arXiv:2602.07409v1 [physics.flu-dyn] 7 Feb 2026

双原子气体的唯象能量交换：直接模拟蒙特卡罗方法中 Pullin 模型与 Borgnakke-Larsen模型的比较

金浩 (Hao Jin),[1,] a) 刘沙 (Sha Liu),[1, 2, 3,] b) 丁宁超 (Ningchao Ding),[1] 杨思睿 (Sirui Yang),[1] 崔华华 (Huahua Cui),[4] 卓丛山 (Congshan Zhuo),[1, 2, 3] 和钟诚文 (Chengwen Zhong)[1, 2, 3]1)西北工业大学航空学院，中国陕西省西安市 710072 2)西北工业大学极端力学研究院，中国陕西省西安市 710072 3)西北工业大学飞机总体设计全国重点实验室，中国陕西省西安市 710072 4)曙光信息产业有限公司，中国天津市滨海高新技术产业开发区 300384（日期：2026年2月10日）

在高超声速稀薄流中，分子间碰撞不足会导致平动温度与转动温度之间出现显著差异，从而产生强烈的热非平衡。这种现象与连续流显著不同；在连续流中，这两种温度几乎相同，可用一个约化的平动-转动温度表示。不同能量模态之间的能量再分配会显著影响高超声速飞行器的流场结构和表面加热，因此，准确模拟能量交换对于稀薄流模拟至关重要。对于氮气和氧气等双原子气体，直接模拟蒙特卡罗（DSMC）方法通常采用Borgnakke-Larsen（BL）模型来模拟平动-转动能量交换（弛豫）过程。尽管BL模型应用广泛，但它缺乏严谨的理论基础，并假设只有部分碰撞会导致转动弛豫，因此其物理真实性受到限制。为解决这些不足，Pullin将一种动力学一致的弛豫模型引入气体动理论。该模型利用贝塔函数进行能量分配，构造出满足细致平衡条件的具体碰撞截面。本研究在DSMC框架内对BL模型和Pullin模型进行了比较研究，同时考察原始方程和简化方程，并以贝塔函数中的物理适应系数作为参数。研究采用一系列测试用例评估这些模型的准确性和效率，包括氮气的零维转动弛豫、一维平面库埃特流和正激波、二维圆柱绕流高超声速流，以及X38类飞行器周围的三维高超声速流。结果证实了Pullin模型与BL模型的一致性。得益于严谨的理论基础和准确的物理表征，Pullin模型有望为后续理论研究和数值模拟的拓展提供有力支持。此外，在高度稀薄流动状态（克努森数大于1，或高于100千米的高度）下，简化Pullin模型的性能与BL模型相当。

[a])jinhao@mail.nwpu.edu.cn[b])通讯作者：
shaliu@nwpu.edu.cn

I. 引言

在高超声速流动中，双原子气体（例如 N_2 和 O_2）会发生与其内自由度（DOF）相关的复杂能量交换过程，包括转动和振动模态。在中等高度的连续介质条件下，碰撞足够频繁，使平动、转动和振动模态之间的能量传递趋向于能量均分——尤其是平动与转动模态之间——从而维持近似的局部热力学平衡[1]。然而，在高空，平均自由程增大，碰撞能量传递显著减慢。因此，内能模态的弛豫时间可能与特征流动时间尺度相当，从而导致热力学非平衡[2–4]。在这种稀薄状态下，不同模态之间的能量重新分配会显著影响流场结构、表面加热以及高超声速飞行器的整体气动热力学性能。因此，在稀薄高超声速气体动力学中，准确模拟此类能量交换过程至关重要。

为捕捉稀薄流动中的热力学非平衡现象，人们开发了多种用于求解玻尔兹曼方程的数值方法，通常分为确定性方法[5–7] 和随机粒子方法[8–11]。在这些方法中，直接模拟蒙特卡罗（DSMC）[8,12] 方法已成为稀薄非平衡气体流动中应用最广泛的随机方法。DSMC 方法在每个时间步内将分子运动与碰撞解耦：首先使分子以恒定速度自由输运，随后通过概率抽样选取代表性的碰撞粒子对。通过显式模拟分子碰撞对，DSMC 方法能够高效地纳入复杂的物理化学过程——包括平动-内能交换[13,14], 、化学反应[15,16], 和电离[17]——而无需显著增加计算成本，因此尤其适用于高超声速非平衡流动模拟。

已有多种唯象模型[18–23] 被提出并应用于 DSMC模拟中的平动-内能交换。其中，1975年提出的 Borgnakke-Larsen（BL）模型[18], 是目前最广泛采用的模型，用于描述双原子分子平动和内能模式之间的能量传递。在 BL模型中，会随机选取一部分发生碰撞的粒子，使其发生非弹性碰撞。弹性

碰撞只改变粒子速度，而非弹性碰撞则会在平动和内能模式之间重新分配碰撞后能量，新能量从与碰撞能量相对应的平衡分布中抽取。非弹性碰撞的概率由弛豫碰撞数决定，因此该模型能够再现实验观测到的弛豫率[24]。引入温度相关弛豫模型后——例如用于描述转动能的 Parker模型[25] 和用于描述振动能的 Millikan-White关联式[26]——研究表明，只要能量交换概率完全取决于碰撞不变量（总碰撞能），就能满足细致平衡原理[14]。BL模型简单且计算效率高，但在物理上并不现实，因为只有一部分碰撞是非弹性的。为提高其物理保真度，有人提出了该模型的一种受限能量交换[8] 变体，其中所有发生碰撞的粒子都会发生非弹性碰撞。然而，这一改动会降低计算效率，而且已被证明不满足细致平衡原理[8,19]。在能量交换过程中，细致平衡原理要求在平衡状态下，正向碰撞的概率必须等于相应逆向碰撞的概率。违反这一条件可能导致不真实的平衡态，进而造成平动能和内能分布错误，或弛豫率不准确。

另一方面，在专注于构建碰撞核的研究中，Pullin 提出了一种替代性动力学模型，其中每个自由度都参与每次碰撞中的能量交换[19,]，且满足细致平衡原理。该模型对转动-平动能量交换的描述在物理上更加真实。在 Pullin 的原始模型中，转动模态与平动模态之间的能量交换由五个贝塔分布随机变量表示，可方便地用于 DSMC模拟。然而，该模型的计算成本较高。为降低计算成本，人们提出了一种简化变体，仅采用三个贝塔分布随机变量；在该变体中，将碰撞粒子对的转动能之和作为整体处理，并将碰撞后转动能均匀分布[20]。另一种简化模型同样采用三个贝塔分布随机变量，其中只有部分平动能参与交换，并已用于 DSMC模拟中的振动-平动能量交换[22]。与 BL模型相比，这些模型对能量交换的描述在物理上更加真实；然而，其较高的计算成本限制了它们在 DSMC模拟中的实际应用。此外，Pullin

模型中 VHS 分子的自由参数尚未得到充分确定。因此，关于 Pullin模型与 BL模型准确性和效率的比较研究仍然有限。

近期，有研究提出了一种基于 Pullin模型 的新型转动-平动分布函数，并通过宏观量的弛豫率建立了模型参数与弛豫过程之间的关系[27]。本文采用这一关系，在 Pullin模型 框架下确定 VHS 分子 的模型参数，并将该模型应用于直接模拟蒙特卡罗方法。随后，通过一系列数值模拟，将 Pullin模型 及其简化变体的性能与 BL模型 进行比较。本文其余部分安排如下：第二节简要回顾 Pullin模型、其简化变体，以及适用于 VHS 模型的能量分配参数。第三节介绍直接模拟蒙特卡罗方法中的碰撞过程，并概述 Pullin模型 在 DSMC框架 中的实现，并与 BL模型 进行比较。第四节对几种典型的稀薄气体流动进行数值模拟，以直接比较准确性和效率。最后，第五节给出结论。

II. 受限能量交换方案

A. Pullin模型回顾

气体的微观状态由密度分布函数$f(\boldsymbol{c},\ \boldsymbol{x},\ t,\ \boldsymbol{e})$描述，其中 t、 $\boldsymbol{x}$、 $\boldsymbol{c}$和 $\boldsymbol{e}$ 分别表示时间、位置矢量、粒子速度和粒子内能。在没有外力的情况下， f 的演化由下式给出的约化广义玻尔兹曼方程[19], 控制

$$\frac{\partial\left(nf\right)}{\partial t}+\boldsymbol{c}\frac{\partial\left(nf\right)}{\partial\boldsymbol{x}}=Q\left(f,f\right), \tag{1}$$

其中， n 为数密度，双线性碰撞算子 $Q(f,\ f)$描述粒子二元碰撞。该算子的形式为

$$Q\left(f,f\right)=n^{2}\int\int\cdots\int\left[f_{1}^{'}f_{2}^{'}J-f_{1}f_{2}\right]c_{r}I\left(\boldsymbol{e}|\boldsymbol{e}^{'}\right)d\boldsymbol{e}^{'}d\Omega^{'}d\boldsymbol{c}_{2}de_{2}, \tag{2}$$

其中， $\boldsymbol{e}=(e_1,\ e_2,\ e_t)$表示内能的分量，因子为 $J=\left(e_1e_2/e_1^{'}e_2^{'}\right)^{\zeta-1}$ ，其中 $\zeta=\upsilon/2$, 而 υ 表示内自由度。这里， c_r 是相对速率， $d\Omega^{'}$ 是单位立体角，$I\left(\boldsymbol{e}|\boldsymbol{e}^{'}\right)$ 是散射核。

如果存在逆碰撞，散射核 $I\left(\boldsymbol{e}|\boldsymbol{e}^{'}\right)$ 满足细致平衡关系，即:

$$e_t e_1^{\zeta-1} e_2^{\zeta-1} I\left(\boldsymbol{e}|\boldsymbol{e}^{'}\right) = e_t^{'} e_1^{'\zeta-1} e_2^{'\zeta-1} I\left(\boldsymbol{e}^{'}|\boldsymbol{e}\right). \tag{3}$$

为简化碰撞过程中动量与能量交换的描述，假定散射核 I 可分离为相互独立的速度散射过程与能量散射过程，即

$$I\left(\boldsymbol{e}|\boldsymbol{e}^{'}\right) = R\left(\boldsymbol{e}|\boldsymbol{e}^{'}\right)\sigma\left(\chi\right), \tag{4}$$

其中 σ 为截面， χ 为极偏转角， R 为能量散射核。应注意，散射与内能交换的解耦也与边界层及其他唯象模型相一致。将式(4)代入碰撞算子（式(2)）可得模型 Q，其中碰撞过程中的单原子几何散射性质得以保留，而多原子效应（内能与平动能交换）则通过适当选取 R以唯象方式加以表示。

对于截面 σ，考虑具有分子间势 $V = a/r^{\alpha}$的反幂律分子，其中 r 为粒子间距， a 为常数。对于能量散射核 R，将 I 的分离形式（式(4)）代入细致平衡关系（式(3)），可得如下条件

$$e_t^{\eta-1} e_1^{\zeta-1} e_2^{\zeta-1} R\left(\boldsymbol{e}|\boldsymbol{e}^{'}\right) = e_t^{'\eta-1} e_1^{'\zeta-1} e_2^{'\zeta-1} R\left(\boldsymbol{e}^{'}|\boldsymbol{e}\right), \tag{5}$$

其中 $\eta = 2 - 2/\alpha$。此外，能量散射核 R 必须满足以下要求：(1) 能量守恒: $e_0 = e_1 + e_2 + e_t = e_1^{'} + e_2^{'} + e_t^{'} = e_0^{'}$。(2) 非负性： $R \geq 0$。(3) 归一化：对于所有 $\boldsymbol{e}$, $\iint R\left(\boldsymbol{e}|\boldsymbol{e}^{'}\right) d\boldsymbol{e}^{'} = 1$。

通常很难为 R 构造显式表达式。Pullin[19] 引入了一个l维随机向量 $\boldsymbol{s} = (s_1, s_2, \cdots, s_l)$，其概率密度为 $h(\boldsymbol{s}) = \prod_{i=1}^{l} h_i(s_i)$，使得 $\int h(\boldsymbol{s})\, d\boldsymbol{s} = 1$，其中 $d\boldsymbol{s} = ds_1 ds_2 \ldots ds_l$。利用这一表示， R 可以写成另一种形式:

$$R\left(\boldsymbol{e}|\boldsymbol{e}^{'}\right) d\boldsymbol{e}^{'} = \iint_v h\left(\boldsymbol{s}\right) d\boldsymbol{s}, \tag{6}$$

其中， $h(\boldsymbol{s})$由五个贝塔分布函数定义如下

$$h(\boldsymbol{s}) = \left[\prod_{j=1}^{2} \beta\left\langle s_j|\phi\zeta, (1-\phi)\zeta\right\rangle\right] \beta\left\langle s_3|\psi\eta, (1-\psi)\eta\right\rangle \beta\left\langle s_4|\phi\zeta, \phi\zeta\right\rangle \beta\left\langle s_5|2\phi\zeta, \psi\eta\right\rangle. \tag{7}$$

这里， $0<\phi<1$ 和 $0<\psi<1$ 是总能量e_0/kT'和黏度温度指数 ω的任意函数（模型参数），其中 T'是任意参考温度。参数为 μ_1 和 μ_2 的贝塔分布定义如下

$$\beta\left\langle z\left|\mu_1,\mu_2\right.\right\rangle=\frac{1}{B\left(\mu_1,\mu_2\right)}z^{\mu_1-1}(1-z)^{\mu_2-1}, \tag{8}$$

其中， $B\left(\mu_1,\ \mu_2\right)$是完全贝塔函数。

通过取不同的 μ_1 和 μ_2值，贝塔分布可用于在不同自由度之间以及分子之间收集和重新分配能量。根据碰撞算子方程（1）和（7），对于反幂律分子，质心系中的碰后分子能量可表示为

$$\begin{aligned}
e_1^{'}&=\left(1-s_1\right)e_1+s_4s_5e_a,\\
e_2^{'}&=\left(1-s_2\right)e_2+\left(1-s_4\right)s_5e_a,\\
e_t^{'}&=\left(1-s_3\right)e_t+\left(1-s_5\right)e_a,\\
e_a&=s_1e_1+s_2e_2+s_3e_t,
\end{aligned} \tag{9}$$

