arXiv:2302.00310v1 [physics.flu-dyn] 1 Feb 2023

按需粒子方法：理论分析、简化技术与模型扩展

N. G. Kallikounis 和 I. V. Karlin*Department of Mechanical and Process Engineering, ETH Zurich, 8092 Zurich, Switzerland(日期：2023年2月2日)

按需粒子方法 [B. Dorschner, F. B¨osch 和 I. V. Karlin, *Phys. Rev. Lett.***121**, 130602 (2018)] 近期采用守恒有限体积离散进行了公式化，并通过具有挑战性的基准测试进行了验证。在本文中，我们严格分析参考系变换的性质及其对模型精度的影响。基于这些考量，我们提出了提高格式效率、降低计算成本的策略。此外，我们通过准平衡弛豫对模型进行推广，使其包含可调的普朗特数。最后，我们将多尺度半拉格朗日格子玻尔兹曼公式中的概念应用于所提出的框架，进一步提升动理学模型的潜力并拓宽其适用范围。高马赫数可压缩流的数值模拟表明，该模型在广泛的条件下具有出色的精度和稳定性。

I. 引言

理解高速可压缩流动的本质，一直是科学与工程界长期追求的目标。在现代研究和技术领域，准确预测复杂的流体动力学特征至关重要，例如解读深空望远镜所拍摄图像中的天体物理喷流 [1, 2] ，以及设计高马赫数低空飞行器的机身和推进系统 [3]。纵观计算流体力学（CFD）的发展历程，人们提出了多种用于模拟高速流动的数值方法，包括人工黏度方法 [4], 、全变差递减（TVD） [5], 、本质无振荡（ENO）格式 [6, 7] 和加权本质无振荡（WENO）格式 [8, 9]。这类流动的复杂性使该领域成为活跃的研究方向 [10, 11],；保正限制器和目标本质无振荡（TENO）格式等新进展 [12], ，则进一步拓展了计算流体力学的计算域，使其能够研究更为奇特的流体动力学现象[13–15]。

与传统计算流体力学（CFD）不同，格子玻尔兹曼方法（LBM）通过由设计粒子构成的完全离散动力学系统的动力学，描述流体动力场的演化；这些粒子与离散速度 $\boldsymbol{c}_i$, $i = 0, \ldots, Q-1$相关联。系统状态用粒子分布函数 $f_i(\boldsymbol{x}, t)$表示，并随时间和空间演化，其过程由一个简单算法完成："沿链路 $\boldsymbol{c}_i$ 迁移，并在离散时间 t于节点 $\boldsymbol{x}$ 碰撞"。LBM 已发展为模拟复杂流动的多用途工具，应用范围包括过渡流 [16], 、复杂运动几何体中的流动 [17], 、热流与对流 [18–20], 、多相流与多组分流[21–24], 、反应流 [25] 以及稀薄气体 [26], 等近期实例；关于 LBM 及其应用领域的讨论，参见 [27–29]。然而，尽管 LBM 在近不可压缩流模拟中具有高效率和低数值耗散，但高速可压缩流的计算域仍面临诸多严峻挑战[18, 30–33]。将传统 LBM 拓展至可压缩流领域的主要方向包括：加入修正项的标准格子格子玻尔兹曼方法 [34–37],、多速格子 [38–42] 以及混合方法 [43–46]。

传统格子玻尔兹曼方法的一个共同特点是，粒子分布函数以固定的离散速度传播，这相当于将参考系固定在"静止"状态。众所周知，当流体速度明显偏离参考系速度时，误差和数值不稳定性会破坏求解结果，从而限制格子玻尔兹曼方法在高马赫数流动中的应用 [30, 34, 47]。一种解决方法是引入均匀 平移的晶格，即在数值计算域的每个网格点上，将参考系进行恒定平移 [48]。对于以单向流动为主的可压缩流动，该方法表现出色，并随着所选参考速度平移相应地移动了该方法的适用范围 [35, 42, 48]。虽然统一参考系平移这一概念保留了该格式的关键优势，例如简单性和精确传播，但对于流速和温度变化较大的流动，其潜力会有所减弱，因为实际流动速度与施加的参考系之间不可避免地存在较大偏差。

与传统的格子玻尔兹曼方法（LBM）不同，近期提出的按需粒子（PonD）方法在时空自适应参考系中重新表述动理学方程，该参考系由局部流体的实际速度和温度决定 [49]。PonD 方法引入了两个关键要素：首先，PonD 使用一致的方式表示不同参考系中的分布函数，这一操作称为参考系变换。其次，采用了预测-校正迭代循环，确保在局部共动参考系中实现传播步骤和碰撞步骤，从而提高精度和稳定性。PonD 的早期实现采用了半拉格朗日

* 通讯作者；ikarlin@ethz.ch

离散化，为适应变化的参考系提供了非格子灵活性，并通过一系列基准测试验证了核心概念，其中包括多相流和稀薄流 [50–56]。然而，半拉格朗日方法容易导致质量、动量和能量守恒误差，在存在间断（激波）的情况下会降低解的精度 [57]。为克服这些不足，文献 [57],提出了 PonD 的有限体积表述，其离散化遵循离散统一气体动理学格式（DUGKS） [58–60]。由此得到的守恒格式结合了基于粒子分布函数 Grad投影的参考系变换，在一系列具有挑战性的高超声速可压缩流基准测试中表现出色，其中包括近真空区域形成等极端流体动力学现象。

本文旨在进一步发展 PonD 的有限体积表述，探索简化格式并提高效率的策略。我们详细分析了求解方法，并阐述了参考系变换需要满足的要求。该格式扩展后纳入了强迫项和可变普朗特数。最后，我们将 [54] , 中提出的多尺度框架思想与 Grad投影参考系变换相结合。我们通过一系列数值实验验证了理论结果，并对该格式在具有挑战性的流体动力学流动中的表现进行了广泛的基准测试。

本文结构如下：第 II 节详细介绍自适应参考系下动理学方程的表述。第 III 节介绍一种动理学模型，该模型允许绝热指数和普朗特数可变。随后，第 IV 节阐述该模型的数值离散化。第 V 节对该模型进行广泛的基准测试，并展示参考系变换的重要概念。最后，第 VI 节给出结论。

II. 自适应参考系公式

A. 离散速度

不失一般性，我们考虑由厄米多项式 $c_{i\alpha}$ 的根通过张量积构造的二维离散速率，

$$\boldsymbol{c}_i = (c_{ix}, c_{iy}). \tag{1}$$

该模型由晶格温度 T_L 以及与向量 (1) 相关联的权重 W_i 表征，

$$W_i = w_{ix} w_{iy}, \tag{2}$$

其中 $w_{i\alpha}$ 为高斯–厄米求积的权重。离散速度及其对应的权重如表I所示。对于离散速率（1），粒子的速度 $\boldsymbol{v}_i^{\lambda_{\rm ref}}$是相对于参考系 $\lambda_{\rm ref}$定义的，该参考系由参考系速度 $\boldsymbol{u}_{\rm ref}$ 和参考系温度 $T_{\rm ref}$指定，

$$\lambda_{\rm ref} = \{\boldsymbol{u}_{\rm ref}, T_{\rm ref}\}, \tag{3}$$

$$\boldsymbol{v}_i^{\lambda_{\rm ref}} = \sqrt{\frac{T_{\rm ref}}{T_L}}\boldsymbol{c}_i + \boldsymbol{u}_{\rm ref}. \tag{4}$$

最优参考系是共动参考系，它由局部温度 $T_{\rm ref} = T(\boldsymbol{x},\ t)$ 和局部流速 $\boldsymbol{u}_{\rm ref} = \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x},\ t)$ 指定。

表 I. 晶格温度 T_L、厄米多项式的根 $c_{i\alpha}$ 和 $w_{i\alpha}$ 阶高斯–厄米求积的权重，以及术语说明。

Model	T_L	$c_{i\alpha}$	$w_{i\alpha}$	$D=2$
$D1Q3$	1	$0,$ $\pm\sqrt{3}$	$2/3$ $1/6$	$D2Q9$
$D1Q4$	1	$\pm\sqrt{3-\sqrt{6}}$ $\pm\sqrt{3+\sqrt{6}}$	$(3+\sqrt{6})/12$ $(3-\sqrt{6})/12$	$D2Q16$
$D1Q5$	1	0 $\pm\sqrt{5-\sqrt{10}}$ $\pm\sqrt{5+\sqrt{10}}$	$8/15$ $(7+2\sqrt{10})/60$ $(7-2\sqrt{10})/60$	$D2Q25$

B. 参考系变换

我们构建方法的一个关键环节，是将相对于某一λ 参考系定义的粒子分布函数 f_i^{λ}，变换到另一个参考系 λ'，

$$\lambda' = \{\boldsymbol{u}', T'\}. \tag{5}$$

在本文中，我们采用 [57] 的策略。记 $\boldsymbol{M}_k^{\lambda}$ 为 k 阶矩张量，

$$\boldsymbol{M}_k^{\lambda} = \sum_{i=0}^{Q-1} f_i^{\lambda} \underbrace{\boldsymbol{v}_i^{\lambda}\boldsymbol{v}_i^{\lambda}\cdots\boldsymbol{v}_i^{\lambda}}_{k}. \tag{6}$$

参考系变换由以下条件定义：阶数为 k =0、1、.....、K 的矩保持不变，

$$\boldsymbol{M}_k^{\lambda'} = \boldsymbol{M}_k^{\lambda},\ k = 0, 1, \ldots, K, \tag{7}$$

其中，K 表示要求具有参考系不变性的最高矩阶。随后，将变换后的分布函数表示为Grad投影：

$$f_i^{\lambda'} = W_i \sum_{n=0}^{K} \frac{1}{n!}\boldsymbol{\alpha}^{(n)}(\boldsymbol{m};\lambda')\boldsymbol{H}^{(n)}(\boldsymbol{c}_i), \tag{8}$$

其中，$\boldsymbol{H}^{(n)}(\boldsymbol{c}_i)$ 对应于格点速度的厄米多项式，而展开系数$\boldsymbol{\alpha}^{(n)}(\boldsymbol{m};\lambda')$的计算使得矩不变系统（7）得以满足（详见附录A）。后者取决于参考系不变矩向量 $\boldsymbol{m}=\{\boldsymbol{M}_0,\ldots,\boldsymbol{M}_K\}$和目标参考系 λ'。作为参考系变换的简写形式，我们使用以下公式：

$$f_i^{\lambda'}=\mathcal{G}_{i,\lambda}^{\lambda'}f^{\lambda}. \tag{9}$$

C. 求解方法

我们考虑一种简单的动理学模型，在绝热指数和普朗特数固定的条件下，该模型可还原可压缩流体动力学。动理学演化可以在任意常数四参数参考系 λ 中表述，

$$\partial_t f_i^{\overline{\lambda}}+\boldsymbol{v}_i^{\overline{\lambda}}\cdot\nabla f_i^{\overline{\lambda}}=\Omega_{f,i}^{\overline{\lambda}}, \tag{10}$$

其中 $\Omega_{f,i}^{\overline{\lambda}}$ 是粒子分布函数的碰撞核。粒子分布函数 $f_i^{\lambda(\boldsymbol{x},t)}$ 是相对于局部参考系 $\lambda(\boldsymbol{x},t)$描述的，该参考系通常不同于监测参考系 λ。参考系变换将这两个参考系中的粒子分布函数联系起来，

$$f_i^{\overline{\lambda}}=\mathcal{G}_{i,\lambda(\boldsymbol{x},t)}^{\overline{\lambda}}f^{\lambda(\boldsymbol{x},t)}. \tag{11}$$

为简化记法，我们省略参考系对时空的依赖，并将 λ 保留用于局部参考系 $\lambda=\lambda(\boldsymbol{x},t)$。上横线和下标用于表示在整个计算域内均匀的监测参考系（例如 λ）。将变换后的粒子分布函数（11）代入演化方程（10），即可得到 PonD 的最终方程，

$$\partial_t(\mathcal{G}_{i,\lambda}^{\overline{\lambda}}f^{\lambda})+\boldsymbol{v}_i^{\overline{\lambda}}\cdot\nabla(\mathcal{G}_{i,\lambda}^{\overline{\lambda}}f^{\lambda})=\mathcal{G}_{i,\lambda}^{\overline{\lambda}}\Omega_f^{\lambda}. \tag{12}$$

我们强调，动理学方程 (12) 是相对于均匀参考系 λ 表述的。因此，方程 (12) 是一个典型的动理学方程，具有常特征速度，适用于格子玻尔兹曼方法中的常规数值实现，例如沿特征线积分。这里的必要环节是引入参考系变换算子。变化参考系的影响体现在非局部梯度运算中的操作 $\mathcal{G}_{i,\lambda}^{\lambda}f^{\lambda}$。以上观察至关重要，并决定了参考系变换必须满足的要求。

以下几点值得说明：

- 原则上，动理学方程可以相对于任意参考系建立。因此，不同的监测点可以采用不同的参考系。通过适当的参考系变换，可以确保不同参考系中的演化保持一致。在离散速度趋于无穷多的极限下，每个参考系中的解都完全相同，因此没有理由这样做。但在离散系统中，解的精度取决于所采用的参考系与实际局部参考系的接近程度，而实际局部参考系由局部流动条件决定。因此，通过这一过程，我们可以使给定模型在整个计算域内的精度最大化。

- 直接对具有自适应速度的动理学方程进行表述，会引入额外的“强迫”项，其中包含关于粒子速度的导数。关于这一方向的详细讨论，可参见 [61]。在 PonD 的背景下，求解方法由一组方程构成，每个方程都处于各自空间均匀的参考系中。这种策略避免了显式计算“强迫”项的要求。相应的代价则是需要进行参考系变换。

- 需要围绕哪个“生成框架”的监测点变换计算域？得益于系统的双曲性，只需变换数值依赖域。当然，对于椭圆型方程，这一过程的计算开销将难以承受。

D. 流体动力学极限分析

我们使用 Chapman–Enskog 方法分析控制动理学方程（12），并研究矩不变系统的一致性要求。我们将方程（12）改写为具有 Bhatnagar–Gross–Krook（BGK）碰撞算子的形式，并引入弛豫时间 τ_1 的小参数 ϵ，

$$\partial_t(\mathcal{G}_{i,\lambda}^{\overline{\lambda}}f^{\lambda})+\boldsymbol{v}_i^{\overline{\lambda}}\cdot\nabla(\mathcal{G}_{i,\lambda}^{\overline{\lambda}}f^{\lambda})=\frac{1}{\epsilon\tau_1}\mathcal{G}_{i,\lambda}^{\overline{\lambda}}(f^{\lambda,\mathrm{eq}}-f^{\lambda}). \tag{13}$$

按照惯用记法，我们引入以下多尺度展开，

$$\partial_t=\partial_t^{(1)}+\epsilon\partial_t^{(2)}+\mathcal{O}(\epsilon^2), \tag{14}$$
$$f_i^{\lambda}=f_i^{\lambda,(0)}+\epsilon f_i^{\lambda,(1)}+\epsilon^2 f_i^{\lambda,(2)}+\mathcal{O}(\epsilon^3). \tag{15}$$

我们将展开式代入控制方程，并按不同阶数分离动力学

（ϵ），

$$\mathcal{O}(\epsilon^0): \quad \mathcal{G}^{\overline{\lambda}}_{i,\lambda} f^{\lambda,(0)} = \mathcal{G}^{\overline{\lambda}}_{i,\lambda} f^{\lambda,\mathrm{eq}}, \tag{16}$$

$$\mathcal{O}(\epsilon^1): \quad \partial_t^{(1)}(\mathcal{G}^{\overline{\lambda}}_{i,\lambda} f^{\lambda,(0)}) + \boldsymbol{v}_i^{\overline{\lambda}} \cdot \nabla(\mathcal{G}^{\overline{\lambda}}_{i,\lambda} f^{\lambda,(0)}) = -\frac{1}{\tau_1} \mathcal{G}^{\overline{\lambda}}_{i,\lambda} f^{\lambda,(1)}, \tag{17}$$

$$\mathcal{O}(\epsilon^2): \quad \partial_t^{(2)}(\mathcal{G}^{\overline{\lambda}}_{i,\lambda} f^{\lambda,(0)}) + \partial_t^{(1)}(\mathcal{G}^{\overline{\lambda}}_{i,\lambda} f^{\lambda,(1)}) + \boldsymbol{v}_i^{\overline{\lambda}} \cdot \nabla(\mathcal{G}^{\overline{\lambda}}_{i,\lambda} f^{\lambda,(1)}) = -\frac{1}{\tau_1} \mathcal{G}^{\overline{\lambda}}_{i,\lambda} f^{\lambda,(2)}. \tag{18}$$

在 $\mathcal{O}$（ϵ^0）阶，我们得到平衡分布函数，

$$\mathcal{G}^{\overline{\lambda}}_{i,\lambda} f^{\lambda,(0)} = \mathcal{G}^{\overline{\lambda}}_{i,\lambda} f^{\lambda,\mathrm{eq}} \Leftrightarrow f_i^{\lambda,(0)} = f_i^{\lambda,\mathrm{eq}}, \tag{19}$$

这意味着满足以下可解性约束，

$$\sum_{i=0}^{Q-1} \{1, \boldsymbol{v}_i^{\overline{\lambda}}, (v_i^{\overline{\lambda}})^2\} \mathcal{G}^{\overline{\lambda}}_{i,\lambda} f^{\lambda,(k)} = \{0, \mathbf{0}, 0\}, \ k \geq 1. \tag{20}$$

1. *Equilibrium moments*

平衡矩的函数形式是分析的基本要素，并决定了所恢复的流体动力学方程。我们强调，本文讨论并列于表 I 中的所有格子，都会在共动参考系中再现与其麦克斯韦–玻尔兹曼（MB）连续对应形式相符的相关平衡矩。例如，即使对于标准的 $D2Q9$ 晶格，采用共动参考系进行计算

$$\lambda = \{\boldsymbol{u}, T\}, \tag{21}$$

$$\boldsymbol{v}_i^{\lambda} = \sqrt{T/T_L}\boldsymbol{c}_i + \boldsymbol{u}, \tag{22}$$

$$f_i^{\mathrm{eq},\lambda} = \rho W_i, \tag{23}$$

获取以下各矩，

$$\boldsymbol{J}^{\mathrm{eq},\lambda} = \sum_{i=0}^{Q-1} \boldsymbol{v}_i^{\lambda} f_i^{\mathrm{eq},\lambda} = \boldsymbol{J}^{\mathrm{MB}}, \tag{24}$$

$$\boldsymbol{P}^{\mathrm{eq},\lambda} = \sum_{i=0}^{Q-1} \boldsymbol{v}_i^{\lambda}\boldsymbol{v}_i^{\lambda} f^{\mathrm{eq}}_{,\ i\ \ \lambda} = \boldsymbol{P}^{\mathrm{MB}}, \tag{25}$$

$$\boldsymbol{Q}^{\mathrm{eq},\lambda} = \sum_{i=0}^{Q-1} \boldsymbol{v}_i^{\lambda}\boldsymbol{v}_i^{\lambda}\boldsymbol{v}_i^{\lambda} f_i^{\mathrm{eq},\lambda} = \boldsymbol{Q}^{\mathrm{MB}}, \tag{26}$$

$$\boldsymbol{q}^{\mathrm{eq},\lambda} = \sum_{i=0}^{Q-1} \boldsymbol{v}_i^{\lambda}(v_i^{\lambda})^2 f_i^{\mathrm{eq},\lambda} = \boldsymbol{q}^{\mathrm{MB}}, \tag{27}$$

$$\boldsymbol{R}^{\mathrm{eq},\lambda} = \sum_{i=0}^{Q-1} (v_i^{\lambda})^2 \boldsymbol{v}_i^{\lambda}\boldsymbol{v}_i^{\lambda} f_i^{\mathrm{eq},\lambda} = \boldsymbol{R}^{\mathrm{MB}}. \tag{28}$$

