

# 计算流体动力学的新趋势 (I)

P. J. Boris

美国海军研究所计算物理与流体动力学研究室

## 1 引言：目前的能力

1.1 计算流体动力学展望 计算流体动力学涉及用数字计算机寻求流体动力学方程的解，以及流体动力学研究中数字计算机的应用。它用于以下几个方面：流体动力学的基础研究，复杂流动结构的工程设计，了解并预计燃烧和推进中化学反应与流体流动的相互作用，自然现象和湍流性质的基础与应用研究，整理并分析实验数据，外推实验研究中难以达到的或花费昂贵的参数范围。

计算流体动力学最近的成就基于数值计算方法的改进，该方法是将流体动力学连续介质方程组离散为大量的但是有限数目的代数方程或常微分方程。然后用目前已有的大容量高速数字计算机解这些方程。这一领域已有一些书籍，会议文集和综述评论文章问世。其中有：美国国家科学院 (NAS) 和国家科学研究委员会 (NRC) (1986) 关于空气动力学方面的计算流体动力学研究，Oran & Boris (1987) 的化学反应流动，Anderson et al (1984) 的流体动力学与传热，Woodward & Colella (1984) 的强激波流动，Canuto et al (1988) 关于亚声速流动的谱方法；Book (1981) 和 Rodrigue (1982) 主编的论述超级计算机矢量处理和并行处理的计算流体动力学方法优化问题的书籍，以及 Ortega & Voigt (1985) 的较新的综述报告；出版了大量的流体动力学数值方法最新会议文集，其中 Fritts et al (1985)，Morton & Baines (1986) 主编的文集值得注意。基本上或全部地致力于计算流体动力学的期刊，如 *Journal of Computational Physics*, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*，包含着大部分最新的思想和仿真方法。

研究流体动力学系统有三条途径：①在容易处理的极端情况下，求 Navier-Stokes 方程或其它流体动力学模型的分析解；②在大型数字计算机上，用计算流体动力学方法解算流体的数学模型；③对于那些能够较容易地将其特殊过程和参数范围孤立出来的，在自然界中出现的或实验室系统中理想化了的真实流体用实验进行观测。由于这些方法都有各自的长处和不足，为了全面地预计和了解流体系统的动力学性状，这三种方法都是必要的。

与分析方法相比较，计算流体动力学只需较少的限制性假设，并对所有变量给出流场的完整描述。它能处理十分复杂的结构，其方法也容易应用。对于受标量压力场加速的 Newton 流体，Navier-Stokes 方程很好地描述了其流体动力学过程。在有化学反应的流动情况，为了完整地描述所研究的特殊流动系统，往往需要增加一些项或方程。尽管流体连续介质的数学模型是严密而又相当完备的，但其固有的非线性特性和出现奇异性的可能性，使得描述动力学性状的封闭形式分析解只存在于极少数的特殊流动系统。因此，从实际流体系统的分

析处理角度来看, 最好的愿望莫过于近似求解。

有效的近似分析包括定常流动分析, 其中时间导数可以忽略, 这些理想化的定常流动的应用是周期振荡和指数式不稳定性的线性小扰动分析的基础。另一个有用的近似方法是应用简化的几何形状。在势流这一极端情况, 可用复变量变换方法将问题简化为一维或二维的; 在可压缩流和强激波的极端情况, 用相似性方法亦可达到同样目的。封闭形式的解是很宝贵的, 因为它把流动特性随控制参量的改变而发生的变化显式地表示出来。这样, 就可以用最少的计算机时或最少的反复实验次数直接得到优化的近似系统。遗憾的是, 这种方法只能处理理想化的几何形状, 并且通常伴有相当大的限制性简化假设。

甚至在比较理想化的流体动力学结构中, 对很多问题也是不能得到有用的近似分析解的。在仪表、汽车、飞机、船舶和引擎的设计中, 要处理很多流体非线性、时间相关性和真实几何形状的问题, 这通常需要借助于数值计算和实验。相对于实验来说, 计算流体动力学很少有 Mach 数和物体尺度的限制, 并且经济上是高效的。数值仿真优于实验的地方还在于, 计算机仿真的诊断“探测”并不干扰流动且不使所研究的现象变得不可捉摸。

