

稀薄气体动力学: 进展与应用

樊 菁[†]

中国科学院力学研究所高温气体动力学国家重点实验室, 北京 100190

摘 要 简要回顾了稀薄气体动力学的发展历程; 重点介绍了该领域最近二三十年的主要进展, 这突出表现在分子模拟方法 (DSMC 方法、信息保存方法等) 的迅速发展与成功应用; 概述了航天工业、真空技术、微机电系统等尖端技术中的稀薄气流问题, 以及最近几届国际稀薄气体动力学会议的主题. 在此基础上指出了学科前沿问题, 以及几个与实际应用有关的重大问题, 如过渡流区高超声速三维非平衡流场的精细预测和实验验证、热层大气的时空演化规律与探测、以气体为介质的微机电系统设计与优化、真空环境下原子水平的材料制备工艺的定量设计.

关键词 稀薄气体动力学, 分子模拟方法, 高超声速飞行器, 微电子机械系统, 薄膜沉积

中图分类号: O355 **文献标识码:** A **DOI:** 10.6052/1000-0992-13-018

1 引 言

稀薄气体动力学, 亦称分子气体动力学, 是一门交叉学科. 它所要回答的问题, 与经典气体动力学是相似的, 但它的学科基础, 不再是传统的连续介质力学, 而是分子动理论和原子分子物理.

稀薄气体动力学的形成和发展, 主要来自两方面的推动. 一是实际应用的需要, 二是学科发展的内在动力.

气体的稀薄程度通常用 Knudsen 数 (Kn) 表征, 它等于分子平均自由程与流场特征长度的比值. 当 Kn 不是很小时, 气体分子的离散结构便会显现出来, 并影响流动的规律, 这时连续介质假设和 Navier–Stokes 方程不再适用, 而需要采取分子的观点和动理论的方法进行分析. 现代工业一直向着极端条件的方向发展, 高

空、高温、高速、低密度、微尺度等, 都是稀薄气体效应发生的契机.

在原子和分子结构确立之后, 如何从它们出发理解和认识宏观流动中的非平衡和非线性输运过程, 是现代力学的核心问题之一. 由于气体分子相互作用模型相对简单、成熟, 稀薄气体动力学在这方面的研究中一直起着先锋作用.

2 发展历程

气体的分子模型, 是稀薄气体动力学的基石. 它的研究历史可以追溯到古希腊的原子论哲学家, 如 Democritus (460~370 B.C.) 等. 他们认为: 宇宙万物皆由微小粒子组成; 这种微小粒子, 他们称之为原子, 大小形状各异并处于不停的快速运动之中. 那时当然举不出令人信服的证据, 只能说是妄想或猜测, 不过却抓住了现代

收稿日期: 2013-03-03, 修回日期: 2013-03-19

[†] E-mail: jfan@imech.ac.cn

引用格式: 樊菁. 稀薄气体动力学: 进展与应用. 力学进展, 2013, 43(2): 185-201 (Fan J. Rarefied gas dynamics: Advances and applications. Advances in Mechanics, 2013, 43(2): 185-201)

科学物质构造图案中的核心要素. 但它的确认经历了漫长的时间, 直到 20 世纪初, Einstein 等经由看得见的花粉微粒在液体中跳跃扩散的现象, 推算看不见的分子运动特性, 并与 Perrin 在显微镜下的实验观测相符合, 才被科学界普遍接受.

分子动理论, 为研究稀薄气体流动提供了基本方法. 它的研究历史可以追溯到 1738 年 D. Bernoulli (1700~1782) 以分子运动论的观点, 解释了 Boyle 定律, 即恒温下气体的压力正比于密度. 在 Bernoulli 的分析中, 气体对器壁的压力是由于分子与器壁碰撞, 并将动量传递给后者而产生的. 对于一个立方体容器, 假设其中的分子只沿前后、左右、上下 3 个方向运动, 各占总数的 $1/3$, 计算单位面积器壁因气体分子碰撞和反射动量变化所受的力, 就得到压力. 它正比于气体的密度和气体分子均方根速度; 在恒温条件下, 分子均方根速度是一个常数, 故压力只取决于密度.

Bernoulli 之后, 差不多又经过了一个世纪, 由于几位杰出科学家的出现, 分子动理论的基础终于奠定了. 第 1 位是 Clausius (1822~1888), 提出了平均自由程概念, 构建了简明、直观的分子运动图案. 第 2 位是以发现电磁场规律著称的 Maxwell (1831~1879), 1859 年引入速度分布函数, 以几率的方式描述分子运动, 得到平衡态分子速度分布函数, 即 Maxwell 分布函数, 还与平均自由程概念结合, 给出宏观输运系数与微观分子运动的关系. 第 3 位是 Boltzmann (1844~1906), 建立了气体分子运动的微分 - 积分方程, 即 Boltzmann 方程, 这是历史上第一个概率随时间的演化的方程, 无论从哪个角度看都意义重大, 却不幸遭到同时代物理学家和数学家两方面的强烈反对 (Cercignani 1998).

Boltzmann 方程之于稀薄气体动力学, 如同 Navier-Stokes 方程之于经典气体动力学. Boltzmann 方程的平衡态解, 乃 Maxwell 分布; 它的一

阶近似解, 即 Chapman-Enskog 分布, 由此可得气体输运系数的准确表达式, 堪称动理论 20 世纪上半叶最重要的成果, 在 Chapman 和 Cowling (1952), Hirschfelder, Curtiss 和 Bird (1954), Bird, Stewart 和 Lightfoot (2002) 等的名著中, 得到了系统的总结和扩展.

稀薄气体动力学作为一个力学学科分支的提出, 与钱学森有关. 1946 年, 钱学森发表了他关于稀薄气体流动的第一篇论文 (Tsien 1946), 题目是“超级空气动力学, 稀薄气体力学”. 这是国际上公认的稀薄气体动力学的开创性工作 (Muntz 1996). 钱学森写到: “随着最近火箭作为推进动力装置的完善, 情况有了很大的改变, 飞行器能够达到的高度应该是没有限制的, 甚至有迹象表明远程火箭飞行器的最佳飞行高度大约在 60 英里. 在这样以及更高的高度上, 空气的密度是如此之低, 使得流体必须看做具有粗粒结构, 而不是通常流体力学中的连续介质.” “除了高空飞行中的应用, 超级空气动力学还应在包含低密度气体的工业过程有许多应用. 超级空气动力学的知识在改善这些过程的效率上应有非常宝贵的帮助.”

在这篇文章中, 钱学森将稀薄气体流动划分为 3 个区域 (滑流区、过渡流区和自由分子流区), 划分的依据是 Kn 数. 在滑流区 ($0.01 < Kn < 0.1$), 气体流动与连续介质的差别主要表现在边界附近, 即所谓的速度滑移和温度跳跃现象; 在自由分子流区 ($Kn > 10$), 分子之间的碰撞机会很少, 从物面反射的分子流几乎不受来流影响, 近似服从物面条件下的 Maxwell 分布, 这类问题容易处理, 只要了解分子在物面是如何反射的就得到了问题的解; 在过渡流区 ($0.1 < Kn < 10$), 分子之间的碰撞与分子和物面的碰撞同等重要, 这是稀薄气体动力学中最困难的问题.

过渡流区问题的求解, 是稀薄气体动力学的核心. 早期的研究, 是从低速问题开始的, 如

著名的 Knudsen (1909) 平面槽道流动的质量流量实验、Millikan (1923) 油滴阻力系数实验. 他们发现随着 Kn 数的增大, 稀薄气体效应非常显著, 进入过渡流区, 出现与滑移 Navier–Stokes 方程预测定性不同, 所谓的 Knudsen 佯谬, 以及小球阻力系数 Stokes 公式的 Millikan 修正.

20 世纪 50 年代之后, 随着洲际导弹、返回式卫星、载人飞船和航天飞机的研制, 再入过程中飞行器的气动特性是不能回避的问题. 再入初始阶段, 大约从高度 80 ~ 100 km, 那里的空气密度大约只有海平面的 $1/10^6 \sim 1/10^5$, 估计来流 Kn 数, 可知飞行器处在稀薄气体环境之中. 典型的例子是美国“哥伦比亚”航天飞机和我国“神舟”飞船, 它们在回地过程中, 平衡攻角由于稀薄气体效应都显著偏离地面设计值, 威胁着航天器的回地安全. 这类问题非常复杂, 在稀薄气体效应显现的同时, 还伴随着空气分子的非平衡内态激发、解离反应、置换反应、电离反应、电子能级跃迁等物理化学过程, 地面试验十分困难. 幸运的是, 直接模拟 Monte Carlo (DSMC) 方法经过几十年的发展 (Bird 1994, 沈青 2003, 2005) 加之计算机内存和速度的数量级提高, 为解决这类问题打开了大门. DSMC 方法是澳大利亚学者 G. A. Bird (1963) 发明的, 是 20 世纪下半叶稀薄气体动力学的代表性成果, 沈青 (2002) 认为“其重要性可与 Boltzmann 方程相媲美”.