其中 MB 矩为，

$$\boldsymbol{J}^{\mathrm{MB}} = \rho\boldsymbol{u}, \tag{29}$$

$$\boldsymbol{P}^{\mathrm{MB}} = \rho T\boldsymbol{I} + \rho\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}, \tag{30}$$

$$\boldsymbol{Q}^{\mathrm{MB}} = \rho T\overline{\boldsymbol{u}\boldsymbol{I}} + \rho\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}, \tag{31}$$

$$\boldsymbol{q}^{\mathrm{MB}} = \rho\boldsymbol{u}(u^2 + T(D+2)), \tag{32}$$

$$\boldsymbol{R}^{\mathrm{MB}} = \rho T((D+2)T + u^2)\boldsymbol{I} + \rho((D+4)T + u^2)\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}. \tag{33}$$

此处，上划线表示对称化。尽管共动参考系中的所有相关平衡矩都是准确的，但当使用另一种非共动的任意参考系 $\lambda = \{\boldsymbol{u}, T\}$ 进行计算时，未必也能得出相同结论。事实上，各种晶格之间的关键差异在于平衡矩的参考系不变性。

在非共动参考系 λ 中，平衡分布函数 $f^{\mathrm{eq},\ \lambda}$ 不再由简单的表达式 ρW_i 给出，而必须通过计算得到。利用参考系变换即可轻松实现这一点，

$$f^{\mathrm{eq},\overline{\lambda}} = \mathcal{G}^{\overline{\lambda}}_{\lambda} f^{\mathrm{eq},\lambda} = \rho\mathcal{G}^{\overline{\lambda}}_{\lambda} W, \tag{34}$$

该变换作用于格子权重 W 向量，将其从共动参考系 λ 变换到 λ 参考系。根据构造，只要平衡矩具有参考系不变性，λ 参考系中的平衡矩就与 MB 矩相匹配。例如，对于由 $D2Q16$ 晶格支持的三阶 Grad 投影，以下关系成立，

$$\boldsymbol{Q}^{\mathrm{eq},\overline{\lambda}} = \sum_{i=0}^{Q-1} \boldsymbol{v}_i^{\overline{\lambda}}\boldsymbol{v}_i^{\overline{\lambda}}\boldsymbol{v}_i^{\overline{\lambda}} f_i^{\mathrm{eq},\overline{\lambda}} = \boldsymbol{Q}^{\mathrm{eq},\lambda} = \boldsymbol{Q}^{\mathrm{MB}}. \tag{35}$$

然而，对于未包含在参考系不变矩集合中的高阶矩，则会出现偏差。继续沿用同一示例，λ 参考系中的四阶平衡矩变为，

$$\boldsymbol{R}^{\mathrm{eq},\overline{\lambda}} = \boldsymbol{R}^{\mathrm{MB}} + \boldsymbol{R}'. \tag{36}$$

偏差的显式形式可通过对式（33）—（34）进行代数运算得到，

$$\boldsymbol{R}' = -\rho(\boldsymbol{\xi}\boldsymbol{\xi}\xi^2 + \theta((D+2)\theta\boldsymbol{I} + \xi^2\boldsymbol{I} + (D+4)\boldsymbol{\xi}\boldsymbol{\xi})), \tag{37}$$

其中，

$$\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{u} - \overline{\boldsymbol{u}}, \ \theta = T - \overline{T}. \tag{38}$$

如前述表达式所示，当监测参考系 λ 趋近于共动参考系 λ 时，偏差将消失。

2. *Full invariant moment system*

我们来考虑这样一种情况：晶格的各向同性支持矩的参考系不变性，直至

四阶。特别是，这种情况对应于表 I 中提到的 $D2Q25$ 晶格。对式 (17) 求零阶矩，得到以下方程，

$$\partial_t^{(1)}\rho^{\mathrm{eq},\overline{\lambda}} + \nabla\cdot\boldsymbol{J}^{\mathrm{eq},\overline{\lambda}} = 0, \tag{39}$$

其中，

$$\rho^{\mathrm{eq},\overline{\lambda}} = \sum_{i=0}^{Q-1}\mathcal{G}_{i,\lambda}^{\overline{\lambda}} f^{\mathrm{eq},\lambda}, \tag{40}$$

$$\boldsymbol{J}^{\mathrm{eq},\overline{\lambda}} = \sum_{i=0}^{Q-1}\boldsymbol{v}_i^{\overline{\lambda}}\mathcal{G}_{i,\lambda}^{\overline{\lambda}} f^{\mathrm{eq},\lambda}. \tag{41}$$

这两个矩都属于参考系变换的参考系不变系统。因此，它们同样可以在共动参考系中进行计算，

$$\rho^{\mathrm{eq},\overline{\lambda}} = \rho^{\mathrm{eq},\lambda} = \rho, \tag{42}$$

$$\boldsymbol{J}^{\mathrm{eq},\overline{\lambda}} = \boldsymbol{J}^{\mathrm{eq},\lambda} = \rho\boldsymbol{u}. \tag{43}$$

将式（42）、（43）代入式（39），可得连续性方程，

$$\partial_t^{(1)}\rho + \nabla\cdot(\rho\boldsymbol{u}) = 0. \tag{44}$$

对于式（17）中的其余守恒矩，同样的推理也适用，因为所有相关的矩都是参考系不变的。在欧拉阶，动量和能量守恒定律如下，

$$\partial_t^{(1)}(\rho\boldsymbol{u}) + \nabla\cdot\boldsymbol{P}^{\mathrm{MB}} = 0, \tag{45}$$

$$\partial_t^{(1)}(2\rho E) + \nabla\cdot\boldsymbol{q}^{\mathrm{MB}} = 0. \tag{46}$$

类似地，二阶方程（18）的矩可恢复纳维–斯托克斯–傅里叶（NSF）贡献，

$$\partial_t^{(2)}\rho = 0, \tag{47}$$

$$\partial_t^{(2)}(\rho\boldsymbol{u}) + \nabla\cdot\boldsymbol{P}^{(1)} = 0, \tag{48}$$

$$\partial_t^{(2)}(2\rho E) + \nabla\cdot\boldsymbol{q}^{(1)} = 0, \tag{49}$$

其中

$$\boldsymbol{P}^{(1)} = -\tau_1\left(\partial_t^{(1)}\boldsymbol{P}^{\mathrm{MB}} + \nabla\cdot\boldsymbol{Q}^{\mathrm{MB}}\right), \tag{50}$$

$$\boldsymbol{q}^{(1)} = -\tau_1\left(\partial_t^{(1)}\boldsymbol{q}^{\mathrm{MB}} + \nabla\cdot\boldsymbol{R}^{\mathrm{MB}}\right). \tag{51}$$

可压缩 NSF 方程可通过将 $\mathcal{O}(\epsilon^1)$ $\mathcal{O}(\epsilon^2)$ 各项贡献相加得到，

$$\partial_t\rho = -\nabla\cdot(\rho\boldsymbol{u}), \tag{52}$$

$$\partial_t(\rho\boldsymbol{u}) = -\nabla\cdot(\rho\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}) - \nabla\cdot\boldsymbol{\pi}, \tag{53}$$

$$\partial_t(\rho E) = -\nabla\cdot(\rho E\boldsymbol{u}) - \nabla\cdot\boldsymbol{q} - \nabla\cdot(\boldsymbol{\pi}\cdot\boldsymbol{u}), \tag{54}$$

其中 $\boldsymbol{\pi}$ 是压力张量，

$$\boldsymbol{\pi} = \rho T\boldsymbol{I} - \mu\left(\boldsymbol{S} - \frac{2}{D}(\nabla\cdot\boldsymbol{u})\boldsymbol{I}\right), \tag{55}$$

$\boldsymbol{S}$ 应变率张量，

$$\boldsymbol{S} = \nabla\boldsymbol{u} + \nabla\boldsymbol{u}^{\top}, \tag{56}$$

$\boldsymbol{q}$ 为热流，

$$\boldsymbol{q} = -\kappa\nabla T, \tag{57}$$

and

$$\mu = \tau_1\rho T, \tag{58}$$

$$\kappa = \tau_1\rho C_p T. \tag{59}$$

3. *Third-order invariant moment system*

我们继续分析一个三阶矩不变量系统，它对应于 $D2Q16$晶格。欧拉阶动力学以及 NSF 密度和动量贡献包含参考系不变量矩。因此，公式（45）—（46）以及 NSF 密度和动量贡献（47）—（48）均可精确获得。然而，NSF 能量贡献包含能流张量的通量，而该通量并非参考系不变量。根据公式（37），在监测参考系 λ而非共动参考系 λ中计算这一矩会引入误差。这种偏差会在 NSF 能量方程（49）中产生一个扩散误差项，

$$\partial_t^{(2)}(2\rho E) = \nabla\cdot\tau_1\left(\partial_t^{(1)}\boldsymbol{q}^{\mathrm{MB}} + \nabla\cdot\boldsymbol{R}^{\mathrm{MB}} + \frac{\partial\boldsymbol{R}'}{\partial\boldsymbol{u}}\cdot\nabla\boldsymbol{u} + \frac{\partial\boldsymbol{R}'}{\partial T}\cdot\nabla T\right). \tag{60}$$

正如上述分析所预期的那样，即使存在极强的间断，$D2Q16$ 晶格在无黏欧拉气体动力学系统中也表现出色。当存在显著的黏性效应时，误差项（公式（60）中的最后一项）会影响解的精度。误差的大小随参考系的空间变化而变化，换言之，随速度场和温度场的梯度而变化。正如后续数值模拟所示，使用 $D2Q16$ 晶格可以精确捕捉基准黏性流体动力学流动，这表明误差项的大小相当微弱。然而，随着速度和温度梯度增大，误差项会在解中显现。第V节B借助数值模拟对这一问题作进一步讨论。

4. *Second-order invariant moment system*

最后，我们考察二阶参考系不变矩系统的流体动力学性质，其中一个

典型示例是 $D2Q9$ 晶格。此类模型无法将完整的能量通量张量及更高阶张量（$\boldsymbol{Q}, \boldsymbol{R}$）作为参考系不变矩。按照前述情形的相同推理，我们发现，欧拉级动力学的能量方程（46）以及 NSF 级动力学的动量方程和能量方程（48）、（49）中均引入了误差项。对于没有激波、相对平滑的流动，数值证据表明，$D2Q9$ 模型中的误差项影响相当小。一个突出的例子是平流涡旋；研究表明，即使涡旋马赫数和对流马赫数分别处于 $\mathrm{Ma}_v = 0.8$ 和 $\mathrm{Ma}_a = 100$ [49]的范围内，该涡旋仍能被准确捕捉。然而，对于存在激波的流体动力学流动，参考系变化导致的误差不可忽略。值得注意的是，欧拉阶的激波动力学无法得到准确描述，进而导致激波传播速度出现误差。

5. *Summary of observations*

我们根据帧不变矩系统的阶数，总结动理学模型的适用范围：

- 二阶（$D2Q9$）：适用于可压缩流动中的平滑区域。
- 三阶（$D2Q16$）：适用于存在激波的可压缩流动，且耗散效应较小（欧拉流动）。
- 四阶（$D2Q25$）：通常适用于纳维–斯托克斯–傅里叶流动。

我们利用上述层级，通过本框架实现最高效率。具体而言，低阶模型可用于流动的平滑区域，而高阶模型可用于流体动力学梯度陡峭的区域。在下一节中，我们将本着 [54] 的精神，讨论不同模型之间的耦合。

E. 多尺度帧变换

对于参考系变换，Grad 投影方法在稳定性和效率方面具有优势。下面我们展示其另一项优势：只需对框架进行少量改动，并承担有限的计算开销，即可在整个计算域中采用不同的格子。其核心思想是将多尺度概念 [54] 与 Grad 投影参考系变换相结合。

我们考虑两个阶数不同的速度集，

$$\mathcal{V}_q = \{\boldsymbol{c}_i^q, i = 0, \ldots, q-1\},$$
$$\mathcal{V}_Q = \{\boldsymbol{c}_i^Q, i = 0, \ldots, Q-1\},$$

其中 $q < Q$。我们区分与从 λ 到 λ'的坐标系变换相耦合的两种不同操作：

- 升阶：升阶操作将低阶 q-模型切换为高阶 Q-模型，因此需要一个映射，

$$f_q^\lambda \to f_Q^{\lambda'}. \tag{61}$$

- 投影：投影操作将高阶 Q-模型切换为低阶 q-模型，因此需要一个映射，

$$f_Q^\lambda \to f_q^{\lambda'}. \tag{62}$$

这两种操作的构建都需要确定 Grad 展开的适当展开系数。我们回顾一下，展开系数是矩和参考系 λ' 的函数。

1. *Lifting*

对于提升操作，我们可以将参考系变换所需的矩列表 $\boldsymbol{m}_{q\to Q}$ 表示为如下组合：

$$\boldsymbol{m}_{q\to Q} = \{\boldsymbol{m}_q, \boldsymbol{m}_{Q-q}\}, \tag{63}$$

其中，$\boldsymbol{m}_q$ 可通过操作获得，而 $\boldsymbol{m}_{Q-q}$则构成其余未知的高阶矩。升阶操作包括指定相应的贡献，如下所示：

$$\boldsymbol{m}_q = \mathcal{M}_{q,\lambda} f_q^\lambda, \tag{64}$$
$$\boldsymbol{m}_{Q-q} = \boldsymbol{m}_{Q-q}^{\mathrm{eq}}. \tag{65}$$

其中，$\mathcal{M}_{q,\ \lambda}$是分布函数到矩的映射矩阵。确定所需的矩后，提升后的分布函数的构造方式与第 II B 节类似。展开系数由矩 $\boldsymbol{m}_{q\to Q}$ 和参考系 λ'计算得到，

$$\boldsymbol{\alpha}_n = \boldsymbol{\alpha}_n(\boldsymbol{m}_{q\to Q}; \lambda'). \tag{66}$$

随后可根据 Grad 展开求得提升后的分布函数 $f_Q^{\lambda'}$，

$$f_{Q,i}^{\lambda'} = W_i^Q \sum_{n=0}^{K} \frac{1}{n!} \boldsymbol{\alpha}^{(n)}(\boldsymbol{m}_{q\to Q}; \lambda') \boldsymbol{H}^{(n)}(\boldsymbol{c}_i^Q), \tag{67}$$

其中，W_i^Q、$\boldsymbol{H}^{(n)}$（$\boldsymbol{c}_i^Q$）和 K 分别是高阶模型的权重、厄米多项式和展开阶数。

2. Projection

在投影步骤中，高阶分布函数 f_Q^λ 包含了构造低阶分布函数$f_q^{\lambda'}$ 所需的 q 个线性独立矩的子集。因此，与提升过程不同，这里没有信息缺失，而且可以通过 f_Q^λ直接获得低阶矩向量 $\boldsymbol{m}_{Q\to q}$ ，

$$\boldsymbol{m}_{Q\to q} = \mathcal{M}_{Q,\lambda} f_Q^\lambda. \tag{68}$$

与升阶操作类似，投影后的粒子分布函数 $f_q^{\lambda'}$ 由 Grad 展开给出，

$$f_{q,i}^{\lambda'} = W_i^q \sum_{n=0}^{k} \frac{1}{n!} \boldsymbol{\alpha}^{(n)}(\boldsymbol{m}_{Q\to q};\lambda') \boldsymbol{H}^{(n)}(\boldsymbol{c}_i^q), \tag{69}$$

其中，W_i^q、 $\boldsymbol{H}^{(n)}$（$\boldsymbol{c}_i^q$）和 k分别是低阶模型的权重、厄米多项式和展开阶数。

III. 可变绝热指数与普朗特数

A. 动理学模型

通过双分布函数方法[42]，可以将该动理学模型扩展至具有可变绝热指数的情形。第二组分布函数（g-分布函数）用于描述与非平动自由度相关的内能，从而实现可调的绝热指数 $\gamma = C_p/C_v$，其中 $C_p = C_v + 1$ 为理想气体的恒压比热容， C_v 为定容比热容[62, 63]。控制动力学方程可写为:

$$\partial_t f_i + \boldsymbol{v}_i \cdot \nabla f_i = \Omega_{f,i} = \frac{1}{\tau_1}(f_i^{\mathrm{eq}} - f_i), \tag{70}$$

$$\partial_t g_i + \boldsymbol{v}_i \cdot \nabla g_i = \Omega_{g,i} = \frac{1}{\tau_1}(g_i^{\mathrm{eq}} - g_i), \tag{71}$$

此外，碰撞算子可以纳入向准平衡态的中间弛豫，从而实现可变普朗特数 [42, 64],

$$\Omega_{f,i} = \frac{1}{\tau_1}(f_i^{\mathrm{eq}} - f_i) + \left(\frac{1}{\tau_1} - \frac{1}{\tau_2}\right)(f_i^{*} - f_i^{\mathrm{eq}}), \tag{72}$$

$$\Omega_{g,i} = \frac{1}{\tau_1}(g_i^{\mathrm{eq}} - g_i) + \left(\frac{1}{\tau_1} - \frac{1}{\tau_2}\right)(g_i^{*} - g_i^{\mathrm{eq}}), \tag{73}$$

其中 f_i^*， g_i^*是 $f-$和 $g-$分布函数的准平衡分布，而弛豫时间 τ_2 决定了普朗特数。密度 ρ、动量 $\rho\boldsymbol{u}$ 和总能量 ρE 的局部守恒律为:

$$\rho = \sum_{i=0}^{Q-1} f_i = \sum_{i=0}^{Q-1} f_i^{\mathrm{eq}}, \tag{74}$$

$$\rho\boldsymbol{u} = \sum_{i=0}^{Q-1} \boldsymbol{v}_i f_i = \sum_{i=0}^{Q-1} \boldsymbol{v}_i f_i^{\mathrm{eq}}, \tag{75}$$

$$\rho E = \sum_{i=0}^{Q-1} \frac{v_i^2}{2} f_i + \sum_{i=0}^{Q-1} g_i = \sum_{i=0}^{Q-1} \frac{v_i^2}{2} f_i^{\mathrm{eq}} + \sum_{i=0}^{Q-1} g_i^{\mathrm{eq}}, \tag{76}$$

其中，理想气体的总能量为,

$$\rho E = C_v \rho T + \frac{\rho u^2}{2}. \tag{77}$$

共动参考系中的平衡分布函数如下,

$$f_i^{\mathrm{eq}} = \rho W_i, \tag{78}$$

$$g_i^{\mathrm{eq}} = \left(C_v - \frac{D}{2}\right) T \rho W_i. \tag{79}$$

动力黏度、体积黏度和热导率的表达式为 [42],

$$\mu = \tau_1 \rho T, \tag{80}$$

$$\varsigma = \left(\frac{1}{C_v} - \frac{2}{D}\right)\mu, \tag{81}$$

$$\kappa = \tau_2 \rho C_p T. \tag{82}$$

因此，普朗特数为,

$$\mathrm{Pr} = \frac{\mathrm{C_p}\mu}{\kappa} = \frac{\tau_1}{\tau_2}. \tag{83}$$

对于 $\mathbf{Pr} < 1$，准平衡分布的设计旨在保持中心热流，从而得到以下表达式,

$$f_i^* = f_i^{\mathrm{eq}} + W_i \boldsymbol{Q} \cdot (\boldsymbol{e}_i\boldsymbol{e}_i\boldsymbol{e}_i - 3T\boldsymbol{e}_i\boldsymbol{I})/6T^3, \tag{84}$$

$$g_i^* = g_i^{\mathrm{eq}} + W_i \boldsymbol{\varsigma} \cdot \boldsymbol{e}_i / T, \tag{85}$$

