乘性噪声下计算涨落流体力学中的方差与高阶矩

Satinderpreet Singh 和 Changho Kim*加利福尼亚州大学默塞德分校应用数学系，加利福尼亚州默塞德 *95343*，美国

Ishan Srivastava、Andrew J. Nonaka 和 John B. Bell劳伦斯伯克利国家实验室计算科学与工程中心，伯克利，加利福尼亚州 *94720*，美国

Alejandro L. Garcia物理与天文学系，圣何塞州立大学，加利福尼亚州圣何塞 *95192*，美国（日期：2026年11月25日）

arXiv:2611.31978v1 [physics.comp-ph] 24 Nov 2026

摘要

涨落流体力学（FHD）通过在经典守恒定律中加入受涨落耗散定理支配的随机通量项，对介观流体系统进行建模。传统上，对计算涨落流体力学（CFHD）算法的验证主要关注平衡涨落的二阶中心矩，但要评估流体动力学场的非线性函数，准确求解高阶矩（如偏度和峰度）至关重要。本文分析了有限体积 CFHD 离散化，以评估热力学涨落的二阶、三阶和四阶中心矩。通过一维随机热方程，我们证明，必须纳入乘性噪声，才能恢复正则系综中温度预期的伽马分布；而加性噪声模型给出的是高斯分布，无法捕捉非零偏度和超额峰度。我们还推导了多种边界条件下的固有建模误差解析表达式，这些误差在时间步长趋于零时仍然存在。此外，我们提出了一种改进的狄利克雷边界条件处理方法，可消除传统边界处理在边界相邻区域造成的三阶中心矩大误差。我们还考察了更高阶的时间积分格式，结果表明，基于斯特拉托诺维奇的积分器（如 Heun预测-校正法）可以减小这些建模误差。最后，对完整可压缩随机纳维–斯托克斯方程的数值模拟证实了从随机热方程得出的结论具有普遍性和实际适用性。

I. 引言

涨落流体力学（FHD）将经典连续介质力学拓展至介观尺度，在这一尺度上，热涨落在整体动力学中发挥着重要作用。宏观流体力学依赖确定性的守恒定律，而微观和纳米尺度系统的流体动力学场本质上具有随机性。为避免分子动力学（MD）带来的高昂计算开销，同时捕捉这些效应，FHD 采用由 Landau and Lifshitz 提出的纳维–斯托克斯方程推广形式来描述介观动力学 [1, 2]。从形式上看，这种方法导出随机偏微分方程（SPDE），在标准流体动力学方程中加入随机通量项，以模拟自发热涨落。这些噪声项的大小由涨落耗散定理决定，该定理确保随机驱动与物理耗散相平衡，从而维持正确的吉布斯–玻尔兹曼平衡分布。

尽管早期研究展现出良好前景 [3–5], ，数值求解涨落流体动力学方程仍面临独特挑战，因为标准离散化方案往往无法在离散层面保持涨落耗散平衡。一种处理涨落流体动力学方程的方法是引入有限体积

* ckim103@ucmerced.edu

离散化方案，专门用于满足离散形式的涨落耗散平衡 [6, 7]。这样便可将涨落流体动力学方程改写为含乘性噪声的随机常微分方程组。人们已开发出显式随机龙格–库塔时间积分方法，在保持通量结构的同时对方程进行时间离散化。

总体而言，对连续涨落流体动力学方案的验证主要集中在涨落的二阶中心矩。例如，对于温度涨落，连续涨落流体动力学计算中测得的方差 $\delta T^2(\mathbf{r})$，可以与已知的理论结果进行比较，通常是针对处于热力学平衡的系统。由于涨落耗散平衡已纳入空间离散化，测得的结果与预期理论值之间的偏差，主要被归因于时间离散化导致的数值截断误差。然而，将涨落流体动力学方程改写为具有乘性噪声的随机常微分方程，也会引入在极限 $\Delta t \to 0$下不会消失的“建模误差”。本研究的目标之一是从理论和数值两方面定量评估这些建模误差。

对于 CFHD 中流体动力学变量的高阶矩（3 阶、4 阶等），其涨落精度在很大程度上尚未得到研究。[8] 然而，在某些应用中，准确解析高阶矩可能发挥重要作用。例如，假设我们在模拟中计算温度的某个非线性函数 $g(T)$；成核速率或反应的平衡常数就是很好的例子。在稳态下，我们有 $\bar{g} = \int dT\, g(T)\mathrm{P}(T)$，其中 P 是温度的平稳分布。将 $g(T)$ 在平均温度 $\bar{T}$ 处作泰勒展开可得

$$\langle g \rangle = g(\bar{T}) + \frac{1}{2}\left.\frac{d^2 g}{dT^2}\right|_{T=\bar{T}} \langle \delta T^2 \rangle + \frac{1}{6}\left.\frac{d^3 g}{dT^3}\right|_{T=\bar{T}} \langle \delta T^3 \rangle + \dots , \tag{1}$$

其中 $\delta T = T - \bar{T}$。显然，如果 $g(T)$ 关于 $\bar{T}$不对称，那么只有温度的中心矩正确时，模拟中得到的 $g(T)$ 才会更加准确。

在本研究中，我们考虑最简单的随机流体力学方程之一——随机热方程（SHE）[3, 9]。一维 SHE 为

$$\partial_t T(x,t) = \kappa \partial_x^2 T + \xi \partial_x \left(T\tilde{Z}\right), \tag{2}$$

其中 $\kappa = \lambda/\rho c_V$ 是热扩散率。这里，ρ 是密度，c_V 是比热容，λ 是热导率，这些量均视为常数。根据涨落耗散定理，噪声系数为 $\xi = \sqrt{2k_\mathrm{B}\lambda/\rho c_V}$，其中 k_B 是玻尔兹曼常数。噪声方差为

$$\langle \tilde{Z}(x,t)\tilde{Z}(x',t') \rangle = \frac{1}{\mathcal{A}} \delta(x-x')\delta(t-t'), \tag{3}$$

其中 A 是系统的横截面积。

在许多情况下，精确进行 CFHD 计算都很重要，尤其是当

我们考虑非平衡情形时。例如，考虑具有线性温度梯度的一维随机热方程。对于位于 $x = 0$ 和l处的狄利克雷边界条件，温度涨落的相关函数为 [3]:

$$\langle \delta T(x)\delta T(x')\rangle = \frac{k_{\mathrm{B}}\overline{T}(x)^2}{\rho c_V \mathcal{A}}\delta(x-x') + \frac{k_{\mathrm{B}}(\partial_x \overline{T})^2}{\rho c_V \mathcal{A}\ell} \times \begin{cases} x(\ell - x'), & \text{if } x < x', \\ x'(\ell - x), & \text{otherwise.} \end{cases} \tag{4}$$

右端的第一项是局域平衡方差，第二项则是温度涨落的微弱长程关联。即使在$T \approx |l\partial_x T|$这一极端情况下，非平衡项与平衡项之比通常也只有百分之几。尽管这些非平衡关联通常很微弱，却能产生显著的宏观现象，例如巨涨落效应 [10–12]。最近，Bussoletti、等人 [13] 的研究表明，远离平衡时，二元流体中浓度涨落的三点偏度会因浓度涨落与速度涨落之间的非线性模态耦合而依赖于浓度梯度。

本文分析了用于随机热方程的有限体积 CFHD 格式，推导出温度的二阶、三阶和四阶中心矩表达式。分析结果表明（数值模拟也证实），采用乘性噪声的这些数值格式能够准确得到这些中心矩。我们的处理涵盖了具有狄利克雷边界条件的封闭系统，以及具有周期性或齐次诺伊曼边界条件的孤立系统。对于孤立系统，我们明确计入了能量守恒导致的有限尺寸修正。基于这项分析，我们还推导出一种新的狄利克雷边界条件处理方法，与传统的狄利克雷边界处理相比，它能显著提高高阶矩的分辨率。此外，我们还推导出随机偏微分方程离散化所导致的小建模误差的表达式。即使在时间步长趋于零的极限下，这些误差仍然存在。最后，我们通过测量完整随机可压缩纳维–斯托克斯方程的 CFHD 计算中的中心矩，证明了这些发现具有普遍性。

II. 温度涨落

我们在此关注的是，随机热方程的数值解能否准确给出温度涨落的正确中心矩。我们首先考虑状态概率分布由正则系综给出的情形，即系统与热库接触 [14]。对于随机热方程，这对应于固定温度下的狄利克雷边界条件。正则系综还给出了一个极限情形：无限大系统中的一个小子体积（网格单元）充当“热浴”，使该子体积维持在平衡温度。如第IIA节所示，

温度　正则系综中的温度涨落服从伽马分布　　.

我们还关注系统处于孤立状态的情形（例如，采用周期性边界条件）。在这种情况下，温度涨落的中心矩不同于伽马分布的中心矩。具体而言，对于随机热方程，由于能量守恒，有限系统中子体积的温度涨落取决于整个系统的大小。我们不分析微正则系综所描述的一般情形，而是在第 IIB 节提出一种简单的中心矩修正，以考虑能量守恒。正如我们将看到的，这个代表物理效应的守恒方程与建模误差项共同构成了对数值模拟的准确预测。

A. 正则系综

根据 Callen，正则系综中能量涨落的第 [14], n^{th} 阶中心矩可由概率分布得到：

$$\langle \delta E^n \rangle = \langle (E-U)^n \rangle = \sum_j^{\text{states}} \left(E_j - U\right)^n \exp\left(\beta(F-E_j)\right) , \tag{5}$$

其中，$\beta = 1/k_{\mathrm{B}}T$、$E$ 表示某个状态的能量，$U = E$ 是能量的平衡值，而 F 是正则系综的自由能（即亥姆霍兹自由能）。Callen 给出了涨落矩的递推关系：

$$\langle \delta E^{n+1} \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta}\langle \delta E^n \rangle - n\langle \delta E^{n-1} \rangle \frac{\partial U}{\partial \beta} . \tag{6}$$

二阶矩为

$$\langle \delta E^2 \rangle = \rho k_{\mathrm{B}} c_V \overline{T}^2 V , \tag{7}$$

其中 V 是系统的体积。利用递推关系，对于常数 c_V，三阶矩和四阶矩为

$$\langle \delta E^3 \rangle = 2\rho k_{\mathrm{B}}^2 c_V \overline{T}^3 V , \quad \langle \delta E^4 \rangle = 3\rho c_V k_{\mathrm{B}}^2 (\rho c_V V + 2k_{\mathrm{B}}) \overline{T}^4 V . \tag{8}$$

这些结果适用于正则系综，也就是说，系统与热浴接触。对于其他情况（例如，孤立系统），体积为 V 的子系统，其矩与上述结果相同，但有一个修正项 $O(V/V_\Sigma)$ 其中 V_Σ 是系统的总体积（见第 IIB节）。

我们关注的是温度涨落，因此利用上述内容和关系式 $E = \rho c_V V T$ 可得

$$\langle \delta T^2 \rangle = \frac{k_{\mathrm{B}} \overline{T}^2}{\rho c_V V} , \quad \langle \delta T^3 \rangle = \frac{2k_{\mathrm{B}}^2 \overline{T}^3}{\rho^2 c_V^2 V^2} , \quad \langle \delta T^4 \rangle = \frac{3k_{\mathrm{B}}^2 (\rho c_V V + 2k_{\mathrm{B}}) \overline{T}^4}{\rho^3 c_V^3 V^3} . \tag{9}$$

将比热容写成 $c_V = \frac{1}{2} f k_B/m$ 是很有用的，其中 f 是经典自由度的数量， m 是原子质量。例如，对于经典固体，根据杜隆-珀蒂定律，对于 $f = 6$ 个自由度（3 个平动自由度加 3 个振动自由度），有 $c_V = 3k_B/m$ 。利用这一关系，我们得到 $\rho c_V V = \frac{1}{2} f k_B \mathrm{N}$，其中 N 是体积为$V$中的分子数量，并且 -

$$\langle \delta T^2 \rangle = \frac{2\overline{T}^2}{f\mathcal{N}}, \quad \langle \delta T^3 \rangle = \frac{8\overline{T}^3}{f^2\mathcal{N}^2}, \quad \langle \delta T^4 \rangle = \frac{\left(12 + \frac{48}{f\mathcal{N}}\right)\overline{T}^4}{f^2\mathcal{N}^2} = \left(3 + \frac{12}{f\mathcal{N}}\right)\langle \delta T^2 \rangle^2 . \tag{10}$$

根据中心矩，我们可以计算变异系数、偏度和峰度

$$\begin{aligned} \mathrm{CV}[T] &= \frac{\sqrt{\langle \delta T^2 \rangle}}{\langle T \rangle} = \sqrt{\frac{2}{f\mathcal{N}}}, \quad \mathrm{Skew}[T] = \frac{\langle \delta T^3 \rangle}{\langle \delta T^2 \rangle^{3/2}} = \sqrt{\frac{8}{f\mathcal{N}}}, \\ \mathrm{Kurt}[T] &= \frac{\langle \delta T^4 \rangle}{\langle \delta T^2 \rangle^2} = 3\left(1 + \frac{4}{f\mathcal{N}}\right) . \end{aligned} \tag{11}$$

注意 该分布是尖峰态（$\mathrm{Kurt}[T] > 3$），这意味着它具有“厚”尾部 s.

