

燃烧系统的离散 Boltzmann 建模与模拟研究进展

许爱国 张广财 应阳君

Progress of discrete Boltzmann modeling and simulation of combustion system

Xu Ai-Guo Zhang Guang-Cai Ying Yang-Jun

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 184701 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.184701

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.184701>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I18>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

流体力学拉氏守恒滑移线算法设计

[Conservative sliding algorithms for hydrodynamics](#)

物理学报.2015, 64(19): 194701 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.194701>

干斜压大气拉格朗日原始方程组的半解析解法和非线性密度流数值试验

[Semi-analytical solution of the dry baroclinic Lagrange primitive equation and numerical experiment of a non-linear density current](#)

物理学报.2015, 64(19): 194702 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.194702>

疏水表面减阻的格子 Boltzmann 方法数值模拟

[Numerical investigation on drag reduction with hydrophobic surface by lattice Boltzmann method](#)

物理学报.2015, 64(18): 184702 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.184702>

液滴在梯度微结构表面上的铺展动力学分析

[Spreading dynamics of liquid droplet on gradient micro-structured surfaces](#)

物理学报.2015, 64(15): 154705 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.154705>

脉动流在分叉管中通栓效果的晶格玻尔兹曼方法研究

[Pulsation effect on thrombus in a bifurcation pipe by the lattice Boltzmann method](#)

物理学报.2015, 64(14): 144701 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.144701>

专题: 计算物理的近期发展和应用

## 燃烧系统的离散 Boltzmann 建模与模拟研究进展\*

许爱国<sup>1)2)3)†</sup> 张广财<sup>1)3)4)</sup> 应阳君<sup>1)</sup>

1) (北京应用物理与计算数学研究所计算物理重点实验室, 北京 100088)

2) (北京大学应用物理与技术研究中心和高能量密度物理数值模拟教育部重点实验室, 北京 100871)

3) (理论物理国家重点实验室(中国科学院理论物理研究所), 北京 100190)

4) (爆炸科学与技术国家重点实验室(北京理工大学), 北京 100081)

(2015年2月4日收到; 2015年4月2日收到修改稿)

燃烧系统的诸多模拟依托于流体建模, 离散 Boltzmann 方法 (discrete Boltzmann method, DBM) 是近年来发展起来的一种新的流体介观建模方法. 本文简要评述 DBM 发展的两个方向——Navier-Stokes 等偏微分方程的数值逼近解法和复杂系统的微介观动力学建模. 主要介绍在燃烧系统模拟方面 DBM 已有的工作、新近的思路、与传统流体建模的异同以及近期的研究成果. 本文重点传递的信息为: 作为复杂系统微介观动力学建模出现的 DBM 在模拟过程中同时给出“流动”及其相伴的、关系最密切的那部分“热动”非平衡效应; 它为燃烧等复杂系统中各类非平衡行为的描述、非平衡信息的提取、非平衡程度的度量提供了一种简洁、有效的方法; 它所提供的热动非平衡测量量有两类: 一类是直接比较分布函数和平衡态分布函数的动力学矩关系得到的, 一类是来自于 Chapman-Enskog 多尺度分析给出的热传导和黏性项. 基于第二类 DBM, 可以实现(燃烧等)一大类复杂流体系统的多尺度物理建模.

关键词: 离散 Boltzmann 方法, 非平衡效应, 燃烧, 复杂流体

PACS: 47.11.-j, 47.40.Rs, 47.70.-n

DOI: 10.7498/aps.64.184701

## 1 引言

燃烧是燃料和氧气的剧烈化学反应, 并伴随着发光、发热等现象. 燃烧反应的主要功能之一在于将燃料的化学能转化为热能. 诸如锅炉、内燃机、燃气轮机、火箭发动机以及一些爆炸动力装置等都是能量转换设备, 均是以燃烧的形式实现化学能向热能、进而机械能的转换. 目前, 世界上可用能源的 80% 来自于燃烧. 在可预见的将来, 燃烧仍将是向人们提供能源的主要方式<sup>[1]</sup>. 然而, 燃烧(特别是低效燃烧)带来的污染物已经开始严重影响空气质量, 甚至已经开始影响我们赖以生存的气候和环境.

自从人类学会使用火来取暖和烘烤食物以来, 人们对燃烧的思考就一直没有停止过. 当下, 如何提高燃烧设备能量转换效率的问题已经提到了前所未有的高度, 成了人们重点思考的课题之一<sup>[2]</sup>. 粗略地说, 燃料有两种: 核燃料和有机燃料. 有机燃料泛指含碳氢化合物的矿物燃料、生物燃料及经过人工合成的相关燃料. 为了获得低排放、贫油高速燃烧以及推进新的燃烧技术, 近年来人们提出了一系列新的燃烧概念<sup>[2,3]</sup>, 例如, 脉冲和旋转爆震 (pulsed and spinning detonation)<sup>[4,5]</sup>、微尺度燃烧 (microscale combustion)<sup>[6,7]</sup>、纳米推进剂 (nano propellant)<sup>[8,9]</sup>、部分预混和层流燃烧 (partially premixed and stratified combustion)<sup>[10]</sup>、等

\* 计算物理重点实验室基金、国家自然科学基金(批准号: 11475028, 11202003)、理论物理国家重点实验室(中国科学院理论物理研究所)开放课题(批准号: Y4KF151CJ1)和爆炸科学与技术国家重点实验室(北京理工大学)开放课题(批准号: KFJJ14-1M)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: Xu\_Aiguo@iapcm.ac.cn

离子体助燃 (plasma assisted combustion)<sup>[11-13]</sup>、冷火焰 (cool flame)<sup>[14]</sup> 等. 围绕着这些新概念, 从科学和技术角度仍存在着一系列亟待解决的问题. 例如: 1) 在旋转爆震方面, 器壁曲率和预混程度对起爆和传播模式的影响; 2) 在高压层流燃烧方面, 低温下起爆到爆轰的转变问题; 3) 在等离子体助燃方面, 电子、激发态分子和中性分子之间的高度非平衡能量转换; 4) 在冷火焰方面, 流体动力学、化学动力学及其相关的输运问题<sup>[1,15-17]</sup>. 可见, 所有这些新的燃烧概念均涉及到复杂的非平衡流体动力学、化学动力学及输运过程.

长期以来, 人们认识燃烧过程的途径是实验和少量理论研究<sup>[18-24]</sup>. 在最近 50 年里, 燃烧问题的数值模拟取得了长足的进展<sup>[25-31]</sup>. 在文献资料中常见的燃烧问题数值模拟一般由如下三个步骤组成: 1) 根据基本守恒定律和适当的简化构建物理模型; 2) 将控制方程离散化; 3) 数值实验和数据分析. 常用的离散格式有有限差分、有限元、有限体积、有限分析、边界元、积分变换、谱方法等. 值得一提的是, 近年来, 格子 Boltzmann 方法 (lattice Boltzmann method, LBM)<sup>[32-38]</sup> 也被加进了常用离散格式的行列. 关于这一点, 在后面讲到离散 Boltzmann 建模或方法 (discrete Boltzmann model/method, DBM) 时再做解释.

燃烧系统诸多行为的研究依托于流体建模. 我们也可以从微观、介观和宏观三个层面对一个燃烧系统进行描述. 由于物质世界是无限可分的, 所以对微观、介观、宏观的界定自然也是相对的. 在流体系统描述方面, 微观描述一般是指基于分子动力学的描述, 模拟工具自然是分子动力学模拟; 分子间相互作用势的建立是模型构建的关键. 在这个层面上, 人们可以通过模拟研究建立化学反应率方程. 宏观描述一般是指含化学反应项的 Euler 方程或 Navier-Stokes 方程. 在这个层面上, 人们关注的主要是“流动” (hydrodynamic) 非平衡, 即流体力学状态量在空间的不均匀及其引起的演化. 介观描述一般是指基于非平衡统计力学理论描述. 其中, 使用较普遍的是基于 Boltzmann 方程<sup>[39]</sup>

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{a} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = Q(f, f),$$

$$Q(f, f) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{4\pi} (f^* f_1^* - f f_1) g \sigma d\Omega d\mathbf{v}_1 \quad (1)$$

的描述, 如图 1 所示. 其中,  $f = f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ ,  $f_1 = f(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1, t)$ ,  $f^* = f(\mathbf{r}, \mathbf{v}^*, t)$  和  $f_1^* = f(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1^*, t)$  分别是  $t$  时刻位于  $\mathbf{r}$  位置的粒子速度为  $\mathbf{v}$ ,  $\mathbf{v}_1$ ,  $\mathbf{v}^*$  和  $\mathbf{v}_1^*$

的 (单体) 分布函数;  $\mathbf{v}$  和  $\mathbf{v}_1$  为两粒子碰撞前的速度,  $\mathbf{v}^*$  和  $\mathbf{v}_1^*$  为两粒子碰撞后的速度;  $g = |\mathbf{v} - \mathbf{v}_1|$  为碰撞前两粒子相对速度的大小;  $\mathbf{a}$  为粒子的加速度;  $\sigma$  为微分碰撞截面;  $\Omega$  为碰撞的微分立体角. 可见, 与分子动力学描述相比, Boltzmann 方程描述忽略了大量分子运动的细节, 只保留了分子运动速度分布的部分统计特征; 系统的动力学行为用分布函数  $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$  的时空演化来描述.

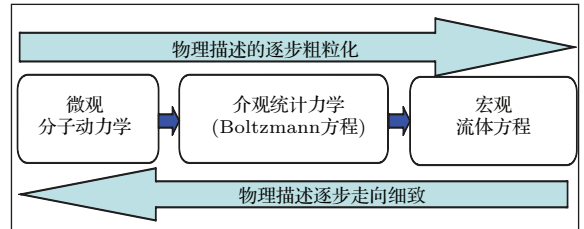


图 1 流体系统的微观、介观和宏观建模示意图  
Fig. 1. Schematic of modelings of fluid system in the microscopic, mesoscopic and macroscopic scales.

流体力学状态量密度  $\rho$ 、动量  $\rho \mathbf{u}$ 、能量  $E_T$  与分布函数  $f$  的关系为

$$\mathbf{W} = \int f \boldsymbol{\Psi} d\mathbf{v}, \quad (2)$$

其中,

$$\mathbf{W} = [\rho, \rho \mathbf{u}, E_T = \rho T + \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} / 2 = \rho T + \rho u^2 / 2]^T,$$

$$\boldsymbol{\Psi} = [1, \mathbf{v}, \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} / 2 = v^2 / 2]^T, \quad (3)$$

即分别为分布函数  $f$  相对于粒子速度  $\mathbf{v}$  的零阶矩、一阶矩和二阶矩对角分量之和的一半. 压强张量  $\mathbf{P}$  与分布函数  $f$  的关系为

$$\mathbf{P} = \int f (\mathbf{v} - \mathbf{u})(\mathbf{v} - \mathbf{u}) d\mathbf{v}. \quad (4)$$

即为分布函数  $f$  的二阶中心矩. 热流  $\mathbf{q}$  与分布函数  $f$  的关系为

$$\mathbf{q} = \int f \frac{1}{2} (\mathbf{v} - \mathbf{u})(\mathbf{v} - \mathbf{u}) \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{u}) d\mathbf{v}. \quad (5)$$

能量流  $E_T \mathbf{u}$  与分布函数  $f$  的关系为

$$E_T \mathbf{u} = \int f \frac{1}{2} \mathbf{v} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} d\mathbf{v}. \quad (6)$$

相对于 Boltzmann 方程描述, 在 Navier-Stokes 方程描述中, 分子运动的细节被进一步忽略, 分布函数  $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$  也不再出现, 出现的是分布函数  $f(\mathbf{x}, \mathbf{v}, t)$  的守恒矩——密度、动量、能量和少量非守恒矩——动量流、能量流以及黏性项和热传导项; 内能和压强之间的关系由状态方程来确定. 如果进一步忽略黏性项和热传导项所代表的输运效应, 就可得到

Euler 方程描述。所以,从分子动力学到 Boltzmann 方程,再到 Navier-Stokes 方程、Euler 方程是一个物理描述逐步粗粒化、所含物理信息量逐步减少的过程。模型的逐级转换对应的是所描述的系统越来越靠近“热动”(thermodynamic)平衡,系统的行为越来越简单,越来越可以使用更少的参量来确定;对于一个确定的非平衡系统,模型的逐级转换对应的是观测系统所用的空间-时间尺度越来越大,越来越多的小结构和快模式被忽略,即逐级转换的模型描述的是系统中越来越大的结构和越来越慢的行为。Boltzmann 方程描述在这里起到一个“承上启下”,“连接微观与宏观”的桥梁作用。通过这一介观描述,人们可以同时研究“流动”非平衡和与之相伴的、关系最密切的那部分“热动”非平衡行为。

## 2 流体系统的离散 Boltzmann 建模

从 Boltzmann 方程描述到离散 Boltzmann 模型的建立,需要经过两次重要的粗粒化物理建模。

### 2.1 第一次粗粒化——碰撞项的线性化

由于宏观流体描述牵涉的变量少,从而简单,所以大量工程应用采用宏观流体描述。而现实中有许多复杂流体系统,仅靠 Navier-Stokes 模型描述是不够的。例如,等离子体物理领域存在大量热动非平衡系统(例如三温系统,其中离子、电子和光子各自具有不同的温度);再例如,微管道流动系统中的 Knudsen 数较高,非平衡效应较强;另外,冲击波、爆轰波等的精细物理结构往往需要分布函数  $f$  二阶矩的非对角分量、甚至更高阶的矩来描述。对于这类问题,往往需要借助 Boltzmann 方程来描述。但在很多情形下, Boltzmann 方程极其复杂的碰撞项给其有效使用带来了不便。为了能够方便、有效地使用,方法之一就是引入一个局域平衡态分布函数  $f^{eq}$  将原来复杂的碰撞项用一个线性化模型来取代。这类线性化 Boltzmann 模型可以写成统一的形式<sup>[40]</sup>:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{a} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = -\frac{1}{\tau} (f - f^{eq}), \quad (7)$$

其中  $\tau$  称为松弛时间。这些粗粒化建模所依赖的基本假设如下:碰撞项的主要特征完全可以通过对所有碰撞的效应做统计平均来获得,而对某个具体碰撞的细节与效应不敏感。这些线性化碰撞算符构造的基本要求是:我们所关心的流体力学量使用简化

后和简化前的模型进行计算,所得结果一致,即

$$\int -\frac{1}{\tau} (f - f^{eq}) \Psi' d\mathbf{v} = \int Q(f, f) \Psi' d\mathbf{v}, \quad (8)$$

其中

$$\Psi' = [1, \mathbf{v}, \mathbf{v}\mathbf{v}, \mathbf{v}\mathbf{v}\mathbf{v}, \dots]^T. \quad (9)$$

显然,  $\Psi'$  取的项数越多,则线性化模型与原始碰撞模型在提供动理学矩方面的一致性就越高。根据  $\Psi'$  取的项数不同,可以获得不同形式的  $f^{eq}$ 。  $\Psi'$  取的项数越多,  $f^{eq}$  的具体形式越复杂。根据  $f^{eq}$  取不同的形式,该线性化模型分别称为 Bhatnagar-Gross-Krook (BGK) 模型<sup>[41]</sup>、椭圆统计 BGK 模型<sup>[42]</sup>、Shakhov 模型(单原子气体模型)<sup>[40]</sup>、Rykov 模型(双原子气体模型)<sup>[43]</sup>、Liu 模型<sup>[44]</sup>等。其中, BGK 模型由于简单,从而获得的应用最为广泛。

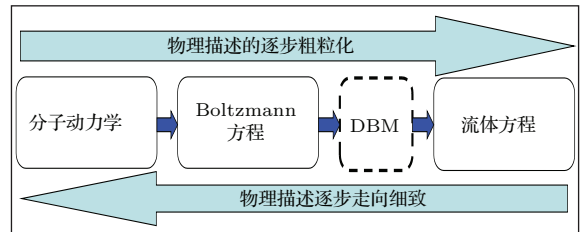


图2 离散 Boltzmann 方法在流体系统不同层次描述中的位置

Fig. 2. Position of discrete Boltzmann method in descriptions of fluid system in various scales.