其中， $\boldsymbol{e}_i = \boldsymbol{v}_i - \boldsymbol{u}$、 $\boldsymbol{Q}$ 是非平衡三阶通量张量，而 $\boldsymbol{\varsigma}$ 是与内自由度相关的能量通量,

$$\boldsymbol{Q} = \sum_{i=0}^{Q-1} \boldsymbol{e}_i\boldsymbol{e}_i\boldsymbol{e}_i (f_i - f_i^{\mathrm{eq}}), \tag{86}$$

$$\boldsymbol{\varsigma} = \sum_{i=0}^{Q-1} \boldsymbol{e}_i (g_i - g_i^{\mathrm{eq}}). \tag{87}$$

B. 关于 $g-$ 分布函数的说明

我们注意到，到目前为止介绍的概念同样适用于 $g-$分布函数，唯一的区别在于所需的参考系不变矩必须

由相应的 $g-$ 晶格支持。Chapman–Enskog 分析 [42] 表明， $g-$ 二阶及以下的平衡矩足以恢复 NSF 方程。因此，本研究可以放心地将 $D2Q9$用于 $g-$分布函数。参考系变换（第 IIB 节）及其多尺度实现（第 IIE 节）同样适用于 $g-$ 分布函数，但需注意，最高阶参考系不变矩为二阶。

IV. 数值实现

A. 有限体积离散

我们按照 PonD-DUGKS 框架 [57, 58] 的思路进行有限体积离散。根据上述概念，动理学方程可以在任意参考系 λ 中表述。我们首先介绍普朗特数为 $\mathrm{Pr}=1$ 时的离散化。下一节将说明如何扩展到可变普朗特数。

1. Updating rule

动理学模型 (70)-(71) 的演化可离散如下，

$$\tilde{f}_i^{\lambda}(\boldsymbol{x}_j,t_{n+1})=\left(\frac{2\tau-\delta t}{2\tau+\delta t}\right)\tilde{f}_i^{\lambda}(\boldsymbol{x}_j,t_n)+\left(\frac{2\delta t}{2\tau+\delta t}\right)f_i^{\mathrm{eq},\lambda}(\boldsymbol{x}_j,t_n)-\frac{\delta t}{V_j}F_{f,i}^{\lambda}(\boldsymbol{x}_j,t_{n+1/2}),\tag{88}$$

$$\tilde{g}_i^{\lambda}(\boldsymbol{x}_j,t_{n+1})=\left(\frac{2\tau-\delta t}{2\tau+\delta t}\right)\tilde{g}_i^{\lambda}(\boldsymbol{x}_j,t_n)+\left(\frac{2\delta t}{2\tau+\delta t}\right)g_i^{\mathrm{eq},\lambda}(\boldsymbol{x}_j,t_n)-\frac{\delta t}{V_j}F_{g,i}^{\lambda}(\boldsymbol{x}_j,t_{n+1/2}).\tag{89}$$

更新方程通过对参考系 λ 中表述的连续方程 (70)-(71) 在以 $\boldsymbol{x}_j$ 为中心、体积为 V_j 的控制体内，从时间 t_n 到 $t_{n+1}=t_n+\delta t$ 进行积分推导而得，其中对流项采用中点法，碰撞项采用梯形法 [58]。为消除隐式性，DUGKS 格子格式采用标准格子玻尔兹曼方法中的变量变换 [65, 66]

$$\tilde{\phi}_i^{\lambda}=\phi_i^{\lambda}-\frac{\delta t}{2}\Omega_{\phi,i}^{\lambda}=\phi_i^{\lambda}-\frac{\delta t}{2\tau}(\phi_i^{\mathrm{eq},\lambda}-\phi_i^{\lambda}),\tag{90}$$

其中， ϕ 表示 f和 g分布函数，而 $\Omega_{\phi,\ i}$是式 (70)–(71) 中定义的 BGK 碰撞核。分布函数 $F_{\phi,\ i}^{\lambda}(\boldsymbol{x}_j,\ t_{n+1/2})$ 穿过控制体表面的通量定义为：

$$F_{\phi,i}^{\lambda}(\boldsymbol{x}_j,t_{n+1/2})=\int_{\partial V_j}(\boldsymbol{v}_i^{\lambda}\cdot\boldsymbol{n})\phi_i^{\lambda}(\boldsymbol{x},t_{n+1/2})d\boldsymbol{S},\tag{91}$$

其中， $\boldsymbol{n}$ 是垂直于表面、指向外侧的单位向量。最后需要指出，在有限体积框架下，分布函数和碰撞项均为单元平均量，

$$\phi_i^{\lambda}(\boldsymbol{x}_j,t_n)=\frac{1}{V_j}\int_{V_j}\phi_i^{\lambda}(\boldsymbol{x},t_n)d\boldsymbol{x}.\tag{92}$$

用于演化位置 $(\boldsymbol{x}_j,\ t_n)$ 处粒子分布函数的参考系，根据已知的流速和温度设定为共动参考系，

$$\lambda(\boldsymbol{x}_j,t_n)=\{\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_j,t_n),T(\boldsymbol{x}_j,t_n)\}.\tag{93}$$

2. Flux evaluation

更新方程 (88)、(89) 的关键在于通量项 $F_{\phi,\ i}^{\lambda}(\boldsymbol{x}_j,\ t_{n+1/2})$ 的计算，该项包含单元界面 $\boldsymbol{x}_b$ 和时间 $t_{n+1/2}$ 处未知的粒子分布函数 $\phi_i^{\lambda}(\boldsymbol{x}_b,\ t_{n+1/2})$。用于通量计算的参考系为 $\lambda_F=\{\boldsymbol{u}_F,T_F\}$，其参考系速度 $\boldsymbol{u}_F$ 和温度 T_F 由界面 $\boldsymbol{x}_1$， $\boldsymbol{x}_2$ 相邻单元中心的平均参考系构造得到，

$$\boldsymbol{u}_F=\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_1,t_n)+\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_2,t_n)\right),\tag{94}$$

$$T_F=\frac{1}{2}\left(T(\boldsymbol{x}_1,t_n)+T(\boldsymbol{x}_2,t_n)\right).\tag{95}$$

沿特征线对方程 (70)–(71) 积分半时间步长后可知，所需的粒子分布函数 $\phi_i^{\lambda_F}(\boldsymbol{x}_b,\ t_{n+1/2})$ 与时间 t_n 处已知的粒子分布函数之间满足以下方程 [58],

$$\bar{\phi}_i^{\lambda_F}(\boldsymbol{x}_b,t_{n+1/2})=\bar{\phi}_i^{+,\lambda_F}(\boldsymbol{x}_b-\boldsymbol{v}_i^{\lambda_F}\delta t/2,t_n),\tag{96}$$

其中，

$$\bar{\phi}_i^{\lambda_F}=\phi_i^{\lambda_F}-\frac{\delta t/2}{2}\Omega_{\phi,i}^{\lambda_F},\tag{97}$$

$$\bar{\phi}_i^{+,\lambda_F}=\phi_i^{\lambda_F}+\frac{\delta t/2}{2}\Omega_{\phi,i}^{\lambda_F}.\tag{98}$$

式（96）本质上是一个半时间半拉格朗日步，终点位于界面 $\boldsymbol{x}_b$，时间为 $t_{n+1/2}$。随后，在时间 t_n，于界面相邻单元中计算粒子分布函数 $\bar{\phi}^{+,\ \lambda_F}_{\ i}$以及空间梯度 $\boldsymbol{\sigma}_i^{\lambda_F}=\nabla\bar{\phi}^{+,\ \lambda_F}_{\ i}$。在本研究中，使用 Van Leer 和 minmod 斜率限制器计算空间导数 [67, 68]。我们还注意到，应用参考系变换，将所需的粒子分布函数从其原参考系转换到目标参考系 λ_F。使用 MUSCL格式 [69]，在出发点 $\boldsymbol{x}'=\boldsymbol{x}_b-\boldsymbol{v}_i^{\lambda_F}\delta t/2$重构粒子分布函数

$$\bar{\phi}_i^{+,\lambda_F}(\boldsymbol{x}',t_n)=\bar{\phi}_i^{+,\lambda_F}(\boldsymbol{x}_j,t_n)+(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x}_j)\cdot\boldsymbol{\sigma}_i^{\lambda_F}(\boldsymbol{x}_j,t_n).\tag{99}$$

根据式（96），我们得到界面 $\boldsymbol{x}_b$ 处、时间 $t_{n+1/2}$的 $\bar{\phi}_i^{\lambda_F}$ 粒子分布函数，

$$\bar{\phi}_i^{\lambda_F}(\boldsymbol{x}_b, t_{n+1/2}) = \bar{\phi}_i^{+,\lambda_F}(\boldsymbol{x}', t_n). \tag{100}$$

最终通过以下方式计算 $(\boldsymbol{x}_b,\ t_{n+1/2})$ 处的密度、动量和温度：

$$\rho = \sum_{i=0}^{Q-1} \bar{f}_i^{\lambda_F}(\boldsymbol{x}_b, t_{n+1/2}), \tag{101}$$

$$\rho\boldsymbol{u} = \sum_{i=0}^{Q-1} \boldsymbol{v}_i^{\lambda_F} \bar{f}_i^{\lambda_F}(\boldsymbol{x}_b, t_{n+1/2}), \tag{102}$$

$$\begin{aligned} C_v\rho T = &\sum_{i=0}^{Q-1} \frac{\left(v_i^{\lambda_F}\right)^2}{2} \bar{f}_i^{\lambda_F}(\boldsymbol{x}_b, t_{n+1/2}) \\ &+ \sum_{i=0}^{Q-1} \bar{g}_i^{\lambda_F}(\boldsymbol{x}_b, t_{n+1/2}) - \frac{\rho u^2}{2}. \end{aligned} \tag{103}$$

根据在 $(\boldsymbol{x}_b,\ t_{n+1/2})$ 处计算得到的宏观场 $(\rho,\ \boldsymbol{u},\ T)$，可以计算平衡分布函数 $\phi^{\mathrm{eq},\ _i\ ^{\lambda_F}}(\rho,\ \boldsymbol{u},\ T)$，随后在对方程 (97) 求逆后，也可以计算分布函数 $\phi_i^{\lambda_F}(\boldsymbol{x}_b,\ t_{n+1/2})$。需要指出的是，平衡分布函数可通过参考系变换 (34) 获得，

$$\phi^{\mathrm{eq},\lambda_F}(\rho, \boldsymbol{u}, T) = \rho \mathcal{G}^{\{\boldsymbol{u}_F, T_F\}}_{\{\boldsymbol{u}, T\}} W. \tag{104}$$

最后，更新单元中心分布函数所需的通量可通过对单元各个面求和并进行适当的参考系变换得到，

$$F^{\lambda}_{\phi,i}(\boldsymbol{x}_j, t_{n+1/2}) = \sum_c (\boldsymbol{v}_i^{\lambda} \cdot \boldsymbol{n}_c) \mathcal{G}^{\lambda}_{i,\lambda_{F,c}} \phi^{\lambda_{F,c}}(\boldsymbol{x}_{b,c}, t_{n+1/2}), \tag{105}$$

其中，$\boldsymbol{x}_{b,\ c}$ 表示单元第 c 个面的中心，$\boldsymbol{n}_c$ 为外法向量，λ 为单元演化所处的参考系。

3. Summary of the algorithm

基于上述步骤，我们总结从时间 t_n 到 t_{n+1} 的演化过程：

1. 初始数据（单元中心 $\boldsymbol{x}_j$）
   - Given $(\rho, \boldsymbol{u}, T)$, comoving reference frame $\lambda = \{\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}_j, t_n), T(\boldsymbol{x}_j, t_n)\}$ and populations. $\phi_i^{\lambda}(\boldsymbol{x}_j, t_n)$
   - Calculation of the $\bar{\phi}_i^{+,\lambda}(\boldsymbol{x}_j, t_n)$ populations, according to eq. (98).
2. 通量计算（遍历单元面 $\boldsymbol{x}_b$）
   - Set reference frame λ_F at interface and time $(\boldsymbol{x}_b, t_{n+1/2})$
   - 根据第 IV A 2 节中的过程计算分布函数 $\phi_i^{\lambda_F}(\boldsymbol{x}_b,\ t_{n+1/2})$。
3. 分布函数更新（遍历单元中心 $\boldsymbol{x}_j$）
   - 计算单元局部参考系中的通量，见公式 (105)，并通过公式 (88)、(89) 更新分布函数。

我们强调，所提出的实现与 [57], 中建议的格式之间存在一个关键区别，即通量计算步骤中不进行迭代。需要指出的是，根据公式 (96)，需执行一个半拉格朗日步骤，以获得单元面处的分布函数。在本文中，上述步骤的参考系取为相邻单元中心的平均参考系（公式 (94)），并且通量计算采用显式方式进行。采用这种方法，必须获得非共动平衡分布函数 $\phi^{\mathrm{eq},\ \lambda_F}(\rho,\ \boldsymbol{u},\ T)$，才能完成通量计算。 [57] 中建议采用迭代的预测-校正过程，使通量计算在共动参考系中进行。尽管计算开销较大，但该迭代过程仅使用公式 (78)、(79) 中的简单共动平衡分布函数。第 V D 节通过数值模拟进一步分析了这一方面。

B. 可变普朗特数的实现

准平衡弛豫可以作为动理学方程中的强迫项来实现。我们沿用 DUGKS [60] 中的典型方法，并通过 Strang 分裂法 [70]实现准平衡弛豫：

1. 对单元中心的分布函数进行准平衡弛豫（半时间步），

$$f_i' = f_i + \frac{\delta t}{2}\left(\frac{1}{\tau_1} - \frac{1}{\tau_2}\right)(f_i^* - f_i^{\mathrm{eq}}). \tag{106}$$

2. 执行不含准平衡弛豫的更新步骤，见式（88）、（89）。3. 对单元中心的分布函数进行准平衡弛豫（半时间步），与步骤 1 相同。

需要指出的是，每个单元中心都会执行半时间步的弛豫操作，且这些操作均为局部操作。按照构造方式，准平衡弛豫守恒流速和温度，并使分布函数保持在其共动参考系中。

C. 多尺度实现

所提出的框架几乎无需更改算法，即可在多尺度设置中实现。

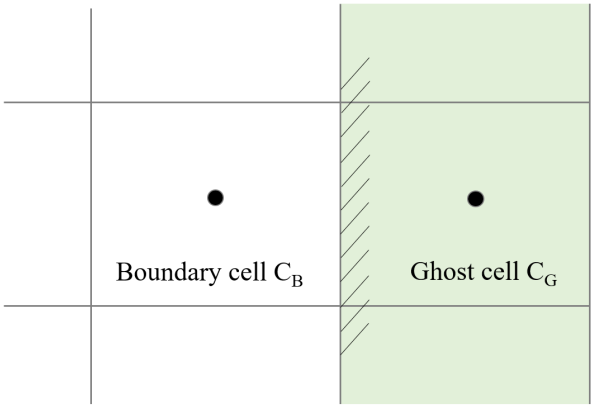


图 1. 边界条件实现示意图。

不同的格子依据切换准则，自适应地部署在模拟计算域中。根据第 II D 节，切换准则是流体动力学梯度的函数，在梯度陡峭的区域启用高阶格子。在本研究中，切换函数由对数值计算得到的流速梯度和温度梯度设置的阈值准则构成。不同的格子按照前一节所述的常规方式更新，区别在于界面区域附近的参考系变换由多尺度参考系变换（见第 II E 节）取代。

D. 边界条件

本研究采用虚节点方法 [71]施加边界条件（BC）。首先，确定虚单元 C_G 处的密度、流速和温度（见图 1）。对于壁面上的固定值，例如无滑移速度 $\boldsymbol{u}_w$，虚单元处的值 $\boldsymbol{u}_G$ 为:

$$\boldsymbol{u}_G = 2\boldsymbol{u}_w - \boldsymbol{u}_B, \tag{107}$$

其中， $\boldsymbol{u}_B$ 是边界单元处的对应值。为施加法向梯度为零条件（例如用于密度计算），我们令:

$$\rho_G = \rho_B. \tag{108}$$

定义宏观量（ρ_G， $\boldsymbol{u}_G$， T_G）后，将虚单元 λ_G 的参考系设为共动参考系， $\lambda_G = \{\boldsymbol{u}_G, T_G\}$。随后，平衡分布函数为:

$$f_i^{G,\mathrm{eq}} = \rho_G W_i, \tag{109}$$

$$g_i^{G,\mathrm{eq}} = (C_v - \frac{D}{2}) T_G \rho_G W_i. \tag{110}$$

非平衡贡献的近似遵循 [42]的实现。具体而言，一阶非平衡矩根据 Chapman–Enskog 解，它们取决于局部流体动力学梯度。 $f-$ 粒子分布函数的相关非平衡矩为 [42],

$$\boldsymbol{P}^{(1)} = -\tau_1 \rho_G T_G \left(\boldsymbol{S} - \frac{1}{C_v} (\nabla \cdot \boldsymbol{u}) \boldsymbol{I} \right), \tag{111}$$

$$\boldsymbol{Q}^{(1)} = -\tau_2 \rho_G T_G (\overline{\nabla T \boldsymbol{I}}) + \overline{\boldsymbol{u} \boldsymbol{P}^{(1)}}. \tag{112}$$

$g-$ 分布函数的零阶至二阶非平衡矩， $M_{g\,0}^{(1)}$， $\boldsymbol{M}^{(1)}{}_{g,\,1}$， $\boldsymbol{M}^{(1)}{}_{g,\,2}$估算为 [42],

$$M_{g,0}^{(1)} = -\tau_1 \rho_G T_G (2C_v - D) \left(\frac{1}{C_v} \nabla \cdot \boldsymbol{u} \right), \tag{113}$$

$$\boldsymbol{M}_{g,1}^{(1)} = -\tau_2 \rho_G T_G (2C_v - D) \nabla T + M_{g,0}^{(1)} \boldsymbol{u}, \tag{114}$$

$$\boldsymbol{M}_{g,2}^{(1)} = -\tau_1 \rho_G T_G (2C_v - D) (T\boldsymbol{S} + \overline{\boldsymbol{u} \nabla T}). \tag{115}$$

流体动力学梯度采用基于前一时间步长物理量的二阶中心格式计算。根据 Grad 投影程序，由非平衡矩计算非平衡分布函数,

$$f_i^{\lambda'} = W_i \sum_{n=0}^{3} \frac{1}{n!} \boldsymbol{\alpha}^{(n)} (\boldsymbol{P}^{(1)}, \boldsymbol{Q}^{(1)}; \lambda_G) \boldsymbol{H}^{(n)} (\boldsymbol{c}_i), \tag{116}$$

$$g_i^{\lambda'} = W_i \sum_{n=0}^{2} \frac{1}{n!} \boldsymbol{\alpha}_g^{(n)} (M_{g,0}^{(1)}, \boldsymbol{M}_{g,1}^{(1)}, \boldsymbol{M}_{g,2}^{(1)}; \lambda_G) \boldsymbol{H}^{(n)} (\boldsymbol{c}_i). \tag{117}$$

V. 结果与讨论

本节通过一维/二维欧拉气体动力学基准测试和黏性流动验证模型，以评估普朗特数以及壁面边界条件的精度。随后，我们聚焦于激波结构问题，并通过数值结果展示第 II D 节矩分析的影响。接着，我们采用多尺度设置（第 II E 节）实现该框架，即在计算域中部署不同的格子。本节最后总结我们的观察结果，并讨论模型的能力。需要指出的是， $g-$ 粒子分布函数在 $D2Q9$ 格子上演化。除非另有说明，模拟所用的数值参数如下。时间步长 δt 满足库朗数 CFL $= \max |v_{i\alpha}| (\delta t / \delta x) = 0.2$, 其中$\delta x$ 为网格分辨率。绝热指数为$\gamma = 1.4$。此外，欧拉流动的黏度足够低，因此结果保持不变（通常为 $\mu \sim \mathcal{O}(10^{-3} - 10^{-2})$）。最后，我们指出，初始条件和边界条件的表述基于无量纲变量，并采用适当的参考密度、速度和压力进行缩放。

