

在教学方面,从忠诚党的教育事业,认真教学、严格要求已形成传统作风,教学量很大的理论力学、材料力学和流体力学的教学质量不断提高,效果较好,一般力学教研室被学校誉为教学工作“信得过”的先进教研室。副系主任吴镇教授长期以来热心于教育工作,做出了很大贡献,1981年被评为六机部劳动模范,他对教学精益求精,经他一再修订的理论力学校铅印教材,已被许多重点高校所采用。

目前,全系近百人的教师队伍,承担着艰巨的教学、科研任务,中年教师在各方面起着骨干作用,新生力量不断成长,学科梯队逐步形成。但是工程力学系与其它老系和全国同类专业相比,历史较短,很多工作还缺乏经验,在教学与科研体制、学科建设、师资培养,以及教学计划如何更好地适应我国当前“四化”建设需要等方面,还有许多改革工作要做。

(李思简)

## 知识园地

# 经典流体的计算机模拟试验—— 蒙特卡洛法和分子动力学法

孙 祉 伟

(中国科学院力学研究所)

物质是由分子、原子组成的。尽管我们往往在不考虑分子、原子的微观运动情况下,照样可以把握物质的宏观运动。如流体力学的基本方程,虽然不涉及流体本身是由什么组成,但我们仍然可以成功地运用它去解决实际问题。但最终要深刻认识宏观规律或进一步发现新规律,从物质的微观结构出发去探求其宏观运动规律,无疑是一个根本性的重要途径。正是由于这个原因,《流体力学年鉴》的主编在1980年特约 G. E. Uhlenbeck 写了一篇文章<sup>[1]</sup>,专门论述了流体力学与统计物理学间的关系。然而,从微观角度研究物质并不简单,它要考虑极大量分子的同时相互作用和运动。除了在某些理想情况下可作简单处理外,一般来说是很难用解析方法处理的。高速电子计算机的发展为解决这一问题带来了希望。计算机模拟试验,正是从分子运动的微观层次出发,以统计物理的原则为基础,通过对“大量”分子运动状况的直接模拟,而得出物质的宏观性质。近二十多年来,这方面的发展是十分迅速的。从经典流体的平衡性质、输运性质、激波的传播到晶体生长、固体缺陷的扩展等等,它已广泛应用于物理学的各个方面。由于不同领域的特点不同,在处理方法和技巧上也有很大区别。我们这里仅以经典流体为例,来说明计算机模拟的原理和特点。这里说明经典流体,指不显示量子效应的流体,例如,一般的液体,高度压缩了的中性或带电流体等。

众所周知,对稠密流体的统计力学处理,要比对稀薄气体和固体困难得多,因为他们不能象理想气体或

理想晶体那样,把耦合的多体问题简化。计算机的巨大运算能力,为直接解决这个多体问题提供了条件。计算机模拟的优点是什么呢?首先,它所给出的关于“模型体系”(其中假设了分子间相互作用的具体形式)的数据,原则上是精确的。也就是说,其数值结果在统计误差的限度内是准确的,而只要计算时间足够长,统计误差可以做到足够小。所以,计算机模拟的一个目的是把它的结果与真实体系的实验数据做比较,以检验“模型体系”在什么程度上与真实体系相符。同时,采用恰当的模型,计算机模拟可以成功地预言真实体系的性质;另一个目的是可以把模拟结果与分析理论做比较,这样就可以检验在分析处理中所做的各种近似或假设是否合用或在什么情况下合用。而直接把理论和真实实验做比较时,往往很难区分是模型有问题,还是近似方法不妥。另外,计算机还能提供一些实际实验所无法测量的数据,这些都为促进理论的发展提供了有利条件。

## 1. 分子动力学和蒙特卡洛法

在分子的层次上模拟流体行为有两个基本方法:即分子动力学法(Molecular Dynamics-MD)和蒙特卡洛(Monte Carlo-MC)法。

在分子动力学法中,设想把 $N$ 个粒子(可以是原子、分子或离子)的体系放在一个体积单元(一般是正方体)中,每个粒子的初位置和初速度事先给定,随后的各粒子的运动状态是按照一定的时间步长 $\Delta t$ ,数值

