

“十三五”国家重点出版物出版规划项目·重大出版工程

高超声速出版工程

# 分子气动力学及 气体流动的直接模拟

〔英〕G. A. Bird 著

方明 李志辉 译

黄霞 彭傲平 校



科学出版社

“十三五”国家重点出版物出版规划项目·重大出版工程

高超声速出版工程

# 分子气动力学及 气体流动的直接模拟

[英] G. A. Bird 著

方明 李志辉 译

黄霞 彭傲平 校

科学出版社

北京

## 内 容 简 介

本书是稀薄气体动力学的经典著作,既包括稀薄气体动力学的基本理论和计算模型,也包括过渡流区流动分析理论和数值方法的简要介绍,特别是详细陈述了直接模拟蒙特卡罗方法的基本原理、数理模拟及其在零维、一维、二维、轴对称和三维流动中的具体应用。附录给出了代表性气体性质、相关数学基础、演示程序及其总结。

本书可作为空气动力学专业高年级本科生和研究生的教材,也可作为从事稀薄气体动力学研究人员的参考书。

*Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows, Second Edition* was originally published in English in 1994. This translation is published by arrangement with Oxford University Press. China Science Publishing & Media Ltd. (Science Press) is solely responsible for this translation from the original work and Oxford University Press shall have no liability for any errors, omissions or inaccuracies or ambiguities in such translation or for any losses caused by reliance thereon.

英文版原书《分子气动力学及气体流动的直接模拟》于1994年出版。中文翻译版由牛津大学出版社授权出版。中国科技出版传媒股份有限公司(科学出版社)对原作品的翻译版本负全部责任,且牛津大学出版社对此类翻译产生的任何错误、遗漏、不准确之处或歧义以及任何损失概不负责。

### 图书在版编目(CIP)数据

分子气动力学及气体流动的直接模拟 / (英) G. A. 伯德 (G. A. Bird) 著; 方明, 李志辉译. — 北京: 科学出版社, 2019.9  
书名原文: *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*

“十三五”国家重点出版物出版规划项目 重大出版工程  
高超声速出版工程

ISBN 978-7-03-061435-3

I. ①分… II. ①G… ②方… ③李… III. ①稀薄气体动力学—研究 ②稀薄气体流动—研究 IV. ①O354

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2019) 第 110167 号

责任编辑: 徐杨峰 / 责任校对: 谭宏宇  
责任印制: 黄晓鸣 / 封面设计: 殷 靓

科 学 出 版 社 出 版

北京东黄城根北街 16 号  
邮政编码: 100717

http: // www. sciencep. com

南京展望文化发展有限公司排版

苏州市越洋印刷有限公司印刷  
科学出版社发行 各地新华书店经销

\*

2019 年 9 月第 一 版 开本: B5 (720×1000)

2019 年 9 月第一次印刷 印张: 28 3/4

字数: 500 000

定价: 180.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换)

# 高超声速出版工程 专家委员会

---

## 顾 问

王礼恒 张履谦

---

## 主任委员

包为民

---

## 副主任委员

杜善义 吕跃广

---

## 委 员

(按姓名汉语拼音排序)

艾邦成	包为民	陈连忠	陈伟芳	陈小前
邓小刚	杜善义	李小平	李仲平	吕跃广
孟松鹤	闵昌万	沈 清	谭永华	汤国建
王晓军	尤延铖	张正平	朱广生	朱恒伟

高超声速出版工程·高超声速空气动力学系列

## 编写委员会

主 编

沈 清

---

副主编

艾邦成 陈伟芳 闵昌万

---

编 委

(按姓名汉语拼音排序)

