

# 多尺度科学：面向 21 世纪的挑战<sup>\*</sup>

James Glimm

Department of Applied Mathematics and Statistics, State University of New York, Stony Brook, USA

David H. Sharp

Theoretical Division (Complex Systems Group), Los Alamos National Laboratory, USA

**摘要**<sup>1)</sup> 多尺度科学是一门研究各种不同长度尺度或时间尺度相互耦合现象的科学。多尺度科学的研究领域十分宽广，涵盖的学科之多难以一一罗列。对于诸如流体动力学、材料科学、生物学、环境科学、化学、地质学、气象学和高能物理之类的各门科学，多尺度科学是它们的核心。

多尺度科学目前在国际上处于刚刚起步的阶段。正如非线性现象和随机现象被认为是属于交叉学科并得到广泛重视一样，多尺度科学因其处于当代科学的许多极富挑战性问题的核心地位，发展前景不可限量。因此，在我国有必要抓住机遇，大力开展多尺度科学及其方法的研究。

**关键词** 多尺度科学，挑战性

## 1 科学的汇合点

固态金属在通常的情况下和最有用的时候并不是由纯晶体构成，而是具有在长度尺度上比其组成原子为大的重要结构。如果从最大的尺度开始往下观察，我们首先会碰到空隙和断裂。对遭到局部损伤的金属而言，这是一种常见的特征。对多晶体材料而言，则是处于次一级尺度上的晶粒结构（如由每边 1000 个原子的原子群组成的晶粒在这些材料中是以晶体形态排列的，晶粒间的联结方式有点像石砌墙中不规则石块的结合形式）。位错是出现在单晶粒结构中的缺陷，人们对此已作了广泛的研究并按对称组合律进行了分类。尺度最小的缺陷（点缺陷）是原子尺度上的缺陷，例如杂质、异物和空穴。

像强度、韧度、耐腐蚀性和电导率这样一些宏观物理特性都主要依赖于不同长度尺度的结构。例如，纯晶体的强度一般要比由同样材料构成的多晶体的强度大 1 个数量级，而其抗断裂能力和延展性则是前者要比后者小得多。因此金属材料在本质上是多尺度的。

不仅材料的静态特性而且动态特性也是多尺度的问题。金属的塑性变形问题是从位错流动着手研究的，但位错理论本身不能预测塑性流动率和屈服强度——位错与晶界、点缺陷及原子

<sup>\*</sup> 本项目调研得到国家自然科学基金 (19772002) 与高等学校博士点专项科研基金 (97000104) 的资助。

<sup>1)</sup> 摘要是为了读者了解阅读本文，译者根据论文前言和结语写成，也是翻译介绍此文的初衷；关键词是译者加的——编者注

振动之间的相互作用才是导致诸如应变强化、热软化和材料强度特性动态变化等现象的主导因素。

不同尺度上的事件之间的相互作用或影响是一个活跃的研究领域。从着眼于未来的观点看可更加大胆地说, 根据将固体的微观结构与其原子层次的组成成分相结合来预测固体材料的宏观特性, 是材料科学的宏伟理想, 并期望达到人工设计材料的终极目标。

对于本质特性是多尺度的问题, 材料科学并不是其产生的唯一得天独厚的领域。类似地, 在结构生物学家眼中, 蛋白质的折叠过程也引起同样的思考。其中数据资料是在一系列 DNA 基对和对应的一维氨基酸族的层次上得出的, 后者则是蛋白质的主要结构。氨基酸的自组织行为形成诸如  $\beta$  片和  $\alpha$  螺旋体的二次结构, 这种结构又反过来折叠形成蛋白质的三维结构。虽然在一个活的有机体内这种组织在几毫秒内就可形成, 可是即使在目前的超级计算机上模拟这一过程看来也需要数十年的时间, 而且前提条件还须是人们已足够精确地获知原子间微观作用力的物理规律。由于蛋白质的几何形状和其表面上的电荷分布二者一起强烈地影响着生物化学反应, 所以本问题的重要性是毋庸置疑的。

