

具体模型.

3.2 模拟二维流体运动的 FHP 模型

作为格子自动机方法(LGA)的一个例子,我们简要介绍由佛瑞士(U. Frisch)、哈斯拉奇(B. Hasslacher)与波米奥(Y. Pomeau)所提出的,模拟二维流体运动的正六边形网格模型,简称为 FHP 模型. 利用这一模型得到的模拟结果,与实验结果定性是一致的;理论上由该模型导出的流体宏观运动方程,与 N-S 方程非常相似. 在低速流动条件下,对于固定雷诺(Reynolds)数,利用时间变量的重新标度,在一定精度内,该方程形式上可化为二维不可压缩流体运动的 N-S 方程.

考虑如图 15.6 所示平面上正六边形所组成的网格. 每个六边形的中心结点与其边上的六个结点连接. 粒子可沿任何一条连线方向以确定的速度运动,相应的速度向量分别记为 e_α ,

$$e_\alpha = (\cos(2\pi\alpha/6), \sin(2\pi\alpha/6)), \quad \alpha = 1, 2, \dots, 6.$$

任何时刻,在任何一个结点处,对任何一个特定的连线方向 α ,最多只允许存在有速度为 e_α 的一个粒子. 因而在一个结点处,同一时刻最多有六个具有不同速度方向的粒子. 假设所有粒子都是相同的,质量均为 1,由此每个粒子的速度与动量均由相应的 e_α 表示. 这样模型中所有粒子的动能相等,不具有势能.

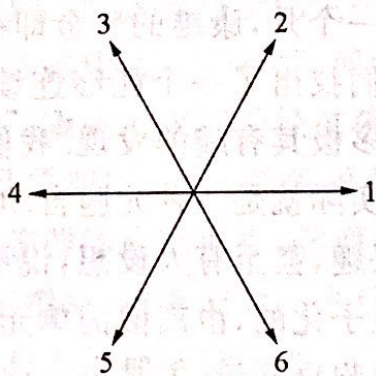


图 15.6

取离散的时间变量,两个相继时刻的间隔是 1. 这样,随着时间流逝,粒子由 t 时刻所在的位置,按照其速度方向 e_α ,在 $t+1$ 时刻移



动到某一相邻结点. 同时来到同一结点但具有不同速度方向的粒子, 将会发生碰撞, 碰撞粒子将按照如图 15.7 所示的散射规则重新安排它们的速度方向. 如果把在一条直线上的两个相反方向依次记为 i 和 $i+3$, 与 i 相差正负 60 度角的方向记为 $i\pm 1$, 那么如图所示, 当从

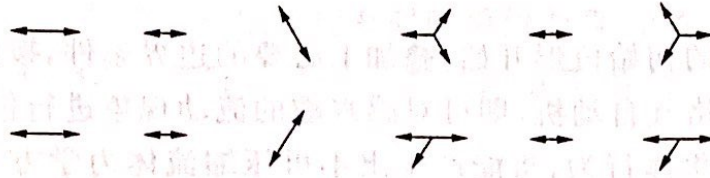


图 15.7

i 和 $i+3$ 两个相反方向同时有粒子来到同一结点时, 两粒子发生正碰, 它们将依照适当规则, 或者散射到 $(i+1, i+4)$ 方向, 或者散射到 $(i-1, i-4)$ 方向. 当 $(i, i+2, i+4)$ 三个方向的粒子发生碰撞时, 它们将被散射至 $(i+1, i+3, i+5)$ 方向; 而具有 $(i, i+3, i+4)$ 方向的三个粒子将不发生散射. 从任何初始位形出发, 如上规则决定了 FHP 模型随时间的演化. 下面对模型做几点简要说明:

1. 最早的格子模型采取正方形网格, 称为 HPP 模型, 但从该模型导出的宏观方程应力张量不满足各向同性的要求. 而 FHP 模型则是具有与 N-S 方程类似性状宏观方程之最简单模型. 当然这一模型可以进一步复杂化, 以满足更多的要求.

2. 由方向 $(i, i+3)$ 的两个粒子正碰撞产生的散射有两种选择, 若指定任何一个, 将得到确定性规律, 但丧失了镜像对称下的不变性. 为避免这一点, 可利用等概率或者利用时间坐标与空间坐标的奇偶性, 给出一种随机或伪随机的选取规则. 需要指出的是: 若以不相等的概率选择两种散射方式, 并不影响由模型导出的宏观方程的一般形式, 受到影响的只是方程的参数, 例如粘性的数值.