其中， e_t 和 e_i 分别表示分子的碰前平动能和转动能，而$e_t^{'}$ 和 $e_i^{'}$ 分别表示相应的碰后平动能和转动能。随机变量 s_i 从以下贝塔分布中抽取:

$$\begin{aligned}
&\beta\left\langle s_j\left|\phi\zeta,\left(1-\phi\right)\zeta\right.\right\rangle,j=1,2,\\
&\beta\left\langle s_3\left|\psi\eta,\left(1-\psi\right)\eta\right.\right\rangle,\\
&\beta\left\langle s_4\left|\phi\zeta,\phi\zeta\right.\right\rangle,\\
&\beta\left\langle s_5\left|2\phi\zeta,\psi\eta\right.\right\rangle,
\end{aligned} \tag{10}$$

其中， ϕ 和 ψ 为模型参数。

此外，碰撞后转动能往往在两个分子之间平均分配，因此可以假定它们实际上是均等分配的[20]。在这一假设下，首先将粒子 e_1 和 e_2 的转动能作为一个整体处理，然后将总 e_r 在它们之间均等分配。因此，碰撞后能量可表示为

$$\begin{aligned}
e_t'&=\left(1-s_1\right)e_t+\left(1-s_3\right)\left(s_1e_t+s_2e_r\right),\\
e_r'&=\left(1-s_2\right)e_r+s_3\left(s_1e_t+s_2e_r\right),\\
e_r&=e_1+e_2,e_1'=\mathscr{R}e_r',e_2'=(1-\mathscr{R})e_r',
\end{aligned} \tag{11}$$

其中，$\mathscr{R}$ 是区间 (0，1) 内的均匀分布随机数，随机变量 s_i 从贝塔分布中抽样得到，具体如下

$$\begin{aligned}
&\beta\left\langle s_1\left|\psi\eta,(1-\psi)\,\eta\right.\right\rangle,\\
&\beta\left\langle s_2\left|2\phi,\ 2\,(1-\phi)\right.\right\rangle,\\
&\beta\left\langle s_3\left|2\phi,\ \psi\eta\right.\right\rangle.
\end{aligned} \tag{12}$$

对于 Pullin 模型的这一简化变体，同样满足细致平衡原理[20]。

一旦指定了 ϕ 和 ψ，上述两个模型便完全确定，且这些参数与弛豫过程之间的关系将在下一小节中讨论。

B. 模型参数的选择

在 Pullin 模型中，必须在计算框架内指定两个模型参数 ϕ 和 ψ。基于宏观输运系数的 Chapman-Enskog 展开，已有研究提出了适用于硬球（HS）分子的这些参数的具体表达式[19],，即

$$\begin{cases}\psi=\phi=\phi_0,\,\omega<1,\\ \psi=\phi=0,\,\omega>1.\end{cases} \tag{13}$$

当 $\omega<1$时，模型参数 ϕ_0 与转动碰撞数 Z 之间的关系为

$$\phi_0=\frac{8\,(2+\upsilon)}{5\pi}\frac{1}{Z}. \tag{14}$$

对于 VHS 分子，Pullin 并未建立参数 ϕ 和 ψ 与弛豫特性之间的直接关系，这可能限制该模型更广泛的适用性。近期，研究者基于能量均分定理推导出这些参数的显式表达式。在该定理中，两个碰撞粒子的平动能和转动能按各自的自由度成比例重新分配[27]。在这一框架下，平动温度和转动温度的弛豫由下式控制：

$$\frac{\partial T_{tr}}{\partial t}=\frac{5\cdot 4^{\eta}\sqrt{\pi}n\left(\frac{m}{kT_{tr}}\right)^{\frac{3}{2}-\eta}(T-T_{tr})\,c_{r,ref}^{4-2\eta}\cdot\sigma_{ref}\Gamma\,(1+\eta)\,\phi\psi}{3\,(2\phi+\eta\psi)}, \tag{15}$$

$$\frac{\partial T_{rot}}{\partial t}=\frac{5\cdot 4^{\eta}\sqrt{\pi}n\left(\frac{m}{kT_{tr}}\right)^{\frac{3}{2}-\eta}\left(T-T_{rot}\right)c_{r,ref}^{4-2\eta}\cdot\sigma_{ref}\Gamma\left(1+\eta\right)\phi\psi}{3\left(2\phi+\eta\psi\right)}, \tag{16}$$

其中， m 为分子质量， σ_{ref} 为碰撞截面， Γ 为伽马函数。同时，应力张量的弛豫由下式给出：

$$\frac{\partial p_{\langle ij\rangle}}{\partial t}=-\frac{2^{1+2\eta}\sqrt{\pi}n\left(\frac{m}{kT_{tr}}\right)^{\frac{3}{2}-\eta}c_{r,ref}^{4-2\eta}\sigma_{ref}\Gamma\left(1+\eta\right)\left(1+\eta\right)}{15}p_{\langle ij\rangle}. \tag{17}$$

根据宏观变量弛豫率的定义，方程（16）和（17）可改写为标准形式，即

$$\begin{aligned}\frac{\partial T_{rot}}{\partial t}&=\frac{T-T_{rot}}{\tau_{rot}},\\ \frac{\partial p_{\langle ij\rangle}}{\partial t}&=-\frac{p_{\langle ij\rangle}}{\tau_{tr}},\end{aligned} \tag{18}$$

其中， τ_{rot} 和 τ_{tr} 分别表示旋转弛豫时间和平动弛豫时间。转动碰撞数 Z 定义为 $Z=\tau_{rot}/\tau_{tr}$。因此，根据温度和应力张量的弛豫率，转动碰撞数 Z （弛豫至总温度 T）可表示为

$$Z=\frac{2\left(1+\eta\right)\left(2\phi+\eta\psi\right)}{25\phi\psi}. \tag{19}$$

在 Pullin 配分函数方程（7）中，项 $\phi\zeta$ 和 $\psi\eta$ 分别表示内能和平动能所占的比例。根据能量均分定理，与每种模式相关的能量按其自由度成比例分配。因此，对于双原子气体， ψ 与 ϕ 之间的关系可确定如下

$$\psi=\frac{3}{2\eta}\phi. \tag{20}$$

因此，模型参数 ψ 和 ϕ 可由转动碰撞数 Z 直接确定为

$$\begin{aligned}\phi&=\frac{14\eta\left(1+\eta\right)}{75Z},\\ \psi&=\frac{7\left(1+\eta\right)}{25Z}.\end{aligned} \tag{21}$$

需要注意的是， ϕ 和 ψ 的取值必须保持在(0，1)范围内，这对转动碰撞数 Z施加了下限。对于氮气，这一约束要求 Z 必须大于0.906752。从物理角度来看，转动碰撞数通常大于1，这表明当前公式在物理上是合理的。尽管这些参数源自Pullin模型，但本研究采用的Pullin模型简化变体也使用了这些参数。

III. 直接模拟蒙特卡罗方法中的能量交换模型实现

A. 直接模拟蒙特卡罗方法

直接模拟蒙特卡罗方法是一种基于粒子的随机数值方法，用于求解玻尔兹曼方程[28]，，其中速度分布函数由大量模拟粒子近似表示。采用算子分裂格式，广义玻尔兹曼方程（式（1））被分解为自由输运步骤和碰撞步骤，即

$$\begin{cases} \dfrac{\partial (nf)}{\partial t} + \boldsymbol{c}\dfrac{\partial (nf)}{\partial \boldsymbol{x}} = 0, \\ \dfrac{\partial (nf)}{\partial t} = Q(f,f). \end{cases} \tag{22}$$

在 DSMC 方法中，自由输运步骤对应于自由分子运动，而碰撞步骤则通过随机抽样模拟分子间相互作用。在自由输运步骤中，每个粒子的运动均采用拉格朗日跟踪方法计算，即在离散时间间隔 Δt内，根据粒子的瞬时速度 $\mathbf{c}_i$ 推进每个粒子，即

$$\begin{aligned} &\mathbf{r}_i^{n+1} = \mathbf{r}_i^n + \mathbf{c}_i \Delta t, \\ &d(m_i \mathbf{c}_i)/dt = \mathbf{C}(\mathbf{c}_i, e_i), \end{aligned} \tag{23}$$

其中，下标“i”表示粒子索引，$\mathbf{r}_i$ 和 $\mathbf{c}_i$ 分别表示粒子 i的位置和速度， m 表示粒子的质量，而 $\mathbf{C}$ 表示每个粒子在该时间步内经历的二体碰撞过程。作为 DSMC 方法的核心组成部分，碰撞算法根据选定粒子对的碰撞前状态，确定其碰撞后速度和能量。在各种方法中，无时间计数（NTC）方案[8,29] 应用最为广泛。在该方案中，利用最大碰撞概率估算每个时间步 Δt 内的候选碰撞对数量 N_c。 N_c 的值为

$$N_c = \frac{1}{2} N(N-1) F_N (\sigma_T c_r)_{\max} \Delta t / V_c \tag{24}$$

其中， N 是计算单元中的模拟粒子数， F_N 表示真实分子与模拟粒子的比值， σ_T 代表总碰撞截面， c_r 是两个碰撞粒子之间的相对速度， V_c 是计算单元的体积

。由于碰撞次数必须为整数，实际测试的碰撞对数 $N_{c,\ \mathrm{test}}$ 取为 $\lfloor N_c \rfloor$ ，并以概率 $N_c - \lfloor N_c \rfloor$额外增加一次碰撞。随机选取每一对粒子（共 $N_{c,\ \mathrm{test}}$ 对），不考虑它们在单元中的位置，然后以一定概率选定候选粒子对进行碰撞

$$p_c = \frac{\sigma_T c_r}{(\sigma_T c_r)_{\max}}, \tag{25}$$

其中， $\sigma_T c_r$ 表示所选粒子对的总碰撞截面与相对速度的乘积。量（$\sigma_T c_r$）$_{\max}$ 最初在计算单元内被赋予一个合适的参考值，随后如果任意所选粒子对的 $\sigma_T c_r$ 超过该阈值，则对其进行更新。通过将碰撞概率 p_c 与均匀分布随机数 $\mathscr{R} \in (0,\ 1)$进行比较，采用接受-拒绝（AR）过程来确定候选粒子对是否实际发生碰撞。如果接受，该粒子对将经历弹性碰撞（粒子速率的变化）或非弹性碰撞（平动能与内能的交换）；在非弹性碰撞中，平动能与内能相互交换，并在不同自由度之间重新分配。

B. Borgnakke-Larsen模型的实现

在直接模拟蒙特卡罗方法（DSMC）中，BL模型[8,18] 通常用于描述碰撞过程中平动和内能模式之间的能量交换。在BL框架下，碰撞粒子对的总能量 e_c 由平动和内能两部分组成，并严格守恒。碰撞后，内能根据基于平动能和内能之和的平衡分布重新分配。弛豫率由非弹性碰撞与弹性碰撞的比值决定，从而确保与规定的宏观弛豫行为一致。在实际应用中，非弹性碰撞概率 p_i 通常定义为 $p_i = 1/Z_{\mathrm{BL}}$，其中 Z_{BL} 表示特定于模型的弛豫数。但需要强调的是， Z_{BL} 的定义可能不同于其他模型（如Pullin模型）中采用的碰撞数 Z 。本文的分析仅限于转动能，并采用串行BL过程[23] 。具体而言，碰撞粒子对中的每个粒子都独立接受是否参与非弹性碰撞的判定。当粒子 A 被选中时，碰撞类型由

非弹性碰撞概率 p_i决定。若发生非弹性碰撞，则碰撞能量定义为 $e_c = e_t + e_1$。碰撞后转动能 e_i 的取值范围为 $[0, e_c]$，并通过对均匀随机变量 $\mathscr{R}_1$进行抽样生成。给定转动能的概率相对于其最大值归一化后，表示为

$$\frac{p}{p_{\max}} = \left(\frac{\zeta_{\rm rot}/2 + 1/2 - \omega}{\zeta_{\rm rot}/2 - 1}\frac{e_i}{e_c}\right)^{\zeta_{\rm rot}/2-1}\left[\frac{\zeta_{\rm rot}/2 + 1/2 - \omega}{3/2 - \omega}\left(1 - \frac{e_i}{e_c}\right)\right]^{3/2-\omega}, \tag{26}$$

其中 $\zeta_{\rm rot}$ 为转动自由度。碰撞后转动能由 $e_i = \mathscr{R}_1 e_c$给出。随后生成另一个随机数 $\mathscr{R}_2$ 进行比较。如果 $\mathscr{R}_2 \leq p/p_{\max}$，则接受转动能 e_i 作为粒子 A 的碰撞后转动能 e_1'；否则，重新抽取 e_i，直至接受。然后根据 $e_t' = e_c - e_1'$确定粒子 A 碰撞后的平动能。随后，对粒子 B 应用相同的概率判据 p_i，以确定其碰撞是弹性还是非弹性。将第一步重新分配的平动能与粒子 B 的转动能相结合，得到新的碰撞能量 $e_c{}' = e_t' + e_2$。从均匀随机变量 $\mathscr{R}_3$ 中抽取粒子 B 的碰撞后转动能，直至接受。最终，粒子 B 的碰撞后转动能由$e_2' = \mathscr{R}_3 e_c'$给出，碰撞后的平动能则由 $e_t'' = e_c{}' - e_2'$给出。因此，分子间碰撞后的相对速度大小 c_r' 可表示为 $c_r' = \sqrt{2e_t''/m_r}$，其中 m_r 为碰撞粒子对的约化质量。粒子对的碰撞后速度按如下方式更新

$$\begin{aligned}\mathbf{c}_1' &= \frac{1}{2}[(\mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_2) - c_r'\omega],\\ \mathbf{c}_2' &= \frac{1}{2}[(\mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_2) + c_r'\omega],\end{aligned} \tag{27}$$