如附录 A所证，在正则系综中，温度的概率密度函数是伽马分布

$$\mathcal{P}_\gamma(T) = \frac{\tilde{\beta}^{\tilde{\alpha}}}{\Gamma(\tilde{\alpha})} T^{\tilde{\alpha}-1} e^{-\tilde{\beta}T}, \tag{12}$$

其形状参数为 $\tilde{\alpha} = \frac{1}{2} f \mathrm{N}$, - 率参数为 $\tilde{\beta} = \tilde{\alpha}/T$。这并不令人意外，因为对于服从麦克斯韦–玻尔兹曼分布的粒子速度，其动能服从伽马分布。

B. 守恒修正

上述关于正则系综的结果，对于有限孤立系统中的子体积不再是精确的。当所有边界均为周期性边界，或满足齐次诺伊曼边界条件时，系统是孤立的。孤立系统中的总能量守恒，因此，温度涨落的分布必须符合这一守恒性质。

考虑将孤立系统划分为 N 个单元，每个单元的体积为 V，以此预示随机热方程的有限体积离散化。对于任意守恒量，涨落之和必须为零，因此独立涨落的数量是 $N-1$，而不是 N。我们预计，当 N 非常大时，这种修正很小。然而，当单元数量较少时，例如 $O(10)$，分布 $\mathrm{P}(T)$ 会明显偏离伽马分布。

为量化守恒带来的修正，我们考虑如下假设：方差的修正

和二次相关可以写作

$$\langle \delta T_i \delta T_j \rangle_{(N)} = a_1 \delta_{ij} + a_2 \,, \tag{13}$$

其中，下标 (N) 表示系统中的单元数；系数 a_1 和 a_2 假定为常数。对于孤立系统，守恒约束 $\sum_i^N \delta E_i = \sum_i^N \rho c_V \delta T_i = 0$ 意味着 $\sum_i^N \delta T_i = 0$。对方程（13）求和可得 $a_2 = -a_1/N$。由于守恒修正在 $N \to \infty$的极限下消失；即，

$$\lim_{N\to\infty} \langle \delta T_i \delta T_j \rangle_{(N)} = \langle \delta T^2 \rangle \delta_{ij} \,, \tag{14}$$

我们有

$$\langle \delta T_i^2 \rangle_{(N)} = \left(1 - \frac{1}{N}\right) \langle \delta T^2 \rangle \,. \tag{15}$$

换言之，由于守恒，温度涨落的方差降低了 $1/N$ 倍。该分析还给出，对于 $i \neq j$，$\langle \delta T_i \delta T_j \rangle_{(N)} = -\langle \delta T^2 \rangle / N$；也就是说，由于守恒，不同单元中的涨落彼此相关。这种由守恒导致的相关性通常称为有限尺寸修正，是众所周知的（例如 [15]），并且不同于非平衡系统中的长程相关。

采用类似的论证，我们写出

$$\langle \delta T_i \delta T_j \delta T_k \rangle_{(N)} = a_1 \delta_{ij} \delta_{jk} + a_2 (\delta_{ij} + \delta_{ik} + \delta_{jk}) + a_3 \,, \tag{16}$$

求得 $a_2 = -a_1/N$ 和 $a_3 = -2a_2/N$，因此对于 $N > 2$,

$$\langle \delta T_i^3 \rangle_{(N)} = \left(1 - \frac{3}{N} + \frac{2}{N^2}\right) \langle \delta T^3 \rangle. \tag{17}$$

此外，我们发现

$$\langle \delta T_i^2 \delta T_j \rangle_{(N)} = -\frac{N-2}{N^2} \langle \delta T^3 \rangle \,, \quad \langle \delta T_i \delta T_j \delta T_k \rangle_{(N)} = \frac{2}{N^2} \langle \delta T^3 \rangle \,, \tag{18}$$

对于 $i \neq j \neq k$。

最后，四阶中心矩的分析稍显复杂（参见附录B）

最终结果为

$$\langle \delta T_i^4 \rangle_{(N)} = \left(3 + \gamma_2 - \frac{6+4\gamma_2}{N} + \frac{3+6\gamma_2}{N^2} - \frac{3\gamma_2}{N^3}\right) \langle \delta T^2 \rangle^2 , \tag{19a}$$

$$\langle \delta T_i^3 \delta T_j \rangle_{(N)} = \left(-\frac{3+\gamma_2}{N} + \frac{3+3\gamma_2}{N^2} - \frac{3\gamma_2}{N^3}\right) \langle \delta T^2 \rangle^2 , \tag{19b}$$

$$\langle \delta T_i^2 \delta T_j^2 \rangle_{(N)} = \left(1 - \frac{2}{N} + \frac{3+2\gamma_2}{N^2} - \frac{3\gamma_2}{N^3}\right) \langle \delta T^2 \rangle^2 , \tag{19c}$$

$$\langle \delta T_i^2 \delta T_j \delta T_k \rangle_{(N)} = \left(-\frac{1}{N} + \frac{3+\gamma_2}{N^2} - \frac{3\gamma_2}{N^3}\right) \langle \delta T^2 \rangle^2 , \tag{19d}$$

$$\langle \delta T_i \delta T_j \delta T_k \delta T_l \rangle_{(N)} = \left(\frac{3}{N^2} - \frac{3\gamma_2}{N^3}\right) \langle \delta T^2 \rangle^2 , \tag{19e}$$

其中， $\gamma_2 = 12/f\mathrm{N}$ 是伽马分布的超额峰度。

应当强调，这些守恒修正是物理效应。它们仅仅反映了这样一个事实：对于一个用有限个单元表示的孤立系统$\sum_i \delta T_i = 0$。尽管对于 $N \gtrsim O(100)$而言，这种守恒修正相当小，但仍可能与数值建模误差相当，正如第V节所讨论的。

III. 有限体积公式

为了对随机热方程（SHE）进行数值求解，我们引入一种在空间和时间上对方程离散化的有限体积格式。我们将区域划分为有限体积单元，$C_i = (i\Delta x, \ (i+1)\Delta x)$，并令 $t^n = n\Delta t$。我们的目标是评估这类数值方法对温度分布中心矩的捕捉效果。令 T_i^n表示 C_i 在时刻 t^n的取值，其中 $i = 0, \ldots, N-1$，其中 N是单元数。对于时间积分，我们采用最简单的随机常微分方程格式，即 Euler–Maruyama方法或前向欧拉法 [16]。尽管 Euler–Maruyama方法在时间上仅为一阶精度，但我们在此着重采用该方法，因为它相对容易分析，且与 Itô 随机微积分相一致。第VI节将简要讨论高阶格式。使用该格式

$$\begin{aligned} T_i^{n+1} &= T_i^n + \frac{\kappa\Delta t}{\Delta x^2}\left(T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n\right) + \frac{\xi\Delta t}{\Delta x}\left(T_{i+\frac{1}{2}}^n \tilde{Z}_{i+\frac{1}{2}}^n - T_{i-\frac{1}{2}}^n \tilde{Z}_{i-\frac{1}{2}}^n\right) \\ &= T_i^n + \frac{\Delta t}{\Delta x}\left(F_{i+\frac{1}{2}}^n - F_{i-\frac{1}{2}}^n\right) , \end{aligned} \tag{20}$$

其中，总通量 F 是确定性分量 $F_{i+\frac{1}{2}}^n$ 与随机分量 $\tilde{F}_{i+\frac{1}{2}}^n$ 之和，后者由下式给出

$$\overline{F}_{i+\frac{1}{2}}^n = \frac{T_{i+1}^n - T_i^n}{\Delta x} , \quad \tilde{F}_{i+\frac{1}{2}}^n = \xi\, T_{i+\frac{1}{2}}^n \tilde{Z}_{i+\frac{1}{2}}^n , \tag{21}$$

分别。对于面的温度，我们采用算术平均值 $T^n_{i+\frac{1}{2}} = (T^n_{i+1} + T^n_i)/2$。数值上，噪声的生成方式如下

$$\tilde{Z}^n_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{V\Delta t}} \mathfrak{N}^n_{i+\frac{1}{2}}, \tag{22}$$

其中 $V = \mathrm{A}\Delta x$ 是网格单元的体积，$\mathfrak{N}$ 是均值为零、方差为单位值的独立高斯伪随机数。

需要强调的是，我们的随机热方程具有乘性噪声。若将噪声设为加性噪声，例如将 $T^n_{i\pm\frac{1}{2}}$ 设为平衡温度，则可以得到正确的平衡方差，但无法得到正确的高阶矩，因为加性噪声下的温度分布为高斯分布 [6]。

我们考虑三种边界条件：周期性、诺伊曼和狄利克雷。周期性边界条件的实现很直接。对于齐次诺伊曼边界条件，边界处的能量通量为零，因此在绝热边界处，我们在离散化方程（20）中令 $F^n_{-\frac{1}{2}} = F^n_{N-\frac{1}{2}} = 0$。我们不考虑非齐次诺伊曼边界条件（即非零热流），因为我们关注的系统限于热力学平衡状态。

对于狄利克雷边界条件，我们在边界处单元的面上指定 T，这会同时改变边界处的确定性通量和随机通量。对于左、右边界条件 $T_\mathrm{L} = T$（$x = 0$）和 $T_\mathrm{R} = T$（$x = L$），确定性通量写为

$$\overline{F}^n_{-\frac{1}{2}} = \frac{T^n_0 - T_\mathrm{L}}{\Delta x/2}, \quad \overline{F}^n_{N-\frac{1}{2}} = \frac{T_\mathrm{R} - T^n_{N-1}}{\Delta x/2}, \tag{23}$$

分别。为确保离散系统在平衡态下捕捉到正确的方差，我们对左右两个面上的随机通量进行了如下修改：

$$\tilde{F}^n_{-\frac{1}{2}} = \sqrt{2}\xi \mathcal{D}(T_\mathrm{L}, T^n_0)\tilde{Z}^n_{-\frac{1}{2}}, \quad \tilde{F}^n_{N-\frac{1}{2}} = \sqrt{2}\xi \mathcal{D}(T_\mathrm{R}, T^n_{N-1})\tilde{Z}^n_{N-\frac{1}{2}}, \tag{24}$$

分别。对于狄利克雷边界条件下随机通量的定义，我们考虑如下形式的 D

$$\mathcal{D}_\zeta(T_\mathrm{L}, T) = \zeta T + (1-\zeta)T_\mathrm{L}, \tag{25}$$

采用 $\zeta = 0$ 或 $\zeta = \frac{1}{2}$。[17] 早期研究 [3, 9] 采用了 $\mathcal{D}_0$，因为它对方差的计算结果准确。然而，如第 V 节所示，采用 $\mathcal{D}^1_2$ 能更准确地计算高阶矩。

IV. 数值测试

本节讨论数值测试的结果：在使用上一节所述有限体积算法对随机热方程进行模拟时，测量了 δT^m。

这些模拟测量值与第II节给出的中心矩进行了比较。除非另有说明，模拟参数为：$T = 300\,\mathrm{K}$；$f = 6$；$\Delta x = 1 \times 10^{-9}\,\mathrm{m}$；$\mathrm{A} = 2。5 \times \overline{1}0^{-19}\,\mathrm{m}^2$, $\lambda = 70\,\mathrm{W\,m{\cdot}K}$。

这里我们考虑介观系统，也就是说，每个单元中的分子数足够少，从而会出现明显的涨落（$\mathrm{N} \leq 100$），但又不会少到使涨落流体动力学表述不再适用（$\mathrm{N} \geq 10$）。本节还考虑网格单元数量较大的系统（$N \gg 1$），具体而言，我们取 $N = 100$ 或 $N = 1000$。对于这些数量较大的 N，守恒修正相对较小。我们认为理论矩与模拟之间的差异主要来自建模误差；对于中心矩，该误差通常为 $O(1/f\mathrm{N})$。

图 1 比较了狄利克雷边界条件下两种选项所测得的归一化中心矩，$\langle \delta T_i^m \rangle_\mathrm{s} / \langle \delta T_i^m \rangle$，其中 $T_\mathrm{L} = T_\mathrm{R} = T$。对于这些计算，时间步长为$\Delta t = 1。8\overline{6} \times 10^{-16}$ 秒，$N = 100$，且 $\mathcal{N} = 100$。传统选项 $\zeta = 0$在二阶矩和四阶矩方面表现良好，但对于边界附近的单元，三阶矩的误差非常大。相比之下，另一种选项 $\zeta = \frac{1}{2}$ 的结果良好（三种矩的分数差均低于百分之一）。特别是，采用 $\zeta = \frac{1}{2}$ 时，二阶矩的误差约为 0.3%，而三阶矩和四阶矩的误差为 $\approx 1\%$。

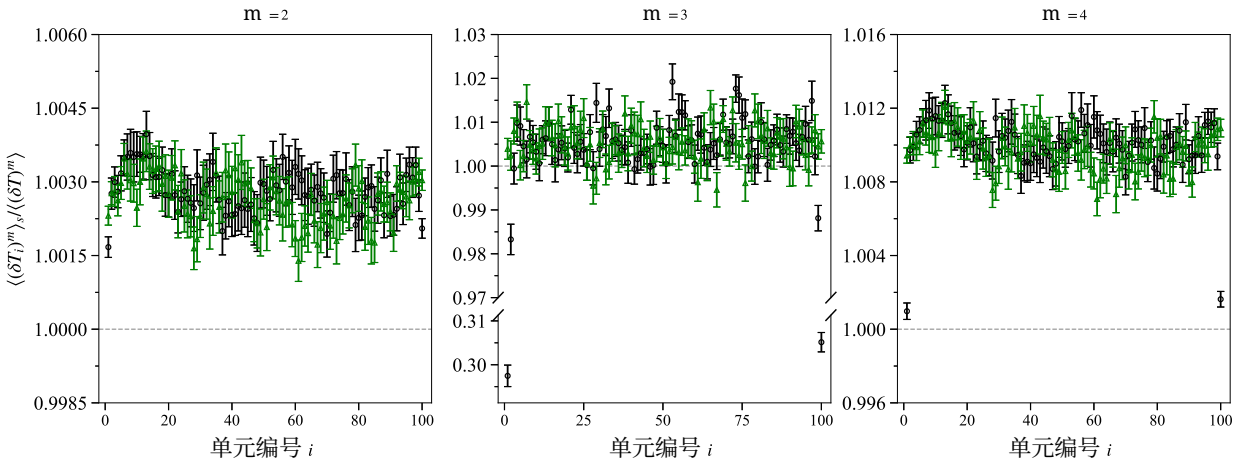


图1. 测得的归一化中心矩 $\delta T_i^m{}_\mathrm{s} / \delta T_i^m$与单元索引 i的关系，分别对应 $m = 2$（左）、$m = 3$（中）和 $m = 4$（右）。系统包含 $N = 100$ 个单元，并采用Dirichlet边界条件，边界条件分别为$\zeta = 0$（黑色圆圈）或$\zeta = \frac{1}{2}$（绿色三角形）。

现在我们更仔细地考察狄利克雷边界条件下这些模拟结果如何依赖于 Δt 和N。对于Euler–Maruyama方法，温度方差的截断误差为 $O(\Delta t/\Delta x^2)$ [6]，因此我们采用若干不同的时间步长进行了多次模拟，并将结果外推至时间步长 Δt趋于零的极限。图2显示了测得的分数差$\delta T^m{}_\mathrm{s} / \delta T^m - 1$随 Δt变化的情况，其中 $m = 2$取3、4；这里，$\delta T^m{}_\mathrm{s}$表示对模拟系综取平均，而δT^m由方程（式）(10)给出。从这些结果可以看出