3. 若只考虑二元碰撞, 则在任何一对相反方向 $(i, i+3)$ 上, 粒子数之差守恒. 这意味着除了总粒子数守恒 (即质量守恒) 与动量守恒外, 模型引入了一个人造的守恒关系. 这将使模型的行为背离实际流体. 为克服这一点, 引入了三元碰撞.

4. 以上模型的所有状态和规则都可由逻辑变量来表示. 任何时



刻系统的变化,由所有结点的状态变化决定,而任何结点的状态改变是由与其相邻六个结点的局部状态决定的,而局部状态是有限的.这样结点状态的改变可由查表的方式实现,因而系统的运行极易由数字计算机进行模拟.当然,也可根据上述原理设计大规模并行计算的硬设备.

从一定的初始位形开始,叠加上必要的边界条件,按照上述给定的规则运行格子自动机,即可对感兴趣的流动现象进行模拟.格子模型中粒子的集体行为,将能产生出不可压缩流体力学方程组所能描写的性状.下一段中即来说明这一点.

3.3 由 FHP 模型导出的宏观方程

对 FHP 模型的理论分析,就物理学家说来几乎在模型提出的同时就已经完成,如何从上述离散模型导出这一模型所遵循的宏观方程可见本章主要参考文献[2]与[3]中沃尔夫兰(Wolfram)和佛瑞士、哈斯拉奇与波米奥等人的文章,他们说明了由 FHP 模型所导出的宏观方程与 N-S 方程几乎有相同的形式.限于本书的性质与篇幅,此处不可能详细引述有关内容,但为了使读者有一个大致概念,下面给出一极其简化的说明,不当之处,应由本书编著者个人负责.

考虑一个结点数为 L 的正六边形有限点阵,总粒子数为 N ,考虑这 N 个粒子所有可能的初始分布,以及由每一个初始分布按照 FHP 模型规则可能演化出的所有系统.在任何确定时刻,这些系统的粒子分布给出了所有可能的粒子分布形式.每一个特定的粒子分布形式称为一个位形.用统计物理的语言来说,所有这些系统构成一个系综.这一系综的特点是:其中的每个系统有相同的不随时间变化的能量.因而可以合理地认为,系综中每个系统是以等概率发生的.

以 X, T 表示 FHP 模型中离散格点的空间坐标与时间坐标,定义单个粒子分布函数 $f_e(X, T)$,它的含义是:在时刻 T ,在系综所有可能的位形中,在空间点 X 处发现一个具有速度 e_e 的粒子之概率.造成 f_e 变化的原因有两个:一是粒子的运动,一是粒子的碰撞.如



果不考虑碰撞,则模型的演化规则蕴涵

$$f_a(X + e_a, T + 1) = f_a(X, T). \quad (28)$$

对尺度极大于网格间距的点阵和长的时间间隔,空间变量与时间变量可以认为是连续的,即可以定义新的空间与时间变量 $x = \delta_x X, t = \delta_t T$, 且 $\delta_x, \delta_t \ll 1$, 即对于新的长度及时间单位而言,元胞自动机的网格间距和时间单位只相当 δ_x 与 δ_t 的小量. 在新变量下,方程(28)化为

$$f_a(x + \delta_x \cdot e_a, t + \delta_t) - f_a(x, t) = 0. \quad (29)$$

将上式在点 x, t 做 Taylor 展开,保留 δ_x, δ_t 的一阶项,并假设 $\delta_x = \delta_t$, 有

$$\partial_t f_a(x, t) + e_a \cdot \nabla f_a(x, t) = 0, \quad (30)$$

这就是不考虑碰撞作用时,单粒子分布函数 f_a 所要满足的波尔兹曼方程. 碰撞作用一般是复杂的,为简单,此处只笼统地以 Ω_a 表示当考虑碰撞作用时,式(30)所应附加的修正项. 我们不考虑 Ω_a 的具体形式,然而如欲得到宏观方程中所有系数的表达式, Ω_a 的具体形式则必须给出. 在 FHP 模型中,假设 Ω_a 只依赖单粒子分布函数 f_a ($\alpha = 1, 2, \dots, 6$) 的局部值,且不直接依赖它们的导数. 引入这一碰撞项后,式(30)化为

$$\partial_t f_a(x, t) + e_a \cdot \nabla f_a(x, t) = \Omega_a(x, t). \quad (31)$$