艾邦成 曹 伟 陈坚强 陈伟芳 方 明  
符 松 柳 军 罗金玲 罗振兵 闵昌万  
沈 清 杨基明 叶友达 余永亮 周 禹

## 丛书序

飞得更快一直是人类飞行发展的主旋律。

1903年12月17日,莱特兄弟发明的飞机腾空而起,虽然飞得摇摇晃晃,犹如蹒跚学步的婴儿,但拉开了人类翱翔天空的华丽大幕;1949年2月24日,Bumper-WAC从美国新墨西哥州白沙发射场发射升空,上面级飞行速度超越马赫数5,实现人类历史上第一次高超声速飞行。从学会飞行,到跨入高超声速,人类用了不到五十年,蹒跚学步的婴儿似乎长成了大人,但实际上,迄今人类还没有实现真正意义的商业高超声速飞行,我们还不得不忍受洲际旅行需要十多个小时甚至更长飞行时间的煎熬。试想一下,如果我们将来可以在两小时内抵达全球任意城市的时候,这个世界将会变成什么样?这并不是遥不可及的梦!

今天,人类进入高超声速领域已经快70年了,无数科研人员为之奋斗了终生。从空气动力学、控制、材料、防隔热到动力、测控、系统集成等众多与高超声速飞行相关的学术和工程领域内,一代又一代科研和工程技术人员传承创新,为人类的进步努力奋斗,共同致力于推动人类飞得更快这一目标。量变导致质变,仿佛是天亮前的那一瞬,又好像是蝶即将破茧而出,几代人的奋斗把高超声速推到了嬗变前的临界点上,相信高超声速飞行的商业应用已为期不远!

高超声速飞行的应用和普及必将颠覆人类现在的生活方式,极大地拓展人类文明,并有力地促进人类社会、经济、科技和文化的发展。这一伟大的事业,需要更多的同行者和参与者!

书是人类进步的阶梯。

实现可靠的长时间高超声速飞行堪称人类在求知探索的路上最为艰苦卓绝的一次前行,将披荆斩棘走过的路夯实、巩固成阶梯,以便于后来者跟进、攀登,

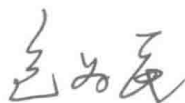
意义深远。

以一套丛书,将高超声速基础研究和工程技术方面取得阶段性成果和宝贵经验固化下来,建立基础研究与高超声速技术应用的桥梁,为广大研究人员和工程技术人员提供一套科学、系统、全面的高超声速技术参考书,可以起到为人类文明探索、前进构建阶梯的作用。

2016年,科学出版社就精心策划并着手启动了“高超声速出版工程”这一非常符合时宜的事业。我们围绕“高超声速”这一主题,邀请国内优势高校和主要科研院所,组织国内各领域知名专家,结合基础研究的学术成果和工程研究实践,系统梳理和总结,共同编写了“高超声速出版工程”丛书,丛书突出高超声速特色,体现学科交叉融合,确保了丛书的系统性、前瞻性、原创性、专业性、学术性、实用性和创新性。

该套丛书记载和传承了我国半个多世纪尤其是近十几年高超声速技术发展的科技成果,凝结了航天航空领域众多专家学者的智慧,既可为相关专业人员提供学习和参考,又可作为工具指导书。期望本套丛书能够为高超声速领域的人才培养、工程研制和基础研究提供有益的指导和帮助,更期望本套丛书能够吸引更多的新生力量关注高超声速技术的发展,并投身于这一领域,为我国高超声速事业的蓬勃发展做出力所能及的贡献。

是为序!



2017年10月

## 原著作者中文版序

本书是 1976 年出版的牛津工程科学系列丛书之《分子气动力学》的延续。《分子气动力学》一书的序言中指出,该书为在分子层次上分析实际非线性气体流动的科学家和工程师而著。目标读者没有变化,直接模拟蒙特卡罗方法仍然是分析这类问题的主要工具。随着技术的进步,计算机速度已有 1~2 个数量级的增长,更重要的是有效计算成本有 3~4 个数量级的降低,而且 1976 年以来引入的分子模型和 DSMC 方案,要比当时高级很多。