现在, 计算流体动力学的解在精度和分辨率方面, 可与实验室实验结果相媲美甚至超过它。然而, 由于工程师们对现有的实验结果往往不满意, 加之还有小型实验结果用于全尺寸系统的尺度效应问题, 他们的勉强信赖计算机就完全是可以理解的了。另外, 数值仿真不管多么精确, 它毕竟不是, 也不可能是真实世界。数值仿真反映了我们关于流体行为的当代数学理论, 实际上, 它是通过仿真结果与真实世界之间的差别来使我们学到关于流体动力学的一些新事物的, 就象我们通过实验所见到的那样。最后, 虽然数值仿真的花费比实验室实验、现场试验及风洞实验都便宜, 但是在发展和应用对复杂流体动力学问题的仿真时, 所花的费用和遇到的限制仍然是很大的。

1.2 计算流体动力学的现状 计算流体动力学界进行特殊类型计算的能力每提高一步, 总是相应地引起工程师们的期望增加一次。而这些期望很快又转化为研究和开发的需要。为了满足这些需要, 计算流体动力学研究者提供了改进的数值算法和其它先进的诊断软件。与此同时, 硬件研制者提供了一系列大型、快速、准确和“方便用户”的计算机。在过去的几十年里, 改进的计算表示法和计算算法对整个计算流体动力学的能力所作的贡献, 至少与硬件的发展所作的贡献一样多。硬件、软件和算法的共同发展, 使得综合的计算能力提高了好些个数量级。早期的一维气体动力学计算, 是用40个或50个空间元胞(cell)去求解。现在, 用老的一维计算的相同时间可以完成三维问题的计算, 而三维的计算量大约高4个量级。

前面要走的路仍然漫长。实际上仅仅是用以仿真完整汽车、飞机或船只的数学上理想化的定常流, 求解起来依然是件棘手的工作。湍流模型(例如附加耦合 Reynolds 平均应力方程)最好也只不过限于近似方法且通常计算费用昂贵。在真实世界里, 在有旋涡脱落和声-涡或涡-波相互作用的重要情况中, 几乎所有的流动都是非定常的。而这些非定常现象却使得大多数湍流统计唯象理论的推导方法无效。

有几十万个格点的有限差分网格, 甚至当时间步长有1万到2万个时, 解算流动变量也是很昂贵的, 因此, 100万或100万以上元胞的计算很少有人尝试。有限元算法具有处理一般几何形状的能力, 因而日益引起计算流体动力学工作者的关注, 但是, 反演全部矩阵的计算费用使得此法进入时间相关流动领域很受限制。对于计算流体动力学, 基于整体展开的谱

方法被证明比有限差分法或有限体积法更准确，但是相应地用于真实几何形状比较困难，并且对于每一网格点需要作更多的运算。用单调的有限差分法或有限体积法，将大涡仿真用于处理流体对流，开辟了一条完全仿真 Navier-Stokes 方程的途径。这些模型可以有粘性项，但在多数区域不能分辨小尺变湍流，这些区域基于统计的湍流模型应由具有局部时间相关的小网格湍流模型所取代。

计算流体力学问题目前主要在超级计算机上处理，例如 Cray, Cyber, NEC, Fujitsu, Hitachi 等，这些计算机依靠矢量寄存器和流水线获得高速度并有比较少的处理机。它们能满足某些三维定常与某些二维非定常问题的要求，但对于流体力学中三维非定常问题，拿它们来求解则一般说来显得太小、太慢、太贵，以致不能解决问题。

在三维非定常问题中，目前在最大型计算机上作过的许多尝试达几十到几百小时，尽管如此，所得的空间分辨率一般仍是有限的。在周期振荡的封闭盒子与部分周期振荡的具有壁面边界槽(比较理想化的结构)中，持续仿真三维不可压缩湍流，例如 Spalart (1986, 1988), Kim et al (1987), Moser & Moin (1987), Metcalfe et al (1987) 已作到了用  $432 \times 80 \times 320$  个元胞的网格来进行，但是耗资颇巨。因为只有少数设备能完成几千个以上时间步长的计算，所以这些计算的抽点打印结果已纳入国家数据库，以便计算流体力学界的重要部门能够使用它们。

上述理想化的仿真有巨大的价值，对于复杂结构伴有复杂物理现象和较长时间的计算来说，理解这些结果很有必要。要建立适当流体系统的仿真出来的行为同浑沌及非线性动力学的新数学理论之间的关系，至少需要几千个旋涡脱落来“满足(flesh out)”该系统的计算出的返回映射，而这又需要几百万个时间步长，这大大超过了曾经有过的任何“高”分辨率三维模型。我们现在只接近二维计算中需要的(时间)长度。Winkler et al (1987), Boris & Oran (1988) 已作过可压缩流体带有激波与复杂旋涡相互作用的二维高分辨率(一般为  $600 \times 400$  元胞)仿真。虽然这些计算由 100 万个以上时间步长承担(例如 Boris & Oran 1987)，但完成它所需要的机时与 Cray 计算机的几百个计算小时等价。