单粒子分布函数可以决定宏观物理量,特别是

$$\sum_a f_a = n, \quad \sum_a e_a f_a = nu \quad (32)$$

依次定义了总粒子密度 $n(x, t)$ 和动量密度 nu , 此处 $u(x, t)$ 是宏观流体速度. 如果考虑一个均匀流,则 $\nabla f_a = 0$, 由此(31)化为

$$\partial_t f_a = \Omega_a.$$

对于一个均匀系统, n, u 不随时间变化,将上式对 α 求和,再利用(32)式有

$$\sum_a \Omega_a = 0, \quad (33)$$

类似地可有



$$\sum_a e_a \Omega_a = 0. \quad (34)$$

实际上(33), (34)对非均匀流也是正确的, 因为它们可视为 FHP 模型在任何时刻任何一点的粒子散射遵从粒子数守恒与动量守恒的结果. 利用(33)式, 从(31)式得到

$$\partial_t \sum_a f_a + \sum_a e_a \cdot \nabla f_a = 0, \quad (35)$$

把第二项写成 $\nabla \cdot (\sum_a e_a f_a)$, 利用(32)式得到

$$\partial_t n + \nabla \cdot (nu) = 0, \quad (36)$$

这就是通常所称的连续性方程, 它表达了流体质量守恒的要求, 这是格气自动机平均性状满足的第一个宏观方程. 利用(31), (34)式, 还可得到动量守恒方程

$$\partial_t \sum_a e_a f_a + \sum_a e_a (e_a \cdot \nabla f_a) = 0.$$

定义动量通量张量

$$\Pi_{ij} = \sum_a (e_a)_i (e_a)_j f_a, \quad (37)$$

则动量方程化为

$$\partial_t (nu)_i + \partial_j \Pi_{ij} = 0, \quad (38)$$

后一项对指标 j 适用爱因斯坦求和约定. 从(32)式不能给出一个简单的, 由宏观量组成的 Π_{ij} 的表达式, 为通过宏观量表示 Π_{ij} 必须首先得出 f_a 与宏观量的关系.

在局部平衡假设下, 描述微观粒子分布的函数 f_a 仅应依赖宏观参数 $u(x, t)$, $n(x, t)$ 和它们在 (x, t) 的导数, 一般而言依赖关系可能是很复杂的. 然而, 如果假设 $u(x, t)$, $n(x, t)$ 随时间与空间变量变化缓慢, 且限定 $\|u\| \ll 1$ 的低速流动时, 近似地可以认为

$$f_a = f \left\{ 1 + c^{(1)} e_a \cdot u + c^{(2)} \left[(e_a \cdot u)^2 - \frac{1}{2} \|u\|^2 \right] + c_{\nabla}^{(2)} \left[(e_a \cdot \nabla)(e_a \cdot u) - \frac{1}{2} \nabla \cdot u \right] \right\} + \dots, \quad (39)$$

忽略的是高阶项. 式中诸 $c^{(i)}$ 是待定常数, 花括号中除去常数项 1 外, 前面的项表示微观粒子密度对宏观速度的依赖, 最后一项表示对速



度一阶导数的依赖. 这些项的形式是由要从向量 e_a, u, ∇ 形成数量函数 f_a 所决定, $\|u\|$ 与 $\nabla \cdot u$ 两项的引进是为了使 f_a 满足(32), 在确定它们前面的系数时, 利用了 FHP 模型满足关系

$$\sum_a (e_a)_i (e_a)_j = 3\delta_{ij}.$$

由(39)与(32)式易于得到 $f = n/6, c^{(1)} = 2$. 为得到 $c^{(2)}$ 和 $c_{\nabla}^{(2)}$ 需使用更复杂的近似方法, 此处略去有关的讨论. 即使不知道这两个系数的值, 也不影响推导宏观方程的形式. 在统计物理中, 如(39)所表达的近似式称为查普曼-恩斯柯克(Chapman-Enskog)展开. 利用 f_a 的近似展式(39)以及对 FHP 模型成立的关系式

$$\sum_a (e_a)_i (e_a)_j (e_a)_k = 0,$$

$$\sum_a (e_a)_i (e_a)_j (e_a)_k (e_a)_l = \frac{3}{4}(\delta_{ij}\delta_{kl} + \delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}),$$

