复杂系统离散模拟的通用化

葛 蔚 李静海

(中国科学院过程工程研究所多相反应实验室, 北京 100080. E-mail: gw7034@sina.com, jhli@home.icm.ac.cn)

摘要 通过在同一算法下嵌入不同的粒子模型, 即分子动力学模型(MD)和宏观拟颗粒模型(MaPPM), 成功地模拟了尺度和性质差别很大的两种物理现象——两种分子间的相互扩散和流体的界面不稳定性. 展示了采用粒子方法(PM)建立复杂物理系统离散模拟的通用并行算法和模块化软件的可能性, 使该方法有希望成为与有限元(FE)和有限差分(FD)方法互为补充的主流模拟方法.

关键词 复杂系统 并行计算 粒子方法 拟颗粒模拟

在复杂系统中由于多尺度不均匀结构和运动界面的存在, 使有限元(FE)和有限差分(FD)等基于连续介质观点的数值方法难以应用. 简单地说, 如采用非结构化的贴体网格, 则网格的变形、映射和重新生成相当繁复, 而若采用结构化网格, 界面的描述和跟踪又变得困难^[1]. 而粒子方法(PM)^[2]以大量粒子的运动和相互作用重构系统行为, 并与结构和界面的演变在物理上相对应, 实现了真正的拉格朗日观点的模拟, 正好能克服上述难点, 故近年来逐渐得到重视. 但要发展成一种主流方法, 必须实现通用的并行算法, 现初步探讨如下.

1 通用化的可能性

PM 最突出的性质是它与真实世界物理上的相似性. 从分子到尘埃, 从星球到星系, 世界是由不同尺度上的离散粒子组成的. 两个粒子间的作用在一定距离以外可忽略, 而在此距离内粒子常可处理为几何点. 基本力的性质决定了这些点间的作用可用常微分方程描述并具有可加性. 这使得算法的框架和具体的作用描述可分离. 如果不考虑计算量, PM 可直接模拟几乎所有的经典物理系统. 因此其通用化具有内在的合理性.

当然在材料和流体力学中, 考虑大量分子的集合更方便, 这样计算量就未必随系统规模增长. 这曾是采用连续介质方法的重要理由, 而现在 PM 也能将许多分子的集体处理为一个粗粒化的粒子, 如在耗散粒子动力学(DPD)^[3], 光滑粒子流体力学(SPH)^[4]和 MaPPM^[5]中那样. 这就大大扩展了 PM 的应用范围, 也提供了通用化的现实性.

当然与 FE 和 FD 相比, PM 的计算量依然很大, 但其算法一般具有更完全而本质的并行性, 大规模

并行处理(MPP)已成为实现超级计算的主要途径, 但与串行计算相比, 并行计算的效率更依赖于问题的性质. 考虑到 MPP 系统的造价, 它们一般被设计成通用系统, 这样就要求任意两个处理单元(PE)间有快速的信息传递或共享, 从而使体系结构随 PE 数增加而复杂化, 并迅速达到技术的极限. 但 PM 无此要求. 一个粒子的即时运动只决定于少数几个相邻粒子的状态, 因此当计算分布到以适当方式(如矩阵)连接的 PE 上后, 每个 PE 可只与其直接的邻居通讯. 同时 PM 仍适用于需要超级计算的大多数问题, 因此如果能提炼出 PM 的通用算法, 就值得为它设计专门、高效和简化的 MPP 系统^[6]. 这是通用化的必要性.

2 通用算法

PM 通用算法的初步实现由图 1 示意. 每个粒子的详细信息存储在一个记录的数组中, 除了一些类型和索引标记, 其中主要是状态变量的向量, 其维数作为程序的参数. 模拟的物理空间以正交网格(或其拓扑同构)划分, 以使任一粒子单步内只与同网格或其直接相邻网格内的粒子作用. 网格以相应结构的矩阵存储, 其元素是指向网眼内粒子记录的指针表. 这样, 程序通过矩阵寻找数组中每个粒子的碰撞对象, 并按两者的类型调用相应的函数计算它们的状态变化量, 累计在各记录专设的临时变量中. 这些函数只以状态变量为参数, 因此随不同应用而建立和更新的函数库可独立于主程序. 所有粒子间作用处理一遍后, 程序依累计的变化量更新粒子状态并开始下一步. 该程序的并行化直截了当. 每个 PE 分配到一部分模拟空间, 其基本计算过程与串行相同, 但边界网眼上的粒子记录要附加到邻近 PE 的数组中, 而网格矩阵也要扩充以容纳这些镜像粒子. 为减少

计算,最好将边界上粒子的记录存在特定的区段中,以便集中传送.为此记录数组每段必须留出一些空位,并建立相应的指针堆栈来管理其插入和删除,这也适用于改善网眼的指针表的内存局部性.