除了一个例外,1976 年以前 DSMC 方法就使用的分子模型,都是从气体经典动理学理论流传下来的。输运性质的 Chapman-Enskog 理论是这一模型的主要成就,而且已经证实传统模型对于单原子气体是充分的。双原子和多原子分子的经典模型并不充分,上述提到的例外是 1974 年引入的 Larsen 和 Borgnakke 现象学方法。它在后续发展中发挥了强大的影响力,以至于可以视为一种“哲学”,而不仅是一种方案。现象学方法可以从数学上得到模拟真实分子物理特性的模型,从而绕开了经典动理学理论中用到的整个物理相似性的限制。

现象学方法也促使本书作者于 1981 年引入可变硬球(variable hard sphere, VHS)模型,这一模型避免了与经典弹性模型相关的很多困难。最近由 Koura 引入的可变软球(variable soft sphere, VSS)模型和 Hash 与 Hassan 提出的推广硬球(generalized hard sphere, GHS)模型给这一模型添加了可选特征,使得其在某些情形下更为真实。内自由度的 Larsen-Borgnakke 理论在这些新模型上进行了拓展,由于它是现象学的,其还在振动和电子模态上进行了量子形式的拓展。现在的“DSMC 模型”,要比经典动理学理论及其在输运性质中的应用发展起来的,先进得多。现象学方法还催生了 Cercignani 和 Lampis 在 1974 年引入的 CLL

气体-壁面相互作用模型,该模型最近由 Lord 重新表述并应用于 DSMC 模拟。

尽管本书前面很多章节与《分子气动力学》对应章节的标题相同,但是众多新模型的引入,使得内容上发生很大变化。

阐述化学反应和热辐射的第 6 章几乎由全新的工作组成。离解模型与振动激发的 Larsen-Borgnakke 模型集成,在为 DSMC 提供背景理论的同时,也包含离解和复合反应速率的一种新理论,并演示新模型在分析和数值研究上的有用性。

第 7 章是《分子气动力学》中相应章节的更新,给出稀薄气体流动研究必要的背景材料。第 8 章综述过渡区流动的分析方法,详细阐述后续章节中与 DSMC 结果直接比较所需的相关问题。第 9 章综述过渡区流动的数值方法,特别强调与 DSMC 方法、分子动力学方法和格子气体格式的区别所在。1976 年以来的这段时间,直接模拟统计方面有了飞跃性发展,导致直接模拟方法实现策略上的显著改变,这些在第 10 章中进行了讨论。

DSMC 方法潜在用户面临的首要问题是需要付出大量的时间和精力来熟悉并掌握繁多的细节问题,以生成和验证新程序,而最后还面临虽然获得了结果,但是没有办法验证其正确性的问题。在物理不一致性缺失的情况下,它们的接受依赖信任;反过来说,任何拒绝只可能出于偏见。这是计算流体力学 (computational fluid dynamics, CFD) 多数方法共有的问题,但是在 DSMC 方法的情况下更为严重,因为它是一个在物理上基于概率模拟而不是标准数值分析已接纳数学方程的应用。本书试图通过附带的 13 个演示程序 FORTRAN 源代码来克服这些问题。本书给出和讨论的所有数值结果都由这些程序得到,而且任一结果都可以通过当前“顶级”个人计算机 24 h 以内的运行得到。

第 11 章给出均匀气体中的 DSMC 方案和分子模型并进行测试,第 12 章将其用于一维定常流动。这些计算在 Navier-Stokes 方程有效的条件下进行,通过简单气体和混合气体输运性质的细致研究验证 DSMC 方法和基本方法,并与测量值和连续流理论值进行比较。

正则激波依然是最有价值的单一测试算例,既可以用于与可靠实验的比较,也可以用于 Navier-Stokes 方程传统描述缺陷的演示。Muntz 等的 DSMC 弱激波结果与实验、Navier-Stokes 方程解、Burnett 方程解的比较,以激波研究专用演示程序得到了一些复现。

第 13~16 章讨论 DSMC 方法在多于一个独立变量流动中的应用方案。一维非定常流动程序仅要求定常程序在抽样模块上发生变化,且保留了柱和球对称的通用选项。二维流动、轴对称流动和三维流动的演示程序,限于平直或扁平

