湍流的分子动力学理论

周　秀　骥

湍流是自然界中极为普遍的一种流体运动形态．研究湍流运动发生发展的规律，在气象学、海洋学、空间物理、流体力学、等离子体物理以及不少工程技术等领域中，不仅具有重要的实用价值，而且是一个极有意义的理论问题，也一直引起各方面的密切注视．湍流理论的系统研究已有五十多年的历史，其主要成果大多建立于三十年代和四十年代初期．以后一个时期内，由于问题的复杂和困难，进展并不显著．近几年来，国内外对湍流理论相继提出一些有益的新设想和新方法，湍流分子动力学理论就是其中的一个．本文想着重介绍一下这个理论的概貌，以冀引起注意，进一步发展这个理论，并应用于大气湍流的研究．

1974 年，我们曾经提出过一个设想，企图利用非平衡统计力学理论来研究湍流．基本方法是把分子群在相宇空间中的分布函数看作为一个随机函数，推导出分布函数起伏分量所满足的方程．由此出发，用分子动力学方法研究湍流发生的物理机制，并且给出流体平均场和湍流场各阶统计相关矩之间的相互关系．自 1974 年以来，在国外，也比较有系统地发表了一系列论文[1]—[8]，提出了类似的设想，他们所取得的初步结果，都说明利用非平衡统计力学理论来处理湍流问题，是一条新的途径．

在以往的湍流理论研究中，一般是从下列熟知的 Navier-Stokes 流体力学方程(1)出发

$$\frac{\partial u_i}{\partial t}+\sum_j \frac{\partial}{\partial x_j}(u_i u_j)=F_i^0-\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial x_i}+\nu\,\Delta u_i \tag{1}$$

常用的处理方法是，把流体速度 u_i 分成平均流速 $\bar{u}_i$ 和湍流起伏速度 δu_i，即

$$u_i=\bar{u}_i+\delta u_i \tag{2}$$

把式(2)代入(1)，经过统计平均处理以后，求得描述湍流运动的湍流雷诺方程

$$\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t}+\sum_j \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{u}_j\bar{u}_i)=-\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial x_i}+\nu\Delta\bar{u}_i-\sum_j\frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\delta u_i\delta u_j}) \tag{3}$$

显然，从方程(1)导出方程(3)，只是一种数学处理的方法，并没有给出湍流发生发展的物理机制．方程(3)中同时出现了新的物理量——雷诺应力项 $\frac{\partial}{\partial x_j}(\overline{\delta u_i\delta u_j})$．要介方程(3)，就必须寻求湍流速度二次相关矩 $R_{ij}=(\overline{\delta u_i\delta u_j})$ 所满足的方程．这样的方程虽然不难从方程(1)及(3)中推出，但是，在新方程中又出现湍流速度三次相关矩．以此类推，不断出现高次相关矩，以致无法得到有限的闭合方程组，这就是湍流理论中极其困难的闭合性问题 (The problem of closure)．过去，为解决这个困难，设计了不少湍流统计结构模

1977 年 6 月 21 日收到修改稿．

式. 在这些模式中,或者假设了二次相关矩与平均场之间的关系,或者假设各阶相关矩之间的关系,从而求得闭合的湍流方程组. 问题是,这些模式和假设必须以坚实而清楚的物理机制为基础. 我们认为,湍流运动也是分子运动集合统计平均在宏观尺度上的反映. 从分子运动及其相互作用的最基本规律出发,对湍流形成的物理机制以及湍流场的统计结构,提供一些比较清楚的概念和物理图象,并且可以充分运用近代非平衡统计力学理论和方法来解决湍流理论中的一些问题.

