

认识稀薄气体动力学¹⁾

沈 青

(中国科学院力学研究所, 北京 100080)



沈青, 1935 年 12 月生, 中国科学院力学研究所研究员、博士生导师。1961 年毕业于前苏联列宁格勒大学(圣彼得堡大学)数学力学系。1983 年英国剑桥大学应用数学和理论物理系访问学者, 1985 年前苏联列宁格勒加里宁工学院(圣彼得堡国立技术大学)访问学者。多年在力学研究所、航天部 207 所、701 所从事稀薄气体动力学、气溶胶力学和导弹弹头防热等方面的研究。在小粒子热泳沉降、稀薄气流中内能激发松弛和化学反应等的直接统计模拟以及低速稀薄气流的模拟等方面有创新贡献。现任中国空气动力学会副理事长, 国际稀薄气体动力学会议咨询委员会成员, 第 20 届国际稀薄气体动力学会议主席。

摘要 以通俗易懂的方式介绍了空气动力学当气体间断分子效应显著时发展起来的特殊分支——稀薄气体动力学。讨论了非平衡现象与稀薄气体动力学的关系。通过与 8 速度气体模型的间断 Boltzmann 方程的对比, 解释了 Boltzmann 方程碰撞项的物理意义和数学困难, 简要综述了其一般解法。讨论了分子在物体表面的反射和问题的边界条件, 着重介绍了直接模拟 Monte Carlo (DSMC) 方法和为克服低速稀薄流动(如 MEMS 中流动)中模拟困难的信息保存(IP)方法。

关键词 稀薄气体动力学, Boltzmann 方程, DSMC 方法, 低速稀薄流动, IP 方法

1 介质是连续的还是间断的?

在古希腊诸多关于物质构造的哲学臆测中, Democritus(460~370BC)提出的物质构造学说最接近于真实。他认为物质均由极小粒子组成, 它们大小形状各异并处于不停运动之中。当然, 分子运动论(亦称分子动理论, Kinetic theory)的真正的定量论证是从 Daniel Bernoulli (1700~1782)开始的。他于 1738 年解释了 Boyle 定律, 即恒温下气体的压力与密度成正比。在 Bernoulli 的讨论中, 气体对壁面的压力是由各个分子与器壁碰撞将动量传递给后者而产生的。在立方体容器中, 设所有分子中各 1/3 沿前后, 左右和上下三个方向运动, 计算壁面因分子动量变化所受的力, 就得到压力与密度和气体均方根速度的关系

$$p = \frac{1}{3} \rho \bar{c}^2 \quad (1)$$

这与现代分子运动论的理论是完全一致的。有趣的是, 尽管 Daniel Bernoulli 是最早从分子运动论的观点来观察气体的科学家, 但他对于流体运动研究的最大贡献是从连续介质模型出发建立起来的流动中的液体的压力、高度和速度关系的 Bernoulli 定理。的确, 从 Euler(1707~1783)和 Bernoulli 建立理论流体力学以来, 连续介质的处理方法, 包括以后发展起来的气体动力学方法, 一直成功地解决人类遇到的物体在液体和气体中的受力和受热的问题, 而毋需考虑介质其实是

2002-07-08 收到第 1 稿, 2002-08-20 收到修改稿。

1) 国家自然科学基金项目(19889209)资助。

间断的. 这是因为通常条件下, 人们所感知的气体世界表现出连续的特征, 用仪器观察到的气体的性质也是连续和光滑的. 在人类的生产实践中或实验室里, 通常流动特征尺度至少要有 1 cm, 而气体的物理或动力学性质在 10^{-3} cm 的范围内变化会很小. 这一线性大小构成的体积 10^{-9} cm³ 在标准状态下包含了大约 3×10^{10} 个分子, 这使得气体的平均性质没有什么涨落起伏而表现出连续和光滑的特性. 但当气体密度变得十分低使得分子的平均自由程与流动的特征尺度相比不为小量时, 气体的间断分子效应就变得显著, 通常的气体动力学方法不再适用. 分子平均自由程 λ 是一个分子在两次相继碰撞间走过的距离, $\lambda = 1/(\sqrt{2}\sigma_T n)$, 其中 σ_T 为碰撞截面, n 为分子数密度*. 在海平面其大小约为 0.07×10^{-6} m. 在 70 km 高空约为 1 mm, 在 85 km 高空则约为 1 cm, 这时稀薄效应变得重要起来. 现代稀薄气体动力学正是从对在高空飞行的物体的受力受热的研究开始的^[1,2]. 钱学森将稀薄气体流动分为三大领域, 即滑流领域, 过渡领域和自由分子流领域. 领域划分的依据是 Knudsen 数

$$Kn = \lambda/L \quad (2)$$

这里 L 为流动特征长度. 不同流动领域所对应的 Kn 数为

$$\begin{array}{ll} \text{滑流领域} & 0.01 < Kn < 0.1 \\ \text{过渡领域} & 0.1 < Kn < 10 \\ \text{自由分子流} & Kn > 10 \end{array} \quad (3)$$

在滑流领域, 气体流动与一般连续介质流动的不同主要表现在边界附近, 出现所谓壁面速度滑移和温度跳跃. 在自由分子流领域, 气体分子之间的碰撞很少, 由物体反射的分子不对来流的速度分布函数产生影响, 是已知的平衡 Maxwell 分布, 这时, 了解分子在表面是如何反射的就得问题的完全的解. 在过渡领域, 分子间的碰撞及分子与表面的碰撞同样重要, 要借助分子气体动力学的方法求解, 这是稀薄气体动力学的核心的, 也是最困难的问题.

根据分子运动论, 气体的黏性系数 μ 与密度 ρ , 热运动平均速度 \bar{c} 和平均自由程 λ 有如下关系

$$\mu = \frac{1}{2} \rho \bar{c} \lambda \quad (4)$$

而 \bar{c} 与声速 a 的关系是

$$a = \sqrt{\frac{\pi\gamma}{8}} \bar{c}$$

从而钱学森将 Kn 数 $Kn = \lambda/L$ 和 Mach 数 $Ma = U/a$ 和 Reynolds 数 $Re = \rho UL/\mu$ 联系起来^[1]

$$Kn = \frac{\lambda}{L} = 1.26 \sqrt{\gamma} Ma/Re \quad (5)$$

对于不太高速的流动, 两种流动相似要求它们的 Ma 数和 Re 数相同, 由于有式 (5), 也就有 Kn 数的相同. 流动相似要求 Ma, Re 和 Kn 三个参数中任意两个相同.

当讨论的问题的特征尺度十分细小时, 如在讨论微机电系统 (MEMS) 问题时, 特征体积中分子的真实数目小到一定程度, 会引起宏观量的涨落问题, 如特征长度为 $0.1 \mu\text{m}$ 时, 其构成的立方体在标准条件 (p 为 1 个大气压) 下就只包含 3×10^4 个分子, 而宏观量 (多个分子贡献的数学期望) 的方差与粒子数的平方根 \sqrt{N} 成反比, 涨落会有 1% 的量级. 在标准状态下分子平均自由程约为 $0.07 \mu\text{m}$, Kn 数为 0.7. 如果我们想将压力降低 1000 倍, 即在 10^{-3} 大气压的稀薄条件下, 用 Kn 数相似模拟此问题, 这时平均自由程 λ 为 $70 \mu\text{m}$, 流动尺度相应为 $100 \mu\text{m}$. 其构成的体积

* 本文第 4 页有 λ 的这一表达式的简单推导.