流动相似律是另一个重要的问题. 对于低速稀薄气体流动, 流动相似准则是 Kn 数和 Mach 数相同 (钱学森 1946). 对于航天飞行器关心的高速稀薄气体流动问题, 其相似准则可归结为双尺度律 (Birkhoff 1960), 即静温相同条件下, 来流速度相同, 来流密度与飞行器特征长度的乘积相同. 双尺度律在实际情况下的验证是很重要的, 我国学者沈青等 (1970) 与美国的 Moss 等 (1987) 为此做出了贡献.

3 最近二三十年的研究进展

由于计算机的广泛应用和性能的不不断提高, 以 DSMC 方法为代表的分子模拟方法脱颖而出 (Bird 1994, 沈青 2003, 2005), 不仅成功解决了航天飞行器面临的高速稀薄气流问题, 微机电系统 (MEMS) 中的低速稀薄气流问题, 目前还在向其他领域拓展, 如流动稳定性、三维混沌乃至湍流的微观输运机制, 以及颗粒流等等, 是稀薄气体领域近二三十年公认的最重要的进展.

DSMC 方法在计算机中用大量模拟分子代表真实气体. 模拟分子的空间坐标、速度、内能等存储在计算机中, 因分子运动、碰撞以及与边界的相互作用而随时间变化. 该方法的核心思想是在一个时间步长 Δt 内, 将分子运动与碰撞解耦, 所有分子首先按照各自的速度, 运动一段距离, 然后再按照与真实分子相同的碰撞频率, 根据一定的碰撞模型, 从所有可能组合的分子对中, 选出碰撞对, 以几率的方式分配碰撞后的分子速度和内能、决定是否有化学反应发生等.

在 DSMC 发展的前 30 年中, Boltzmann 方程还处在稀薄气体动力学的中心位置, 因此大家很关心它与 Boltzmann 方程的关系. 20 世纪 90 年代以来, 随着 DSMC 方法的日益完善和计算机性能的迅速提高, DSMC 在许多方面显示出优于 Boltzmann 方程解决实际问题的能力.

沈青 (2002, 2003) 曾明确指出: 并没有特别的必要来证明 DSMC 方法与 Boltzmann 方程的等价性, 虽然这个问题在简单情况下已得到解决 (Wagner 1992). 除了直接的原因——DSMC 不是从 Boltzmann 方程出发的, 更重要的是 DSMC 直接模拟单个分子的行为, 比较容易引入符合物理实际的模型, 描述分子间的碰撞, 以及分子与表面的碰撞, 而将真实的模型引入 Boltzmann 方程的数学求解则很困难, 对于

处理伴随着化学反应和辐射的气体流动更是如此, 在 Boltzmann 方程框架下, 目前还没有成熟的描述化学反应的数学表达. 又如, DSMC 方法不依赖于逆碰撞假设, 故可应用于三体碰撞复合反应, 而这是 Boltzmann 方程无法做到的. 即使对于 Boltzmann 方程可以处理的不包含化学反应和辐射过程的问题, 求解 Boltzmann 方程也比较复杂, 只限于较简单的几何外形, 而 DSMC 方法已经可以解决三维复杂外形、有丰富物理化学过程的稀薄气体流动问题. 从这些方面看来, 曾经是根深蒂固的一种观点, 即一种模拟方法应该是从严格的 Boltzmann 方程数学推导而来才能得到接受的观点, 就显得过时和不切实际了.

沈青 (2002) 还提出这样一个问题: “解方程好, 还是直接模拟好?” 这个问题关系到未来发展方向, 值得深思. Boltzmann 方程诞生的年代, 分子的真实性和计算机, 更没有什么. 今天的情况已经有了很大的不同. 直接模拟或者分子模拟, 简言之, 就是真实分子模型和计算机的直接结合. 分子的真实性和计算机, 堪称 20 世纪最重要的科技成果, 借助它们的力量, 在许多实际问题中, 分子模拟已经显示出比求解基于简单分子模型的 Boltzmann 方程更为强大的能力.

不过, 这并不意味着 Boltzmann 方程已经过时. 对于 DSMC 方法已经能够很好解决的问题, 再花很多时间去探讨 Boltzmann 方程有无可能做到, 也许意义不大. 但对于实际中非常关心, 而 DSMC 或其他直接模拟方法尚未很好解决的问题, 传统力学解方程的思路仍很重要, 应继续保持并充分借鉴.

我国学者在 Boltzmann 方程简化模型的数值求解方法, 特别是跨流域统一格式方面, 取得了重要进展 (Li & Zhang 2009, Xu & Huang 2010, Wang & Xu 2012), 有兴趣者可参阅李启兵和徐昆 (2012) 在本刊的最新的综述文章.

3.1 高速稀薄气流问题

DSMC 方法是目前唯一有能力模拟实际情况三维高速稀薄气体流动的方法. 一个典型的例子是强激波结构. Muntz 等 1966 年就用电子束荧光技术, 测量 Mach 数 25 的氮激波结构中的分子速度分布函数, 但因与 Boltzmann 方程的 Mott-Smith 解 (1951) 不相符而未发表. 20 多年后, 该研究小组用 DSMC 方法分析实验条件下的激波结构, 结果与实验相符甚好, 才在 Science 上公布 (Pham-Van-Diep, Erwin & Muntz 1989).

DSMC 方法实际应用方面的成功例子很多, 如美国航天飞机升阻比计算与飞行测量数据的出色相符 (Bird 1990)、我国长征 -4B 火箭末子级剩余推进剂在轨排放扰动力矩的成功预测 (樊菁等 2004)、美国通讯衰减飞行试验电子密度分布计算与测量数据的满意比较 (樊菁等 2012), 等等. 后两个例子反映了我国应用 DSMC 方法解决航天实际问题的能力, 这里略加展开介绍.

3.1.1 长征 -4B 火箭末子级剩余推进剂在轨排放的扰动力矩

鉴于空间碎片对在轨飞行器的威胁, 世界上主要航天国家达成协议, 设法从源头上减少新的空间碎片. 为落实此协议, 中国航天相关部门采取的重要措施之一, 就是在轨排放火箭末子级贮箱内的剩余推进剂, 以避免氧化剂 N_2O_4 较长时间后蚀穿隔板, 与燃料偏二甲肼接触爆炸, 产生空间碎片. 遗憾的是, 1999 年 5 月我国第一次剩余推进剂在轨排放飞行试验发生事故, 导致长征 -4B 末子级的姿态发散, 因所排放的推进剂具有很强的腐蚀性, 刚分离仍在附近的卫星受到威胁. 事故的原因是什么? 改进后的排放方式是否安全? 实际部门非常关心 (图 1).

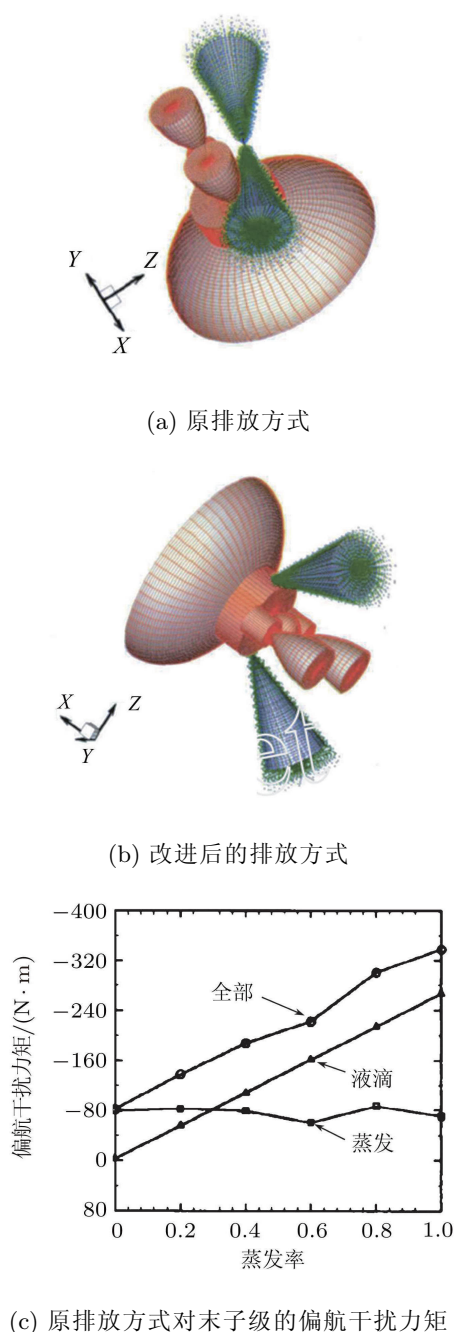


图 1 长征 -4B 火箭剩余燃料偏二甲肼在轨排放的两种方式, 与计算得到的原方式对末子级偏航干扰力矩 (樊菁等 2004)

