

# Frish-Hasslecher-Pomeau 流体力学 模型的平均自由程\*

刘慕仁 孔令江 江 峰

广西师范大学物理系, 桂林, 541001

1990年12月28日收到

本文计算 Frish-Hasslecher-Pomeau (缩写为 FHP)模型的平均自由程  $\lambda$ . 计算表明,当粒子碰撞超过 60 次后  $\lambda$  趋于常数; 当粒子密度为 0.25 时  $\lambda$  取最小值, 对应于雷诺数的最大值. 此外, 本文还指出 FHP 模型与分子动力学模型的某些差别.

PACC: 0540

## 一、引 言

FHP 细胞自动机(简称 CA)流体模型<sup>[1]</sup>是一组三角形网格, 每一格点最多可同时容纳 6 个速度大小相同, 方向不同的粒子. 粒子按一定的规则发生碰撞后以一定的速度运动到相邻的格点上. 这一模型自 1986 年由 Frish, Hasslecher 和 Pomeau 提出后受到广泛的注意. 近年来, 在 FHP 模型基础上又发展了 FHP-II, FHP-III<sup>[2]</sup> 和多重速度模型<sup>[3]</sup>, 用来在计算机上模拟流体的动力学行为. 在低雷诺数低马赫数下, 一些典型问题的 CA 流体模型的模拟结果与通常的数值解大致相同<sup>[4]</sup>. 经典的流体力学研究方法是发展各种数值解法来求解非线性的 N-S 方程, 而 CA 方法则是通过模型的演化求出 N-S 方程的解空间, 以克服直接求解方程的困难.

CA 流体模型中粒子的位置、速度的大小和方向, 运动时间都不连续, 这使该模型很容易在并行计算机上高速运行, 边界条件也容易实现. 目前 CA 流体模型的研究方向主要是进一步弄清模型的性质, 以期不断改进, 使之更好地符合实际流体的情况, 其次是用模型来模拟特定条件下的流体行为并与通常的数值解及实验结果进行比较, 以验证模型的正确性. 也有人将其用于别的研究领域.

平均自由程是 CA 模型的重要性质之一, 用它可推算系统的许多其它性质, 如扩散系数  $D$  和粘滞系数  $\nu$ . 反之, 通过平均自由程也可了解和检验模型的正确性<sup>[4]</sup>. 此外, 用 CA 流体模型模拟流体或对模拟流体进行测量时也常用到平均自由程<sup>[4,5]</sup>. 例如, 在计算流体对壁面的压力和流体的剪切力时, 要知道平均自由程<sup>[6]</sup>. 在模拟多孔介质和重力场中的流体时, 要在模型中加上动量源, 这时, 平均自由程也很重要. 用 CA 流体模型模拟湍流时, 必须取足够大的雷诺数. 由于最大的雷诺数对应着最小的粘滞系数和最小的平

\* 国家自然科学基金资助的课题.

均自由程,这时,平均自由程更具有其特殊的意义<sup>[4]</sup>。

## 二、计算方法

在平均自由程计算过程中发现,仅当粒子密度小于 0.05 和大于 0.85 时,粒子自由程才达到 256 数量级,故在一般密度下,选取  $256 \times 256$  的子格子。同时,采用周期边界条件来模拟无限大格子。

计算开始时,按流体密度  $\rho$  在网格上“放置”粒子,然后在网格中间安排一个观察粒子。在模型演化过程中,记下观察粒子走过的路程及其与其它粒子“碰撞”的次数,再求出其平均自由程。计算碰撞次数时注意到每一时刻每个格点上可能存在几个速度方向不同的粒子,但只有在少数情况下,碰撞前后粒子的动量分布才会不同。

模型所定义的碰撞规则如图 1 所示。图 1 中一共有 5 种状态碰撞前后动量分布不同,即只有粒子处于图 1 所示 5 种状态时才被认为发生了“碰撞”。观察粒子按碰撞规则在格点上发生“碰撞”后,从末状态的几种可能的速度方向中随机地选取一种,然后沿此方向继续向下一格点运动。

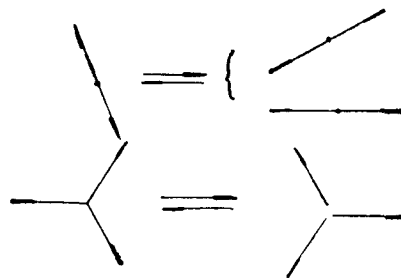


图 1 FHP 模型的二粒子碰撞和三粒子碰撞规则

## 三、计算结果与讨论

1. 平均自由程随碰撞次数的变化 在 FHP 模型的演化过程中,观察粒子走过多少步才发生碰撞,在 5 种可能的碰撞方式中以何种方式发生碰撞,碰撞后又沿哪一方向继续运动,这些都是随机的。表 1 列出密度等于 0.3 时观察粒子每两次碰撞之间经过的路程。从表 1 可知,观察粒子有时只走一步就发生碰撞,有时则要走几十步才发生碰撞,但每两次碰撞间所走路程的平均值即平均自由程随着碰撞次数的增加而趋于一个常数。图 2 表示密度等于 0.3 时平均自由程随碰撞次数的变化。由图 2 可见,在前几次碰撞中,平均自由程变化比较大,但经 60 次碰撞后就趋于常数了,上下波动仅 0.4,相对误差 4%。当粒子密度取不同的数值时,只要碰撞次数大于 60,粒子的平均自由程也趋于对应的常数。