图 1 PM 通用算法的数据结构

3 模拟实例

按此通用算法,即在同一主程序下,我们采用两种粒子模型模拟分属宏观和微观的两种现象,以说明通用算法的可行性.图版 I -1(附本刊后,下同)中一个二维的水平槽道中有分子性质相同但受质量力强度不同(g_1, g_2)的两种气体,重的在上层.此分子动力学(MD)模拟采用截断的 L-J 势函数^[7],即

$$f_{ij} = \frac{24\epsilon}{\sigma^2} \left[2 \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{14} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^8 - 2 \left(\frac{\sigma}{r_c} \right)^{14} + \left(\frac{\sigma}{r_c} \right)^8 \right] r_{ij} \quad (r < r_c),$$

其中 f 为两粒子间的作用力, r 为粒子间中心距, r_c 为

粒子间的作用距离, σ 为粒子的特征直径, ϵ 为势能.积分采用 Verlet 格式^[7].模拟参数列于表 1,其物性大致相当于氩.表中 H 为流场高度, m 为粒子质量, n 为粒子数密度, r_c 为粒子间最大作用距离, T 为温度, t 为时间, v_{rms} 为粒子的均方根速度, W 为流场的宽度, Δt 为时间步长.为求简单,所有分子初始分布于规则的格点并具有随机速度,但动能($E_k = mv_{rms}^2/2$)相同.在质量力的作用下(为加快物理过程亦即模拟进程,此处 g 远高于现实值), E_k 的平均值先增长,然后围绕一个恒定值波动.而两种气体相互扩散的趋稳过程要缓慢得多(图 2,图版 I -1~4).较重气体的浓度梯度最终转为预期的竖直向上,并较另一气体的梯度更陡.但要观察这一过程中更吸引人的现象只能在更大的尺度上,此时流体力学模型将更有效.

热不稳定性是流体力学中的一个经典问题^[8],虽然其流型由不可避免的密度不均匀性诱发,但其根本动因是流体中质量力的方向与其梯度相反,并由两侧边界上的连续加热与冷却维持,其间流体力学和热力学过程存在复杂的耦合.上例则在较简单的条件下蕴涵了这种机制,在此更简化为两种流体不相溶.

模拟采用 MaPPM,它结合 FD 和加权平均手段构造了有明确的微观意义而宏观上符合 N-S 方程的粗粒化的流体粒子.详细方法可参考文献[5],现仅将有关算子的离散表达进一步推导如下.考虑一个可微的二维标量场 f ,则按梯度的性质,相近两点间的方向导数的差分形式应近似满足

$$\frac{f_{ia}}{|r_{ia}|} = |\nabla f|_a |\cos \langle r_{ia}, \nabla f|_a \rangle| \Rightarrow \frac{f_{ia}}{|r_{ia}|^2} r_{ia} = |\nabla f|_a |\cos \langle r_{ia}, \nabla f|_a \rangle| \frac{r_{ia}}{|r_{ia}|},$$

其中 $\langle \rangle$ 为取夹角运算.如对 a 周围半径为 R 的范围内的各点应用上式并加权平均,则

$$\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} \int_0^R \frac{f_{ia}}{|r_{ia}|^2} r_{ia} W(r_{ai}) r_{ai} dr_{ai} d\varphi \\ &= \int_0^{2\pi} \int_0^R |\nabla f|_a |\cos \varphi| \frac{r_{ia}}{|r_{ia}|} W(r_{ai}) r_{ai} dr_{ai} d\varphi, \end{aligned}$$

表 1 槽道内两种气体扩散过程模拟的参数

	r_c / m	σ / m	H / m	W / m	m / kg	$\Delta t / \text{s}$	$v_{rms} / \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	$g_1 / \text{m} \cdot \text{s}^{-2}$	$g_2 / \text{m} \cdot \text{s}^{-2}$	n	ϵ	$r / \text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	T / K
有因次值	8.5×10^{-8}	1.4×10^{-10}	2.81×10^{-8}	3.26×10^{-8}	4.69×10^{-25}	10^{-14}	70.38	9.8×10^8	9.8×10^9			372.7	120
无因次值	1	0.4	96	112	1	1	8.28×10^{-4}	1.15×10^{-10}	1.15×10^{-9}	0.513	3.43×10^{-7}		