这个问题相当复杂, 不仅几何外形复杂, 而且包含射流失稳、液滴蒸发等过程。我们采用 Lagrange 方法追踪排放后各个推进剂液滴的运动轨迹及其表面在太空中的蒸发冷凝过程, 并

将相应的子程序嵌入中国科学院力学研究所发展的三维稀薄气体通用模拟程序 3R 之中, 以追踪稀薄蒸气分子的运动和碰撞, 然后通过统计平均, 求出排放推进剂对长征 -4B 末子级的扰动力和力矩。

长征 -4B 火箭原排放方式的飞行遥测数据表明: 剩余燃料偏二甲肼在轨排放开始后, 火箭偏航方向很快出现较大的干扰力矩, 超过了末子级姿控火箭调节范围, 引起偏航姿态角发散。我们的计算得到的偏航力矩, 如图 1 所示, 依赖打在箭体表面的偏二甲肼液滴的蒸发率 α , 其绝对值在 $\alpha = 0$ 时最小, 约 $80 \text{ N}\cdot\text{m}$, 也超出了姿控火箭的范围。

对此计算结果, 实际部门开始颇为困惑, 因为在飞行试验之前, 他们做过地面喷流试验, 干扰力矩的测量值很小, 到了天上为什么会这么大? 问题出在地面试验忽略了空间环境的影响。在轨排放高度距离地面几百公里, 环境压力约为地面的 $1/10^{12}$ 。在此高真空环境下, 偏二甲肼液滴表面分子迅速蒸发, 内能转化为动能, 其中部分作用在箭体表面, 造成远大于地面的扰动力矩。

我们也计算了改进排放方式下的偏二甲肼气液固羽流场, 得到的扰动力矩的偏航、俯仰和滚转分量的绝对值分别为 $0.25 \text{ N}\cdot\text{m}$, $0.26 \text{ N}\cdot\text{m}$ 和 $7.45 \text{ N}\cdot\text{m}$, 都很小, 在姿控火箭可调控的安全范围之内。这些预测与实际飞行遥测数据一致。值得说明的是, 改进排放方式的预测结果, 我们是在实际发射前一个半月得到并提交给实际部门的, 反映了 DSMC 方法和我们的计算程序解决实际复杂问题的能力。

3.1.2 美国通讯衰减飞行试验电子密度分布

高速再入气动加热, 使得飞行器周围的气体分子部分电离, 形成等离子体。从宏观看, 等离子体像电介质一样对电磁波有吸收, 反射和折射的作用。对频率为 ν 的电磁波的折射率

$n = \sqrt{1 - v_p^2/v^2}$, 当 $v < v_p$ 时, n 为虚数, 电磁波在等离子体界面全反射, 对通讯而言, 意味着信号中断, 即“黑障”, 其中 $v_p \approx 9\sqrt{n_e}$ Hz 是 Langmuir 频率, n_e 是电子数密度 (单位: m^{-3}).

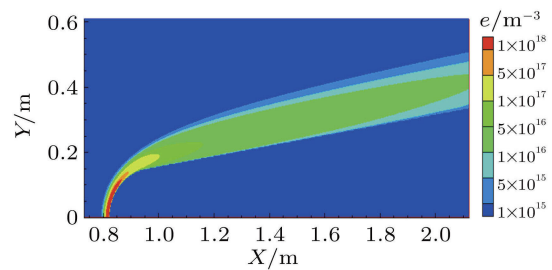
准确地了解电子数密度的分布, 是恰当选择通讯波段和天线位置的基础. 图 2 给出了我们利用微量组分离 (TSS) 方法计算得到的美国 RAM C-II 试验条件下的电子密度分布, 并与飞行测量数据进行了比较 (樊菁, 张羽淮, 蒋建政 2012). RAM 是通讯衰减测量的英文缩写, 为了弄清通讯中断机理, 美国在 1960~1970 年间开展的系列试验, RAM C-II 是其中的一次, 试验外形为常见的球锥, 再入速度 7.8 km/s, 飞行高度 80 km 附近时, 处在稀薄气体过渡流区.

G. A. Bird (1989) 最早尝试用 DSMC 方法计算此时的电子数密度分布, 未获成功. 根本原因在于 RAM C-II 流场中的电子的摩尔浓度很小, 大约为 0.1%, 与空气来流中的氮分子和氧分子的数密度相比, 低 3~5 个数量级. 这些微量组分, 尽管对于飞行器的气动力、热以及流场中主要的中性分子和原子的影响都很小, 但对于通讯和目标特性等的影响却很大, 必须考虑. 如前所述, 在 DSMC 方法中, 真实气体由大量模拟粒子代表. 受计算机内存和速度的限制, 实际模拟粒子总数最多约 $10^7 \sim 10^8$, 因此每个模拟粒子最少要代表约 $10^{12} \sim 10^{13}$ 个真实粒子. 但对于 RAM C-II 这种情况, 上述做法使得整个流场中的模拟电子和离子个数太少, 导致严重的统计误差, 乃至物理失真. Bird 之后, 国际稀薄气体动力学几位著名学者都颇为关注此类问题, 有的持续研究近 20 年, 仍未能彻底解决.

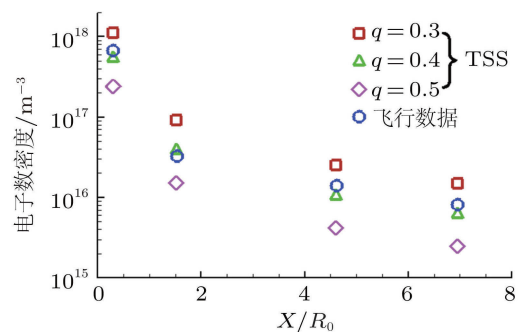
为了克服这个困难, 我们提出了 TSS (trace species separation) 方法 (樊菁, 张羽淮, 蒋建政 2012). 该方法的基本想法是将主要组分和微量组分解耦计算, 首先用 DSMC 方法求出稀薄气流中主要组分的密度、速度和温度分布, 然后

在主要组分保持不变的条件下, 再用 DSMC 方法和化学反应速率方程, 求出微量组分的摩尔分布. 将 TSS 方法纳入我们的 3R 程序中, 计算的几何外形和具体参数与 RAM C-II 飞行试验相同, 计算主要组分和微量组分的模拟粒子总数分别为 6×10^7 和 3×10^5 , 在中国科学院力学研究所的 Dell M910 刀片服务器上, 所用 CPU 个数和 CPU 小时分别为 64 和 24、32 和 6.

TSS 计算结果与测量数据的相符甚好. 令人高兴的是, 这种符合未以各种过于人为的假设为前提, 从而使高超声速稀薄气流微量组分 DSMC 计算这个持续多年的难题, 得到了满意的解决. 图 2 中的参数 q 来自 TSS 计算中用到的 Park 化学反应模型. Park (1990) 评估各种高



(a) TSS 方法给出的电子密度分布场



(b) 飞行数据来自微波反射计 (Grantham 1970), 分别安装在飞行器表面的 4 个位置 (横坐标 X 是与头部顶点的轴向距离, R_0 是球头半径), 用于测量其所在法线方向的最大电子数密度

图 2 RAM C-II 试验条件下, 高度 81 km 时, TSS 方法计算得到的电子密度分布, 及其与飞行测量数据的比较 (樊菁, 张羽淮, 蒋建政 2012)

温空气化学反应速率的实验数据后, 引入平均温度 $T_a = T_v^q \cdot T_{t-r}^{1-q}$, T_v 是振动温度, T_{t-r} 是平动和转动温度, 以反映热力学非平衡效应对反应速率的影响, 并建议 q 的取值介于 0.3 和 0.5 之间. 图 2 的比较表明: 热力学非平衡效应对电子密度影响不小, 不可忽略, 而 Park (1990) 推荐的高温空气化学反应模型是可信赖的.

3.1.3 DSMC 方法的碰撞模型

碰撞模型是 DSMC 方法的关键. 从早期十分简单的硬球模型, 到如今能很好反映实际气体行为的碰撞模型, 经历了如下的发展过程, 从中也可体会到以分子为对象的直观模拟的优点.