其中$\mathbf{c}_1$ 和$\mathbf{c}_2$ 表示两个发生碰撞的粒子 A 和 B 的碰撞前速度，$\mathbf{c}_1'$ 和$\mathbf{c}_2'$ 表示它们的碰撞后速度，而 ω 是一个定义碰撞后相对速度方向的单位向量。向量 ω 在单位球面上进行随机游走，其运动取决于所选的碰撞模型。对于 VHS 模型，ω 表示为

$$\omega = (\cos\chi, \sin\chi\cos\theta, \sin\chi\sin\theta)^T, \tag{28}$$

其中，在极坐标中，偏转角 χ 的余弦值和方位角 θ 分别在区间 $[-1, 1]$ 和 $[0, 2\pi]$上均匀分布。即，

$$\cos\chi = 2\mathscr{R}_4 - 1,\ \theta = 2\pi\mathscr{R}_5. \tag{29}$$

尽管 BL 模型已得到广泛应用，且在实际模拟中表现出良好的一致性，但它在物理上并不一致，因为只有一部分碰撞被视为非弹性碰撞。为提高模型的物理保真度，Bird 提出了 BL 模型的一种修正变体[8], ，其中所有碰撞均被视为非弹性碰撞，但每次碰撞中仅传递计算所得转动能变化量的指定比例 p_i 。在实际实现中，这意味着所有发生碰撞的粒子都被视为经历非弹性碰撞，从而无需进行概率选择。具体而言，粒子 A 的碰撞后转动能计算为 $e_1'' = e_1(1-p_i) + e_1' p_i$，碰撞粒子对相应的碰撞后平动能则为$e_t' = e_c - e_1''$。随后，粒子 B 的碰撞后转动能计算为$e_2'' = e_2(1-p_i) + e_2' p_i$，碰撞粒子对最终的碰撞后平动能为 $e_t'' = e_c{}' - e_2''$。尽管这一修正保留了弛豫率，但不满足细致平衡原理[19]。

C. Pullin模型的实现

Pullin模型很容易在DSMC框架中实现，只需对发生碰撞的粒子进行修改。该模型能够计算碰撞后每个粒子的平动能和转动能，而Pullin模型的其余部分则与传统DSMC方法保持一致。图1展示了Pullin模型和BL模型在DSMC框架中的计算流程。需要注意的是，Pullin模型中的转动碰撞数定义与BL模型中的定义不同Z；为确保结果一致，必须首先分析这一差异。此外，Pullin模型及其简化变体都仅依赖于从贝塔分布中进行抽样（五次或三次），区别仅在于输入参数不同。因此，下一节将详细讨论Pullin模型中的转动碰撞数及相关的贝塔分布抽样流程。

在Pullin模型中，转动碰撞数直接定义为与实验测量一致的形式[30,31], ，即

$$Z = \frac{\tau_{rot}}{\tau_{tr}}, \tag{30}$$

其中， τ_{tr} 表示平动弛豫时间，定义为 μ/p，其中 μ 为黏性系数， p 为压力。在BL模型中，转动碰撞数的定义

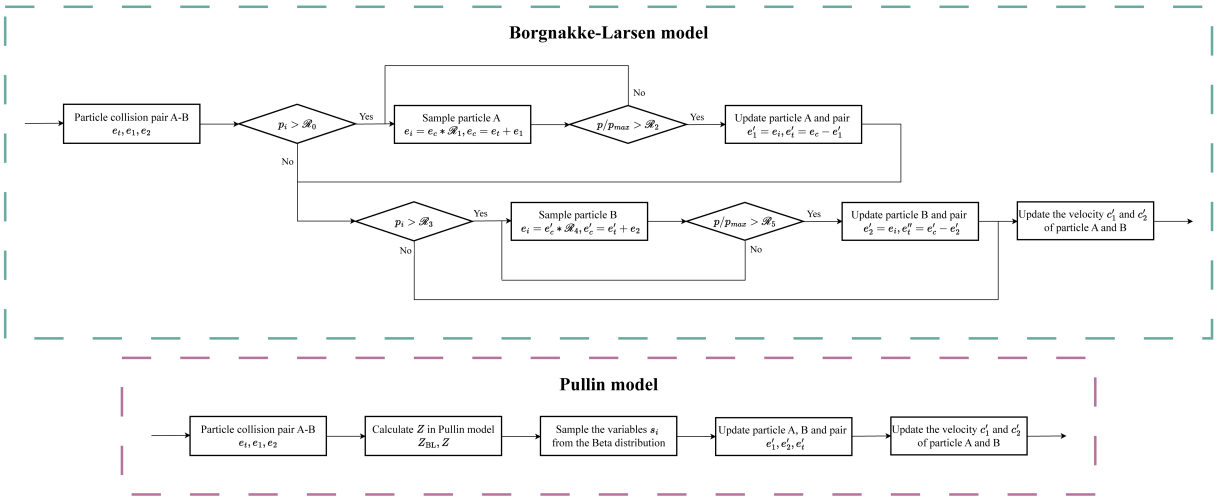


图 1. DSMC框架下BL模型与Pullin模型实现流程的比较。上：BL模型；下：Pullin模型。

与Pullin模型中的定义一致；然而，平动弛豫时间 τ_{tr} 的定义有所不同，并取决于所采用的碰撞模型。对于广泛使用的VHS 模型，平动弛豫时间定义为

$$\tau_{tr,\mathrm{VHS}} = \frac{(5-2\omega)(7-2\omega)}{30}\frac{\mu}{p}. \tag{31}$$

为便于对Pullin模型和BL模型进行一致比较，碰撞数Z 通过以下关系表示为碰撞数 Z_{BL}

$$Z = \frac{\tau_{rot}}{\tau_{tr}} = \frac{\tau_{rot}}{\tau_{tr,\mathrm{VHS}}} \cdot \frac{\tau_{tr,\mathrm{VHS}}}{\tau_{tr}} = \frac{(5-2\omega)(7-2\omega)}{30} Z_{\mathrm{BL}}. \tag{32}$$

如果在直接模拟蒙特卡罗方法中采用Pullin模型，则必须将转动碰撞数 Z_{BL}转换为Pullin模型中相应的转动碰撞数 Z 。

目前已有多种算法可用于计算机生成服从 $\beta\langle z \mid \mu_1,\ \mu_2\rangle$ 分布的随机变量。应用最广泛的算法包括 J¨ohnk 方法[32]和 Cheng算法[33], ，二者均适用于所有形状参数 $\mu_1 > 0$, $\mu_2 > 0$，且能够在广泛的参数取值范围内生成贝塔分布随机变量。尤其是 J¨ohnk 方法，简单而有效，其原理是对均匀随机数进行变换。该过程可概述如下：首先生成两个相互独立的 Uniform(0，1) 随机数 $\mathscr{R}_{01}$ 和 $\mathscr{R}_{02}$ ，然后通过$V_1 = {\mathscr{R}_{01}}^{1/\mu_1}$ 和 $V_2 = {\mathscr{R}_{02}}^{1/\mu_2}$进行变换。接着计算总和 $W = V_1 + V_2$ ；如果满足 $W \leq 1$，则得到贝塔分布随机变量 $z = V_1/W$；否则，重复上述过程。该

算法确保所得随机变量 z 服从 $\beta\langle z \mid \mu_1,\ \mu_2\rangle$ 分布。该算法通用性强且易于实现，因此非常适合用于 DSMC框架中的 Pullin模型。

IV. 数值模拟

为评估Pullin模型在广泛非平衡现象中的预测能力，本文模拟并分析了五个典型测试用例：氮气零维（0-D）转动弛豫、一维（1-D）平面库埃特流和平面正激波结构、二维（2-D）圆柱绕流高超声速流动，以及三维（3-D）X38类飞行器高超声速流动。Pullin模型在DSMC框架中实现，并将结果与采用BL模型获得的结果进行比较。除非另有说明，以下讨论的所有Pullin和BL结果均来自Bird[8],开发的DSMC代码DSMC0R和DS1，或开源求解器SPARTA[34]。

对于氮气流动，采用可变硬球（VHS）模型，其中黏度μ 根据幂律关系取决于平动温度 T_{tr}

$$\mu = \mu_{ref}\left(\frac{T_{tr}}{T_{ref}}\right)^{\omega}. \tag{33}$$

在后续所有模拟中，参考黏度为 $\mu_{ref} = 1.656\times10^{-5}\text{Pa}\cdot s$，幂律指数为 $\omega = 0.74$，相应的参考直径为 $d_{ref} = 4.17\times10^{-10}m$，对应温度为 $T_{ref} = 273$开尔文。除非另有说明，自由来流 Knudsen 数 Kn 定义为 $\text{Kn} = \lambda/L_{ref}$，其中 VHS 模型的平均自由程 λ 表示为

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}\pi d_{ref}^2 n\left(\frac{T_{ref}}{T_{tr}}\right)^{\omega-0.5}}. \tag{34}$$

A. 氮气的转动弛豫

氮气的转动弛豫是一个典型的零维非平衡流动问题，被广泛用于考察平动与转动模态之间的能量交换[8,21]。系统被初始化为强非平衡状态：100,000个模拟粒子被限制在单个孤立的计算单元内，其平动温度

为 $T_{tr}=500$开尔文，转动温度为 $T_{rot}=0$开尔文，对应于零转动能。随着弛豫的进行，系统渐近趋近于 $T_{eq}=300$开尔文下的热平衡。在本模拟中，BL模型中的转动碰撞数保持为常数值 $Z_{\mathrm{BL}}=5$，而Pullin模型中的相应参数 Z 则由式(32)计算得到。

在此模拟中，转动温度和平动温度的时间演化可以解析地推导出来[8]。转动温度的预测值为

$$T_{rot}=300[1-\exp\left(-\upsilon t/5\right)], \tag{35}$$

而平动温度则可类似地求得:

$$T_{tr}=300+200\exp\left(-\upsilon t/5\right), \tag{36}$$

其中， υ 表示碰撞频率。在弛豫过程中，平动温度T_{tr} 单调下降，而转动温度 T_{rot} 单调上升，两者均渐近趋近于 300 开尔文。在平衡状态下，分子速率分布 $f_{\beta c}$ 呈麦克斯韦形式

$$f_{\beta c}=\frac{4}{\sqrt{\pi}}\beta^2c^2\exp(-\beta^2c^2), \tag{37}$$

而氮气的转动能量分布$f_{e_{rot}/(kT)}$ 为

$$f_{e_{rot}/(kT)}=\exp\left(-e_{rot}/kT\right). \tag{38}$$

图 2 展示了弛豫过程中转动温度的时间演化。Pullin模型及其简化变体的结果与解析解吻合良好。作为比较，图中还给出了 BL模型及其修正变体的结果；二者均与 Pullin模型和解析解表现出较好的一致性。在平衡状态下，四种不同模型得到的速度分布函数如图 3(a) 所示，并与平衡温度 T_{eq} 下的麦克斯韦分布 $f_{\beta c}$ 进行比较，四种模型均表现出令人满意的一致性。图 3(b) 展示了对数尺度下的转动能量分布函数。Pullin模型、其简化变体以及 BL模型均表现出对转动能的指数依赖关系，并与理论解 $f_{e_{rot}/(kT)}$高度吻合，而修正的 BL 模型未能再现平衡状态下的理论分布，主要是因为

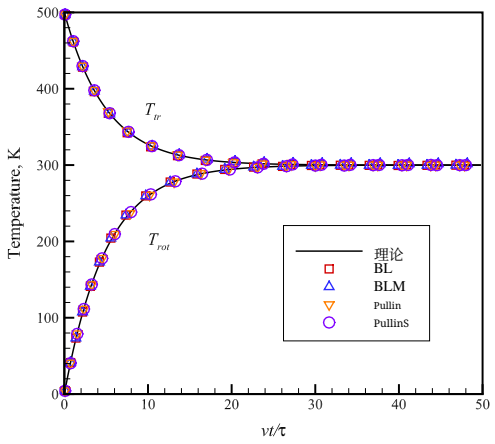
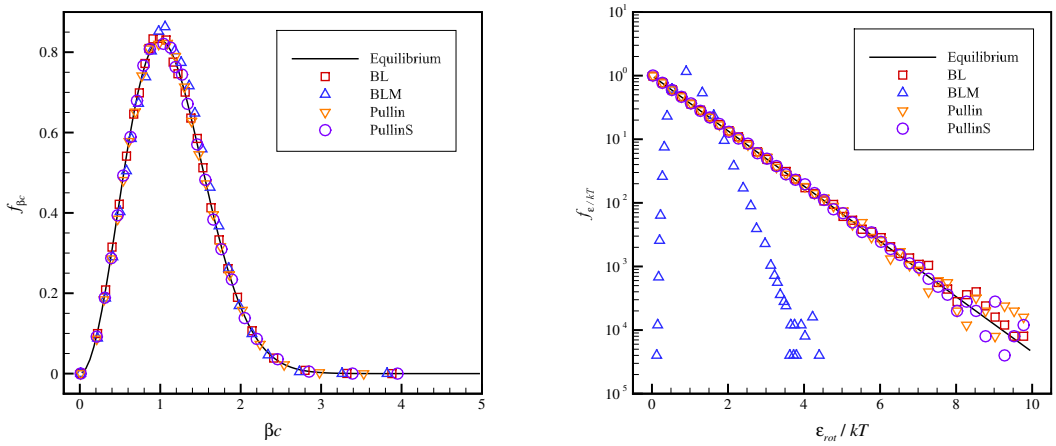


图 2. 氮气中的转动弛豫。方块：BL模型；三角形：修正的 BL 模型；渐变：Pullin模型；圆圈：简化Pullin模型；实线：解析解。



(a) (b)

图 3. 氮分子的平衡分布：(a) 分子速率和 (b) 转动能。方块：BL模型；三角形：修正的 BL 模型；渐变：Pullin模型；圆圈：简化Pullin模型；实线：理论解。