在药理学中, 药物的合理设计问题就是针对具有某一形状和其分子中带有电荷分布的化合物给出有机结构表达式, 以便能够预测其生物反应。因药理学药物在尺度上比起它们所依附的蛋白质要小, 故这种多尺度的问题比起蛋白质折叠问题本身可能更易于处理。

依然是在生物学的领域内但进入较大的长度尺度范围, 相互作用基因的调控和其蛋白质的转录控制着若干基本的生物过程, 包括胚胎发育、细胞分裂和死亡。生物科学的多尺度结构持续存在于整个有机生物体中, 并通过传染病学和生态学的途径直达研究物种相互作用的领域。

对于气候学家和气象学家来说, 在大气环流模拟中计算网格尺度的典型数量级为 100 km。云层和积雪的反射作用很强, 因此对整个大气层的能量平衡和动力学行为有很大的影响。但是局地降水量、水汽含量以及某些风暴系统的特性则通常是小网格现象, 因而必须在小网格层次上进行模拟。小网格模拟, 无论出现在何处, 都是多尺度问题的表征, 而且是一种处理这类问题的办法。

正如在地质板块构造理论和天体物理学研究中所做的那样, 人们在石油开发工程和化学反应流体(如湍流燃烧中的流动)的研究中也广泛使用小网格模拟。甚至充分混合的(空间上均匀的)化学反应在时间上也是多尺度的, 事实上在这类问题的求解中需要刚性常微分方程解法及其自适应时间步技术。

长期以来, 高能物理学家们就认识到他们的理论对预测其中的一些参数(粒子质量和耦合常数)无能为力, 因此必须从更基础的理论中获得这些参数值。点阵量子色动力学方程的计算程序正是这样一种多尺度算法, 其目的之一是计算质子的质量, 因为, 质子在理论上被看成是物质的一种束缚状态, 它的基本成分是夸克和胶子。

## 2 问题和概况

从 Boltzmann 方程出发推导低密度气体的 Navier-Stokes 方程的理论属于多尺度科学, 恰如从 Navier-Stokes 方程出发导出 Darcy 定律一样。理论推导并不能定量地提供其中的参数值或者宏观方程的非线性响应函数(即稠密流体的粘性系数和其它输运系数, 或者多孔介质的渗透率), 在这种意义上, 很多例子通常都是定性的。

多尺度科学中完全定量的(即完全可预测的或不依赖于实验量测结果的)例子很罕见。根据位力展式(virial expansion)推导低密度气体状态方程的过程是多尺度科学中的一个量化例

子. 可是对稠密气体和流体而言, Navier-Stokes 方程更加常用, 这种情况下, 上述理论推导 (无论是微观物理理论还是唯象理论) 并不能得出状态方程和该方程所需要的输运系数, 并且预测这些参数也仅仅是部分地解决问题.

在多尺度科学中能成功地实现量化是少见的情况, 而不能定量地解决科学中的困难则是常例. 这方面不仅多尺度科学难以做到, 而且在过去 10 年内量化的标准已大大提高了, 原因在于以下两个基本因素: “技术吸引”和“技术推动”.

所谓“技术吸引”是指外部需求, 其驱动力是迅速采用新技术的客观要求. 这种需求正在不断加强, 这从目前引人注意的大批新材料、参数范围和优化策略的例子中就可以看出. 对随即引起的科学和技术领域的扩大现象, 结合目前日益增长的对实时且有效响应的需求看, 就必然可以较好理解. 显然, 目前的方法体系承受的压力很大.

“技术推动”指的是开拓研究能力和利用科学机遇, 从而开辟更佳的科学研究道路. 不同科学发展趋势的再一次汇合正在提供途径. 硬件与软件及算法两方面都在不断增大的计算机能力、多尺度科学模拟技术和理论思想的发展、日益增加的研究兴趣等多种因素, 至少在多尺度方法的特定情况下, 都构成了实现多尺度科学目标之计划的基本要素. 在这篇文章里通过将不同的思路勾画在一起, 我们希望能有助于给出这些工作的共同点, 从而加速其发展.