表 1  $\rho = 0.3$  时观察粒子每两次碰撞间所经历的路程

|    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |
|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|
| 9  | 4  | 19 | 11 | 4  | 10 | 31 | 5  | 5  | 4  |
| 8  | 17 | 1  | 18 | 16 | 20 | 2  | 4  | 11 | 6  |
| 5  | 4  | 3  | 7  | 6  | 2  | 13 | 10 | 3  | 28 |
| 6  | 21 | 27 | 13 | 1  | 5  | 3  | 3  | 10 | 6  |
| 18 | 6  | 1  | 10 | 1  | 15 | 7  | 4  | 2  | 5  |
| 35 | 13 | 1  | 1  | 42 | 17 | 6  | 24 | 13 | 11 |
| 7  | 5  | 14 | 23 | 1  | 11 | 19 | 13 | 16 | 8  |

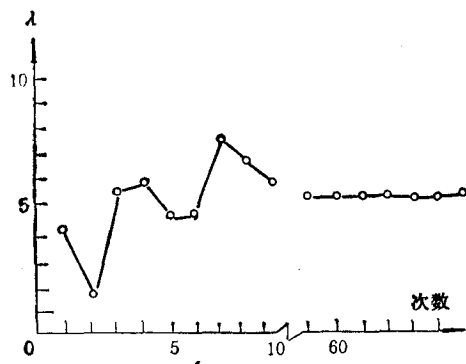


图2 密度  $\rho = 0.3$  时平均自由程  $\lambda$  随碰撞次数的变化

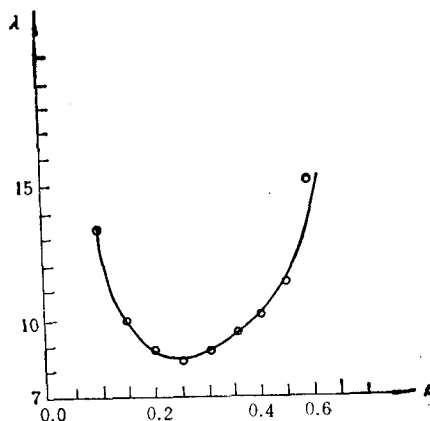


图3 不同密度  $\rho$  时的平均自由程  $\lambda$

2. 平均自由程随密度的变化 粒子密度不同,符合碰撞规则的碰撞概率也不同,因而平均自由程不同。不同密度下粒子的平均自由程如图3所示。图3表明,  $\rho$ - $\lambda$  曲线并非对于  $\rho = 0.25$  为对称,这可能是因 FHP 模型中粒子与空位交换不具有对称性所致。当粒子密度等于 0.25 附近时容易形成二粒子碰撞状态,粒子碰撞机会较多,故平均自由程较小。

为了证明平均自由程-密度曲线对于密度等于 0.5 为对称是由于粒子、空位双重性作用的结果,在 FHP 模型基础上增加了四粒子碰撞规则(如图4所示),使模型具有粒子空位交换对称性,然后计算粒子密度为 0.35 和 0.65 时的平均自由程。结果表明,两者平均自由程相等。这就说明上述的假设和判断是正确的。

由图3还可看到,当  $\rho \rightarrow 0$  和  $\rho \rightarrow 1$  时,平均自由程  $\lambda \rightarrow \infty$ 。在密度很低的情况下,每个格点上都很难出现碰撞状态,故粒子的平均自由程很大。在密度较大的情况下,格点上仍然不易出现碰撞状态,所以平均自由程也很大。这是与分子运动论的结论不同之处。

当粒子密度为 0.25 时,出现平均自由程的最小值。在该密度下,粒子碰撞最频繁,粒子间的动量交换最激烈,所以此时粘滞性最小,系统的雷诺数最大。所以,可以定义该点的密度(即平均自由程最小时粒子的密度)为 FHP 模型的临界密度  $\rho_c$ ,该密度所对应的

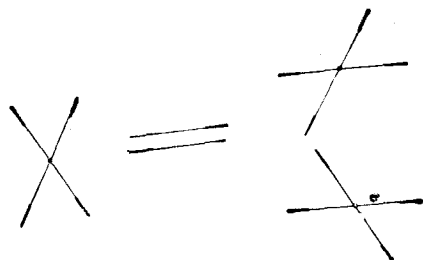


图4 FHP 模型的四粒子碰撞规则

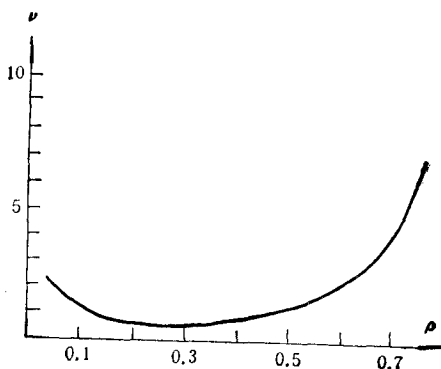


图5 不同密度  $\rho$  时的粘滞系数(按(1)式)