事实上,流体是由分子所组成的,任何形式的流体运动都是分子运动系综平均的宏观现象,湍流也不例外. 分子运动本质上是随机起伏的,微粒子在流体中的布朗运动充分反映了这种特性. 但是,在流体运动稳定的条件下,当微粒子尺度逐渐增大时,这种布朗运动的微尺度起伏现象就逐渐消失. 流体的湍流运动是一种宏观尺度的起伏现象,和分子的微尺度起伏应该是不同的. 然而,它们之间决没有绝对不可逾越的洪沟,必然具有辩证的联系,在一定条件下,它们是可以相互转换的. 在最早期的一些湍流实验中,曾试图把外界对流体的干扰减弱到最低限度,以抑制湍流的形成. 实验结果却表明,随着干扰的不断减小,湍流产生的阈值——临界雷诺数 $\mathrm{Re}=\dfrac{\overline{U}L}{\nu}$ 虽然逐步升高,却存在一个临界雷诺数的最大值. 当流体运动达到这一状态时,无论怎样再减小干扰,湍流都不可避免地要形成. 这个事实说明,在一定条件下,即使微尺度的分子随机起伏运动也将会发展,最后形成宏观尺度的起伏运动——湍流. 同时,实验结果也表明,存在一个临界雷诺数的最小值,此时,外界干扰再大. 最终都衰变为微尺度的分子运动. 不会形成湍流. 对微尺度起伏和宏观尺度起伏现象之间相互联系与相互转换的现象,运用分子动力学理论应该予以解释,从而,更深入地揭露湍流发生发展的规律. 众所周知, Navier-Stokes 流体动力学方程(1)是可以从分子动力学的波尔兹曼方程推导出来的.[9]—[10] 但是,波尔兹曼方程只是普遍的分子动力学方程的一级近似. 对 N 个分子的流体来说,普遍的分子动力学方程是相宇空间 $\boldsymbol{z}(\boldsymbol{r}_1,\cdots\boldsymbol{r}_N,\boldsymbol{p}_1\cdots\boldsymbol{p}_N)$ 中分布密度函数 f_N 所满足的刘维方程[9]—[10]

$$\frac{\partial f_N}{\partial t}+\sum_{1\leqslant i\leqslant N}\left(\boldsymbol{v}_i\cdot\frac{\partial f_N}{\partial \boldsymbol{r}_i}+\boldsymbol{F}(\boldsymbol{r}_i)\frac{\partial f_N}{\partial \boldsymbol{p}_i}\right)=0 \tag{4}$$

其中 $(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{p}_i)$ 是第 i 个分子的座标与动量向量, $\boldsymbol{F}=-\dfrac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}_i}\sum\limits_{\substack{1\leqslant j\leqslant N\\ i\neq j}}\phi_{ij}\left(|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j|\right)+\boldsymbol{F}^0(\boldsymbol{v}_i,\boldsymbol{t})$是分子相互作用力$-\dfrac{\partial\phi_{ij}}{\partial \boldsymbol{r}_i}$与外力 $\boldsymbol{F}^0$ 之和. 从方程(4)推导波尔兹曼方程时,采纳了分子混乱假设 (The hypothesis of molecular chaos). 根据这个假设,两个分子碰撞之后,其碰撞前的统计特性完全消失. 实际并非如此,在宏观的时间和空间尺度内,分子的统计相关性都具有一定的保守性,不会因碰撞而全部消失、如果考虑到这一重要特性,则从更为普遍的分子动力学方程导出的流体力学方程中,将直接出现湍流应力项,它将和分子运动的统计相关特性密切相联. 同时,还直接从分子动力学方程出发,求得湍流应力方程.

根据分布密度函数 f_N 的定义,它表示 N 个分子群在时刻 t 处于微观运动状态 $\boldsymbol{z}$ 的几率. 如果分布密度函数 f_N 已定,则所有流体宏观量都可以由它所确定[9]—[10]. 当流体宏观量是随机起伏量时,分布密度函数 f_N 也应该是随机起伏量. 为此,必须引入随机起伏的分布密度函数. 可以采用 Климонтович[11] 和 Massignon[12] 的方法引进六维空间 $\boldsymbol{z}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$

中的密度函数 $N(\boldsymbol{z},t)$

$$N(\boldsymbol{z},t)=\sum_{1\leqslant i\leqslant N}\delta(\boldsymbol{z}-\boldsymbol{z}_i(t)) \tag{5}$$