图1 中观察到的分数差并非有限时间步长下的截断误差所致。我们还注意到，中心矩中的这一分数差会随着N增大而减小；这一点将在第VA节中分析。

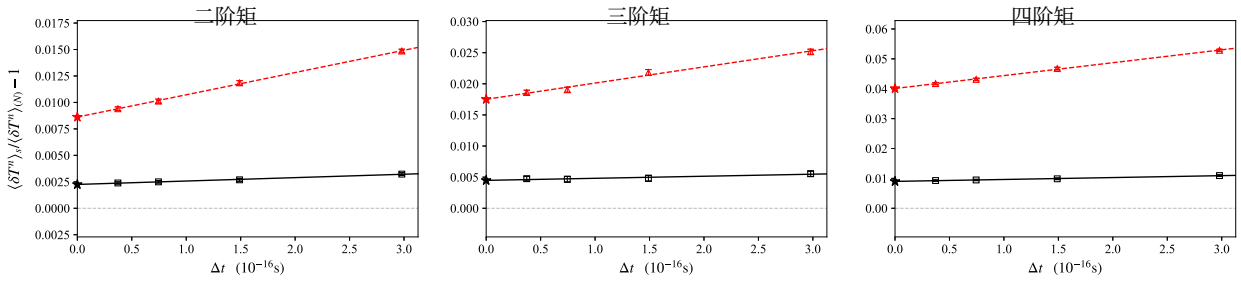


图2。狄利克雷边界条件下，第二（左）、第三（中）和第四（右）中心矩的测量分数差 $\delta T^m{}_s/\delta T^m - 1$ 随时间步长 Δt 的变化。符号表示单次模拟的结果，曲线表示 $N = 100$ 的拟合，其中 $\mathrm{N} = 20$（红色）或 100（黑色）。

图3展示了孤立系统的测量归一化中心矩 $\langle \delta T_i^m \rangle_s / \langle \delta T_i^m \rangle_{(N)}$，具体而言，是具有周期性或齐次诺伊曼边界条件的系统。这里，$\langle \delta T^m \rangle_s$ 表示对模拟系综取平均，而 $\langle \delta T^m \rangle_{(N)}$ 由方程（15）、（17）、（19）给出。对于这些运行，时间步长为 $\Delta t = 1.86 \times 10^{-16}$ 秒，$N = 100$，且$\mathcal{N} = 100$。理论与结果总体吻合良好（分数差低于 1%），且靠近诺伊曼边界的单元与内部区域的单元无法区分。

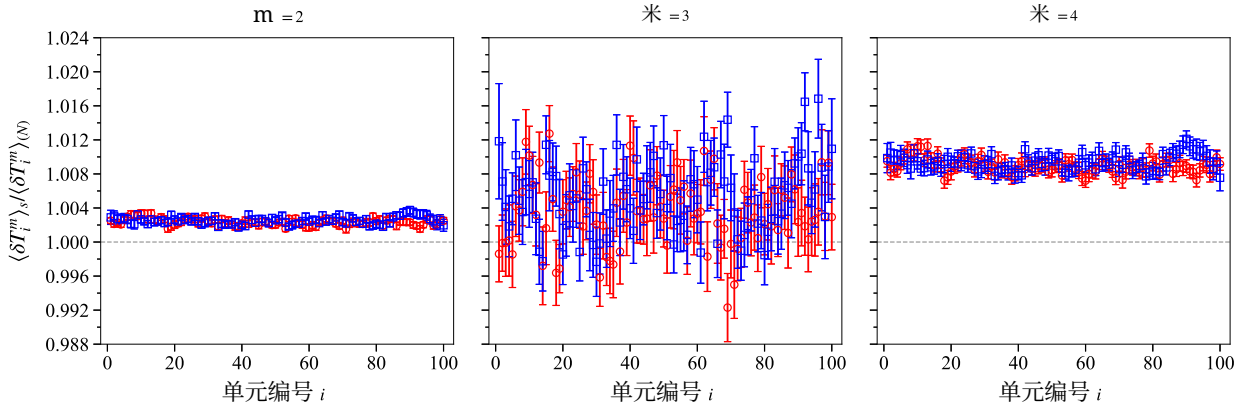


图 3. 测得的归一化中心矩 $\delta T_i^m{}_s/\delta T_i^m{}_{(N)}$ 随单元索引 i 的变化，分别对应 $m = 2$（左）、$m = 3$（中）和 $m = 4$（右）。系统包含 $N = 100$ 个单元，$\mathrm{N} = 100$，边界条件为周期性（红色圆圈）或诺伊曼（蓝色方块）。虚线表示 $\delta T_i^m{}_s/\delta T_i^m{}_{(N)} = 1$。

图 4 展示了周期性边界条件下模拟结果对 N、$\mathcal{N}$ 和 Δt 的依赖关系；诺伊曼边界条件下也得到了类似结果。我们看到，矩中存在一个小误差，该误差随着时间步长的减小而线性减小，这符合预期；然而，当 $\Delta t \to 0$ 时，分数差并不会趋于零。该分数差确实会减小

随着 $\mathcal{N}$ 的增大以及 N 的增大而减小；这些构成了第 VB 节中讨论的建模误差。

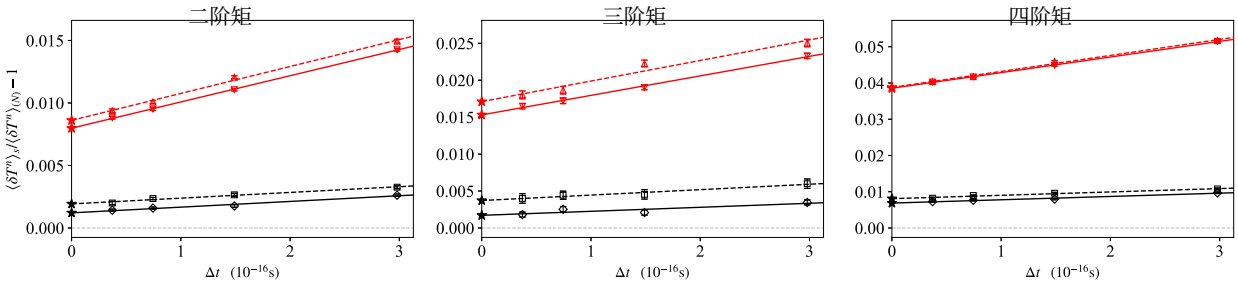


图4. 周期性边界条件下，第二（左）、第三（中）和第四（右）中心矩的测得分数差 $\delta T^m{}_s/\delta T^m{}_{(N)} - 1$ 随时间步长 Δt 的变化。符号表示单次模拟结果，曲线为拟合结果；N = 20 （红色）或 100 （黑色）， N = 100（虚线）或 1000（实线）。

为了更详细地刻画守恒修正，我们考察了它对单元数较少的系统的影响。具体而言，图5展示了具有 N = 3、.....、10 个单元的系统在周期性和诺伊曼边界条件下的模拟结果。在这些计算中，时间步长为 $\Delta t = 9.88 \times 10^{-18}$ s，且 N = 100；统计数据累计于 4×10^9 个时间步长内。这些结果证实，即使对于单元数较少的系统，模拟测量结果也与含守恒修正的矩表达式 $\delta T^m{}_{(N)}$ 高度吻合，相关表达式见方程（15）、（17）和（19）。值得注意的是，当 N $\lesssim O(10)$ 时，$\delta T^m{}_s$ 与 $\delta T^m{}_{(N)}$ 的吻合程度较低；这一现象已在图4中出现，并将在第V.B节中分析。

V. 建模误差

从图 2 和 4 可以看出，模拟测得的中心矩与理论预测值之间的分数差，取决于 $\mathcal{N}$ 和 N，即使在时间步长趋于零的极限下也是如此。本节将说明，将随机热方程建模为具有乘性噪声的随机常微分方程组，并使用标准有限体积格式对这些方程进行空间离散化后，得到的中心矩与方程（式）(10) 相差 $O(1/(f\mathcal{N}))$ 阶的项。对于孤立系统，除守恒修正外，这种建模误差还会弱微地取决于 N，即单元数。

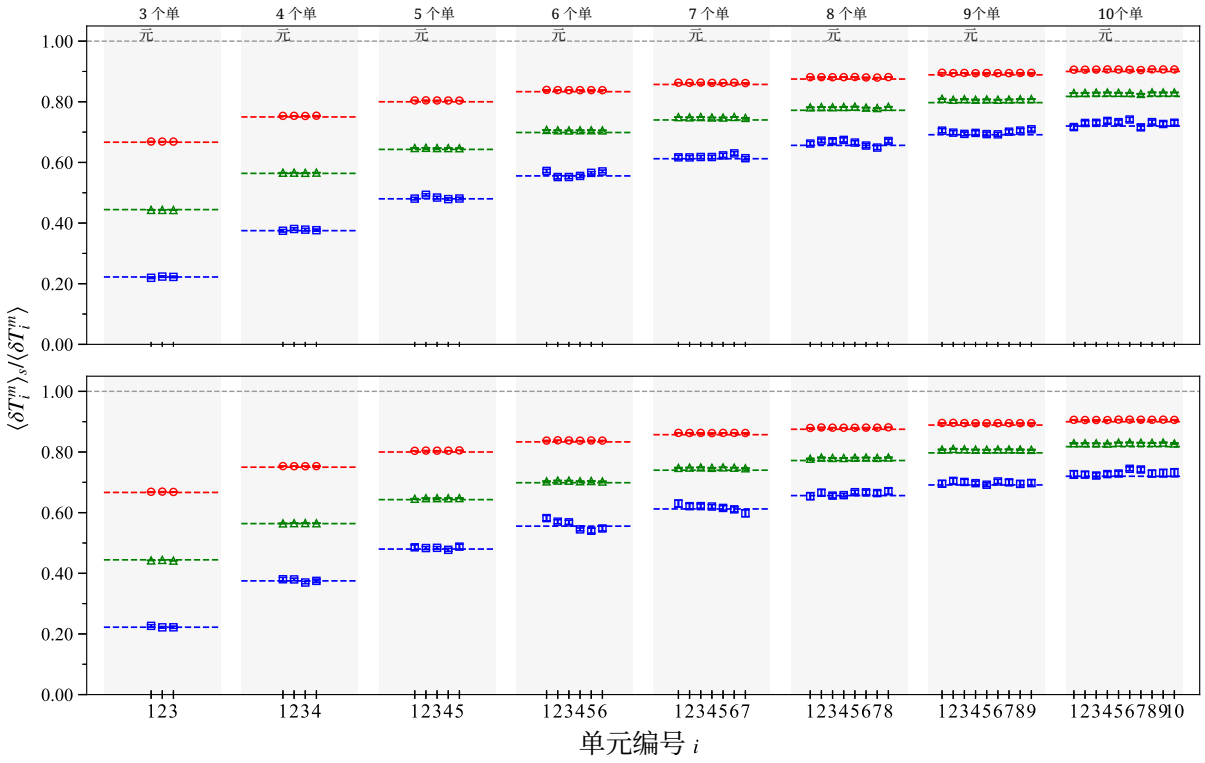


图5. 归一化测量矩，$\langle \delta T_i^m \rangle_s / \langle \delta T_i^m \rangle$对于 $m = 2$（红色圆圈）、3（蓝色方块）和4（绿色三角形）。测量数据来自模拟中各个单元，其中 $N = 3, \ldots,$10个单元采用周期性（上图）或诺伊曼（下图）边界条件。红色、蓝色和绿色虚线分别由方程（15）、（17）和（19）给出。

A. 狄利克雷边界条件

1. 单单元情形

我们先考虑一种简单情形，在该情形下，狄利克雷边界条件对应的高阶矩很容易进行解析计算，并可简洁地表示。考虑一个只有一个单元的系统，其左侧面为热壁（温度为 T_{L}的狄利克雷边界），右侧面为绝热壁（热流为零的诺伊曼边界）。该系统的Euler–Maruyama格式为

$$T_0^{n+1} = T_0^n - \frac{2\kappa \Delta t}{\Delta x^2} \left(T_0^n - T_{\mathrm{L}} \right) - \frac{\sqrt{2}\xi \Delta t}{\Delta x} \mathcal{D}(T_{\mathrm{L}}, T_0^n) \tilde{Z}_{-\frac{1}{2}}^n \,. \tag{26}$$

如果定义 $T' = T_0^{n+1}$， $T = T_0^n$， $Z = \tilde{Z}_{-\frac{1}{2}}$则方程（26）可写为

$$T' = T + A(2T_{\mathrm{L}} - 2T) - \sqrt{2} B \, \mathcal{D}_\zeta(T_{\mathrm{L}}, T) \, Z \,, \tag{27}$$

其中 $A = \kappa\Delta t/\Delta x^2$，且 $B = \xi\Delta t/\Delta x$。注意，$\langle Z^2\rangle = 1/(\Delta t V)$，其中 $V = \mathcal{A}\Delta x$ 是单细胞系统的体积。如果定义 $\delta T = T - \langle T\rangle$，方程（27）变为

$$\delta T' = \delta T - 2A\delta T - \sqrt{2}B\,\mathcal{D}_\zeta(T_\mathrm{L}, T)\,Z\,, \tag{28}$$

这样便可通过求解来获得中心矩

$$\langle(\delta T)^m\rangle_{\Delta t} = \langle(\delta T - 2A\delta T - \sqrt{2}B\,\mathcal{D}_\zeta(T_\mathrm{L}, T)\,Z)^m\rangle_{\Delta t}\,, \tag{29}$$

因为 $(\delta T')^m{}_{\Delta t} = \delta T^m{}_{\Delta t}$。这里的下标“$\Delta t$”表示平均值是在模型方程的有限时间步长处计算的，也就是随机热方程的离散形式。我们取 $\overline{T}_\mathrm{L} = \overline{T}$，因此，由于 $Z_{\Delta t} = 0$，对于所有 Δt 和 ζ，都有 $\delta T_{\Delta t} = 0$。

这里我们不考虑 Euler–Maruyama 离散化所产生的 $O(\Delta t/\Delta x^2)$ 时间截断误差项。因此，我们定义

$$\langle(\delta T)^m\rangle_\mathrm{m} = \lim_{\Delta t\to 0}\langle\delta T^m\rangle_{\Delta t}\,, \tag{30}$$

其中，下标“m”表示在时间步长趋于零的极限下，对模型方程求取平均值。对于 $\zeta = 0$，温度方差为

$$\begin{aligned}\langle\delta T^2\rangle_\mathrm{m} &= \lim_{\Delta t\to 0}\langle\delta T^2\rangle_{\Delta t} = \lim_{\Delta t\to 0}\frac{B^2}{2A(1-A)V\Delta t}\overline{T}^2 \\ &= \lim_{\Delta t\to 0}\left(\frac{2\overline{T}^2}{f\mathcal{N}} + O(\Delta t/\Delta x^2)\right) = \frac{2\overline{T}^2}{f\mathcal{N}}\,,\end{aligned} \tag{31}$$

这恰好是统计力学的理论结果。然而，对于 $\zeta = 0$，去掉截断误差项后，我们发现 $\langle\delta T^3\rangle_\mathrm{m} = 0$，这与理论结果并不一致，因为它给出的偏度为 $\mathrm{Skew}[T] = 0$，而从方程（11）可知，偏度应为非零。事实上，利用 28）和 $\mathcal{D}_0$,，方程（会得到一个具有加性噪声的线性随机常微分方程。因此，我们预计 δT 的分布为高斯分布，因此偏度为零，峰度为 3。