### 2.2 第二次粗粒化——粒子速度空间的离散化

引入介观描述的目的有二: 1) 在冲击波、爆轰波、边界层等附近宏观量梯度较大的区域,传统流体模型不能令人满意时,可以借助 Boltzmann 方程来获得对原始模型方程的修正; 2) 可以根据需要,通过“进一步粗粒化物理建模”构造物理描述能力介于 Boltzmann 方程和 Navier-Stokes 等宏观模型之间的“介观”模型。本文重点介绍的离散 Boltzmann 模型

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + v_{i\alpha} \cdot \frac{\partial f_i}{\partial r_\alpha} = -\frac{1}{\tau} (f_i - f_i^{eq}) \quad (10)$$

或

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + v_{i\alpha} \frac{\partial f_i}{\partial r_\alpha} = -M_{il}^{-1} \left[ \hat{R}_{lk} (f_k - f_k^{eq}) + \hat{A}_l \right], \quad (11)$$

就是将粒子速度空间做了特殊离散化的“粗粒化”模型。其中,  $i = 1, 2, \dots, N$  为离散速度的编号,  $N$  为离散速度的数目;  $\alpha = x, y, z$ ;

$f_i = f_i(r, \mathbf{v}_i, t)$ ,  $f_i^{\text{eq}} = f_i^{\text{eq}}(r, \mathbf{v}_i, t)$ ;  $\hat{f}_k = M_{ki} f_i$ ,  $\hat{f}_k^{\text{eq}} = M_{ki} f_k^{\text{eq}}$  是  $f_i$  和  $f_i^{\text{eq}}$  的动理学矩;  $\hat{R}_{lk} = \text{diag}(R_1, \dots, R_k, \dots, R_N)$  为碰撞参数, 描述  $\hat{f}_k$  趋于平衡态值  $\hat{f}_k^{\text{eq}}$  的快慢;  $\hat{A}_l$  为保证离散 Boltzmann 模型能够描述正确的宏观行为 (例如在连续极限下包含正确的宏观流体模型) 而做的必要修正. 模型 (11) 又称多松弛因子离散 Boltzmann 模型. 模型 (10) 可以看作是模型 (11) 的特例; 或者模型 (11) 可以看作是模型 (10) 的推广. 由于只涉及粒子速度  $\mathbf{v}$  空间中数量很少的  $N$  个离散点  $\mathbf{v}_i$ , 所以相对于离散化之前的 Boltzmann 方程, 它肯定丢失了很多信息. 但相对于 Navier-Stokes 方程等宏观描述, 通过合理建模, 它仍然可以包含更多的微介观动理学信息, 并且包含的是与我们关注的宏观流动行为关系最密切的那部分动理学信息 [36,37]. 前面提到, 燃烧新概念的提出与研究带来了一系列 (非平衡流体动理学、化学动理学等方面的) 新挑战、新课题. 在这些复杂动理学行为的研究方面, 离散 Boltzmann 方法或模型将是个有益的工具.

### 2.3 离散 Boltzmann 发展简史

早期版本的离散 Boltzmann 方法并不是按照上述思路由 Boltzmann 方程经过两次粗粒化建模 (碰撞算符线性化和粒子速度空间离散化) 而得到的, 而是由更早期的格子气 (lattice gas) 模型 [45] 逐步发展而来的, 并且保留了“在一个时间步内, 粒子只能从一个格点沿着运动方向移动到相邻的格点”的简单图像和算法, 所以在文献中经常被称为格子 Boltzmann 模型或方法 [46-49]. 格子气模型的早期研究可以追溯到 20 世纪 60 年代. 为了能够模拟连续流体系统, 特别是为了让那些在微介观层次上破缺的对称性在宏观上得到恢复, 格子气模型的构造必须遵从一定的条件 (包括对称性约束) [50].

人们习惯上将 1986 年的 Frisch-Hasslacher-Pomeau 模型 [41] 作为现代格子气模型、格子 Boltzmann 方法研究的起点. 在这个二维模型中, 使用三角网格来描述空间, 分布在网格点上的粒子只有沿着网格的六个运动方向, 这六个方向分别用  $\alpha = 1, 2, \dots, 6$  来表示. 在一个时间演化步内, 粒子的运动和粒子间的相互作用通过一个“传播”算符加上一个“碰撞”算符来描述. 这个模型的控制方程参见图 3 中的第一行. 其中, 右侧  $C_\alpha$  表示“碰撞”的贡献,  $n_\alpha(\mathbf{r}, t)$  表示在  $t$  时刻位于网格点  $\mathbf{r}$  位置运动方向为第  $\alpha$  个离散方向的粒子数. 在数值

模拟过程中, 首先,  $t$  时刻位于格点  $\mathbf{r}$  运动方向为  $\alpha$  的粒子在  $t + \Delta t$  时刻运动到了新的网格点位置  $\mathbf{r} + \mathbf{e}_\alpha \Delta t$ , 运动方向保持不变, 这个过程称为“传播”; 然后, 在粒子分布数  $n_\alpha(\mathbf{r} + \mathbf{e}_\alpha \Delta t, t + \Delta t)$  中加入粒子“碰撞”的贡献  $C_\alpha$ . 从格子气到离散 Boltzmann 的发展主要经历了如下几个阶段 (如图 3 所示): 在 1988 年人们开始使用分布函数  $f_\alpha(\mathbf{r}, t)$  取代粒子数  $n_\alpha(\mathbf{r}, t)$  [51]; 1989 年引入平衡分布函数  $f_\alpha^{\text{eq}}(\mathbf{r}, t)$ , 实现了碰撞算符的线性化 [52]; 在 20 世纪 90 年代初期, 进一步将碰撞算符简化为 Boltzmann 方程的 BGK 模型形式 [46-48]; 在 1997 年, 人们发现格子 Boltzmann 方法可以看作是 Boltzmann-BGK 方程的特殊离散化 [49]; 在 2012 年, 人们进一步找到了通过离散 Boltzmann 建模来研究系统内热动非平衡行为的具体方案 [36]. 到这里, (由格子气模型经过一系列改进逐步发展而来的) 离散 Boltzmann 方法已经不再仅仅是一种偏微分方程数值逼近解法, 而且成为一种全新的复杂系统非平衡行为建模方法 [37].

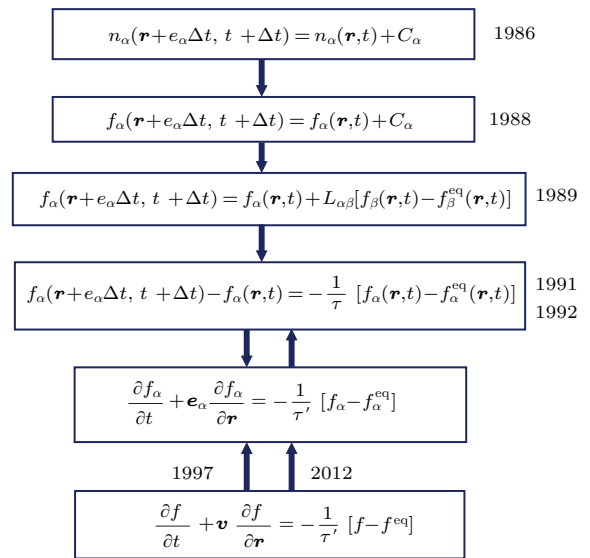


图 3 从格子气模型到离散 Boltzmann-BGK 模型的发展  
Fig. 3. Development from lattice gas model to discrete Boltzmann-BGK model.

容易看出, 初期格子 Boltzmann 方法当中的“传播+碰撞”模式实际上是时间导数和空间导数有限差分算法的一种特例. 除了这种特殊的有限分离散格式之外, 基于其他形式的有限分离散格式、以及其他非有限分离散格式的离散 Boltzmann 方法也获得了一些尝试与发展. 这样, 初期的格子 Boltzmann 被称为标准格子 Boltzmann; 后面出现的这些格子 Boltzmann 方法分别被称为有限差分格子 Boltzmann、有限体积格子 Boltzmann、有

限元格子 Boltzmann 等. 需要指出的是, 在这些方法的名称中虽然保留了“格子”的称谓, 但在有些具体的算法(例如有限差分离散 Boltzmann)中已经不再使用“传播+碰撞”的简单处理. 从发表的学术论文来看, 除了标准格子 Boltzmann 方法之外, 有限差分格子 Boltzmann 方面的工作最多 [38,53].

现代版本的离散 Boltzmann 建模直接从 Boltzmann-BGK 方程粒子速度空间的离散化开始. 我们以没有外力和化学反应等非理想气体效应、在连续极限下以 Navier-Stokes 方程为宏观对应模型的最简单情形为例来说明. 其基本思路如下: 1) Chapman-Enskog 多尺度分析告诉我们, 传统流体描述只包含了 Boltzmann 方程描述的部分信息; 2) 因为 Navier-Stokes 方程只涉及了 Boltzmann 方程中平衡态分布函数  $f^{eq}$  的前 7 个矩关系 (Chapman-Enskog 多尺度分析的更多细节和这 7 个矩关系将在后面给出), 所以在将粒子速度  $\mathbf{v}$  空间进行离散化的过程中, 只要保证这 7 个矩关系仍然能够满足, 那么离散化的 Boltzmann 方程就仍然能够描述 Navier-Stokes 方程能够描述的系统; 3) 需要指出的是, 恢复 Navier-Stokes 方程仅是这一离散 Boltzmann 方程的功能之一! 在这前 7 个动理学矩关系当中, 只有前 3 个中的  $f^{eq}$  可以被  $f$  所取代. 因为这前 3 个描述的是守恒矩 (密度、动量和能量).  $f^{eq}$  可以被  $f$  所取代, 描述的是三个基本守恒定律, 含义是: 系统在趋于或者远离热动平衡的过程当中, 系统的质量、动量、能量守恒. 其余的 4 个描述的是非守恒矩; 系统在趋于或者远离热动平衡的过程当中它们不守恒. 所以, 在其余的 4 个动理学矩关系式中, 如果将  $f^{eq}$  用  $f$  来取代, 那么方程的左右两侧可能就不再相等. 这种不等或者差异正是系统偏离热动平衡之后的宏观效应! 所以, 我们可以分别使用  $f$  和  $f^{eq}$  计算动理学矩, 这两个矩的差异描述的就是系统偏离热动平衡的具体状态.

将这些动理学矩写成坐标分量形式, 就会发现: 在 2 维情形, 连续极限下给出 Navier-Stokes 方程的离散 Boltzmann 模型可以提供 18 个描述热动非平衡效应的物理量, 其中 11 个是独立的. 这 11 个独立的非平衡效应量实际上是分别从 11 个不同的角度或侧面来描述系统偏离热动平衡的状态或系统偏离热动平衡的程度 [36,37]. 由这 11 个非平衡效应量可以进一步构建更加方便我们分析和使用的非平衡效应量. 在 3 维情形, 等级别的离散 Boltzmann 模型可以提供的非平衡效应量有 45 个, 其中 24 个是独立的.

由于在模拟的每一步  $f$  和  $f^{eq}$  都要计算, 而宏观守恒量和非平衡量分别是分布函数  $f$  的低阶矩和高阶矩, 所以离散 Boltzmann 模拟同时给出宏观流动特征及其相伴的 (部分) 非平衡效应. 由于在建模过程中要求所构建的离散 Boltzmann 模型在连续极限下给出 Navier-Stokes 方程, 所以这类离散 Boltzmann 模型给出的那部分非平衡效应恰恰是与我们关注的 (Navier-Stokes 方程所描述的) 宏观行为关系最密切的那一部分. 另外, Chapman-Enskog 多尺度分析告诉我们: Euler 方程描述根本没有考虑热动非平衡效应; 与 Euler 方程相比, Navier-Stokes 方程多出的也只有黏性项和热传导项. 其中, 热传导项和黏性项描述的就是部分 (热动) 非平衡效应. 所以, 根据离散 Boltzmann 建模与模拟, 我们可以有两种方法描述系统偏离热动平衡的状态或程度: 一种方法是直接比较分布函数  $f$  和平衡态分布函数  $f^{eq}$  的动理学矩; 另一种方法是直接使用 Chapman-Enskog 多尺度分析得到的热传导项和黏性项. 前者描述的是热动非平衡的具体状态, 是局域的; 后者描述的是这些局域热动非平衡效应对宏观控制方程的影响, 是非局域的. 从物理描述精度上讲, 前者“细致”, 后者“粗糙”.