其不满足细致平衡原理。这些结果表明，Pullin模型、其简化变体以及 BL模型能够准确捕捉平动与转动模态之间的非平衡能量交换。

表 I 汇总了采用不同方法对所有测试用例进行计算所得的计算时间。所有计算均使用 AMD Ryzen

表 I. 不同旋转能量弛豫模型的计算时间比较。

交换模型	BL	BLM	Pullin	PullinS
CPU 总时间（s）	424.549	470.266	594.484	548.813

5900X 处理器的单核完成。结果表明，Pullin模型所需的计算时间比 BL模型约多 40%，这主要是因为增加了贝塔分布的采样。简化Pullin模型所需的贝塔分布采样较少，与完整的 Pullin模型相比，计算时间减少了约 7.7%，同时保持了相当的精度。总体而言，Pullin模型及其简化变体的计算开销均高于 BL模型，但在模拟能量交换过程时具有更高的物理保真度。

B. 平面库埃特流

为评估 Pullin模型在剪切驱动输运中的性能，考虑平面库埃特流[35] 。该构型由位于 $x = 0$ 的下板和一块平行上板组成，两板间距为 10 个平均自由程（$h = 10\lambda$）。两块平板沿相反方向运动，速度均为 $U_p = 336.89 m/s$。克努森数设为 Kn $= 0.1$，参考长度定义为平板间距 h。工作气体为氮气，采用 VHS 模型进行建模。初始状态均匀，数密度为 $n_0 = 2.69 \times 10^{25} m^{-3}$，平动温度和转动温度均为 $T_0 = 273$K。两块平板均保持在 $T_{wall} = 273$K，并建模为完全漫反射壁。BL模型中的转动碰撞数设为 $Z_{\mathrm{BL}} = 5$，而 Pullin模型中的相应值 Z 则根据公式（32）计算。计算域沿垂直方向划分为 300 个均匀网格单元，每个计算单元初始约包含 2,000 个模拟粒子。系统达到稳态后，对 10,000 个时间步内的结果进行平均。

图 4(a) 和图 4(b) 分别展示了密度和速度分布，图 4(c) 则展示了平动温度分布。热流分布见图 4(d)。对于所有流动变量，Pullin模型及其简化变体的结果均与BL模型的结果吻合良好。特别是，Pullin模型能够以很高的精度再现热流分布，而热流对非平衡效应尤其敏感。这些

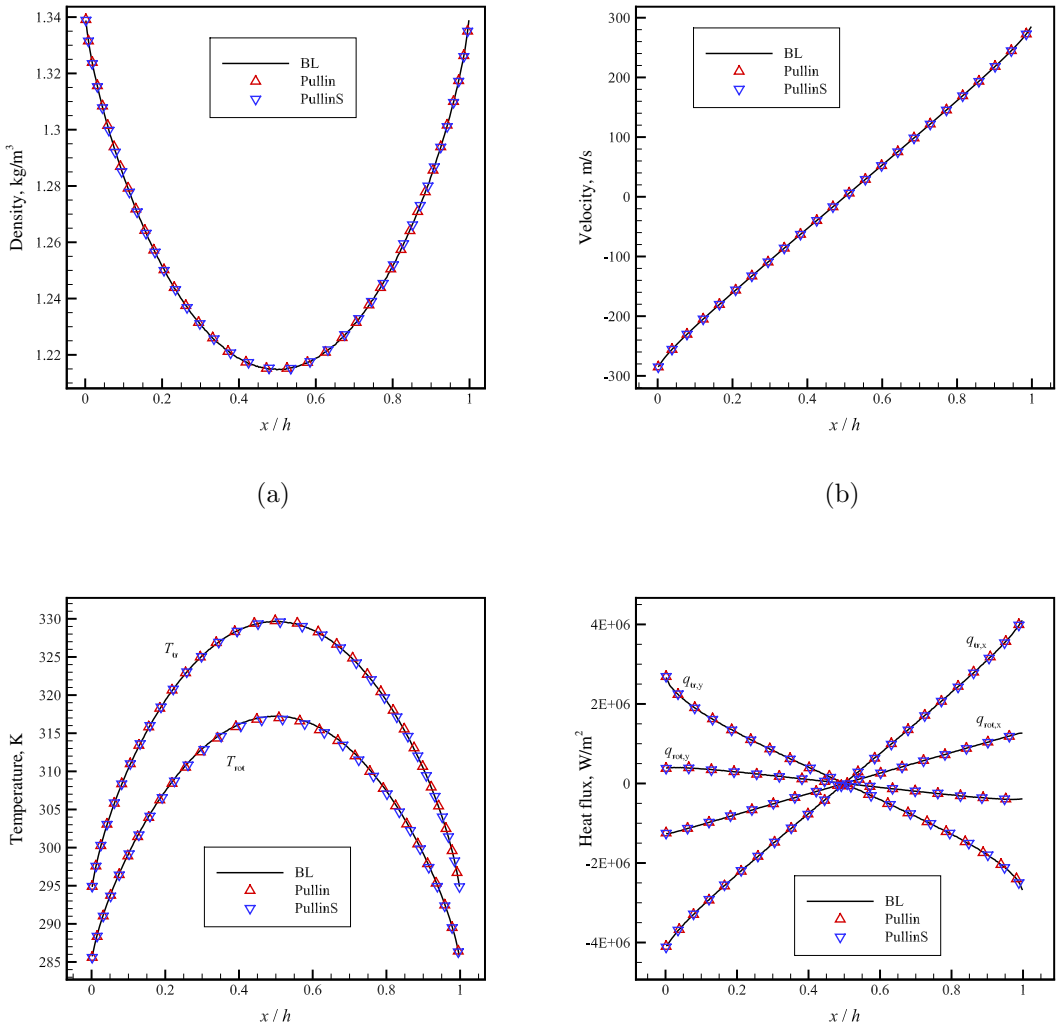


图 4. Kn = 0.1下的库埃特流剖面：(a) 密度；(b) 速度；(c) 温度；(d) 热流。三角形：Pullin模型；梯度：简化Pullin模型；实线：BL模型。

结果表明，Pullin模型能够可靠地描述稀薄气体流动中的剪切驱动输运现象。

C. 正常激波

正激波是验证 Pullin 模型在强非平衡条件下表现的基础测试案例，因为速度、密度和温度会在仅几个平均自由程的距离内形成陡峭梯度。Robben 和 Talbot[36] 报告了实验

表 II. 正激波的上游和下游参数。

Ma	$n_1(m^{-3})$	$u_1(m/s)$	T_1(开尔文)	$n_2(m^{-3})$	$u_2(m/s)$	T_2(开尔文)	Z_{BL}	ω
1.53	1.0E20	540.37	300	1.92E20	282.43	402.09	4.0	0.72
2.0	1.0E20	706.37	300	2.67E20	264.89	506.25	4.0	0.72
6.1	1.0E20	2154.43	300	5.29E20	407.32	2452.8	4.4	0.72
10.0	1.0E20	3531.86	300	5.72E20	618.08	6116.25	5.0	0.72

数据，包括氮气激波的转动温度和密度测量结果。Alsmeyer[37], 还获得了额外的密度分布测量数据集；此后，这些数据集被广泛用于数值验证，Boyd[38]对此进行了展示。

按照 Alsmeyer 的实验设置，本研究模拟了上游马赫数分别为 Ma $= 1.53$、2.0、6.1 和 10.0 时氮气中的正激波。上游条件规定如下：数密度 $n_1 = 1.0 \times 10^{20} m^{-3}$，平动温度和转动温度分别为 $T_{tr,1} = T_{rot,1} = 300$K，以及由马赫数确定的速度 u_1 。相应的下游条件根据 Rankine–Hugoniot关系求得，并汇总于表 II；该表还列出了模拟中采用的转动碰撞数 Z_{BL}和黏度指数 ω 。Pullin模型中的相应数值 Z 由式 (32) 计算得出。计算域从 $x = -50\lambda_1$ 延伸至$x = 50\lambda_1$，其中 λ_1 为上游平均自由程；计算域被划分为 2,000 个均匀网格单元，每个网格单元初始约含 2,500 个模拟粒子。上游边界设为流入边界条件，下游边界则模拟为以下游速度 u_2运动的镜面反射壁面。

图 5 展示了不同马赫数下穿过激波的平动温度和转动温度分布。 x 坐标以按照硬球（HS）模型定义的上游平均自由程 λ_1 归一化，即

$$\lambda_1 = \frac{16\mu_1}{5\rho_1 \left(2\pi R T_1\right)^{1/2}}, \tag{39}$$

其中 R 为气体常数， μ_1 和 ρ_1 分别为上游黏度和密度。上游黏度 μ_1 根据参考黏度 $\mu_{\mathrm{ref}} = 1.656 \times 10^{-5}$ Pa · s和参考温度 $T_{\mathrm{ref}} = 273$ 开尔文计算。Pullin模型预测的平动温度与其简化变体略有差异；不过，二者总体上与BL模型的结果吻合良好。随着上游马赫数增大，

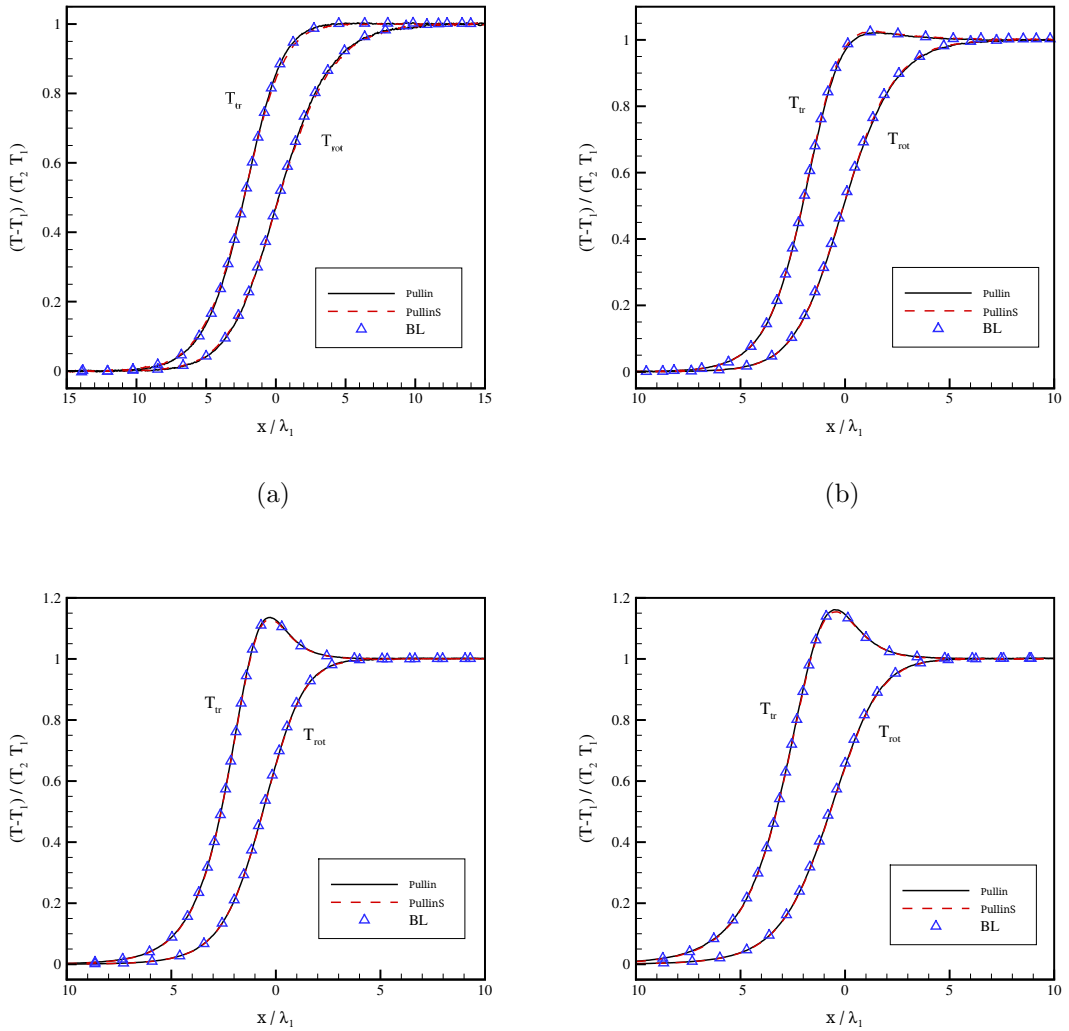


图5. 不同马赫数下激波的温度分布：(a) Ma $= 1.53$；(b) Ma $= 2.0$；(c) Ma $= 6.1$；(d) Ma $= 10.0$。实线：Pullin模型；虚线：简化Pullin模型；三角形：BL模型。

激波变厚，非平衡效应更加显著。图6给出了跨越激波的相应密度分布。Pullin模型及其简化变体的结果与BL模型的结果以及Alsmeyer[37]的实验数据吻合良好。总体而言，这些结果表明，Pullin模型及其简化变体能够准确捕捉正激波中复杂的非平衡现象。