从(37)式可以得到

$$\begin{aligned} \Pi_{ij} = & \frac{n}{2}\delta_{ij} + \frac{n}{4}c^{(2)}\left[u_i u_j - \frac{1}{2}\|u\|^2\delta_{ij}\right] \\ & + \frac{n}{8}c_{\nabla}^{(2)}\left[\partial_i u_j + \partial_j u_i - \frac{1}{2}(\nabla \cdot u)\delta_{ij}\right] + \dots \end{aligned}$$

将上式代入(38)式, 得到宏观运动方程

$$\begin{aligned} \partial_t(nu) + \frac{1}{4}nc^{(2)}\left\{(u \cdot \nabla)u + \left[u(\nabla \cdot u) - \frac{1}{2}\nabla\|u\|^2\right]\right\} \\ = -\frac{1}{2}\nabla n - \frac{1}{8}nc_{\nabla}^{(2)}\nabla^2 - \Xi, \end{aligned} \quad (40)$$

Ξ 表示所有在近似展开式(39)中没有明确写出的项所引起的效应. 如果从(29)式导出(30)式时保留了二阶项, 那么由计算可知, 连续性方程(36)无须修正, 而运动方程(40)右端还应添加一个修正项

$$\psi = -\frac{1}{16}nc^{(1)}\nabla^2 u = -\frac{1}{8}n\nabla^2 u.$$

3.4 宏观方程与 Navier-Stokes 方程的比较

为将宏观方程式(40)与 N-S 方程加以比较, 首先略去(40)中不



必要的项. 由前述, Ξ 包括所有不出现在近似展式(39)中的项所引起的效应, 这意味着其中是高阶项, 因而可以除去; 其次, 由连续性方程可知, $n(\nabla \cdot \mathbf{u})$ 与 $\mathbf{u} \cdot \nabla n$ 是同量级的, 后者不出现在(39)中, 故 $n(\nabla \cdot \mathbf{u})$ 同样视为应忽略的项, 所以相应的项也应从式(40)中除去. 这样最终保留下来的项给出方程

$$\begin{aligned} \partial_t(n\mathbf{u}) + \frac{1}{4}c^{(2)}n \left\{ (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} - \frac{1}{2}\nabla\|\mathbf{u}\|^2 \right\} \\ = -\frac{1}{2}\nabla n - \frac{1}{8}c_{\nabla}^{(2)}n\nabla^2\mathbf{u}. \end{aligned} \quad (41)$$

现在将(41)式与 N-S 方程逐项加以比较. 首先 $n(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}$ 是对流项, 与 N-S 方程的差别是该项前面多出了一个不等于 1 的因子 $\mu = c^{(2)}/4$. 这表明格子模型不具有伽里略(Galilei G.)不变性, 这与 N-S 方程是不同的; (41)式右端的 $-\frac{1}{8}nc_{\nabla}^{(2)}\nabla^2\mathbf{u}$ 是粘性项. $\nu_c = -\frac{1}{8}c_{\nabla}^{(2)}$ 是运动学粘性系数, 取正值. 如果在推导方程的过程中, 考虑了二阶校正项, 则粘性系数化为 $\nu = \nu_c - 1/8$, 后面的 $-1/8$ 反映点阵离散的效果. 式中 $-\nabla n/2$ 项对应 N-S 方程的压力项, 相当有状态方程 $p = n/2$; 但(41)式中还有一项 $\nabla\|\mathbf{u}\|^2$, 它可以和 ∇n 项组合起来, 产生一个将流体动能对压力的影响包括在内的压力项. 至此我们已经看到, FHP 模型导出的宏观方程与 N-S 方程有类似的结构. 还需指出, 在低速流动条件下, 对于固定雷诺数, 将时间变量适当地重新加以标度, 在一定精度范围内, 可使宏观方程与 N-S 方程形式上相同.

由于对任何时刻, 在任何结点上, 对任一确定速度方向, FHP 模型所允许存在的粒子数只能是 0 或 1, 因此在它所导出的宏观方程中出现了破坏伽里略不变性的因子和一些非物理效应项, 从而模型只能在低马赫数下运行. 为消除这些缺点, 1988 年又出现了格点变量取连续值的格点波尔兹曼方程模型(LBE), 加上随后出现的对碰撞项的重要改进, 消除非物理效应与破坏伽里略不变性的因子已不再是一个困难. 至今, 这些方法都还在继续发展之中, 并已得到了若干令人惊叹的模拟结果. 这些模型是极具启发性的, 希望读者从中能够有所收获.