中包含的分子数会多达 3×10^{13} 个分子. 这时统计方差降到 $2 \times 10^{-5}\%$, 即没有涨落问题出现. 对 NEMS(纳米机电系统) 的研究, 更不能只考虑 Kn 数的模拟. 真实的分子数相同是模拟的关键, 流场量的涨落是物理真实现象.

2 非平衡现象与稀薄气体动力学

这里首先通过航天飞行器驻点区气体分子能量的变化说明非平衡现象的重要性. 航天飞行器以很高的速度 U 飞过高空大气. 在驻点区域, 气体的动能要转变为内能. 如果用理想气体的模型, 能量守恒关系式给出驻点温度 T_0 为

$$T_0 = T + \frac{U^2}{2c_p} = T \left(1 + \frac{U^2}{2c_p T} \right) = T \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2 \right) \quad (6)$$

取比热比 $\gamma = 1.4$, 来流静温 $T = 300$, 从式 (6) 可得, 当 $U = 7 \text{ km/s}$ 和 10 km/s 时, T_0 分别会达到 24700 K 和 50100 K . 但实际上驻点温度远没有这样高, 这是因为能量用来激发了气体分子的振动内自由度和被气体中的离解这样的吸热反应所吸收了的缘故.

对于空气中的 O_2 , NO 和 N_2 , 转动特征温度为 $\theta = 2.07 \text{ K}$, 2.44 K 和 2.88 K , 所以在室温下, 转动能已充分激发起来, 双原子分子的转动能表现出两个自由度. 加上分子平动运动的三个自由度, 分子的内自由度数为 5. 这正是将空气这样的双原子分子气体的比热比 γ 取为 1.4 的原因 ($\gamma = (i + 2)/i$, i 为分子内自由度数). 而 O_2 , NO 和 N_2 的振动特征温度相应分别为 $\theta_v = 2256 \text{ K}$, 2719 K 和 3371 K , 振动能只有在较高温度下才被激发起来. 高温下气体的能量一部分要用来激发振动能. 同时, 空气在高温下发生的吸热离解反应也吸收了一部分动能转换来的热量. O_2 , NO 和 N_2 的离解特征温度为 $\theta_d = 59500 \text{ K}$, 75500 K 和 113500 K . 在驻点区当然 T 要比 θ_d 小得多, 但仍有显著的离解产生. 这是因为, 一是高能量的粒子碰撞的机会较多, 二是复合反应是三体碰撞反应, 其发生几率较小, 使离解占主导地位. 而较高的离解特征温度 (对应的离解能也较高) 还使离解反应降低温度的作用变得显著.

以上所举的转动和振动特征温度 θ_r , θ_v 之值, 都是由量子力学的规律确定的, 说明量子力学的结果从总体上影响着气体在高温下的行为. 但是没有必要用量子力学的方法描述空气分子的行为. Heisenburg 测不准原理说, 位置的不准确性 $|\Delta r|$ 和动量不准确性 $|\Delta mc|$ 的乘积为 h (Planck 常数) 的大小

$$|\Delta r| |\Delta mc| \sim h \quad (7)$$

在分子气体动力学问题中, 确定分子位置的典型尺度是分子间距 $\delta \sim n^{-1/3}$, n 为气体数密度, 动量的典型值是 $m\sqrt{c^2} = m(3kT/m)^{1/2} = (3mkT)^{1/2}$ (参见式 (1) 并用气体状态方程 $p = \rho \frac{k}{m} T$, k 为 Boltzmann 常数, m 为分子质量). 如果它们的乘积远大于 h , 量子效应即不重要, 这给出量子效应不重要的条件

$$(3mkT)^{1/2} / n^{1/3} h \gg 1 \quad (8)$$

用已知数据代入, 可见式 (8) 在标准状态下满足, 在高温和低密度下就更是满足的. 这说明描述空气分子的行为没有必要用量子力学的方法.

内能激发、离解 (还有电离) 等物理化学变化决定着高空流场中的温度和空气状态. 而气体分子的内态激发、化学反应等均为速率过程, 都是在分子的碰撞中完成的, 松弛时间正比于分子的平均碰撞时间. 当松弛时间和松弛距离与流动特征时间和流场特征距离相比为较大时, 内能和化学反应的非平衡出现. 而这也是稀薄效应显著的领域. 这样, 在航天飞行器在高空机动飞行和

制动时,要考虑间断介质效应,同时要考虑非平衡的内态激发,化学反应,电子能级跃迁等物理化学过程.这样,稀薄气体动力学丰富了气体动力学的研究内容,使其在两方面向微观化发展:将连续介质假设摒弃而考虑气体是由单个分子构成的,同时在微观水平上考虑分子内部的非平衡的物理化学过程.有时稀薄气体动力学又称为分子气体动力学.不过,按照从1958年起两年召开一次的本学科国际学术会议的名称,“稀薄气体动力学”仍然是最合适的学科名称,国际稀薄气体动力学会议所讨论的各个课题也正是稀薄气体动力学包含的内容^[3~5].

3 Boltzmann 方程及其求解

分子气体动力学在速度分布函数的水平上描述气体分子的行为.按照速度分布函数 $f(\mathbf{c}, \mathbf{r}, t)$ 的定义,在时刻 t ,物理空间 $d\mathbf{r} = dx dy dz$ 内,速度在速度空间 \mathbf{c} 附近元素 $d\mathbf{c} = du dv dw$ 内的分子数目为

$$f(\mathbf{c}, \mathbf{r}, t) d\mathbf{c} d\mathbf{r} \quad (9)$$

为了较直观地理解分布函数和控制它的基本方程(Boltzmann方程),这里以8速度气体模型^[6]为例来考察气体分子的行为.在这模型中,气体的速度仅能取为 $\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2, \dots, \mathbf{c}_8$ (见图1). $\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2, \dots, \mathbf{c}_8$ 为从立方体中心指向其8个顶点的速度矢量,其量值是相等的.给出了具有每个速度 \mathbf{c}_i 的分子的数密度 $n_i(\mathbf{r}, t)$ 就给出了这一模型下对气体的描述.也就是说给出

$$\begin{aligned} & \mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2, \mathbf{c}_3, \dots, \mathbf{c}_8 \\ & n_1, n_2, n_3, \dots, n_8 \end{aligned} \quad (10)$$

相当于给出 $f(\mathbf{c}, \mathbf{r}, t)$. 显然分子的数密度为(对于8速度模型)

$$n = \sum_{i=1}^8 n_i \quad (11)$$

对于分布函数的描述,则有

$$n = \int f d\mathbf{c} \quad (12)$$

在某地的气体的速度为

$$\mathbf{u} = \sum_{i=1}^8 n_i \mathbf{c}_i / n \quad (13)$$

和

$$\mathbf{u} = \frac{1}{n} \int f \mathbf{c} d\mathbf{c} \quad (14)$$

现来考察各类(共8类)分子因碰撞引起的数目的变化.以速度为 \mathbf{c}_1 的1类分子为例.因需满足动量守恒,1类分子与2类分子的碰撞的结果只能是产生2类分子与1类分子(参见图1).这对1类分子数没有影响.这也适用于1类分子与3类分子和5类分子的碰撞.1类分子与4

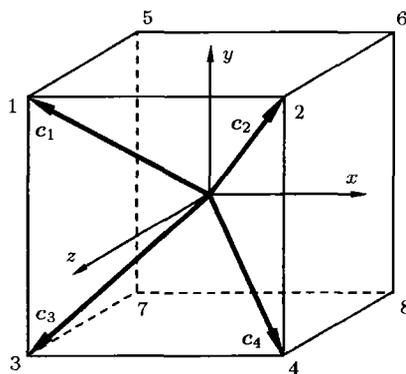


图1 8速度气体模型,气体的速度仅能取为 $\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2, \dots, \mathbf{c}_8$, 图中仅绘出 $\mathbf{c}_1, \dots, \mathbf{c}_4$