通过认识到多尺度科学是一门跨越当代科学技术的许多研究领域的公共学科, 以及随着信息共享、研究方法交流和技术转让的不断加强, 多尺度科学向前发展的过程一定会得到加速. 如果可能, 开发一种通用的多尺度方法以便于广泛应用也是大有希望的. 这也是下面将要讨论的问题.

### 3 多尺度方法

在经典连续介质物理学范围内, 一种求解多尺度问题的通用方法体系正在出现. 如果一个微结构在空间是孤立的并且集中在维数较其低一些的低维系统中, 如激波或火焰峰面的情况, 那么行波方法和黎曼问题解析法是合适的. 对于体积密实 (volume-filling) 的微结构, 则其中的界面是一种不稳定面, 它将以混沌的形式扩张而形成混合层. 于是, 相对于其内部结构而言, 这种混合层是体积密实的; 而当从外部观察时, 它又是维数低一些的低维结构. 在第二和第三种情况下, 微结构可能是混沌的 (对初始条件具有敏感的依赖性).

函数空间积分以及空间平均、时间平均及系统平均在多尺度科学中起很大作用, 大多数多尺度方法不论以哪种形式出现, 其目标都是研究算法. 一些得到比较广泛应用的多尺度方法包括:

- 相关函数和随机数据分析法
- 基本模态的线性和非线性理论
- 相互作用模态的系综
- 等效方程及其封闭
- 重正化群方法

正如在一般科学中的做法一样, 实现这些多尺度方法需要分析、模拟和实验研究. 介绍这方面情况的大量资料可参见文献 [4].

假定基本方程 (微观物理学的) 是一个非线性的守恒关系式

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \nabla F(U) = 0 \quad (1)$$

对基本方程引入初始数据的统计系综之后, 方程的解是随机性的, 且解的系综保留了定义在初始条件上的概率测度. 采用括弧  $\langle \cdot \rangle$  表示系综平均, 则函数  $U$  的空间测度矩就是数学期望  $\langle U^n \rangle$ . 把相关函数定义为矩, 并看作是  $U$  的变量的函数, 则两点的相关函数由  $\langle U(x_1, t_1)U(x_2, t_2) \rangle$  给出, 它是  $x_1, t_1, x_2, t_2$  的函数.

假设微观物理学量是混沌的, 则在对初始条件有敏感依赖性的意义上, 只有描述解的平均行为的某些泛函才是实验中可重复的. 这一物理特性促使人们对作为统计系综的基本方程进行初始条件下的数学模拟, 其结果将是得到随机性的解. 实验中可重复的量是与某一测度例如相关函数有关的系综平均量相联系的.

对于高斯测度的情况, 所有  $n$  点函数都可用一点和二点相关函数以显式形式表示. 在非高斯测度的情况下, 难以分析较高阶的  $n$  点函数, 仅在高阶函数可以忽略时 (例如当高阶函数很小 (是 virial 展式) 时, 或当其测度近似于高斯分布从而非高斯分布部分很小时, 又或者当封闭关系可对一点和二点函数给出相容的方程, 从而将其从高阶矩中解耦时), 相关函数才是极有价值的. 对线性或者拟线性问题, 高斯测度通常是适用的, 但它对强非线性问题则常常无能为力. 齐次化 (homogenization) 方法将微观尺度到宏观尺度间的范围划分为无穷多个尺度的集合, 所以该方法也可以视为一种封闭形式的求解方法.

把无穷维函数空间中的测度描述为有限对象之极限的另一种途径, 是用拟序结构来逼近函数. 为了简化动力学的描述过程, 我们假定拟序结构是微观物理学方程的基本模态或基本模态的组合. 这种途径利用相互作用模态的统计系综导出一种函数空间测度的描述方法. 一个具体的例子是前面曾提到的第三种情形 (即不稳定的中间态). 其中的不稳定界面变成混沌状态进而决定了一个体积密实的混合层. 接着基本模态将成为不稳定界面的基本模态, 例如剪切不稳定性中的涡旋.