除去长时间等待结果外，为了这些计算还要付出其它代价。这里趋向于在巨型高效计算机和容易使用之间采取折衷，此处容易使用是指由软件、硬件系统综合组成的所谓“方便用户”计算机，总是需要专门的编制程序方法来从现有的硬件中得到最多的东西。问题表达、数据结构和算法的选择必需取决于最佳的工具。设计新的语言和新的语言编译程序来帮助计算流体力学专业达到高水平的程序性能，这样作要以使他成为软件的试验品而付出代价。因为这个领域仍在极其迅速地发展，所以在当今的超级计算机世界中，正在可靠地、灵活地、准确地工作着的任何计算流体力学模型，都将被某些研究工作者、实验科学家或计算机推销员证明是缓慢的、低效率的和过时的。

1.3 使用计算流体力学的研究方向 遗憾的是，上述算法和硬件的迅速发展似乎趋于某种固有的极限。连续流体的现代表达式正在普遍尽可能地放弃表达式中的每个自由度，解算偏微分方程的现代有限差分法、有限体积法、有限元法以及谱算法已达到这样一点，过此则通过折衷选择计算费用和精度这一办法所带来的好处将递减。现在，更有效的是采用增加网格点的办法来改进空间分辨率及其精度，而不是通过更高阶算法来追求更高的精度。与改进分辨率相比，甚至增加湍流和物理的分模型的复杂程度现在已不那么重要了。

受光速、成本和大规模集成电路可靠性等制约的现代超级计算机，正在普遍尽可能地放弃单处理机的使用。在一个具有共用存储器的单处理机中，寻求更多的流水线的工作也已经达到这样一点，过此则带来的好处将递减。除去高效地编制这些计算机的程序方面有明显困难外，还有硬件通信联络的瓶颈问题，有从越来越多的运算器到一个共用存储器或者到互相之间的存储数据库调度存取数据方面的瓶颈问题。

本文的第2—5节考虑某些新的方向以及目前刚刚出现的试图突破上述这些限制的崭新方法。介绍新方向的四个层次并讨论它们之间的强烈相互作用。第2节讨论表达流体状态的模型方面的新方向，包括元胞自动机 (cellular-automata)，混合元胞自动机 (hybrid-cellular-automata)，分子动力学等方法，此外还有，对流体动力学方程中的自由度 $n$ 取其一的新颖方法，使方程中只有几个动力学上重要的自由度，也考虑在象Euler方程和Navier-Stokes方程等标准流体连续介质模型范围内把连续函数离散化的新方法。

第3节讨论算法的推广及新方向。必需承认并适应的是，通过离散网格如何精确地表示连续函数和对流运算是受到限制的。简单对流方程的非完全但最佳的解，提供了传统方法可以得到的精度的固有上界。接近这种性能的非常普遍的现有有用算法已经存在。计算算法的新方向包括：这些接近最佳的单调方法推广到完全自适应及非结构的网络生成来仿真一般几何形状的流动；对于中等复杂程度的几何形状，用谱单元来获得较高的精度；以避免数值扩散误差为目标的全Lagrange算法的应用。

第4节集中讨论发展硬件中的课题和类似于计算流体动力学的有关课题。在选择计算模型的表达式及计算算法与在特定硬件系统上执行之间，有一个很密切的联系。流体状态的某些数学模型更适合于某种类型而不是另一类型的硬件，新颖的数字算法日益趋向于以模型执行的并行化为目标。事实上，模型的选择通常取决于特定计算机上模型的最有效的执行。

第5节考虑计算流体动力学解决复杂问题的未来方向，以及它对实验流体系统和观测方面的崭新应用。它们都是计算流体动力学与真实世界之间的联系，这里包括：比较复杂的问题；唯象模型的应用；人工智能程序在组织、写出和运行计算流体动力学模型方面的潜在应用；计算流体动力学方法在实验和实时系统中日益增长的应用。因为这四个新方向层次都互相影响，因此，对计算流体动力学来说，目前是一个振奋人心的时代。