类分子的碰撞会引起 1 类分子的减少, 这是因为根据动量守恒, 1 类分子与 4 类分子的碰撞有两种结果, 即有产生出 4 类分子与 1 类分子的情况, 以及产生 2 类分子和 3 类分子的情况. 只有后一情况引起 1 类分子的减少. 定量来说, 1 类分子以相对速度 c_r^{14} 在数密度为 n_4 的 4 类分子的场中运动, 单位时间扫过的体积为 $c_r^{14}\sigma_T$ (见图 2), 这里 σ_T 为分子的碰撞截面. 将 $c_r^{14}\sigma_T$ 乘以 n_4 即得单位时间一个 1 类分子与 4 类分子的碰撞数 $c_r^{14}\sigma_T n_4^*$. 这样的碰撞以 1/2 的几率 (因一半结果产生 2、3 类分子) 引起 1 类分子的减小. 由于单位体积中有 n_1 个 1 类分子, 因此, 单位时间单位体积内由于 1 类分子与 4 类分子的碰撞而引起的 1 类分子数的减少为

$$L_{1(4)} = \frac{1}{2} c_r^{14} \sigma_T n_1 n_4 \quad (15)$$

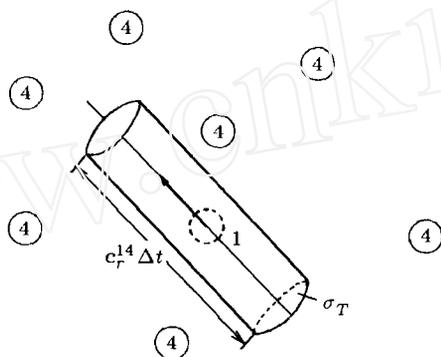


图 2 1 类分子以相对速度 c_r^{14} 在 4 类分子场中, Δt 时间扫过的体积

1 类分子与 6 类分子和 7 类分子的碰撞, 和 1 类分子与 4 类分子的碰撞是类似的. 这些碰撞的结果可以形象地表达为

$$(1-4) \begin{array}{l} \nearrow (4-1) \\ \searrow (2-3) \end{array}, \quad (1-6) \begin{array}{l} \nearrow (6-1) \\ \searrow (2-5) \end{array}, \quad (1-7) \begin{array}{l} \nearrow (7-1) \\ \searrow (3-5) \end{array} \quad (16)$$

1 类分子与 8 类分子的碰撞, 则可以产生四种结果, 这可以形象地表达为

$$(1-8) \begin{array}{l} \nearrow (8-1) \\ \rightarrow (2-7) \\ \rightarrow (3-6) \\ \searrow (4-5) \end{array} \quad (17)$$

显然, 1 类与 8 类分子的碰撞以 3/4 的几率引起 1 类分子的减少. 这样, 单位时间单位体积内 1 类分子与所有各类分子碰撞而引起的数目减少为

$$L_1 = \frac{1}{2} c_r^{14} \sigma_T (n_1 n_4 + n_1 n_6 + n_1 n_7) + \frac{3}{4} c_r^{18} \sigma_T n_1 n_8 \quad (18)$$

用类似的推理, 可以求得单位时间单位体积内由于碰撞引起的 1 类分子的数目增加为

$$G_1 = \frac{1}{2} c_r^{23} \sigma_T (n_2 n_3 + n_2 n_5 + n_3 n_5) + \frac{1}{4} c_r^{27} \sigma_T (n_2 n_7 + n_3 n_5 + n_4 n_5) \quad (19)$$

* 由于单位时间 1 类分子走过距离为 c , 其间发生了 $c_r^{14}\sigma_T n_4$ 次碰撞, 所以 (1-4) 碰撞的分子平均自由程 λ_{14} 为 $c/(c_r^{14}\sigma_T n_4)$. 一般的分子动理论给出 $\lambda = \bar{c}/(\bar{c}_r \sigma_T n) = 1/(\sqrt{2}\sigma_T n)$, 其中 \bar{c} , \bar{c}_r 为平均热运动速度和平均相对速度, $\bar{c}_r = \sqrt{2}\bar{c}$.

n_1 的时间的变化率 $\frac{dn_1}{dt} \equiv \frac{\partial n_1}{\partial t} + u_1 \frac{\partial n_1}{\partial x} + v_1 \frac{\partial n_1}{\partial y} + w_1 \frac{\partial n_1}{\partial z}$ 是因由碰撞产生的 1 类分子的增加和减少而引起的事实, 可以写为

$$\frac{\partial n_1}{\partial t} + u_1 \frac{\partial n_1}{\partial x} + v_1 \frac{\partial n_1}{\partial y} + w_1 \frac{\partial n_1}{\partial z} = G_1 - L_1 \quad (20)$$

类似地, 可以写出 2 类, 3 类, \dots , 8 类分子的方程, 从而有

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + u_i \frac{\partial n_i}{\partial x} + v_i \frac{\partial n_i}{\partial y} + w_i \frac{\partial n_i}{\partial z} = G_i - L_i, \quad i = 1, \dots, 8 \quad (21)$$

这是对于 8 速度气体模型写出的间断速度 Boltzmann 方程.

对于由分布函数 $f(\mathbf{c}, \mathbf{r}, t)$ 描述的一般气体, Boltzmann 方程有如下形式 (参见 [7~9])

$$\frac{\partial f}{\partial t} + u \frac{\partial f}{\partial x} + v \frac{\partial f}{\partial y} + w \frac{\partial f}{\partial z} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{4\pi} (f^* f_1^* - f f_1) c_r \sigma d\Omega dc_1 \quad (22)$$

$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c$ 这一积分项是由分子碰撞引起的 c 类分子数的变化率, 称为 Boltzmann 方程的碰撞项. 这一项是 Boltzmann 方程表现出数学复杂和难于求解的根源. 正是为了容易理解这一项, 我们详细给出了 8 分子气体的间断分子 Boltzmann 方程 (20) 的推导. 对照式 (20) 和 G_1, L_1 的表达式, $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c$ 的意义就比较容易理解了. 考虑 c 类分子和 c_1 类分子的碰撞, 碰撞后的速度变为 c^* 和 c_1^* . c, c_1, c^* 和 c_1^* 的分布函数分别记为 f, f_1, f^* 和 f_1^* . c_r 为分子相对速度, $\sigma d\Omega$ 为微分碰撞截面. Boltzmann 方程右端碰撞项的两项分别代表 $(c^*, c_1^* \rightarrow c, c_1)$ 逆碰撞导致的 c 类分子数目增加和 $(c, c_1 \rightarrow c^*, c_1^*)$ 碰撞导致的 c 类分子数目的减少. 就象考察 1 类分子数目的变化要考察它与所有其它七类分子的碰撞一样, 考察 c 类分子的数目变化, 要对 c_1 空间积分. 同时, 因微分碰撞截面仅对应微分立体角 $d\Omega$, 应对全方位求积分.