非平衡系统的行为极其丰富、极其复杂. 是否将非平衡行为研究推向深入, 在很大程度上取决于能否找到有效的方法. 离散 Boltzmann 建模为复杂系统非平衡行为的描述、非平衡信息的提取、非平衡程度的度量提供了一种全新的、便于使用的思路和方法. 这可以看作是离散 Boltzmann 建模为非平衡统计物理学基本描述方法的贡献. 在非平衡效应较强、Navier-Stokes 方程需要修正的情形, 在模型构建时, 可以根据物理系统本身的特点适当增加需要满足的动理学矩关系来获得更合理的模拟结果 (包括更准确的密度、流速、温度、压强以及各非平衡效应描述量); 另外, 基于分子动力学等更小尺度模拟得到的统计信息容易通过非平衡效应建模进入离散 Boltzmann 模型. 在 Navier-Stokes 方程自身不需要修正的情形, 也可以通过适当增加需要满足的动理学矩关系来提高非平衡效应的描述精度. 其代价自然是需要使用更多的离散速度. 在实际应用过程中, 需要在物理描述需求和运算代价之间进行合理的平衡.

可见, 从 Boltzmann 方程这一“特殊离散化”出发可以派生出两个不同的研究方向, 这两个方向代表了离散 Boltzmann 方法研究现有的两种不同的建模目的和思路. 一种是将其作为一种全新的数

值求解 Navier-Stokes 等流体方程的离散方法, 进而将其思路进行推广, 用于求解其他类型的偏微分方程; 另一种是将其作为一种全新的包含更多动理学信息的微介观动理学模型构建方法. 数值解法研究和物理建模研究的主要区别在于: 前者必须忠于原始模型(由控制方程描述); 而后者必须具有部分超越原始模型的功能. 由于这两类模型构建的目的不同, 所以在构建过程中需要使用的物理判据也就不同. 在目前已经发表的关于格子 Boltzmann 方法或模型的文献中, 绝大部分工作都是基于第一种建模思路的. 既然是数值解法, 那么人们关注的就是它的数值精度(即对原始控制方程的忠诚度)和运算效率等; 只要计算的结果正确, 具体计算细节是否有物理对应、对应的合理程度如何可以不予深究. 但如果将离散 Boltzmann 方法看作是比 Navier-Stokes 方程描述包含更多微介观动理学信息的物理模型, 那么对其建模过程所要遵循的物理要求自然会提高一些; 提高到什么程度, 视具体问题研究的需求而定. 例如, 在有些 LBM 构建过程中, 使用  $\Delta t = \varepsilon$  或  $\Delta t = \tau$  这一处理方法. 这里  $\varepsilon$  是 Knudsen 数, 其定义为分子的平均间距  $l$  与某一宏观空间尺度  $L$ (例如系统的空间尺度)之比或者热力学弛豫时间  $\tau$  与上述宏观尺度对应的时间尺度  $t_L$  之比, 即

$$\varepsilon = \frac{l}{L} = \frac{\tau}{t_L}. \quad (12)$$

在后一种处理方法( $\Delta t = \tau$ )中, 通常认为 Knudsen 数  $\varepsilon$  已被吸收在松弛时间  $\tau$  当中, 所以二者原则上是等价的. 因为这些模型的构建研究目的是模拟或求解某类偏微分方程, 其含义是当时间步长  $\Delta t$  趋于零时, LBM 模拟结果将与被求解方程趋于一致<sup>[54]</sup>. 这在数学上是合理的. 但如果用物理模型的标准来看,  $\Delta t$  是数值积分的时间步长, 其大小对应数值模拟精度的高低; 而如果将  $L$  视为系统或系统内某一介观结构的宏观尺度, 则  $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{r}, t)$  描述的是分子的疏密状态随空间和时间的变化, 代表的是系统的动理学状态;  $\tau$  描述的是系统由热动非平衡态趋于热动平衡态的时间尺度, 是由系统自身的动理学特性决定的.  $\varepsilon$  和  $\tau$  都是客观的, 是不能随着数值积分步长  $\Delta t$  的改变而改变的. 再例如, 在有些 LBM 构建过程中, 为了模拟含温度场的流体方程组, 系统的密度  $\rho$  和流速  $\mathbf{u}$  使用一个分布函数来描述, 而温度  $T$  则使用另外一个分布函数来描述<sup>[38,53]</sup>. 显然, 这里的分布函数已经不是统计物理学中所定义分布函数了. 只是因为构建这些

LBM 的目的是模拟相应的偏微分控制方程组, 所以只要其最终的数值结果与原始控制方程组相符即可.

鉴于抛开了原始格子气模型的“传播+碰撞”这一简单操作之后, “格子(lattice)” Boltzmann 的名称就失去了直观的含义; 同时鉴于在文献中格子 Boltzmann 方法已经被广泛接受为求解 Navier-Stokes 等偏微分方程的一种数值方法, 所以在本文后面的主要叙述中我们做如下约定: 在介绍将离散 Boltzmann 作为偏微分方程数值算法的工作时, 仍沿用文献中的习惯叫法“格子 Boltzmann 方法”或 LBM; 在介绍将离散 Boltzmann 作为复杂系统微介观粗粒化物理建模的工作时, 直接使用简单名称“离散 Boltzmann 建模”, “离散 Boltzmann 方法”或 DBM. 这里的“离散”指的不是时间和空间的离散, 而是指粒子速度空间的特殊离散化处理.

离散 Boltzmann 的诞生已有近 30 年的历史, 其理论和应用研究已渗透到诸多学科和研究领域. 时至今日, 仍然是国际热点研究课题之一.

## 2.4 作为数值解法的 LBM 研究进展概述

在最近的 30 年当中, LBM 作为一种新的计算流体力学工具引发了广泛的兴趣, 取得了突飞猛进的进展. 如果使用 google scholar 输入“Lattice Boltzmann”进行搜索, 立即会发现约 41 万余条信息(搜索时间: 2014 年 12 月 22 日 18:22). 2013 年 11 月 19 日的搜索结果 282000 条信息, 平均每个月增加 1 万条信息. 其中, 以等温低速不可压流体系统模拟为代表, LBM 已经广泛应用于各类复杂流体系统<sup>[55-80]</sup>(这里列出的参考文献仅是少数实例). 这些研究也分为两类: 一类是构造相应系统控制方程的 LBM 算法, 一类是通过使用 LBM 方法模拟原始控制方程来研究物理问题. 相当一部分研究论文二者兼顾: 以物理研究为目的, 但在方法方面也有所改进.

## 2.5 作为微介观粗粒化物理建模的 DBM 研究进展概述

从物理建模的角度看, 格子气、元胞自动机模型本身就是为研究复杂系统中的复杂行为而提出的一种微介观、粗粒化物理建模. 作为非平衡统计物理学基本方程——Boltzmann 方程特殊离散化的离散 Boltzmann 方法理应也是复杂系统的一种微介观、粗粒化模型, 非平衡效应研究理应是其

重要内容之一. 这一信念一直存在, 但由于缺乏有效的方案, 在近30年的时间里离散 Boltzmann 方法仅仅在第一条思路——作为偏微分方程数值求解方法方面获得了广泛研究和应用. 近年来, 有些工作尝试使用离散 Boltzmann 方法模拟微管道流、边界层流等问题(相对于宏观连续流体系统, 那里的 Knudsen 数相对较高), 有些突破传统流体连续介质建模成立的范围. 这个研究方向不在本文的讨论范围之内. 在本文中我们关心的是含有较多界面和微介观结构的多尺度复杂流体系统, 这类系统的尺度远大于微管道流的管径和边界层的厚度. 最早基于离散 Boltzmann 建模来发展非平衡行为描述方法, 给出从模拟结果中提取非平衡效应具体方案的工作出现于2012年的一篇综述<sup>[36]</sup>. 随后, 在燃烧与爆轰系统<sup>[81-83]</sup>、多相流系统<sup>[84,85]</sup>、Richtmyer-Meshkov 不稳定性系统<sup>[86,87]</sup>、Rayleigh-Taylor 不稳定性系统<sup>[37,88,89]</sup>、Kelvin-Helmholtz 不稳定性系统<sup>[37,90]</sup>得到了逐步的推广与应用.

这里, 我们简单地比较一下离散 Boltzmann 模拟与传统流体力学 (computational fluid dynamics, CFD) 模拟的异同. 我们以最简单的理想气体系统为例来说明. 1) 传统 CFD 需要先确定控制方程的具体形式, 然后根据控制方程的特点设计算法; 而 DBM 是 Boltzmann 方程的二次粗粒化物理建模, 原则上它无需准确地知道宏观流体控制方程的具体细节, 可以在未知宏观流体控制方程的情形下给出物理上合理的结果. 例如, 只要我们在离散化粒子速度空间时考虑足够多的动理学矩关系, 就能保证 DBM 给出的结果在物理上是合理的. 2) 恢复宏观流体控制方程仅是 DBM 的功能之一. 从物理上讲, 在连续极限下 DBM 相当于一个宏观流体模型外加一个热动非平衡效应的粗粒化模型. 3) 基于 DBM 建模思路, 可以较容易地实现一大类复杂系统的多尺度物理建模. 例如, 我们可以根据局域 Knudsen 数来构建开关函数, 在局域 Knudsen 数接近于零的情形, 使用最简单 (离散速度数目最少) 的离散速度模型 (来自于恢复 Euler 方程所要求的前5个动理学矩关系); 在局域 Knudsen 数大一些时, 使用稍复杂 (离散速度数目稍多一些) 的离散速度模型 (来自于恢复 Navier-Stokes 方程所要求的前7个动理学矩关系); 在局域 Knudsen 数再大一些时, 使用再复杂 (离散速度数目再多一些) 的离散速度模型 (满足的动理学矩关系再适当增加一些). 反过来, 当局域 Knudsen 数降低到一定程度后, 该 DBM 自适应地换回较简单的离散速度模型. 在离散速

度模型调换的第一步, 可以使用粗粒化物理建模  $f = f^{eq}$ .

### 3 燃烧系统的离散 Boltzmann 建模与模拟

#### 3.1 作为数值解法的 LBM 研究进展

由于燃烧问题的重要性, 燃烧系统的 LBM 模拟很早就引起人们的关注. 但在早期的工作中, LBM 是作为相应燃烧系统控制方程的一种新的模拟方法而出现的. 最早的尝试是由 Succi 等在1997年完成的<sup>[91]</sup>. 他们在化学反应极快、热量释放率极低的冷火焰假设下就甲烷和空气的层流火焰模拟出一些基本行为. 随后, 几个典型的 LBM 工作分别来自 Filippova 等<sup>[92-94]</sup>, Yu 等<sup>[95]</sup>, Yamamoto 等<sup>[96-98]</sup>, Lee 等<sup>[99]</sup>, Chiavazzo 等<sup>[100-102]</sup> 和 Chen 等<sup>[103-110]</sup>. 由于在这些工作中, LBM 的作用是模拟原始控制方程, 所以与物理建模改进无关; 其研究内容自然是基于原始物理建模的, 是原始控制方程 (借助于其他的数值离散方法) 也可以做的. 并且, 由于早期的 LBM 主要是针对等温低速近似不可压流体系统而设计的, 所以后来为了能够模拟含温度场的流体系统, 部分工作引入了双分布函数 LBM. 在这类 LBM 中, 一般处理方法是: 整个系统的密度和流速用一个分布函数来描述, 而温度用另外一个分布函数来描述; 有些模型甚至干脆忽略化学反应热对流场的影响. 在2012年之前出现的所有燃烧问题的 LBM 研究都是将 LBM 视为原始控制方程的一种数值求解方法, 并且模拟的都是一些相对简单的情形; 高马赫燃烧的 LBM 模拟一直未见报道, 爆轰问题的 LBM 建模与模拟更是从未涉及. 近年来, Chen 等<sup>[103-110]</sup> 使用他们所构造的 LBM 就低马赫燃烧问题进行模拟研究, 取得一些有意义的结果.

#### 3.2 作为微介观粗粒化模型的 DBM 出现的背景

作为燃烧的一种特例, 爆炸是一个伴有大量能量释放的化学反应传输过程. 它经常引发事故和灾难, 但受控的爆炸已经成为一门高科技, 广泛应用于国防技术与工业生产当中. 例如, 爆炸喷涂、爆炸清洗、爆炸加工、爆炸推进、爆炸开采、爆炸掘进等. 爆轰, 又称爆震, 其反应区前沿为一以超声速运动的冲击波, 称为爆轰波. 爆轰波扫过后, 介



质成为高温高压的爆轰产物. 鉴于燃烧与爆轰技术在科学和工程领域的广泛应用, 其理论和实验研究很早就引起人们的广泛兴趣. 早在19世纪末20世纪初, Chapman<sup>[18]</sup> 和 Jouguet<sup>[19]</sup> 就提出了著名的CJ理论. 这一理论将爆轰波视为一个强间断, 即在爆轰波扫过后化学反应瞬间完成. 在20世纪初, Zeldovich<sup>[20]</sup>, Neumann<sup>[21]</sup> 和 Doering<sup>[22]</sup> 发展了著名的ZND模型. 这个模型的重要贡献之一在于它指出了在爆轰波前沿存在一个 von Neumann峰; 反应物首先经过冲击波的预压缩, 然后在冲击波后紧接着有一个连续的反应区. 在反应区内部系统的密度、温度、压强和流速到达最大值.

尽管爆轰研究已有100多年的历史, 但时至今日, 它仍然是国际热点研究问题之一. 到目前为止, 几乎所有获得广泛应用的化学反应模型均是唯象的或半唯象的<sup>[111]</sup>. 例如, Arrhenius反应率、forest fire燃烧模型、两步模型、Cochran反应率模型<sup>[112]</sup>, Lee-Tarver模型<sup>[113]</sup>等. 在实际应用过程中需要根据具体问题选择合适的化学反应模型. 能够发生爆轰的系统可以是气相、液相、固相或气-液、气-固和液-固等混合相组成的系统. 本文只涉及流体建模适用的系统. 当将“燃烧”与“爆轰”两个名词放在一起进行讨论时, “燃烧”便只描述“爆轰”以外的其他燃烧形式.