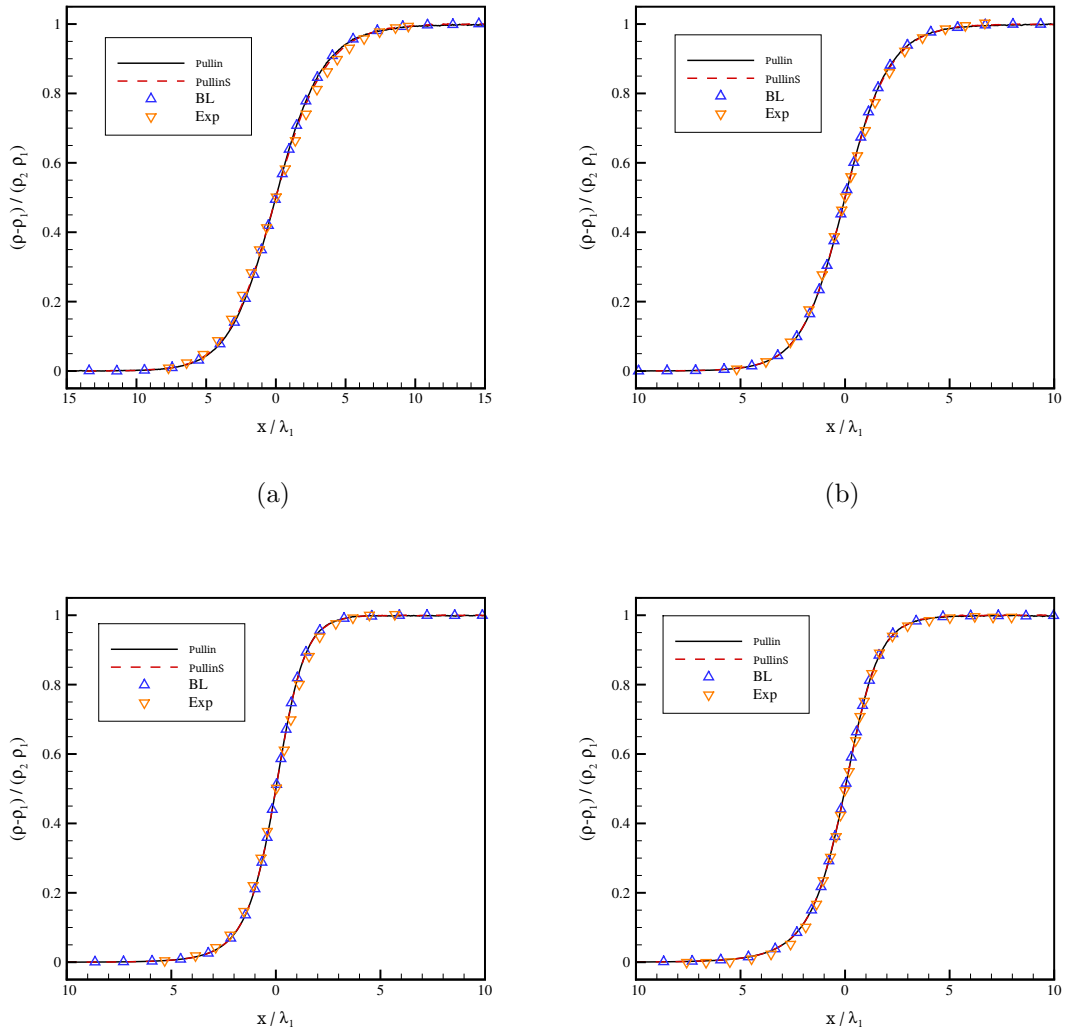


图 6. 不同马赫数下激波的密度分布：(a) Ma = 1.53；(b) Ma = 2.0；(c) Ma = 6.1；(d) Ma = 10.0。实线：Pullin模型；虚线：简化Pullin模型；三角形：边界层模型；渐变：来自 Alsmeyer[37] 的实验数据。

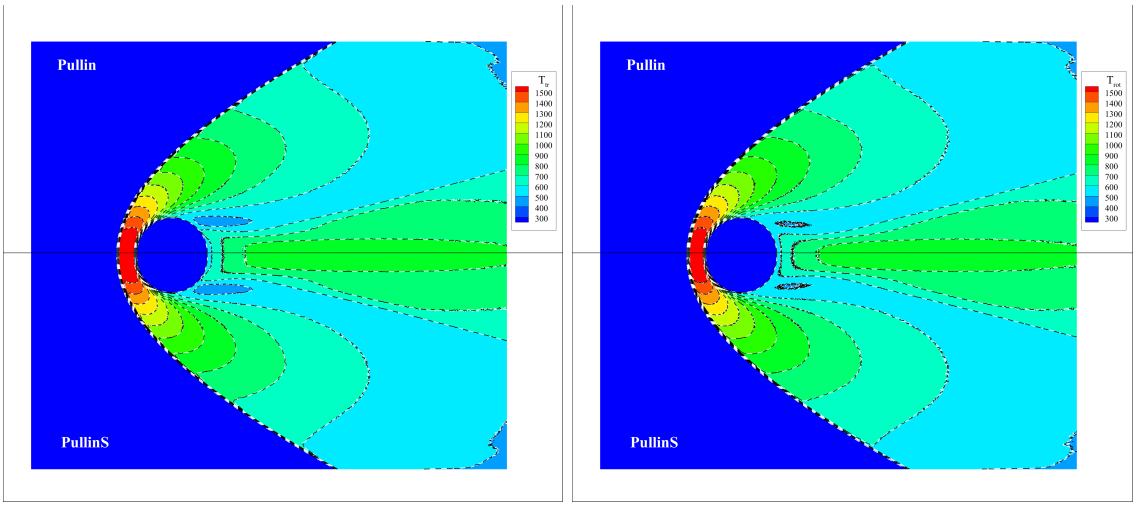
D. 圆柱周围的高超声速流动

圆柱绕流高超声速流动是评估稀薄气体动力学中能量交换模型的经典基准，其特点是圆柱前方存在高密度区域，下游则形成稀薄尾流。本研究模拟自由来流马赫数为 Ma = 5 、克努森数分别为 Kn = 0.01、0.1、1.0 和 10.0 时的圆柱绕流高超声速流动。选取圆柱半径作为特征长度，其值设为 L_{ref} =

$R = 1m$。工作气体为氮气，对应四个克努森数的自由流数密度分别为 $1.29438 \times 10^{20}m^{-3}$、$1.29438 \times 10^{19}m^{-3}$、$1.29438 \times 10^{18}m^{-3}$ 和 $1.29438 \times 10^{17}m^{-3}$。平动温度和转动温度均初始化为 $T_{tr} = T_{rot} = 273$K，自由流速度为 $V = 1684.59m/s$。采用完全漫反射壁面边界条件，壁面温度保持恒定，为 $T_{wall} = 500$K。BL模型中的转动碰撞数设为 $Z_{\mathrm{BL}} = 5$，而 Pullin模型中的相应数值 Z 由式 (32) 得出。每个计算单元初始化约 20 个模拟粒子，流动达到稳态后，对 40,000 个时间步的结果取平均。

图 7–10 对比了三种内能弛豫模型在四种自由来流克努森数下预测的平动温度和转动温度等值线。在这四种克努森数下，三种模型给出的平动温度结果均吻合良好。同样，在 Kn $= 0.01$ and 0.1 时，转动温度预测结果也一致。然而，随着克努森数增大，结果开始出现差异：在 Kn $= 1$ and 10 时，Pullin 模型和 BL 模型在圆柱后方尾流区的转动温度略有差异，而 Pullin 模型与其简化变体的结果仍几乎完全相同。这些流场结果还表明，在 Kn $= 0.01$ 时，平动温度和转动温度几乎相等，说明热非平衡可以忽略。随着克努森数增大，平动温度与转动温度之间的差异也随之增大，反映出非平衡效应增强。值得注意的是，尾流中的转动温度随 Kn 增大而逐渐升高；在 Kn $= 10$ 时，其温度达到与驻点相当的水平，甚至略高于驻点，表明在高度稀薄的高超声速流中，非平衡效应十分显著。

图 11 对比了不同克努森数下的表面压力，图 12 则展示了相应的表面剪切应力。可以看出，Pullin模型及其简化变体与 BL模型的参考解吻合良好。图 13 对比了不同克努森数下的表面热流，包括平动和转动分量。在全部四种克努森数下，三种模型的结果均吻合良好。随着自由来流 Knudsen 数增加，流动的非平衡程度逐渐增强，导致转动热流逐渐减小，同时平动热流对总热流的贡献相应增加。当 Kn $= 10$ 时，转动热流甚至变为负值，



(a) (b)

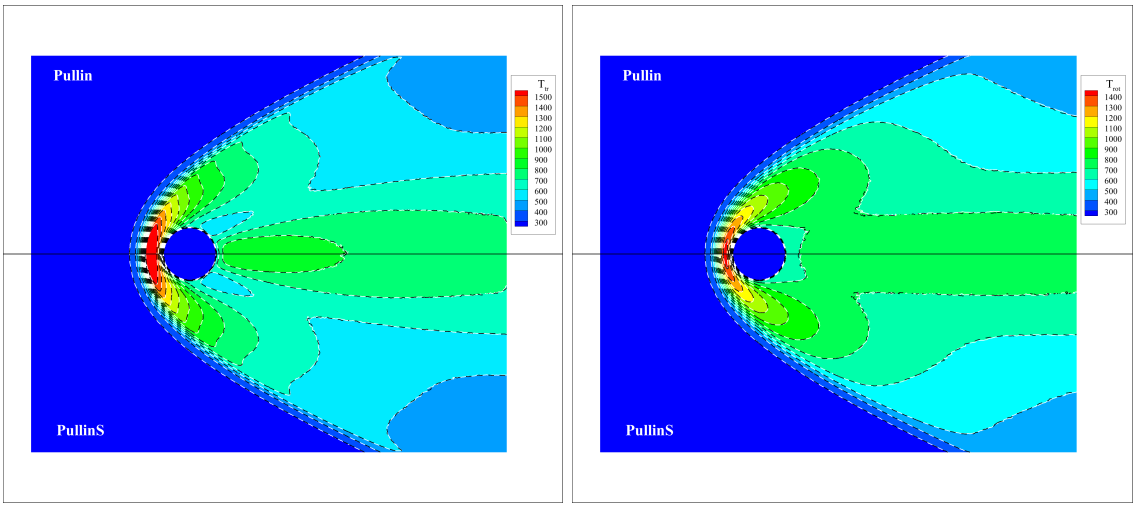
图 7. 马赫数为 $= 5$ 、克努森数为 $= 0.01$ 时高超声速圆柱绕流的温度等值线：(a) 平动温度；(b) 转动温度。上方实线：Pullin模型；下方实线：简化Pullin模型；虚线：BL模型。

这反映出在高度稀薄的流动中，主导热传递的非平衡效应十分显著。

所有测试用例的计算时间汇总于表 I。所有计算均在西安计算中心的高性能计算节点上完成，每个节点均配备两颗海光7285H 32核CPU（2.5 GHz）和 256 GB 内存。计算时间随克努森数呈非线性变化，这主要归因于计算域尺寸以及网格间距与平均自由程之比的差异。在近连续流区（Kn $= 0.01$），Pullin模型比BL模型慢 43.26%，而其简化变体慢 32.62%，这限制了Pullin模型的广泛适用性。随着稀薄效应增强，Pullin模型与BL模型之间的效率差异逐渐减小；在高度稀薄条件下（Kn $=$ 1和 10），二者的计算成本相当。

E. 类 X38 飞行器周围的高超声速稀薄流

为进一步评估 Pullin 模型在航空航天流动中的实际适用性，本文研究了 X38类飞行器周围的高超声速流动。采用 1:16.7 缩比构型

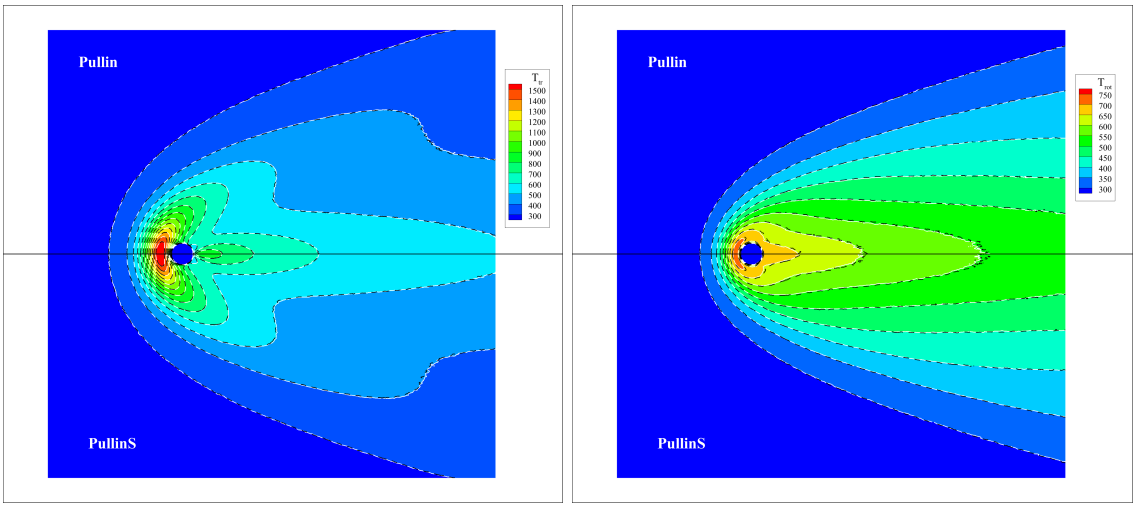


(a) (b)

图 8. 马赫数 $=5$、克努森数 $=0.1$ 时高超声速圆柱绕流的温度等值线：(a) 平动温度；(b) 转动温度。上方实线：Pullin模型；下方实线：简化Pullin模型；虚线：BL模型。

在 Ma $=8$ 下的四种克努森数条件，以及在高度为 70–100 km、Ma $=10$ and 20 条件下的全尺寸构型，此前已由 Jiang 等人[39,40] 采用统一气体动理学格式和直接模拟蒙特卡罗方法进行了研究。本研究采用结合 Pullin模型的直接模拟蒙特卡罗方法，对高度为 90 km 和 100 km 的全尺寸 X38类飞行器进行模拟。图 14 展示了 X38类飞行器的示意图，其中参考长度 L_{ref} 为$4.67m$ ，参考面积 A_{ref} 为 $5.86m^2$。相应的自由来流参数汇总于表 IV。工作气体为空气；在 273 K 下，VHS 模型的参考直径为 4.19 $^{\circ}$A，黏度指数为 0.77。自由来流马赫数设为 Ma $=10$，攻角为 $\alpha=20°$，平动温度和转动温度均初始化为 $T_{tr}=T_{rot}=T_{\infty}$。在完全漫反射边界条件下，壁面温度维持在$T_{wall}=300$，K。BL模型中的转动碰撞数设为 $Z_{\mathrm{BL}}=5$，而 Pullin模型中的相应参数 Z 则根据公式 (32) 计算。高度为 100 km 时，计算域划分为 6,750,000 个网格单元，每个网格单元初始化 20 个模拟粒子；高度为 90 km 时，计算域划分为 125,000,000 个网格单元，每个网格单元初始化 10 个模拟粒子。所有结果均为达到稳态后对 40,000 个时间步的结果取平均所得。