相比之下，对于 $\zeta = -\frac{1}{2}$，同样忽略 Euler–Maruyama方法的截断误差，方差为

$$\begin{aligned}\langle\delta T^2\rangle_\mathrm{m} &= \frac{2\overline{T}^2}{f\mathcal{N}(1-\frac{1}{2f\mathcal{N}})} = \langle\delta T^2\rangle\frac{1}{(1-\frac{1}{2f\mathcal{N}})} \\ &\approx \langle\delta T^2\rangle\left(1 + \frac{1}{2f\mathcal{N}} + O\left(\frac{1}{(f\mathcal{N})^2}\right)\right)\,,\end{aligned} \tag{32}$$

因此，与方程（式）(10) 的差异为 $O(1/(fN))$。三阶中心矩为

$$\langle \delta T^3 \rangle_{\mathrm{m}} = \frac{8\overline{T}^3}{(fN)^2\left(1-\frac{3}{2fN}-\frac{1}{2(fN)^2}\right)} \approx \langle \delta T^3 \rangle \left(1+\frac{3}{2fN}\right), \tag{33}$$

这与方程（式）(10)一致，但有一个 $O(1/(fN))$ 的修正因子。四阶中心矩为

$$\begin{aligned} \langle \delta T^4 \rangle_{\mathrm{m}} &= \frac{(12+\frac{36}{fN})\overline{T}^4}{(fN)^2(1-\frac{3}{fN}+\frac{11}{4(fN)^2}-\frac{3}{4(fN)^3})} \\ &= \langle \delta T^4 \rangle \frac{1+\frac{3}{fN}}{(1+\frac{4}{fN})(1-\frac{3}{fN}+\frac{11}{4(fN)^2}-\frac{3}{4(fN)^3})} \\ &\approx \langle \delta T^4 \rangle \left(1+\frac{2}{fN}\right), \end{aligned} \tag{34}$$

总之，对于单元格这一简单情形，狄利克雷边界函数 $\mathrm{D}_{\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(T_{\mathrm{L}}+T)$ 对二阶至四阶中心矩给出了准确结果（建模误差为 $O(1/(fN))$）。传统替代方案 $\mathrm{D}_0 = T_{\mathrm{L}}$ 虽然能给出正确的二阶矩，但对三阶矩的计算效果很差。

2. 多单元格情形

上述分析可扩展至包含 2、3 或 4 个单元、左侧为狄利克雷边界且右侧为诺伊曼边界的区域。在这些情形中，结果因单元而异。我们不逐一处理各个情形，而是采用附录 C中描述的一般多单元乘性噪声公式，由此可以系统地推导出矩方程。

对于两个单元，我们得到以下二阶矩：

$$\langle \delta T_0^2 \rangle_{\mathrm{m}} = \langle \delta T^2 \rangle \frac{1}{1-\frac{5}{8}\frac{1}{fN}} \approx \langle \delta T^2 \rangle \left(1+\frac{5}{8}\frac{1}{fN}\right), \tag{35a}$$

$$\langle \delta T_1^2 \rangle_{\mathrm{m}} = \langle \delta T^2 \rangle \frac{1+\frac{1}{4}\frac{1}{fN}}{1-\frac{5}{8}\frac{1}{fN}} \approx \langle \delta T^2 \rangle \left(1+\frac{7}{8}\frac{1}{fN}\right), \tag{35b}$$

其中，$i=0$ 是与狄利克雷边界相邻的单元，$i=1$ 是与诺伊曼边界相邻的单元。这两个单元之间还存在交叉相关

$$\langle \delta T_0 \delta T_1 \rangle_{\mathrm{m}} = \langle \delta T^2 \rangle \frac{1}{5-8fN} \approx \langle \delta T^2 \rangle \left(-\frac{1}{8fN}\right). \tag{36}$$

对于高阶矩，表达式会复杂得多，因此我们只考虑 $1/(\,f\mathrm{N})$ 的主导阶项。对于三阶矩，这给出

$$\langle \delta T_0^3 \rangle_\mathrm{m} \approx \langle \delta T^3 \rangle \left(1 + \frac{215}{136}\frac{1}{f\mathcal{N}}\right), \quad \langle \delta T_1^3 \rangle_\mathrm{m} \approx \langle \delta T^3 \rangle \left(1 + \frac{229}{136}\frac{1}{f\mathcal{N}}\right), \tag{37}$$

含互相关项

$$\langle \delta T_0^2 \delta T_1 \rangle_\mathrm{m} \approx \langle \delta T^3 \rangle \left(-\frac{1}{136}\frac{1}{f\mathcal{N}}\right), \quad \langle \delta T_0 \delta T_1^2 \rangle_\mathrm{m} \approx \langle \delta T^3 \rangle \left(-\frac{9}{136}\frac{1}{f\mathcal{N}}\right). \tag{38}$$

最后，对于四阶矩，我们得到

$$\langle \delta T_0^4 \rangle_\mathrm{m} \approx \langle \delta T^4 \rangle \left(1 + \frac{489}{224}\frac{1}{f\mathcal{N}}\right), \quad \langle \delta T_1^4 \rangle_\mathrm{m} \approx \langle \delta T^4 \rangle \left(1 + \frac{529}{224}\frac{1}{f\mathcal{N}}\right), \tag{39}$$

含交叉相关

$$\begin{aligned} &\langle \delta T_0^3 \delta T_1 \rangle_\mathrm{m} \approx \langle \delta T^4 \rangle \left(-\frac{73}{224}\frac{1}{f\mathcal{N}}\right), \quad \langle \delta T_0 \delta T_1^3 \rangle_\mathrm{m} \approx \langle \delta T^4 \rangle \left(-\frac{115}{224}\frac{1}{f\mathcal{N}}\right), \\ &\langle \delta T_0^2 \delta T_1^2 \rangle_\mathrm{m} \approx \frac{\langle \delta T^4 \rangle}{3}\left(1 - \frac{323}{224}\frac{1}{f\mathcal{N}}\right). \end{aligned} \tag{40}$$

类似地，对于三个单元，我们得到以下二阶矩：

$$\langle \delta T_0^2 \rangle_\mathrm{m} \approx \langle \delta T^2 \rangle \left(1 + \frac{33}{52}\frac{1}{f\mathcal{N}}\right), \tag{41a}$$

$$\langle \delta T_1^2 \rangle_\mathrm{m} \approx \langle \delta T^2 \rangle \left(1 + \frac{12}{13}\frac{1}{f\mathcal{N}}\right), \tag{41b}$$

$$\langle \delta T_2^2 \rangle_\mathrm{m} \approx \langle \delta T^2 \rangle \left(1 + \frac{49}{52}\frac{1}{f\mathcal{N}}\right), \tag{41c}$$

其中，$i = 0$ 是与狄利克雷边界相邻的单元，$i = 1$ 是中心单元，$i = 2$ 是与诺伊曼边界相邻的单元。此外，我们得到

$$\langle \delta T_0^3 \rangle_\mathrm{m} \approx \langle \delta T^3 \rangle \left(1 + \frac{4127}{2574}\frac{1}{f\mathcal{N}}\right), \tag{42a}$$

$$\langle \delta T_1^3 \rangle_\mathrm{m} \approx \langle \delta T^3 \rangle \left(1 + \frac{4619}{2574}\frac{1}{f\mathcal{N}}\right), \tag{42b}$$

$$\langle \delta T_2^3 \rangle_\mathrm{m} \approx \langle \delta T^3 \rangle \left(1 + \frac{4753}{2574}\frac{1}{f\mathcal{N}}\right), \tag{42c}$$

对于三阶矩，以及

$$\langle \delta T_0^4 \rangle_{\rm m} \approx \langle \delta T^4 \rangle \left(1 + \frac{6991}{3172} \frac{1}{f\mathcal{N}} \right) , \tag{43a}$$

$$\langle \delta T_1^4 \rangle_{\rm m} \approx \langle \delta T^4 \rangle \left(1 + \frac{2020}{793} \frac{1}{f\mathcal{N}} \right) , \tag{43b}$$

$$\langle \delta T_2^4 \rangle_{\rm m} \approx \langle \delta T^4 \rangle \left(1 + \frac{7743}{3172} \frac{1}{f\mathcal{N}} \right) . \tag{43c}$$

对于四阶矩。与双细胞情形一样，交叉相关的正确阶数为 $1/(\,f\mathrm{N})$。

最后，对于四细胞系统，我们有二阶矩

$$\langle \delta T_0^2 \rangle_{\rm m} \approx \langle \delta T^2 \rangle \left(1 + \frac{173}{272} \frac{1}{f\mathcal{N}} \right) , \tag{44a}$$

$$\langle \delta T_1^2 \rangle_{\rm m} \approx \langle \delta T^2 \rangle \left(1 + \frac{127}{136} \frac{1}{f\mathcal{N}} \right) , \tag{44b}$$

$$\langle \delta T_2^2 \rangle_{\rm m} \approx \langle \delta T^2 \rangle \left(1 + \frac{131}{136} \frac{1}{f\mathcal{N}} \right) , \tag{44c}$$

$$\langle \delta T_3^2 \rangle_{\rm m} \approx \langle \delta T^2 \rangle \left(1 + \frac{263}{272} \frac{1}{f\mathcal{N}} \right) , \tag{44d}$$

和三阶矩

$$\langle \delta T_0^3 \rangle_{\rm m} \approx \langle \delta T^3 \rangle \left(1 + \frac{1445193287}{899132176} \frac{1}{f\mathcal{N}} \right) , \tag{45a}$$

$$\langle \delta T_1^3 \rangle_{\rm m} \approx \langle \delta T^3 \rangle \left(1 + \frac{819624061}{449566088} \frac{1}{f\mathcal{N}} \right) , \tag{45b}$$

$$\langle \delta T_2^3 \rangle_{\rm m} \approx \langle \delta T^3 \rangle \left(1 + \frac{851953641}{449566088} \frac{1}{f\mathcal{N}} \right) , \tag{45c}$$

$$\langle \delta T_3^3 \rangle_{\rm m} \approx \langle \delta T^3 \rangle \left(1 + \frac{1712762021}{899132176} \frac{1}{f\mathcal{N}} \right) , \tag{45d}$$

以及四阶矩

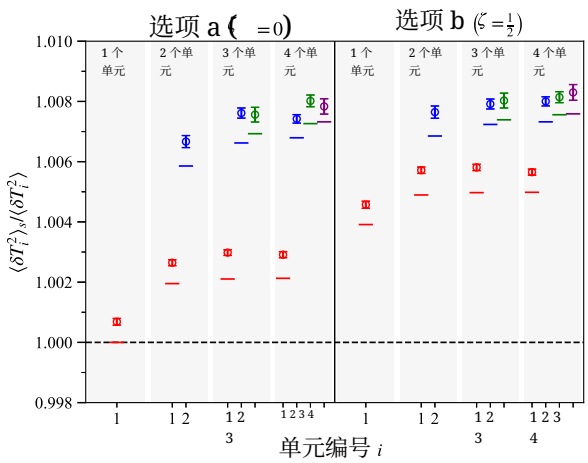
$$\langle \delta T_0^4 \rangle_{\rm m} \approx \langle \delta T^4 \rangle \left(1 + \frac{2288935876707}{1037199712768} \frac{1}{f\mathcal{N}} \right) , \tag{46a}$$

$$\langle \delta T_1^4 \rangle_{\rm m} \approx \langle \delta T^4 \rangle \left(1 + \frac{45437271084873}{17632395117056} \frac{1}{f\mathcal{N}} \right) , \tag{46b}$$

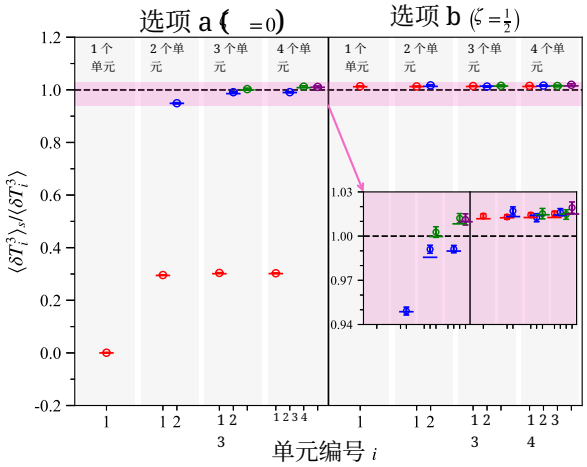
$$\langle \delta T_2^4 \rangle_{\rm m} \approx \langle \delta T^4 \rangle \left(1 + \frac{46026326584681}{17632395117056} \frac{1}{f\mathcal{N}} \right) , \tag{46c}$$

$$\langle \delta T_3^4 \rangle_{\rm m} \approx \langle \delta T^4 \rangle \left(1 + \frac{43785272852931}{17632395117056} \frac{1}{f\mathcal{N}} \right) . \tag{46d}$$

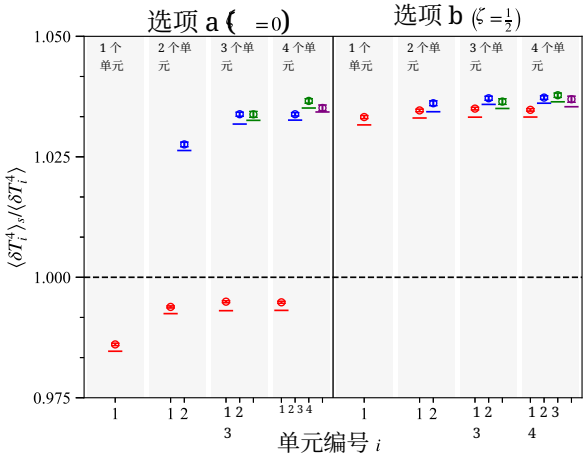
图6 展示了模拟结果，说明了两种狄利克雷边界选项（$\zeta = 0$ 和$\zeta = \frac{1}{2}$）下的模型误差。与上述分析相同，模拟在左侧施加了Dirichlet边界条件，在右侧施加了齐次诺伊曼（即零通量）边界条件。为突出其对模型误差的贡献，我们将每个单元的粒子数设为$\mathcal{N} = 20$。图中显示，在所有情况下，建模误差的理论预测与模拟结果的差异均约在1%以内。图中还显示，在大多数情况下，即使当$\mathcal{N} = 20$时，模拟结果也与方程（式）（10）给出的理论值基本吻合。例外的是紧邻狄利克雷边界的单元中的三阶矩；当 $\zeta = 0$时，该处的模型误差超过50%。



(a) 二阶矩



(b) 三阶矩



(c) 四阶矩

图 6. 对左侧设有狄利克雷边界、右侧设有诺伊曼边界的 $N = 1$、……、4 单元系统的中心矩进行比较。图中展示了模拟结果 $\delta T_i^m{}_s/\delta T_i^m$（标记）以及使用模型修正预测的解析结果 $\delta T_i^m{}_m/\delta T_i^m$（水平线），对应两种狄利克雷边界函数选项（$\zeta = 0$ 和 $\zeta = \frac{1}{2}$）。各面板分别展示：(a) 二阶矩；(b) 三阶矩；(c) 四阶矩。