其中 $\boldsymbol{z}_i(t)$ 是第 i 个分子在 $\boldsymbol{z}$ 空间中 t 时刻的状态，$\delta(\boldsymbol{z}-\boldsymbol{z}_i(t))$ 是 Dirac 函数．由于分子运动的随机起伏性，密度函数 $N(\boldsymbol{z},t)$ 是个随机量．可以证明，$N(\boldsymbol{z},t)$ 满足以下方程

$$\frac{\partial N}{\partial t}+\boldsymbol{v}\cdot\frac{\partial N}{\partial \boldsymbol{r}}+\boldsymbol{F}^M(\boldsymbol{r},t)\frac{\partial N}{\partial \boldsymbol{p}}=0 \tag{6}$$

$$\boldsymbol{F}^M=-\int\frac{\partial\phi(|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)}{\partial \boldsymbol{r}}N(\boldsymbol{z}',t)\,d\boldsymbol{z}'+\boldsymbol{F}^0(\boldsymbol{r},t) \tag{7}$$

而 $N(\boldsymbol{z},t)$ 与 BBGKY 分子动力方程组中简约分布密度函数 $f_1,\cdots f_s,\cdots f_N$[10] 的关系式为

$$\overline{N}(\boldsymbol{z},t)=\int\sum_{1\leqslant i\leqslant N}\delta(\boldsymbol{z}-\boldsymbol{z}_i(t))f_N\,d\boldsymbol{z}=nf_1(\boldsymbol{z},t) \tag{8}$$

$$\overline{N(\boldsymbol{z},t)N(\boldsymbol{z}',t)}=n^2f_2(\boldsymbol{z},\boldsymbol{z}',t)+\delta(\boldsymbol{z}-\boldsymbol{z}')nf_1(\boldsymbol{z},t) \tag{9}$$

$$\begin{aligned}\overline{N(\boldsymbol{z},t)N(\boldsymbol{z}',t)N(\boldsymbol{z}'',t)}=&\ n^3f_3(\boldsymbol{z},\boldsymbol{z}',\boldsymbol{z}'',t)+n^2[\delta(\boldsymbol{z}-\boldsymbol{z}')f_2(\boldsymbol{z}',\boldsymbol{z}'',t)+\\&+\delta(\boldsymbol{z}'-\boldsymbol{z}'')f_2(\boldsymbol{z}'';\boldsymbol{z},t)+\delta(\boldsymbol{z}''-\boldsymbol{z})f_2(\boldsymbol{z},\boldsymbol{z}',t)]+\\&+n\delta(\boldsymbol{z}-\boldsymbol{z}')\delta(\boldsymbol{z}'-\boldsymbol{z}'')f_1(\boldsymbol{z}'',t)\end{aligned} \tag{10}$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

其中 $n=\lim\limits_{\substack{N\to\infty\\ v\to\infty}}\dfrac{N}{V}$ 是分子数密度，简约分布密度函数 $f_s(s=1,2,\cdots N)$ 是

$$f_s=v^s\int f_N(\boldsymbol{z},t)\;d\boldsymbol{z}_{s+1}\cdots d\boldsymbol{z}_N \tag{11}$$

由此可见，分布密度函数 f_N 只是一种平均分布值．随机密度函数 $N(\boldsymbol{z},t)$ 将由统计平均值 $\overline{N}$ 和起伏量两部分组成

$$N(\boldsymbol{z},t)=\overline{N}(\boldsymbol{z},t)+\delta N(\boldsymbol{z},t)=nf_1(\boldsymbol{z},t)+\delta N(\boldsymbol{z},t) \tag{12}$$

而平均密度函数 $\overline{N}(\boldsymbol{z},t)$ 与流体宏观平均量之间的联系是

平均密度：$\bar{\rho}=mn\int f_1d\boldsymbol{p}=m\int\overline{N}\,d\boldsymbol{p}$

平均动量：$\overline{\boldsymbol{M}}=\overline{\rho\boldsymbol{u}}=n\int\boldsymbol{p}f_1d\boldsymbol{p}=\int\boldsymbol{p}\,\overline{N}\,d\boldsymbol{p}$