图 15 和图 16 分别展示了 Pullin模型在 90 km 和 100 km 高度下预测的转动温度和平动温度等值线



(a) (b)

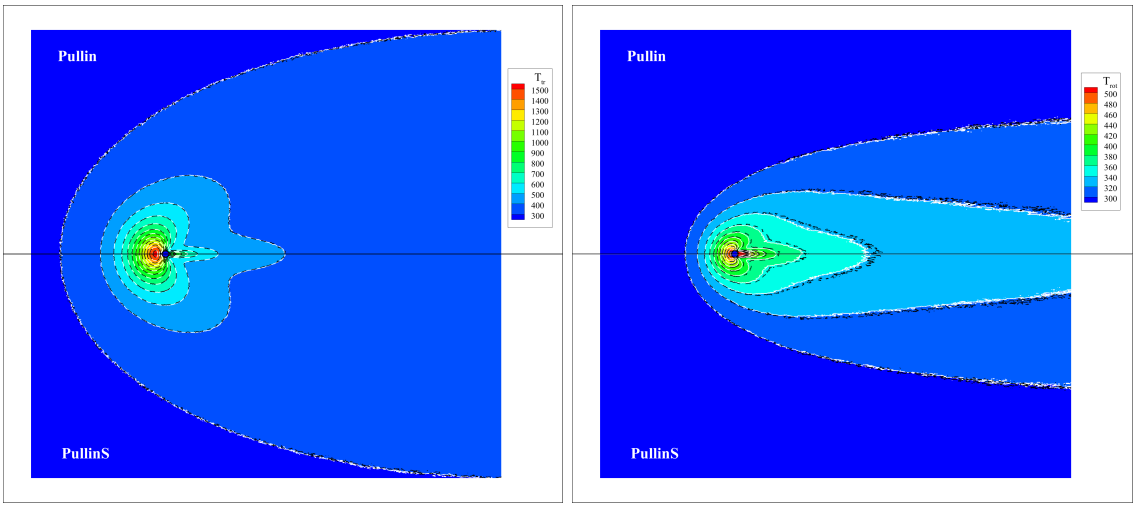
图 9. 马赫数为 $=5$、克努森数为 $=1.0$ 时高超声速圆柱绕流的温度等值线：(a) 平动温度；(b) 转动温度。上方实线：Pullin模型；下方实线：简化Pullin模型；虚线：BL模型。

。在 90 km 高度下，平动温度与转动温度存在显著差异，表明热非平衡程度较高。飞行高度升至 100 km 时，转动温度的最大值偏离驻点，高温区域向下游延伸，反映出流动具有显著的非平衡特征。图 17 和图 18 分别比较了三种内能弛豫模型在 90 km 和 100 km 高度下预测的压力、剪切应力和热流表面分布。Pullin模型及其简化变体所得结果与BL模型的预测结果吻合良好。X38类飞行器的总体气动系数列于表 V。无量纲系数定义如下

$$C_L = \frac{L}{0.5\rho_\infty U_\infty^2 A_{ref}}, \\ C_d = \frac{D}{0.5\rho_\infty U_\infty^2 A_{ref}}, \tag{40}$$

其中，L 和 D 分别表示升力和阻力。Pullin模型及其简化变体与BL结果吻合极佳，升力系数和阻力系数的最大相对误差分别仅为 0.06% 和 0.05%。

所有测试用例的计算时间汇总于表 VI。所有计算



(a) (b)

图 10. 马赫数为 $= 5$ 、克努森数为 $= 10$ 时高超声速圆柱绕流的温度等值线：(a) 平动温度；(b) 转动温度。上方实线：Pullin模型；下方实线：简化Pullin模型；虚线：BL模型。

表 III. 不同模型计算高超声速流动绕圆柱所需计算时间的比较。

Case	模型	粒子数	N_{step}	CPU 核心	时间（小时）	CPU 小时
克努森数 $=10^{-2}$	Pullin	36 932 194	80 000	60	10.1	606
	PullinS	36 936 927	80 000	60	9.35	561
	BL	36 935 474	80 000	60	7.05	423
克努森数 $=10^{-1}$	Pullin	6 767 054	80 000	30	1.39	41.7
	PullinS	6 768 071	80 000	30	1.28	38.4
	BL	6 766 777	80 000	30	1.07	32.1
Kn=1	Pullin	13 656 471	80 000	30	2.14	64.2
	PullinS	13 659 587	80 000	30	2.13	63.9
	BL	13 656 578	80 000	30	2.1	63
克努森数 $=10$	Pullin	45 656 769	80 000	60	4.76	285.6
	PullinS	45 656 113	80 000	60	4.76	285.6
	BL	45 654 716	80 000	60	4.73	283.8

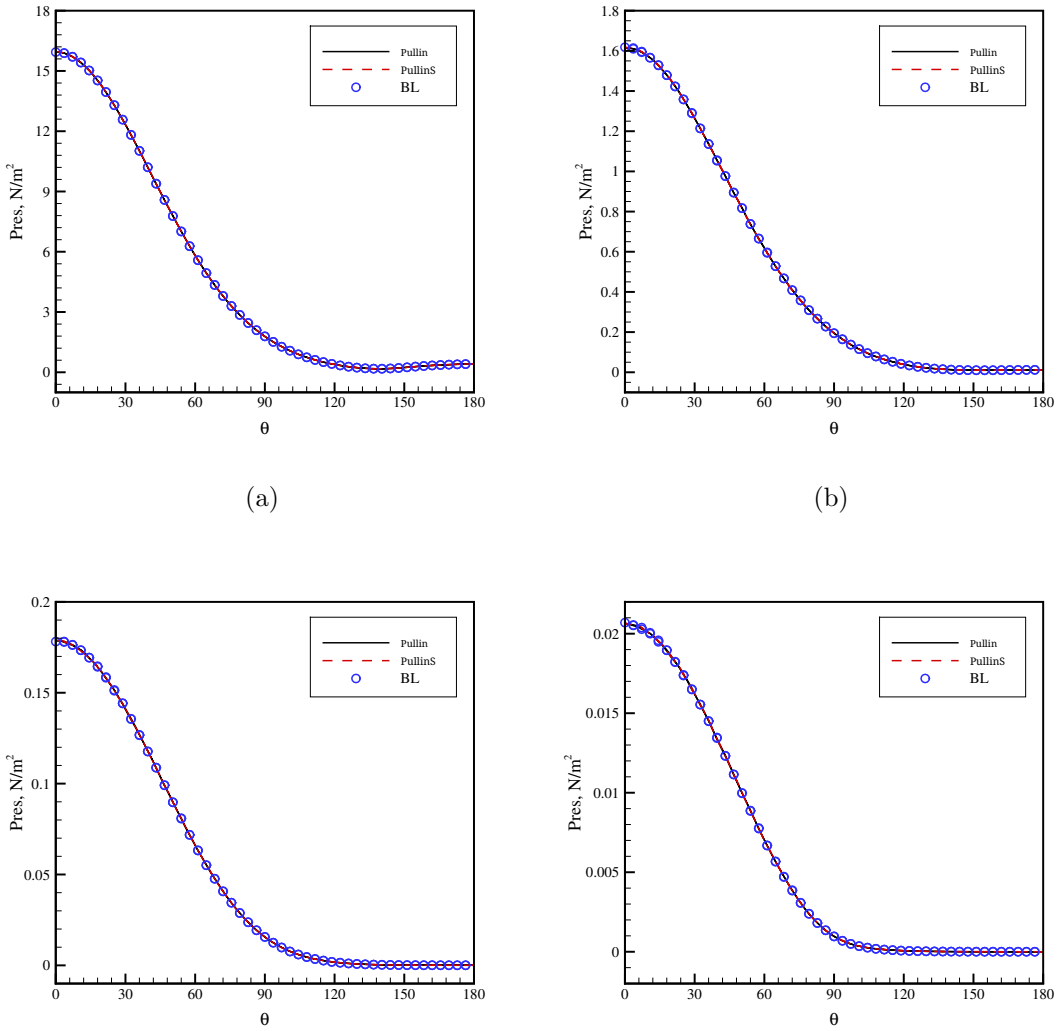


图 11. 马赫数为 $= 5$ 时高超声速圆柱绕流的表面压力结果：(a) 克努森数 $= 0.01$，(b) 克努森数 $= 0.1$，(c) 克努森数 $= 1.0$，(d) 克努森数 $= 10.0$。实线：Pullin模型；虚线：简化Pullin模型；圆圈：BL模型。

表 IV. 高度为 90 和 100 km 时 X38类飞行器周围高超声速流动的自由来流条件。

高度(km)	Gas	Ma	$n_\infty(m^{-3})$	T_∞(K)	T_{wall}(K)	α	R(J/(kg ·开尔文))	Z_{BL}
90	Air	10	7.116×10^{19}	186.867	300	20°	286.71	5.0
100	Air	10	1.189×10^{19}	195.081	300	20°	286.71	5.0

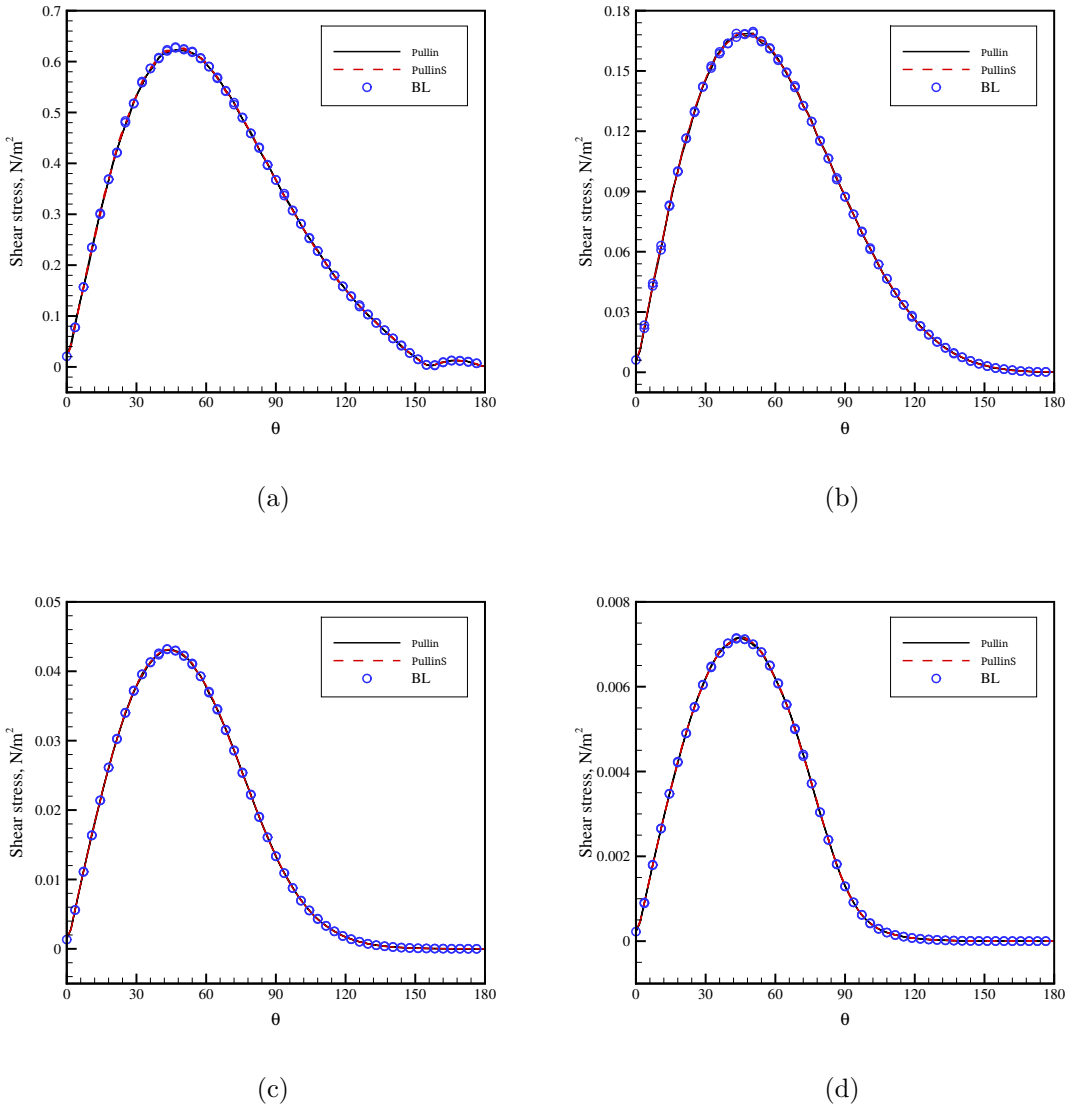


图12. 马赫数 $= 5$下高超声速圆柱绕流的表面剪切应力结果：(a) 克努森数 $= 0.01$，(b) 克努森数 $= 0.1$，(c) 克努森数 $= 1.0$，(d) 克努森数 $= 10.0$。实线：Pullin模型；虚线：简化Pullin模型；圆圈：BL模型。

在西安计算中心使用高性能计算节点完成，每个节点配备双路海光7285H 32核CPU（2.5 GHz）和256 GB内存。在90 km高度，Pullin模型比BL模型大约慢20.81%，而其简化变体慢13.4%。当飞行高度增至100 km时，差异分别降至8.36%和4.1%。对于100 km以上的模拟，模型选择对计算效率的影响可忽略不计。