(1) 1963 年, Bird 在发明 DSMC 方法的最早论文中, 采用的是硬球模型.

(2) 1981 年, Bird 提出 VHS (variable hard sphere, 变径硬球) 模型, 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依赖相对速度的特点, 可在一定的温度范围内保证黏性系数随温度的变化与实际气体一致.

(3) 1992 年, Koura 和 Matsumoto 指出: VHS 模型的黏性碰撞截面和扩散碰撞截面之比, 与实际不符, 在多组元混合气体扩散起重要作用的情况下, 会给出与实际偏离较大的结果. 为此他们提出 VSS (variable soft-sphere, 变径软球) 模型, 使碰撞后散射角依赖分子相对运动速度, 以保证黏性系数和扩散系数随温度的变化同时与实际气体一致.

(4) 1993 年, Hassan 和 Hash 指出: VHS 模型只考虑了分子之间的强排斥作用势, 忽略了它们之间的弱吸引作用势, 而后者在低温情况下是特别重要的. 为此他们提出 GHS (generalized hard-sphere, 广义硬球) 模型, 以使在更宽广的温度范围内黏性系数随温度的变化与实际气体一致.

(5) 2002 年, 樊菁提出 GSS (generalized soft-sphere, 广义软球) 模型. 该模型可以在更宽广的温度范围内, 同时保证黏性系数和扩散系数随温度的变化与实际气体相同.

(6) 2008 年, Kim, Kwon 和 Park, 利用最新的黏性系数和扩散系数数据, 将 GSS 模型的适用范围, 拓展到 50000 K 的高温以及 22 种组分、191 种碰撞对, 并证明采用他们提供的参数后, GSS 模型给出的气体输运性质与实验数据和量子力学的从头计算结果的相符情况, 远优于其他模型.

(7) 2010 年, Gu, Watkins 和 Koplík 提出修正的 GSS 模型, 以实现 DSMC 方法和分子动力学方法的耦合计算.

Bird (1994) 和沈青 (2003, 2005) 的专著, 对于 DSMC 方法碰撞模型有更为全面和系统的介绍, 包括分子内能激发、电子能级跃迁、解离/复合反应、置换反应、电离反应、热辐射, 以及气体分子与表面的相互作用模型等, 有兴趣者可以参阅.

3.2 低速稀薄气流问题

低速稀薄气流引起广泛的重视, 是在 20 世纪 80 年代末 MEMS 出现之后的. Ho 和 Tai (1998) 的研究小组, 在微槽道气流实验中观测到的压力分布和质量流量, 显著偏离经典 Navier-Stokes 解, 引起流体力学界的热烈关注.

其实, 这个现象对于稀薄气体动力学界来说并不陌生, Knudsen 在大约 90 年前就已发现. 如果说有什么不同的话, 就是 Ho 和 Tai 实验中的微槽道是芯片加工技术做成的, 只有大约 $1 \mu\text{m}$ 宽, 这在 Knudsen 时代是难以想象的. 尽管如此, 这个问题还是引起了国际稀薄气体动力学研究者的高度重视, 一是因为 MEMS 为学科发展提供了新的机遇, 二是因为他们最可信赖的研究工具——DSMC 方法在这里遇到了麻烦.

3.2.1 DSMC 方法的统计涨落

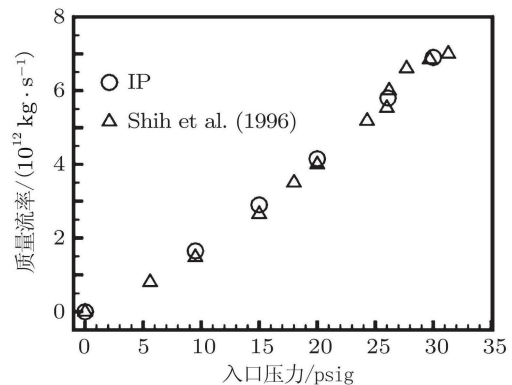
DSMC 计算结果中的统计散布源自分子无规则热运动. 统计散布的大小, 正比于分子热运动速度, 反比于统计样本个数的平方根. 为了获得统计意义下收敛的计算结果, DSMC 统计散布的量级应小于气流速度. 微槽道实验中, 气流速度约为 0.2 m/s, 室温下氮气分子的最可几热运动速度约 400m/s, 要使统计散布的量级减小到 0.02 m/s, 统计样本数需要达到 4×10^8 . 如此大样本数对应的计算量, 即使超级计算机也难以承受. 1998 年, Bird 发表题为“DSMC 的最新进展与现实挑战”的文章, 认为“出现在 DSMC 计算中的涨落被公认为该方法在实际中和思想上最严重的困难”. Oran, Oh 和 Cybyk (1998) 也在《流体力学年鉴》以“DSMC: 最新进展与应用”为题撰文指出:“未来的挑战在于最新计算机技术对于利用 DSMC 计算低速、高 Knudsen 流动的限制”.

3.2.2 信息保存方法

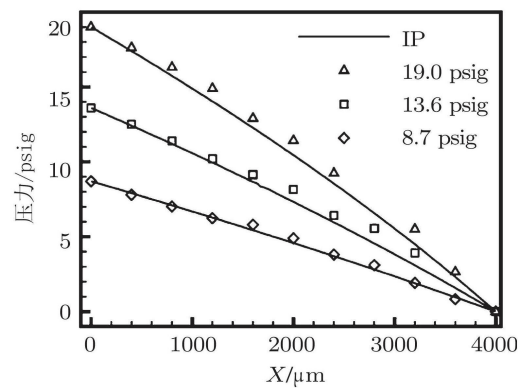
为了应对这个挑战, 我们提出了信息保存 (information preservation, IP) 方法 (Fan & Shen 1999). IP 方法赋予每个模拟分子两个速度: 一个是分子速度, 用来计算分子运动轨迹, 计算规则与 DSMC 方法相同; 另一个是信息速度, 对应于单个模拟分子所代表的大量真实分子的集体速度, 宏观物理量如流动速度、表面剪应力等通过信息速度的统计平均获得. IP 方法首先用于单方向流动问题, 非常成功 (Fan & Shen 1999, 2001); 接着用于实验条件下的微槽道气流和微平板绕流, 均得到与测量数据相符的结果 (Cai et al. 2000, Shen, Fan & Xie 2003, Sun & Boyd 2004), 例如图 3. IP 方法的理论基础方面, Sun & Boyd (2005) 基于 Maxwell 输运方程, 建立了信息速度和信息温度的控制方程, 并被推广到多维和多温度情况 (Masters & Ye 2007, Zhang, Fan & Jiang 2011). 张俊和樊菁利用 IP 方法分

析 Rayleigh-Benard 失稳的微观机制 (Zhang & Fan 2009); 在沈青先生指导下, 李军的博士论文利用 IP 方法计算硬盘三维读写头复杂几何流场, 得到与实际相符的结果 (Li, Shen & Fan 2009). 这些工作显示了 IP 方法已经具备了预测非定常、三维、低速稀薄气体流动的能力.

IP 方法的实质是用分子运动输运大量分子的集体行为. DSMC 方法以分子作为研究对象, 每个分子的质量、动量和能量通过分子运动实现, 这种输运方式适合于全部流动领域.



(a) 质量流率与入口压力的关系



(b) 不同入口压力下, 沿流向的压力分布

图 3 在 Shih 等 (1996) 的微槽道实验条件下, IP 方法计算结果与测量数据的比较 (Shen, Fan & Xie 2003). 实验气体为氦气, 微槽道的长、宽、高分别为 $4000 \mu\text{m}$ 、 $40 \mu\text{m}$ 和 $1.2 \mu\text{m}$, 出口压力 1 atm

然而, 计算机中追踪的气流模拟分子个数远小于真实分子个数, 一个模拟分子代表着数目巨大的真实分子, 其无规则热运动所引起的宏观物理量统计散布, 相应地远大于它所代表的大量真实分子的平均涨落. 连续介质方法, 如 Navier-Stokes 方程, 以大量分子的集体行为作为研究对象. 这些集体行为通常以流动速度、温度和密度表征, 通过本构关系输运, 不受分子热运动涨落的影响, 但经典的本构关系只适用于近平衡的连续介质区, 在微尺度气流关心的过渡流区乃至自由分子流区不适用. 概括地说, IP 方法综合了 DSMC 方法和连续介质方法两者的优点, 这是它成功的原因所在.