求解牛顿运动方程(对球对称分子)或耦合的牛顿-欧拉运动方程(对非球对称的刚性分子除平动自由度还有转动自由度)而确定的。时间步长  $\Delta t$  的选择,依赖于体系的温度、密度以及粒子的质量和相互作用势等因素。对液氢的模拟,其典型时间步长为  $10^{-4}$  秒。一般要经过  $10^3$  到  $10^5$  步才能给出满意的结果。体系的平衡性质,可用时间平均来计算:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T A(t) dt \approx \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M A(m\Delta t)$$

式中的  $A$  可以是动能(由它可以计算温度值)  $\langle \quad \rangle$  表示平均,  $A$  也可以是维里(由它可以计算压强值)等等。上式假定  $t = 0$  时体系处于初步平衡态,  $T$  是足够长的时间,一般是从初步平衡态开始计算机模拟的整个时间,  $\Delta t$  为时间步长,  $m$  为总步数。可知,除了初条件(座标、速度)是事先选定输入计算机的外,原则上讲以后整个的计算过程是完全确定的。

与此不同,在蒙特卡洛法中,随机性是本质的。体积单元中  $N$  个粒子的坐标是逐次由计算机控制而随机变化的,但这种变化是使体系在相空间中,每个位形出现的频率与特定统计系综的相应几率密度成正比(例如,对正则系综,几率密度为  $\exp(-V_N/kT)$ , 其中  $V_N$  为体系势能,  $k$  为波尔兹曼常数,  $T$  为温度)。这样,粒子坐标函数的系综平均(例如势能或维里)即可作为上述由计算机给出的一系列位形的无权平均而得到。所以,就上述意义讲,在蒙特卡洛模拟中,各个分子坐标的变动,并不与分子的实际运动相联系,它没有明确的物理意义,只是一种随机取样。一般是采用重要性取样(importance sampling),即按照一定的几率给出一系列位形。为了得到可靠的结果,往往要采用  $10^3$ — $10^6$  个位形。位形出现的先后次序也没有特殊意义。所以用蒙特卡洛法模拟,所估算的物理量是对系综平均求的。但随着蒙特卡洛技术的发展,现已在某种意义上把它理解为“时间”平均(这里的“时间”只表征一系列状态在先后次序上的标号,并非物理意义上的时间),在这种认识的基础上,发展了解决非平衡过程的技术(可参考文献[2])。

前面已经说过,计算机模拟是直接研究多体问题。但是,实际的研究对象总要包括  $10^{23}$  级的分子数目。即使是更强大的计算机,也不可能模拟如此巨大数目的粒子行为。那么,计算机模拟的粒子又多到什么程度呢?近二十年来大量工作已证实,就绝大多数实际目的来说,几十到几百个分子就足够多了,用这个数量的分子即可很好地估计几乎各种条件的宏观体系的行为(临界点附近的行为是个明显的例外)。

为了能用较少的粒子(一般小于  $10^3$ ) 数来有效地模拟大体系的行为。在应用上述两个模拟方法时,几乎都无例外地采用了所谓周期边界条件的处理办法。这个办法是考虑一个确定的基本区域(通常是立