矩张量法和基本模态张量法是系统论的方法. 在矩张量的封闭中假定高阶矩可以近似地用低阶矩的简单函数来表示, 这是一个对函数空间测度的限制依赖问题. 如果流动分离或阵发现象是数据的重要成分, 则这种函数空间测度可能是失效的. 如果分离现象由完全确定的拟序结构产生, 那么后者就决定了基本模态, 且相互作用基本模态的系综可能是作进一步展开的基函数.

重正化群是一种强有力的方法, 但仅适用于求解具有自相似性的问题, 即在每一长度尺度上的共性在微小尺度至宏观尺度间的转移过程中拥有无穷多级串结构的问题. 事实上, 存在这种无穷级串结构及其共性不过是数学上的自相似性在物理学术语上的重申. 充分发展的湍流就是这样一个例子.

大多数的系统论方法都是数值模拟与从矩张量或基本模态张量导出的小网格模型相结合的算法. 随着计算能力的增强, 将有可能对更多的问题进行直接积分, 这样小网格模型的用武之地就不多了. 对于如上面所提到的较简单的问题, 小网格模型的成果还应加以改进.

#### 4 多尺度解法

这里介绍的多尺度方法可在由加速度驱动的流体界面不稳定性引起的多相混物流动的特定范围内予以描述. 在这一领域近年来已经取得了长足的进步, 正如在一系列学术年会论文集<sup>[7]</sup>中所报道的那样. 加速度驱动的流体不稳定性存在二个极端情形: 等加速度 (如重力) 引起的 Rayleigh-Taylor (RT) 不稳定性 and 脉冲加速度 (如激波) 引起的 Richtmyer-Meshkov (RM) 不稳定性.

这里我们考察二相相互渗透的流动，它们在微观层次上并不混合。令  $X_k$  表示  $k$  相的特征函数，用  $X_k$  将前面定义的相关函数分成二相各自的分量，从而可得到一个重要的结果：通常用来研究湍流的矩张量可以分成二部分的和，也就是，完全在各相内计算的相关函数，和一个由一阶二相矩张量构成的封闭表达式<sup>[1]</sup>。这个恒等关系式表明了相关函数分析法的威力。

为了得出这一关系式，令  $\bar{A} = \langle A \rangle$  表示  $A$  的系综平均， $\beta_k = \langle X_k \rangle$  表示  $k$  相体积，并且  $\bar{A}_k = \langle X_k A \rangle / \beta_k$  表示  $A$  在  $k$  相内的体积平均。若用  $\rho$  表示密度而  $\rho_k$  表示密度的相内平均，则  $\tilde{A} = \langle \rho X_k A \rangle / \rho_k$  是  $A$  在  $k$  相内的质量加权平均。对可压缩流体，雷诺应力张量  $R$  可表示为

$$R = \beta_1 R_1 + \beta_2 R_2 + \beta_1 \beta_2 \frac{\bar{\rho}_1 \bar{\rho}_2}{\bar{\rho}} (\tilde{v}_1 - \tilde{v}_2)^2 \quad (2)^{1)}$$

式中  $\tilde{v}_k$  为  $k$  相流体速度。应强调指出，这是一个精确关系式，换言之，在封闭关系的意义上该式并不是一个近似关系式，而且其中不含有任何自由参数。类似的恒等式也适用于湍流理论中的其它二阶矩。

在湍流模型的实际应用中，人们遇到的大多数困难是如何为雷诺应力张量  $R$  及有关的矩张量选择一个合适的近似公式。方程 (2) 及有关恒等关系式表明，多相湍流雷诺应力张量  $R$  以及严格在各相内定义的湍流分布由一个精确的多相湍流混合物关系式确定。换句话说，在多相流中湍流雷诺应力张量  $R$  的确定过程可以简化为确定各单相湍流的雷诺应力张量。在这个基础上，构造一个单相和多相流 (如管道流动) 相结合的湍流模型将是非常方便的。