## 2 新颖的表示法

2.1 计算流体动力学中的离散化 计算流体动力学的目的是计算连续流体变量如 $\rho(x, t)$ 的正确的时间演化，此处 $x$ 表示空间变量而 $t$ 表示时间。函数 $\rho(x, t)$ 随时间的演化由不断修改的一组离散元胞值近似表示，这些元胞值是在由离散的时间步长分离成时间序列中得出的。在计算流体动力学中这是一个基本概念；空间尺度分割成离散地连接的元胞，通常叫有限体积或有限元；时间离散化为短的时间步长，叫时间步长。尽管进行这种分割离散的方法是从时间相关问题的观点提出的，但这种方法对探讨定常态解也是适用的。这种空间和时间的离散化，是迫于通常的计算机只有有限的存储器把数据分割成许多浮点字而不得已采用的。

根据被近似的连续守恒量，有很多方法解释离散变量。考虑单元 $j$ 的位置 $x_j$ ，依赖于对 $x_j$ 不同的解释，它可以是：①元胞中心的位置；②元胞质量中心的位置；③元胞中的特殊点，此处 $\rho_j$ 恰好已知。

考虑与某个时刻 $t^n$ 有关的 $\rho$ 的元胞值 $\rho_j^n$ 和 $x_j$ ，这可能是下列情形之一；①在时刻 $t^n$

在特定位置  $x_i$  处  $\rho(x, t)$  的值；② 在时刻  $t^n$  接近特殊位置  $x_i$  处  $\rho(x, t)$  的特征值；③ 在特定时刻  $t^n$ ，由计算元胞界面围成的体积内连续解的平均值；④ 在元胞  $x_i$  内， $\rho$  在  $t^{n-1/2}$  与  $t^{n+1/2}$  之间的时间平均值；⑤ 空间与时间的平均值；⑥ 因变量  $\rho(x, t)$  线性展开中一组基本函数的系数。

每种离散化都由一组数值和解释这些数值的一个规定所组成。

每一个这些解释都有不同的特征，每种近似方法在某些情况都有优于其他方法的地方，而且每种都有各自不同的有关解释的算法。可能的计算流体动力学表示法和相应的算法，其数量甚为庞大。正确的选择依赖于待解算问题的许多特征和现有计算机的种类。然而在所有的情形，在表示法中只有有限多个离散值，而且每一离散值只给定有限的精度。这意味着相对于要予以近似的连续问题来说，计算机得到的解中不可避免地要失掉一些信息。计算中的误差来自离散化的不确定性。这种不确定性的根源在于，在离散的空间单元和时间步长中，将细致的解的结构有关信息丢失了。所有用有限个数值去表示连续剖面的方法都存在这个问题。

2.2 可供选择的各种离散连续量的方法 数字计算机要求用离散法表示连续介质，但是有很多离散化方法可供应用。流体状态的可能的表示法中，其不同的离散化的基础可以设想有 4 个不同的层次：①硬件层次；②算法层次；③数学层次；④物理型范 (paradigm)。这 4 个层次并不真的容易分开解决和讨论，因为在任何一个层次上选择物理型范或模型，都会强烈地影响其后所有低层次上对表示法的选择。在可能定性改善计算流体动力学的希望方面，流体的这些可能的表示法是制约新方向的最基本的因素。可能得到很大的报偿。然而风险也大，因为需要对观点作重大的改变，还因为现有的计算机硬件并不最适于表示这些可供选择方法的基本偏离最有利的情况。

表达式的最高层次是物理型范。在原子层次上流体并不真正连续，因此自然要问，基于流体的原子离散本质进行计算离散化是不是有用的方法。对流体动力学来说，元胞自动机及密切相关的分子动力学模型，是基于此概念的可供选用的物理表示法的一些例子，并且目前正在受到很大的注意。第 2.3 节简要地评述格子气元胞自动机模型。第 2.4 节考虑更加直接地基于流体的原子基础的分子动力学离散化。

紧接在物理层次之后的是数学层次，亦即如何从数学上控制和表达物理型范。在这个层次上，常见的流体连续介质模型的运动 Lagrange 表示法正被研究来用于克服数值扩散，这种扩散在计算流体动力学模型的固定 Euler 网格上出现，以及用于表示流体与不同类型物质之间的界面。下面第 3.5 节考虑这种可供选用的表示法。

对于一组 Euler 网格密度的可能的算法解释，上面已阐明如何用于离散表示法，其依赖于伴随元胞值的解释数量与实际网格值一样多。下面第 3.2—3.4 节会看到算法层次方面当前趋势和新方向的推断。单调算法正在广泛流行。设计确保正定的物理变量，如质量密度在对流穿过计算网格时保持为正值，这些算法是趋于最佳性能的。因而，对于自适应和非结构的网格生成来说，这些单调算法的变种正被设计来用于推广到复杂的与时间有关的几何形状。