平均动能：$\overline{W}=n\int\dfrac{\boldsymbol{p}^2}{2m}f_1\;d\boldsymbol{p}=\int\dfrac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\overline{N}\;d\boldsymbol{p}$

密度函数起伏量 δN 与流体宏观起伏量之间的联系是

起伏密度：$\delta\rho=m\int\delta N\,d\boldsymbol{p}$

起伏动量：$\delta\boldsymbol{M}=\delta(\rho\boldsymbol{u})=\int\boldsymbol{p}\,\delta N\,d\boldsymbol{p}$

起伏动能：$\delta W=\int\dfrac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\delta N\;d\boldsymbol{p}$

这里，起伏分布密度函数 δN 描述了流体所有的宏观起伏现象．如果已知 f_N 及 δN，

则流体的平均场和起伏场结构都由此而确定. 不难证明, f_N 与 δN 满足以下方程[10]

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\boldsymbol{v}\cdot\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}+\boldsymbol{F}(\boldsymbol{r},t)\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}}\right)f_1=-\frac{1}{n}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}}(\overline{\delta F\delta N})_{r,z,t} \tag{13}$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\boldsymbol{v}\cdot\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}+\boldsymbol{F}(\boldsymbol{r},t)\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}}\right)\delta N+\delta \boldsymbol{F}\frac{\partial nf_1}{\partial \boldsymbol{p}}=$$

$$-\frac{1}{\partial \boldsymbol{p}}[\delta\boldsymbol{F}(\boldsymbol{r},t)\delta N(\boldsymbol{z},t)-(\overline{\delta\boldsymbol{F}\delta N})_{r,z,t}] \tag{14}$$

其中 $$\overline{(\delta\boldsymbol{F}\delta N)}_{r,z,t}=-\int\frac{\partial\phi(|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)}{\partial \boldsymbol{r}}(\overline{\delta N\delta N})_{z',z,t}\,d\boldsymbol{z}' \tag{15}$$

$$\delta\boldsymbol{F}(\boldsymbol{r},t)=-\int\frac{\partial\phi(|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)}{\partial \boldsymbol{r}}\delta N(\boldsymbol{z}',t)\,d\boldsymbol{z}' \tag{16}$$

$$\boldsymbol{F}=\boldsymbol{F}^0-n\int\frac{\partial\phi(|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)}{\partial \boldsymbol{r}}f_1(\boldsymbol{z}',t)\,d\boldsymbol{z}' \tag{17}$$

方程(13)左边代表流体平均场,右边代表起伏场的统计平均相关特性.

由式(5),(8),(9)可得

$$(\overline{\delta N\delta N})_{z',z,t}=n^2[f_2(\boldsymbol{z},\boldsymbol{z}',t)-f_1(\boldsymbol{z},t)f_1(\boldsymbol{z}',t)]+\delta(\boldsymbol{z}-\boldsymbol{z}')nf_1(\boldsymbol{z},t) \tag{18}$$

在分子混乱假设下

$$f_2(\boldsymbol{z},\boldsymbol{z}',t)=f_1(\boldsymbol{z},t)f_1(\boldsymbol{z}',t) \tag{19}$$

则

$$(\overline{\delta N\delta N})=\delta(\boldsymbol{z}-\boldsymbol{z}')nf_1(\boldsymbol{z},t) \tag{20}$$

此时,方程(13)封闭, 它对应波尔兹曼方程, 由此可推导出一般的 Navier-Stokes 流体动力学方程.