在相当一部分燃烧过程中, 化学反应速率和能量转换率对燃烧过程起着重要影响(例如, 着火、熄灭、火焰传播等均与化学反应动力学过程密切相关), 并且化学反应过程决定了所有燃烧过程中污染物的生成与破坏. 实际的燃烧过程涉及广泛的时间和空间尺度. 典型的时间尺度从 $10^{-13}$  s到 $10^{-3}$  s, 跨越10个数量级, 典型的空间尺度涉及从 $10^{-10}$  m到1 m, 也是跨越10个数量级<sup>[114]</sup>. 所以, 我们需要从微观、介观和宏观的多个层面对燃烧问题进行分解与整合研究.

传统流体力学已经用于研究燃烧和爆轰多年, 但除了上面提到的几种极端或理想情形之外, 以前的LBM尚不具备模拟那些既定控制方程的能力, 物理模型改进更无从谈起. 其中, 很重要的原因之一就是以前发展的比较成功的LBM均是针对等温低速不可压流体系统的. 要模拟高马赫燃烧与爆轰问题, 第一个技术瓶颈就是需要将离散 Boltzmann模拟的范围推广到马赫数大于1的可压流体系统. 近年来, 我们课题组在这方面进行了大量探索, 取得了一系列进展, 使得冲击与爆轰问题的模拟成为可能<sup>[36,37,115-123]</sup>. 其中, 既包含作为高速可压流

体方程组数值解法的探索, 也包含作为高速可压流体系统微介观动理学建模的探索; 既包含单松弛因子模型, 又包含多松弛因子模型. 所构建的离散 Boltzmann模型均实现了用同一个分布函数同时描述密度 $\rho$ 、温度 $T$ 、流速 $\mathbf{u}$ 、压强 $P$ 以及相关的高阶矩; 既适用于高速可压流体, 又适用于低速近似不可压流体.

为了模拟高马赫数燃烧和爆轰问题, 下面我们讨论如何从微介观粗粒化物理建模的角度构建离散 Boltzmann模型. 正如前面所述, 与传统流体模型相比, 这类模型具有更加坚实的动理学基础, 在连续极限下恢复传统流体控制方程仅是其功能之一.

### 3.3 燃烧系统的 Boltzmann 建模

最近30年来爆轰问题的模拟得到了迅速的发展, 但两个技术问题仍然在困扰着宏观物理建模, 一是爆轰波阵面的合理描述, 一是化学反应放能过程中非平衡效应的描述. 就第一个问题, 传统方法可以处理间断面, 但不易忠实地描述波阵面的精细物理结构; 就第二个问题, 有些反应放能过程会引发热动非平衡行为, 而宏观流体 Navier-Stokes建模并未充分描述这部分非平衡效应. 由于前面已经提到的原因, 我们可以从 Boltzmann方程出发构建与 Navier-Stokes相比包含更多微介观动理学信息的介观描述.

下面以包含化学反应项的 Boltzmann-BGK方程

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f = -\frac{1}{\tau}(f - f^{\text{eq}}) + C \quad (13)$$

为例来讨论燃烧系统的动理学建模问题. 其中 $f$  ( $f^{\text{eq}}$ )为(平衡态)分布函数;  $\tau$ 为松弛时间;  $\mathbf{v}$ 为粒子速度;  $C$ 为化学反应项, 描述由于化学反应而引起的分布函数 $f$ 的变化率. 我们考虑如下假设成立的情形.

1) 系统中只有两种介质: 反应物和产物, 其密度分别为 $\rho_R$ 和 $\rho_P$ . 整个流场可以用一个单粒子分布函数 $f$ 来描述, 松弛时间 $\tau$ 对密度和温度的依赖可以暂时忽略.

2) 热辐射可以忽略.

3) 化学反应的时间尺度 $t_C$ 远大于分子热力学弛豫的时间尺度 $\tau$ (即 $\tau \ll t_C$ , 例如, 常温常压条件下氢气系统的热力学弛豫时间为 $10^{-10}$  s量级, 而氢气爆燃或爆轰的时间尺度为 $10^{-5}$  s量级), 以至于可以近似认为: 在整个化学反应过程中系统始终

处于热动平衡态. 这样, 我们有

$$\begin{aligned} C &= -\frac{1}{\tau} (f^{\text{eq}} - f^{*\text{eq}}), \\ f^{\text{eq}} &= f^{\text{eq}}(\rho, \mathbf{u}, T), \\ f^{*\text{eq}} &= f^{*\text{eq}}(\rho, \mathbf{u}, T^*). \end{aligned} \quad (14)$$

4) 化学反应不可逆, 反应进程由下面的反应率方程来描述:

$$\frac{d\lambda}{dt} = F(\lambda), \quad (15)$$

其中  $\lambda = \rho_P/\rho$  是化学反应进程参数. 这样,

$$T^* = T + \tau Q F(\lambda), \quad (16)$$

其中  $Q$  为单位质量的反应物发生反应后可以释放出的热量.

由关系式(14)—(16)可见, 化学反应项  $C$  的相对强弱不仅取决于化学反应的速率, 而且受单位质量反应物燃烧后放出的热量  $Q$  的影响. 即便是化学反应速率很快, 但如果  $Q \approx 0$ , 那么化学反应项  $C$  的贡献也可能较小. 为便于分析, 可以将反应热  $Q$  吸收到反应率方程  $G(\lambda) = QF(\lambda)$  中去. Chapman-Enskog 多尺度分析表明, 该 Boltzmann 模型在连续极限下均包含如下的 Navier-Stokes 模型:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (17)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla(P\mathbf{I} + \rho \mathbf{u} \mathbf{u}) \\ + \nabla \cdot [\mu(\nabla \mathbf{u})\mathbf{I} - \mu(\nabla \mathbf{u})^T - \mu \nabla \mathbf{u}] = \mathbf{0}, \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left( \rho E + \frac{1}{2} \rho u^2 \right) + \nabla \left[ \rho \mathbf{u} \left( E + \frac{1}{2} u^2 + \frac{P}{\rho} \right) \right] \\ - \nabla \left[ \kappa \nabla E + \mu \mathbf{u} \cdot (\nabla \mathbf{u}) - \mu \mathbf{u} (\nabla \cdot \mathbf{u}) + \frac{1}{2} \mu \nabla u^2 \right] \\ = \rho Q F(\lambda), \end{aligned} \quad (19)$$

其中  $\mu (= P\tau)$  和  $\kappa (= 2P\tau)$  分别为黏性和热传导系数.

### 3.4 燃烧系统的离散 Boltzmann 建模

由于粒子速度  $\mathbf{v}$  空间的连续性, 燃烧系统的 Boltzmann 模型仍不便于直接做模拟. 与没有化学反应的流体系统一样, 我们需要将 Boltzmann 模型在粒子速度空间中做离散化. 由于单松弛因子模型是多松弛因子模型的特例, 所以燃烧系统的离散 Boltzmann 模型可以统一用下式描述<sup>[83]</sup>:

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + v_{i\alpha} \frac{\partial f_i}{\partial r_\alpha}$$

$$= -M_{il}^{-1} \left[ \hat{R}_{lk} \left( \hat{f}_k - \hat{f}_k^{\text{eq}} \right) + \hat{A}_l \right] + C_i,$$

$$C_i = \left. \frac{df_i}{dt} \right|_C, \quad (20)$$

在单松弛因子情形,  $R_1 = R_2 = \dots = R_N = 1/\tau$ , 修正项  $\hat{A}_l = 0$ ,  $C_i = \frac{1}{\tau} (f_i^{*\text{eq}} - f_i^{\text{eq}})$ ,  $f^{*\text{eq}} = f^{*\text{eq}}(\rho, \mathbf{u}, T + \tau Q F(\lambda))$ ,  $f^{\text{eq}} = f^{\text{eq}}(\rho, \mathbf{u}, T)$ . 在多松弛因子模型情形, Chapman-Enskog 多尺度分析按如下方式展开:

$$\begin{cases} f_i = f_i^{(0)} + f_i^{(1)} + f_i^{(2)} + \dots, \\ A_i = A_{1i}, \\ C_i = C_{1i}, \\ \frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t_1} + \frac{\partial}{\partial t_2} + \dots, \\ \frac{\partial}{\partial r_\alpha} = \frac{\partial}{\partial r_{1\alpha}}. \end{cases} \quad (21)$$

修正项  $A_i$  必须是 Knudsen 数  $\varepsilon$  的一阶项, 即  $A_{1i} = O(\varepsilon)$ .

#### 3.4.1 单松弛因子模型

我们先介绍两个单松弛因子模型. 2013年我们课题组给出燃烧和爆轰系统的第一个离散 Boltzmann 模型<sup>[81]</sup>, 这是一个基于笛卡尔坐标系的简单模型. 在该模型中, 流体行为使用我们以前发展的一个高速可压流体离散 Boltzmann 模型<sup>[116]</sup>描述, 化学反应使用目前应用较多的反应率模型之一——Lee-Tarver 模型<sup>[113]</sup>描述. 相对于以前的 LBM 燃烧模型, 该模型实现了密度  $\rho$ 、流速  $\mathbf{u}$ 、温度  $T$ 、压强  $P$  以及相关的高阶矩皆使用同一个分布函数  $f_i$  来描述的物理要求, 实现了化学反应放能过程与流体动力学过程的自然耦合.

Lee-Tarver 反应率模型

$$\frac{d\lambda}{dt} = I(1-\lambda)^x \eta^r + G(1-\lambda)^x \lambda^y P^z \quad (22)$$

由两项构成: 点火项和成长项. 前者多用于研究各种热点的形成和随后的生长, 后者多用于描述化学反应的成长过程. 其中,  $\eta = (V_0/V) - 1$  为相对压缩度;  $V_0$  和  $V$  分别为反应前后的比体积, 与相应密度  $\rho$  的关系分别为  $V_0 = 1/\rho_0$ ,  $V = 1/\rho$ ;  $I, G, x, y, z, r$  为模型参数, 其中  $G, x, y$  描述的是反应率对燃烧面积等的依赖度, 参数  $G$  也依赖于入射冲击波的压力;  $P^z$  描述的是局域压力对反应率的影响方式.

该离散 Boltzmann 模型使用如下形式的离散

速度模型:

$$\begin{cases} \mathbf{v}_0 = 0, \\ \mathbf{v}_{ki} = v_k \left[ \cos\left(\frac{i\pi}{4}\right), \sin\left(\frac{i\pi}{4}\right) \right], \\ (k = 1, 2, 3, 4; i = 1, 2, \dots, 8), \end{cases} \quad (23)$$

它有33个速度分量,下标  $k$  和  $i$  分别表示第  $k$  层第  $i$  个方向,如图4所示.

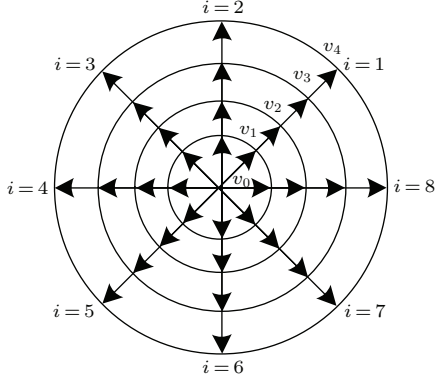


图4 离散速度模型示意图

Fig. 4. Schematic of the discrete velocity model.

平衡态分布函数通过如下的 Taylor 展示来计算:

$$\begin{aligned} f_{ki}^{\text{eq}} = & \rho F_k \left[ \left( 1 - \frac{u^2}{2T} + \frac{u^4}{8T^2} \right) + \frac{v_{ki\epsilon} u_\epsilon}{T} \left( 1 - \frac{u^2}{2T} \right) \right. \\ & + \frac{v_{ki\epsilon} v_{ki\pi} u_\epsilon u_\pi}{2T^2} \left( 1 - \frac{u^2}{2T} \right) \\ & + \frac{v_{ki\epsilon} v_{ki\pi} v_{ki\vartheta} u_\epsilon u_\pi u_\vartheta}{6T^3} \\ & \left. + \frac{v_{ki\epsilon} v_{ki\pi} v_{ki\vartheta} v_{ki\xi} u_\epsilon u_\pi u_\vartheta u_\xi}{24T^4} \right], \quad (24) \end{aligned}$$

上式中  $T$  为局域温度,权重系数  $F_k$  和  $F_0$  的计算公式如下:

$$\begin{aligned} F_k = & \frac{1}{v_k^2 (v_k^2 - v_{k+1}^2) (v_k^2 - v_{k+2}^2) (v_k^2 - v_{k+3}^2)} \\ & \times \left[ 48T^4 - 6(v_{k+1}^2 + v_{k+2}^2 + v_{k+3}^2)T^3 \right. \\ & + (v_{k+1}^2 v_{k+2}^2 + v_{k+2}^2 v_{k+3}^2 + v_{k+3}^2 v_{k+1}^2)T^2 \\ & \left. - \frac{v_{k+1}^2 v_{k+2}^2 v_{k+3}^2}{4} T \right], \\ & k = 1, 2, 3, 4; \quad (25) \end{aligned}$$

$$F_0 = 1 - 8(F_1 + F_2 + F_3 + F_4); \quad (26)$$

$$\{k+l\} = \begin{cases} k+l, & \text{if } k+l \leq 4, \\ k+l-4, & \text{if } k+l > 4. \end{cases} \quad (27)$$

我们选取  $v_0 = 0$  和四个非零的  $v_k$  ( $k = 1, 2, 3, 4$ ). 这个模型的构建要求:平衡态分布函数  $f$  前7个动