这种算法表示法层次并不是最低的层次。在更为基本的硬件层次上，应用实质同样的元胞值定义和解释的可选用方法，有可能表示相同的连续函数。元胞自动机模型用单个字位代替浮点数，宏观流体变量由许多这样的字位的平均值确定。虽然这些元胞自动机是否象在字

位换字位的基础上 (on a bit for bit basis) 以网格离散化为基础的通常的浮点一样精确是有问题的, 但其他硬件数值型范可能提供的精度, 比离散网格上一系列浮点元胞值要高。

在有限区间  $(x_1, x_2)$  考虑一个标量密度  $\rho(x, t)$  在零与某一最大值  $\rho_{max}$  之间变化。如果元胞宽度均匀不变, 则只需确定与这些元胞有关的密度值。如果元胞尺寸任意变化, 则需要两倍的计算机存储, 因为元胞界面 (或元胞中心) 的位置与元胞密度一起变成为自由度。但是, 因为密度在其中缓慢变化的元胞的尺度可以很大, 所以几乎总是为任意元胞间隔付出明显增加的计算费用。

在通常的表示法中, 每一元胞密度值与元胞位置通常都是相对于所选的某个原点确定的。于是, 在每一元胞密度和元胞位置中要用很多字位来重新确定这些量与零点的偏移。如果只确定从一个元胞到下一个元胞的密度差和元胞界面位置差, 则可以使用相当低精度的数目, 而且可以把许多更多的数目存储在固定数量的存储器中。作为一个例子, 考虑4096个字位的存储器分割成每段64个字位的实数。如果允许元胞间距和密度值两者均适当变化, 则可能有32个元胞。虽然每个存储值的精度为  $10^{14}$  分之一, 但一般密度剖面很可能在任何特定点大约精确到不大于百分之一。

考虑将这同样的4096个字位分为256个线段, 每个线段16个字位。每个线段由一对8个字位的数组成, 分别给出定义剖面的连续曲线上从一个结点到下一个结点的元胞位置和密度的位移。在这种可选用的“双三角”表示法中, 密度值与结点位移二者取离散值的精度均为  $10^4$  分之一左右, 与64个字位的常规浮点表示法相比元胞 (密度) 值或位置都粗糙得多。然而, 剖面的全部数据在精度上至少提高10倍, 因为在字位数相同的情况下, 此表示法的元胞数目为8倍。另外, 还可以表示真正的不连续性甚至多值函数。

尽管这种表示法也有明显的缺点, 例如应用此法时必须特别注意选定标度和现代超级计算机的低效率, 与在常规计算机上实现元胞自动机模型相比, 这些缺点并没有更多的妨碍。确实, 如果出现或者1个字位数 (如象元胞自动机支持者所声称的那样) 或者64个字位数 (如象常规计算流体动力学专业人员所声称的那样) 的结果都是最佳的, 那将是真正出乎意外的。

### 2.3 格子气元胞自动机模型 Frish et al (1986) 最近在二维空间论证了不同于

Navier-Stokes 方程的流体动力学建模与表示法的另外的模型。这个模型称为“格子气自动机”模型, 是“元胞自动机”模型这一普遍类型中特别令人感兴趣的一个例子。这类模型以简单的、局部的基本规律为基础去完成广泛的复杂计算。图1是这种标准元胞自动机表示法中六边形格子的图解说明。格子气的“原子”是计算机理想化了的真实流体 (气体或液体) 的原子, 这些原子在其无规则热运动中来来回回地跳动。象真实流体一样, 格子气原子的数目、动量、能量都守恒。Hasslacher (1987) 和 Shimomura et al (1987) 提出了一个元胞自动机流体模型的

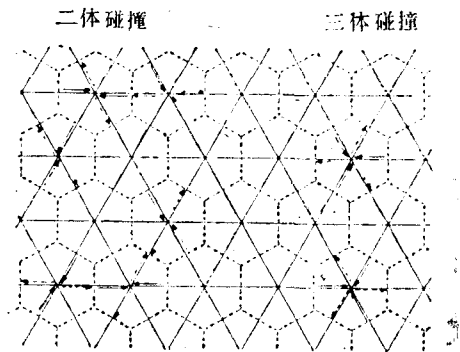


图1 有典型碰撞图示的二维六边形格子气元胞自动机网格示意图

特别清晰的表示法。

为了排除需要高数值精度的碰撞积分所付出的高昂的计算机费用，允许格子气原子的运动和相互作用，与其物理相似物比较，是受很大限制和程式化的。而碰撞是由最多需要几个字位精度的简单的局部规则来完成。希望在于：逻辑上需要能够制造特别用途的大规模集成电路，这种电路在单个芯片上具有基本元胞自动机的许多复制件。