<https://engine.scichina.com/doi/10.1360/csb2002-47-5-353>

图 2 两种气体在扩散过程中平均密度垂直分布的变化

其中

其中

$$\varphi = \langle \mathbf{r}_{ia}, \nabla f|_a \rangle, \quad \int_0^{2\pi} \int_0^R W(r_{ai}) r_{ai} dr_{ai} d\varphi = 1.$$

设

$$r_{ai} = |\mathbf{r}_{ia}| = r_{ia} = |\mathbf{r}_{ia}|, \quad \mathbf{i} = \nabla f|_a / |\nabla f|_a|,$$

单位矢量 $\mathbf{j} \perp \mathbf{i}$, 并将上式左边写成离散形式得

$$\sum_i \frac{f_{ia}}{r_{ai}^2} \mathbf{r}_{ia} W(r_{ai}) \frac{m_i}{\rho_i} = |\nabla f|_a \int_0^{2\pi} \int_0^R \cos\varphi (\cos\varphi \mathbf{i} + \sin\varphi \mathbf{j}) W(r_{ai}) r_{ai} dr_{ai} d\varphi.$$

考虑到函数 $\cos\varphi \sin\varphi$ 的奇偶性可得

$$\sum_i \frac{f_{ia}}{r_{ai}^2} \mathbf{r}_{ia} W(r_{ai}) \frac{m_i}{\rho_i} = \pi \int_0^R W(r_{ai}) r_{ai} dr_{ai} = \nabla f|_a / 2.$$

三维情形可类似证明, 总之

$$\nabla f|_a = D \sum_i \frac{f_{ia}}{r_{ai}^2} \mathbf{r}_{ia} W(r_{ai}) \frac{m_i}{\rho_i},$$

其中 D 为模拟系统的维数. 对于拉普拉斯算子, 可先考虑二维的标量场 f , 在以 a 为原点的极坐标系中有差分式

$$\Delta f|_a = \frac{\frac{f(\theta, r) - f_a}{r} + \frac{f(-\theta, r) - f_a}{r}}{r/2 - (-r)/2} + \frac{\frac{f(\theta + \pi/2, r) - f_a}{r} + \frac{f(\theta - \pi/2, r) - f_a}{r}}{r/2 - (-r)/2}.$$

如对 a 周围半径为 R 的范围内的各组点应用上式并加权平均, 注意到上式各项间的对称性可得

$$\Delta f|_a = \int_0^{2\pi} \int_0^R \frac{f(\theta, r) - f_a}{r^2} W_1(r) r dr d\varphi,$$

其中

$$\int_0^{2\pi} \int_0^R W_1(r) r dr d\varphi = 1.$$

设 $W(r) = W_1(r)/4$, 则

$$\int_0^{2\pi} \int_0^R W(r) r dr d\varphi = 1,$$

而

$$\Delta f|_a = 4 \int_0^{2\pi} \int_0^R \frac{f(\theta, r) - f_a}{r^2} W_1(r) r dr d\varphi,$$

写成离散形式即

$$\Delta f|_a = 4 \sum_i \frac{f_{ia}}{r_{ai}^2} W(r_{ai}) \frac{m_i}{\rho_i}.$$

同理可证三维和矢量函数的情况, 总之,

$$\Delta f|_a = 2D \sum_i \frac{f_{ia}}{r_{ai}^2} W(r_{ai}) \frac{m_i}{\rho_i}.$$

文献[5]中的(4)和(5)式应为其一维时的特例. 另外, 我们的数值实验表明采用

$$\Delta f|_a = D \sum_i (\nabla f|_i - \nabla f|_a) \cdot \mathbf{r}_{ia} \frac{W(r_{ai})}{r_{ai}^2} \frac{m_i}{\rho_i},$$

并以前述方法计算 ∇f 可获得更高精度.