理学矩关系的积分形式可以写为求和形式. 具体如下:

$$\sum_{ki} f_{ki}^{\text{eq}} = \rho, \quad (28)$$

$$\sum_{ki} \mathbf{v}_{ki} f_{ki}^{\text{eq}} = \rho \mathbf{u}, \quad (29)$$

$$\begin{aligned} \sum_{ki} \frac{1}{2} v_{ki}^2 f_{ki}^{\text{eq}} &= e_{\text{therm}} + \frac{1}{2} \rho u^2 = \rho T + \frac{1}{2} \rho u^2 \\ &= P + \frac{1}{2} \rho u^2, \quad (30) \end{aligned}$$

$$\sum_{ki} v_{ki\alpha} v_{ki\beta} f_{ki}^{\text{eq}} = e_{\text{therm}} \delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta, \quad (31)$$

$$\begin{aligned} \sum_{ki} v_{ki\alpha} v_{ki\beta} v_{ki\gamma} f_{ki}^{\text{eq}} \\ = e_{\text{therm}} (u_\gamma \delta_{\alpha\beta} + u_\alpha \delta_{\beta\gamma} + u_\beta \delta_{\gamma\alpha}) \\ + \rho u_\alpha u_\beta u_\gamma, \quad (32) \end{aligned}$$

$$\sum_{ki} \frac{1}{2} v_k^2 v_{ki\alpha} f_{ki}^{\text{eq}} = 2e_{\text{therm}} u_\alpha + \frac{1}{2} \rho u^2 u_\alpha, \quad (33)$$

$$\begin{aligned} \sum_{ki} \frac{1}{2} v_k^2 v_{ki\alpha} v_{ki\beta} f_{ki}^{\text{eq}} \\ = \left( 2T + \frac{1}{2} u^2 \right) e_{\text{therm}} \delta_{\alpha\beta} + \left( 3e_{\text{therm}} \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \rho u^2 \right) u_\alpha u_\beta, \quad (34) \end{aligned}$$

式中右边为平衡态分布函数动理学矩关系的积分形式,已经直接表示为宏观量的表达式;  $e_{\text{therm}}$  为热力学内能. 作为这类工作的开始和模型构建的例子,我们只考虑了最简单情形的反应率模型:令  $x = y = 1$ ,  $a = I\eta^r$ ,  $b = GP^z$ . 这样, Lee-Tarver 模型简化为

$$\frac{d\lambda}{dt} = \begin{cases} a(1-\lambda) + b(1-\lambda)\lambda, \\ T \geq T_{\text{th}} \text{ 且 } 0 \leq \lambda \leq 1, \\ 0, \quad \text{其他} \end{cases} \quad (35)$$

其中  $T_{\text{th}}$  为燃烧发生的临界温度. 由于化学反应的速率比流动过程要快得多,所以成功模拟的一个关键技术为分裂算子思想的使用. 从物理上,可将上述反应率方程理解为反应产物所占份额的变化由两部分构成:1)局域流动导致的变化,2)化学反应导致的变化. 即在满足反应条件 ( $T \geq T_{\text{th}}$ ) 时,

$$\begin{cases} \frac{\partial \lambda}{\partial t} + u \nabla \lambda = 0, \\ \frac{\partial \lambda}{\partial t} = a(1-\lambda) + b(1-\lambda)\lambda. \end{cases} \quad (36)$$

局域流动导致的变化使用一阶迎风格式计算:

$$\frac{\lambda_j^{n+1} - \lambda_j^n}{\Delta t} = - \begin{cases} \frac{u(\lambda_j^n - \lambda_{j-1}^n)}{\Delta x} & u \geq 0, \\ \frac{u(\lambda_{j+1}^n - \lambda_j^n)}{\Delta x} & u < 0. \end{cases} \quad (37)$$

化学反应导致的变化使用解析解:

$$\lambda = \frac{e^{(a+b)t} + \frac{a(\lambda - 1)}{a + b\lambda}}{e^{(a+b)t} + \frac{b(1 - \lambda)}{a + b\lambda}}. \quad (38)$$

其中下标  $j - 1, j, j + 1$  为  $x$  或  $y$  方向的网格点编号. 在实际模拟中, 系统的局域总内能变化率为

$$\dot{e} = \dot{e}_{\text{therm}} + \dot{e}_{\text{chem}}, \dot{e}_{\text{chem}} = R(\lambda) \rho Q, \quad (39)$$

其中,  $e = \rho E$ . 化学反应过程与流动过程的耦合流程如下: 化学反应放热导致局域内能增加, 局域内能增加导致局域压强增大, 局域压强的增大进一步影响局域流场的行为. 这样, 放能过程与流动过程实现了自然耦合. 在该模型中化学反应的引入并没有引起所需动理学矩关系的增多, 从而所需离散速度数目并没有增多.

模型的有效性通过如下一些典型问题获得验证和确认: 1) 黏性爆轰的活塞问题; 2) 热起爆问题; 3) 爆轰波与冲击波的碰撞问题; 4) 爆轰波的规则与马赫反射; 5) Richtmyer-Meshkov 不稳定性问题; 6) 黏性爆轰的相图. 作为应用的一个实例, 我们研究了一维稳定爆轰波问题. 为了展现离散 Boltzmann 建模的优势, 我们将注意力集中在反应区及其邻域, 重点研究其中的热动非平衡行为. 研究表明: 一般情形下, 化学反应区从 von Neumann

压强峰之前开始, 跨越 von Neumann 压强峰. 在 von Neumann 压强峰之前只存在升温机理, 在 von Neumann 压强峰之后, 化学反应放热引起的升温与反应产物膨胀引起的降温机理并存. von Neumann 压强峰不是温度的极大值点. 温度的峰值一般在 von Neumann 压强峰之后. 密度、流速、温度、压强等物理量最大值点(峰值点)的不重合是系统在 von Neumann 压强峰处无法完全恢复到热动平衡的原因. 系统黏性的增大有两个效应: 一是系统在 von Neumann 压强峰处更加接近热动平衡态, 二是在 von Neumann 压强峰前后系统偏离热动平衡的幅度加大. 在化学反应速率极低的情形下, 与纯粹冲击情形的区别是: 从化学反应启动到跨过 von Neumann 压强峰, 进一步到化学反应结束之前的这一较宽区域内, 温度一直在升高. 温度从上升到最后的稳定, 不存在极大值点. 所以, 从冲击响应过程开始到化学反应结束, 系统始终处在热动非平衡态. 在反应速率极高的情形下, 在压强上升到 von Neumann 峰之前化学反应已经结束. 在此情形下, von Neumann 压强峰后不再有升温机理.

为了模拟柱状轴向均匀系统的内爆和外爆问题, 2014年我们课题组给出了一个基于极坐标的离散 Boltzmann 模型<sup>[82]</sup>. 该模型的离散速度模型和边界条件设置如图5所示.

在这个模型中, 使用的是 Cochran 反应率函数<sup>[111,112]</sup>:

$$R(\lambda) = \omega_1 P^m (1 - \lambda) + \omega_2 P^n \lambda (1 - \lambda), \quad (40)$$

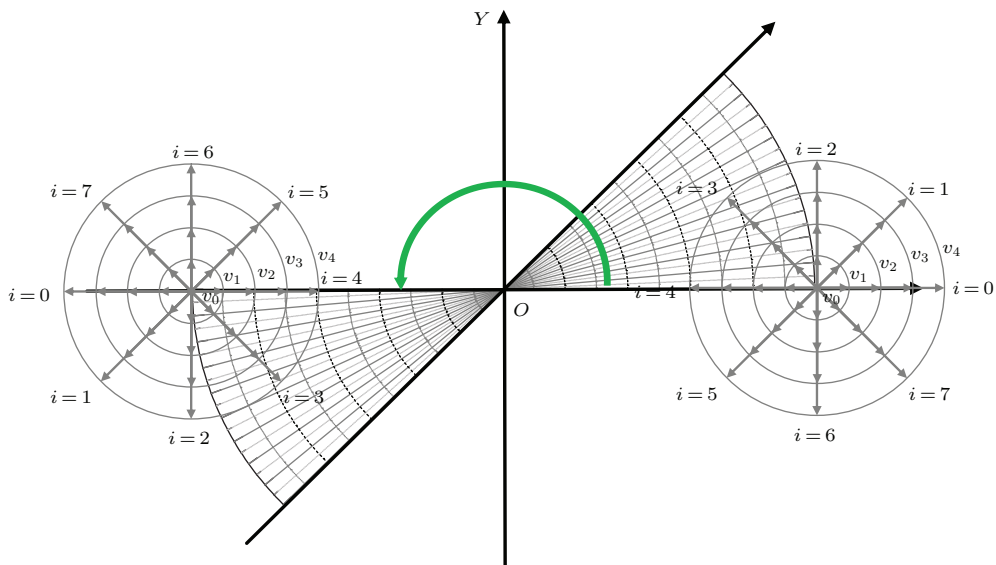


图5 离散速度模型与周期边界条件设置示意图

Fig. 5. Schematic of the discrete velocity model and the periodic boundary conditions.

其中, 第一项为热点形成项, 第二项为增长项; 系数  $P^m$  和  $P^n$  描述的压强对反应率的影响;  $\omega_1, \omega_2$ ,  $m$  和  $n$  是可调参数. 点火条件为  $T > T_{th}$ . 不失一般性, 这里我们取  $m = n = 1$ ,  $T_{th} = 1.1$ . 为方便起见, 引入参数  $a = \omega_1 P^m$ ,  $b = \omega_2 P^n$ ,  $\lambda = \lambda_{i_r} = \lambda_{i_\theta} = \lambda(i_r, i_\theta, t)$ . 其中,  $i_r$  和  $i_\theta$  分别为径向和角向的网格点编号. 具有一阶精度的 Cochran 反应进程方程为

$$\lambda^{t+\Delta t} = \frac{(a+b\lambda)e^{(a+b)\Delta t} - a(1-\lambda)}{(a+b\lambda)e^{(a+b)\Delta t} + a(1-\lambda)} + \lambda_{i_r}^* + \lambda_{i_\theta}^*, \quad (41)$$

其中,

$$\lambda_{i_r}^* = \begin{cases} -\frac{u_r(\lambda_{i_r} - \lambda_{i_r-1})}{\Delta r} \Delta t, & \text{for } u_r \geq 0, \\ -\frac{u_r(\lambda_{i_r+1} - \lambda_{i_r})}{\Delta r} \Delta t, & \text{for } u_r < 0, \end{cases} \quad (42)$$

$$\lambda_{i_\theta}^* = \begin{cases} -\frac{u_\theta(\lambda_{i_\theta} - \lambda_{i_\theta-1})}{r\Delta\theta} \Delta t, & \text{for } u_\theta \geq 0, \\ -\frac{u_\theta(\lambda_{i_\theta+1} - \lambda_{i_\theta})}{r\Delta\theta} \Delta t, & \text{for } u_\theta < 0. \end{cases} \quad (43)$$

在数值实验中,  $\lambda, \mathbf{u}, P$  由分布函数  $f_{ki}$  获得. 同样, 这一离散 Boltzmann 模型在连续极限下包含基于极坐标的传统流体模型即含化学反应的 Navier-Stokes 方程组. 除了使用典型算例对新模型进行校

验以外, 我们还将新模型用于燃烧或爆炸过程中非平衡行为的研究. 图 6 给出了下面的初始条件

$$\begin{cases} (\rho, T, u_r, u_\theta, \lambda)_i = (1, 1, 0, 0, 0), \\ (\rho, T, u_r, u_\theta, \lambda)_o \\ = (1.5, 1.55556, -0.666667, 0, 1), \end{cases} \quad (44)$$

引发的内爆过程中不同时刻的宏观量和一个非平衡量  $\Delta_{2,rr}^*$  的空间分布. 这里爆轰波前区域在内部:  $0 \leq r \leq 0.098$ , 爆轰波后区域在外部:  $0.098 < r \leq 0.1$ . 其他参数如下:  $\tau = 2 \times 10^{-4}$ ,  $\Delta t = 2.5 \times 10^{-6}$ ,  $\omega_1 = 1$ ,  $\omega_2 = 50$ . 从图 6 中可以看到由于几何效应而导致的与一维稳定爆轰情形的明显区别: 1) 整个过程可以大体分为两个阶段, 在第一阶段, 爆轰波向内传播, 波后的密度、温度、压强由于几何汇聚效应而升高, 当爆轰波到达中心处那一瞬间, 密度、温度、压强达到极大值, 而速度降低到 0; 随后是压缩波的向外传播; 2) 非平衡效应是由也存在着一个向圆心运动, 发生碰撞后发射向外传播的过程; 3) 在化学反应结束后, 爆轰波退变为纯粹的冲击波, 站在冲击波前沿上看, 波前粒子速度向内, 波后粒子速度向外; 4) 在高度对称的系统中, 在中心处系统始终处于热动平衡态.

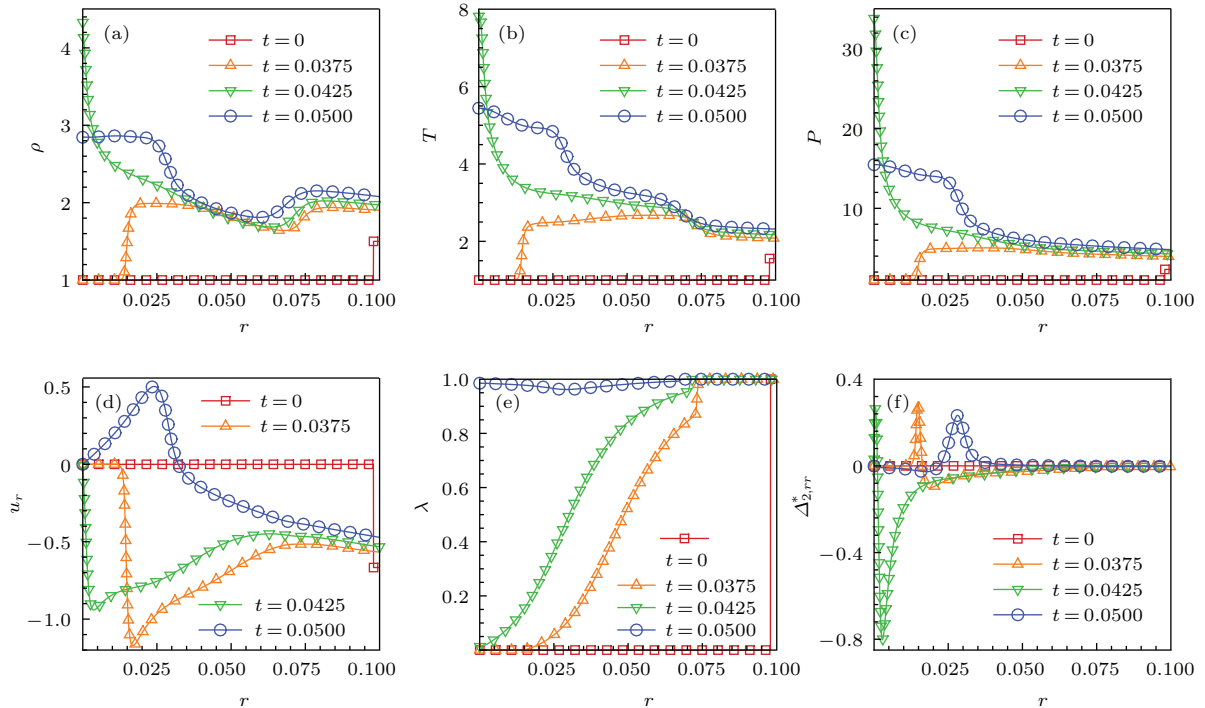


图 6 内爆过程不同时刻的宏观量和非平衡量

Fig. 6. Macroscopic quantities and nonequilibrium quantity at various times in the implosion process.

