中国计算机学会学术著作丛书

格子气自动机

李元香　康立山　陈毓屏

清华大学出版社
广西科学技术出版社

需要全本请访问 www.ertongbook.com

内 容 简 介

本书系统地论述了格子气自动机的基本理论及其应用。

全书共分九章、三个附录。第一章简要介绍了与格子气自动机有关的流体力学、统计物理的基础知识，并概述了格子气自动机的诞生及其发展过程。第二章到第四章详细阐述了目前已基本成熟的几个基本模型。第五、六两章给出了一类单速非确定模型的理论体系。第七章讨论了基本模型的某些推广。第八章和第九章是应用部分，包括格子气自动机应用中若干常见问题的处理方法和几个典型流体力学问题的计算机试验。三个附录是对正文的有益补充。

本书可供计算机、数学、力学以及物理等学科的研究生、教师和科研工作者参考。

(京)新登字 158 号

格 子 气 自 动 机

李元香　康立山　陈毓屏

☆

清华大学出版社出版

北京　清华园

广西科学技术出版社出版

南宁市河堤路 14 号

通县人民文学印刷厂印刷

新华书店总店科技发行所发行

☆

开本：850×1168 1/32　印张：6　字数：165 千字

1994 年 2 月第 1 版　1994 年 2 月第 1 次印刷

印数：0001—1000

ISBN 7-302-01386-1/TP·532

定价：9.20 元

LATTICE GAS AUTOMATON

LI YUAN-XIANG
KANG LI-SHAN
CHEN YU-PING

ABSTRACT

In this book, foundations of theory and application of lattice gas automaton will be discussed in a systematic way.

It consists of nine chapters. In Chapter 1, basic theories about fluid mechanics and statistical physics are introduced briefly. Several models of lattice gas automaton, which have been well-considered, are expounded from Chapter 2 to Chapter 4. In Chapter 5 and Chapter 6, a theory system is given for a general class of nondeterministic models with single speed. Some generalizations of basic models are discussed in Chapter 7. Chapter 8 and Chapter 9 are the application part, which contains the treatment methods of problems which often arise in lattice gas simulations and the simulating results of a certain number of typical examples in hydrodynamics.

清华大学出版社　广西科学技术出版社
计算机学术著作出版基金

评 审 委 员 会

主 任 委 员　张效祥

副主任委员　周远清　汪成为

委　　员　王鼎兴　杨芙清　李三立
施伯乐　徐家福　夏培肃
董韫美　张兴强　徐培忠

需要全本请访问 www.ertongbook.com

序　　言

计算机是当代发展最为迅猛的科学技术，其应用几乎已深入到人类社会活动和生活的一切领域，大大提高了社会生产力，引起了经济结构、社会结构和生活方式的深刻变化和变革，是最为活跃的生产力之一。计算机本身在国际范围内已成为年产值达 2500 亿美元的巨大产业，国际竞争异常剧烈，预计到本世纪末将发展为世界第一大产业。计算机科技具有极大的综合性质，与众多科学技术相交叉而反过来又渗入更多的科学技术，促进它们的发展。计算机科技内容十分丰富，学科分支生长尤为迅速，日新月异，层出不穷。因此在我国计算机科技尚比较落后的情况下，加强计算机科技的传播实为当务之急。

中国计算机学会一直把出版图书刊物作为学术活动的重要内容之一。我国计算机专家学者通过科学实践，做出了大量成果，积累了丰富经验与学识。他们有撰写著作的很大积极性，但相当时期以来计算机学术著作由于印数不多，出版往往遇到不少困难，专业性越强越有深度的著作，出版难度越大。最近清华大学出版社与广西科学技术出版社为促进我国计算机科学技术及产业的发展，推动计算机科技著作的出版工作，特设立“计算机学术著作出版基金”，以支持我国计算机科技工作者撰写高水平的学术著作，并将资助出版的著作列为中国计算机学会的学术著作丛书。我们十分重视这件事，并已把它列为学会本届理事会的工作要点之一。我们希望这一系列丛书能对传播学术成果、交流学术思想、促进科技转化为生产力起到良好作用，能对我国计算机科技发展具有有益的