A. 欧拉气体动力学

我们使用 $D2Q16$ 格子和三阶 Grad投影进行矩变换，以验证该模型。根据第 IID 节的矩分析，该模型应能准确捕捉欧拉阶的流体动力学。事实上，对于一系列一维黎曼问题，该模型表现优异；这些问题涉及低密度、近真空区域以及极强的不连续性。虽然此前工作 [57] 中的所有基准测试都经过了检验，但这里仅展示两个具有代表性的一维算例。二维算例包括一个高马赫数黎曼问题、一个马赫 3 流动绕过台阶障碍物，以及一个激波绕拐角衍射问题。

1. *Strong shock tube*

我们考虑强激波管的情形 [72], ，左右两侧的温度比为 10^5。该问题的初始条件为：

$$(\rho, u_x, p) = \begin{cases} (1, 0, 1000), & 0 \le x < 0.5, \\ (1, 0, 0.01), & 0.5 \le x \le 1. \end{cases} \tag{118}$$

该问题具有强烈的温度间断，可用于检验数值方法的稳健性和精度。在$t = 0.012$ 和 $L = 800$时的模拟结果如图 2 所示。总体而言，结果与精确解吻合得非常好。

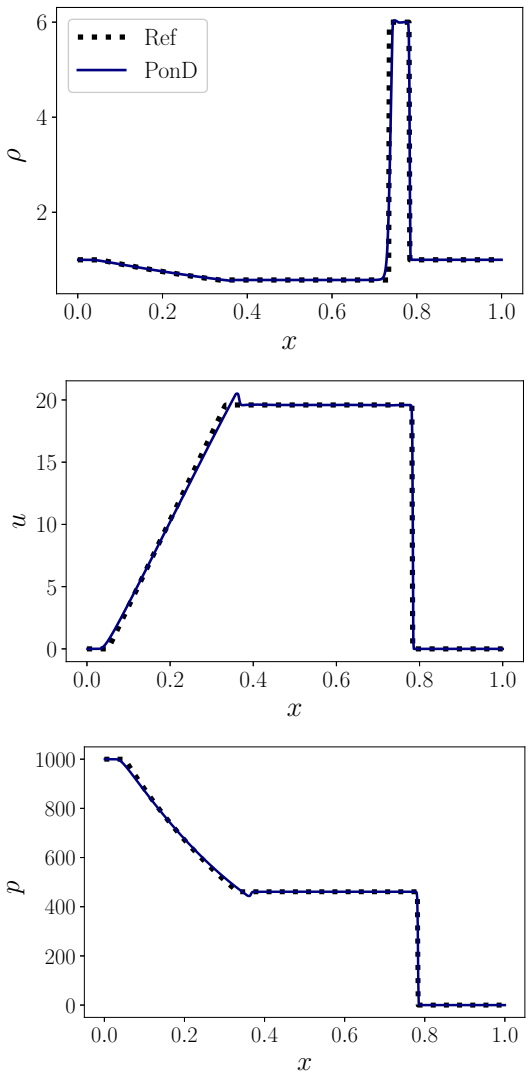


图 2. 强激波管问题在 $t = 0.012$ 时的密度（上）、速度（中）和压力（下）分布。实线：PonD 模型。虚线：精确黎曼求解器的参考结果。

2. *Le Blanc problem*

接下来考虑 Le Blanc 问题 [73], ，该问题涉及非常强烈的间断，其初始条件如下：

$$(\rho, u_x, p) = \begin{cases} (1, 0, 2/3 \times 10^{-1}), & 0 \le x < 3, \\ (10^{-3}, 0, 2/3 \times 10^{-10}), & 3 \le x \le 9. \end{cases} \tag{119}$$

在该问题中，绝热指数固定为 γ =5/3。图 3 展示了 $t = 6$ 和 $L = 4000$时的结果。除轻微振荡外，当前格式与参考解 [14] 吻合得非常好。

3. *2D Riemann, configuration 3*

作为二维情形下的首次验证，我们模拟了一个二维黎曼问题，这是可压缩流求解器的经典基准测试 [74]。一个正方形区域 $(x, y) \in [0, 1] \times [0, 1]$ 被划分为四个象限，每个象限的密度、速度和压力初始值如下：

$$(\rho, u_x, u_y, p) = \begin{cases} (1.5, 0, 0, 1.5), & x > 0.5, y > 0.5, \\ (0.5323, 1.206, 0, 0.3), & x \le 0.5, y > 0.5, \\ (0.138, 1.206, 1.206, 0.029), & x \le 0.5, y \le 0.5, \\ (0.5323, 0, 1.206, 0.3), & x > 0.5, y \le 0.5. \end{cases} \tag{120}$$

在边界处施加了零梯度边界条件$\partial_{\boldsymbol{n}} f = 0$，其中 $\boldsymbol{n}$ 是指向外侧的单位法向量。模拟采用的分辨率为 $[500, 500]$。图 4 展示了密度场以及计算域中心附近的密度等值线。黎曼问题的初始条件导致了激波相互作用，并形成了复杂的

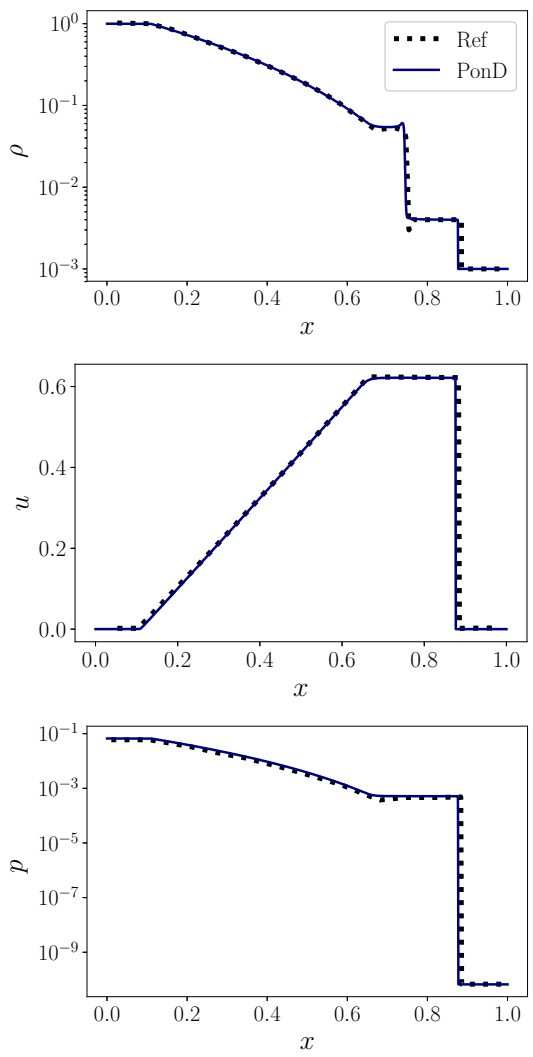


图 3. Le Blanc 问题在 $t = 6$ 时的密度（上）、速度（中）和压力（下）分布。实线：PonD 模型。虚线：参考解 [14]。

图样。结果与 [74, 75]中的参考解吻合良好。

4. *Mach 3 flow over step*

在此问题中，风洞内设置了一个台阶，并施加均匀的马赫 3 流动 [76]。台阶处产生瞬态激波，激波在壁面反射并形成复杂的流动形态。计算域由一个 $[0,3] \times [0,1]$ 矩形界定，台阶位于 (0.6,0)，高度为 $\Delta y = 0.2$。初始时，具有 $\gamma = 1.4$ 的气体在空间上均匀分布，其流体动力学条件如下：

$$(\rho, u_x, u_y, p) = (1.4, 3, 0, 1). \tag{121}$$

左边界施加相同的入口边界条件 $x = 0$，右边界施加流出边界条件

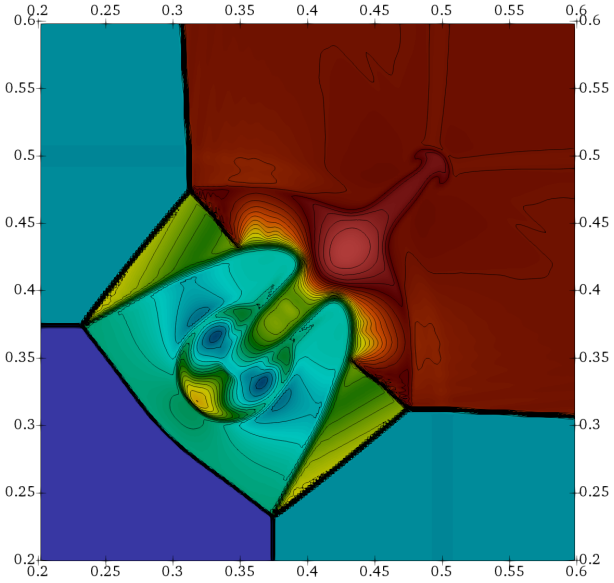


图 4. 二维黎曼问题，分辨率为 [500,500] 个网格点，在 $t = 1$ 时的结果。结果上叠加了 25 条等间距密度等值线。

处 $x = 3$。计算域壁面采用反射边界条件。图 5 展示了使用[300, 100] 个网格点进行模拟的结果，时间间隔相等的六个时刻分别为（$t = 0.5$ 至 $t = 3$）。流动特征和动力学与文献 [76]中相应的结果非常吻合。

5. *Shock diffraction over corner*

本文研究激波绕射问题，即激波掠过一个后向台阶拐角 [15]。这一问题中的流体动力学流动模式已通过理论、实验和数值模拟进行了研究。然而，从数值角度来看，由于拐角附近会产生负压和/或负密度，这一问题颇具挑战性。我们采用该问题的常规设置：计算域由 $[0,1] \times [6,11]$ 和 $[1,13] \times [0,11]$ 两个矩形的并集构成。初始时，一个 Ma $= 5.09$ 右行激波位于 $x = 0.5$和 $6 \le y \le 11$ 处，并向未扰动空气中传播，空气的密度为 1.4、压力为 1。边界条件方面，在 $x = 0$, $0 \le y \le 11$处采用具有初始条件的流入边界，在 $x = 13$, $0 \le y \le 11$、 $1 \le x \le 13$, $y = 0$和 $0 \le x \le 13$, $y = 11$处采用流出边界。在计算域的边界 $0 \le x \le 1$, $y = 6$ 和$x = 1$, $0 \le y \le 6$处施加反射边界条件。分辨率为 [390, 330]和 $t = 2.3$时的结果如图 6 所示，与 [15] 的参考结果非常吻合。

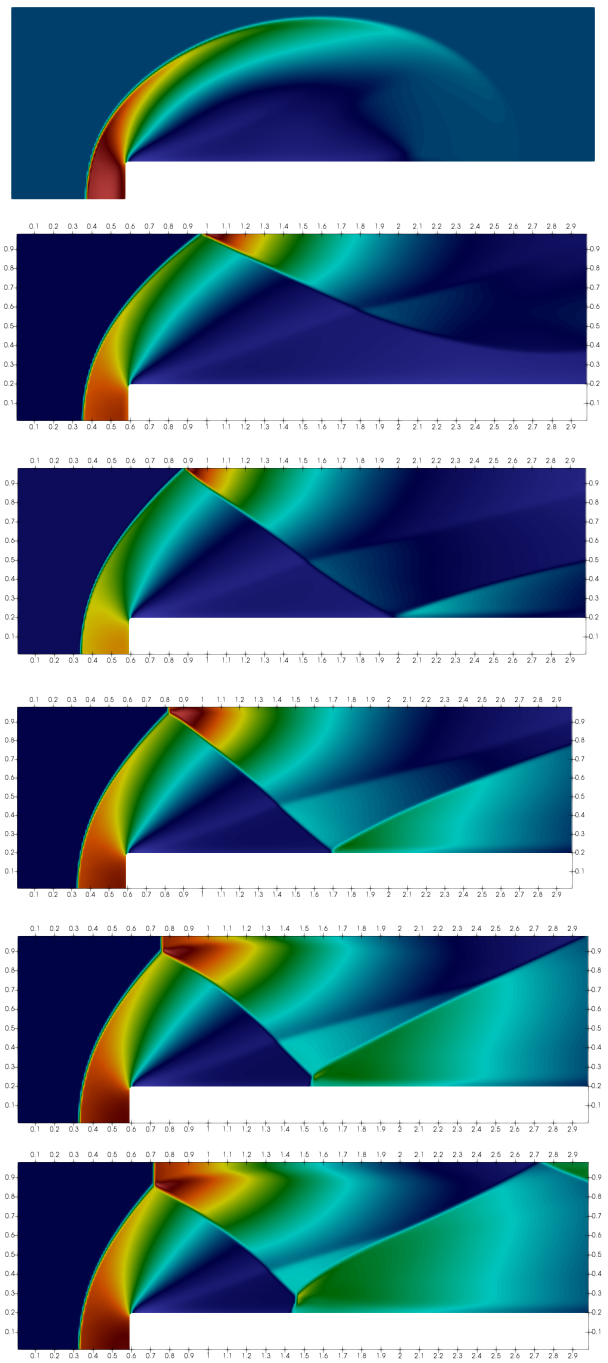


图 5. 前向台阶上马赫 3 流动的密度剖面。从 $t = 0$ 到 $t = 3$，以相等的时间间隔展示了六个时刻的快照。

B. 黏性流动

本节重点讨论黏性效应显著的流体动力学流动。讨论围绕由 $D2Q16$ 晶格支持的三阶矩不变系统的精度及其局限性展开。

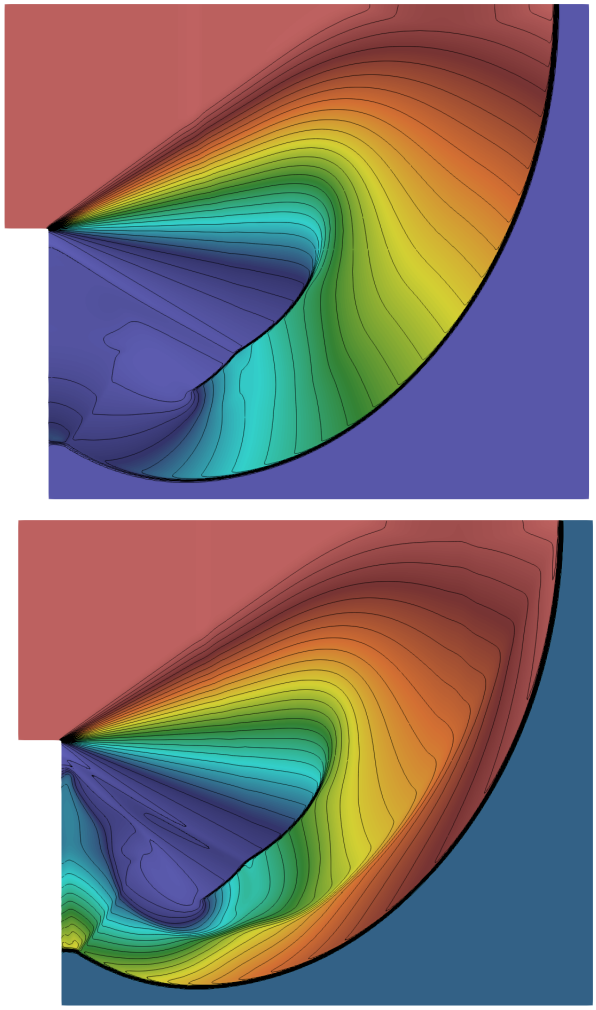


图 6. 在 $t = 2.3$ 时，拐角处马赫数 5.09 激波绕射问题的压力（上）和密度（下）分布。场中叠加了 30 条等间距等值线。

1. *Channel flow*

我们首先研究雷诺数为 $Re = 100$ 的等温通道流，以评估壁面边界条件。图 7 展示了采用 80 个网格点进行模拟的结果，与解析解高度吻合。此外，针对 L_2 误差的收敛阶研究验证了该格式具有二阶空间收敛性。

2. *Thermal Couette flow*

热库埃特流是用于探究黏性耗散热和普朗特数的基准测试案例。温度较高的上壁面T_H 以恒定速度 u_0运动，而下壁面静止，温度为 T_C。温度的解析解

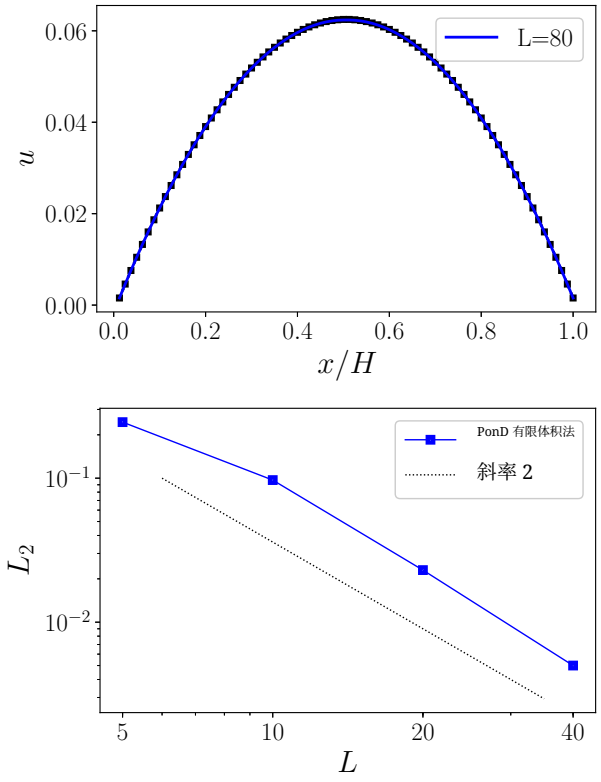


图 7. 上：雷诺数为 $= 100$ 时通道中的力驱动流。符号表示模拟结果，实线表示解析解。下：收敛阶分析。实线表示 L_2 误差范数。虚线表示二阶 L_2 误差范数斜率。

为：

$$\frac{T - T_C}{T_H - T_C} = \frac{x}{L} + \frac{\mathrm{Pr} \cdot \mathrm{Ec}}{2} \frac{x}{L} \left(1 - \frac{x}{L}\right), \tag{122}$$

其中 $\mathrm{Ec} = u_0^2/(C_p \Delta T)$ 为埃克特数，且 $\Delta T = T_H - T_C$。顶部和底部壁面采用无滑移和恒温边界条件，水平方向则施加周期性边界条件。数值模拟的参数为 $\mathrm{Ma} = u_0/\sqrt{\gamma T_C} = 0.5, L = 150$，$\mathrm{Re} = \rho u_0 L/\mu = 100$，$T_C = 1$。图 8 展示了三种不同普朗特数（$\mathrm{Pr} = 0.5$, 0.7,1.0）及不同埃克特数（$\mathrm{Ec} = 4$,20,40）下的温度分布，与解析解高度吻合。值得注意的是，数值模拟采用了 $D2Q16$ 晶格，因此使用了三阶Grad投影框架变换。结果的精度表明，能量方程（60）中的误差项可以忽略不计。