B. 周期性边界条件

现在我们转而讨论周期性边界条件下模型误差结果的推导。利用附录 C 中所述的框架，可以得到单元数量较少的系统的闭式表达式。与狄利克雷情形不同，平移对称性意味着所有单元在统计上等价，因此矩和相关性的表达式要简单得多。对较小的 N 值所得到的解析结果 N和 $f\mathcal{N}$，显示出明显的依赖关系。基于这些结果，我们推导出下文给出的二阶矩和三阶矩的一般形式，并随后通过对更大系统进行数值模拟加以验证。值得注意的是，我们未能得到四阶矩的闭式表达式。

对于二阶矩，我们发现

$$\langle \delta T_i^2 \rangle_{\mathrm{m}} = \left(1 - \frac{1}{N}\right) \frac{2\overline{T}^2}{f\mathcal{N}\left(1 - \frac{N-2}{N}\frac{1}{f\mathcal{N}}\right)} \approx \langle \delta T_i^2 \rangle_{(N)} \left(1 + \frac{N-2}{N}\frac{1}{f\mathcal{N}}\right), \tag{47}$$

$$\langle \delta T_i \delta T_j \rangle_{\mathrm{m}} = -\frac{1}{N} \frac{2\overline{T}^2}{f\mathcal{N}\left(1 - \frac{N-2}{N}\frac{1}{f\mathcal{N}}\right)} \approx \langle \delta T_i \delta T_j \rangle_{(N)} \left(1 + \frac{N-2}{N}\frac{1}{f\mathcal{N}}\right). \tag{48}$$

对于三阶矩，我们有

$$\begin{aligned} \langle \delta T_i^3 \rangle_{\mathrm{m}} &= \left(1 - \frac{3}{N} + \frac{2}{N^2}\right) \frac{8\overline{T}^3}{\left(f\mathcal{N} - \frac{N-4}{N}\right)\left(f\mathcal{N} - \frac{N-2}{N}\right)} \\ &= \langle \delta T_i^3 \rangle_{(N)} \frac{1}{\left(1 - \frac{N-4}{N}\frac{1}{f\mathcal{N}}\right)\left(1 - \frac{N-2}{N}\frac{1}{f\mathcal{N}}\right)} \approx \langle \delta T_i^3 \rangle_{(N)} \left(1 + \left(2 - \frac{6}{N}\right)\frac{1}{f\mathcal{N}}\right), \end{aligned} \tag{49}$$

$$\langle \delta T_i^2 \delta T_j \rangle_{\mathrm{m}} = -\frac{N-2}{N^2} \frac{8\overline{T}^3}{\left(f\mathcal{N} - \frac{N-4}{N}\right)\left(f\mathcal{N} - \frac{N-2}{N}\right)} \approx \langle \delta T_i^2 \delta T_j \rangle_{(N)} \left(1 + \left(2 - \frac{6}{N}\right)\frac{1}{f\mathcal{N}}\right), \tag{50}$$

$$\langle \delta T_i \delta T_j \delta T_k \rangle_{\mathrm{m}} = \frac{2}{N^2} \frac{8\overline{T}^3}{\left(f\mathcal{N} - \frac{N-4}{N}\right)\left(f\mathcal{N} - \frac{N-2}{N}\right)} \approx \langle \delta T_i \delta T_j \delta T_k \rangle_{(N)} \left(1 + \left(2 - \frac{6}{N}\right)\frac{1}{f\mathcal{N}}\right). \tag{51}$$

上述表达式包含了第 IIB 节推导出的守恒修正，以及由离散化乘性噪声动力学引起的额外修正。守恒修正仅取决于 N，并源于孤立系统中能量守恒这一物理约束。相比之下，其余与 $1/(f\mathcal{N})$ 成正比的项代表了有限体积近似引入的建模误差。当 $f\mathcal{N}$ 趋于无穷大时，这些误差将变得可以忽略；在此情况下，上述推导得到的所有矩和相关性都会化为第 II B节中相应的守恒修正表达式。对于固定的 $f\mathcal{N}$，系数

乘以 1/(fN) 后，当 $N \to \infty$ 时趋于有限极限。因此，与守恒修正不同，建模误差不会随着系统规模的增大而消失，而主要取决于每个单元的粒子数。

最后，我们评估上述理论建模误差对周期系统行为的预测效果。我们考虑了四个具有 $N = 100$ 或 1000 以及 $\mathcal{N} = 20$ 或 100 的系统。模拟结果与理论的比较如图 7所示。由于这些系统是孤立的，为获得物理上正确的答案，我们需要纳入有限尺寸修正，该修正在图中以红色表示。图中用符号表示 $\mathcal{N} = 20$ 和 $\mathcal{N} = 100$ 的模拟结果，而曲线表示理论值。总体而言，测量值 $\langle \delta T^m \rangle_{\mathrm{s}}$ 与预测值 $\langle \delta T^m \rangle_{\mathrm{m}}$ 吻合良好。正如预期，较大的 $\mathcal{N}$对应的建模误差更小。

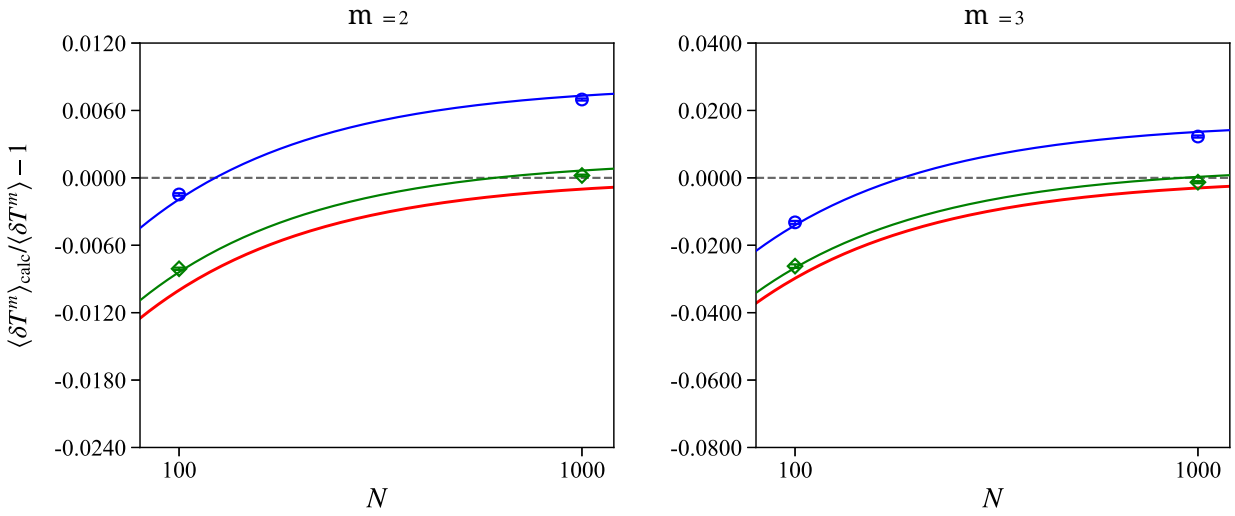


图7。周期系统中中心矩的分数差。左图和右图分别为 $m = 2$和 $m = 3$。蓝色圆圈和绿色菱形（带误差棒）分别表示对 N $= 20$ 和 N $= 100$ 的 $\delta T^m{}_s$ 模拟测量结果。蓝色线和绿色线分别对应 N $= 20$ 和 N $= 100$，表示解析模型预测。红线表示守恒修正 $\delta T^m{}_{(N)}$。

VI. 高阶格式

上述各节中的分析仅限于 Euler–Maruyama格式。本节将考察一种高阶格式（即

Heun方法thod 或预测-校正法。采用这一时间积分器后，方程（20）被替换为

$$T_i^* = T_i^n + \frac{\Delta t}{\Delta x}\left(F^n_{i+\frac{1}{2}} - F^n_{i-\frac{1}{2}}\right), \tag{52a}$$

$$T_i^{n+1} = \frac{1}{2}\left\{T_i^n + T_i^* + \frac{\Delta t}{\Delta x}\left(F^*_{i+\frac{1}{2}} - F^*_{i-\frac{1}{2}}\right)\right\}, \tag{52b}$$

其中

$$F^*_{i+\frac{1}{2}} = \kappa\frac{T^*_{i+1} - T^*_i}{\Delta x} + \xi\, T^*_{i+\frac{1}{2}}\tilde{Z}^n_{i+\frac{1}{2}}\,. \tag{53}$$

Heun方法在Stratonovich解释下求解相应的随机常微分方程，而Euler–Maruyama方法在随机微积分中采用Itô解释 [16]。

与第 VA 节一样，我们考虑单单元情形，左侧采用狄利克雷边界条件，右侧采用齐次Neumann边界条件。对于Heun方法，方程（式）（27）替换为

$$T^* = T + 2A(T_\mathrm{L} - T) - \sqrt{2}B\,\mathcal{D}_\zeta(T_\mathrm{L}, T)\,Z\,, \tag{54a}$$

$$T' = \frac{1}{2}\left\{T + T^* + 2A(T_\mathrm{L} - T^*) - \sqrt{2}B\,\mathcal{D}_\zeta(T_\mathrm{L}, T^*)\,Z\right\}\,. \tag{54b}$$

注意，预测步骤和校正步骤对 Z 使用相同的值。可以验证，当 $\Delta t \to 0$ 时，由方程（式）（54）得到的矩与通过Euler–Maruyama离散化得到的矩相同，后者还包含一个由Itô/Stratonovich修正给出的附加项。按照第 VA 节所述的步骤，我们可以求得中心矩。然而，值得注意的是，由于随机微积分解释方式的改变，对于 $\zeta = \frac{1}{2}$，温度的均值为

$$\langle T\rangle_\mathrm{m} = \mathcal{S}T_\mathrm{L}\,, \quad \text{where} \quad \mathcal{S} = \left(1 + \frac{1}{f\mathcal{N} - \frac{1}{2}}\right), \tag{55}$$

因此，我们设定 $T_\mathrm{L} = T/\mathrm{S}$，使其具有 $\delta T_\mathrm{m} = 0$。

对于 $\zeta = 0$，噪声是加性的，并且当 $\Delta t \to 0$ 时的极限行为与 Euler–Maruyama方法相同。对于 $\zeta = \frac{1}{2}$，方差为

$$\langle\delta T^2\rangle_\mathrm{m} = \langle\delta T^2\rangle\frac{1}{1 - \frac{3}{4}\frac{1}{(f\mathcal{N})^2} - \frac{1}{4}\frac{1}{(f\mathcal{N})^3}} \approx \langle\delta T^2\rangle\left(1 + \frac{3}{4}\frac{1}{(f\mathcal{N})^2}\right). \tag{56}$$

将此结果与方程（式）（32）进行比较可知，采用Heun方法（Stratonovich微积分）时，建模

中的误差 方差是 1/(fN) 的高阶项。三阶中心矩和四阶中心矩为

$$\langle \delta T^3 \rangle_{\mathrm{m}} = \langle \delta T^3 \rangle \frac{1}{1 - \frac{1}{f\mathcal{N}} - \frac{3}{2}\frac{1}{(f\mathcal{N})^2} + \frac{1}{2}\frac{1}{(f\mathcal{N})^3} + \frac{13}{16}\frac{1}{(f\mathcal{N})^4} + \frac{3}{16}\frac{1}{(f\mathcal{N})^5}} \approx \langle \delta T^3 \rangle \left(1 + \frac{1}{f\mathcal{N}}\right), \tag{57}$$

$$\begin{aligned}\langle \delta T^4 \rangle_{\mathrm{m}} &= \langle \delta T^4 \rangle \frac{1 + \frac{5}{2f\mathcal{N}}}{1 + \frac{3}{2f\mathcal{N}} - \frac{11}{(f\mathcal{N})^2} - \frac{1}{4(f\mathcal{N})^3} + \frac{265}{16(f\mathcal{N})^4} + \frac{151}{32(f\mathcal{N})^5} - \frac{231}{32(f\mathcal{N})^6} - \frac{73}{16(f\mathcal{N})^7} - \frac{3}{4(f\mathcal{N})^8}} \\ &\approx \langle \delta T^4 \rangle \left(1 + \frac{1}{f\mathcal{N}}\right). \end{aligned} \tag{58}$$

将方程（式）(57)与方程（式）(33)以及方程（式）(58)与方程（式）(34)进行比较可知，Heun方法产生了相似的 $O(1/f\mathcal{N})$ 误差，且其系数略小于Euler–Maruyama离散化的系数。

对含有 N 个单元的系统进行完整的建模误差分析十分简单，但极其繁琐。然而，单细胞系统的结果揭示了两点重要结论。第一，Heun方法等高阶格式可能会对狄利克雷边界条件进行修正，如方程（式）(55)所示。第二，高阶方法可以降低中心矩中的模型误差，但无法将其消除。

VII. 可压缩纳维–斯托克斯方程

A. 表述

一个自然的问题是，涨落流体动力学模型能否捕捉更复杂系统中的高阶矩。具体而言，我们考虑具有乘性噪声的单组分可压缩流体的随机方程，写作 [18]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho) = -\boldsymbol{\nabla} \cdot (\rho \boldsymbol{u}), \tag{59a}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \boldsymbol{u}) = -\boldsymbol{\nabla} \cdot [\rho \boldsymbol{u} \otimes \boldsymbol{u} + p\mathbb{I}] - \boldsymbol{\nabla} \cdot [\overline{\boldsymbol{\tau}} + \widetilde{\boldsymbol{\tau}}], \tag{59b}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathcal{E}) = -\boldsymbol{\nabla} \cdot [\boldsymbol{u}(\rho \mathcal{E} + p)] - \boldsymbol{\nabla} \cdot \left[\overline{\boldsymbol{Q}} + \widetilde{\boldsymbol{Q}}\right] - \boldsymbol{\nabla} \cdot [(\overline{\boldsymbol{\tau}} + \widetilde{\boldsymbol{\tau}}) \cdot \boldsymbol{u}], \tag{59c}$$

其中， ρ 是流体密度， $\boldsymbol{u}$ 是速度，E 是总比能， p 是压力， $\mathbb{I}$ 是单位张量。流体的总能量密度 $\rho \mathrm{E} = \rho e + \frac{1}{2}\rho(\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{u})$ 是内能与动能之和，其中 $e = c_V T$ 是比内能。我们假设采用理想气体状态方程 $p = \rho k_{\mathrm{B}} T/m$，并假设比热为常数；对于经典单原子气体（$f = 3$），其值为 $c_V = \frac{3}{2}k_{\mathrm{B}}/m$。