格子气模型通常是确定性的。仿真的格子气原子位于规则离散格子的结点上，一般是在正方形或六边形围成的角点处，如图 1 对二维所图示的。原子只在任何一个时间步长内在相邻的结点之间运动，因此原子被限制在很少几个特别的离散速度之一，该速度恰好有能力携带它到靠近的格子位置之一。

这个人工系统的理论作为流体动力学模型是基于如下事实：随着格子结点数目变大和格子分辨率变得非常精细，在足够精细的格子上，高度程式化的原子相互作用，足以在统计上逼近理想流体的宏观行为。这些元胞自动机模型作为解决流体动力学连续介质模型的另一模型而得到实际应用，决定性的因素是格子气模型以多快的速度逼近 Navier-Stokes 方程的行为，因为已知 Navier-Stokes 方程近似表示真实气体和流体的宏观行为是非常准确的。

为了对格子气的兴趣而了解其物理基础，不妨回想一下，流体可在不同描述层次上或不同“分块 (chunking)”层次上予以描述 (参见 Hofstadter 1979)。在原子或分子层次上，一群单个的原子按照力学的基本反作用定律碰撞。在较高层次上描述，因全部沿轨道运动的原子自由度数目巨大，需以这些粒子的分布函数来取代。这大大减少了实际上很重要的自由度数目，但却由于要平均粒子的瞬态属性而使问题的总自由度数形式上变为无穷大。这些平均过程是形成动力学不可逆性的原因。进一步平均这些粒子的动理学方程，将把流体模型简化为近似的特别易于处理的宏观流体方程，其中介质表现为连续介质。

导出数学模型这种第三层次的描述是人类智力的一个大胜利：由此提出并解出了偏微分方程。然而，当问题难到不能求分析解时，我们不得不对这些非线性流体方程数值上求解。在求数值解时，因为自由度数在形式上是无穷大，所以我们不得不将连续流体方程在某种网格或格子上作数值上的离散。代替离散连续介质方程组的 (不管怎样，连续介质方程组恰好是离散的原子或分子动力学方程的光滑形式)，是元胞自动机的倡导者证明：我们应当对原子或分子采用基本确定论的 Newton 定律的简单形式。在一个小区域中对许多小格子气原子求位置和速度的平均，就能得到该小区域中宏观流体变量的近似表示式。

元胞自动机模型的有力优势，是其在大规模并行计算机中实行运算的适用性，例如，10 亿台闭合连接的微型计算机能同时全部啃掉一个大问题。新的格子气模型必须克服的实际障碍，是必须把大力气花在非常多的自由度上以获得足够光滑的解，即与实验结果相比较，以及与用常规 32 字位和 64 字位对中等 Reynolds 数和高 Reynolds 数流动的计算结果 (例如见 Yakhot & Orszag 1986, Dahlburg et al 1987) 比较，是光滑的解。

在仿真真实的流动中，在专门的元胞自动计算机能够同通常的超级计算机竞争以前，简单的格子气模型用于低密度，低 Mach 数和用于三维流动时，必须克服与尺度有关的附加问题。在总问题的另一方面，已对下列问题发明了自动网格算法：Chen & Matthaeus (1987a) 对无源标量对流，D. Rothman & J. Keller (私人通信) 对有界面的不混溶流体，Montgomery & Doolen (1987) 和 Chen & Matthaeus (1987b) 对磁流体动力学。虽然这

些自动机模型尚未达到它们的浮点表示法对应物那样在整个范围的物理灵活性，但是回答了一个很重要的问题：这个新的计算流体动力学方向的前途，能有多么远大？

或许，这里有一个历史教训值得吸取。若干年前，Symon et al(1970)考虑了一个元胞自动机模型去解相对接近不可压流体方程的 Vlasov 方程。这个模型被形容为“字位推移”(bit pushing)，而且指出它等价于称为“最近网格点”(nearest-grid-point)算法的一种简单的连续等离子体仿真算法，只要这种算法以有限的分辨率进行运算。“最近网格点”法在当时被大量应用，但现时这两种算法都不再使用。在当时，因为粒子数远低于建立真实等离子体模型所必要的数量，所以在流动着的等离子体中，粒子密度(在该情况中即电子和离子)的统计涨落简直是太大了。现在，等离子体是用离散的粒子来仿真，但这些粒子被表示成光滑地运动着，表示成以最少双浮点内插法来光滑重叠的插入码，以帮助将不能接受的数值涨落予以光滑。