3. *Viscous shock tube*

在这个问题中，我们使用 Daru 和

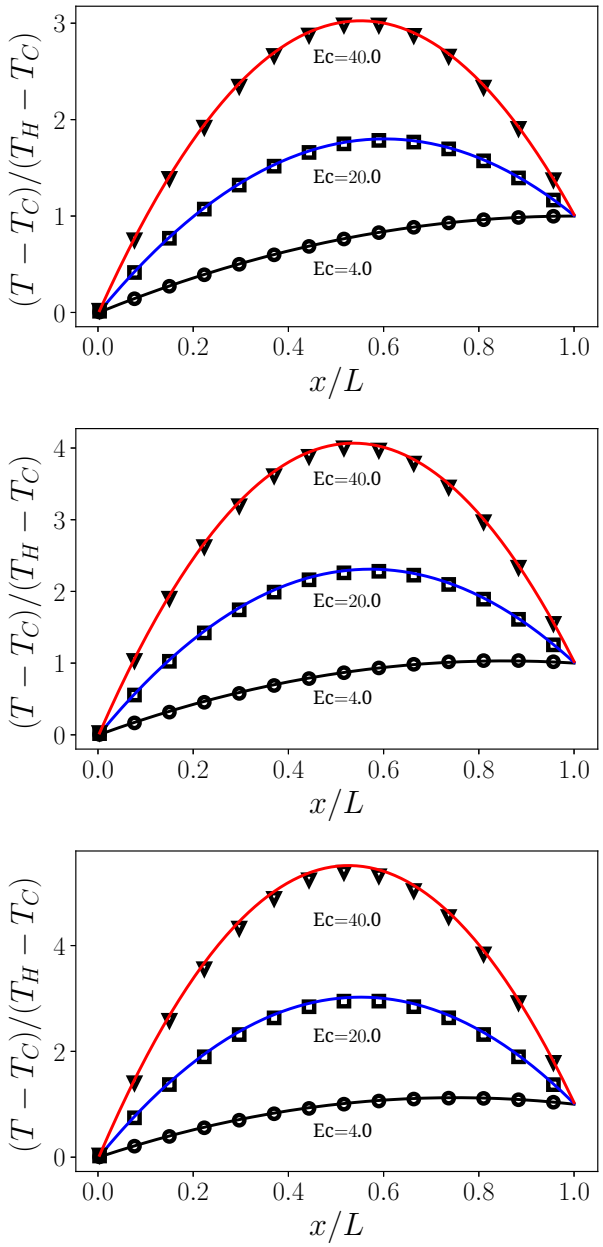


图 8. 热库埃特流问题。展示了三种不同普朗特数下的结果：$\mathrm{Pr} = 0.5$（上）、$\mathrm{Pr} = 0.7$（中）、$\mathrm{Pr} = 1$（下）。对于每个普朗特数，模拟分别采用埃克特数 $\mathrm{Ec} = 4$，20，40（符号表示），并与解析解（实线）进行比较。

Tenaud [77] 提出的黏性激波管测试，来探究我们模型的性能。二维激波管 $[0,1] \times [0,1]$ 的初始条件如下：

$$(\rho, u_x, u_y, p) = \begin{cases} (120, 0, 0, 120/\gamma), & 0 \le x < 0.5, \\ (1.2, 0, 0, 1.2/\gamma), & 0.5 \le x \le 1, \end{cases} \tag{123}$$

其中 $\gamma = 1.4$，普朗特数设为 $\mathrm{Pr} = 0.73$，黏度设定为使雷诺数为 $\mathrm{Re} = 200$。在

表 II. 根据 [78] 给出的黏性激波管精度判据。x-TP（y-TP）分别表示三重点的 x 坐标（y 坐标）。x-PV 表示经过主涡的直线与水平轴的交点。y-PV 表示主涡的高度。

	x-TP	y-TP	x-PV	y-PV
参考值	0.58	0.137	0.78	0.166
D2Q16	0.58	0.133	0.774	0.168
D2Q25	0.58	0.134	0.775	0.168

激波管壁面上施加无滑移和绝热边界条件。由于问题构型对称，实际模拟的几何体为 $[0,1]\times[0,0.5]$ 计算域，并在顶部边界施加对称条件。初始流动条件形成一道向右传播、马赫数为 Ma $=2.37$ 的激波、一个接触间断，以及分别向两个方向扩展的膨胀波。需要注意的是，激波的运动会在管道水平壁面附近诱发不可忽略的边界层。该边界层与入射激波和反射激波相互作用，形成复杂的流动形态。

分辨率为 $[500,250]$ 、马赫数为 $t=1$时的密度等值线、压力场和温度场结果如图9所示。此外，我们使用 D2Q25 和四阶参考系不变矩系统重复了数值模拟，并对结果进行了比较。比较时，我们报告了 [78] 提出的评价指标。具体而言，表 II 汇总了三重点和主涡对应的坐标。与参考数据的比较表明，$D2Q16$ 和 $D2Q25$ 数值模拟的结果都非常吻合。图10展示了沿固壁的密度分布，也得出了相同结论。

4. *Shock structure problem*

迄今为止的问题展现了三阶参考系不变矩系统及其对应的 $D2Q16$ 晶格具有非常好的精度。接下来的基准测试涉及陡峭的流体动力学梯度，清楚地展现了 $D2Q16$ 的局限性。同时，将参考系不变矩系统从三阶扩展至四阶（$D2Q25$）可恢复其精度。

激波结构问题是气体动理论中的经典问题，其中非平衡效应主导着流动 [79]。我们考虑一维准平面激波，计算域中心处的密度、速度和温度初始呈阶跃分布。上游和下游的流动参数由兰金–雨贡纽条件连接 [80]。硬球分子的上游平均自由程

定义为，

$$\lambda_1=\frac{16}{5\sqrt{2\pi\gamma}}\left(\frac{\mu_1\alpha_1}{p_1}\right), \tag{124}$$

其中，p_1,α_1,μ_1 分别为激波上游气体的压力、声速和黏度。黏度随温度的变化关系为：

$$\mu=\mu_1\left(\frac{T}{T_1}\right)^s, \tag{125}$$

其中，对于硬球情形 $s=0.5$。稳态无量纲密度、温度、法向应力和热流定义如下：

$$\rho_n=\frac{\rho-\rho_1}{\rho_2-\rho_1},T_n=\frac{T-T_1}{T_2-T_1},\hat{\sigma}_{xx}=\frac{\sigma_{xx}}{p_1},\hat{q}_x=\frac{q_x}{p_1\sqrt{2T_1}}, \tag{126}$$

其中，下标 1 和 2 分别表示上游和下游的取值。普朗特数设为 Pr $=2/3$ ，单原子理想气体的绝热指数设为 $\gamma=5/3$。此情形报告的结果为稳态解，并与 Ohwada [81]的结果进行比较。坐标系的原点取在满足 $\rho_n=0.5$ 的点，$x_n=x/0.5\sqrt{\pi}\lambda_1$ 用作约化坐标。

我们首先考察马赫数 Ma $=1.2$时的激波结构剖面。采用不同的参考系变换阶数进行了两次数值模拟。具体而言，我们比较了 $D2Q16$和 $D2Q25$ 格子的表现，分别使用三阶和四阶 Grad投影。图 11 展示了密度、温度、法向应力和热流分布。显然，与参考数据相比，这两种模型的表现都非常准确。

我们继续研究更高马赫数 Ma $=1.6$ 下的激波结构，并针对不同的参考系变换阶数重复数值实验。结果汇总于图 12。这里，三阶模型在所有分布中都明显出现偏差，其中温度和热流分布在激波上游部分的误差尤为显著。在这种情况下，由于激波剖面内速度和温度梯度陡峭，参考系变换 $\boldsymbol{R}^{\mathrm{eq}}$ 阶矩导致的偏差项仍然存在。将$\boldsymbol{R}^{\mathrm{eq}}$ 阶矩列表纳入参考系不变列表，即采用四阶模型后，模型精度得以恢复，并与参考结果非常吻合。

C. 多尺度框架

最后一个关注的主题是格式的多尺度扩展，即在计算域的不同区域部署不同的格子。切换准则是局部流速和温度梯度的阈值。在梯度较大的计算域区域启用高阶格子，其余区域则使用低阶格子。

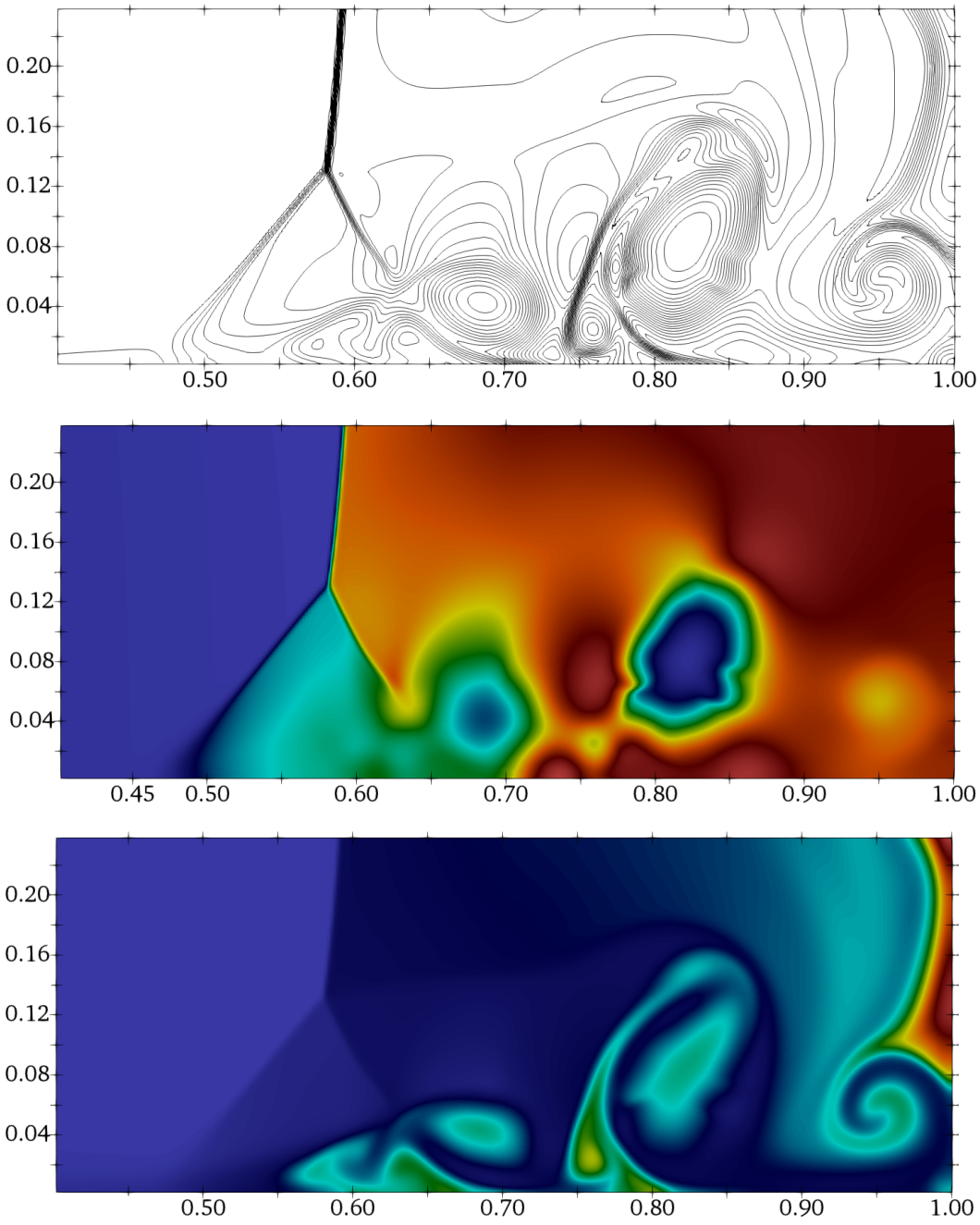


图9. 黏性激波管问题　　顶部：30 条等间距密度等值线。中部：压力场。底部：温度场。

1. *Lax tube*

我们展示了一个 $D2Q9/D2Q16$模型，并对 Lax问题 [82]进行模拟。初始条件如下，

$$(\rho, u_x, p) = \begin{cases} (0.445, 0.698, 3.528), & 0 \le x < 0.5, \\ (0.5, 0, 0.571), & 0.5 \le x \le 1. \end{cases} \quad (127)$$

该模拟采用 $L = 600$ 进行，直至 $t = 0.14$。图13显示了通过 $D2Q9$ 和 $D2Q16$ 个格子彼此独立。虽然 $D2Q16$模型与解析解高度吻合，但$D2Q9$ 模型出现了偏差，表现为激波与接触间断之间的密度被高估。对于 $D2Q9$ 的情况，欧拉阶上的差异是预期之中的，因此这里采用二阶矩不变系统。图 14 展示了多尺度 $D2Q9/D2Q16$ 模型以及两个格子的部署区域。具体而言， $D2Q16$在两个以激波为中心的狭窄区域内启用

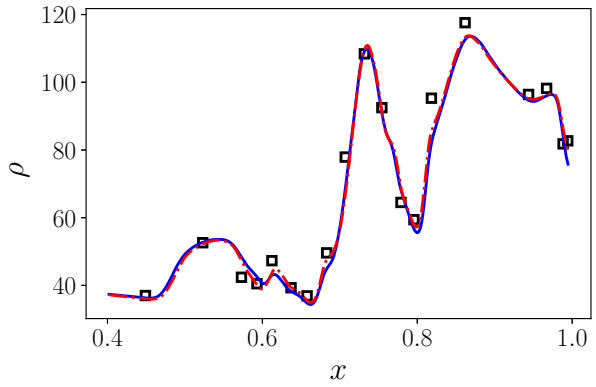


图10. 黏性激波管问题。沿固壁的密度分布。实线： $D2Q16$ 模型。点线：$D2Q25$。符号：来自 [78]的参考数据

以及以接触间断为中心的狭窄区域内启用。多尺度模型的结果再次与解析解高度吻合。

2. *Shu-Osher problem*

$D2Q9/D2Q16$ 模型进一步通过 Shu-Osher 问题 [83] 进行测试。在此设置中，马赫数3激波与扰动密度场相互作用。该相互作用导致间断并形成小尺度结构。初始条件为，

$$(\rho, u_x, p) = \begin{cases} (3.857, 2.629, 10.333), & 0 \le x < 1, \\ (1 + 0.2\sin(5(x-5)), 0, 1), & 1 \le x \le 10. \end{cases} \tag{128}$$

密度分布结果展示于 t =1.8 和 $L = 800$。图15展示了$D2Q9$ 和 $D2Q16$ 模型的解，并与参考解进行比较；参考解采用特征线格式五阶WENO、RK4时间积分以及5000个点的分辨率获得 [84]。除激波后波振幅略有低估外，显然，$D2Q16$ 很好地捕捉了激波位置和高频波。相比之下， $D2Q9$模型明显偏离参考解。图16展示了 $D2Q9/D2Q16$ 解的演化，并将其与纯 $D2Q16$解进行比较。多尺度模型与 $D2Q16$ 模型几乎无法区分，因此也与参考解几乎无法区分。还值得注意的是，如图16中的尖峰所示， $D2Q16$ 仅在计算域的狭窄区域内被激活。

3. *High Mach Astrophysical jet*

作为最后一个测试案例，我们考虑一个马赫 30 的天体物理喷流，不包含辐射冷却 [13]。该案例是从哈勃空间望远镜图像中揭示的实际气体流动的一个示例，因此具有很高的科学价值。按照 [13],中的配置，我们使用以下条件初始化计算域 $[0,2]\times[-0.5,0.5]$:

$$(\rho, u_x, u_y, p) = \begin{cases} (5, 11.2, 0, 0.4127), & \text{if } x = 0,\ -0.05 \le y \le 0.05, \\ (0.5, 0, 0, 0.4127), & \text{otherwise.} \end{cases} \tag{129}$$

除左侧边界采用指定的固定条件外，计算域周围均使用流出边界条件。模拟采用分辨率[1200, 600]。我们比较了 $D2Q9$、$D2Q16$ 和多尺度 $D2Q9/D2Q16$ 模型的结果。图17对比了 $D2Q16$ 与 $D2Q9/D2Q16$解的压力、密度和温度场。两种数值模拟对弓形激波向周围介质中的传播，以及喷流茧内部形成的瑞利–泰勒不稳定性的捕捉结果非常吻合。图18展示了 $D2Q16$ 晶格在计算域中的分布。为进行定量比较，图19绘出了计算域三个水平截线上的密度场。多尺度 $D2Q9/D2Q16$ 模型与纯 $D2Q16$ 结果高度吻合。相反，纯 $D2Q9$ 模型的演化出现了明显偏差，如图19所示。

D. 讨论

我们总结了为提高 PonD 方法效率而采用的主要策略，同时尽可能减少精度损失。关键在于根据目标流体动力学系统，确定适用于 f- 和 g-粒子分布函数的参考系不变矩系统。根据第 II D 节的分析， g-分布函数的参考系不变矩系统应包含至二阶矩。因此，不论采用何种 f-晶格，本研究的所有数值模拟均对 g-粒子分布函数使用 $D2Q9$ 晶格，从而降低了 $g-$ 粒子分布函数更新和 g-参考系变换的计算成本。采用不同 f- 和 g-晶格进行的数值实验表明，它们对格式的稳定性和精度均无明显影响。

多尺度公式使得在流速平稳、温度变化平缓的区域中，可以为 f- 粒子分布函数采用低阶格子。根据 [54], 中的观察，解的稳定性和准确性都能得到良好保持。这种方法带来的效率提升自然取决于具体算例。值得注意的是，不同格子仅通过 Grad 参考系变换进行通信，因此，从单一格子过渡到多尺度模型易于编程且效率很高。

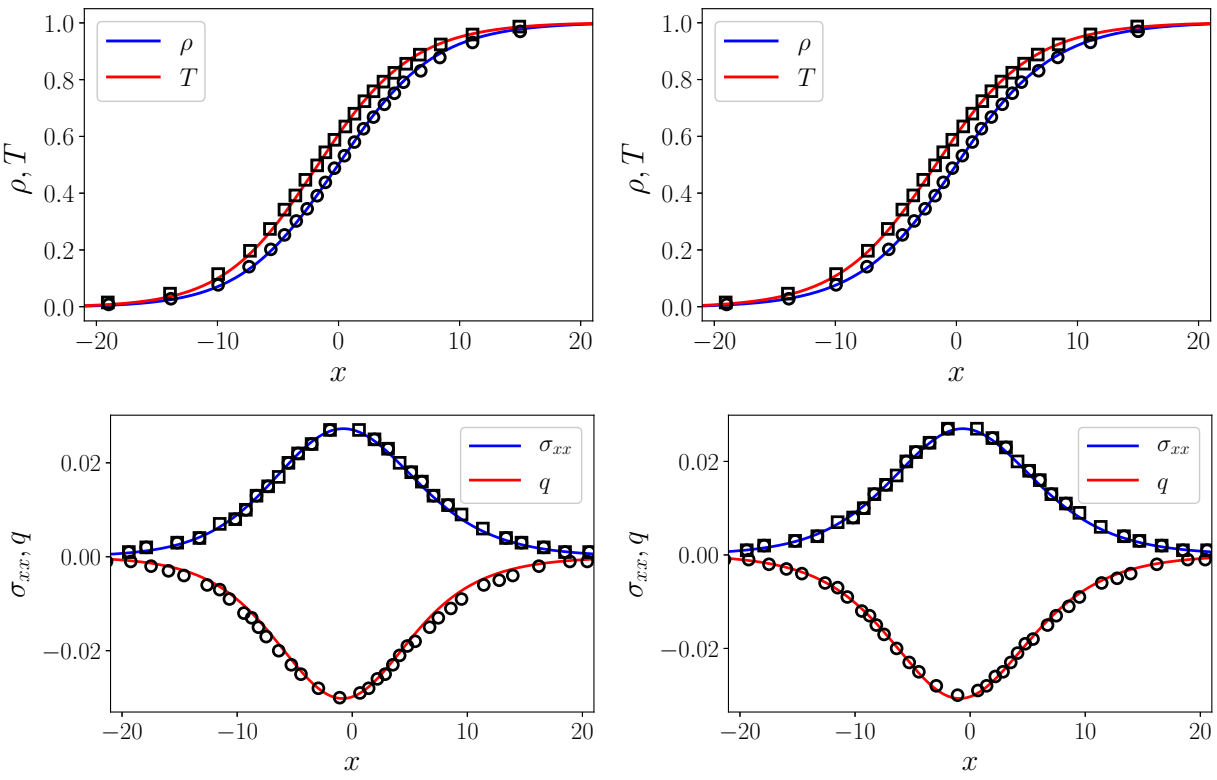


图 11. 激波结构问题，马赫数 1.2。密度、温度分布（上），法向应力和热流分布（下）。左列为三阶变换，右列为四阶变换。

与 [57] 中的 PonD 公式不同的最后一点是，如 IV A 3 所述，通量计算中不进行迭代。我们通过 Shu-Osher问题 [84] 展示迭代公式与当前公式的比较。图 20 展示了两种格式在不同库朗数和分辨率下的结果。可以观察到，对于较大的库朗数和较粗的计算域，迭代格式的准确度略高于显式对应格式。对于适中的库朗数和已解析区域，两种解几乎无法区分。其他数值实验也证实了上述观察。我们可以得出结论：对于已解析的数值模拟（空间和时间上均已解析），可以安全地采用非迭代通量计算。