3.3 分子模拟方法的拓展

数值模拟方法可以大致分为两类: 连续介质方法和粒子方法. 鉴于 DSMC 方法在稀薄气体中的成功, 将其推广应用于更广泛的领域, 是容易想到, 也很能引起兴趣的工作, 当前颇为活跃. 这样做的目的, 一是希望在分子水平上了解和认识各种流动演化的机制, 其意义在本文开篇已经说明, 二是对于许多复杂流动问题, 究其根本, 在于不同时空尺度上的非平衡输运, DSMC 方法在过渡流区的成功表明, 对于这类问题, 分子模拟方法可能更加适合.

流动稳定性是流体力学非常关注和熟悉的问题. 下面以它为例, 说明分子模拟方法在向其他领域延拓中面临的问题和取得的进展.

稀薄气体流动和连续介质流动通常以 Kn 数 0.01 分界. 随着 Kn 数进一步增大或减小, 都将有过渡区出现, 前者通向自由分子流, 后者通向湍流. 在通向自由分子流的过渡区, 分子模拟方法表现出色; 在通向湍流的转捩区, 分子模拟方法是否也能有所作为呢? 这个问题吸引了许多研究者, 包括 G. A. Bird (1996, 1998)、分子动力学的发明者 B. J. Alder (2000, 2012) 等等.

3.3.1 流动稳定性的微观机制

分子模拟方法用于流动稳定性, 从原理上讲没有问题, 在无量纲控制参数相对小的情况下, 已经取得一些新的认识, 例如 Rayleigh-Benard 问题中, 热传导向热对流的转捩, 首先有一个孕育过程, 大约持续 4000 个分子平均碰撞时间, 然后经过约 1200 个分子平均碰撞时间完成转捩, 整个过程在 Nusselt 数随时间的演化中清晰可见 (图 4, 横坐标为无量纲时间, 无量纲因子 $t_s = 20\tau_c$, τ_c 为分子平均碰撞时间); 转捩的原因在于微观涨落关联而非外界扰动 (Zhang & Fan 2009b); 随着 Rayleigh 数 (Ra) 的增大, 等效扩散系数大幅增加, 标志着分子运动从个体、随机方式向集体、有序方式的转变 (Zhang, Fan & Fei 2010).

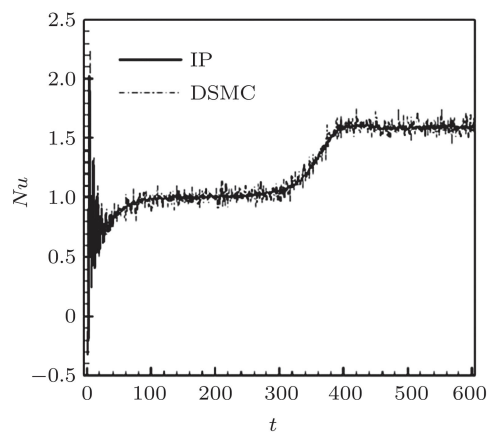


图 4 IP 方法计算得到的 $Ra=3190$ 时, Rayleigh-Benard 转捩过程中, 平板无量纲热流 Nusselt 数随时间的变化情况 (Zhang & Fan 2009a)

3.3.2 扩散信息保存方法

对于实际非常关心的高 Ra 数或高 Re 数情形, 分子模拟的具体实现有很大困难. 以 DSMC 方法为例, 该方法的本质是在一个时间步长内解耦分子运动和碰撞, 并从一个网格内所有分子对中选出发生碰撞的分子对. 只有当时间步长小于分子平均碰撞时间、网格尺度小于分子

平均自由程,这种做法在物理上才是合理的. 以 DSMC 计算的黏性系数相对误差 ($\Delta\mu/\mu$) 为例, Alexander, Garcia & Alder (1998) 与 Hadjiconstantinou (2000) 的分析表明: 它与时间步长 Δt 和网格大小 Δx 的平方成正比. 当 Δt 和 Δx 分别为分子平均碰撞时间和平均自由程的 1/3 时, $\Delta\mu/\mu \sim 1\%$; 当 Δt 和 Δx 与平均碰撞时间和平均自由程相当时, $\Delta\mu/\mu \sim 10\%$. 在标准大气条件下, 空气分子的平均自由程和平均碰撞时间分别约为 6×10^{-8} m 和 2×10^{-10} s. 由于 Kn 数反比于 Re 数和 Ra 数, Re 数或 Ra 数很大, 意味着 Kn 数很小, 即流动的特征尺度远大于分子运动特征尺度, 即使用当前最快的计算机, 也很难满足 DSMC 在这种情况下时间步长和网格大小要求.

一些研究者采用扩散观点, 将分子运动和碰撞耦合在一起考虑 (Jenny, Torrilhon & Heinz 2010, Gorji, Torrilhon & Jenny 2011). 这种做法从源头上消除 DSMC 对于时间步长和网格大小的苛刻限制, 其实现的关键在于如何实时获得每个分子所在网格的流动速度和温度. Jenny 等 (2010) 和 Gorji 等 (2011) 采用与 DSMC 相同的办法, 通过分子速度的统计平均来获得. 遇到的问题, 正如他们自己说的那样: “新模型有着和 DSMC 相同的随机噪声”, “低 Mach 数流动噪声带给两种方法的困难一如所料”.

最近, 我们将扩散观点和 IP 方法结合起来, 提出了一种扩散信息保存 (diffusive information preservation, 简化 D-IP) 方法 (Fei & Fan 2012). 其要点是, 经过一个时间步长 Δt , 模拟分子 k 的新的空间坐标

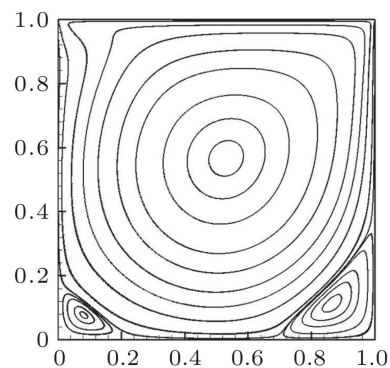
$$r_{k,i}^{t+\Delta t} = r_{k,i}^t + u_{k,i}^t \cdot \Delta t + \Delta r_{k,i}^D, \quad (1)$$

这里 $u_{k,i}^t$ 是局部对流速度, 也即该分子的 IP 速度, 扩散项 $\Delta r_{k,i}^D$ 由 Langevin 方程的 Chandrasekhar 分布得到.

D-IP 方法避免了 DSMC 的时间步长和网格大小的限制, 同时克服了先前分子扩散方法面临的统计噪声困难, 用于计算小 Kn 数 ($10^{-3} \sim 10^{-4}$) 单方向流动问题、二维槽道流动和方腔流动, 在时间步长和网格大小分别是分子平均碰撞时间和平均自由程的几十倍乃至几百倍的情况下, 均得到非常满意的结果. 以方腔流动为例, D-IP 方法计算得到的速度分布与 Ghia (1982) 的经典结果相符甚好, 图 5 是 D-IP 给出的流线等值线, 涡结构清晰, 计算参数如表 1, 其中 $Re = U_{lid} \times L/\nu$, L 是方腔边长, U_{lid} 是方腔顶边的驱动速度, λ 是分子平均自由程, Δx 和 Δt 分别是网格尺寸和时间步长, L 是方腔边长, 与 DSMC 方法的要求相比, 增大了 2~3 个. 此工作在 28 届国际稀薄气体动力学会议 (RGD 28) 上报告, 引起与会专家的兴趣和重视, 为进一步开展流动稳定性乃至湍流的分子模拟研究, 提供了一个有希望的工具.

表 1 驱动方腔流动的 D-IP 计算参数
(Fei & Fan 2013)

Re	100	3 200	10 000
L	500λ	$16\ 000\lambda$	$5\ 000\lambda$
$U_{lid}/(\text{m/s})$	37.35	37.35	37.35
Δx	2λ	67λ	100λ
Δt	$2\tau_c$	$6\tau_c$	$10\tau_c$



(a) $Re = 1000$

图 5 不同 Reynolds 数下, D-IP 方法计算得到驱动方腔流线等值线 (Fei & Fan 2013)

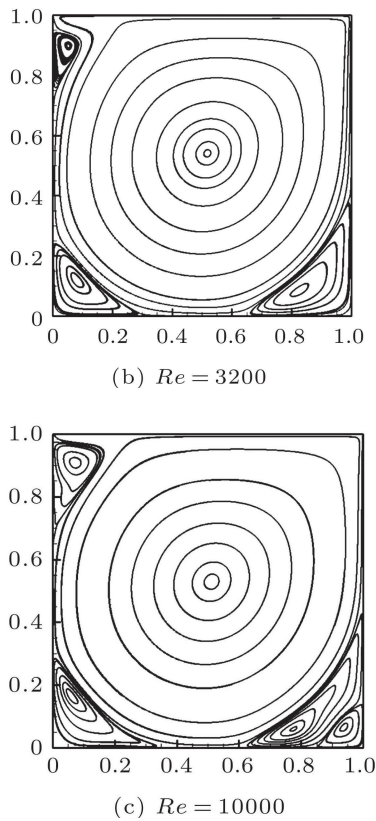


图 5 不同 Reynolds 数下, D-IP 方法计算得到驱动方腔流线等值线 (Fei & Fan 2013)(续)

分子模拟方法的拓展, 当然不限于流动稳定性问题, 像颗粒流等, 也是研究热点, 在 RGD 28 上专门设立了分会场, 有兴趣者可参阅 J. Dufty (2012) 的综述报告.