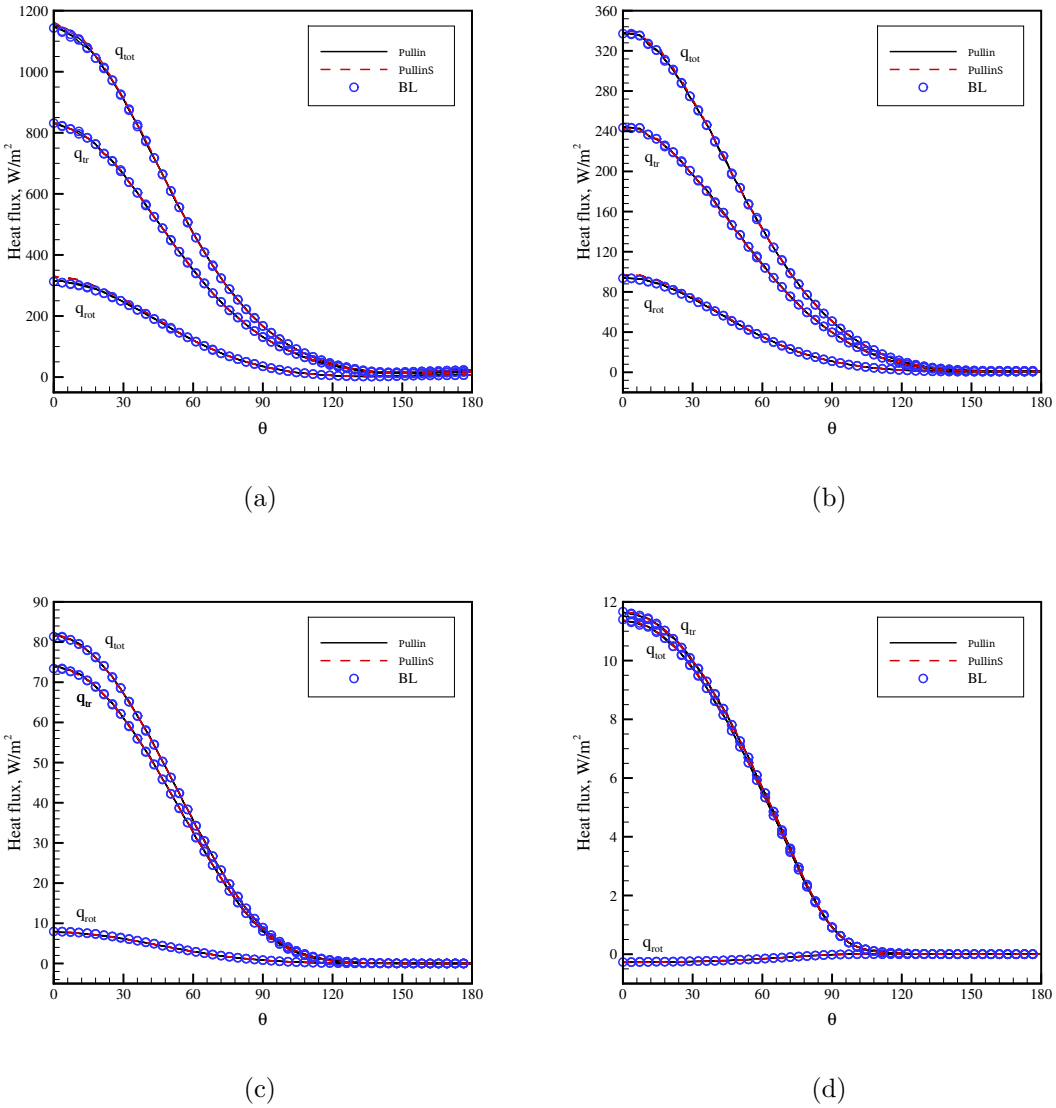


图 13. 马赫数为 Ma $= 5$ 时高超声速圆柱绕流的表面热流结果：(a) Kn $= 0.01$，(b) Kn $= 0.1$，(c) Kn $= 1.0$，(d) Kn $= 10.0$。实线：Pullin模型；虚线：简化Pullin模型；圆圈：BL模型。

表 V. 马赫数为 10 时 X38 类飞行器气动系数的比较。

高度（km）	系数	BL	Pullin	相对误差	PullinS	相对误差
90	C_L	0.3142	0.3142	-	0.3140	-0.06%
	C_d	0.2708	0.2708	-	0.2709	-0.04%
100	C_L	0.39	0.3902	0.05%	0.3901	0.03%
	C_d	0.5140	0.5140	-	0.5142	0.04%

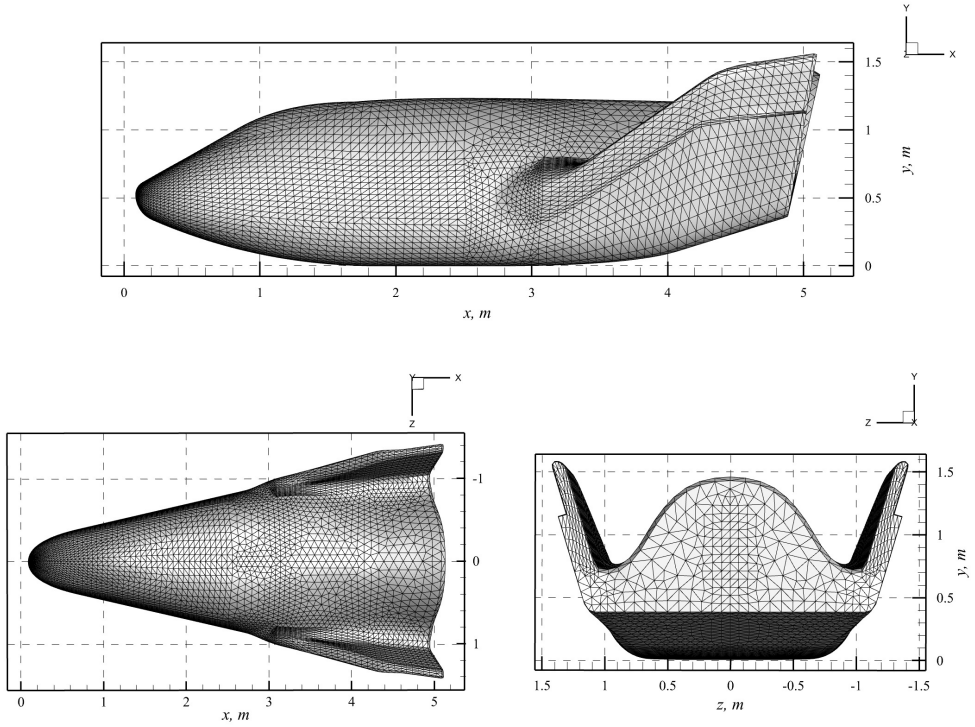


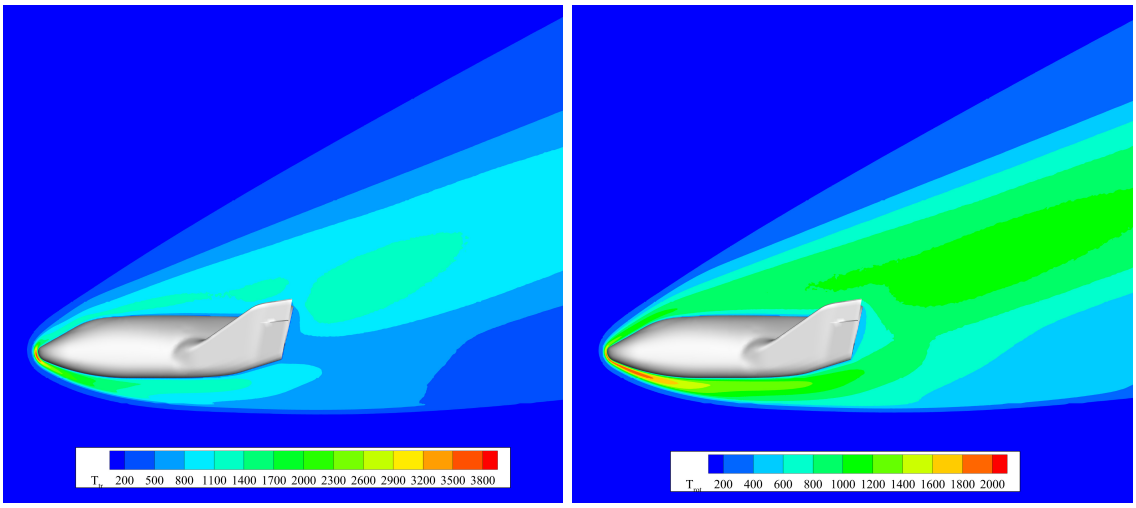
图14. X38类飞行器示意图（表面网格中有17,414个三角形）。

表VI. 不同模型计算X38类飞行器周围高超声速流动所需计算时间的比较。

高度(km)	模型	粒子数	N_{step}	CPU 核心	时间（小时）	CPU 小时
90	Pullin	1 270 009 678	80 000	300	59.69	17907
	PullinS	1 270 009 737	80 000	300	56.03	16809
	BL	1 269 992 103	80 000	300	49.41	14823
100	Pullin	136 497 915	80 000	150	6.61	991.5
	PullinS	136 495 963	80 000	150	6.35	952.5
	BL	136 489 077	80 000	150	6.1	915

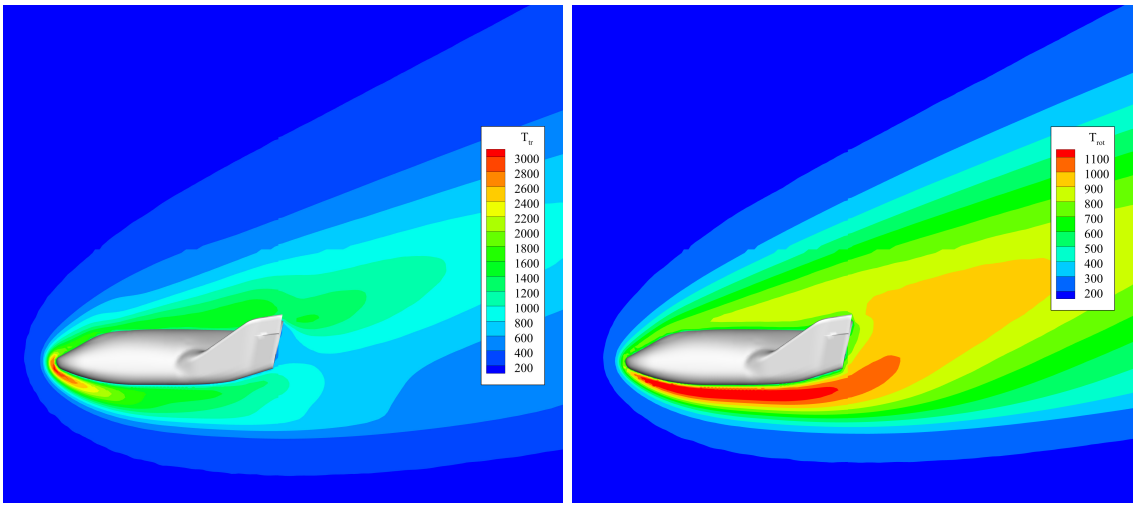
V. 结论

本文提出了一种针对 VHS 分子的 Pullin模型新参数化方法，建立了分配参数与转动碰撞数之间的直接联系。与广泛使用的边界层模型相比，基于气体动理论的 Pullin框架通过实现所有模拟粒子的内能发生旋转弛豫，提高了物理保真度



(a) (b)

图15. 90公里高度下X38类飞行器周围高超声速流动的温度等值线结果：(a) 平动温度，(b) 转动温度。



(a) (b)

图16. 100千米高度下X38类飞行器周围高超声速流动的温度等值线结果：(a) 平动温度，(b) 转动温度。

。借助所提出的参数化方法，完整的 Pullin模型和简化Pullin模型均已成功扩展至双原子VHS气体。由于能量交换仅需对三个或五个贝塔分布随机变量进行采样，因此这些模型可以轻松地在 DSMC框架中实现。

Pullin模型及其简化变体的准确性和效率已得到

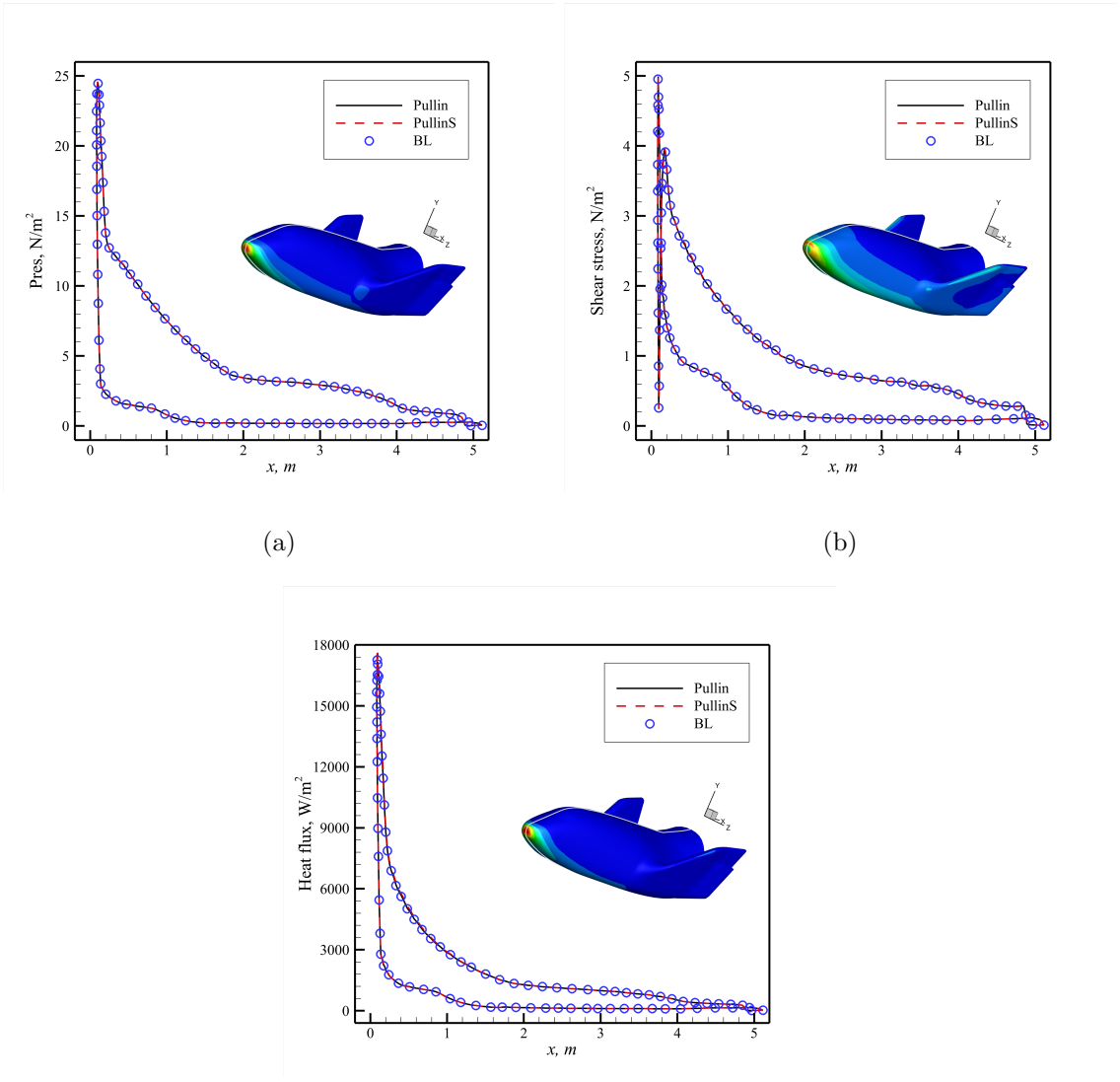


图17. 90公里高度处X38类飞行器周围高超声速流动的表面结果：(a) 压力，(b) 剪切应力，(c) 热流。实线：Pullin模型；虚线：简化Pullin模型；圆圈：BL模型。