VI. 结论

本文介绍了 PonD 公式，重点阐述了参考系变换的要求。根据目标流体动力学方程，静止参考系下的传统格子玻尔兹曼模型需要满足一组平衡矩约束。相比之下，PonD 采用自适应共动参考系，相关的平衡矩约束可由精确的平衡态粒子分布自动满足。然而，目标流体动力学方程对参考系变换中的参考系不变矩系统提出了要求。本文提出的框架是在自适应参考系下对控制动力学方程进行有限体积离散。与传统有限体积格子玻尔兹曼方法（如传统 DUGKS）相比，自适应公式所需付出的代价是进行参考系变换。该方法的优势在于提高了精度和稳定性，并扩大了马赫数和温度方面的适用范围。此外，还可轻松纳入多尺度扩展，从而进一步提升效率。未来将重点开展存在曲面边界的高马赫数 $3D$ 数值模拟。

致谢

本研究由欧洲研究委员会（ERC）高级资助项目 834763-PonD 提供支持。瑞士国家超级计算中心 CSCS 在资助项目 s1066 的支持下提供了计算资源。

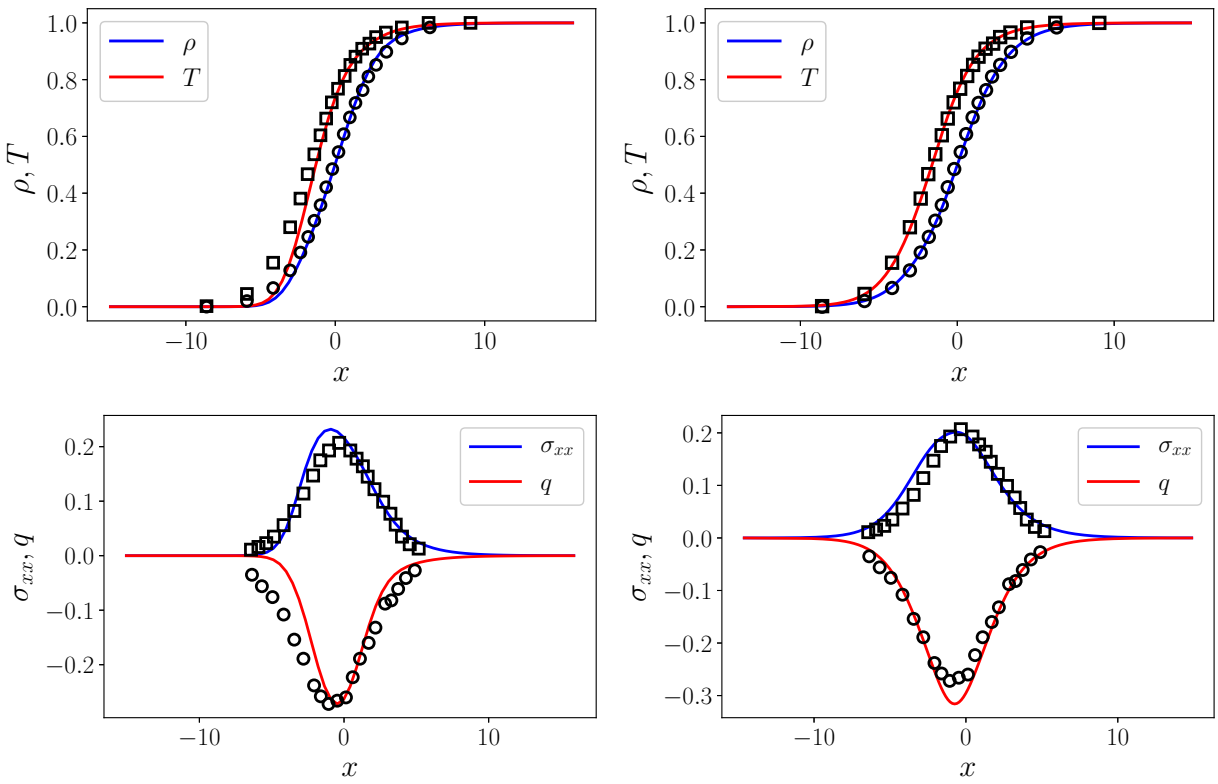


图 12. 马赫数 1.6 时的激波结构问题。密度、温度分布（上），法向应力和热流分布（下）。左列为三阶变换，右列为四阶变换。

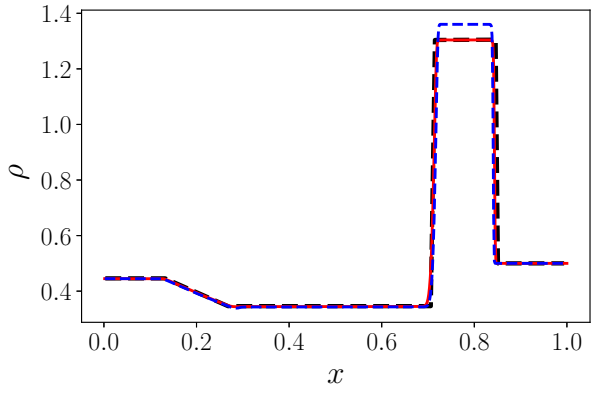


图 13. $t = 0.14$ 时 $D2Q16$ Lax 管问题的密度分布，在。红线对应晶格，蓝色虚线对应 $D2Q9$ ，黑色虚线对应解析解。

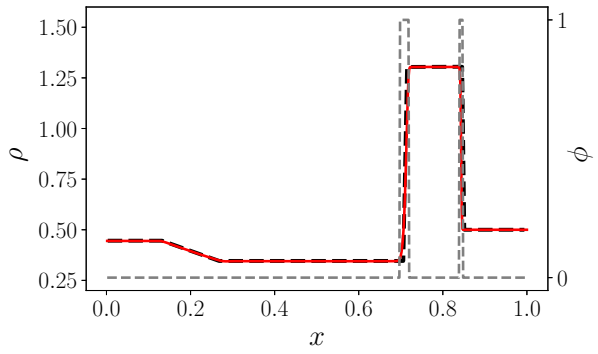


图 14. Lax 管问题的密度分布，在 $t = 0.14$。红线对应 $D2Q9/D2Q16$ 模型，黑色虚线对应解析解。灰色虚线表示 $D2Q16$ 晶格（$\phi = 1$）和 $D2Q9$ 晶格（$\phi = 0$）的占据区域。

附录 A：厄米多项式

最高至四阶且离散速度经过缩放，使得 $T_L = 1$ 的厄米多项式如下：

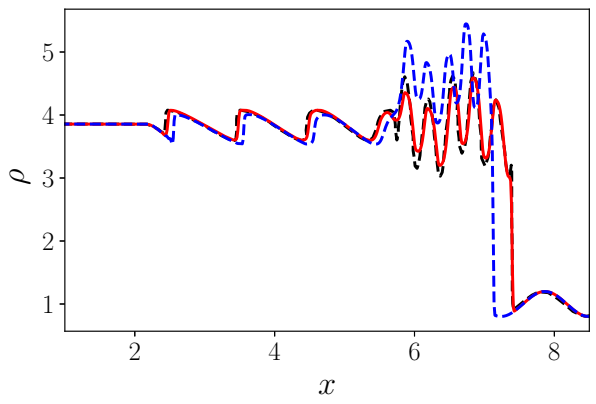


图 15 1.8 $D2Q16$ $t=$ 。
Shu-Osher问题的密度分布，位于 。红线对应晶格，蓝色虚线对应 $D2Q9$ ，黑色虚线对应参考解 [84]。

$$H_i^{(0)} = 1, \tag{A1}$$
$$H_{i\alpha}^{(1)} = c_{i\alpha}, \tag{A2}$$
$$H_{i\alpha\beta}^{(2)} = c_{i\alpha}c_{i\beta} - \delta_{\alpha\beta}, \tag{A3}$$
$$H_{i\alpha\beta\gamma}^{(3)} = c_{i\alpha}c_{i\beta}c_{i\gamma} - [c_{i\alpha}\delta_{\beta\gamma}]_{\text{cyc}}, \tag{A4}$$
$$H_{i\alpha\beta\gamma\delta}^{(4)} = c_{i\alpha}c_{i\beta}c_{i\gamma}c_{i\delta} - [c_{i\alpha}c_{i\beta}\delta_{\gamma\delta}]_{\text{cyc}} + [\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta}]_{\text{cyc}}, \tag{A5}$$

其中， $[]_{\text{cyc}}$ 表示对各指标进行不重复的循环置换。收缩后的四阶多项式如下:

$$H_{i,\alpha\beta}^{(4)} = c_{i\alpha}c_{i\beta}(c_i^2 - (D+4)) - \delta_{\alpha\beta}(c_i^2 - (D+2)). \tag{A6}$$

给定矩 $\boldsymbol{m} = \{M^{(0)}\, M^{(1)_\alpha},\ M^{(2)\alpha\beta},\ M^{(3)\alpha\beta\gamma},\ M_{\alpha\beta}^{(4)}\}$以及目标参考系 $\lambda = \{T, \boldsymbol{u}\}$，计算展开系数。目标参考系中的粒子分布函数按 Grad级数展开，

$$f_i^\lambda = W_i \sum_{n=0}^{4} \frac{1}{n!} \boldsymbol{\alpha}^{(n)}(\boldsymbol{m};\lambda) H^{(n)}(\boldsymbol{c}_i), \tag{A7}$$

用于确保所选矩具有参考系不变性的约束条件为:

$$M^{(0)} = \sum_{i=0}^{Q-1} f_i^\lambda, \tag{A8}$$
$$M_\alpha^{(1)} = \sum_{i=0}^{Q-1} f_i^\lambda v_{i\alpha}^\lambda, \tag{A9}$$
$$M_{\alpha\beta}^{(2)} = \sum_{i=0}^{Q-1} f_i^\lambda v_{i\alpha}^\lambda v_{i\beta}^\lambda, \tag{A10}$$
$$M_{\alpha\beta\gamma}^{(3)} = \sum_{i=0}^{Q-1} f_i^\lambda v_{i\alpha}^\lambda v_{i\beta}^\lambda v_{i\gamma}^\lambda, \tag{A11}$$
$$M_{\alpha\beta}^{(4)} = \sum_{i=0}^{Q-1} f_i^\lambda v_{i\alpha}^\lambda v_{i\beta}^\lambda v_{i\gamma}^\lambda v_{i\gamma}^\lambda, \tag{A12}$$

其中离散速度为 $v_{i\alpha}^\lambda = (\sqrt{T}c_{i\alpha} + u_\alpha)$。展开系数的解如下，

$$\alpha^{(0)} = M^{(0)}, \tag{A13}$$
$$\alpha_\alpha^{(1)} = \frac{1}{T^{1/2}}\left(M_\alpha^{(1)} - u_\alpha M^{(0)}\right), \tag{A14}$$
$$\alpha_{\alpha\beta}^{(2)} = \frac{1}{T}\left(M_{\alpha\beta}^{(2)} - M^{(0)}(T\delta_{\alpha\beta} - u_\alpha u_\beta M^{(0)}) - [u_\alpha(M_\beta^{(1)} - u_\beta M^{(0)})]_{\text{cyc}}\right), \tag{A15}$$
$$\alpha_{\alpha\beta\gamma}^{(3)} = \frac{1}{T^{3/2}}\left(M_{\alpha\beta\gamma}^{(3)} - u_\alpha u_\beta u_\gamma M^{(0)} - [(M_\alpha^{(1)} - M^{(0)}u_\alpha)(T\delta_{\beta\gamma} - u_\beta u_\gamma)]_{\text{cyc}} - [(M_{\alpha\beta}^{(2)} - M^{(0)}u_\alpha u_\beta)u_\gamma]_{\text{cyc}})\right), \tag{A16}$$

附录B：PonD方程

我们从在恒定、均匀监测参考系 λ 下表述的动理学方程开始，

$$\partial_t f_i^{\bar{\lambda}} + \boldsymbol{v}_i^{\bar{\lambda}} \cdot \nabla f_i^{\bar{\lambda}} = \Omega_i^{\bar{\lambda}}, \tag{B1}$$

监测参考系 $\bar{\lambda}$中的矩 $\boldsymbol{m}^{\bar{\lambda}}$ 通过线性矩阵 $\mathcal{M}^{\bar{\lambda}}$与相应的分布函数相联系，

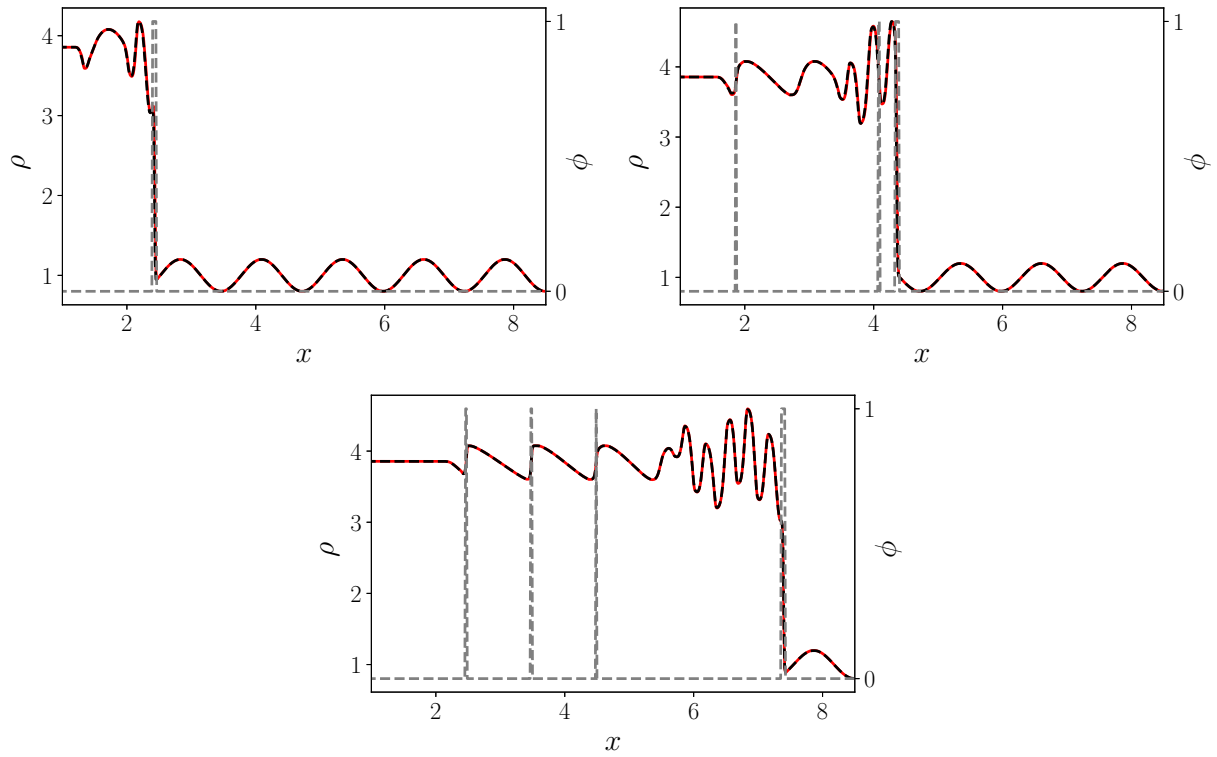


图16。Shu-Osher问题在不同时间的密度分布。红线对应于 $D2Q9/D2Q16$ 模型，黑色虚线对应于 $D2Q16$ 解。灰色虚线表示 $D2Q16$ 晶格（$\phi=1$）和 $D2Q9$ 晶格（$\phi=0$）的占据区域。

$$m_i^{\bar{\lambda}} = \mathcal{M}_{i,j}^{\bar{\lambda}} f_j^{\bar{\lambda}}, \tag{B2}$$

$$f_i^{\bar{\lambda}} = [\mathcal{M}^{\bar{\lambda}}]_{i,j}^{-1} m_j^{\bar{\lambda}}, \tag{B3}$$

将式 (B3) 代入式 (B1)，得到以下方程，

$$\partial_t([\mathcal{M}^{\bar{\lambda}}]_{i,j}^{-1} m_j^{\bar{\lambda}}) + \boldsymbol{v}_i^{\bar{\lambda}} \cdot \nabla([\mathcal{M}^{\bar{\lambda}}]_{i,j}^{-1} m_j^{\bar{\lambda}}) = [\mathcal{M}^{\bar{\lambda}}]_{i,j}^{-1} m_{\Omega,j}^{\bar{\lambda}}, \tag{B4}$$

其中，$m_{\Omega,\ j}^{\bar{\lambda}}$ 表示碰撞算子中的矩。接下来，我们利用矩的参考系不变性，

$$m_i^{\bar{\lambda}} = m_i^{\lambda(\boldsymbol{x},t)}, \tag{B5}$$

其中，$\lambda(\boldsymbol{x},t)$ 表示局部参考系。我们将从局部参考系（B5）计算得到的矩代入公式（B4），

$$\partial_t([\mathcal{M}^{\bar{\lambda}}]_{i,j}^{-1} m_j^{\lambda(\boldsymbol{x},t)}) + \boldsymbol{v}_i^{\bar{\lambda}} \cdot \nabla([\mathcal{M}^{\bar{\lambda}}]_{i,j}^{-1} m_j^{\lambda(\boldsymbol{x},t)}) = [\mathcal{M}^{\bar{\lambda}}]_{i,j}^{-1} m_{\Omega,j}^{\lambda(\boldsymbol{x},t)}. \tag{B6}$$

随后，我们将矩 $m_j^{\lambda(\boldsymbol{x},t)}$ 与局部参考系中的分布函数互换，$m_j^{\lambda(\boldsymbol{x},t)} = \mathcal{M}_{j\ \ ,k}^{\lambda(\boldsymbol{x},t)}\ f_k^{\lambda(\boldsymbol{x},t)}$，并得到以下方程，

$$\partial_t([\mathcal{M}^{\bar{\lambda}}]_{i,j}^{-1} \mathcal{M}_{j,k}^{\lambda(\boldsymbol{x},t)} f_k^{\lambda(\boldsymbol{x},t)}) + \boldsymbol{v}_i^{\bar{\lambda}} \cdot \nabla([\mathcal{M}^{\bar{\lambda}}]_{i,j}^{-1} \mathcal{M}_{j,k}^{\lambda(\boldsymbol{x},t)} f_k^{\lambda(\boldsymbol{x},t)}) = [\mathcal{M}^{\bar{\lambda}}]_{i,j}^{-1} \mathcal{M}_{j,k}^{\lambda(\boldsymbol{x},t)} \Omega_k^{\lambda(\boldsymbol{x},t)}. \tag{B7}$$

矩阵 $[\mathcal{M}^{\bar{\lambda}}]_{i\ ,\ j}^{-1}\ \mathcal{M}_{j\ k}^{\lambda(\boldsymbol{x},t)}$，的乘积定义了参考系变换，

$$[\mathcal{G}_{\lambda(\boldsymbol{x},t)}^{\bar{\lambda}}]_{i,k} = [\mathcal{M}^{\bar{\lambda}}]_{i,j}^{-1} \mathcal{M}_{j,k}^{\lambda(\boldsymbol{x},t)}, \tag{B8}$$