Boltzmann 方程是分子气体动力学的基本方程, 在整个稀薄气体动力学中占据中心的地位. 在自由分子流领域, 用无碰撞 Boltzmann 方程, 有时用它的平衡解, Maxwell 分布. 在滑流领域, 基本方程 Navier-Stokes 方程和 Burnett 方程和滑移边界条件是从解 Boltzmann 方程的 Chapman-Enskog 展开得到的, 或者要系统地对 Boltzmann 方程应用渐近方法得到流体力学方程. 在过渡领域则要从 Boltzmann 方程或用与之等价的方法求解气体流动问题.

Boltzmann 方程是一个积分微分方程. 右端为碰撞积分. f^*, f_1^* 是以碰撞后的速度 c^* 和 c_1^* 为自变量的分布函数, c^* 和 c_1^* 可以从碰撞动力学表达为 c 和 c_1 以及碰撞中几何参数的复杂的函数. 从碰撞项的积分式看, 对于每一个 c 相空间点要对于另一相空间 c_1 的所有点求积, 而且再要对碰撞的所有命中参数求和 (指对 $d\Omega$ 的积分). 可以想象, 碰撞积分的存在给求解带来多大的困难.

Boltzmann 方程还有自变量多的特点. f 是唯一的未知函数是带来了简单性, 但是变量多带来的复杂性要严重得多. 三维与非定常情况, f 依赖于 7 个标量自变量, 而且速度空间要延拓到很大的值. 这给数值求解带来在相空间布置庞大数目网格点的巨大困难 (每维布置 100 点, 共需 10^{14} 个网格点). 一般情况 (复杂几何, 大的扰动) 下解析解是不可能的, 数值求解也很困难. 但多年来, 还是发展了一些方法对其求解.

Boltzmann 方程平衡态下的解 Maxwell 分布的存在, 使得可以寻求这个解附近的小扰动解 [10~12], 即 **线性化 Boltzmann 方程的解**. 小扰动假设使得解仅适用于低速流动的情况, 但由

于 MEMS(微机电系统)的诞生和发展, 这样的解有实际的应用范围, 参见‘低速流动也带来模拟的困难’一节.

碰撞积分的复杂性促使人们用 **求积分的 Monte Carlo 方法** 来对之进行近似计算, 并用通常的有限差分法求解 Boltzmann 方程^[13,14]. 已进展到可以求解一些二维和三维问题^[15].

间断纵坐标方法 是引入有限个数的间断的速度, 代替整个无限的连续的速度空间. 上节中引入的 8 速度模型, 就是 Broadwell 最早发展的间断速度模型^[6]. Gatignel^[16] 和 Cabannes^[17] 以一般形式的 c_1, c_2, \dots, c_p 集合代替整个速度空间, 得到一般形式的间断 Boltzmann 方程, 并求解了一些简单问题. 间断 Boltzmann 方程收敛于 Boltzmann 方程的数学证明也取得了进展^[18].

矩方法 是将 Boltzmann 方程乘以某个分子的量 Q , 再将其对整个速度空间求矩(求积分)而得到矩方程. Navier-Stokes 方程和 Burnett 方程就是利用 Chapman-Enskog 展开求解 Boltzmann 方程的一阶和二阶矩方程. 在过渡领域要引入新的矩和矩方程, 这方面没有唯一的可以遵循的方法. 对于定常一维流动的一些个别问题, 矩方法可以得到较好的效果.

模型方程方法 是鉴于 Boltzmann 右端碰撞项的复杂性而用简化的碰撞项来代替它. 最著名的是 BGK 模型方程^[19]

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{c} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} = \nu(f_e - f) \quad (23)$$

f_e 是局部平衡分布, ν 是碰撞频率. BGK 方程因其简单而被广泛应用. 有一类有实际意义的小扰动问题, 是用 BGK 方程而不是 Boltzmann 方程求解的. 但 BGK 方程终究是用一个近似项代替了准确项, 其解只适用于 Maxwell 分子这一特殊非真实分子模型. 同时, 对实际问题的计算表明在远离平衡时, BGK 方程是不准确的^[20,21].

4 分子在表面的反射, 边界条件

在考察气体对物体的绕流时, 为得到 Boltzmann 方程的解, 还要提出边界条件, 要知道以一定速度入射物体表面分子是如何反射的. 分子与表面的相互作用, 是物体所受阻力、升力、力矩和传热的源泉. 由于这一问题的复杂性, 目前对它的研究无论理论上和实验上都还未臻完善. 航天和其它工程实践中长期应用所谓的完全漫反射模型, 或应用部分漫反射部分镜面反射的 Maxwell 类型边界条件. 镜面反射与漫反射模型还是 Maxwell 早在 1879 年引入的^[22]. 镜面反射模型假设, 来流分子在物体表面有如光滑弹性球在光滑的完全弹性表面上反射, 即其在物表法向的相对速度分量改变方向, 而其余速度分量保持不变. 这样反射流产生的正压力与来流产生的相同, 而反射流产生的剪切应力则与来流产生的符号相反, 即总剪切应力为零. 完全漫反射模型假设离开表面的分子以 Maxwell 分布散射, 平衡条件是表面温度、来流温度与 Maxwell 分布中的温度相同. 实验表明, 完全漫反射模型或纯镜面反射模型不能很好描述分子在表面散射的真实情况. Maxwell^[23] 建议了一种由这两种反射组成的模型, 即来流分子有 σ 部分为完全漫反射, 其余 $(1 - \sigma)$ 部分为镜面反射. 这就是所谓的 Maxwell 类型边界条件.

当漫反射模型中的 Maxwell 分布中的温度为壁温时, 相应于完全热适应的情况. 对于来流能量不是太高、表面温度为常温的一般工业加工表面, 这是分子在表面反射的一个较好的近似. 但实验表明, 对于精密加工的清洁表面, 在高温和高真空环境下, 当来流能量较高(如在相当于卫星速度下的能流)时, 反射能量流就表现出与适应于表面温度的 Maxwell 分布假设下的反射能量流有很大区别, 而趋向于接近入射的能量流. 同时, 分子束的实验还显示出反射分子在某一方向上有叶片状的分布. 这些都意味着要提出更现实的分子表面模型.

构造一般的散射模型应该满足分子在表面处的质量守恒和细致平衡原则, 引入分子在表面的

散射核 $R(\mathbf{c}_i, \mathbf{c}_r, \mathbf{r}, t)$, \mathbf{c}_i 代表入射分子速度, \mathbf{c}_r 代表反射分子速度, 根据定义

$$R(\mathbf{c}_i, \mathbf{c}_r, \mathbf{r}, t) d\mathbf{c}_r \quad (24)$$

代表入射速度在 \mathbf{c}_i 与 $\mathbf{c}_i + d\mathbf{c}_i$ 间的分子, 以 \mathbf{c}_r 到 $\mathbf{c}_r + d\mathbf{c}_r$ 间的速度反射的几率. 质量守恒导致散射核归一化条件

$$\int_{\mathbf{c}_r, n > 0} R(\mathbf{c}_i, \mathbf{c}_r) d\mathbf{c}_r = 1 \quad (25)$$

细致平衡原则则导致互易性原理^[24~26]

$$\mathbf{c}_r \cdot \mathbf{n} R(-\mathbf{c}_r, -\mathbf{c}_i) \exp[-\varepsilon_{\mathbf{c}_r} / (kT_w)] = -\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{n} R(\mathbf{c}_i, \mathbf{c}_r) \exp[-\varepsilon_{\mathbf{c}_i} / (kT_w)] \quad (26)$$

这一原理也表现出一定的数学复杂性, 书 [9] 中有从平衡态分布和细致平衡原理出发对它的简单推导.