导向意义，也希望我国广大学会会员和计算机科技工作者，包括海外工作和学习的神州学人们能积极投稿，出好这一系列丛书。

中国计算机学会

1992 年 4 月 20 日

出　版　说　明

近年来,随着微电子和计算机技术渗透到各个技术领域,人类正在步入一个技术迅猛发展的新时期。这个新时期的主要标志是计算机和信息处理的广泛应用。计算机在改造传统产业,实现管理自动化,促进新兴产业的发展等方面都起着重要作用,它在现代化建设中的战略地位愈来愈明显。计算机科学与其它学科的交叉又产生了许多新学科,推动着科学技术向更广阔的领域发展,正在对人类社会产生深远的影响。

科学技术是第一生产力。计算机科学技术是我国高科技领域的一个重要方面。为了推动我国计算机科学及产业的发展,促进学术交流,使科研成果尽快转化为生产力,清华大学出版社与广西科学技术出版社联合设立了“计算机学术著作基金”,旨在支持和鼓励科技人员,撰写高水平的学术著作,以反映和推广我国在这一领域的最新成果。

计算机学术著作出版基金资助出版的著作范围包括:有重要理论价值或重要应用价值的学术专著;计算机学科前沿探索的论著;推动计算机技术及产业发展的专著;与计算机有关的交叉学科的论著;有较大应用价值的工具书;世界名著的优秀翻译作品。凡经作者本人申请,计算机学术著作出版基金评审委员会评审通过的著作,将由该基金资助出版,出版社将努力做好出版工作。

基金还支持两社列选的国家高科技重点图书和国家教委重点图书规划中计算机学科领域的学术著作的出版。为了做好选题工作,出版社特邀请“中国计算机学会”、“中国中文信息学会”帮助做好组织有关学术著作丛书的列选工作。

热诚希望得到广大计算机界同仁的支持和帮助。

清华大学出版社
计算机学术著作出版基金办公室
广西科学技术出版社

1992 年 4 月

前　言

本书是根据武汉大学软件工程国家重点实验室并行计算研究小组的研究成果,并广泛参考、总结国内外有关成果写成的。介绍当今应用数学、力学、计算机科学以及物理学界都十分关注的格子气自动机(Lattice Gas Automaton)。

格子气自动机是更广泛的细胞自动机(Cellular Automaton)在流体力学与统计物理中的具体化和应用。细胞自动机是一个时间离散和空间离散的数学模型,根据若干条简单的局域规则而运行,借助于先进的计算机设备广泛用于研究各种非线性现象和分形结构。同时它也有力地促进了计算机科学理论以及计算机应用的向前发展。

流体力学是一门古老而年轻的学科,研究的范围相当广泛。它起初是以局部范围内的空气和水等流体为研究对象,随后派生出以整个大气和海洋为研究对象的地球流体力学。发展到今天其分支越来越多,研究范围日益广泛。大到以宇宙中的星球为研究对象的个体星球流体力学和无数星球流体力学,小到考虑量子效应的超流体,还有生物流体力学和电磁流体力学,等等。由此可见,包含在流体力学中的非线性现象相当丰富,理所当然成了细胞自动机的研究者们关注的焦点。这就促使格子气自动机独立于细胞自动机而成为一个多学科交叉的新领域。

自从 1985 年底在美国 Los Alamos 国家实验室工作的科学家们提出 FHP(Frisch-Hasslacher-Pomeau)模型,并成功地进行了首批流体力学格子气模拟以来,引起了物理学家、计算机科学家与数学家们浓厚的兴趣,致使格子气自动机无论是理论分析还是计

算机模拟都取得了许多进展。物理学家和数学家致力于完善格子气自动机的理论基础,借助计算机研究自己感兴趣的课题,同时也提出一些有价值的新模型;而计算机科学家则关心它的计算理论并着手建造格子气机(Lattice Gas Machine)。在美国和法国就已诞生了一批这样的专用机。