$\bar{}$从局部参考系 $\lambda(\boldsymbol{x},\ t)$ 变换到监测参考系 λ。因此，方程（B7）就是最终的PonD方程，

$$\partial_t(\mathcal{G}_{i,\lambda(\boldsymbol{x},t)}^{\bar{\lambda}} f^{\lambda(\boldsymbol{x},t)}) + \boldsymbol{v}_i^{\bar{\lambda}} \cdot \nabla(\mathcal{G}_{i,\lambda(\boldsymbol{x},t)}^{\bar{\lambda}} f^{\lambda(\boldsymbol{x},t)}) = \mathcal{G}_{i,\lambda(\boldsymbol{x},t)}^{\bar{\lambda}} \Omega^{\lambda(\boldsymbol{x},t)}, \tag{B9}$$

为方便起见，重复指标上的求和不再显式写出，

$$\mathcal{G}_{i,\lambda(\boldsymbol{x},t)}^{\bar{\lambda}} f^{\lambda(\boldsymbol{x},t)} = [\mathcal{G}_{\lambda(\boldsymbol{x},t)}^{\bar{\lambda}}]_{i,k} f_k^{\lambda(\boldsymbol{x},t)} \tag{B10}$$

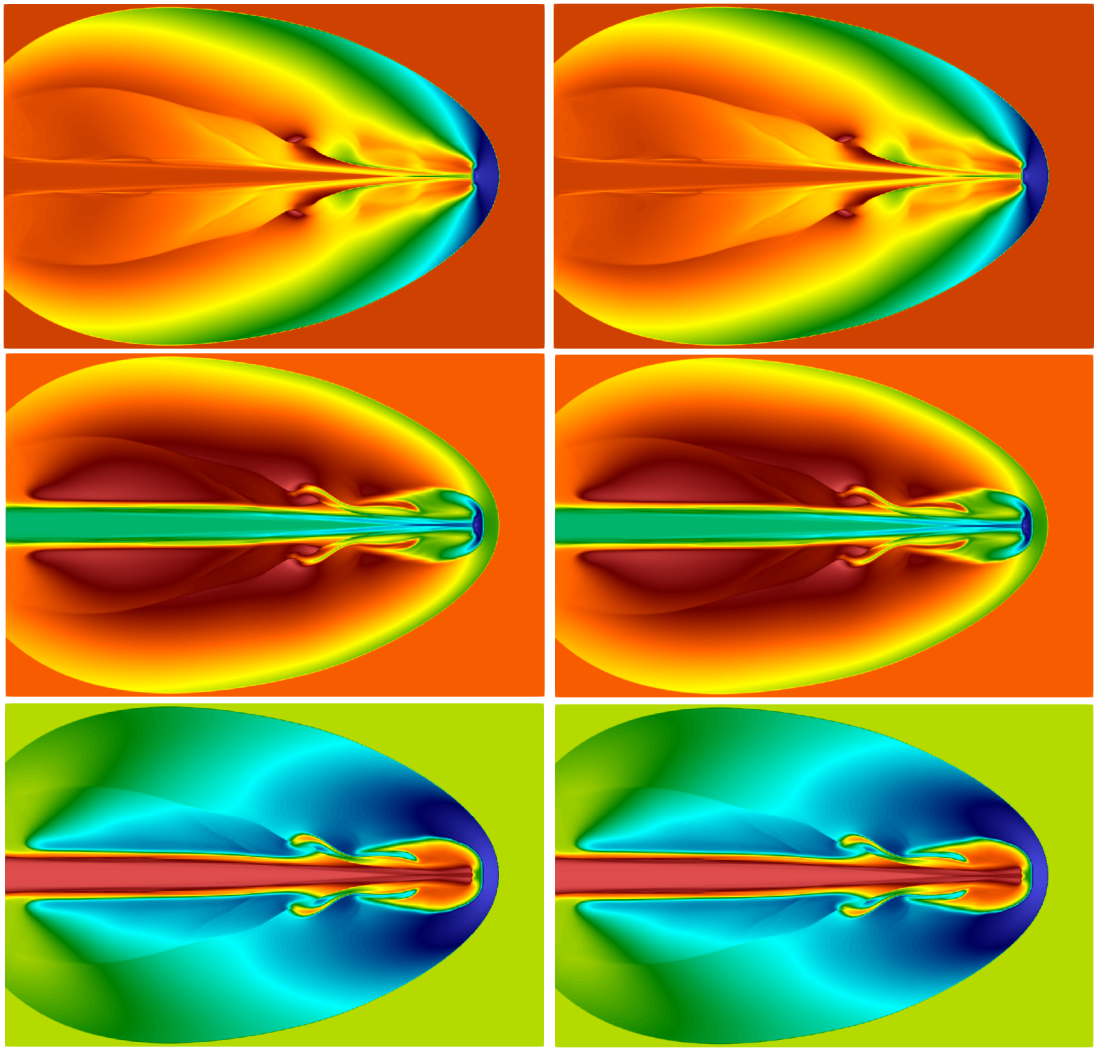


图 17. 马赫数30天体物理喷流问题。上：压力；中：密度；下：温度。左列： $D2Q16$。右列： $D2Q9/D2Q16$。

附录 C：守恒性质

不失一般性，我们考虑位于 $\boldsymbol{x}_I$ 的一个面，其单位法向量沿 x 方向。根据所提出的格式，通量已在参考系 λ 下计算，并表示为：

$$F^{\overline{\lambda}}_{f,i}(\boldsymbol{x}_I) = v^{\overline{\lambda}}_{ix} f^{\overline{\lambda}}_i(\boldsymbol{x}_I), \tag{C1}$$

$$F^{\overline{\lambda}}_{g,i}(\boldsymbol{x}_I) = v^{\overline{\lambda}}_{ix} g^{\overline{\lambda}}_i(\boldsymbol{x}_I). \tag{C2}$$

左右相邻单元 $\boldsymbol{x}_L, \boldsymbol{x}_R$ 中的粒子分布函数 f_- 根据通量 $F^{\lambda}_{f,\,i}(\boldsymbol{x}_I)$ 更新为：

$$f_i^{\lambda_L}(\boldsymbol{x}_L, t_{n+1}) = f_i^{\lambda_L}(\boldsymbol{x}_L, t_n) - \delta t \mathcal{G}^{\lambda_L}_{i,\overline{\lambda}} F^{\overline{\lambda}}_f(\boldsymbol{x}_I), \tag{C3}$$

$$f_i^{\lambda_R}(\boldsymbol{x}_R, t_{n+1}) = f_i^{\lambda_R}(\boldsymbol{x}_R, t_n) + \delta t \mathcal{G}^{\lambda_R}_{i,\overline{\lambda}} F^{\overline{\lambda}}_f(\boldsymbol{x}_I). \tag{C4}$$

相应地，粒子分布函数 g_- ，

$$g_i^{\lambda_L}(\boldsymbol{x}_L, t_{n+1}) = g_i^{\lambda_L}(\boldsymbol{x}_L, t_n) - \delta t \mathcal{G}^{\lambda_L}_{i,\overline{\lambda}} F^{\overline{\lambda}}_g(\boldsymbol{x}_I), \tag{C5}$$

$$g_i^{\lambda_R}(\boldsymbol{x}_R, t_{n+1}) = g_i^{\lambda_R}(\boldsymbol{x}_L, t_n) + \delta t \mathcal{G}^{\lambda_R}_{i,\overline{\lambda}} F^{\overline{\lambda}}_g(\boldsymbol{x}_I), \tag{C6}$$

对粒子分布函数求和后，我们得到界面通量引起的左侧相邻单元 $\delta\rho_L$， $\delta(\rho\boldsymbol{u})_L$， $\delta(\rho E)_L$ 和右侧相邻单元 $\delta\rho_R$， $\delta(\rho\boldsymbol{u})_R$， $\delta(\rho E)_R$中质量、动量和能量的更新，

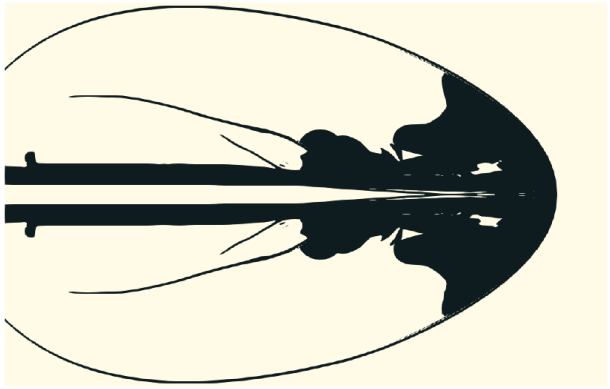


图 18. 马赫数30天体物理喷流问题。 $D2Q9/D2Q16$ 模型的晶格分布。黑色区域表示 $D2Q16$ 晶格。

$$\delta\rho_L = \sum_{i=0}^{Q-1}\left\{f_i^{\lambda_L}(\boldsymbol{x}_L,t_{n+1}) - f_i^{\lambda_L}(\boldsymbol{x}_L,t_n)\right\} = -\delta t\sum_{i=0}^{Q-1}\mathcal{G}_{i,\overline{\lambda}}^{\lambda_L}F_f^{\overline{\lambda}}(\boldsymbol{x}_I), \tag{C7}$$

$$\delta(\rho\boldsymbol{u})_L = \sum_{i=0}^{Q-1}\left\{\boldsymbol{v}_i^{\lambda_L}f_i^{\lambda_L}(\boldsymbol{x}_L,\ t_{n+1}) - \boldsymbol{v}_i^{\lambda_L}f_i^{\lambda_L}(\boldsymbol{x}_L,\ t_n)\right\} = -\delta t\sum_{i=0}^{Q-1}\boldsymbol{v}_i^{\lambda_L}\mathcal{G}_{i\ \to\ \lambda}^{\lambda_L}F_f^{\lambda}(\boldsymbol{x}_I), \tag{C8}$$

$$\begin{aligned}\delta(\rho E)_L &= \sum_{i=0}^{Q-1}\left\{\frac{(v_i^{\lambda_L})^2}{2}f_i^{\lambda_L}(\boldsymbol{x}_L,t_{n+1}) + g_i^{\lambda_L}(\boldsymbol{x}_L,t_{n+1}) - \frac{(v_i^{\lambda_L})^2}{2}f_i^{\lambda_L}(\boldsymbol{x}_L,t_n) - g_i^{\lambda_L}(\boldsymbol{x}_L,t_n)\right\}\\ &= -\delta t\sum_{i=0}^{Q-1}\left\{\frac{(v_i^{\lambda_L})^2}{2}\mathcal{G}_{i,\overline{\lambda}}^{\lambda_L}F_f^{\overline{\lambda}}(\boldsymbol{x}_I) + \mathcal{G}_{i,\overline{\lambda}}^{\lambda_L}F_g^{\overline{\lambda}}(\boldsymbol{x}_I)\right\},\end{aligned} \tag{C9}$$

$$\delta\rho_R = \sum_{i=0}^{Q-1}\left\{f_i^{\lambda_R}(\boldsymbol{x}_R,t_{n+1}) - f_i^{\lambda_R}(\boldsymbol{x}_R,t_n)\right\} = \delta t\sum_{i=0}^{Q-1}\mathcal{G}_{i,\overline{\lambda}}^{\lambda_R}F_f^{\overline{\lambda}}(\boldsymbol{x}_I), \tag{C10}$$

$$\delta(\rho\boldsymbol{u})_R = \sum_{i=0}^{Q-1}\left\{\boldsymbol{v}_i^{\lambda_R}f_i^{\lambda_R}(\boldsymbol{x}_R,\ t_{n+1}) - \boldsymbol{v}_i^{\lambda_R}f_i^{\lambda_R}(\boldsymbol{x}_R,\ t_n)\right\} = \delta t\sum_{i=0}^{Q-1}\boldsymbol{v}_i^{\lambda_R}\mathcal{G}_{i\ \to\ \lambda}^{\lambda_R}F_f^{\lambda}(\boldsymbol{x}_I), \tag{C11}$$

$$\begin{aligned}\delta(\rho E)_R &= \sum_{i=0}^{Q-1}\left\{\frac{(v_i^{\lambda_R})^2}{2}f_i^{\lambda_R}(\boldsymbol{x}_R,t_{n+1}) + g_i^{\lambda_R}(\boldsymbol{x}_R,t_{n+1}) - \frac{(v_i^{\lambda_R})^2}{2}f_i^{\lambda_R}(\boldsymbol{x}_R,\ t_n) - g_i^{\lambda_R}(\boldsymbol{x}_R,\ t_n)\right.\\ &\qquad \left.\mathcal{G}_{i\ ,\lambda}^{\lambda_R}F_f^{\lambda}\ (\boldsymbol{x}_I) + \mathcal{G}_{i\ ,\lambda}^{\lambda_R}F_g^{\lambda}\right\}\\ &= \delta t\sum_{i=0}^{Q-1}\left\{\frac{(v_i^{\lambda_R})^2}{2}\ (\overline{\boldsymbol{x}}_I)^{-}\right\}.\qquad -\end{aligned} \tag{C12}$$

有限体积法在质量、动量和总能量方面严格守恒，条件是：

$$\delta\rho_R + \delta\rho_L = 0, \tag{C13}$$

$$\delta(\rho\boldsymbol{u})_R + \delta(\rho\boldsymbol{u})_L = 0, \tag{C14}$$

$$\delta(\rho E)_R + \delta(\rho E)_L = 0. \tag{C15}$$

将上述表达式代入后，我们得到以下约束条件：

$$\sum_{i=0}^{Q-1}\mathcal{G}_{i,\overline{\lambda}}^{\lambda_L}F_f^{\overline{\lambda}} = \sum_{i=0}^{Q-1}\mathcal{G}_{i,\overline{\lambda}}^{\lambda_R}F_f^{\overline{\lambda}}, \tag{C16}$$

$$\sum_{i=0}^{Q-1}\boldsymbol{v}_i^{\lambda_L}\mathcal{G}_{i,\overline{\lambda}}^{\lambda_L}F_f^{\overline{\lambda}} = \sum_{i=0}^{Q-1}\boldsymbol{v}_i^{\lambda_R}\mathcal{G}_{i,\overline{\lambda}}^{\lambda_R}F_f^{\overline{\lambda}}, \tag{C17}$$

$$\begin{aligned}\sum_{i=0}^{Q-1}\frac{(\boldsymbol{v}_i^{\lambda_L})^2}{2}\mathcal{G}_{i,\overline{\lambda}}^{\lambda_L}F_f^{\overline{\lambda}} + \mathcal{G}_{i,\overline{\lambda}}^{\lambda_L}F_g^{\overline{\lambda}} &= \sum_{i=0}^{Q-1}\frac{(\boldsymbol{v}_i^{\lambda_R})^2}{2}\mathcal{G}_{i,\overline{\lambda}}^{\lambda_R}F_f^{\overline{\lambda}}\\ &\quad + \mathcal{G}_{i,\overline{\lambda}}^{\lambda_R}F_g^{\overline{\lambda}}.\end{aligned} \tag{C18}$$

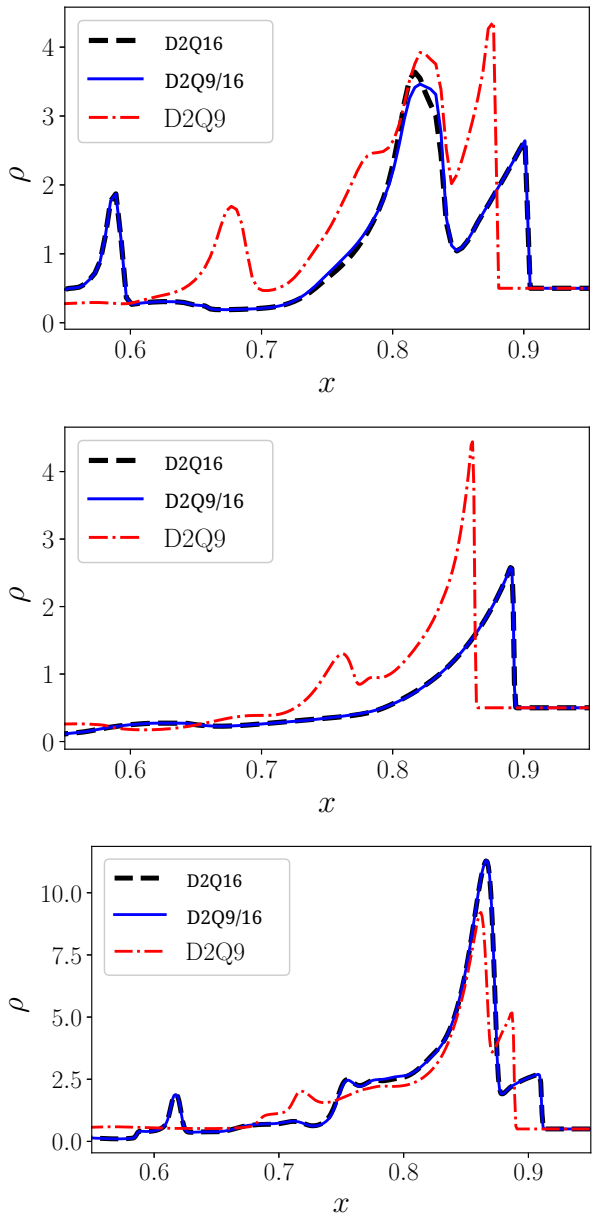


图19。马赫数30天体物理喷流问题。 $D2Q16$ （黑色虚线）、 $D2Q9$ （红色点划线）和 $D2Q9/D2Q16$ （蓝色实线）模型的密度剖面，沿计算域的水平截线绘制。水平截线与 y 轴分别在 $y/L_y = 0.66$ （顶部）、 $y/L_y = 0.7$ （中部）和 $y/L_y = 0.73$ （底部）相交。

如果 $f-$ 粒子分布函数的以下矩在参考系变换下保持不变，则这些约束条件得以满足

变换，

$$\sum_{i=0}^{Q-1} v_{ix}^{\lambda_L} f_i^{\lambda_L} = \sum_{i=0}^{Q-1} v_{ix}^{\lambda_R} f_i^{\lambda_R}, \tag{C19}$$

$$\sum_{i=0}^{Q-1} \boldsymbol{v}_i^{\lambda_L} v_{ix}^{\lambda_L} f_i^{\lambda_L} = \sum_{i=0}^{Q-1} \boldsymbol{v}_i^{\lambda_R} v_{ix}^{\lambda_R} f_i^{\lambda_R}, \tag{C20}$$

$$\sum_{i=0}^{Q-1} (\boldsymbol{v}_i^{\lambda_L})^2 v_{ix}^{\lambda_L} f_i^{\lambda_L} = \sum_{i=0}^{Q-1} (\boldsymbol{v}_i^{\lambda_R})^2 v_{ix}^{\lambda_R} f_i^{\lambda_R}. \tag{C21}$$

以及以下针对 $g-$ 粒子分布函数的表达式，

$$\sum_{i=0}^{Q-1} v_{ix}^{\lambda_L} g_i^{\lambda_L} = \sum_{i=0}^{Q-1} v_{ix}^{\lambda_R} g_i^{\lambda_R}. \tag{C22}$$

附录 D：强迫方案

我们考虑带有强迫项的连续动理学方程，

$$\partial_t f_i + \boldsymbol{v}_i \cdot \nabla f_i = \frac{1}{\tau}(f_i^{\mathrm{eq}} - f_i) + F_i. \tag{D1}$$

体力可表示为

$$F_i = -\frac{\boldsymbol{a} \cdot (\boldsymbol{v}_i - \boldsymbol{u})}{T} f_i^{\mathrm{eq}}. \tag{D2}$$