Cercignani 和 Lampis^[27] 构造了满足归一化条件式 (25) 和互易性原理式 (26) 并为正值的散射核. Lord^[28,29] 发展了这一模型, 将其在 DSMC 方法中加以实现并推广, 包括内能转换, 不完全能量适应的漫反射情况以及间断能态转换的情况, 一般称之为 CLL 模型. 用 Cercignani-Lampis 模型计算出的散射到给定方向的分子数与分子束测量的实验结果^[30] 相符, 显示出这一模型与实验结果适应的巨大可能性, 与分子表面实验结合起来可以比较好地反映分子在表面反射的真实情况.

以上讨论的是分子水平上的边界条件. 当 Kn 数不可忽略但仍小于 0.1 时, 一般的气体力学方程仍然成立, 但无滑移边界条件的正确性要加以检验. 从分子运动论可推论出存在一个滑移速度 (气体切向速度与表面切向速度之差), 其大小与平均自由程 λ 成正比. 下面给出一个滑移速度的简单的推导.

在物体表面附近的气体分子, 一半来自外流, 一半从物体表面反射出来. 设表面切向的气体速度 u 沿法向 y 的变化是已知的, $u = u(y)$. 从来流中运动到表面的分子的平均速度, 是它们在最后一次碰撞中得到的速度的平均值, 也就是距离表面 $\zeta\lambda$ 处的速度, ζ 是近于 1 的系数. 设 u_s 为未知的表面附近的气体速度, 来流分子的平均速度是

$$u_s + \zeta\lambda \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_0 \quad (27)$$

设反射的分子 σ 部分漫反射, 其余 $(1 - \sigma)$ 部分镜面反射, 反射分子的平均速度是

$$\sigma \cdot O + (1 - \sigma) \left[u_s + \zeta\lambda \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_0 \right] \quad (28)$$

u_s 应是式 (27) 和式 (28) 速度的平均值, 从而解出

$$u_s = \frac{2 - \sigma}{\sigma} \zeta\lambda \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_0 \quad (29)$$

这一滑移速度 u_s 的推导不是严格的, 但就 u_s 对 σ 和 $(\partial u / \partial y)_0$ 的依赖关系而言, 它是准确的.

滑移速度以及温度跳跃的严格推导基于 Knudsen 层内动量和能量通量的守恒^[31,32,9]. 所谓 Knudsen 层是靠近物体表面的厚度为平均自由程量级的气体区域, 其中气体的行为由分子运动论所控制. 可以推得如下的速度滑移和温度跳跃表达式 (Maxwell-Smoluchowski 滑移条件)

$$u_{y=0} - u_w = C_m \lambda \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)_0 + C_s \frac{\mu}{\rho T} \frac{\partial T}{\partial x} \quad (30)$$

$$T_{y=0} - T_w = C_t \lambda \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)_0 \quad (31)$$

C_m 为速度滑移系数, C_s 为热蠕动系数, C_t 为温度跳跃系数.

式 (30) 和式 (31) 中三个速度与温度梯度项引起的现象和对流动产生的后果是不同的. $(\partial u / \partial y)_0$ 和 $(\partial T / \partial y)_0$ 引起速度滑移和温度跳跃, 这只是对于由粘性方程控制的主流的一些修正, 是粘性流体流动框架内的一类二阶效应, 在 $0.01 < Kn < 0.1$ 的范围起作用. 式 (30) 中的 $(\partial T / \partial x)$ 也引起气体沿表面的速度滑移, 称为热蠕动. 在一定条件下, 它会是流动的主导因素, 引起一些从经典流体力学出发本不会发生的特有现象. 如小粒子在静止有温度梯度气体中会从低温区向高温区运动, 即产生热泳或热致迁移. 热除尘器即用热泳原理, 对于除去 1μ 以下的粒子十分有效, 热泳原理的取样器广泛用于收集气溶胶粒子, 热泳还引起石油精炼热交换器的污垢等等. 有关粒子的热泳沉降的详细讨论见文 [33,34].

5 解方程好, 还是直接模拟好?

随着电子计算机的广泛应用和性能的迅速提高, 有一种直接从流动的物理出发的直接模拟方法发展起来. C. A. Bird(1930-) 发展的直接模拟 Monte Carlo(Direct Simulation Monte Carlo, 简称 DSMC) 方法 [35,36] 成功地模拟高空物体飞行引起的气体流动 (包括非平衡效应), 其重要性可与 Boltzmann 方程相媲美.

在计算机中引入大量的 ($10^4 \sim 10^6$ 或更多) 模拟分子, 纪录它们的位置、速度和内能, 以及它们因分子运动、与边界碰撞以及分子间碰撞而随时间的改变. 模拟中的时间等同于真实的时间, 计算过程是非定常的, 定常流做为非定常流的长时间状态而得到. 在小时间间隔 Δt 内将分子的运动与碰撞解耦. 在 Δt 内, 所以分子依其速度运动一段距离, 然后再计算 Δt 内有代表性的碰撞. Δt 应小于平均碰撞时间. 空间网格用来计算碰撞 (选取碰撞对, 并计算碰撞后果) 和对气体分子量求和以得到宏观量, 其尺寸 Δr 应小于平均自由程的一个分数.

DSMC 方法是通过与 Boltzmann 方程相同的物理推理得到的, 两者均要求分子混沌和稀疏气体 (dilute gas, 分子间隙 $\delta = n^{-1/3} \gg d$ 分子直径) 假设. 事实上遵循 DSMC 方法的规程可以导出 Boltzmann 方程 [37]. 不过, 并没有特别的必要来证明 DSMC 方法与 Boltzmann 方程是等价的, 因为它本身就不是从 Boltzmann 方程出发的. 同时由于 DSMC 方法的分子模拟的特性, 它在许多方面还显示出其优于直接解 Boltzmann 方程的解决问题的能力.

由于 DSMC 方法是直接模拟单个分子的行为, 所以可以较容易把分子间的碰撞和分子与表面间的碰撞的复杂的物理过程加以模拟. 为了模拟分子在高温下振动能的激发, 对于流场计算的目的, 最重要的就是在碰撞后正确地分配内能, 并保证内能的激发与松弛速率与实验给出的一致. 为此, Larsen 和 Borgnakke [38,39], 引入了一种唯象论模拟内能松弛过程的模型, 假设碰撞中分子的动能和内能遵守能量守恒, 碰撞后的内能按照动能和内能的平衡分布取值, 而能量松弛速率靠着调节弹性碰撞和非弹性碰撞的比率加以确定. 这在 DSMC 方法中已做为常规方法实现, 并可以应用到间断能阶的情况 [40,41]. 对于连续分布的内能出现奇异性的情况我们设想了有效的对待方法 [42,43]. 在高温下还遇到有化学反应的气体流动, DSMC 方法也比较容易对之模拟, 如 Bird [44] 引入了唯象论的化学反应模型, 通过赋予反应截面 σ_R 一定的值, 即可使化学反应速率常数达到真实反应应有的值. 以后人们又发展了许多化学反应模型, 将它们应用于 DSMC 模拟中, 均可再现真实化学反应的速率和结果. 而在 Boltzmann 方程的框架中还没有成熟的描述化学反应的公式表达. 为了描述一般的分子碰撞, Bird 引入了一种唯象论模型, 即所谓 VHS(variable

hard sphere, 变径硬球) 模型^[45], 它既保持了硬球分子模型散射规律的简单又能反映真实分子碰撞截面随相对速度而改变(随 c_r 的增加而减小), 从而保证了黏性系数 μ 随温度 T 的变化与实际气体中一致. 这对于保证流场模拟的准确性是很重要的. 而在经典分子运动论中没有一种分子模型可以做到这点. 以后又发展了 VSS 模型, GHS 模型和 GSS 模型等分子碰撞模型, 使模拟分子的行为与实际气体中的行为更趋一致. 对于分子在表面的反射也是如此, 由于 DSMC 方法对于单个分子物理模拟的本质, 引入更真实更复杂的模型, 如上节中提到的 CLL 模型, 是容易的, 而使其包含在 Boltzmann 方程的数学求解之中则很困难.