什么是格子气自动机?实际上它是一个十分简单的计算模型,但其内涵却非常丰富。简而言之,将流体及其存在的时间和空间完全离散,给出离散的流体粒子之间相互作用及迁移的规则,这就定义了一个格子气自动机。流体粒子存在于空间网格上,所有粒子同步地随着离散的整时间步依据给定的规则在网格节点上相互作用,沿网格线在节点之间运动,这就是格子气自动机的运行。从以上简单的描述可以看出,它是用简单的局域作用规则来表现整个流场的复杂行为。从计算方法的角度来看,格子气自动机最本质的特征是它的纯布尔运算和完全并行性。因此它又是一类求解数值问题的非数值极度并行(Massively Parallel)算法,为流体力学计算的大规模并行化开创了一个新天地。在这里,传统数值方法中的主要矛盾——方法的稳定性和数值舍入误差——已不复存在,对各种常见边界问题的处理已十分灵活方便。另外,对比数值试验还表明,其收敛速度比传统数值方法提高了几个数量级。

因此,无论在哪方面格子气自动机都有很大的潜力可挖,值得多方面重视。

本书共分九章、三个附录。第一章是基础知识,简单介绍了与格子气自动机有关的流体力学基本方程,统计物理中的一些基本概念、方程和方法,同时也概述了格子气自动机的诞生及发展过程。第二章到第四章是本书的主要部分。在这三章里,从 HPP 和 FHP 两个简单的单速模型开始,详细地讨论了目前已研究得比较透彻的几个有代表性的单速和多速模型。五、六两章是前三章的深化和提高,建立了一类单速非确定格子气自动机模型的一般理论。

需要全本请访问 www.ertongbook.com

第七章则是进一步的推广,定义并阐述了一类多粒子、多速度格子气自动机序列,介绍了多相流模型。第八章讨论格子气模拟中一些常见问题的处理方法,诸如边界处理,初始条件的给定,宏观量的统计平均法,等等。同时也着重讨论了用格子气自动机模拟高 Reynolds 数湍流的可能性。第九章是一些计算试验结果。用流体力学中一些典型的问题来检验本书中的各类模型,从定常的不可压粘性流问题到非定常的可压流中的激波现象,还有 Benard 热对流问题,等等。附录一和附录二是第二章的继续,给出了 FHP 模型的若干结果以及粘性的 Green-Kubo 公式。附录三是五、六两章的继续,讨论了单速非确定模型含均匀质量力情形的 Navier-Stokes 方程。另外,作者还收录了自 HPP 模型提出以来国内外各期刊上发表的与格子气自动机有关的文献及其摘要,读者如感兴趣,可与作者联系。

必须指出,格子气自动机的发展还处在初期阶段,理论和实践尚不完善。本书在取材和问题的阐述方面不可避免地会受作者偏好的影响,而且,目前还没有这方面的专著问世,我们只能从浩如烟海的文献之中选取一部分相对稳定和基本的内容加以充实和系统化。因此书中肯定存在不少的遗憾,希望读者谅解。同时也由于作者的学识和水平所限,书中难免还有许多错误,敬请各位读者批评指正。

我们开展格子气自动机的研究是在国家“863”高技术基金、自然科学基金和国防科工委军用共性软件“八五”预研计划基金的资助下进行的。在研究过程中,一直得到了武汉大学软件工程国家重点实验室的领导和同事们的大力支持。同时也得到了北京应用物理与计算数学研究所的张景琳教授、袁国兴教授,武汉水利电力大学的李炜教授、杨屹松博士热情的支持与鼓励。在此,特向他们致以衷心的感谢。