可以通过 Strang 分裂方法引入力。

$$\partial_t f_i = F_i, \ (\text{for } \delta t/2) \tag{D3}$$

$$\partial_t f_i + \boldsymbol{v}_i \cdot \nabla f_i = \frac{1}{\tau}(f_i^{\mathrm{eq}} - f_i), \ (\text{for } \delta t) \tag{D4}$$

$$\partial_t f_i = F_i \ (\text{for } \delta t/2). \tag{D5}$$

中间步骤是在无体力作用下进行动理学更新。在两个半时间步的外力作用步骤中，分布函数和宏观速度更新如下：

$$f_i^* = f_i + \frac{1}{2}\delta t F_i, \tag{D6}$$

$$\boldsymbol{u}^* = \boldsymbol{u} + \frac{1}{2}\delta t \boldsymbol{a}. \tag{D7}$$

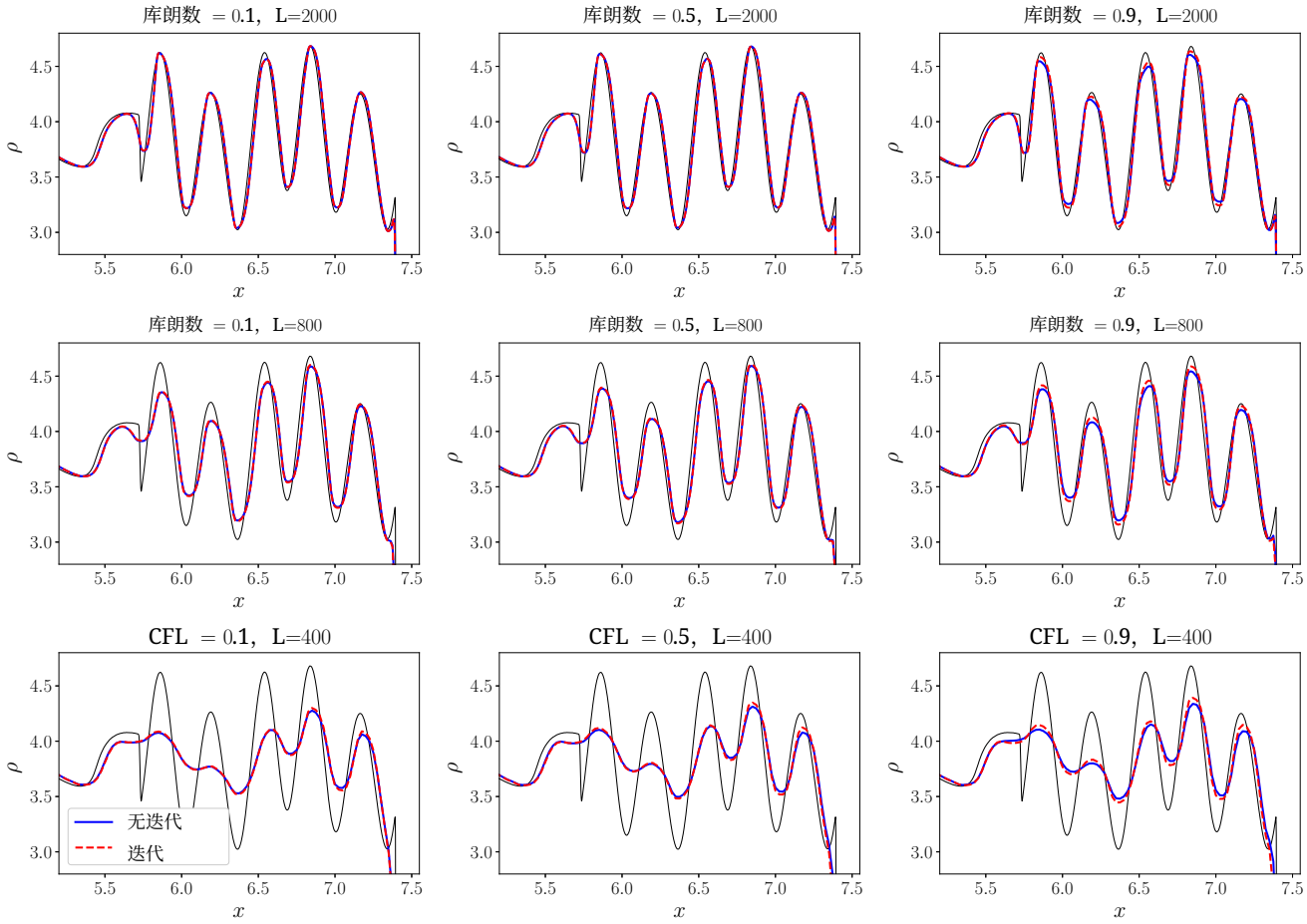


图 20. Shu-Osher问题的密度分布，对比采用迭代（红色虚线）和不采用迭代（蓝色实线）的格式。黑色实线对应参考结果 [84]。展示了不同库朗数和分辨率下的结果。

[1] Y. Ha 和 C. L. Gardner, 《高马赫数天体物理喷流的正性格式数值模拟》, Journal of Scientific Computing **34**, 247（2010）。[2] C. L. Gardner 和 S. J. Dwyer, 《XZ Tauri 超声速天体物理喷流的数值模拟》, Acta Mathematica Scientia **29**, 1677（2009）。[3] J. Urzay, 《高超声速飞行用吸气式推进系统中的超声速燃烧》, Annual Review of Fluid Mechanics **50**, 593（2018）, https://doi.org/10.1146/annurev-fluid-122316-045217。[4] J. Von Neumann 和 R. D. Richtmyer, 《流体动力学激波数值计算方法》, Journal of Applied Physics **21**, 232（1950）, https://doi.org/10.1063/1.1699639。[5] A. Harten, 《双曲守恒律的高分辨率格式》, 计算物理学杂志 **49**, 357（1983）。[6] A. Harten 和 S. Osher, 《一致高阶精度非振荡格式 I》, SIAM Journal on Numerical 分析《24》, 279 (1987). [7] A. Harten, B. Engquist, S. Osher, 和 S. R. Chakravarthy, 《一致高阶精度本质无振荡格式》, III, 《计算物理学杂志》**71**, 231 (1987). [8] X.-D. Liu, S. Osher, 和 T. Chan, 《加权本质无振荡格式》, 《计算物理学杂志》**115**, 200 (1994). [9] G.-S. Jiang 和 C.-W. Shu, 《加权 ENO 格式的高效实现》, 《计算物理学杂志》 **126**, 202 (1996). [10] S. Pirozzoli, 《高速流动数值方法》, Annual Review of Fluid Mechanics **43**, 163 (2011), https://doi.org/10.1146/annurev-fluid-122109-160718. [11]J. A. Ekaterinaris, 《用于空气动力学的高阶精度低数值扩散方法》, 航空航天科学进展 **41**, 192 (2005). [12] L. Fu, X. Y. Hu, 和 N. A. Adams, 《一类用于可压缩流体模拟的高阶目标本质无振荡格式

》，《计算物理学杂志》305, 333 (2016). [13] X. Zhang 和 C.-W. Shu，《矩形网格上用于可压缩欧拉方程的保正高阶间断伽辽金格式》，《计算物理学杂志》229, 8918 (2010). [14] L. Fu，《一种适用于全速域气体动力学和湍流的超高阶TENO格式》，Computer Physics Communications 244, 117 (2019). [15] X. Zhang 和 C.-W. Shu，《用于可压缩欧拉方程的保正高阶有限差分加权本质无振荡格式》，《计算物理学杂志》231, 2245 2012( ). [16] B. Dorschner, S. S. Chikatamarla, 和 I. V. Karlin，《采用熵格子玻尔兹曼方法模拟过渡流》，流体力学杂志 824, 388 (2017). [17] B. Dorschner, F. B¨osch, S. S. Chikatamarla, K. Boulou-chos, 和 I. V. Karlin，《用于复杂流动的熵多弛豫时间格子玻尔兹曼模型》，流体力学杂志 801, 623 (2016). [18] X. He, S. Chen, 和 G. D. Doolen，《不可压缩极限下格子玻尔兹曼方法的一种新型热模型》，J. Comp. Phys. 146, 282 (1998). [19] Z. Guo, C. Zheng, B. Shi, 和 T. S. Zhao，《低马赫数流动的热格子玻尔兹曼方程：解耦模型》，《物理评论E》75, 036704 (2007). [20] I. V. Karlin, D. Sichau, 和 S. S. Chikatamarla，《用于热流动的一致双分布函数格子玻尔兹曼模型》，《物理评论E》88, 063310 (2013). [21] A. M. Mazloomi, S. S. Chikatamarla, 和 I. V. Karlin，《用于多相流的熵格子玻尔兹曼方法》，《物理评论快报》114, 174502 (2015). [22] A. M. Mazloomi, S. S. Chikatamarla, 和 I. V. Karlin，《液滴从宏观纹理超疏水表面反弹》，流体力学杂志 824, 866 (2017). [23] M. W¨ohrwag, C. Semprebon, A. Mazloomi Moqaddam, I. Karlin, 和 H. Kusumaatmaja，《具有高密度比的三元自由能熵格子玻尔兹曼模型》，《物理评论快报》120, 234501 (2018). [24] N. Sawant, B. Dorschner, 和 I. V. Karlin，《多组分混合物的一致格子玻尔兹曼模型》，Journal of Fluid Mechanics 909, A1 (2021). [25] N. Sawant, B. Dorschner, 和 I. V. Karlin，《反应性混合物的格子玻尔兹曼模型》，Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences 379, 20200402 (2021). [26] X. Shan, X.-F. Yuan, 和 H. Chen，《流体动力学的动理学理论表示：超越纳维–斯托克斯方程的一种途径》，流体力学杂志 550, 413 (2006). [27] K. V. Sharma, R. Straka, 和 F. W. Tavares，《格子玻尔兹曼方法在空气动力学、气动声学和热流动中的应用现状》，航空航天科学进展 115, 100616 (2020). [28] T. Krueger, H. Kusumaatmaja, A. Kuzmin, O. Shardt, G. Silva, 和 E. Viggen, *The Lattice Boltzmann Method: Principles and Practice*，《物理学研究生教材》（施普林格, 2016）。[29] S. Succi, *The Lattice Boltzmann Equation: For Complex States of Flowing Matter*（牛津大学出版社，2018）。[30] Y. H. Qian 和 S. A. Orszag，《纳维–斯托克斯方程的格子BGK模型：可压缩区域中的非线性偏差》，《欧洲物理快报》（EPL）21, 255 (1993)。[31] Z. Guo、C. Zheng、B. Shi 和 T. S. Zhao，低马赫数流动的热格子玻尔兹曼方程：解耦模型，《物理评论E》**75**，036704（2007）。[32] G. R. McNamara、A. L. Garcia 和 B. J. Alder，热格子玻尔兹曼模型的稳定化，《统计物理学杂志》**81**，395（1995）。[33] X. Shan 和 X. He，玻尔兹曼方程求解中的速度空间离散化，《物理评论快报》**80**，65（1998）。[34] N. I. Prasianakis 和 I. V. Karlin，标准格子上的热流动模拟格子玻尔兹曼方法，《物理评论E》**76**，016702（2007）。[35] M. H. Saadat、F. B¨osch 和 I. V. Karlin，标准格子上用于可压缩流动的格子玻尔兹曼模型：可变普朗特数和绝热指数，《物理评论E》**99**，013306（2019）。[36] M. H. Saadat、B. Dorschner 和 I. Karlin，扩展格子玻尔兹曼模型，《熵》**23**，10.3390/e23040475（2021）。[37] M. H. Saadat、S. A. Hosseini、B. Dorschner 和 I. V. Karlin，用于气体动力学的扩展格子玻尔兹曼模型，《流体物理学》**33**，046104（2021），https://doi.org/10.1063/5.0048029。[38] S. S. Chikatamarla 和 I. V. Karlin，格子玻尔兹曼理论的熵与伽利略不变性，《物理评论快报》**97**，190601（2006）。[39] S. S. Chikatamarla 和 I. V. Karlin，格子玻尔兹曼方法的格子，《物理评论E》**79**，046701（2009）。[40] F. J. Alexander、S. Chen 和 J. D. Sterling，格子玻尔兹曼热流体动力学，《物理评论E》**47**，R2249（1993）。[41] N. Frapolli、S. S. Chikatamarla 和 I. V. Karlin，用于可压缩流动的熵格子玻尔兹曼模型，《物理评论E》**92**，061301（2015）。[42] N. Frapolli、S. S. Chikatamarla 和 I. V. Karlin，用于气体动力学的熵格子玻尔兹曼模型：理论、边界条件与实现，《物理评论E》**93**，063302（2016）。[43] Y. Feng、P. Sagaut 和 W.-Q. Tao，规则格子上用于高亚音速和跨音速流动的可压缩格子玻尔兹曼有限体积模型，《计算机与流体》**131**，45（2016）。[44] Y. Feng、P. Boivin、J. Jacob 和 P. Sagaut，用于高亚音速可压缩流动的混合递归正则化热格子玻尔兹曼模型，《计算物理学杂志》**394**，82（2019）。[45] S. Guo、Y. Feng 和 P. Sagaut，采用混合递归正则化改进的标准热格子玻尔兹曼模型，用于可压缩层流和湍流，《流体物理学》**32**，126108（2020），https://doi.org/10.1063/5.0033364。[46] F. Renard、Y. Feng、J.-F. Boussuge 和 P. Sagaut，标准格子上用于亚音速和超音速流动的改进型可压缩混合格子玻尔兹曼方法，《计算机与流体》**219**，104867（2021）。[47] S. A. Hosseini、C. Coreixas、N. Darabiha 和 D. Th´evenin，平移格子模板上格子玻尔兹曼方法的全面分析，《物理评论E》**100**，063301（2019）。[48] N. Frapolli、S. S. Chikatamarla 和 I. V. Karlin，共动伽利略参考系中的格子动理学理论，《物理评论快报》**117**，010604（2016）。[49] B. Dorschner、F. B¨osch 和 I. V. Karlin，动理学理论中的按需粒子方法

(2018). [50] E. Reyhanian、B. Dorschner 和 I. V. Karlin，非理想流体的热动学格子玻尔兹曼模型，《物理评论 E》**102**，020103（2020）。[51] E. Reyhanian、B. Dorschner 和 I. Karlin，可压缩非理想流体的动理学模拟：从超临界流动到相变及奇异行为，《计算》**9**，10.3390/computation9020013（2021）。[52] E. Reyhanian，*Thermokinetic Model for Compressible Generic Fluids* ¨ 2021，博士论文，苏黎世联邦理工学院（）。[53] N. Sawant、B. Dorschner 和 I. V. Karlin，采用按需粒子方法进行爆轰建模，《AIP进展》**12**，075107（2022），https://doi.org/10.1063/5.0095122。[54] N. G. Kallikounis、B. Dorschner 和 I. V. Karlin，多尺度半拉格朗日格子玻尔兹曼方法，《物理评论E》**103**，063305（2021）。[55] E. Zipunova、A. Perepelkina、A. Zakirov 和 S. Khilkov，正则化与按需粒子方法在求解离散玻尔兹曼方程中的应用，《计算科学杂志》**53**，101376（2021）。[56] E. Zipunova、A. Perepelkina 和 A. Zakirov，正则化按需粒子方法求解黎曼问题的适用性，《物理学杂志：会议系列》**1740**，012024（2021）。[57] N. G. Kallikounis、B. Dorschner 和 I. V. Karlin，按需粒子方法用于强间断流动，《物理评论E》**106**，015301（2022）。[58] Z. Guo、K. Xu 和 R. Wang，适用于所有克努森数流动的离散统一气体动理学格式：低速等温情形，《物理评论E》**88**，033305（2013）。[59] Z. Guo、R. Wang 和 K. Xu，适用于所有克努森数流动的离散统一气体动理学格式。II. 热可压缩情形，《物理评论E》**91**，033313（2015）。[60] Z. Guo 和 K. Xu，多尺度流动的离散统一气体动理学格式的进展，《空气动力学进展》**3**，6（2021）。[61] P. Kauf，*Multi-scale approximation models for the Boltzmann equation* ¨ 2011，博士论文，苏黎世联邦理工学院（）。[62] V. A. Rykov，具有转动自由度的气体模型动力学方程，《流体动力学》**10**，959（1975）。[63]X. Nie、X. Shan 和 H. Chen，具有内自由度气体的热格子玻尔兹曼模型，《物理评论E》**77**，035701（2008）。[64] S. Ansumali、S. Arcidiacono、S. S. Chikatamarla、N. I. Prasianakis、A. N. Gorban 和 I. V. Karlin，准平衡格子玻尔兹曼方法，《欧洲物理学杂志B辑》**56**，139（2007）。[65] X. He、X. Shan 和 G. D. Doolen，非理想气体的离散玻尔兹曼方程模型，《物理评论E》**57**，R13（1998）。[66] X. He、S. Chen 和 G. D. Doolen，不可压缩极限下格子玻尔兹曼方法的一种新型热模型，计算物理学杂志**146**，282（1998）。[67] B. Van Leer，迈向终极守恒差分格式。IV. 一种新的数值对流方法

-

算》，计算物理学杂志 **23**, 276 (1977). [68] P. L. Roe，欧拉方程的基于特征的格式，《Annual Review of Fluid Mechanics》**18**, 337 (1986). [69] B. van Leer，迈向终极守恒差分格式。V. 戈东诺夫方法的二阶续篇，计算物理学杂志 **32**, 101 (1979). [70] G. Strang，关于差分格式的构造与比较，《SIAM 数值分析杂志》**5**, 506 1968 10 1137 0705041 ( ), https://doi.org/ . / . [71] A. Tiwari and S. P. Vanka，用于复杂几何的幽灵流体晶格玻尔兹曼方法，《国际流体数值方法杂志》**69**, 481 (2012), https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/fld.2573. [72] E. Toro and M. V´ázquez-Cend´ón，欧拉方程的通量分裂格式，《计算机与流体》**70**, 1 (2012). [73]R. Loub`ère and M. J. Shashkov，适用于任意拉格朗日–欧拉方法的交错多边形网格子单元重映射方法，计算物理学杂志 **209**, 105 (2005). [74] P. D. Lax and X.-D. Liu，利用正性格式求解气体动力学二维黎曼问题，《SIAM 科学计算杂志》**19**, 319 (1998), https://doi.org/10.1137/S1064827595291819. [75] A. Kurganov and E. Tadmor，无需黎曼问题求解器求解气体动力学二维黎曼问题，《偏微分方程数值方法》**18**, 584 (2002). [76] P. Woodward and P. Colella，强激波下二维流体流动的数值模拟，计算物理学杂志 **54**, 115 (1984). [77] V. Daru and C. Tenaud，非定常黏性激波流中全变差递减高分辨率格式的评估，《计算机与流体》**30**, 89 (2000). [78] G. Zhou, K. Xu, and F. Liu，二维激波管中非定常黏性流动的网格收敛解与分析，《流体物理学》**30**, 016102 (2018), https://doi.org/10.1063/1.4998300. [79] C. Cercignani，*Theory and Application of the Boltzmann Equation* 1975 (苏格兰学术出版社，爱丁堡，). [80] A. J. D.，*Modern compressible flow: with historical perspective* 1990 (麦格劳-希尔，). [81] T. Ohwada，正激波结构：硬球分子玻尔兹曼方程的直接数值分析，《流体物理学 A：流体动力学》**5**, 217 (1993), https://doi.org/10.1063/1.858777. [82] P. D. Lax，非线性双曲方程的弱解及其数值计算，《纯粹与应用数学通讯》**7**, 159 (1954). [83] C.-W. Shu and S. Osher，本质无振荡激波捕捉格式的高效实现，II，计算物理学杂志 **83**, 32 (1989).[84] 笛卡尔网格上的有限差分双曲-抛物型偏微分方程求解器，http://hypar.github.io/.