通过一系列数值测试用例进行验证，包括氮气的零维旋转弛豫、一维平面库埃特流和正激波、二维圆柱绕流高超声速流动，以及X38类飞行器周围的三维高超声速流，并与BL模型进行了系统比较。在所有情况下，完整Pullin模型和简化Pullin模型均与理论、实验及BL模型的参考解高度吻合。在近连续区（克努森数Kn

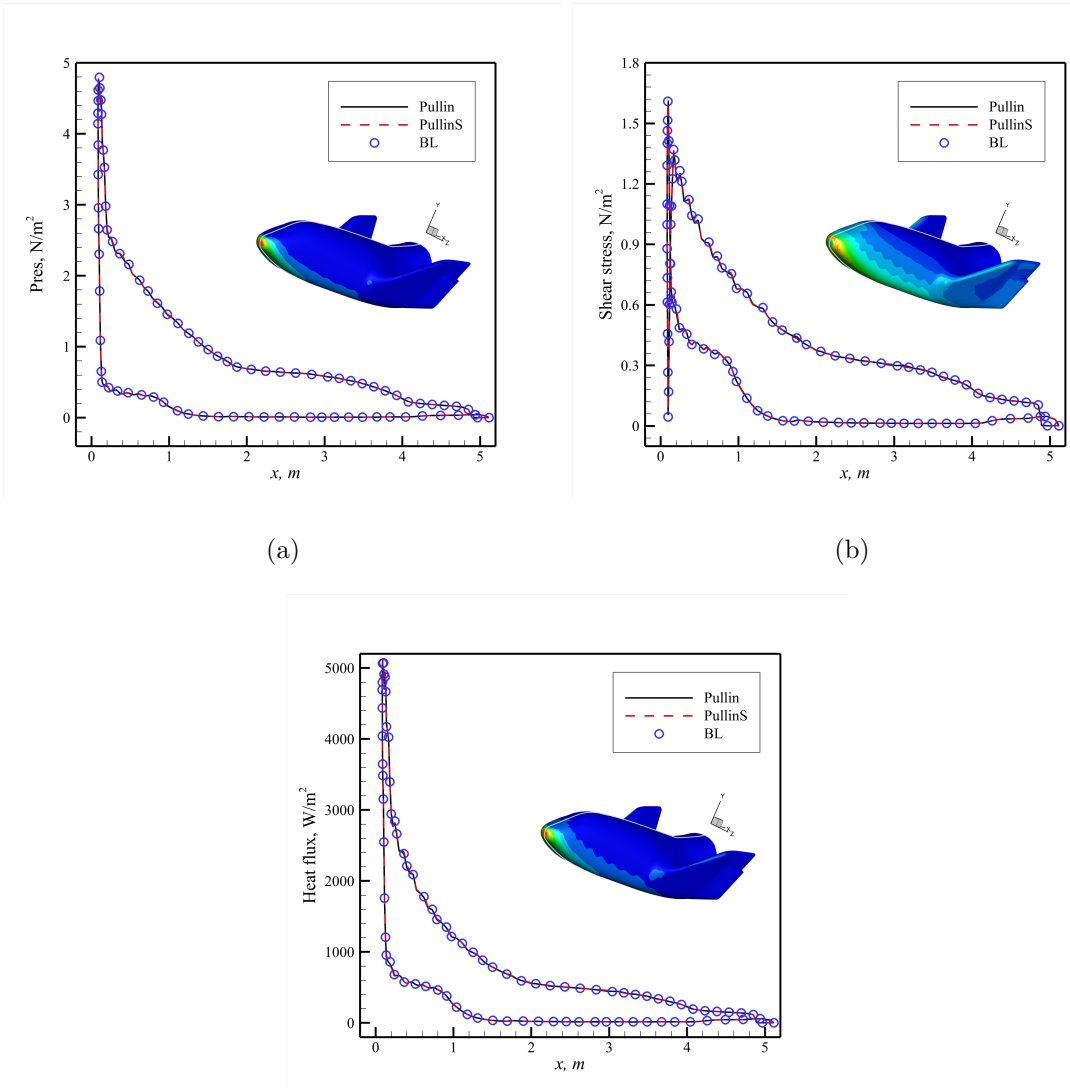


图18. 100千米高度处高超声速流动绕X38类飞行器的表面结果：(a) 压力；(b) 剪切应力；(c) 热流。实线：Pullin模型；虚线：简化Pullin模型；圆圈：BL模型。

$= 0.01$，或低于90千米的高度），由于需要额外计算成本来对Beta分布的变量进行采样，Pullin模型比BL模型慢约 $20 \sim 40\%$。然而，在DSMC模拟的高度稀薄流动状态下（克努森数大于1，或高于100千米的高度），简化Pullin模型的性能与BL模型相当。

总体而言，Pullin模型及其简化变体提供了一种稳健而实用的替代-

方案，可在DSMC框架内替代BL模型，仅以适度的计算成本便提高了转动能弛豫表征的物理保真度。它们在广泛测试用例中所展现的精度，凸显了其适用于高超声速气动物理应用。未来工作将通过纳入振动弛豫来扩展简化Pullin模型，从而增强其对高焓非平衡流动的适用性。

致谢

作者感谢张瑞先生和陈建锋先生就内能弛豫的动力学模型进行了宝贵的讨论。本研究获得国家自然科学基金委员会（项目编号：12172301）和高等学校学科创新引智计划（中国“111计划”，项目编号：B17037）的资助。

数据可用性

支持本研究结果的数据可在提出合理请求后向通讯作者获取。

参考文献

[1]W. Zhang、Z. Zhang、X. Wang 和 T. Su, 《平衡与非平衡高超声速流动数学建模综述》, 《空气动力学进展》4, 38 (2022).[2]J. D. Anderson, 《高超声速与高温气体动力学》（美国航空航天学会，1989）。[3]I. D. Boyd 和 T. E. Schwartzentruber, 《非平衡气体动力学与分子模拟》, 第 42 卷（剑桥大学出版社，2017）。[4]M. Schouler、Y. Pr´evereaud 和 L. Mieussens, 《地球轨道与大气再入过程中遇到的高超声速稀薄流飞行数据与数值数据综述》, 《航空航天科学进展》118, 100638 (2020).[5]S. Liu、P. Yu、K. Xu 和 C. Zhong, 《适用于所有流态的双原子分子模拟统一气体动理学格式》, 《计算物理学杂志》259, 96–113 (2014).[6]W. Hu、Z. Li、A. Peng 和 X. Jiang, 《涵盖多种流态的非平衡多原子气体流动气体动理学统一算法》, 《计算物理通讯》30, 144–189 (2021).[7]Q. Zhang、C. Zhuo、J. Mu、C. Zhong 和 S. Liu, 《用于双原子分子气体的多尺度离散速度方法》, 《流体物理》35 (2023).[8]G. A. Bird, 《分子气体动力学与气体流动直接模拟》（牛津大学出版社，1994）。[9]M. Pfeiffer, 《将粒子椭球统计Bhatnagar-Gross-Krook方法扩展至包含量子化振动能的双原子分子》, 《流体物理》30(2018).[10]X. Xu、Y. Chen、C. Liu、Z. Li 和 K. Xu, 《统一气体动理学波-粒子方法 V：双原子分子流动》, 《计算物理学杂志》442, 110496 (2021).[11]F. Fei、Y. Hu 和 P. Jenny, 《基于Bhatnagar-Gross-Krook模型的多原子气体统一随机粒子方法及其与DSMC的结合》, 《计算物理学杂志》471, 111640 (2022).[12]G. A. Bird, 《DSMC方法》（CreateSpace Independent Publishing Platform，2013）。[13]V. Kosyanchuk 和 A. Yakunchikov, 《双原子分子旋转–平动弛豫过程的详细多尺度研究》, 《流体物理》33 (2021)。

[14]Z. Eckert 和 M. A. Gallis，“在采用温度相关弛豫模型的 Borgnakke–Larsen 再分配方法中强制实施细致平衡”，《流体物理》**34**（2022）。[15]S. Trivedi、J. S. Salinas、J. K. Harvey、A. Y. Poludnenko 和 J. H. Chen，“使用直接模拟蒙特卡罗模拟氢气-空气爆轰”，《燃烧与火焰》**279**，114333（2025）。[16]G. Gokul 和 G. Malaikannan，“高超声速稀薄流中混合化学反应模型化学动力学的认识”，《流体物理》**36** （2024）。[17]M. Fang、Z. Li、Z. Li、J. Liang 和 Y. Zhang，“稀薄气体电离反应的 DSMC 建模及其在高超声速航天器再入流中的应用”，《空气动力学进展》**2**，7（2020）。[18]C. Borgnakke 和 P. S. Larsen，“多原子气体混合物蒙特卡罗模拟的统计碰撞模型”，《计算物理学杂志》**18**，405–420（1975）。[19]D. Pullin，“具有现象学能量交换的多原子分子动力学模型”，《流体物理》**21**，209–216（1978）。[20]A. Erofeev，“转动弛豫速率对氮气激波结构影响的数值研究”，《流体动力学》**30**，621–628（1995）。[21]P. Prasanth、J. K. Kakkassery 和 R. Vijayakumar，“一种基于变硬球模型的现象学非弹性碰撞模型，用于通过直接模拟蒙特卡罗方法进行稀薄气体流动模拟”，《流体动力学研究》**44**，025503（2012）。[22]M. N. Macrossan，“具有受限能量交换的 DSMC 转动-平动碰撞模型”，《国际流体数值方法杂志》**93**，3254–3263（2021）。[23]X. Lu 和 Z. Ye，“分子非弹性碰撞中弛豫能量再分配的通用方法”，《流体物理》**34** （2022）。[24]B. L. Haas、D. B. Hash、G. A. Bird、F. E. Lumpkin 和 H. Hassan，“直接模拟蒙特卡罗方法中的热弛豫速率”，《流体物理》**6**，2191–2201（1994）。[25]I. D. Boyd，“氮气激波中转动弛豫的温度依赖性”，《流体力学杂志》**246**，343–360（1993）。[26]P. Vijayakumar、Q. Sun 和 I. D. Boyd，“直接模拟蒙特卡罗方法的振动-平动能量交换模型”，《流体物理》**11**，2117–2126（1999）。

[27]S. Liu、N. Ding、M. Fang、H. Jin、R. Zhang、C. Zhuo 和 C. Zhong，“扩展玻尔兹曼理论的近连续介质机制：非平衡弛豫”，（2026），arXiv:2602.05775。[28]G. A. Bird，“直接模拟与玻尔兹曼方程”，《流体物理》**13**，2676–2681（1970）。[29]G. A. Bird，《直接模拟蒙特卡罗方法》（CreateSpace Independent Publishing Platform，2013）。[30]J. Parker，“双原子气体中的转动和振动弛豫”，《流体物理》**2**，449–462（1959）。[31]E. Carnevale、C. Carey 和 G. Larson，“高温下多原子气体转动碰撞数和振动弛豫时间的超声测定”，《化学物理学杂志》**47**，2829–2835（1967）。[32]M. J¨ohnk，“贝塔分布和伽马分布随机数的生成”，《Metrika》**8**，5–15（1964）。[33]R. C. Cheng，“具有非整数形状参数的贝塔变量生成”，《ACM 通讯》**21**，317–322（1978）。[34]S. J. Plimpton、S. G. Moore、A. Borner、A. K. Stagg、T. P. Koehler、J. R. Torczynski 和 M. A. Gallis，“千千万亿次超级计算机及更高性能平台上的直接模拟蒙特卡罗”，《流体物理》**31** （2019）。[35]L. Wu、C. White、T. J. Scanlon、J. M. Reese 和 Y. Zhang，“非振动多原子气体的玻尔兹曼方程动力学模型”，《流体力学杂志》**763**，24–50（2015）。[36]F. Robben 和 L. Talbot，“激波中氮气转动分布函数的实验研究”，《流体物理》**9**，653–662（1966）。[37]H. Alsmeyer，“通过电子束吸收测量氩气和氮气激波中的密度分布”，《流体力学杂志》**74**，497–513（1976）。[38]I. D. Boyd，“稀薄非平衡流中的转动-平动能量传递”，《流体物理 A：流体动力学》**2**，447–452（1990）。[39]D. Jiang、M. Mao、J. Li 和 X. Deng，“适用于多种流动状态的隐式并行统一气体动理学格式求解器”，《空气动力学进展》**1**，8（2019）。[40]D. Jiang、P. Wang、J. Li 和 M. Mao，“强黏性相互作用区内 X38 类飞行器气动特性的非线性建模研究”，《熵》**24**，836（2022）。