边界的应用。尽管有这一限制,本书还是给出了一系列代表性测试算例。它们中的多数与已经出版的计算相似,但如克努森数对于竖直平板后涡流形成的影响是全新的。Taylor-Couette 流动中环形涡处理的算例,是基于 Stefanov 和 Cercignani 的新近工作,并且特别有趣。这一算例还将注意力吸引到如下事实: DSMC 计算包括物理上真实的时间参数,给出定常流动发展的有意义信息。Reichelmann 和 Nanbu 的新近工作也将 DSMC 方法应用于 Taylor-Couette 流动,他们对这一流动的实验数据进行对比,演示了 DSMC 方法正确预测稀薄气体中涡形成的条件。

演示程序应该给出 DSMC 方法操作的直观感受,并提升对其能力的理解。多数使用者会发现,数值不稳定性的完全缺席,将超越对令人讨厌的统计涨落的补偿。

DSMC 方法针对空天环境而开发,至今这一方法的工程应用也多见于空天问题。这一方法潜在应用的多领域尚未探索,包括半导体生成的很多方面,以及涉及高真空和高真空设备自身发展的任何过程,其原因是 DSMC 计算的一次性高成本为其带来了“昂贵”方法的名声。考虑到最近在计算代价上的减小,这一名声显然已不再公平。另外,不再昂贵的 DSMC 方法及其易应用性,意味着实验可以同时进行。测量与模拟结果的对比,使得无法直接测量的值可以被推断出来。

希望以上关于 DSMC 方法的阐述能够使得更多的同仁进入其应用领域,分享其多年来给作者带来的喜悦。

## 致谢

正如 DSMC 方法的早期发展得到空军科学研究办公室的支持,作者最近的发展得到了美国国家航空航天局(National Aeronautics and Space Administration, NASA)兰利研究中心的支持。这些发展从在兰利研究中心的讨论中受益,特别是与 Jim Moss、Frank Brock、Dick Wilmoth、Ann Carlson、Michael Woronowicz、Cevdet Celenligil、Rupe Gupta 和 Didier Rault 的讨论。这些努力还包括北卡罗来纳州立大学,类似地也应该提到 Hassan Hassan 和 David Hash。

DSMC 的发展还受到与 DSMC 开发者及全世界多地使用者的讨论和信函的影响。在这些人中,要特别感谢澳大利亚的 Doug Auld,美国的 Don Baganoff、Tim Bartel、Iain Boyd、David Erwin、Brian Haas、Lyle Long、Dan McGregor 和 Phil Muntz,英国的 John Harvey 和 Gordon Lord,德国的 Frank Bergemann,意大利的 Carlo

Cercignani, 比利时的 Malek Mansour, 以及日本的 Kenichi Nanbu。

上面的一些人,特别是 Frank Brock,还协助检查了本书书稿。这一任务还得到了 Alan Fien 和 Bob Ash 的帮助。

作者还要感谢牛津大学出版社的编辑在本书准备过程中的合作。作者的计算机排版使用了 WordPerfect 5.1。

G. A. Bird  
悉尼,澳大利亚  
1993 年 11 月

# 序

*Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows* 是稀薄气体动力学的经典著作,与其上一个版本的 *Molecular Gas Dynamics* 一起,四十余年间在世界范围内影响了一大批从事稀薄气体动力学研究的学者。这本书理论体系完善,论述深入浅出,操作指导性强,可以说是稀薄气体动力学学习和研究的必读教材。

然而,这本出版已 20 余年且影响力如此巨大的著作,竟然没有中译本,是为憾事。欣闻方明博士从入职开始就一边学习一边着手翻译此书,后又根据自身的研究经验和体会不断修改,数易其稿,历时五年终将付梓,甚感欣慰。在我看来,这本经典著作内容非常丰富,理论性和技术性都很强,译者一定在翻译过程中倾注了大量心血,花费了不少工夫。在本书即将出版之际,我欣然接受译者邀请为之作序,主要出于以下两点考虑。