4 学科前沿问题

从 1956 年开始, 每两年召开一次的国际稀薄气体动力学会议, 聚集了该领域世界各国的专家学者, 汇集了该领域几乎所有重要的最新成果. 从会议的主题和分会场的设立, 即可了解到该领域的学科前沿问题.

最近 3 届国际稀薄气体动力学会议, 分别在日本京都、美国加州和西班牙萨拉贡萨召开 (Rarefied Gas Dynamics 2008, 2010, 2012), 每届会议都设 20 个左右的分会场. 这些分会场的主题, 以英文名称的首个字母为序, 加上相应的中

文译名, 分列如下:

- 1) Boltzmann and related equations, Boltzmann 和相关方程 (08, 10, 12)
- 2) Clusters and aerosols, 团簇和气溶胶 (08, 10, 12)
- 3) DSMC and related simulations, DSMC 和相关模拟 (08, 10, 12)
- 4) Experimental procedures in RGD, 稀薄气体动力学中的实验方法 (08, 10, 12)
- 5) Gas-surface interactions, 气体表面相互作用 (08, 10, 12)
- 6) Granular fluids, 颗粒流体 (12)
- 7) Hybrid methods, 杂交方法 (08, 10, 12)
- 8) Jet and plumes, 射流和羽流 (08, 10, 12)
- 9) Kinetic and transport theory, 动理论和输运理论 (08, 10, 12)
- 10) Micro- and nano-scale flows and devices, 微、纳尺度流动和器件 (08, 10, 12)
- 11) Molecular beam and collisions, 分子束和碰撞 (08, 10, 12)
- 12) Molecular dynamics simulations, 分子动力学模拟 (08, 10, 12)
- 13) Numerical solutions of kinetic equations, 动理论方程的数值解 (08, 10, 12)
- 14) Particle methods for flow simulations, 流动模拟的粒子方法 (12)
- 15) Plasma flows and processing, 等离子体流动与工艺 (08, 10, 12)
- 16) Plasma propulsion, 等离子体推进 (10)
- 17) Radiation and plasma flows, 辐射和等离子体流动 (10)
- 18) RGD in astrophysics, 天体物理中的稀薄气体动力学 (08, 10, 12)
- 19) Reaction and relaxation processes, 反应和松

弛过程 (08, 10, 12)

20) Space vehicles aerodynamics, 空天飞行器气动力学 (08, 10, 12)

21) State-to-state methods, 态态方法 (10)

22) Turbulence, 湍流 (10)

23) Vacuum gas dynamics, 真空气体动力学 (08, 10)

每个主题末了括号中的数字, 表示有哪些年度设立了该主题. 从中可见, 这 3 届会议的分会场主题大致是相同的, 基本反映了稀薄气体动力学领域的研究方向. 另一个值得注意的特点是, 在 2010 年美国召开的第 27 届会议, 增设了 4 个主题: 等离子体推进、辐射和等离子体流动、态态方法、湍流; 2012 年 7 月刚在西班牙召开的 28 届会议, 增设了两个主题: 颗粒流体、流动模拟的粒子方法. 这些新增主题, 反映了美、欧在该领域的研究动态, 在某种程度上也反映了稀薄气体动力学最新的拓展趋势与前沿问题所在, 特别是湍流, 过去普遍认为与分子运动尺度无关, 但正如 3.3.2 节中 D-IP 方法计算结果所示, 分子运动模型与高速计算机直接结合, 为研究这个经典难题提供了另一种途径, 因而也纳入稀薄气体动力学的研究范畴, 生动地体现了现代科技内在交融的特点.

5 与实际需求结合的重大问题

稀薄气体动力学的应用, 突出体现在 3 个领域: 航天工业、真空技术、MEMS.

由于喷气推进技术的发展, 飞行高度不再受到限制, 在几十公里以上的高空, 空气稀薄, 不能当做经典流体力学中的连续介质看待, 必须考虑稀薄气体效应. 典型的例子是美国“哥伦比亚”航天飞机和我国“神舟”飞船, 它们在回地过程中, 平衡攻角由于稀薄气体效应都显著偏离地面设计值, 威胁着航天器的回地安全. 当前特别感兴趣的导弹防御系统、火星探测、临

近空间超高速飞行器等, 都面临许多关键的高速非平衡稀薄气体问题.

真空领域的应用出现在 20 世纪 60 年代. 一方面高真空泵的设计需要稀薄气体的知识, 另一方面, 高真空获得技术的发展, 使得人们可以在没有空气干扰的情况下, 重新考虑许多问题. 典型的例子是气相薄膜沉积 (低密度蒸气分子或离子运动到基片表面, 在适宜条件下形成特定功能的薄膜), 几乎都是在真空环境下进行的. 当今极富价值的高新技术领域, 如表面科学、微电子材料加工、纳米结构、先进冶炼等方面, 也都是以真空环境为基础的. 其中遇到各种各样的气体和等离子体流动问题, 由于密度很低, 都需要采取稀薄气体动力学的理论和方法进行研究.

微小机器一直是人类追求的目标. Feymann 在 1959 年美国物理学会年会的演讲中, 就曾设想利用芯片加工技术制造微小机器的可能性, 并预言“到 2000 年, 在人们回首往日之时, 会困惑为什么没有人在 1960 年就开始沿此方向认真钻研”. 随着微电子工业的不断发展, 微加工技术日益成熟, 终于在 1988 年, 美国加州大学伯克莱分校 (Fan, Tai & Muller 1988) 利用微加工技术造出了一台直径约 100 微米的马达. Feymann 的预言提前实现, 也标志着一个极具潜力的新兴产业的诞生. 随着微加工技术进一步发展, 现有 MEMS 特征尺度已达到亚微米量阶. 对于这么小的装置, 当流动介质为气体时, 显著的稀薄气体效应已为许多实验观测所证明. 如何利用稀薄气体理论指导 MEMS 的设计, 无疑是当前和未来相当长时间内的重要问题.

1996 年, 稀薄气体领域的著名学者 E. P. Muntz, 在 J. L. Lumley 等主编的《流体力学研究动态》中, 撰写了题为“稀薄气体动力学”的综述报告, 其中结合实际需要, 提出了 4 个重大问题, 它们分别是:

(1) 发展经过验证的预测技术, 使新的、非平衡辅助材料合成工艺的高效设计成为可能;

(2) 采用非定常、三维、稀薄气体流动预测, 助攻 MEMS 的设计;

(3) 在电磁场存在的情况下, 空间飞行器和各种空间环境的相互作用的精细预测;

(4) 高空导弹羽流在各谱段光学信号的准确预测, 以满足中程弹道导弹快速发现和跟踪的需要。

Muntz 提出的这些问题, 可能更多地结合了当时美国的实际需要, 但也有一定普适性, 即使今天看来也不过时。

航天工业、真空技术、MEMS, 都是当今世界最富价值的产业。稀薄气体动力学在其中的作用, 越来越为各方所认识和重视。结合我国的实际需要, 加强这方面的研究是显见必要的。为此应特别注意加强我国此领域真正能结合实际需要的人才培养, 因为稀薄气体动力学本身是一个交叉学科, 其应用又与尖端技术密切相关, 造就这样的人才所需的学科基础和积累相对更多。可惜的是, 当前我国的科技评价体系, 似乎并不有利于这类人才的成长, 受影响的当然不只是稀薄气体动力学。尽管如此, 下面还是提出几个问题, 供有兴趣者参考。

(1) 过渡流区高超声速三维非平衡流场的精细预测和实验验证。这个问题的应用背景是新型空天超高速飞行器, 与 Muntz 4 个问题中 C 和 D 有关。例如, 当前国内外都非常关注的临近空间, 它的高度范围, 一般认为在 20 ~ 100 km, 也有人认为应更高一点到 200 km。如果飞行器特征长度的量级在 0.1 m, 那么大约从 70 ~ 80 km 到 130 ~ 140 km, 飞行器周围的流场处在过渡流区。超高速激发的各种非平衡物理化学现象, 对于飞行器的气动力、气动热、目标特性等, 有着重要影响。DSMC 方法是进行精细预测的适合工具; 流动实验相似准则是清楚的, 即双尺度律, 但如何在地面满足是一个难题。计算结果的