从 DSMC 方法诞生以来, 30 余年对过渡领域问题的求解来看, 直接求解 Boltzmann 方程还限于较简单的几何, 也鲜有包含化学反应和能量松弛等的解, 而 DSMC 方法已解决了很复杂的几何外形的包括内能和化学非平衡等复杂物理内容的问题. 尤其重要的是 DSMC 方法得到了实验的检验. 一个宏观流场的例子是 DSMC 对复杂外形航天飞机进行的升阻比计算得到了与飞行测量数据有出色的相符^[46]. 另一个例子是在流场的精细结构方面的验证. Muntz 等实验研究了 $Ma = 25$ 的氮的强激波结构, 电子束荧光技术给出同一点上的平行速度分布函数和垂直速度分布函数. 这是 1966 年底的事, 当时由于实验结果与 Mott-Smith 解^[47] 相符不好而未发表. 直至该课题组进行了 DSMC 模拟得到与实验相符结果才于 1989 年在 Science 上公布^[48](见图 3). 这两个实验验证提高了 DSMC 方法的地位和作用. 严格精确的 DSMC 计算, 即网格尺寸, 时间步长, 模拟分子数和分子间作用力满足合适要求的足够取样数的 DSMC 计算, 有做为检验其它计算准确性的标准的价值.

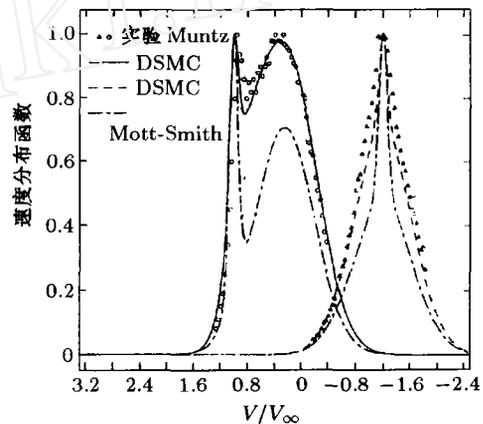


图 3 氮以正激波 ($Ma = 25$, 位置 $\bar{x} = 0.565$ 处) 的平行与法向速度分布函数^[48]

6 低速流动也带来模拟的困难

20 世纪末开始了 MEMS(微机电系统) 的加工制造和对其中流动的研究, 这是 21 世纪高新技术发展的前沿, 有着广阔的应用范围和光明的发展前景. 其空间尺度为微米量级, 时间尺度为微秒量级. 系统兼具运动、探测和控制的功能. MEMS 利用硅整体加工技术制造出来, 包括微槽道、微型泵、微型喷管、微型阀门、微型马达等. MEMS 中的气体流动, 因尺度小而具有较大的 Kn 数, 一般进入滑流领域, 而微槽道、微喷管、微阀门以及硬盘驱动器中的流动会进入过渡领域. DSMC 方法是合适的模拟工具, 但这里会遇到对计算机的内存和机时的过高要求的问题. 以实际生产出的第一代整体植入压力传感器的微槽道为例, 其尺寸为 $1.2\mu\text{m} \times 5\mu\text{m} \times 3000\mu\text{m}$ ^[49], 当网格尺寸 Δr 取为平均自由程 $\lambda \approx 0.07\mu\text{m}$ 时, 用二维近似处理, 也要布置 6×10^5 个网格, 每网格布置 20 个分子, 则需布置 10^7 个粒子. 实验中气流宏观速度约为 0.2m/s , 流过槽道约需 10^{-2}s , 时间步长 Δt 取为碰撞时间 (10^{-10}s) 的量级, 要花费 10^8 个时间步长. 最大的问题还在于 DSMC 给出结果的巨大统计误差. 宏观有用信息为 $U = 0.2\text{m/s}$, 背景噪声(气体的热运动速度)为 10^3m/s 的量级, 从这样大的背景噪声中取出这样小的有用信息, 样本数约需为 10^8 . 对于有入口和出口的管、槽道流动(或几何更复杂的为流), 因问题的椭圆性引起的入口和出口边界条件的

规定、调节以及与流场共同收敛于稳定解等问题也是模拟中遇到的难于克服的困难。所以低速给 DSMC 方法带来很大挑战, 以致有些研究者认为它不适合模拟 MEMS 中的流动^[50]。

为了解决 DSMC 方法处理低速稀薄气流时所遇到的巨大困难, 我们提出了信息保存 (Information Preservation, IP) 方法^[51,52], 这是基于 DSMC 方法的一种方法, 建议每一个模拟分子携带两种速度。其中一种即是通常 DSMC 方法中的分子速度 \mathbf{c} , 用来计算分子的运动、碰撞和在壁面的反射并完全遵循 DSMC 方法。此外建议每个分子携带所谓的信息速度 (IP 速度) \mathbf{u}_i , 用来记录每个模拟分子所代表的极大数目的真实分子的集团速度。它们对分子的运动不产生影响, 只用于求和得到宏观速度, 其原始信息取自气体的来流和物体的表面, 而当分子的物体表面反射、相互碰撞、受到外力作用和从边界进入时, IP 速度获得新值^[51,52,9]。一般情况下在等温假设下, 分子的 IP 速度 \mathbf{u} , 网格的 IP 速度 \mathbf{U} 和 IP 密度 $\rho(\text{mm})$ 满足质量守恒和动量守恒:

$$\iiint \frac{\partial \rho}{\partial t} dV = - \iint \rho \mathbf{U} \cdot \mathbf{l} dS \quad (32)$$

$$\iiint \rho \frac{d\mathbf{u}}{dt} dV = - \iint p \mathbf{l} dS \quad (33)$$

积分对网格的体积和表面进行, \mathbf{l} 是表面的单位外法线向量, 式 (33) 的右端写为了无粘的形式, 或可将其写为 $-\iint \sigma \mathbf{l} dS$, 其中 σ 是应力张量。但 IP 量是由模拟分子携带的, 其经表面 S 的正向和反向运动已体现了黏性输运作用。所以虽然动量守恒写为式 (33), 实际控制 IP 量的是包括黏性输送量的更完全的守恒律, 它适用于整个过渡领域。经过一个时间步长 Δt , 网格 IP 密度 n 获得增量 (根据 (32))

$$\Delta n = - \frac{\Delta t}{\Delta V} \iint n \mathbf{u} \cdot \mathbf{l} dS \quad (34)$$

从而网格密度和压力得到更新: $p = nkT$ 。(网格的)IP 速度增量根据 (33) 得出为

$$\Delta \mathbf{u} = - \frac{\Delta t}{mn \Delta V} \iint p \mathbf{l} dS \quad (35)$$

此增量加到网格中模拟分子的 IP 速度上去。更新的量用于下一步计算。

已将 IP 方法应用于单方向流动的基准问题, Couette 流动, Poiseuille 流动和 Rayleigh 问题^[51,52]。在自由分子流极限, IP 方向与自由分子流理论解相符, 在滑流领域与 Navier-Stokes 方程加滑流条件的解相符, 在过渡领域则与线性 Boltzmann 方程解相符。对于 Rayleigh 问题, 用 DSMC 方法检验了 IP 方法的结果, 结果相符很好, 对于 $U_w = 1\text{m/s}$ 的平板速度, DSMC 不得不用了庞大取样数 2×10^8 以减少统计散布, 而 IP 方法仅用了约 10^4 的取样数, 即得到很好的收敛。