第一,表达对译者的欣赏和支持。方明博士在攻读博士学位期间的学习研究经历与他现在从事的研究工作差异较大,他积极主动、勤奋努力、一步一个脚印地开展 DSMC 方法的学习研究,六年来发表论文数十篇,承担国家自然科学基金、国家重大研究计划等项目十余项,成为中国空气动力研究与发展中心的青年骨干人才。我希望更多的年轻同志能像方明博士一样,积极进取、努力学习、踏实工作,将自身的发展与国家的需要紧密结合,成就一番事业。

第二,表达对稀薄气体动力学的重视和期盼。在可重复使用跨大气层飞行器和临近空间高超声速飞行器发展极为迅猛的今天,飞行器的设计研发对稀薄气体动力学研究提出了迫切需求。经过四十多年的发展,我国在稀薄气体动力学计算模拟、地面试验模拟技术方面取得了长足进步,有力支撑了相关航天飞行

器的研制。但是,我们在基础理论研究方面积累较为薄弱,对气-面相互作用、跨流域流动机理、连续流失效机理及判断准则和高超声速多尺度流动特征等领域研究还不够深入,缺乏相关的理论和方法创新;计算方法和计算模型、试验测试和流场诊断手段需要不断发展;研究力量较为分散,尚未形成科学布局、分工合作的研究体系。我希望有更多的青年学者像方明博士一样,加入这个重要的研究领域,共同推动稀薄气体动力学理论、技术和应用研究的发展。

中国空气动力学学会和中国空气动力研究与发展中心一直重视知识的传播和科学文献的出版工作,2018年还专门组织出版了中心组建50周年系列图书,得到科学出版社、国防工业出版社等单位的大力支持与帮助。借此机会,我要向长期关心和支持我国空气动力学事业发展的社会各界表示衷心的感谢。我相信,本书的出版将进一步推动我国稀薄气体动力学研究的进展;我更相信,在广大科技工作者的不懈努力下,空气动力学事业的明天将更加美好。



2019年1月

# 符号列表

提示：这一列表不包括演示程序中的 FORTRAN 变量。基础物理常数的值基于 1986 CODATA 推荐值。

$a$	声速;常数
$a_c$	调节系数
$A$	常数
$A_{nm}$	爱因斯坦系数
$b$	碰撞参数脱靶距离;常数
$B$	常数
$c$	分子速度;常数;光速
$c_f$	表面摩擦系数,方程式(7.62)
$c_p$	比定压热容
$c_v$	比定容热容
$c_0$	宏观流动速度;质量平均速度
$\mathbf{c}$	分子速度向量
$\mathbf{c}_0$	宏观速度向量
$C$	扩散速度;常数
$C_h$	热传导系数,方程式(7.64)
$C_p$	压强系数,方程式(7.59)
$C_D$	阻力系数
$C_L$	升力系数

$C_N$	法向力系数
$C_P$	平行力系数
$C$	扩散速度向量
$d$	分子直径;常数;距离
$D$	常数
$D_{12}$	扩散系数
$D_{11}$	自扩散系数
$e$	比能
$e_p$	光子能量
$e$	单位法向量
$E_t$	平动能
$E_a$	活化能
$f$	速度空间中的正则速度分布函数, 方程式(3.1); 函数
$f_0$	麦克斯韦或平衡速度分布函数, 方程式(3.47)
$F^{(N)}$	$N$ 粒子分布函数, 方程式(3.7)
$F^{(R)}$	约化分布函数, 方程式(3.8)
$F$	力; 比例; 累积分布函数
$F_N$	一个 DSMC 分子代表的真实分子个数
$F$	力向量
$F$	相空间中的单粒子分布函数, 方程式(3.5)
$g$	相对速度; 量子简并度; 重力加速度
$g$	相对速度向量
$h$	普朗克常量, $h = 6.626\ 075\ 5 \times 10^{-34}$ J/s; 高度
$H$	玻尔兹曼 $H$ 定理
$i$	量子能级
$I$	惯量矩
$j, k, l$	粗球碰撞中的向量
$j$	整数
$k$	玻尔兹曼常量, $k = \mathcal{R}/\mathcal{N} = mR = 1.380\ 658 \times 10^{-23}$ J/K
$k_T$	热扩散比例
$k_f$	正向反应速率系数
$k_r$	逆向反应速率系数

