Department of Mathematics, Duke University, Durham, NC27708, USA;

<sup>2</sup> Center for Applied Physics and Technology & School of Mathematical Sciences, Peking University, Beijing 100871, China;

<sup>3</sup> Department of Mathematics, College of Science, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 211106, China;

4 School of Mathematical Sciences, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China \*E-mail: wangheyu@zju.edu.cn

**Abstract** The moment method is not only a modeling tool that gives macroscopic fluid equations by reducing kinetic equations, but also a numerical method for solving kinetic equations. It has been the subject of rapid development, and in recent years has acquired widespread applications. In this paper, we review and summarize the research development of moment methods in kinetic theory from the aspects of modeling, numerical methods, and applications. First, we discuss the deficiencies of moment methods and summarize the remedy, where in particular the regularized moment method and globally hyperbolic moment methods for solving moment equations, and highlight the numerical regularized method for moment equations of arbitrary orders. In addition, this paper reviews the applications of moment methods in the fields of rarefield gases, microflows, electron transport, plasma, and density functionals and presents an outlook regarding the future development of moment methods.

**Keywords** gas kinetic theory, moment method, hyperbolicity, regularization, model reduction, numerical simulation, application



**Zhenning CAI** was born in 1987. He received the Ph.D. degree in computational mathematics from Peking University, China, in 2013. Currently, he is a postdoc at Duke University, North Carolina, USA. His research interests include computational fluid dynamics, kinetic theory, and quantum mechanics.



Yuwei FAN was born in 1989. He received the Ph.D. degree in computational mathematics from Peking University, Beijing, in 2016. Currently, he is a staff member at the Center for Applied Physics and Technology, Peking University. His research interests include gas kinetic theory, moment methods, and model reduction.



**Ruo LI** received his Ph.D. degree from Peking University, Beijing, in 2001. Currently, he is a professor at the Department of Scientific and Engineering Computing, School of Mathematical Sciences, Peking University. His research interests include computational fluid dynamics and adaptive methods.



Heyu WANG received his Ph.D. degree from the Hong Kong Baptist University, Hong Kong, in 2007. Currently, he is an associate professor at the Department of Computational Mathematics, School of Mathematical Sciences, Zhejiang University. His research interests include numerical solutions of partial differential equations.