但是,分子混乱假设并不完全符合实际,等式(19)也不成立,如令

$$\psi(\boldsymbol{z},\boldsymbol{z}',t)=f_2(\boldsymbol{z},\boldsymbol{z}',t)-f_1(\boldsymbol{z},t)f_1(\boldsymbol{z}',t) \tag{21}$$

则 $\psi(\boldsymbol{z},\boldsymbol{z}',t)$ 是相关函数,它描述两个分子之间的统计相关特性,代入(18)式,得

$$(\overline{\delta N\delta N})=n^2\psi(\boldsymbol{z},\boldsymbol{z}',t)+\delta(\boldsymbol{z}-\boldsymbol{z}')nf_1(\boldsymbol{z},t) \tag{22}$$

显然,该式右边第二项是 Dirac 函数,它表示统计独立的分子微尺度起伏(布朗运动起伏). 而右边第一项代表两个分子之间的相关, 是一个描述宏观起伏的物理量. 此时,为解方程(13),还必须求出 $f_2(\boldsymbol{z},\boldsymbol{z}',t)$. 这样,问题就归结于求解分子动力学的 BBGKY 方程组. 在近代非平衡统计力学理论中,对 BBGKY 方程解的特性及解的方法的研究,已取得不少进展[13]—[16]. 因此,充分运用这些方面的成果,将为湍流理论研究提供了一个新的途径.

Tsugé[6]—[8] 从上述分子动力学方程出发,采用 Grad 的方法[17],把分布函数展成 Hermite 多项式级数和, 在无外力作用, 忽略三个分子同时相互作用的情况下,直接推导出流体湍流方程组为

$$\frac{\partial\rho\bar{u}_i}{\partial t}+\sum_j\frac{\partial}{\partial x_j}\left[\rho\bar{u}_i\bar{u}_j+p\delta_{ij}+(p_{ij})_{NS}+\frac{1}{\rho}R_{i,j}^{(1,1)}\right]=0 \tag{23}$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\sum_k\bar{u}_k\frac{\partial}{\partial x_k}+\sum_k\bar{u}_k'\frac{\partial}{\partial x_k'}\right)R_{i,j}^{(1,1)}+\sum_k\frac{\partial\bar{u}_i}{\partial x_k}R_{k,j}^{(1,1)}+\sum_k\frac{\partial\bar{u}_j'}{\partial x_k'}R_{i,k}^{(1,1)}+$$

$$+\frac{\partial}{\partial x_i}R_{,j}^{(2,1)}+\frac{\partial}{\partial x_j'}R_{i,}^{(1,2)}-\nu\left[\sum_k\frac{\partial^2}{\partial x_k^2}+\sum_k\frac{\partial^2}{\partial x_k'^2}\right]R_{i,j}^{(1,1)}=\frac{pp_{ii}}{\nu n}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')$$

(24)

其中 p 是流体压力，p_{ij} 是粘滞应力，ν 是粘滞系数，$R_{i,j}^{(1,1)}=(\overline{\delta u_i\delta u_j})$；$R_{,j}^{(2,1)}=\frac{1}{\rho}(\overline{\delta p\,\delta u_j'})$；$R_{i,}^{(1,2)}=\frac{1}{\rho}(\overline{\delta u_i\delta p'})$，$R_{i,j}^{(1,1)}$ 就是湍流应力. 和以往的湍流雷诺方程组相比较，新方程组(23)与(24)有以下两个特点.

首先，方程(21)右边出现一个新项，它是 Dirac 函数，代表分子微尺度起伏运动，它在方程中的地位相当于产生湍流应力 $R_{i,j}^{(1,1)}$ 的源. Tsugé 指出，当平均流场均匀，平均流速 $\bar{u}_i$ 为常数，压力起伏和速度起伏统计独立时，方程(24)简化为典型的扩散方程

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\sum_k\bar{u}_k\frac{\partial}{\partial x_k}+\sum_k\bar{u}_k'\frac{\partial}{\partial x_k'}\right)R_{i,j}^{(1,1)}=\nu\left[\sum_k\frac{\partial^2}{\partial x_k^2}+\sum_k\frac{\partial^2}{\partial x_k'^2}\right]R_{i,j}^{(1,1)}+\frac{pp_{ii}}{\nu n}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')$$

(25)

根据这类方程的基本特性，任何初始统计起伏场，瞬时的边界统计干扰以及瞬时的干扰源，最后都将随时间而衰减. 同时，代表分子微尺度起伏 $\frac{pp_{ii}}{\nu n}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')$ 也不能发展成湍流.