$K$	热传导系数
$K_{\text{eq}}$	平衡常数
$K(0)$	平均平方涨落
$K(t)$	时间关联函数
$K(x)$	空间关联函数
$Kn$	克努森数, $Kn = \lambda/L$
$l$	线性维度; 与 $x$ 轴的方向余弦
$L$	线性维度
$m$	分子质量; 与 $y$ 轴的方向余弦; 编号
$m_r$	折合质量
$m_u$	原子质量常量, $m_u = 1.660\,540\,2 \times 10^{-27}$ kg
$Ma$	马赫数
$(Ma)_s$	激波马赫数
$\mathcal{M}$	摩尔质量
$n$	数密度; 与 $z$ 轴的方向余弦; 编号
$n_0$	标准分子数密度, $n_0 = 2.686\,66 \times 10^{25}$ m <sup>-3</sup>
$N$	数目; 比例
$\dot{N}$	数通量
$N_\lambda$	一个平均自由程立方体中的数目
$\mathcal{N}_A$	阿伏伽德罗常量, $\mathcal{N}_A = 6.022\,136\,7 \times 10^{23}$ mol <sup>-1</sup>
$p$	压强
$\mathcal{P}$	压力张量
$P$	连续流失效参数, 方程式(1.4); 概率
$Pr$	普朗特数, $Pr = \mu c_p / K$
$q$	能量通量
$\mathbf{q}$	热通量矢量
$Q$	分子的量; 配分函数
$Q_p$	激波剖面的形函数, 方程式(12.33)
$r$	距离; 半径; 乘子
$\mathbf{r}$	位置矢量
$R$	气体常数, $R = \mathcal{R}/\mathcal{M}$
$R_r$	0~1 的随机数

$Re$	雷诺数, $Re = \rho v l / \mu$
$\mathcal{R}^*$	普适气体常数, $\mathcal{R}^* = 8.314\ 511\ \text{J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$
$s$	速度比, $s = \mu \beta$ ; 平方项的数目
$s_d$	轨迹与表面相交所占的比例
$s_0$	零势能半径
$S$	表面面积; Lennard-Jones 模型中的参数
$Sc$	施密特数; $Sc = \mu / (\rho D_{11})$
$t$	时间
$T$	温度
$Ta$	Taylor 数, 方程式(15.4)
$u$	$x$ 方向的速度分量; 速度
$U$	势能; $x$ 方向的扩散速度; 速度
$v$	$y$ 方向的速度分量
$V$	体积
$V_c$	网格体积
$w$	$z$ 方向的速度分量
$W$	无量纲坐标
$W_0$	正则无量纲坐标, 方程式(2.24)
$x$	物理空间的坐标轴; 假变量
$X$	位置
$y$	物理空间的坐标轴
$z$	物理空间的坐标轴
$Z$	弛豫碰撞次数
$\alpha$	VSS 分子模型中的指数, 方程式(2.36); 调节系数; 离解度; 入射角; 常数
$\alpha_T$	热扩散因子
$\beta$	平衡气体中最概然分子速率的倒数, $\beta = (2RT)^{-1/2}$
$\gamma$	比热比, 方程式(1.62)
$\delta$	平均分子展向; Kronecker 符号
$\varepsilon$	分子能量; 方位角碰撞参数; 阱深参数; 对称因子; 镜面反射的比例; 0、1 或 2 分别对应平面、圆柱或球状流动