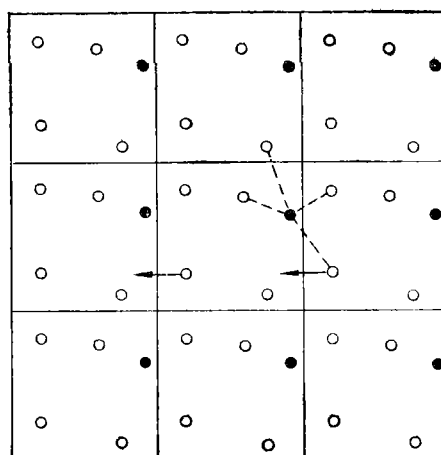


图1 两种情况的周期边界条件,中间方框表示基本单元,其它8个为它的“像单元”,涂黑粒子的四根虚线表示只与这四个粒子存在相互作用

方体),其中置入  $N$  个粒子,然后设想整个空间周期性地填满了与这个基本区域(或单元)一模一样的“像单元”,每个像单元内发生的一切在任何时刻都与基本单元的相同(在三维情况下,基本单元被 26 个像单元包围)。即,每个“像单元”也包含  $N$  个粒子,这些粒子,也处在相同的相对位置上。图 1 给出了周期边界条件的二维示意图,当一个粒子通过中央位置的基本单元的一个界面进入或离开该单元时,该粒子的一个像即同时通过与该界面相对的界面而离开或进入相邻的像单元,所以每个单元的粒子总数仍是  $N$ 。选择粒子数  $N$  和基本单元的形状一般采用的办法是,当把这些粒子安排在适当位置上时,周期边界条件要保证产生一个与所研究的物理体系相应的完整晶格。例如,氢的晶格结构是面心立方,所以会自然地选用正立方体为基本单元,且使  $N = 4n^3$  ( $n$  是整数)。这就是为什么广泛采用的模拟粒子数为 4, 32, 108, 256, 500, 864……, 等等。

为了缩减计算量,总是假设粒子相互作用势可分解为对势的叠加,即  $V_N = \sum_{i < j} V_{ij}$  ( $V_N$  为  $N$  个粒子

的总势,  $V_{ij}$  为粒子  $i, j$  间的对势),这个假设并非不可少的,它只是极大地简化了计算。另外在考虑相互作用时,还常应用“最近像”作用规则。这个规则规定,给定的  $i$  分子只与离它最近的另外  $(N-1)$  个分子的像(或它们本身)存在相互作用。为此常用的办法是把分子相互作用力的范围限制在小于单元边长的一半。但是,如果真实的势作用半径很长(如离子流体),这种人为地把作用势截断的办法就不可取了,需采用其它技巧。

大量的研究已经表明,上面所说的周期体系能很

有效地代表它所模拟的宏观体系。一般来说,当  $N > 100$  时,模拟体系的结果对  $N$  的依赖性就不太明显了。例如,对计算维里系数来说,已有人证明过,用  $N$  个粒子的周期体系与  $N \rightarrow \infty$  的体系比较,其差别为  $1/N$ 。对计算压强来说,用 100 个分子来模拟无穷多分子的体系,其压强的误差为  $1/100$ 。但是临界现象是个例外,因为临界区的特点是大尺度的密度涨落,在这种情况下,应用周期边界条件就会掩盖了长程涨落,因而不能如实地反映临界区的本来面貌。另外,周期边界条件对研究与时间相关的物理过程也影响很大,因为局部扰动将会通过周期体系而重复出现(尽管可能以衰减的形式),它的循环再现的特征时间是  $L/c$ ,  $L$  为基本单元的边长,  $c$  为声速。在比这个特征时间更长的间隔中去计算与时间有关的过程时,周期性会造成虚假的贡献。

## 2. 一些结果

Metropolis 等在 1953 年的文章中<sup>[3]</sup>,首先用蒙特卡洛法就两维刚球情况计算了流体的状态方程,并在该文中引入了基于“重要性取样”的取样方法,该法后来一直被各种物理问题的模拟所采用。Alder 于 1957 年发表了他用分子动力学方法进行计算机模拟的文章<sup>[4]</sup>。

第一个有力证明计算机模拟能准确重复实际流体宏观物性的是 Wood 和 Parker 1957 年的文章<sup>[5]</sup>。他们基于蒙特卡洛法,利用从第二维里系数导出的  $L-J$  势(Lennard-Jones)的参数给出了沿氩的  $55^\circ\text{C}$  等温线的热力学性质,与实验测量的结果吻合极好。

从已发表的文章看,对一些不同的模型体系已进行了广泛的计算机模拟研究。特别是刚球势和  $L-J$  势的稠密流体的性质已有了相当精确的模拟结果。关于双原子分子的流体或更复杂的液态水的模拟研究也已有相当数量的文献报道。