纯元胞自动机确实给出了一个真正的希望：为更深入了解更普遍和抽象的过程作出贡献，其中包括过程的原因，计算系统和认识系统等方面。Wolfram (1985)评论说：“物理过程与计算之间有很密切的对应关系。一方面，理论模型通过计算描述物理过程，这些计算依据代表物理定律的算法将初始数据加以变换。另一方面，计算机本身就是物理系统，服从物理定律。”元胞自动机提供了一个灵活的工具，不仅可以探测物理上计算可能性的极限，而且还通过局部连接的“神经网络”研究，探测发生在大脑中的信息的大规模并行的自组织运算(参见 Hofstadter 1979)。

2.4 分子动力学 在真实世界里，流体动力学来自极大数目分子运动的统计平均。在经典意义上，分子之间的碰撞保持质量、动量和能量守恒。当量子力学的内部自由度起作用时，它们一般被吸收到宏观物质特性中，例如联系热力学能量密度与压力的状态方程。元胞自动机概念引人注目的发展在于，应用浮点数目表示位置、速度和加速气体原子的力。因为与元胞自动机模型中少数离散碰撞可能性相比，碰撞的连续介质是可能的，所以应用分子动力学作为计算流体动力学的物理型范，显然消除了元胞自动机模型中最坏的非物理特性，例如有效压力张量的各向异性。

确实，几年来分子动力学已用于研究测量及计算的粒子之间作用力定律同粒子系统的集体性质之间的联系。导致气体冷凝的二聚物(dimer)的形成以及稠密气体修正状态方程，是分子动力学能够仿真宏观量的例子之一。迄今为止，分子动力学的主要应用是，已作为物质微观表示与宏观表示之间的一座桥梁。这里的新方向是这样的看法：计算机最终变得足够快速足够庞大，以便能够在实用意义上给分子动力学展宽通往流体领域的所有路子。

分子动力学方法研究流体动力学，通常取大大简化的力定律以便将计算量减至最少，这与元胞自动机模型的精神实质完全相同，但所用自由度数较少。折衷办法是元胞自动机模型中的计算简易性以分子动力学模型中的物理真实性为转移。Greenspan (1985)曾考虑过分子动力学方法用于流体有关的一些基本问题，例如，随着粒子数目的增加收敛于连续介质的行为。Rapaport & Clementi (1986)曾用此方法进一步证明经过障碍物的流体绕流中涡的形成，如象 Shimomura et al (1987)用元胞自动机模型所示出的那样。

在这种分子动力学方法中，基本的计算方面的问题也与元胞自动机模型中的一样。要求在一个即使很小的流体体积内将统计涨落的水平减小到某个可接受的值，所需的粒子个数通



常将是大的无法接受的。另外，在分子动力学建模中还有其他重大的计算上的问题，即决定能足够靠近的有显著作用的邻域问题。在元胞自动机模型中这个问题不存在，因为只有邻近的格子位置才是相互作用的潜在源泉。

2.5 紧邻 (near-neighbors) 算法 分子动力学计算的重要部分是，需要频繁地决定一大堆常常似乎是无规运动着的结点中哪些结点是紧邻的。因为系统中每一个结点都有可能与另外  $N-1$  个结点中的任何一个相互作用，所以计算费用很高。因为  $N^2$  个可能相互作用的结点对中只有几对可能是重要的，故称这个问题为  $N^2$  问题。这个紧邻问题曾是很多研究的课题与评述的对象，例如 Hockney & Eastwood (1981)。

单调 Lagrange 网格是设计来攻克  $N^2$  问题的一个新方法 (Boris 1986a, Lambrakos & Boris 1987, Lambrakos et al 1988)。单调 Lagrange 网格是一个密集数据结构，用以存储描述  $N$  个运动结点所需要的位置和其他数据。在单调 Lagrange 网格数据阵列中，一个个带有三个空间坐标的结点有三个指标。用这些指标表示的存储位置中，有关每一个结点的数据是有序的，这样，在真实空间里互相靠近的结点，在单调 Lagrange 网格数据阵列中是自动地紧邻的。对于分子动力学模型，Lagrange 元胞自动机模型和连续介质 Lagrange 计算流体动力学模型，这就简化并加快了紧邻的计算。迄今为止，虽然格子气模型已经在固定格子上实现了，但密度可能变化很大的稀薄格子，也是单调 Lagrange 网格表示法的一个自然而然的应用。只有活跃的格子气原子的相当小一部分必须予以表示。未填满的格子位置可能被排除在描述之外，这一方法已由 Lambrakos & Boris (1987) 用于元胞自动机模型与分子动力学模型。这些可供选用的流体表示法不允许 Lagrange 流体模型的不连续网格涨落，但是容许象前面讨论过的统计性质的剧烈涨落。