RT 和 RM 问题的基本模态是各相相互渗透的“指进” (fingers), 称为“泡” (在轻流体中) 或“钉头” (在重流体中)。关于单个模态的特性现已知道很多。在小幅度时欧拉方程可按幅度线性化并求得该线性化方程的解。在大幅度时，可以得出 RT 终极速度的公式。在对初始幅度作小扰动幂级数渐近匹配展开和 Padé 二次求和的基础上，通过适当地延迟时间可获得早期 RM 速度的解析公式。一个由雷兹 (Layzer) 发展的很有潜力的理论模型给出解在所有时间上的行为，至少在 RT 不稳定性问题中当流体内有一部分为真空时情况是如此。对这类问题的精确模拟只是在最近才得以实现 (参见文献 [4])。

至此我们已经提出了一个关于相互作用基本模态统计系综的零参数模型。这一模型已揭示出长度尺度的动力学增长和 RT 混合物等加速度流动的初步基础，并且在重正化群不动点变量法的基础上首次提出了 RT 混合物流动对初始条件不敏感的理论解释。对重正化群不动点求得该模型方程的解，给出流动掺混率系数值的误差在 20% 以内。

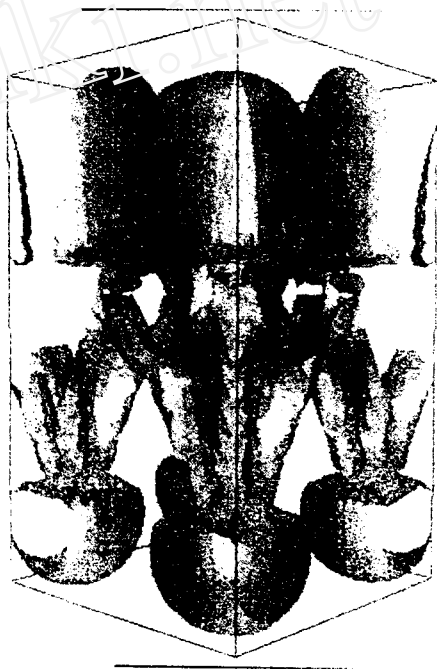


图 1 称为 RT 不稳定性的重力驱动界面混合流动的三维数值模拟结果，计算中采用基于前沿跟踪法的 Fron Tier 程序。在图中，单个延时非线性模态显示出重要的多尺度二次结构，不同模态在随机表面上的相互作用是更高阶的多尺度现象。(模拟结果是 X.L. Li 在印第安纳大学、普渡大学印第安纳分校做出的)

<sup>1)</sup> 式中  $(\tilde{v}_1 - \tilde{v}_2)^2$  宜写成  $(\tilde{v}_1 - \tilde{v}_2) \otimes (\tilde{v}_1 - \tilde{v}_2)$ ，而不容易引起误解——译者注。

关于 RT 问题的多尺度性质, 在本文中从基本或精确微观方程到等效方程一节的内容里可清楚地看出, 该等效方程仅在某些隐去了微观物理小尺度细节的宏观长度尺度范围内有效.

对基本方程 (1) 式取平均, 就可得到

$$\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} + \nabla \bar{F}(U) = 0 \quad (3)$$

因  $F$  是非线性的, 故  $\nabla \bar{F}(U) \neq \nabla F(\bar{U})$ . 由于方程中含有未确定量  $\bar{F}$ , 且未将它作为  $\bar{U}$  的函数给出, 所以该方程是不封闭的. 封闭方程的过程就是构造一个近似关系式即  $F_{\text{ren}}(\bar{U}) \approx \bar{F}$ . 该近似关系式中必须含有某些测度系综的典型元素或大多数元素, 在这种意义上, 这一近似关系式具有统计性质. 因此, 近似关系式的有效性基本上取决于系综的选择, 进而取决于系综所定义的物理流态.

为便于比较, 状态方程也可视为一种封闭关系式, 它把欧拉方程与分子运动论如 Boltzmann 方程联系起来. 不同材料的 Boltzmann 方程通过其中碰撞项的性质而互相区别, 在状态方程中这种对应关系就转化为材料对封闭特性的依赖关系.