在非线性涨落流体力学方程中，应力张量和热流包含 $\overline{}$ 确定性、 $\boldsymbol{\tau}$ 以及 $\boldsymbol{Q}$ 和 $\widetilde{}$ 随机的、 $\widetilde{\boldsymbol{\tau}}$ 以及 $\boldsymbol{Q}$ 贡献。当 $\widetilde{\boldsymbol{\tau}} = \boldsymbol{Q} = 0$ 时，方程（式）(59) 化为可压缩流体的确定性纳维–斯托克斯方程。对于常数 ρ 和

$\boldsymbol{u} = 0$时，方程（式）(59c) 可改写为随机热方程。

确　　定性应力张量 $\boldsymbol{\tau}$ 的各分量以牛顿形式定义如下：　　：

$$\overline{\tau}_{ij} = -\eta\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) - \delta_{ij}\left((\eta_B - \frac{2}{3}\eta)\nabla\cdot\boldsymbol{u}\right), \tag{60}$$

其中，　δ_{ij} 为克罗内克δ，　η 为剪切黏度，　η_B 为体积黏度。确定性热通量为 $\boldsymbol{Q} = -\lambda\nabla T$，其中 λ 为热导率。

随机应力 $\widetilde{\boldsymbol{\tau}}$ 是一个在时空上均为白噪声、具有特定局部协方差的高斯随机场。这里，我们采用 $\widetilde{\boldsymbol{\tau}}$ 的以下高效形式，该形式由 [19, 20]提出：

$$\widetilde{\boldsymbol{\tau}}(\boldsymbol{r},t) = \sqrt{2k_{\mathrm{B}}\eta T}\,\widetilde{\mathcal{Z}} + \left(\sqrt{\frac{k_{\mathrm{B}}\eta_B T}{3}} - \frac{\sqrt{2k_{\mathrm{B}}\eta T}}{3}\right)\mathrm{Tr}(\widetilde{\mathcal{Z}})\mathbb{I}. \tag{61}$$

这里，

$$\widetilde{\mathcal{Z}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\mathcal{Z} + \mathcal{Z}^T\right) \tag{62}$$

是一个对称矩阵，由均值为零~、方差为一的非相关高斯张量场$\mathcal{Z}$ 构造而成。随机热通量 $\boldsymbol{Q}$ 为

$$\widetilde{\boldsymbol{Q}} = \sqrt{2k_{\mathrm{B}}\lambda T^2}\,\mathcal{Z}^{(\boldsymbol{Q})}, \tag{63}$$

其中，$\mathrm{Z}^{(\boldsymbol{Q})}$ 是一个不相关的三维高斯向量场，其均值为零、方差为单位方差。

B. 数值方法与模拟结果

采用基于线法的交错网格离散，对可压缩涨落流体动力学的随机偏微分方程进行空间离散化。这里，守恒标量变量 ρ 和ρE以及原始标量变量 p和 T在有限体积单元的中心进行离散，而矢量变量——守恒动量密度 $\rho\boldsymbol{u}$ 和速度 $\boldsymbol{u}$——则在网格 [18]的法向面上进行离散。所得随机常微分方程（ODE）采用低存储三阶 Runge–Kutta（RK3）积分器 [6, 18]进行显式时间积分。该交错网格数值方法在离散层面保持了涨落耗散平衡 [7],，并已通过正确再现热力学平衡下流体动力学变量的结构因子 [18]得到验证。本文仅考虑具有周期性边界条件或刚性静止壁面的封闭系统；对于后者，边界处的质量通量严格为零。

模拟参数为：　$T = 300$ K；　$\overline{\rho} = 0。817\,\mathrm{kg/m^3}$；　$\Delta x = 2。017\times10^{-8}$ m；　A $= 4。068\times10^{-16}\mathrm{m}^2$，　$N = 100$。黏度和热导率取稀薄氖

气体的相应数值；它们不被视为常数，而是取决于流体的局部状态 [21]。每个网格单元中的平均粒子数为$\langle \mathcal{N} \rangle \approx 200$ 因此，对于$\mathcal{N} = 100$，温度涨落与随机热传导方程（SHE）的温度涨落相当，因为 $f = 3$ 对于单原子理想气体。

图 8 比较了两种狄利克雷边界条件选项下测得的归一化中心矩，$\langle \delta T_i^m \rangle_S / \langle \delta T_i^m \rangle$，其中 $T_L = T_R = T$。所用时间步长 $\Delta t = 5 \times 10^{-13}$ s，根据与较大Δt值下模拟数据的比较，发现能够得到准确结果。与随机热传导方程一样，传统选项 $\zeta = 0$对二阶矩和四阶矩的表现良好，但靠近边界处的三阶矩误差很大。相比之下，另一种选项$\zeta = \frac{1}{2}$ 对所有三个矩的结果都很好（分数差低于百分之一）。

–

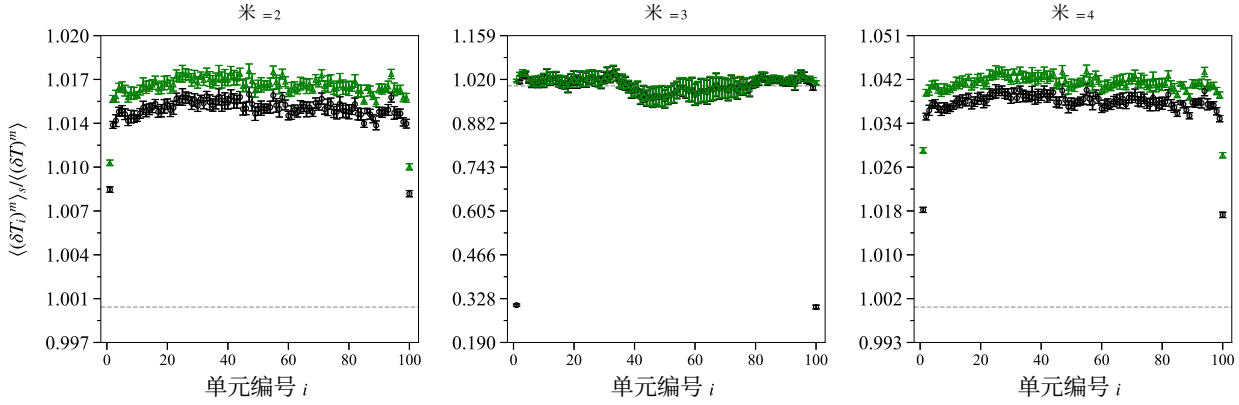


图 8. 测得的归一化中心矩 $\delta T_i^m{}_S / \delta T_i^m$ 随单元索引 i变化的关系，分别对应 $m = 2$（左）、 $m = 3$（中）和 $m = 4$（右）。系统包含 $N = 100$ 个单元，并采用狄利克雷边界条件，边界条件为$\zeta = 0$ （黑色圆圈）或 $\zeta = \frac{1}{2}$ （绿色三角形）。

图9展示了具有各种边界条件的系统所测得的归一化中心矩，$\langle \delta T_i^m \rangle_S / \langle \delta T_i^m \rangle$。与采用诺伊曼和狄利克雷边界条件的随机热传导方程（SHE）一样，边界附近的单元与内部区域的单元无法区分。由于存在守恒修正（图中未包含该修正），采用周期性和诺伊曼边界条件时的二阶矩和四阶矩小于采用狄利克雷边界条件时的相应数值。此处，守恒所致的分数修正$\langle \delta T_i^m \rangle^{(N)} / \langle \delta T_i^m \rangle$对于 $m = 2$，3 和 4 分别为 0.9900、0.9702 和 0.9798。注意，所有情况下四阶矩的误差棒都相对较小，因为其数值主要由非超额峰度部分（即 $3\langle \delta T^2 \rangle^2$ 项）决定。

最后，我们考察密度涨落的中心矩。对于理想气体，单元中粒子数 N 的概率分布为泊松分布；其前几个中心矩为

$$\langle \delta \mathcal{N}^2 \rangle = \langle \mathcal{N} \rangle , \quad \langle \delta \mathcal{N}^3 \rangle = \langle \mathcal{N} \rangle , \quad \langle \delta \mathcal{N}^4 \rangle = 3\langle \mathcal{N} \rangle^2 + \langle \mathcal{N} \rangle . \tag{64}$$

对于质量密度 $\rho = m\mathrm{N}/V$，中心矩为 $\delta\rho^n = (m/V)^n \delta \mathrm{N}^n$。由于质量在我们的封闭系统中守恒，因此这些中心矩需要进行守恒修正。

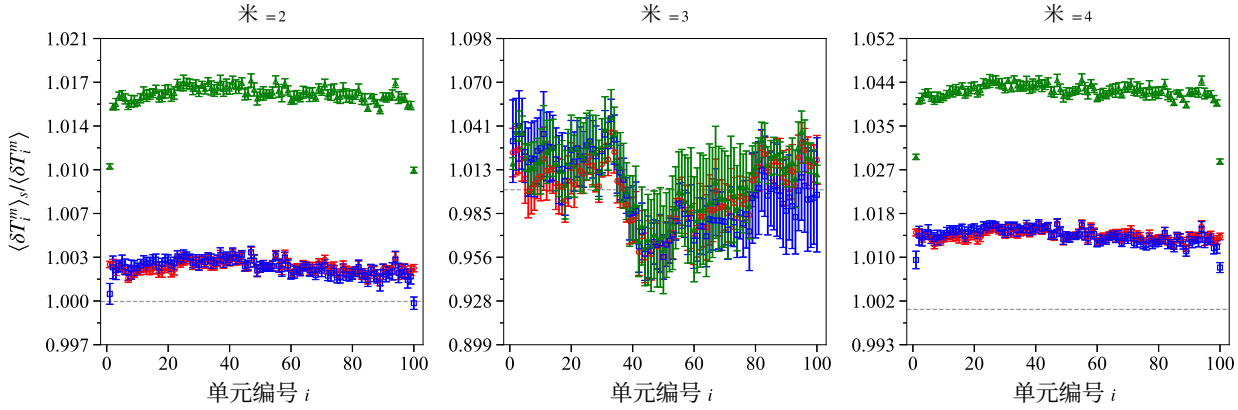


图 9. 测得的归一化中心矩 δT_i^ms/δT_i^m 随单元索引 i 的变化，分别对应 $m = 2$（左）、 $m = 3$（中）和 $m = 4$ （右）。系统包含 $N = 100$ 个单元，边界条件为周期性（红色圆圈）、诺伊曼（蓝色方块），或带有 $\zeta = \frac{1}{2}$ 的狄利克雷边界条件（绿色三角形）。

根据第 IIB 节的结果，对于 N 单元

$$\langle \delta\rho_i^2 \rangle_{(N)} = \left(1 - \frac{1}{N}\right) \langle \delta\rho^2 \rangle , \tag{65}$$

$$\langle \delta\rho_i^3 \rangle_{(N)} = \left(1 - \frac{3}{N} + \frac{2}{N^2}\right) \langle \delta\rho^3 \rangle , \tag{66}$$

$$\langle \delta\rho_i^4 \rangle_{(N)} = \left(3 + \gamma_2 - \frac{6 + 4\gamma_2}{N} + \frac{3 + 6\gamma_2}{N^2} - \frac{3\gamma_2}{N^3}\right) \langle \delta\rho^2 \rangle^2 , \tag{67}$$

其中 $\gamma_2 = 1/\mathcal{N}$ 是泊松分布的超额峰度。图 10 展示了测得的归一化中心矩 $\langle \delta\rho_i^m \rangle$s/$\langle \delta\rho_i^m \rangle_{(N)}$，对应于具有各种边界条件的系统。在所有情况下，考虑守恒修正后，模拟结果都与理论值吻合良好。

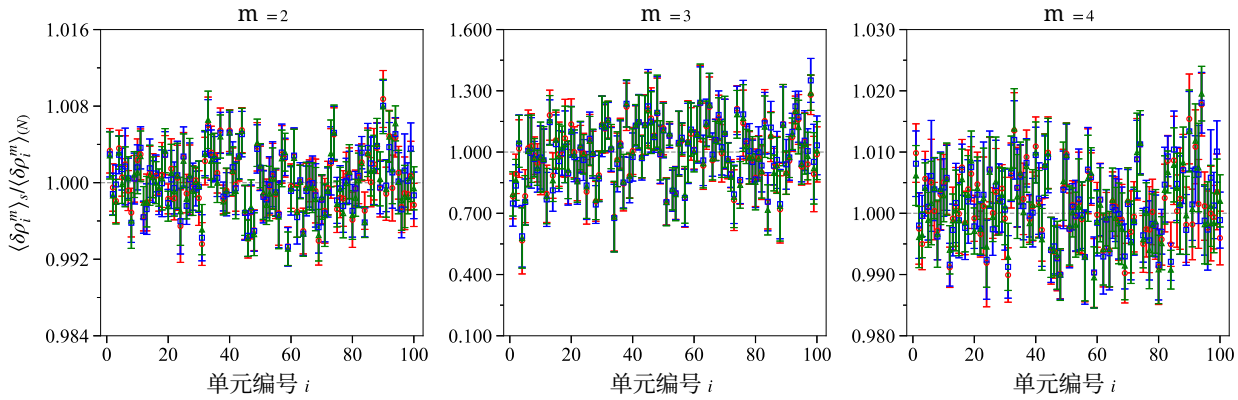


FIG. 10. 测得的归一化中心矩 $\delta\rho_i^m$s/$\delta\rho_i^{m(N)}$ 随单元索引 i 的变化，分别对应 $m = 2$ （左）、$m = 3$ （中）和 $m = 4$（右）。系统包含 $N = 100$ 个单元，边界条件为周期性（红色圆圈）、诺伊曼（蓝色方块）或狄利克雷（绿色三角形）。

总之，关于随机涨落流体力学中温度中心矩的一般观察结果同样适用于完整的可压缩涨落流体力学方程。唯一显著的区别是，对于后者，守恒修正虽然存在于质量和能量密度中，但不会出现在温度涨落中 [22]。

VIII. 总结与结论

在本研究中，我们使用有限体积离散化研究了计算涨落流体力学（CFHD）中最高至四阶中心矩的评估。传统上对CFHD算法的验证主要集中于二阶中心矩（即方差），但准确解析偏度和峰度等高阶矩，对于预测涨落场的非线性函数（包括成核率和化学反应平衡常数）至关重要。通过分析一维随机热方程，我们证明，必须引入乘性噪声，才能获得正则系综所预期的温度涨落伽马分布；而加性噪声会错误地产生偏度为零的高斯分布。此外，我们推导了孤立系统中 $O(1/N)$的守恒诱导的有限尺寸修正解析表达式，以及由将系统离散表示为随机常微分方程系统而产生的 $O(1/(\,f\mathrm{N}\,))$建模误差。我们还证实，狄利克雷边界条件的另一种表述（$T_0 = \frac{1}{2}(T_\mathrm{L} + T_\mathrm{I})$）能够正确捕捉高阶矩，解决传统有限体积边界处理（$T_0 = T_\mathrm{L}$）中存在的严重偏度差异。鉴于随机噪声乘性特性的重要性，我们还研究了高阶时间积分器，结果表明，基于斯特拉托诺维奇的格式（如Heun预测-校正方法）可将方差中的主导建模误差降低至 $O(1/(\,f\mathrm{N}\,)^2)$。最后，对完整可压缩随机纳维–斯托克斯方程进行涨落流体力学模拟所得的数值测量结果，证实了随机热方程研究结果在实际应用中的适用性和普适性。