当平均流场存在速度梯度时，Tsugé 证明，当平均流场的雷诺数超过某一临界值时，流体处于不稳定状态，分子起伏就开始发展，形成宏观尺度的起伏——湍流. Tsugé 曾对 Blasius 边界层的临界雷诺数进行理论估算，求得临界雷诺数的最大值为 4200，这时的宏观起伏速度是 2 厘米/秒，这结果和 Spangler 和 Wells[18] 的实验值基本上一致. 这个结果进一步说明，分子微尺度起伏是湍流形成的内在物理因素. 当然，其他如边界的统计起伏干扰，特别象大气边界层的复杂结构，也必然要通过分子的相互作用反映在湍流场的统计结构中.

其次，方程 (25) 中没有出现湍流速度的三次相关矩 $(\overline{\delta u_i\,\delta u_j\,\delta u_k})$，这是由于忽略了三个以上分子同时相互作用的结果. 不难证明，如果考虑三个分子同时的相互作用，还可以推出湍流速度三次相关矩的动力方程. 因此，分子动力学理论就给出了如何处理湍流速度各阶相关矩的物理依据，其本质是考虑分子之间的相互作用问题.

对于上述湍流的分子动力学理论，由于近代遥感技术的发展，现在已有可能对其从实验上予以验证. 特别是由于激光测速技术的发展，可以把它和光散射技术相结合，高灵敏、高精度、连续地观测到分子微尺度起伏结构，以及其发展成湍流运动的全过程，从而揭示湍流发生发展的规律及其三维场结构. 我们曾利用激光气象雷达对大气湍流结构的观测做过初步尝试[19]. 结果虽比较粗糙，尺度也比较大，特别还有待于湍流直接观测的证明，但是，它显示出利用激光技术研究大气湍流结构，将是很重要的一个应用.

湍流分子动力学理论的发展还刚刚开始，希望能加强研究，推动大气湍流理论的前进.

参　考　资　料

[1] J. Piest, *Physica*, 1974, **73** (3).
[2] В. Н. Жигулев, *ДАН СССР*, 1965, **165** (3).
[2] M. B. Lewis, *The Physics of Fluids*, 1975, **18** (3).

[4] C. A. Sastri, *J. of Statist. Physics*, 1975, **13** (1).
[5] D. Montgomery, *The Physics of Fluids* 1976, 19 (6).
[6] S. Tsugé, *The Physics of Fluids* 1974, 17 (1).
[7] S. Tsugé, K. Sagara, *J. of Statist. Physics*, 1975, **12** (5).
[8] S Tsugé, *The Physics of Fluids*, 1976, **19** (10).
[9] 王竹溪，统计物理学导论，高等教育出版社，1956.
[10] G. E. Uhlenbeck, G. W. Ford, Lectures in Statistical Mechanics, 1963.
[11] Ю. Л. Климонтович, Кинетическая теория неидеального газа и неидеальной плазмы, «Наука», 1975.
[12] D. Massignon, Mecanique Statistique des Fluides, Paris 1957.
[13] Н. М. Боголюбов, Проблемы динамической теории в статистической физике, Гостехиздат, 1946.
[14] Д. Н. Зубарев, Неравновесная статистическая термодинамика, «Наука», 1971.
[15] I. Prigogine, Non-Equilibrium Statistical Mechanics, 1962.
[16] R. Balescu, Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics, 1975.
[17] H. Grad, Principles of the Kinetic Theory of Gases, "Handbuch der Physik", B. 12, 1958.
[18] J. G. Spangler, C. S. Wells, *AIAA J.*, 1968, 6 (543).
[19] 中国科学院大气物理研究所集刊第五号，《大气遥感探测研究 (I)》，科学出版社，1977.