这里介绍两个很有意义的结果。图 2 和 3<sup>[6]</sup>给出的是由分子动力学模拟得到的,32 个刚球粒子的周期体系,经历了约 3000 次碰撞的过程中各粒子的轨迹。图 2 是密度很高的情况,图 3 是在液体密度下的图象。比较这两个图可知,密度很高时,粒子基本在平衡位置附近运动,整体显示有序结构,不同格点上的粒子轨迹不相交错。根据这种图象,我们可以自然地想到在高密度下,采用所谓“笼子”模型(设想每个粒子被禁固在一个由周围粒子集体形成的一个平均势阱中运动,从而可以化简多体问题)必然是行之有效的。而在图 3 的密度下,所有粒子的运动呈无序状态,所以笼子模型就不再适用了。从这里可以看到计算机模拟可以为我们采用什么近似理论提供了很有价值的线索。

图 4 给出了由分子动力学方法所模拟的二维刚球(或刚盘)体系<sup>[6]</sup>的相变情况。它采用了 870 个刚盘,

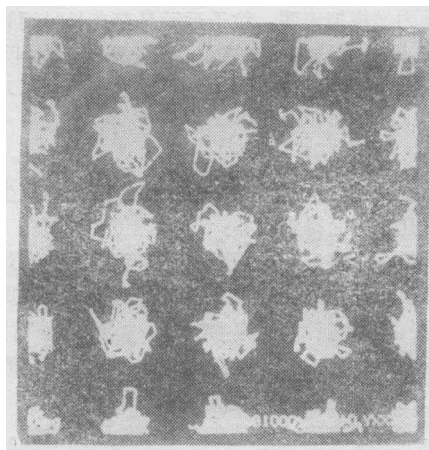


图 2 固相中 32 个粒子的周期体系各粒子的运动轨迹

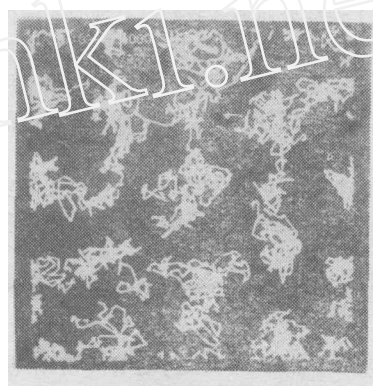


图 3 图 2 中的体系变为液相后的运动轨迹

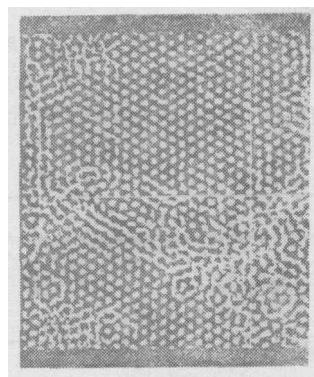


图 4 由分子动力学计算得到的刚盘体系两相区的粒子运动轨迹

从所显示的粒子行迹可以看出,有一部分粒子只在平衡位置附近运动,这相当于固相原子的有序情况,另一部分区域则显示无序情况,表示液相的存在。所以整个图象证实了固-液相变的存在。

计算机对输运性质的模拟已使人们获得了一些颇具启发性的信息。例如,描述流体中扩散过程的 Fick 定律是与流体粒子运动的马尔可夫过程相联系的。但

分子动力学模拟表明,粒子运动是存在长时间的记忆效应的,即并非马尔可夫过程,在此基础上对 Fick 定律的扩散系数做了修正<sup>[1]</sup>.从而使人们深化了对该问题的认识.

综上所述,运用计算机模拟的方法我们至少可以从如下几个方面得到收益:

1. 是一个直接解决问题的有力手段.特别是在一些实验很难进行的极端条件下,它仍能为我们提供参考数据.例如在计算爆轰参数时,需要了解气体在高温高压下的状态方程,这在实验上是难以实现的.但我们已用 MC 法相当满意地给出了结果<sup>[2]</sup>.

2. 许多现有理论都是在一定条件下成立的,但对某些“过渡段问题”就很难处理.如在分子束实验中,需要了解有一定压力的气体通过小空向真空中膨胀的过程.对于连续介质流体我们已有现成的流体力学方程可用,单纯的粒子在真空中的运动,也容易用力学规律解决.但在这两者中间的过渡段,则很难用已有的知识去处理.在这种情况下计算机模拟却仍然可以发挥作用.

3. 计算机模拟可以为我们提供实际实验中所测不到的中间数据信息.从而为理论的检验和发展创造了条件.