模拟的参数见表 2, 其中 $V_{\max}$ 为模拟中的最大流速, μ 为动力黏度, ρ 为密度, l 为粒子的初始间距, p 为压强, 流体为常态空气, 但如上例, g 被人为加强了. 初始时界面上一个较轻的粒子具有微小的向上速度而其他粒子均静止(图版 I - 5). 这一扰动在界面上向两边传播(图版 I - 6)并很快发展为驻波(图版 I - 7). 同时由于流体的可压缩性, g 的作用引入了垂直方向的界面振动, 并放大了驻波. 达到临界振幅时, 驻波中性线附近出现垂直段(图版 I - 9), 此后界面很快变为交错的蘑菇状(图版 I - 10). 然后重的流体

表 2 槽道内两层流体分布失稳定过程的模拟参数

	r_c/m	L/m	H/m	W/m	m/kg	$\Delta t/s$	$\mu/kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$	$p/kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-2}$	$\rho/kg \cdot m^{-3}$	$V_{max}/m \cdot s^{-1}$	$g_1/m \cdot s^{-2}$	$g_2/m \cdot s^{-2}$
无因次值	1	0.3	15.1	30	1	1	3.89×10^{-6}	2.08×10^{-7}	12.8	5×10^{-5}	3×10^{-10}	6×10^{-10}
有因次值	2.30×10^{-5}	6.89×10^{-6}	3.46×10^{-4}	6.89×10^{-4}	1.16×10^{-15}	10^{-11}	1.89×10^{-5}	1.01×10^5	1.18	115	6.89×10^7	1.38×10^8

逐渐沉入下部而轻者上浮(图版 I -12),但要恢复清晰的界面还需更长的模拟时间.虽然这种设置很难直接与实验比较,但参考多相流中的鼓泡等具有类似机理的现象可发现其结果的合理性.

4 讨论

颗粒流体系统的 PM 模拟也已实现^[5],其颗粒为相对位置不变的粒子集群,而其并行计算还需传送 PE 边界上的颗粒整体信息.采用更复杂的粒子模型,PM 还能模拟传热、传质和反应过程相耦合的多相系统.而如在原框架下能放松可加性限制,并允许一些远程通讯和广播,它应还能模拟更复杂的某些生物甚至社会现象,如计量经济学对特定条件下股市的预测中投资者可处理为粒子.

作为 PM 的微元,粒子能简洁而高效地表示为面向对象编程(OOP)中的对象,从而充分利用 C++等新兴语言的优势,而 FE 和 FD 仍拘泥于历经半个世纪的 Fortran. OOP 还使 PM 在共享内存模式下能方便地实现细粒度并行,通过适当的设计,每个粒子能无内存冲突地同时处理.若结合粗粒度的消息传递模式,PM 貌似巨大的实际系统计算量已能为今日技术所及,并在近期得到普及.

5 结论

以上论述、算法的实现和模拟实例说明,目前已

能够并值得建立专门的硬件系统和通用的软件平台来驳接不同的 PM,而在不同尺度上模拟许多不同性质的复杂系统,并非常适合 MPP 和 OOP.其实用性和重要性将可与 FE 和 FD 相比,并具有众多优势,值得深入探讨.

致谢 本工作为国家重点基础研究发展规划资助项目(批准号: G1999032801, G1999022103).

参 考 文 献

1 Unverdi S O, Tryggvason G. A front-tracking method for viscous, incompressible multi-fluid flows. *Journal of Computational Physics*, 1992, 100(1): 25~37

2 Romero-Rochín V, Rubi J M. Discretized integral hydrodynamics. *Physical Review E*, 1998, 58(2): 1843~1850

3 Hoogerbrugge P J, Koelman J M V A. Simulating microscopic hydrodynamic phenomena with dissipative particle dynamics. *Europhysics Letters*, 1992, 19(3): 155~160

4 Monaghan J J. Smoothed particle hydrodynamics. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, 1992, 30: 543~574

5 葛蔚, 李静海. 颗粒流体系统的宏观拟颗粒模拟. *科学通报*, 2001, 46: 802~805

6 葛蔚, 李静海. 近程作用离散系统大规模并行模拟概念模型. *计算机与应用化学*, 2000, 17(5): 385~388

7 Rapaport D C. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. Cambridge: Cambridge University Press, 1995. 15, 57~58

8 Drazin P G, Reid W H. *Hydrodynamic Stability*. Cambridge: Cambridge University Press, 1981

(2001-09-20 收稿, 2002-01-11 收修改稿)

1~4 示两种气体扩散过程中 4 个时刻的分子分布, t 依次为 0, 5, 100, $412.5 (\times 10^4 \text{ a.u.})$, 红蓝绿色分别示轻重和边壁固定分子, 分子内箭头示速度. 5~12 示二维槽道内分布的两层流体在质量力作用下的失稳过程, t 依次为 2.4, 5.1, 12.4, 14.9, 17.4, 19.8, 23.04, 36.05 ($\times 10^5 \text{ a.u.}$), 粒子内箭头示速度方向, 速度大小由箭头颜色指示, 红为 0, 蓝为 5×10^5