利用 IP 方法还求解了多种二维问题, 包括微槽道流动, 平板绕流, 翼剖面绕流, 方腔流动, 以及过滤器中气体的流动等。这里仅简要介绍一下微槽道流动的 IP 方法模拟^[53~55,9]。微槽道是 MEMS 器件的基本构成单元, 其几何形状规则简单, 却能显示出低速稀薄内流的特点, 即问题的椭圆性引起的出入口边界条件的相互影响问题。在 DSMC 方法中总要在出入口处规定压力 p 和速度 \mathbf{u} 才能进行模拟, 但如果将它们完全固定就过度规定了边界条件。这时采用固定 p (如与实验时的出入口压力相等), 允许 \mathbf{u} 通过模拟逐渐变化到定常解的调整方法。在这样一个定常化过程中, 采用积分形式的质量守恒 (34), 或在微分形式下采用守恒形式的连续方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho U}{\partial x} + \frac{\partial \rho V}{\partial y} = 0 \quad (36)$$

是十分重要的^[9,55]. 其守恒形式的空间二阶中心差分格式给出的密度增量为

$$\Delta\rho = \Delta t \left(\frac{\rho_{i-1,j}U_{i-1,j} - \rho_{i+1,j}U_{i+1,j}}{2\Delta x} + \frac{\rho_{i,j-1}U_{i,j-1} - \rho_{i,j+1}U_{i,j+1}}{2\Delta y} \right) \quad (37)$$

试验计算表明, 非守恒格式会使误差积累起来, 不能将质量流量(初始时在多个截面上是不同的)调整为处处相等的定常状态. $\Delta\rho$ 的获得使 IP 密度和压力得以更新, 从式(35)得到 IP 速度的增量, 从而得到更新的 $\rho u, \rho v$ 场. 对 $\rho u, \rho v$ 要进行数值拟合使之光滑以加速收敛. 同时, 从式(37)得到的 $\Delta\rho$ 只有 ρ 的 10^{-9} 倍大小, 直接利用它来调整流场是太费时了. 我们建议采用超松弛方法^[9,55], 令

$$\rho_{i,j}^{t+\Delta t} = \rho_{i,j} + \omega \Delta\rho_{i,j}^t \quad (38)$$

其中超松弛因子 ω 一开始时取为 100~2000, 到收敛时 $\omega = 1$. 图 4 表示出这样的 IP 算法给出的^[56] 实验中微槽道的不同入口压力下, 实测的质量流量与 IP 模拟结果的比较^[55]. 图 5 则给出实验得到的沿槽道长度的非线性的压力分布^[49] 与 IP 模拟得到的结果的比较. 可以看到, 不论质量流量还是压力分布, IP 方法的模拟结果与实验的相符都是很好的. 注意图 4 的比较是对于 He 在出口 Kn 数为 2.5 时, 即在过渡领域进行的.

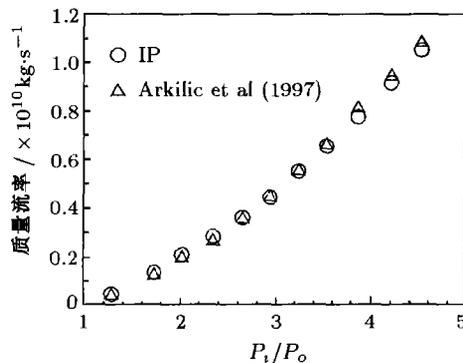


图 4 微槽道不同进口压力下实验的质量流量^[56]与 IP 模拟结果的比较, He, $Kn_0 = 2.5$

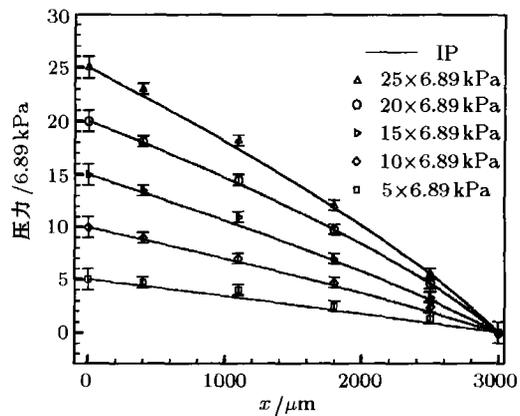


图 5 微槽道口进行压力实测的压力分布^[49]与 IP 模拟结果的比较, $N_2, Kn_0 = 0.05$

7 挑战在继续

稀薄气体动力学自诞生之日起就对其研究者提出了挑战, 要面对难于求解的积分微分方程, 要面对介质内部分子水平上的变化以及边界条件的提法等问题. 40 余年来, 稀薄气体动力学发展的特征是其解题方法的新颖和丰富. 间断速度方法、Monte Carlo 求积法、模型方程方法就是例证. DSMC 方法则是与 Boltzmann 方程同样重要而又能解决实际问题的方法. 在新的世纪中, 科学技术的发展会提出新的问题. 航天探索会更深入远地的宇宙, 微米系统要向纳米发展, 微型飞行器要求探索全新参数范围内的升力阻力机制, 新的材料工艺要求掌握和控制金属蒸汽、等离子体在电磁场中的行为, 等等. 这些和一些预想不到的技术发展都给力学包括稀薄气体动力学提出新的挑战. 我们期盼着有更多的年轻的学者对稀薄气体动力学产生兴趣, 投入对它的研究迎接新世纪对力学的挑战.