通过该模型, 我们在外爆过程中观测到了熄爆、双向爆轰和稳定爆轰等现象, 并对其原因进行了初步分析. 图7—图9给出了如下初始条件

$$\begin{cases} (\rho, T, u_r, u_\theta, \lambda)_i = (1.5, 1.55556, 0.666667, 0, 1) \\ (\rho, T, u_r, u_\theta, \lambda)_o = (1, 1, 0, 0, 0) \end{cases} \quad (45)$$

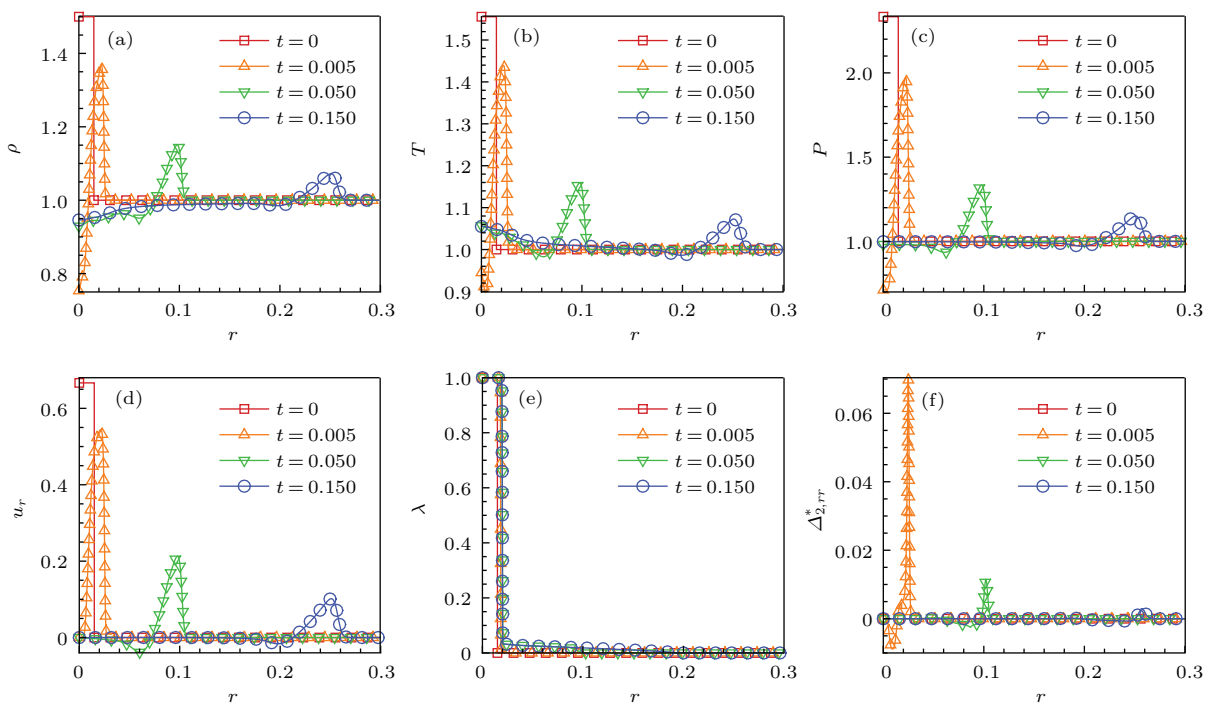


图7 外爆过程中不同时刻的宏观量和非平衡量

Fig. 7. Macroscopic quantities and nonequilibrium quantity at various times in the explosion process.

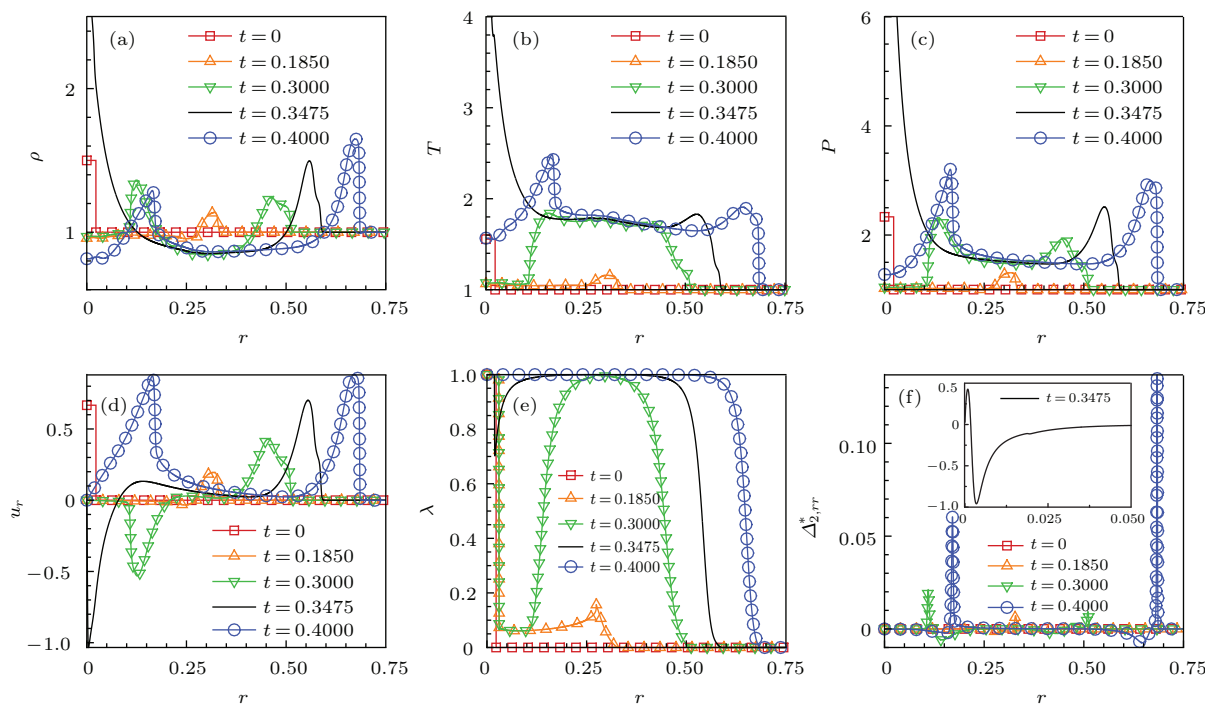


图8 外爆过程中不同时刻的宏观量与非平衡量

Fig. 8. Macroscopic quantities and nonequilibrium quantity at various times in the explosion process.

引发的外爆过程. 参数如下:  $0 \leq r \leq R_1$  为已起爆区域,  $R_1 < r \leq R$  为爆轰波前区域;  $\tau = 2 \times 10^{-4}$ ,  $\Delta t = 2.5 \times 10^{-6}$ ,  $\omega_1 = 1$ ,  $\omega_2 = 50$ . 从图7—图9, 位于中心的预先起爆区域逐渐增大. 具体来说, 在图7中  $R_1 = 0.015$ ,  $R = 0.3$ ; 在图8中  $R_1 = 0.023$ ,  $R = 0.75$ ; 在图9中  $R_1 = 0.050$ ,  $R = 1.2$ . 在外爆过程中, 随着爆轰波向外传播, 爆轰波阵面的面积越来越大, 所以内能变得越来越分散. 这种几何发散效应有降低局域温度的作用. 在图7中, 由于预先起爆的区域太小, 化学反应释放的热量太少, 在向外传播的过程中几何发散效应导致波阵面附近温度低于起爆温度而熄火. 而图8给出的是一个

化学反应先减弱, 后增强, 进而发展为向内、向外双向爆轰的情形 (例如图中所示  $t = 0.3000$  时刻的情形). 在向内的爆轰过程中, 随着化学反应的结束, 爆轰波退变为纯粹的冲击波. 冲击波在中心汇聚、碰撞产生瞬间高温、高密、高压 (例如图中所示  $t = 0.3475$  时刻的情形). 在  $t = 0.4000$  时刻, 密度、温度、压强、粒子速度曲线均出现明显的双峰结构. 在双峰附近, 系统偏离热动平衡的程度最高. 在图9所示的情形, 由于预先爆轰的区域足够大, 释放出的热量足以克服几何发散效应而引发稳定爆轰. 在爆轰波位置附近, 系统偏离热动平衡程度最高.

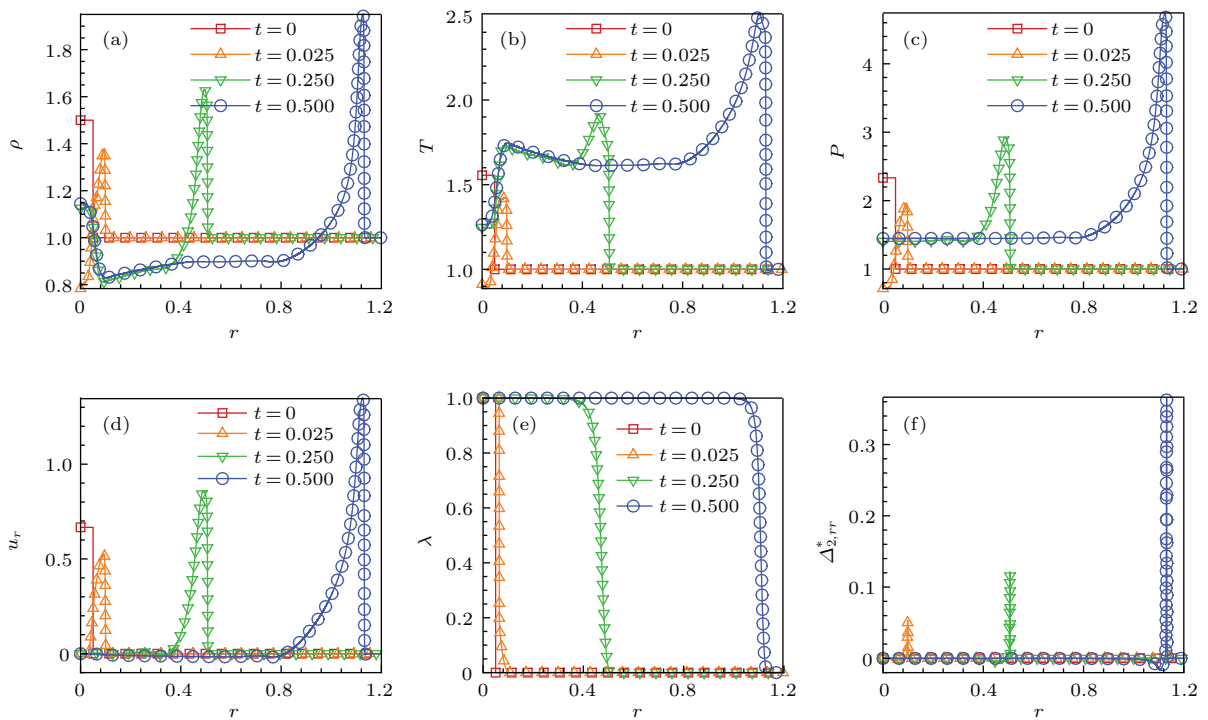


图9 外爆过程中不同时刻的宏观量与非平衡量

Fig. 9. Macroscopic quantities and nonequilibrium quantity at various times in the explosion process.

显然, 在外爆过程中, 存在着化学反应、宏观物质运输、热传导和几何发散效应的竞争. 化学反应释放的热量使得系统局域温度升高, 而热传导和几何发散效应使得系统局域温度降低. 如果之前的化学反应热足够多, 则化学反应得以维持; 如果热传导和几何发散效应占优势, 则会出现熄爆现象. 随着爆轰波向外传播, 几何发散效应逐渐减弱, 发生熄爆的可能性降低. 另外, 在高度对称的系统中, 圆盘中心始终处于热动平衡态. 围绕着爆轰波前

沿, 不同自由度上的内能不再均分. 该工作还研究了压强对化学反应率的影响、冲击强度和反应率对系统偏离热动平衡程度的影响.