4. 可以用计算机模拟实验来判断理论工作中的误差是来自模型体系本身还是数学近似方法.

总之,计算机模拟为我们从分子运动的微观层次出发更深刻地认识流体的宏观性质开辟了新途径.有人说“微观化”和“计算机化”是力学现代化的两个重要方面,计算机模拟作为这两个方面的结合,确实已经显示出很强的生命力.可以预期,它很快会被推广为科学研究上的一个一般性的方法.

### 参考文献

- [1] Uhlenbeck, G. E., Ann. Rev. Fluid Mech. (1980).
- [2] Binder, K., Monte Carlo Methods in Statistical Physics, Ed. Springer-Verlag (1979).
- [3] Metropolis, N. et al., J. Chem. Phys., 21(1953), 1087.
- [4] Alder, B. J. and Wainwright, T. E., J. Chem. Phys., 27(1957), 1208.
- [5] Wood, W. W. and Parker, F. B., J. Chem. Phys., 27(1957), 720.
- [6] Alder, B. J. and Wainwright, T. E., 127 (1962), 359.
- [7] Alley, W. E. and Alder, B. J., Phys. Rev. Lett., 43(1979), 653.
- [8] 陈致英、孙祉伟《全国第二届蒙特卡洛法学术交流会》(1983).



《小问题》栏欢迎来稿  
出题,题目(附解答)请寄  
北京大学力学系《小问题》  
组,采用者将致薄酬.

57. 简支梁  $AB$ , 跨度为  $4a$ ,  
离某一刚性水平面的距离为  $\delta_0$ .  
(图 1). 当作用于梁上的两个荷载  $P$  逐渐增加时, 迫

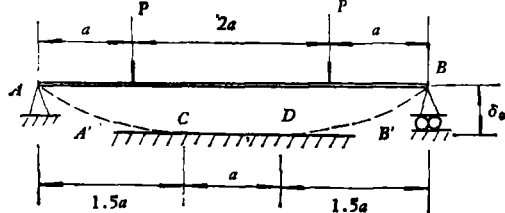


图 1

使梁的中间段  $CD$  与平面  $A'B'$  相接触. 已知  $\delta_0$ ,  $EJ$  及接触段长度为  $a$ , 求: (a) 荷载  $P$  的值. (b) 梁  $A$  端的转角. (南京化工学院 1983 年硕士研究生试题, 黄纪山供稿)

58. 销钉  $M$  能在  $DBE$  杆的竖直槽内滑动, 同时又能在  $OA$  杆的槽内滑动.  $DBE$  杆以等速度  $v_1 = 10\text{cm/s}$  向右运动,  $OA$  杆以等角速  $\omega = 1\text{rad/s}$  顺时针转

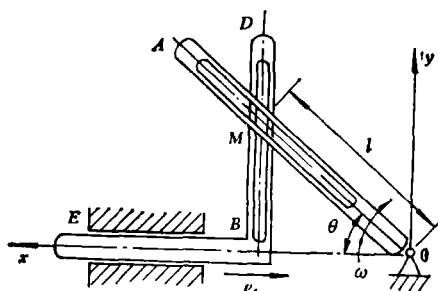


图 2

动(图 2). 设此时  $OA$  与水平夹角  $\theta = 45^\circ$ ,  $OM$  的距离  $l = 10\text{cm}$ . 求  $M$  点的绝对运动轨迹在此位置的曲率半径. (天津大学 1983 年硕士研究生考题, 虞润禄供稿)

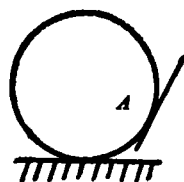


图 3

59. 图 3 所示, 用铁筷赶动圆环在水平面上匀速滚动(环与筷保持在同一竖直平面内运动). 设筷与环之间的滑动摩擦系数为  $f_m$ , 环半径为  $r$ , 环与水平面间的滑动摩擦系数为  $f_L$ , 而滚动摩擦阻系数为  $\delta$ . 求: (1) 筷与环的接触点  $A$ , 使得筷的赶动力为最小, (2) 分析圆环只滚不滑的条件. (南