对于若干流态, 例如粉尘气体、颗粒流动、悬移质(泥沙)运动、雾状流、泡沫流和气泡羽流等, 其多相流方程的封闭关系已经为人们所给出<sup>[2,5,6]</sup>. 我们和我们的同事<sup>[1]</sup>也提出了一个新的封闭关系式, 它有如下几个重要特征: 它允许多相流和湍流的积分描述, 以及将其自由度分成两个部分, 正如在方程 (2) 中的情况一样; 它的数学性质是稳定的(对柯西问题没有复数本征值); 它的有效性已得到仔细论证并用于对 RT 混合流动问题的解析研究. 因为封闭关系式引入了新的物理假设并且在严格的数学意义上是不能被导出的, 所以封闭式的适用范围将比作为其出发点的基本方程的有效范围小. 确定封闭式的适用范围又将引入一新领域的科学问题, 该问题本质上具有多尺度的特性.

在不可压缩流动限度内, RT 问题有一个相当重要的特征影响着流动的数值模拟. 该限度受到一个重正化群不动点的控制. 作为一群不动点中的关键一个, 这个不动点显示出高度的普适性. 基于柯西条件的初始概率测度的详细特征, 在实验中是很难把握的, 因此它对解的系综平均量的长期行为几乎没有影响.

混合层不是完全三维的, 也许正是这个缘故, 信息流的主要趋势是从小距离流向大距离, 正如二维湍流中的典型情况一样. 因而混合层的动力学特性能够提供一种粗粒化方法, 这是重正化群动力学的一个基本手段. 换言之, 在这些情形下, 物理上的时间变量是一个重正化群粗粒化变量. 由量纲分析可以发现, RT 混合物流动的不可压缩极限满足延时标度律. 这一结果首先由实验观察到, 随后在数值模拟中得出, 而最近在对上述 RT 类型的多相流等效方程的解析中再一次证实了该结果. 这种标度不变性流动就是重正化群的不动点, 它也可以理解为由等效方程导出的双曲型守恒方程的一个黎曼解.

以这种方式, 我们发现重正化群的标度不变性和守恒方程黎曼解的标度不变性相一致, 并且二者都给出了混合层流动的长期动力学行为. 根据非线性守恒方程理论的一般性结论, 在一个空间维度上(如混合层的横向), 柯西问题的长期渐近行为将由在  $x = -\infty$  处具有相同初始条件的自相似黎曼解给出. 换言之, 这一数学理论同重正化群理论一样计算出了自相似性及初始条件的记忆丧失.

## 5 结 语

正如非线性现象和随机现象已被认为是属于交叉学科一样, 我们发现多尺度科学处于当代

科学的许多极富挑战性问题的核心。因此，发展多尺度科学的方法论体系既是一种需要也是一种机遇。

### 参 考 文 献

- 1 Chen Y, Glimm J, Sharp D H, Zhang Q. A two-phase flow model of the Rayleigh-Taylor mixing zone. *Phys Fluids*, 1996, 8: 816~825
- 2 Drew D A. Mathematical modeling of two-phase flow. *Ann Rev Fluid Mech*, 1983, 15: 261~291
- 3 Glimm J, Saltz D, Sharp D H. Two-phase modeling of a fluid mixing layer. Tech Rep SUNYSB-AMS-97-01, SUNY at Stony Brook, 1997. Submitted to *J Fluid Mech*
- 4 Glimm J, Sharp D H. Stochastic partial differential equations: Selected applications in continuum physics. In: Carmona R A and Rozovskii B L, eds. *Stochastic Partial Differential Equations: Six Perspectives*, Mathematical Surveys and Monographs, American Mathematical Society, Providence, 1997
- 5 Soo S L. *Particulates and Continuum: Multiphase Fluid Dynamics*. New York: Hemisphere, 1989
- 6 Wallis G. *One-Dimensional Two-Phase Flow*. New York: McGraw-Hill, 1969
- 7 Young R, Glimm J, Boston B, eds. *Proceedings of the Fifth International Workshop on Compressible Turbulent Mixing*. Singapore: World Scientific, 1996

北京大学湍流研究国家重点实验室 吴江航 黄社华译自  
SIAM News, 1997, 30(8): 1~7  
中国科学院力学研究所 董务民校

## MULTISCALE SCIENCE: A CHALLENGE