基于单调 Lagrange 网格数据结构的计算机程序，不需要核对  $N-1$  个可能的距离，以确定哪些结点是靠近某一特别结点的。因为单调 Lagrange 网格结点的指标在所有方向上随着 Lagrange 结点坐标单调变化，所以邻近的结点的指标是自动已知的。实际计算中算法的成本受结点与其紧邻点相互作用的计算量所制约，可把计算的时间尺度看作  $N$ 。

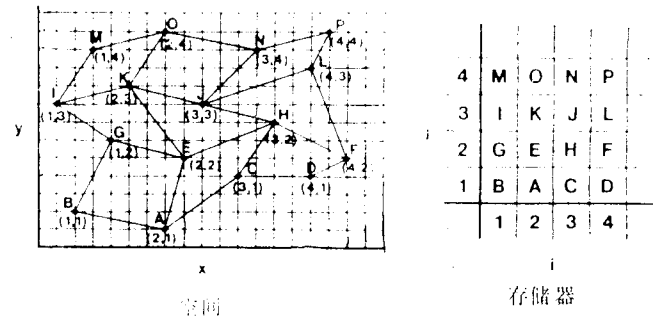


图 2 二维单调 Lagrange 网格的例子

图 2 给出了一个小的二维单调 Lagrange 网格的例子。因为空间坐标确定了位置的自然序列，所以在二维空间中总是可能用一组无规位置把两个网格指标联系起来。图中示出的单调 Lagrange 网格，是把一个二维区域中非均匀分布的 16

个结点连接起来的许多可能的  $4 \times 4$  个单调 Lagrange 网格之一。

所示出的二维单调 Lagrange 网格满足下列指标约束条件：

$$x(i, j) \leq x(i+1, j) \quad i = 1, \dots, N-1, \quad j = 1, \dots, N$$

$$y(i, j) \leq y(i, j+1) \quad i = 1, \dots, N, \quad j = 1, \dots, N-1$$

(下转第 56 页)

# THE APPLICATIONS OF STRESS-WAVE THEORY TO PILE ENGINEERING

Jiang Li-mao

University of Science and Technology of China

Kou Shao-quan

Beijing University of Science and Technology

Lu Yue-ping

Institute of Mechanics, Academia Sinica

**Abstract** This paper presents an historical overview of the stress wave theory applied to piles and gives its state-of-the-art and problems to be solved.

**Keywords** *stress wave, pile, capacity, driveability, integrity*

---

(上接第 113 页)

图 2 中示出的 16 个结点的空间位置是不规则的,但是在单调 Lagrange 网格中,在网格指标与位置之间采用单调映射,这些结点的指标号却是规则的。在每一空间方向上每一网格的横行(和竖行)强制性地用单调指标加以映射。根据这一规定在数据存储中存储的结点,最多有两个或三个与其邻近的结点能影响它们。因而,对梯度、导数或力的计算,只需考虑一部分可能的结点-结点相互作用。没有必要进行搜索以判明紧邻结点位置,而且对于应用这种数据结构并行方法或多处理方法来说,必要的逻辑运算和计算是空想的。仅仅要计算位于计算机存储器的很小一个邻接部分中结点之间的相互作用。即使这个方法导致计算几个远距离结点的相互作用,它提供的也是计算费用显著减少。因为互相靠近的结点是通过邻接的存储器标出指标的,所以这种计算可以高效率地矢量化。

根据无规定位的结点,以  $N \log N$  为尺度构造的算法可用以建立一个单调 Lagrange 网格。对于任意的数据组,总可以找到一个单调 Lagrange 网格,不过它不一定是唯一的。进而,当真实空间中结点的运动破坏某些单调条件时,存在另外一个更快的  $N \log N$  算法将恢复单调 Lagrange 网格次序。应用这些单调 Lagrange 网格算法已减少了分子动力学计算的时间。在 CRAY 计算机上,当结点已显著地移动时,重建单调 Lagrange 网格典型地用了每一时间步长的 3—5%。另外,单调 Lagrange 网格是可以完全矢量化的并可作并行计算机的最佳应用。因此,它也是研究流体连续介质动力学的快速自由 Lagrange 模型的基础,如象第 3.5 节所描述的那样。 (未完待续)

张德华译自: *Ann. Rev. Fluid Mech.*,

21 (1989): 345—361. (董务民校)