检验以及外推, 除了依靠与飞行条件部分相似的地面实验, 飞行试验是必要的。

(2) 热层大气的时空演化规律与探测。按照大气层划分, 热层的低界高度约 86 km, 上界高度与太阳活动有关, 在太阳宁静期约为 200 km, 太阳活动期约 500 km。现有的大气研究, 集中于两端, 一端是贴近地球表面的天气, 另一端是远离地表的太空天气。它们之间当然是有联系的, 其结合部就在热层, 对于认识地球周围不同高度大气之间的关联性质, 有着很直接的用途。另外也是临近空间高层飞行器气动设计的必需的输入条件。可靠的测量数据是现有热层大气各种模型校验的关键, 无论是探空火箭还是近地卫星, 由于处在稀薄气体环境之中, 其试验方法、探测手段与数据分析, 都需与精细的三维稀薄气流预测密切结合。

(3) 以气体为介质的 MEMS 功能设计。1996 年以来, 非定常、三维、低速稀薄气体流动的理论预测有很大进展, 可以说 Muntz 的第 2 个问题已基本解决。另一方面, 基于 MEMS 技术的安全“气囊”, 已在新一代汽车中广泛应用, 有效地缓解和降低了交通事故中的人员伤亡。如何利用微尺度气流新的研究进展, 设计出像安全“气囊”那样有重要实用价值的新 MEMS 器件, 既是挑战, 也是机遇。稀薄气体动力学工作者应抓住机遇, 从被动解答 MEMS 设计者提出的微尺度气流问题, 向充分利用微尺度气体流动特点, 积极参与乃至主动设计有重大实用价值的 MEMS 器件的方向转变。

(4) 原子和分子水平的材料制备工艺的定量设计。这是材料制备的理想目标, 过去的 20 多年中有很大的进展。以电子束物理气相沉积工艺为例, 主要包括 3 个步骤: 利用高能电子束, 将块体材料气化为蒸气原子或分子; 蒸气原子或分子在真空室内运动; 部分到达基片表面, 在适当的条件下吸附、成核、形成薄膜。前两个步骤的 DSMC 计算结果与实验相符甚好 (Fan, Boyd

& Shelton 2000, 李帅辉等 2008), 已能满足工艺参数定量设计的要求. 问题出在第三步, 现有的分子模拟方法, 如 MD 等, 与直接模拟实际工艺条件的需求, 还有很大距离. 借鉴 DSMC 方法的思路, 发展能够满足薄膜生长工艺参数预测要求的分子模拟方法, 是一个非常有意义、值得努力尝试的问题.

6 结论: 未来 5~10 年学科发展趋势

粒子模型、Lagrange 方法和连续介质模型、Euler 方法是流体力学分析问题的两种基本途径. 最近 20 多年, 随着计算机的广泛应用和性能的迅速提高, 以及粒子模型的不断充实完善, 前一种途径蓬勃发展, 是流体力学领域最为活跃的前沿方向之一. 稀薄气体动力学处在其中, 发挥着先锋作用. 可以预见, 这种趋势在未来 5~10 年乃至更长时间内都不会改变.

以分子模拟方法为代表的稀薄气体动力学最新研究进展, 已经具备了解决航天工业、真空技术和 MEMS 等领域中相关实际问题的能力, 为相关技术进步和产业升级, 提供了可能和机遇. 未来 5~10 年, 我国应积极推动两者的结合, 一方面应加强基础能力建设, 形成诸如 DSMC 方法、IP 方法等的软件包和数据库, 另一方面应围绕临近空间高速飞行器、有重要实用价值的 MEMS 设计、薄膜沉积等重大需求, 凝练目标, 组织团队, 保证支持, 延续目前的良好势头, 实现学科前沿与重大应用的成功结合.

分子的真实性和电子计算机是 20 世纪最重要的科技成果. 分子模拟将两者结合在一起, 在诸如过渡流区问题的求解中, 已经显示出威力. 将这种途径推广用于其他流体力学问题, 如多流域问题、流动稳定性、颗粒流等, 是当前的研究热点. 尽管还在探索阶段, 但意义重大, 应鼓励精干的力量, 投身其中, 有所作为.

致谢 2011 年上半年, 作者应李家春先生之邀, 着手撰写此文. 起初的目的是为中国科学院学部学科 (流体力学) 发展战略研究报告提供素材. 文章得到张涵信先生、黎作武研究员和孙泉华研究员的建设性意见、有益讨论和帮助, 在此表示感谢.

参 考 文 献

- Alder B J. 2000. Reflections on the Boltzmann equation. In: T. J. Bartel & M. A. Gallis, ed. *Rarefied Gas Dynamics*, AIP Conference Proceedings 585, AIP Press, pp. 1-3
- Alder B J. 2012. Computer experiments on the onset turbulence. In: M. Mareschal & A. Santos, ed. *Rarefied Gas Dynamics*, AIP Conference Proceedings 1501, AIP Press, pp. 30-33
- Alexander F J, Garcia A L, Alder B J. 1998. Cell size dependence of transport coefficients in stochastic particle algorithms *Phys. Fluids*, 10: 1540
- Bird G A. 1963. Approach to translational equilibrium in a rigid sphere gas. *Phys. Fluids*, 6: 1518-1519
- Bird G A. 1981. Monte Carlo simulation in an engineering context. *Progr. Astro. Aero.*, 74: 239-255
- Bird G A. 1990. Application of the DSMC method to the full shuttle geometry. *AIAA-Paper* 90-1692
- Bird G A. 1994. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Oxford: Clarendon Press
- Bird G A. 1997. The initiation of centrifugal instabilities in an axially symmetric flow. In: C. Shen, ed. *Rarefied Gas Dynamics*, Beijing: Peking Univ. Press, pp. 149-154
- Bird G A. 1998. Recent advances and current challenges for DSMC. *Computer Math. Applic.*, 35: 1-14
- Bird R B, Stewart W E, Lightfoot E N. 2002 *Transport Phenomena*. Chemical Industry Press, New York.
- Birkhoff G. 1960. *Hydrodynamics*. 2nd Edition. Princeton: Princeton University Press
- Cai C P, Boyd I D, Fan J, et al. 2000. Direct simulation methods for low-speed microchannel flows. *J. Thermophys. & Heat Trans.*, 14: 368-378
- Cercignani C. 1998. *Ludwig Boltzmann: The Man Who Trusted Atoms*. Oxford: Oxford University Press
- Chapman S, Cowling T G. 1952. *The Mathematical Theory of Non-uniform Gases*. Cambridge: Cambridge University Press,