平均自由程为  $\lambda_c$ 。由于该点对应于最大的雷诺数,该点临近的流体必定具有某些与众不同的特征行为。这将成为今后进一步探索的问题之一。

利用 Chapman-Enskog 方法从 Boltzmann 近似可以导出 FHP 模型的粘滞系数<sup>[9]</sup>

$$Z = \frac{1}{12\rho(1-\rho)^3}. \quad (1)$$

由(1)式得到图 5 的曲线。曲线表明,  $\nu$  并非对于  $\rho = 0.5$  为对称。 $\rho \rightarrow 0$  或  $\rho \rightarrow 1$  时,  $\nu \rightarrow \infty$ ; 当  $\rho = 0.25$  时,  $\nu$  具有最小值。这些都是与前面做出的平均自由程的计算结果一致的。这表明用 Chapman-Enskog 方法从 Boltzmann 近似导出的结果与用 FHP 模型演化的结果完全相同,从而也证明用 Chapman-Enskog 方法导出的流体力学方程可以描述 FHP 模型的演化行为,或者说, FHP 模型的演化模拟了流体的行为。

3.  $D = \lambda/2$ ,  $\nu = \lambda\rho/2$  在 FHP 模型中不成立

利用 FHP 模型的平均自由程数据和分子动力学的近似公式  $\nu = \lambda\rho'/2$  ( $\rho' = 6\rho$ , 与文献[8]中方程的要求相一致)很容易算出一组数据。当  $\rho < 0.3$  时,这组数据与(1)式比较接近。当  $\rho$  增大时,与(1)式相差很大。这可能是因为:

a) 在大密度下, FHP 模型与分子动力学模型差别很大。

b) 分子动力学近似公式  $\nu = \lambda\rho'/2$  对 FHP 模型不适用,因为现有的模拟结果<sup>[8]</sup>与(1)式符合较好,误差不超过 10%。

同样,从 Boltzmann 近似可以导出<sup>[9]</sup>

$$D = \frac{1}{2\rho^2(1-\rho)^3}. \quad (2)$$

按分子动力学的近似公式  $D = \lambda/2$  算出的数据,不论粒子密度如何,与(2)式的差别都很大。由(1),(2)式得出在 FHP 模型中,  $\nu/D = \rho/6 = \rho'/36$ ,但在分子动力学中  $\nu/D = \rho'$ 。在 FHP 模型的基础上增加三粒子、四粒子碰撞规则后,(1)和(2)两式都变得更加复杂,这时  $\nu/D = f(\rho)/6$  (式中  $f(\rho)$  为两个多项式之比)。由此可见,在 FHP 模型中,  $D = \lambda/2$  不成立。

由于 FHP 模型是分子动力学的简化模型,因此,当用它来模拟流体运动时应选取适当大小的子格子作时间和空间的平均。当子格子太大时,会漏掉一些流场分布的性质;当子格子太小时,由于平均值涨落不定而得不到流场分布的实际情况。物理量的平均值在平均自由程内变化不大,所以,可根据前面计算的平均自由程的大小来选择子格子的大小,以求出各物理量的平均值。

- [1] U. Frish, B. Hasslecher and Y. Pomeau, *Phys. Rev. Lett.*, **56**(1986), 1505.
- [2] D. d'Humieres, P. Lallemand, *Complex Systems*, **1**(1987), 599.
- [3] Shiyi Chen, Hudong Chen and G. D. Doolen, *Complex Systems*, **3** (1989), 243.
- [4] 陈十一、陈耀松,中国科学(A辑),**(4)**(1990),396.
- [5] D. P. Kadanoff, G. R. McNamara and G. Zanetti, *Phys. Rev.*, **A40**(1989), 4526.
- [6] F. Hayot, *Phys. Rev.*, **A35** (1987), 1774.
- [7] K. Balasubramanian, F. Hayot, W. F. Saam, *Phys. Rev.*, **A36**(1987), 2248.
- [8] B. Hasslecher, Los Alamos Laboratory, Special Issue, (1987).
- [9] S. Wolfram, *J. Stat. Phys.*, **45**(1986), 471.

## MEAN FREE PATH OF PARTICLES IN FHP HYDRODYNAMICAL MODELS

LIU MU-REN KONG LING-JIANG JIANG FENG

*Department of Physics, Guangxi Teachers University, Guilin, 541001*

(Received 28 December 1990)

### ABSTRACT

The mean free path of the FHP hydrodynamical models is calculated. The calculations show that the mean free path is approximate to a constant after more than 60 collisions and is a minimum, which is corresponding to the maximum of Reynolds' number, when particle density is 0.25. In addition, the difference between the FHP models and the molecular dynamic models is showed clearly.

**PACC:** 0540