本研究也适用于其他涨落流体力学方程。例如，Dean–Kawasaki 方程 [23–25], 用于描述一维空间中随机游走者的扩散，其

$$\partial_t \rho = D\,\partial_x^2 \rho + \partial_x \sqrt{2D\rho}\,\widetilde{Z}\,. \tag{68}$$

其中，ρ 表示数密度，而 D 表示扩散常数。方程（68）与随机热方程非常相似，显著区别在于 Dean–Kawasaki 方程中的非线性乘性噪声。其他相关方程还包括在该方程中加入对流项后得到的随机Burgers方程 [4]。

将 Dean–Kawasaki 方程扩展为 N_s 物种进行扩散并发生 N_r 反应，可得到反应-扩散方程。使用化学Langevin

方程对随机反应进行建模，我们将
其写为

$$\partial_t \rho_s = D_s \partial_x^2 \rho_s + \partial_x \sqrt{2 D_s \rho_s}\, Z_s^{(D)} + \sum_{r=1}^{N_r} \nu_{sr} \left(a_r(\boldsymbol{\rho}) + \sqrt{a_r(\boldsymbol{\rho})}\, Z_r^{(R)} \right), \tag{69}$$

其中，D_s是物种 s的扩散系数，$\boldsymbol{\rho} = (\rho_1、\ldots\ldots、\rho_{N_s})$，$a_r(\boldsymbol{\rho})$是表示反应 r率参数的倾向函数，而 ν_{sr} 是物种 s 在反应 r中的化学计量系数。鉴于倾向函数通常是数密度的非线性函数，要获得准确的反应-扩散方程数值解，就必须正确捕捉$\boldsymbol{\rho}$ 的矩。

数值涨落流体力学（FHD）格式的准确性通常通过其再现正确平衡结构因子的能力来评估。关于高阶矩和相关性的研究发现表明，固体中常测量的三点和四点结构因子为此类验证提供了一个很有前景的新途径。未来的工作可在这些结果的基础上，对采用乘性噪声的格式开展正式的空间和时间截断误差分析。尤其值得关注的是对替代空间离散化策略的研究（例如，单元中心网格与交错网格、保正通量限制器 [26]）以及用于减轻建模误差的高级时间积分格式。最后，虽然本研究聚焦于有限体积方法，但计算涨落流体力学还涵盖其他数值框架，例如有限元方法 [27–29] 和谱方法 [30,31]。使用本文引入的指标评估这些替代格式，是未来研究的一个重要方向。

致谢

本材料基于美国能源部（DOE）科学办公室高级科学计算研究办公室（ASCR）加速和包容性研究资助计划（FAIR）项目在奖励编号 DE-SC0024240 和合同编号 DE-AC02-05CH11231 下支持的工作。该工作还得到美国能源部科学办公室高级科学计算研究办公室应用数学项目在合同编号 DE-AC02-05CH11231 下的支持。

附录 A：正则系综与伽马分布

这里我们证明，正则系综中的温度概率分布是伽马分布。从能量的递推关系出发：

$$\langle (E-U)^{n+1} \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \langle (E-U)^n \rangle - n \langle (E-U)^{n-1} \rangle \frac{\partial U}{\partial \beta}, \tag{A1}$$

其中 $\beta = 1/(k_{\mathrm{B}}T)$。我们还定义

$$\alpha = \frac{\rho c_V V}{k_{\mathrm{B}}} . \tag{A2}$$

于是我们有

$$U = \frac{\alpha}{\beta} , \quad \langle (E-U)^2 \rangle = \frac{\alpha}{\beta^2} . \tag{A3}$$

若令 $\mu = E - U$，则递推关系可写为

$$\langle \mu^{n+1} \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \langle \mu^n \rangle - n \langle \mu^{n-1} \rangle \frac{\partial U}{\partial \beta} . \tag{A4}$$

注意到

$$\frac{\partial U}{\partial \beta} = -\frac{\alpha}{\beta^2} , \tag{A5}$$

由方程 (A3) 和 (A4) 可知 $\langle \mu^n \rangle \propto \beta^{-n}$。利用这一观察，我们可将递推关系写为

$$\langle \mu^{n+1} \rangle = \frac{n}{\beta} \langle \mu^n \rangle + \frac{n\alpha}{\beta^2} \langle \mu^{n-1} \rangle . \tag{A6}$$

我们将 M_μ 定义为矩母函数

$$M_\mu(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \langle \mu^n \rangle . \tag{A7}$$

将递推关系乘以 $\frac{t^n}{n!}$，并对 n 求和:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \langle \mu^{n+1} \rangle \frac{t^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} \langle \mu^n \rangle \frac{n}{\beta} \frac{t^n}{n!} + \sum_{n=1}^{\infty} \langle \mu^{n-1} \rangle \frac{n\alpha}{\beta^2} \frac{t^n}{n!} . \tag{A8}$$

左侧可以写成

$$\sum_{n=1}^{\infty} \langle \mu^n \rangle \frac{t^{n-1}}{(n-1)!} = \frac{\partial}{\partial t} \sum_{n=0}^{\infty} \langle \mu^n \rangle \frac{t^n}{n!} = \frac{\partial M_\mu}{\partial t} . \tag{A9}$$

右侧的第一项可以改写为

$$\sum_{n=0}^{\infty} \langle \mu^n \rangle \frac{n}{\beta} \frac{t^n}{n!} = \frac{t}{\beta} \sum_{n=1}^{\infty} \langle \mu^n \rangle \frac{t^{n-1}}{(n-1)!} = \frac{t}{\beta} \frac{\partial M_\mu}{\partial t} . \tag{A10}$$

右侧的第二项可以改写为

$$\sum_{n=1}^{\infty} \langle \mu^{n-1} \rangle \frac{n\alpha}{\beta^2} \frac{t^n}{n!} = \frac{\alpha t}{\beta^2} \sum_{n=1}^{\infty} \langle \mu^{n-1} \rangle \frac{t^{n-1}}{(n-1)!} = \frac{\alpha t}{\beta^2} M_\mu . \tag{A11}$$

合并这些项，可得

$$\frac{\partial M_\mu}{\partial t} = \frac{\alpha t}{\beta(\beta - t)} M_\mu \,. \tag{A12}$$

由于 $M_\mu(0) = 1$，我们可以对方程（式）（A12）进行积分，得到

$$M_\mu(t) = \left(1 - \frac{t}{\beta}\right)^{-\alpha} e^{-\frac{\alpha t}{\beta}} \,. \tag{A13}$$

利用矩之间的关系

$$M_E(t) = \langle e^{Et} \rangle = \langle e^{t(E-U)} e^{tU} \rangle = e^{tU} M_\mu \,, \tag{A14}$$

于是有

$$M_E(t) = \left(1 - \frac{t}{\beta}\right)^{-\alpha} \,, \tag{A15}$$

由此可知， E 的分布是伽马分布，其形状参数为 $\rho c_V V / k_\mathrm{B}$ ，率参数为 $1/(k_\mathrm{B}T)$。鉴于 $T = E/\rho c_V V$，我们还可得到， T的分布同样是伽马分布，但其率参数为 $\tilde{\beta} = \rho c_V V/(k_\mathrm{B}T)$。最后，由于伽马分布满足 Carleman条件 [32]，因此其矩可以唯一确定该分布。

我们注意到， E 和 T 的伽马分布可以很容易地从经典（高温）极限下的Einstein模型中推导出来。在这一状态下，该模型中每个原子具有 $f = 6$ 个自由度，其总能量可写为

$$E = \sum_{i=1}^{N} \sum_{\alpha \in \{x,y,z\}} \left(\frac{1}{2} k \, r_{i,\alpha}^2 + \frac{1}{2} m \, v_{i,\alpha}^2 \right) , \tag{A16}$$

其中， k 是力常数， m 是一个原子的质量。每个原子的位移和速度的各个分量（分别记为$r_{i,\alpha}$ 和 $v_{i,\alpha}$）彼此独立，并且服从正态分布：

$$r_{i,\alpha} \sim \mathrm{Normal}\left(\mu = 0, \sigma^2 = \frac{k_\mathrm{B}T}{k}\right) , \quad v_{i,\alpha} \sim \mathrm{Normal}\left(\mu = 0, \sigma^2 = \frac{k_\mathrm{B}T}{m}\right) , \tag{A17}$$

其中， μ 和 σ^2 分别表示正态分布的均值和方差参数。因此，每项势能或动能贡献都服从伽马分布：

$$\frac{1}{2} k \, r_{i,\alpha}^2 \sim \mathrm{Gamma}\left(\alpha = \frac{1}{2}, \beta = \frac{1}{k_\mathrm{B}T}\right) , \quad \frac{1}{2} m \, v_{i,\alpha}^2 \sim \mathrm{Gamma}\left(\alpha = \frac{1}{2}, \beta = \frac{1}{k_\mathrm{B}T}\right) , \tag{A18}$$

其中 α 和 β 分别表示伽马分布的形状参数和率参数。根据方程（式）（A16）， E

因此， $T = E/(\rho c_V V) = E/(3k_{\mathrm{B}}\mathrm{N})$ 也服从伽马分布：

$$E \sim \mathrm{Gamma}\left(\alpha = 3\mathcal{N}, \beta = \frac{1}{k_{\mathrm{B}}\overline{T}}\right), \quad T \sim \mathrm{Gamma}\left(\alpha = 3\mathcal{N}, \beta = \frac{3\mathcal{N}}{\overline{T}}\right). \tag{A19}$$

对于理想单原子气体，我们只保留动能贡献。对 3N 个独立的二次贡献求和，得到

$$E \sim \mathrm{Gamma}\left(\alpha = \frac{3}{2}\mathcal{N}, \beta = \frac{1}{k_{\mathrm{B}}\overline{T}}\right), \quad T \sim \mathrm{Gamma}\left(\alpha = \frac{3}{2}\mathcal{N}, \beta = \frac{3\mathcal{N}}{2\overline{T}}\right). \tag{A20}$$

附录 B：四阶矩守恒修正

我们假设

$$\begin{aligned}\langle \delta T_i \delta T_j \delta T_k \delta T_l \rangle_{(N)} = {} & a_1 \delta_{ij}\delta_{jk}\delta_{kl} + a_2(\delta_{ij}\delta_{kl} + \delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) \\ & + a_3(\delta_{ij}\delta_{ik} + \delta_{ij}\delta_{il} + \delta_{ik}\delta_{il} + \delta_{jk}\delta_{jl}) \\ & + a_4(\delta_{ij} + \delta_{ik} + \delta_{il} + \delta_{jk} + \delta_{jl} + \delta_{kl}) + a_5 .\end{aligned} \tag{B1}$$

由于 $\sum_j \delta T_j = 0$，我们有

$$\sum_j \sum_k \sum_l \langle \delta T_i \delta T_j \delta T_k \delta T_l \rangle_{(N)} = a_1 + 3Na_2 + 4Na_3 + 6N^2 a_4 + N^3 a_5 = 0 , \tag{B2}$$

$$\sum_k \sum_l \langle \delta T_i^2 \delta T_k \delta T_l \rangle_{(N)} = a_1 + (N+2)a_2 + (2N+2)a_3 + (N^2+5N)a_4 + N^2 a_5 = 0 , \tag{B3}$$

$$\sum_l \langle \delta T_i^3 \delta T_l \rangle_{(N)} = a_1 + 3a_2 + (N+3)a_3 + (3N+3)a_4 + Na_5 = 0 , \tag{B4}$$

因此

$$a_3 = -\frac{1}{N}a_1 , \quad a_4 = \frac{1}{N^2}a_1 - \frac{1}{N}a_2 , \quad a_5 = -\frac{3}{N^3}a_1 + \frac{3}{N^2}a_2 . \tag{B5}$$

由于在热力学极限下（即 $N \to \infty$）

$$\langle \delta T_i^4 \rangle_{(N)} = \left(1 - \frac{4}{N} + \frac{6}{N^2} - \frac{3}{N^3}\right)a_1 + \left(3 - \frac{6}{N} + \frac{3}{N^2}\right)a_2 \to a_1 + 3a_2 = \langle \delta T^4 \rangle , \tag{B6}$$

$$\langle \delta T_i^2 \delta T_j^2 \rangle_{(N)} = \left(\frac{2}{N^2} - \frac{3}{N^3}\right)a_1 + \left(1 - \frac{2}{N} + \frac{3}{N^2}\right)a_2 \to a_2 = \langle \delta T^2 \rangle^2 \quad \text{for } i \neq j , \tag{B7}$$

我们有

$$a_1 = \langle \delta T^4 \rangle - 3\langle \delta T^2 \rangle^2 = \frac{48\overline{T}^4}{f^3 \mathcal{N}^3}\,, \tag{B8}$$

$$a_2 = \langle \delta T^2 \rangle^2 = \frac{4\overline{T}^4}{f^2 \mathcal{N}^2}\,. \tag{B9}$$

通过引入

$$\gamma_2 = \frac{a_1}{a_2} = \frac{12}{f\mathcal{N}}\,, \tag{B10}$$

它等于超额峰度，因此可以用$a_2 = \delta T^{2\,2}$表示$\delta T_i \delta T_j \delta T_k \delta T_{l(N)}$的有限尺寸效应。例如，

$$\langle \delta T_i^4 \rangle_{(N)} = \left(3 + \gamma_2 - \frac{6+4\gamma_2}{N} + \frac{3+6\gamma_2}{N^2} - \frac{3\gamma_2}{N^3}\right) \langle \delta T^2 \rangle^2\,. \tag{B11}$$

附录 C：多单元乘性噪声分析

针对单细胞情形（见第 V A1 节）发展的乘性噪声分析可以扩展至多单元情形。为此，我们引入向量记号，并使用克罗内克积，记作 $\otimes$。具体而言，状态变量表示为列向量 $\delta\boldsymbol{T} = [\delta T_0, \delta T_1, \ldots, \delta T_{N-1}]^T$，而二阶、三阶和四阶矩分别表示为 $\boldsymbol{q}_2 = \langle \delta\boldsymbol{T} \otimes \delta\boldsymbol{T} \rangle$、$\boldsymbol{q}_3 = \langle \delta\boldsymbol{T} \otimes \delta\boldsymbol{T} \otimes \delta\boldsymbol{T} \rangle$、$\boldsymbol{q}_4 = \langle \delta\boldsymbol{T} \otimes \delta\boldsymbol{T} \otimes \delta\boldsymbol{T} \otimes \delta\boldsymbol{T} \rangle$。对于列向量 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ 和 $\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^m$，克罗内克积 $\boldsymbol{x} \otimes \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^{mn}$ 定义为

$$\boldsymbol{x} \otimes \boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} x_1 \boldsymbol{y} \\ \vdots \\ x_n \boldsymbol{y} \end{bmatrix}\,. \tag{C1}$$

因此，$\boldsymbol{q}_2$ ，$\boldsymbol{q}_3$和 $\boldsymbol{q}_4$ 分别是包含 N^2、N^3和 N^4 个条目的列向量 .