- Dufty J. 2012. Kinetic theory for active and granular gases. In: M. Mareschal & A. Santos, ed. *Rarefied Gas Dynamics*, AIP Conference Proceedings 1501, AIP Press, p. 11-20
- Fan J, Shen C. 1999. Statistical simulation of low-speed unidirectional flows in transition regime. In: R. Brun, ed. *Rarefied Gas Dynamics*, Toulouse: Cepadus-Editions, Vol. 2, p. 245-252
- Fan J, Boyd I D, Shelton C. 2000. Monte carlo modeling of electron beam physical vapor deposition of yttrium. *J. Vac. Sci. Technol. A*, 18: 2937-2945
- Fan J, Shen C. 2001. Statistical simulation of low-speed rarefied gas flows. *J. Comput. Phys.*, 167: 393-412
- Fan J. 2002. A generalized soft-sphere model for Monte Carlo simulation. *Phys. Fluids*, 14: 4399-4405
- 樊菁, 刘宏立, 蒋建政等. 2004. 火箭剩余推进剂排放过程的分析与模拟. *力学学报*, 36(1): 129-139 (Fan J, Liu HL, Jiang JZ, et al. 2004. Analysis and simulation of discharging residual rocket propellants in orbit. *Acta Mechanica Sinica*, 36(1): 129-139 (in Chinese))
- 樊菁, 张羽淮, 蒋建政. 2012. 高超声速稀薄气流微量组分的计算方法. CSTAM 2012-B03-0174.
- Fan L S, Tai Y C, Muller R S. 1988. Integrated movable micromechanical structures for sensors and actuators. *IEEE Trans. Electron Devices*, 35: 724-30
- Fei F, Fan J. 2012. Molecular simulation of small Knudsen number flows. In: M. Mareschal & A. Santos, ed. *Rarefied Gas Dynamics*, AIP Conference Proceedings 1501, AIP Press, pp. 864-871
- Fei F, Fan J. 2013. A diffusive information preservation method for small Knudsen number flows. *J. Comput. Phys.* (accepted)
- Gorji M H, Torrilhon M, Jenny P. 2011. Fokker-Planck model for computational studies of monatomic rarefied gas flows. *J. Fluid Mech.*, 680: 574-601
- Grantham W L. 1970. Flight results of a 25, 000 foot per second reentry experiment using microwave reflectometers to measure plasma electron density and standoff distance NASA TN D-6062.
- Gu K, Watkins C B, Koplík J. 2010. Atomistic hybrid DSMC/NEMD method for nonequilibrium multiscale simulations. *J. Comput. Phys.*, 229: 1381-1400
- Hadjicostantinou N G. 2000. Analysis of discretization in the direct simulation Monte Carlo method. *Phys. Fluids*, 12: 2634-2638
- Hassan H A, Hash D B. 1993. A generalized hard-sphere model for Monte Carlo simulations. *Phys. Fluids A*, 5: 738-774
- Hirschfelder J O, Curtiss C F, Bird R B. 1954. *Molecular Theory of Gases and Liquids*. New York: John Wiley & Sons
- Ho C M, Tai Y C. 1998. Micro-electromechanical systems (MEMS) and fluid flows. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 30: 579-612
- Kim J G, Kwon O J, Park C. 2008. Modified and expansion of the generalized soft-sphere model to high temperature based on collision integrals. *Phys. Fluids*, 20: 017105
- Koura K, Matsumoto H. 1992. Variable soft sphere molecular model for inverse-power law or Lennard-Jones potential. *Phys. Fluids A*, 3: 2459-2464
- Jenny P, Torrilhon M, Heinz S. 2010. A solution algorithm for the fluid dynamic equations based on a stochastic model for molecular motion *J. Comput. Phys.*, 229: 1077-1098
- Li J, Shen C, Fan J. 2009. IP simulation of micro gas flows under 3-D head sliders. In: T. Abe, ed. *Rarefied Gas Dynamics*, AIP Conference Proceedings 1084, AIP Press, pp. 1003-1008
- 李启兵, 徐昆. 2012. 气体动理学格式研究进展. *力学进展*, 42(5): 522-537 (Li Q B, Xu K. 2012. Progress in gas-kinetic scheme. *Advances in Mechanics*, 42(5): 522-537 (in Chinese))
- Li Z H, Zhang H X. 2009. Gas-kinetic numerical studies of three-dimensional complex flows on spacecraft re-entry. *J. Comput. Phys.*, 228: 1116-1138
- 李帅辉, 舒勇华, 樊菁. 2008. 电子束物理气相沉积钪钛合金薄膜的组分和厚度分布. *中国科学 E*, 38: 1106-1117 (Li S H, Shu Y H, Fan J. Thickness and component distributions of yttrium-titanium alloy films in multi-electron-beam physical vapor deposition. *Sci. China E*, 51: 1470-1482 (in Chinese))
- Millikan R A. 1923. The general law of fall of a small spherical body through a gas, and its bearing upon the nature of molecular reflection from surfaces. *Phys. Rev.*, 22: 1-23
- Masters N D, Ye W. 2007 Octant flux splitting information preservation DSMC method for thermally driven flows. *J. Comput. Phys.*, 226: 2044-2062
- Moss J N. 1987. Nonequilibrium effects for hypersonic transitional flows. AIAA Paper 87-0404
- Mott-Smith H M. 1951. The solution of the Boltzmann equation for a shock wave. *Phys. Rev.*, 82: 885-892
- Muntz E P. 1996. Rarefied gas dynamics. In: J. L. Lumley, A. Acrivos, L. G. Leal & S. Leibovich, ed. *Research Trends in Fluid Dynamics*, New York: AIP Press, pp. 209-219

- Oran E S, Oh C K, Cybyk Z C. 1998. Direct Simulation Monte Carlo: Recent advances and applications, *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 30: 403-441
- Park C. 1990. *Nonequilibrium Hypersonic Aerothermodynamics*. Wiley, NewYork.
- Pham-Van-Diep G C, Erwin D A, Muntz E P. 1989. Nonequilibrium molecular motion in a hypersonic shock wave. *Science*, 245: 624-626
- Rarefied Gas Dynamics*, AIP Conference Proceedings 1084, edited by T. Abe, AIP Press, 2009.
- Rarefied Gas Dynamics*, AIP Conference Proceedings 1333, edited by D. A. Levin, I. J. Wysong, A. A. L. Garcia, AIP Press, 2011.
- Rarefied Gas Dynamics*, AIP Conference Proceedings 1501, edited by M. Mareschal & A. Santos, AIP Press, 2012.
- 沈青, 胡振华, 王岫云. 1970. 黏性薄激波层解 59-90 公里球头锥空气电离流场. 中国科学院力学研究所 207 所 640 分所报告 7006.
- 沈青. 2002. 认识稀薄气体动力学. *力学与实践*, 24(6): 1-14 (Shen Q. 2002. Get acquainted with rarefied gas dynamics. *Mechanics and Engineering*, 24(6): 1-14 (in Chinese))
- 沈青. 2003. 稀薄气体动力学. 国防工业出版社, 北京
- Shen C, Fan J, Xie C. 2003. Statistical simulation of rarefied gas flows in microchannels. *J. Comput. Phys.* 189: 512-526
- Shen C. 2005. *Rarefied Gas Dynamics: Fundamentals, Simulations and Micro-flows*. Springer, Berlin
- Shih J C, Ho C M, Liu J Q, Tai Y C. 1996. Monatomic and polyatomic gas flow through uniform microchannels. *ASME-DSC*, 59: 197
- Sun Q H, Boyd I D. 2004. Drag on a flat plate in low-Reynolds number gas flows. *AIAA J.*, 42: 1066-1072
- Tsien H S. 1946. Superaerodynamics, Mechanics of Rarefied Gases. *J. Aeronaut. Sci.*, 13: 653-664
- Wagner W. 1992. A convergence proof for Bird's direct simulation Monte Carlo method for the Boltzmann equation. *J. Stat. Phys.*, 66: 1011-1044
- Wang R J, Xu K. 2012. The study of sound wave propagation in rarefied gases using unified gas-kinetic scheme. *Acta Mech. Sin.*, 28: 1022-1029
- Xu K, Huang J C. 2010. A unified gas-kinetic scheme for continuum and rarefied flows. *J. Comput. Phys.*, 229: 7747-7764
- Zhang J, Fan J. 2009. Information preservation modelling of Rayleigh-Bénard transition from thermal conduction to convection *Rarefied Gas Dynamics*, AIP Conference Proceedings 1084, edited by T. Abe, AIP Press, pp. 359-364
- Zhang J, Fan J. 2009. Monte Carlo simulation of thermal fluctuations below the onset of Rayleigh-Bénard convection *Physical Review E*, 79: 056302
- Zhang J, Fan J. 2010. Effects of convection and solid wall on the diffusion in microscale convection flows. *Phys Fluids*, 22: 122005
- Zhang J, Fan J, Jiang J Z. 2011. Multiple temperature model for the information preservation method and its application to nonequilibrium gas flows. *J. Comput. Phys.*, 230: 7250-7265

(责任编辑: 黎作武)

Rarefied gas dynamics: Advances and applications

FAN Jing[†]

Key State Laboratory of High Temperature Gas Dynamics, Institute of Mechanics,
Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China

Abstract In this review, we sketch the timeline on the development of rarefied gas dynamics. Major achievements over the past 20–30 years are treated intensively, particularly the great progress and application of molecular simulation approaches such as the direct simulation Monte Carlo (DSMC) method and the information preservation (IP) method. We summarize the rarefied gas flows in the context of aerospace engineering, vacuum industry, micro-electro-mechanical systems, as well as topics in recent International Symposia on Rarefied Gas Dynamics (2008, 2010 & 2012). Based on these discussions, the subject frontier and several grand challenges associated with applications are pointed out, including accurate prediction and experimental verification of hypersonic nonequilibrium three-dimensional flow fields in transition regime, spatially and temporally evolving pattern and measurement of the thermosphere, design and optimization of MEMS with gaseous medium, quantitative design at atomistic level of film deposition in vacuum.

Keywords rarefied gas flow, molecular simulation, hypersonic vehicle, MEMS, film deposition



樊菁, 1965 年出生, 1987 年毕业于北京大学力学系, 1996 年中国科学院力学研究所博士。现任中国科学院力学研究所研究员、所长, 《力学进展》主编, 第 29 届国际稀薄气体动力学会议主席。

[†] E-mail: jfan@imech.ac.cn