### 3.4.2 多松弛因子模型

下面介绍我们课题组最近提出的一个多松弛因子燃烧系统离散 Boltzmann 模型<sup>[83]</sup>. 模型的控制方程由(20)描述. 在该模型中,  $\hat{A}_l$  是矢量  $\hat{A} = (0, \dots, 0, \hat{A}_8, \hat{A}_9, 0, \dots, 0)^T$  的第  $l$  个分量, 是对碰撞算符  $\hat{R}_{lk} (\hat{f}_k - \hat{f}_k^{eq})$  的修正. 其中,

$$\hat{A}_8 = \rho T \frac{R_5 - R_8}{R_5} \left[ 4u_x \left( \frac{\partial u_x}{\partial x} - \frac{1}{D+I} \frac{\partial u_x}{\partial x} - \frac{1}{D+I} \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) + 2u_y \left( \frac{\partial u_y}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial y} \right) \right], \quad (46)$$

$$\hat{A}_9 = \rho T \frac{R_7 - R_9}{R_7} \left[ 4u_y \left( \frac{\partial u_y}{\partial y} - \frac{1}{D+I} \frac{\partial u_x}{\partial x} - \frac{1}{D+I} \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) + 2u_x \left( \frac{\partial u_y}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial y} \right) \right]. \quad (47)$$

需要添加该修正的理由如下: 尽管从数学角度来说,  $(\hat{f}_k - \hat{f}_k^{\text{eq}})$  前的松弛因子  $\hat{R}_{lk}$  可以独立调节; 但从物理角度来说, 不同动理学模式之间可能存在耦合. 我们需要通过 Chapman-Enskog 多尺度分析, 通过检测所恢复的宏观流体方程的合理性来找回丢失的关联<sup>[37]</sup>. 为方便描述起见, 引入  $A_i = M_{il}^{-1} \hat{A}_l$ . 我们考虑二维系统 ( $D = 2$ ), 假设粒子质量为单位质量. 离散后的平衡态分布函数  $f_i^{\text{eq}}$  满足如下动理学矩关系:

$$\sum f_i^{\text{eq}} = \rho = \sum f_i, \quad (48)$$

$$\sum f_i^{\text{eq}} v_{i\alpha} = \rho u_\alpha = \sum f_i v_{i\alpha}, \quad (49)$$

$$\begin{aligned} \sum f_i^{\text{eq}} (v_i^2 + \eta_i^2) &= \rho[(D+I)T + u^2] \\ &= \sum f_i (v_i^2 + \eta_i^2), \end{aligned} \quad (50)$$

$$\sum f_i^{\text{eq}} v_{i\alpha} v_{i\beta} = \rho(\delta_{\alpha\beta} T + u_\alpha u_\beta), \quad (51)$$

$$\sum f_i^{\text{eq}} (v_i^2 + \eta_i^2) v_{i\alpha} = \rho u_\alpha [(D+I+2)T + u^2], \quad (52)$$

$$\begin{aligned} \sum f_i^{\text{eq}} v_{i\alpha} v_{i\beta} v_{i\chi} \\ = \rho(u_\alpha \delta_{\beta\chi} + u_\beta \delta_{\chi\alpha} + u_\chi \delta_{\alpha\beta}) T + \rho u_\alpha u_\beta u_\chi, \end{aligned} \quad (53)$$

$$\begin{aligned} \sum f_i^{\text{eq}} (v_i^2 + \eta_i^2) v_{i\alpha} v_{i\beta} \\ = \rho \delta_{\alpha\beta} [(D+I+2)T + u^2] T \\ + \rho u_\alpha u_\beta [(D+I+4)T + u^2], \end{aligned} \quad (54)$$

$$\sum f_i^{\text{eq}} \eta_i^2 v_{i\alpha} v_{i\beta} = \rho \delta_{\alpha\beta} IT^2 + \rho u_\alpha u_\beta IT, \quad (55)$$

$$\sum f_i^{\text{eq}} (v_i^2 + \eta_i^2) \eta_i^2 = \rho IT[u^2 + (D+3I)T], \quad (56)$$

$$\begin{aligned} \sum f_i^{\text{eq}} (v_i^2 + \eta_i^2) v_i^2 v_{i\alpha} \\ = \rho u_\alpha [u^4 + (D+2)(D+I+4)T^2 \\ + (2D+I+8)u^2 T], \end{aligned} \quad (57)$$

$$\begin{aligned} \sum f_i^{\text{eq}} (v_i^2 + \eta_i^2) \eta_i^2 v_{i\alpha} \\ = \rho u_\alpha IT[u^2 + (D+3I+2)T]. \end{aligned} \quad (58)$$

其中, 参数  $\eta_i$  用于表征分子平动之外的  $I$  个额外自由度. 单位体积的系统内能为  $E' = \rho(D+I)T/2$ . 上面 11 个矩关系表达式可以统一写为

$$\mathbf{M} \mathbf{f}^{\text{eq}} = \hat{\mathbf{f}}^{\text{eq}}, \quad (59)$$

其中  $\mathbf{f}^{\text{eq}} = (f_1^{\text{eq}}, f_2^{\text{eq}}, \dots, f_N^{\text{eq}})^T$  和  $\hat{\mathbf{f}}^{\text{eq}} = (\hat{f}_1^{\text{eq}}, \hat{f}_2^{\text{eq}}, \dots, \hat{f}_N^{\text{eq}})^T$  为  $N$  维列矢量. 矩阵  $\mathbf{M} = (\mathbf{M}_1, \mathbf{M}_2, \dots, \mathbf{M}_N)^T$ , 其中  $\mathbf{M}_i = (m_{i1}, m_{i2}, \dots, m_{iN})$ ,  $m_{1i} = 1$ ,  $m_{2i} = v_{ix}$ ,  $m_{3i} = v_{iy}$ ,  $m_{4i} = v_i^2 + \eta_i^2$ ,  $m_{5i} = v_{ix}^2$ ,  $m_{6i} = v_{ix} v_{iy}$ ,  $m_{7i} = v_{iy}^2$ ,  $m_{8i} = (v_i^2 + \eta_i^2) v_{ix}$ ,  $m_{9i} = (v_i^2 + \eta_i^2) v_{iy}$ ,  $m_{10i} = v_{ix}^3$ ,  $m_{11i} = v_{ix}^2 v_{iy}$ ,  $m_{12i} = v_{ix} v_{iy}^2$ ,  $m_{13i} = v_{iy}^3$ ,  $m_{14i} = (v_i^2 + \eta_i^2) v_{ix}^2$ ,  $m_{15i} = (v_i^2 + \eta_i^2) v_{ix} v_{iy}$ ,  $m_{16i} = (v_i^2 + \eta_i^2) v_{iy}^2$ ,  $m_{17i} = \eta_i^2 v_{ix}^2$ ,  $m_{18i} = \eta_i^2 v_{ix} v_{iy}$ ,  $m_{19i} = \eta_i^2 v_{iy}^2$ ,  $m_{20i} = (v_i^2 + \eta_i^2) \eta_i^2$ ,  $m_{21i} = (v_i^2 + \eta_i^2) v_i^2 v_{ix}$ ,  $m_{22i} = (v_i^2 + \eta_i^2) v_i^2 v_{iy}$ ,  $m_{23i} = (v_i^2 + \eta_i^2) \eta_i^2 v_{ix}$ ,  $m_{24i} = (v_i^2 + \eta_i^2) \eta_i^2 v_{iy}$ . 相应地,  $\hat{f}_1^{\text{eq}} = \rho$ ,  $\hat{f}_2^{\text{eq}} = \rho u_x$ ,  $\hat{f}_3^{\text{eq}} = \rho u_y$ ,  $\hat{f}_4^{\text{eq}} = \rho[(D+I)T + u^2]$ ,  $\hat{f}_5^{\text{eq}} = \rho(T + u_x^2)$ ,  $\hat{f}_6^{\text{eq}} = \rho u_x u_y$ ,  $\hat{f}_7^{\text{eq}} = \rho(T + u_y^2)$ ,  $\hat{f}_8^{\text{eq}} = \rho u_x [(D+I+2)T + u^2]$ ,  $\hat{f}_9^{\text{eq}} = \rho u_y [(D+I+2)T + u^2]$ ,  $\hat{f}_{10}^{\text{eq}} = 3\rho u_x T + \rho u_x^3$ ,  $\hat{f}_{11}^{\text{eq}} = \rho u_y T + \rho u_x^2 u_y$ ,  $\hat{f}_{12}^{\text{eq}} = \rho u_x T + \rho u_x u_y^2$ ,  $\hat{f}_{13}^{\text{eq}} = 3\rho u_y T + \rho u_y^3$ ,  $\hat{f}_{14}^{\text{eq}} = \rho[(D+I+2)T + u^2] + \rho u_x^2 [(D+I+4)T + u^2]$ ,  $\hat{f}_{15}^{\text{eq}} = \rho u_x u_y [(D+I+4)T + u^2]$ ,  $\hat{f}_{16}^{\text{eq}} = \rho[(D+I+2)T + u^2] + \rho u_y^2 [(D+I+4)T + u^2]$ ,  $\hat{f}_{17}^{\text{eq}} = \rho IT^2 + \rho u_x^2 IT$ ,  $\hat{f}_{18}^{\text{eq}} = \rho u_x u_y IT$ ,  $\hat{f}_{19}^{\text{eq}} = \rho IT^2 + \rho u_y^2 IT$ ,  $\hat{f}_{20}^{\text{eq}} = \rho IT[u^2 + (D+3I)T]$ ,  $\hat{f}_{21}^{\text{eq}} = \rho u_x [u^4 + (D+2)(D+I+4)T^2 + (2D+I+8)u^2 T]$ ,  $\hat{f}_{22}^{\text{eq}} = \rho u_y [u^4 + (D+2)(D+I+4)T^2 + (2D+I+8)u^2 T]$ ,  $\hat{f}_{23}^{\text{eq}} = \rho u_x IT[u^2 + (D+3I+2)T]$ ,  $\hat{f}_{24}^{\text{eq}} = \rho u_y IT[u^2 + (D+3I+2)T]$ .

与单松弛因子模型类似, 我们这里也假设松弛因子  $R_k (k = 1, 2, \dots, N)$  可以近似取为常数. 为了使得该模型的比热比  $\gamma$ , Prandtl 数  $Pr$  灵活可调, 我们考虑了分子内部自由度的贡献. 此时, Maxwell 平衡态分布函数为

$$\begin{aligned} f^{\text{eq}} &= \rho \left( \frac{1}{2\pi T} \right)^{D/2} \left( \frac{1}{2\pi IT} \right)^{1/2} \\ &\times \exp \left[ -\frac{(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{2T} - \frac{\eta^2}{2IT} \right], \end{aligned} \quad (60)$$

再结合关系式  $E' = \rho(D+I)T/2$  可得化学反应项如下:

$$C_i = f_i^{\text{eq}} Q \frac{-(1+D)IT + I(\mathbf{v}_i - \mathbf{u})^2 + \eta_i^2}{I(D+I)T^2} F(\lambda). \quad (61)$$



在二维笛卡尔坐标情形, 矩关系 (48)—(58) 式可以写为 24 个关于  $f_i^{\text{eq}} (i = 1, 2, \dots, 24)$  的方程. 所以该模型需要至少 24 个离散速度. 该模型所选用离散速度模型如下:

$$\bar{v}_i = \begin{cases} \text{cyc} : (\pm 1, 0) & \text{for } 1 \leq i \leq 4, \\ \text{cyc} : (\pm 1, \pm 1) & \text{for } 5 \leq i \leq 8, \end{cases}$$

$$v_i = \begin{cases} v_a \bar{v}_i & \text{for } 1 \leq i \leq 8, \\ v_b \bar{v}_{i-8} & \text{for } 8 \leq i \leq 16, \\ v_c \bar{v}_{i-16} & \text{for } 17 \leq i \leq 24. \end{cases}$$

$$\eta_i = \begin{cases} \eta_a & \text{for } 1 \leq i \leq 8, \\ \eta_b & \text{for } 8 \leq i \leq 16, \\ \eta_c & \text{for } 17 \leq i \leq 24. \end{cases}$$

其中 cyc 表示循环排列, 如图 10 所示. 在本工作中离散 Boltzmann 模型中空间导数的计算采用 NND (nonoscillatory and nonfree-parameters dissipative) 有限差分格式. 同样地, 化学反应进程控制方程中的空间导数也使用 NND 格式求解, 而时间演化采用解析求解. 矩阵  $M$  是一个  $24 \times 24$  的矩阵. 在编程模拟之前, 我们可以将离散速度模型的定义式代入, 使用软件 Matlab2011 计算出其逆矩阵  $M^{-1}$  的解析解. 在程序中  $M^{-1}$  的矩阵元直接使用解析表达式进行计算. 需要指出的是, 尽管  $M$  和  $M^{-1}$  的矩阵元表达式看起来有些复杂, 但在实际计算过程中, 在进行主循环之前, 参数  $v_a, v_b, v_c, \eta_a, \eta_b, \eta_c$  均被具体数值取代. 所以, 在进行主循环之前,  $M$  和  $M^{-1}$  的矩阵元已经被具体的数值所取代, 并不存在矩阵  $M$  数值求逆的问题.

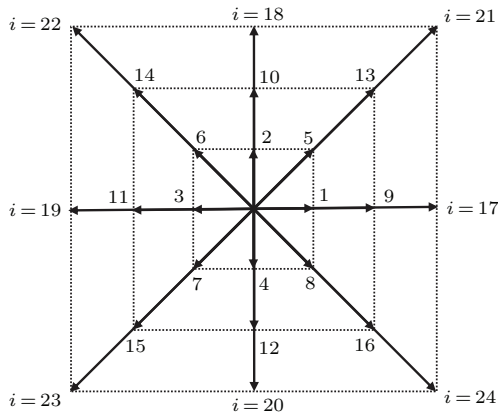


图 10 离散速度模型示意图

Fig. 10. Schematic of the discrete velocity model.

由 Chapman-Enskog 多尺度分析可知, 该模型

在连续极限下可以给出如下的 Navier-Stokes 方程:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_x}{\partial x} + \frac{\partial \rho u_y}{\partial y} = 0, \quad (62)$$

$$\frac{\partial \rho u_x}{\partial t} + \frac{\partial (P + \rho u_x^2)}{\partial x} + \frac{\partial \rho u_x u_y}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{2\rho T}{R_5} \left[ \frac{\partial u_x}{\partial x} - \frac{1}{D+I} \left( \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) \right] \right\} + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{\rho T}{R_6} \left( \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) \right], \quad (63)$$

$$\frac{\partial \rho u_y}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_x u_y}{\partial x} + \frac{\partial (P + \rho u_y^2)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\rho T}{R_6} \left( \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left\{ \frac{2\rho T}{R_7} \left[ \frac{\partial u_y}{\partial y} - \frac{1}{D+I} \left( \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) \right] \right\}, \quad (64)$$

$$\frac{\partial E_T}{\partial t} + \frac{\partial (E_T + P)u_x}{\partial x} + \frac{\partial (E_T + P)u_y}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ c_p \frac{\rho T}{R_8} \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{\rho T}{R_5} \left[ \left( u_y - \frac{2u_x}{D+I} \right) \times \left( \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) + 2u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} \right] \right\} + \frac{\partial}{\partial y} \left\{ c_p \frac{\rho T}{R_9} \frac{\partial T}{\partial y} + \frac{\rho T}{R_7} \left[ \left( u_x - \frac{2u_y}{D+I} \right) \times \left( \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) + 2u_y \frac{\partial u_y}{\partial y} \right] \right\} + \rho F(\lambda) Q, \quad (65)$$

这里  $c_p = (D + I + 2)/2$  是等压比热, 等体积比热可定义为  $C_r = (D + I)/2$ .