参 考 文 献

- 1 Tsien HS. Superaerodynamics, mechanics of rarefied gases. *J Aero Sci*, 1946, 13: 653~664
- 2 Tsien HS. Wind tunnel testing problems in superaerodynamics. *J Aero Sci*, 1948, 15: 573~580
- 3 Rarefied Gas Dynamics, Proceedings of the 20th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics. ed. by C Shen, Beijing: Peking Univ. Press, 1997
- 4 Rarefied Gas Dynamics, Proceedings of the 21st International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, ed. by R Brun, R Campargue, R Gatignol and JC Lengrand, CEPADUES EDITIONS, 1999
- 5 Rarefied Gas Dynamics, Proceeding of the 22nd International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, ed. by TJ Bartel and MA Gallis, AIP, 2001
- 6 Broadwell JE. Study of rarefied gas flow by the discrete velocity method. *J Fluid Mech*, 1964, 19: 401~414
- 7 Chapman S, Cowling TG. The Mathematic Theory of Non-uniform Gases. Cambridge Univ. Press, 1970. 中译本: 查普曼, 考林著. 非均匀气体的数学理论. 北京: 科学出版社. 1985
- 8 Bird GA. Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gases. Oxford: Clarendon Press, 1994
- 9 沈青. 稀薄气体动力学. 北京: 国防工业出版社, 2002
- 10 Grad H. Asymptotic theory of Boltzmann equation, in Rarefied Gas Dynamics, ed. by JA Laurmann, Academic, 1963, 1: 26~59
- 11 Cercignani C. Theory and Application of Boltzmann Equation. Scottish Academic, 1975
- 12 曾根良夫, 青木一生. 分子气体力学. 日本: 朝仓书店, 1994
- 13 Nordsieck A, Hicks BL. Monte Carlo evaluation of the Boltzmann collision integral, in Rarefied Gas Dynamics, ed by CL Brundin, Academic Press, 1967. 675~710
- 14 Yen SM. Monte Carlo solution of nonlinear Boltzmann equations. *J Heat Mass Transfer*, 1970, 14: 1865~1869
- 15 Tcheremissine FG. Fast solution of the Boltzmann equation, in Rarefied Gas Dynamics, ed. by AE Beylich, VCH, 273~284, 1991
- 16 Gatignol R. Theorie Cinetic des Gas a Repartition Discrete de Vitesses, Lecture Notes in Physics 36, Springer, 1975
- 17 Cabannes H. The Discrete Boltzmann Equation, Lecture Notes, University of California, Berkley, 1980
- 18 Bolyev AV, Palczewsky A, Scheider J. Discretization of the Boltzmann equation and discrete velocity models, in Rarefied Gas Dynamics, ed. by J Harvey and G Lord, 1995, 2: 857
- 19 Bhatnagar PL, Gross EP, Krook M. A model for collision processes in gases. *Phys Review*, 1954, 94: 511~525
- 20 Shen C, Xu X, Hu Z, Wu W. Transient motion of rarefied gas caused by heat addition. *Progress in Astro Aero*, 1994, 159: 234
- 21 Shen C, Yi ZQ. Direct numerical test of BGK model by the DSMC method. *Acta Mech Sinica*, 2000, 16: 133
- 22 Maxwell JC. *Phil Trans Roy Soc 1*, Appendix, 1879
- 23 Maxwell JC. *Scientific Papers*, 1890, 2: 704
- 24 Cercignani C. Mathematical Methods in Kinetic Theory. Plenum Press, 1969
- 25 Wenaas EP. Scattering at gas-surface interface. *J Chem Phys*, 1971, 54: 376~388
- 26 Kuscer J. Reciprocity in scattering of gas molecules by surface. *Surface Sci*, 1971, 25: 225~237
- 27 Cercignani C, Lampis M. Kinetic models for gas-surface interactions. *Transport Theory and Stat Phys*, 1971, 1(2): 101~114
- 28 Lord RG. Application of C-L Scattering Kernel to DSMC calculation, Rarefied Gas Dynamics, ed. by AE Beylich, VCH, 1991, 1427~1433
- 29 Lord RG. Some extensions to the C-L gas-surface scattering kernel. *Phys Fluids*, 1991, A3: 706~710
- 30 Hitchen JJ, Foley WM. Scattering of molecular beams by metallic surfaces, Rarefied Gas Dynamics, ed. by JH de Leeuw, 1966, 2: 505
- 31 Patterson GN. Molecular Flow of Gases. John Wiley and Sons, 1956
- 32 Shidlovsky VP. Introduction to Dynamics of Rarefied Gases. Elsevier, 1967
- 33 Shen C. Thermophoretic deposition of particles onto cold surface of bodies in 2-D and axisymmetric flows. *J Colloid and Interface Sci*, 1989, 127(1): 104~105
- 34 Shen C. Thermophoretic deposition of small particles suspended in gas flow onto cold surfaces, in High-Temperature Dust Laden Jets, ed. by Solonenko and Fedorchenko, VSP, 1989, 349~369
- 35 Bird GA. Approach to translational equilibrium in a rigid sphere gas. *Phys Fluids*, 1963, 6: 1518~1519
- 36 Bird GA. Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows. Clarendon Press, Oxford, 1994

- 37 Bird GA. Direct simulation of the Boltzmann equation. *Phys Fluids*, 1970, 13: 2676~2681
- 38 Larsen PS, Borgnakke C. Statistical collision model for simulating polyatomic gas with restricted energy exchange, *Rarefied Gas Dynamics*, ed. by M Becker and M Fiebig, A.7-1, DFVLR Press, 1974
- 39 Borgnakke C, Larsen PS. Statistical collision model for Monte Carlo simulation of polyatomic gas mixture. *J Comput Phys*, 1975, 18: 405
- 40 Haas BL et al. Models of thermal relaxation mechanics for particle simulation methods. *J Comput Phys*, 1993, 107: 348
- 41 Bergemann F, Boyd ID. New discrete vibrational energy model for DSMC method. *Progress in Astro Aero*, 1995, 158: 174
- 42 沈青等. 均匀气体中内自由度激发松弛与离解反应的直接统计模拟. *空气动力学学报*, 1991, 9(1): 1~7
- 43 Shen C, et al. Monte Carlo simulation of vibrational energy relaxation in rarefied gas flow, in *Rarefied Gas Dynamics 19*, ed. by J Harvey and G Lord, Oxford Univ Press, 1995, 1: 469~475
- 44 Bird GA. Simulation of multi-dimensional and chemically reacting flows, in *Rarefied Gas Dynamics*, ed. by R Campargue, 1979, 1: 365
- 45 Bird GA. Monte Carlo simulation in an engineering context. *Prog Astro Aero*, 1991, 74: 239~255
- 46 Bird GA. Application of the DSMC method to the full shuttle geometry. AIAA Paper 90-1692, 1990
- 47 Mott-Smith HM. The solution of the Boltzmann equation for a shock wave. *Phys Rev*, 1951, 82: 885~892
- 48 Pham-Van-Diep, et al. Nonequilibrium molecular motion in a hypersonic shock wave. *Science* 1989, 245: 624~626
- 49 Pong KC, et al. Non-linear pressure distribution in uniform microchannels, ASME-FED, 1994, 197: 51
- 50 Oran ES, et al. DSMC: Recent advances and applications. *Annu Rev Fluid Mech*, 1998, 30: 403
- 51 Fan J, Shen C. Statistical simulation of low-speed unidirectional flows in transition regime, in *Rarefied Gas Dynamics*, ed. by R Brun et al. 1999, 2: 245
- 52 Fan J, Shen C. Statistical simulation of low-speed rarefied gas flows. *J Comput Phys*, 2001, 167: 393
- 53 谢肿, 樊菁, 沈青. 微槽道流动的直接统计模拟. *中国工程热物理学会传质传热学术会议论文集*. 2000, 388
- 54 Cai CP, Boyd ID, Fan J, Candler GV. Direct simulation method for low-speed microchannel flows. *J Thermophys and Heat Transfer*, 2000, 14: 368
- 55 谢肿, 樊菁, 沈青. 微槽道气体流动的统计模拟. *计算物理*, 2002, 19(5): 377
- 56 Arkilic EB, Schmidt MA, Breuer KS. Measurement of the TMAC in silicon microchannels, in *Rarefied Gas Dynamics*, ed. by C Shen, Beijing: Peking Univ. Press, 1997, 983

GET ACQUAINTED WITH RAREFIED GAS DYNAMICS

SHEN Qing

(Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China)

Abstract This article introduces in an easy and understandable manner a specific branch of gas dynamics - rarefied gas dynamics, where discrete molecule effects prevail. The relationship between the non-equilibrium phenomena and rarefied gas dynamics is discussed. Through a comparison with the discrete Boltzmann equation for a 8-velocity gas model the collision term of the Boltzmann equation, its physical meaning and mathematical difficulties are elucidated and a brief review of the solution methods is also given. The reflexion of molecules from body surfaces and the slip boundary conditions are interpreted. The direct simulation Monte Carlo (DSMC) method and the information preservation (IP) method used to overcome the difficulties in simulating slow rarefied gas flows (such as in MEMS) are introduced and recommended.

Key words rarefied gas dynamics, Boltzmann equation, DSMC method, slow rarefied gas flows, IP method