作者诚挚地感谢美国加州大学 LLNL 的 G.Rodrigue 教授,

吉林大学的胡守信教授、武汉水利电力大学的邹秀芬老师、汕头大学的聂思翔老师。他们为作者的研究工作以及本书的撰写提供了宝贵的资料和他们的研究成果。

本书的出版得到了清华大学出版社和广西科学技术出版社“计算机学术著作出版基金”的资助，作者谨致感谢。

作　者

1993 年 4 月

于武汉大学

目　　录

第一章　流体不同层次的描述与格子气自动机 …… 1
1.1　引言 …… 1
1.2　连续介质模型的流体力学方程 …… 2
1.3　统计力学的基本概念和 Liouville 方程 …… 6
1.4　流体运动论层次的描述 …… 10
1.5　Boltzmann 输运方程 …… 13
1.6　Boltzmann 输运方程的解 …… 14
1.7　格子气自动机概述 …… 17
参考文献 …… 21
第二章　单速模型 …… 23
2.1　HPP 模型 …… 23
2.2　FHP 模型 …… 24
2.3　单速模型的理论分析 …… 28
2.4　Galilei 因子与输运系数 …… 40
2.5　单速模型简评 …… 46
参考文献 …… 47
第三章　多速模型 …… 50
3.1　9-Bit 正方形模型 …… 50
3.2　一般 9-Bit 矩形模型设计 …… 52
3.3　多速模型的理论分析 …… 56
参考文献 …… 66
第四章　高维模型 …… 67
4.1　引言 …… 67

4.2 三速正方体模型 …… 68
4.3 四维 FCHC 模型 …… 70
4.4 伪四维 FCHC 模型 …… 73
参考文献 …… 75
第五章 一类单速非确定模型 …… 77
5.1 引言 …… 77
5.2 单速非确定模型 …… 78
5.3 微观动力学方程 …… 83
5.4 Liouville 方程与统计描述 …… 86
5.5 平衡解 …… 89
参考文献 …… 95
第六章 多尺度技术与宏观方程 …… 97
6.1 引言 …… 97
6.2 多尺度技术 …… 97
6.3 各向同性讨论 …… 101
6.4 流体力学方程 …… 105
6.5 小结与注释 …… 109
参考文献 …… 110
第七章 基本模型的推广 …… 111
7.1 引言 …… 111
7.2 格子气自动机模型序列 …… 112
7.3 输运方程 …… 115
7.4 H 定理与平衡解 …… 118
7.5 宏观方程 …… 122
7.6 多相模型简介 …… 123
参考文献 …… 128
第八章 格子气自动机模型的应用 …… 130
8.1 引言 …… 130

8.2 Reynolds 数和湍流模拟 …… 130
8.3 边界处理 …… 134
8.4 均匀质量力问题 …… 137
8.5 初始状态设置 …… 138
8.6 宏观量平均法 …… 139
参考文献 …… 139
第九章 计算试验 …… 141
9.1 引言 …… 141
9.2 程序实现技术 …… 142
9.3 障碍绕流尾流模拟 …… 145
9.4 射流模拟 …… 149
9.5 矩形空腔流模拟 …… 151
9.6 Benard 花纹模拟 …… 154
9.7 一维激波模拟 …… 160
参考文献 …… 166
附录一 FHP 模型的若干结果 …… 168
附录二 FHP Ⅰ模型粘性的 Green-Kubo 公式 …… 170
附录三 含质量力的 Navier-Stokes 方程 …… 178
名词索引 …… 181

第 一 章

流体不同层次的描述与格子气自动机

1.1 引　　言

流体是流体力学的研究对象,是自然界中极为常见的物质,如水、空气等。无论哪种流体总是由分子组成,流体的流动以及其他宏观性质,是流体内部分子作混乱热运动的结果。直接地研究每个分子的运动既不可能也不必要。我们所感兴趣的只是流体的某些宏观特性,如流速、密度、压力等。为此目的,一般研究流体的方法是经过数学抽象,得出近似的数学模型,然后在这些模型的基础上进行研究。从物理学和流体力学的发展来看,描述流体主要在如下两个层次上。

第一,连续介质层次。这个层次的描述是以场论为工具,假设流体连续分布于它所占有的整个区域,称为流场。其他一切物理量,如速度、密度、压力等均是空间坐标和时间的足够光滑的函数。这是一个宏观模型。这种研究流体的方法就是熟知的 Euler 法。传统的流场计算方法就是在宏观模型的 Navier-Stokes 方程基础上,作差分或有限元离散后,得到代数方程,经求解得数值结果。

第二,运动论层次的描述。这个层次的描述是从非平衡统计力学的观点出发,想象流体是由大量的微观粒子所组成。这些粒子的

需要全本请访问 www.ertongbook.com