Fo对于 Euler–Maruyama格式，$\delta\boldsymbol{T}$的时间更新可写成以下形式 m

$$\delta\boldsymbol{T}' = \delta\boldsymbol{T} + A_0 \Delta t \mathbf{A}_1 \delta\boldsymbol{T} + B_0 \sqrt{\Delta t}\; \boldsymbol{v}(\delta\boldsymbol{T}, \boldsymbol{R})\,. \tag{C2}$$

这里，$\delta\boldsymbol{T}' \in \mathbb{R}^N$ 表示经过一个 Δt时间步长后的更新后的状态向量，而 $\boldsymbol{R} \in \mathbb{R}^M$ 表示M相互独立的标准正态随机变量，用于计算单元面处的随机通量；参见方程（22）。对于本文考虑的所有边界条件，包括满足$\mathcal{D}\zeta(T,T)$的狄利克雷边界（参见方程（25）），乘性噪声 $\boldsymbol{v}(\delta\boldsymbol{T}, \boldsymbol{R}) \in \mathbb{R}^N$可以

分解为关于 $\boldsymbol{R}$ 的线性项和关于 $\delta\boldsymbol{T}$ 与 $\boldsymbol{R}$ 的双线性项:

$$\boldsymbol{v}(\delta\boldsymbol{T},\boldsymbol{R}) = \overline{T}\,\mathbf{B}_1\boldsymbol{R} + \mathbf{B}_2(\delta\boldsymbol{T}\otimes\boldsymbol{R})\,. \tag{C3}$$

我们将 A_0 和 B_0 的值固定为

$$A_0 = \frac{\kappa}{\Delta x^2}\,,\quad B_0 = \frac{\xi}{\Delta x\sqrt{\mathcal{A}\Delta x}}\,, \tag{C4}$$

这样矩阵 $\mathbf{A}_1 \in \mathbb{R}^{N\times N}$、$\mathbf{B}_1 \in \mathbb{R}^{N\times M}$和$\mathbf{B}_2 \in \mathbb{R}^{N\times MN}$便不包含任何物理参数、 Δx或 Δt。给定边界条件和 N的值后，即可确定这些矩阵。

这里给出一些示例情形下 $\mathbf{A}_1$, $\mathbf{B}_1$, 和 $\mathbf{B}_2$ 的值。对于第 V A1节中讨论的单细胞情形，有 $M = 1$ 以及

$$\mathbf{A}_1 = -2\,,\quad \mathbf{B}_1 = -\sqrt{2}\,,\quad \mathbf{B}_2 = -\sqrt{2}\zeta\,. \tag{C5}$$

对于第 V A2节中讨论的双细胞情形，有 $M = 2$ 以及

$$\mathbf{A}_1 = \begin{bmatrix} -3 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix},\quad \mathbf{B}_1 = \begin{bmatrix} -\sqrt{2} & 1 \\ 0 & -1 \end{bmatrix},\quad \mathbf{B}_2 = \begin{bmatrix} -\sqrt{2}\zeta & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{bmatrix}. \tag{C6}$$

对于 $N = 3$ （参见 VB节）时的周期性边界条件情形，有 $M = 3$ 以及

$$\mathbf{A}_1 = \begin{bmatrix} -2 & 1 & 1 \\ 1 & -2 & 1 \\ 1 & 1 & -2 \end{bmatrix},\ \mathbf{B}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix},\ \mathbf{B}_2 = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}. \tag{C7}$$

现在我们推导 $\boldsymbol{q}_2$ 在极限 $\Delta t \to 0$下满足的方程。通过计算 $\delta\boldsymbol{T}'\otimes\delta\boldsymbol{T}'$并收集至 $O(\Delta t)$ 阶的项，我们得到

$$\begin{aligned}\langle\delta\boldsymbol{T}'\otimes\delta\boldsymbol{T}'\rangle = {}& \langle\delta\boldsymbol{T}\otimes\delta\boldsymbol{T}\rangle + B_0\sqrt{\Delta t}\left[\langle\delta\boldsymbol{T}\otimes\boldsymbol{v}\rangle + \langle\boldsymbol{v}\otimes\delta\boldsymbol{T}\rangle\right] \\ & + A_0\Delta t\left[\langle\delta\boldsymbol{T}\otimes(\mathbf{A}_1\delta\boldsymbol{T})\rangle + \langle(\mathbf{A}_1\delta\boldsymbol{T})\otimes\delta\boldsymbol{T}\rangle\right] + B_0^2\Delta t\,\langle\boldsymbol{v}\otimes\boldsymbol{v}\rangle + o(\Delta t)\,.\end{aligned} \tag{C8}$$

根据平稳性，$\delta\boldsymbol{T}'\otimes\delta\boldsymbol{T}' = \delta\boldsymbol{T}\otimes\delta\boldsymbol{T} = \boldsymbol{q}_2$。通过分析公式（C8）中的其余各项，我们证明 $O(\sqrt{\Delta t})$ 项为零，而 $O(\Delta t)$ 项可以用 $\boldsymbol{q}_2$ 表示。为此，我们引入单位矩阵 $\mathrm{I}_n \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 和交换矩阵 $\mathrm{S}_{m,n} \in \mathbb{R}^{mn\times mn}$，并利用它们的性质：$\mathrm{I}_n\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{x}\otimes\boldsymbol{y} = \mathrm{S}_{m,n}(\boldsymbol{y}\otimes\boldsymbol{x})$，其中 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ 和 $\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^m$。我们还使用克罗内克积的混合乘积性质：如果 X、Y、Z 和 W 是维数相容的矩阵，使得乘积 XZ 和 YW 有定义，那么 (X $\otimes$ Y) (Z $\otimes$ W) = (XZ) $\otimes$ (YW)。

我们得到

$$\delta\boldsymbol{T}\otimes\boldsymbol{v}=\overline{T}(\mathbf{I}_N\otimes\mathbf{B}_1)(\delta\boldsymbol{T}\otimes\boldsymbol{R})+(\mathbf{I}_N\otimes\mathbf{B}_2)(\delta\boldsymbol{T}\otimes\delta\boldsymbol{T}\otimes\boldsymbol{R})\,, \tag{C9}$$

$$\boldsymbol{v}\otimes\delta\boldsymbol{T}=\overline{T}(\mathbf{B}_1\otimes\mathbf{I}_N)(\boldsymbol{R}\otimes\delta\boldsymbol{T})+((\mathbf{B}_2\mathbf{S}_{M,N})\otimes\mathbf{I}_N)(\boldsymbol{R}\otimes\delta\boldsymbol{T}\otimes\delta\boldsymbol{T})\,. \tag{C10}$$

由于 $\boldsymbol{R}$ 与 $\delta\boldsymbol{T}$ 相互独立，且 $\boldsymbol{R}=0$，因此有 $\delta\boldsymbol{T}\otimes\boldsymbol{v}=\boldsymbol{v}\otimes\delta\boldsymbol{T}=0$。我们得到

$$\langle\delta\boldsymbol{T}\otimes(\mathbf{A}_1\delta\boldsymbol{T})\rangle=(\mathbf{I}_N\otimes\mathbf{A}_1)\boldsymbol{q}_2\,, \tag{C11}$$

$$\langle(\mathbf{A}_1\delta\boldsymbol{T})\otimes\delta\boldsymbol{T}\rangle=(\mathbf{A}_1\otimes\mathbf{I}_N)\boldsymbol{q}_2\,. \tag{C12}$$

利用 $\delta\boldsymbol{T}=0$ 和 $\boldsymbol{R}\otimes\boldsymbol{R}=\mathrm{vec}(\mathbf{I}_M)$，其中 $\mathrm{vec}(\mathbf{X})$ 表示矩阵 $\mathbf{X}$ 的向量化，我们得到

$$\langle\boldsymbol{v}\otimes\boldsymbol{v}\rangle=\overline{T}^2(\mathbf{B}_1\otimes\mathbf{B}_1)\,\mathrm{vec}(\mathbf{I}_M)+(\mathbf{B}_2\otimes(\mathbf{B}_2\mathbf{S}_{M,N}))\langle\delta\boldsymbol{T}\otimes\mathrm{vec}(\mathbf{I}_M)\otimes\delta\boldsymbol{T}\rangle\,. \tag{C13}$$

通过将 $\langle\delta\boldsymbol{T}\otimes\mathrm{vec}(\mathbf{I}_M)\otimes\delta\boldsymbol{T}\rangle=(\mathbf{I}_N\otimes\mathrm{vec}(\mathbf{I}_M)\otimes\mathbf{I}_N)\,\boldsymbol{q}_2$ 以及上述得到的所有结果代入方程（式）(C8)后，最终得到

$$\Big\{A_0\big(\mathbf{I}_N\otimes\mathbf{A}_1+\mathbf{A}_1\otimes\mathbf{I}_N\big)+B_0^2\big(\mathbf{B}_2\otimes(\mathbf{B}_2\mathbf{S}_{M,N})\big)\big(\mathbf{I}_N\otimes\mathrm{vec}(\mathbf{I}_M)\otimes\mathbf{I}_N\big)\Big\}\boldsymbol{q}_2+B_0^2\overline{T}^2(\mathbf{B}_1\otimes\mathbf{B}_1)\mathrm{vec}(\mathbf{I}_M)=0\,. \tag{C14}$$

通过求解方程（式）（C14）以获得 $\boldsymbol{q}_2$，即可计算二阶矩。例如，由于矩阵 $\mathbf{I}_N$ 和 $\mathbf{S}_{M,N}$ 在 $N=M=1$ 时均化为单位矩阵，因此可以很容易地得到第 $\langle\delta T^2\rangle$ 节中给出的单细胞情形的结果。对于较小的 $N>1$ 值，可以借助符号计算工具对方程（式）（C14）中的 $\boldsymbol{q}_2$ 进行解析求解。尽管计算 $\boldsymbol{q}_3$ 和 $\boldsymbol{q}_4$ 更加复杂，但仍可采用相同的步骤；对于较小的 $N>1$ 值，借助符号计算工具仍然可以求得解析解。

---

[1] L. D. Landau 和 E. M. Lifshitz，《流体力学》，《理论物理学教程》，第6卷（Pergamon Press，1959）。[2] J. M. Ortiz de Zarate 和 J. V. Sengers，《流体和流体混合物中的流体动力学涨落》（Elsevier Science，2007）。[3] A. L. Garcia、M. M. Mansour、G. C.Lie 和 E. Cementi，《统计物理学杂志》**47**，209（1987）。[4] J. B. Bell、J. Foo 和 A. L. Garcia，《计算物理学杂志》**223**，451（2007）。[5] J. B. Bell、A. L. Garcia 和 S. A. Williams，《物理评论E》**76**，016708（2007）。[6] A. Donev、E. Vanden-Eijnden、A. Garcia 和 J. Bell，《应用数学与计算科学通信》**5**，149（2010）。[7] F. Balboa、J. B. Bell、R. Delgado-Buscalioni、A. Donev、T. G. Fai、B. E. Griffith 和 C. S. Peskin,

《多尺度建模与仿真》10, 1369（2012）。[8] 我们注意到，Cornalba 和 Fischer [33] 证明了 Dean–Kawasaki 方程高阶矩的弱收敛估计。[9] A. L. Garcia、J. B. Bell、A. Nonaka、I. Srivastava、D. Ladiges 和 C. Kim，《计算涨落流体力学导论》（2025），arXiv:2406。12157 [physics.flu-dyn]。[10] A. Vailati 和 M. Giglio，《自然》390, 262（1997）。[11] A. Donev、J. B. Bell、A. de la Fuente 和 A. L. Garcia，《物理评论快报》106, 204501（2011）。[12] P. Baaske、H. Bataller、M. Braibanti、M. Carpineti、R. Cerbino、F. Croccolo、A. Donev、W. K¨ohler、J. M. O. D. Z´arate 和 A. Vailati，《欧洲物理学杂志 E》39, 119（2016）。[13] M. Bussoletti、M. Gallo、A. Jafari 和 G. L. Eyink，《物理评论研究》8, L012059（2026）。[14] H. B. Callen，《热力学与热统计学导论》（John Wiley & Sons，1985）。[15] A. L. Garcia，《物理评论 A》34, 1454（1986）。[16] P. E. Kloeden、E. Platen 和 H. Schurz，《通过计算机实验求解随机微分方程》（Springer Science & Business Media，2012）。[17] 注意，情形 $\zeta = 1$ 也曾被研究过，但就矩的正确性而言，其结果较差。[18] I. Srivastava、D. R. Ladiges、A. J. Nonaka、A. L. Garcia 和 J. B. Bell，《物理评论 E》107, 015305（2023）。[19] P. Espa˜nol，《物理学 A》248, 77（1998）。[20] V. Morozov，《物理学 A：统计力学及其应用》126, 443（1984）。[21] V. Giovangigli，《多组分流动建模》，《科学、工程与技术中的建模和仿真》第 N/A 号（Birkhauser Boston，2012）。[22] A. Garcia，《应用数学与计算科学通信》1, 53（2007）。[23] D. S. Dean，《物理学杂志 A：数学与理论》29, L613（1996）。[24] K. Kawasaki，《物理学 A：统计力学及其应用》208, 35（1994）。[25] P. Illien，《物理学进展报告》88, 086601（2025）。[26] F. Magaletti、M. Gallo、S. P. Perez、J. A. Carrillo 和 S. Kalliadasis，《计算物理学杂志》463, 111248（2022）。[27] J. De La Torre、P. Espa˜nol 和 A. Donev，《化学物理学杂志》142（2015）。[28] P. Mart´ınez-Lera 和 M. De Corato，《计算物理学杂志》510, 113098（2024）。[29] D. Gourzoulidis、M. Gallo、S. Elkantassi、T. Kay 和 S. Kalliadasis，arXiv 预印本 arXiv:2606.27972（2026）。[30] C. Cartes、E. Tirapegui、R. Pandit 和 M. Brachet，《英国皇家学会哲学汇刊 A》380, 20210090（2022）。[31] L. Gosteva、M. E. Brachet 和 L. Canet，《英国皇家学会哲学汇刊 A：数学、物理与工程科学》384（2026）。[32] N. I. Akhiezer，《经典矩问题及分析中的相关问题》（SIAM，2020）。

[33] F. Cornalba 和 J. Fischer, 《理性力学与分析档案》**247**, 76（2023年).