进一步讨论如下: 系数  $\hat{R}$  代表的是  $\hat{f}$  趋于平衡态值  $\hat{f}^{\text{eq}}$  的快慢. 质量、动量、能量守恒定律要求  $\hat{f}_1 = \hat{f}_1^{\text{eq}}, \hat{f}_2 = \hat{f}_2^{\text{eq}}, \hat{f}_3 = \hat{f}_3^{\text{eq}}, \hat{f}_4 = \hat{f}_4^{\text{eq}}$ . 所以, 系数  $R_1, R_2, R_3$  和  $R_4$  的取值对模拟结果没有影响. 同时, 系统的动理学输运特征是各向同性的. 这就告诉我们, 其余的松弛系数也并不是完全独立的 [36,37]. 具体来说: 1)  $R_5, R_6, R_7$  描述系统的黏性, 当  $R_5 = R_6 = R_7 = R_\mu$  时黏性系数  $\mu = \rho T / R_\mu$ ; 2)  $R_8$  和  $R_9$  描述系统的热传导特性, 当  $R_8 = R_9 = R_\kappa$  时, 热传导系数  $\kappa = c_p \rho T / R_\kappa$ . 这样, 在能量方程 (65) 中的黏性系数与动量方程 (63) 和 (64) 中的黏性系数是自洽的. 系统的比热比

$$\gamma = \frac{c_p}{c_v} = \frac{D + I + 2}{D + I}, \quad (66)$$

和 Prandtl 数

$$Pr = \frac{c_p \mu}{\kappa} = \frac{R_\kappa}{R_\mu} \quad (67)$$

都是灵活可调的. 当  $R_5 = R_6 = R_7 = R_\mu$ ,  $R_8 = R_9 = R_\kappa$  时, 上面的 Navier-Stokes 方程组 (62)–(65) 可写为

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial r_\alpha} = 0, \quad (68)$$

$$\frac{\partial \rho u_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial P}{\partial r_\alpha} + \frac{\partial \rho u_\alpha u_\beta}{\partial r_\beta} = -\frac{\partial P'_{\alpha\beta}}{\partial r_\beta}, \quad (69)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial E_T}{\partial t} + \frac{\partial (E_T + P) u_\alpha}{\partial r_\alpha} \\ &= \rho F(\lambda) Q + \frac{\partial}{\partial r_\beta} \left( \kappa \frac{\partial T}{\partial r_\beta} - P'_{\alpha\beta} u_\alpha \right). \end{aligned} \quad (70)$$

其中,

$$\mu_B = \mu \left( \frac{2}{3} - \frac{2}{D+I} \right), \quad (71)$$

$$\begin{aligned} P'_{\alpha\beta} = & -\mu \left( \frac{\partial u_\alpha}{\partial r_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial r_\alpha} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_\chi}{\partial r_\chi} \delta_{\alpha\beta} \right) \\ & - \mu_B \frac{\partial u_\chi}{\partial r_\chi} \delta_{\alpha\beta}. \end{aligned} \quad (72)$$

再具体一点,

$$\begin{aligned} P_{xx} &= \hat{f}_5^{(1)}, \\ P_{xy} &= P_{yx} = \hat{f}_6^{(1)}, \\ P_{yy} &= \hat{f}_7^{(1)}. \end{aligned}$$

除了直接分析黏性项和热传项导致的效应, 系统的热动非平衡行为也可以由  $f_i$  和  $f_i^{\text{eq}}$  的非守恒动理学矩 [即  $M(f_i)$  与  $M(f_i^{\text{eq}})$ ] 的差异来描述. 在多松弛因子离散 Boltzmann 模型中, 我们定义

$$\Delta_k = \hat{f}_k - \hat{f}_k^{\text{eq}}. \quad (73)$$

由于在碰撞过程中, 密度、动量、能量守恒, 所以当  $k = 1, 2, 3, 4$  时,  $\Delta_k = 0$ . 其余的 20 个  $\Delta_k$  均具有确定的物理含义, 均从自己的角度度量系统偏离热动平衡的程度, 描述系统偏离热动平衡之后的效应. 这些非平衡效应  $\Delta_k$  放大  $R_k$  倍后以  $R_k \Delta_k$  的形式进入系统演化方程, 影响系统演化. 除了直接分析每个  $\Delta_k$  的大小与含义之外, 我们还可以引入一个“到平衡态距离”或“热动非平衡强度”

$$d = \sqrt{\sum_1^N \Delta_k^2} \quad (74)$$

来获得一个对系统热动非平衡程度的更加粗粒化的描述. 显然, 在使用这个定义之前, 需要将  $\Delta_k$  做无量纲化处理.

在具体研究过程中, 我们可以根据实际需要, 将上述  $\Delta_k$  适当组合, 构造出满足特定需求的非

平衡量. 为了对爆轰过程中的部分非平衡效应进行初探, 这里, 我们引入如下定义:  $\Delta_{v_x v_x} = \Delta_5$ ,  $\Delta_{v_x v_y} = \Delta_6$ ,  $\Delta_{v_y v_y} = \Delta_7$ ,  $\Delta_{\eta^2} = \Delta_4 - \Delta_5 - \Delta_7$ ,  $\Delta_{(v^2 + \eta^2) v_x} = \Delta_8$ ,  $\Delta_{(v^2 + \eta^2) v_y} = \Delta_9$ ,  $\Delta_{v_x v_x v_x} = \Delta_{10}$ ,  $\Delta_{v_x v_x v_y} = \Delta_{11}$ ,  $\Delta_{v_x v_y v_y} = \Delta_{12}$ ,  $\Delta_{v_y v_y v_y} = \Delta_{13}$ . 模型验证与校验的算例包括一个一维稳态爆轰、三个 Riemann 问题、一个冲击波反射、一个 Couette 流. 在后三类算例中, 反应热  $Q = 0$ . 在 Couette 流算例中, 比热比  $\gamma$  和 Prandtl 数  $Pr$  是可调的.

就一维稳态爆轰情形, 图 11 给出了如下初始条件

$$\begin{cases} (\rho, T, u_x, u_y, \lambda)_L \\ = (1.38837, 1.57856, 0.577350, 0, 1) \\ (\rho, T, u_x, u_y, \lambda)_R = (1, 1, 0, 0, 0) \end{cases} \quad (75)$$

引起的在  $t = 0.39$  时刻 von Neumann 压强峰前后相关物理量的空间分布. 其中下标“L”和“R”分别代表左 ( $0 \leq x \leq 0.2$ ) 和右 ( $0.2 < r \leq 1$ ) 两部分. 图 11 (a)–(e) 分别给出  $\rho$ ,  $T$ ,  $P$ ,  $u_x$ ,  $\lambda$  在  $x$  方向的分布. 图中分别给出 DBM 模拟结果 (带点的红色实线), CJ 理论的结果 (绿色虚线) 和 ZND 理论的结果 (蓝色实线). 可见, 三者 von Neumann 压强峰后相互验证; 但在 von Neumann 压强峰前沿表现出差异. 因为 CJ 理论没有考虑反应区的厚度, 所以没有 von Neumann 峰. 除了化学反应进程参数外, 其余物理量的分布与纯冲击波情形极为相似. 峰后 DBM 模拟结果为  $(\rho, T, u_x, u_\theta, \lambda) = (1.38997, 1.57597, 0.577874, 0, 1)$ , 与 CJ 理论结果符合得很好. 因为 ZND 理论考虑了反应区的存在, 合理描述了 von Neumann 压强峰的存在, 所以在 von Neumann 压强峰后反应区内 DBM 模拟结果与 ZND 结果符合得很好. 但 ZND 理论没有考虑冲击波的厚度, 所以在 von Neumann 压强峰前的压缩阶段, DBM 模拟结果在物理上更加合理. 随着黏性和热传导系数的减小, 冲击波的厚度逐渐减小, 与 ZND 理论的差异逐渐减小. 图 12 给出了三个不同时刻 ( $t = 0.29$ ,  $t = 0.34$ ,  $t = 0.39$ ) 压强  $P$  沿  $x$  方向的分布. 根据 DBM 模拟结果, 爆轰波速为  $v_D = 2.055$ , 而解析结果为  $v_D = 2.06395$ ; 相对误差为 0.43%.

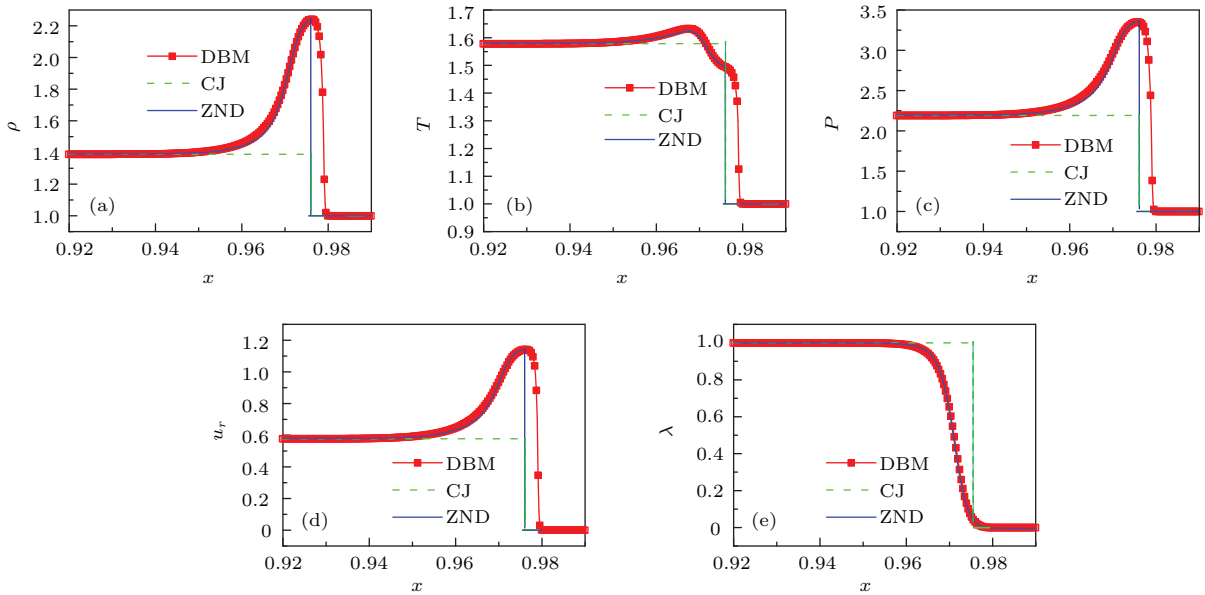


图 11 一维稳态爆轰物理量分布图

Fig. 11. The profiles of physical quantities in the one-dimensional steady detonation.

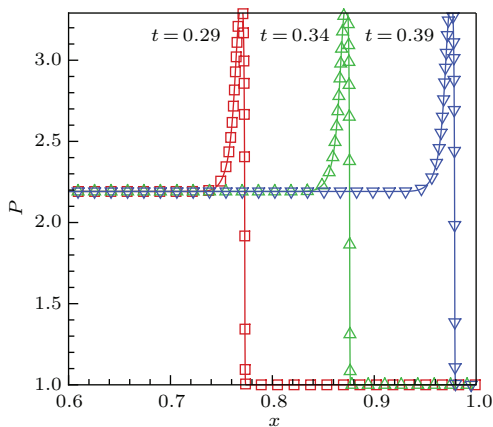


图 12 一维稳态爆轰过程中不同时刻压强 P 的空间分布  
Fig. 12. The profiles of pressure P at various times in the evolution of the steady detonation process.

鉴于篇幅, 激波管问题和冲击波反射问题的数值校验不在此展示. 为了展示本模型对低速近似不可压流体的适用性以及比热比  $\gamma$ 、Prandtl 数  $Pr$  可调的功能, 我们模拟两组低速 Couette 流的算例. 上下两壁之间的距离为  $H = 0.2$ . 上壁以流速  $u_0$  运动, 下壁保持静止. 在左右两侧使用周期边界条件. 上下壁采用非平衡外插边界条件.

在第一组中只有一个算例. 初始条件为  $\rho = 1$ ,  $T = 1$ ,  $u_x = u_y = 0$ . 黏性剪切应力将动量从上边界逐渐输运到系统内部. 图 13 给出了水平速度分量  $u_x$  在时刻  $t = 1, 5, 30$  时的分布. 可见, 模拟结果与下面解析结果

$$u = \frac{y}{H}u_0 + \frac{2}{\pi}u_0 \sum_{n=1}^{\infty} \left[ \frac{(-1)^n}{n} \exp\left(-n^2\pi^2 \frac{\mu t}{\rho H^2}\right) \times \sin\left(\frac{n\pi y}{H}\right) \right] \quad (76)$$

符合较好.

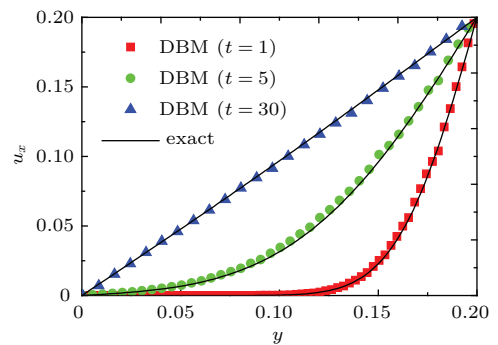


图 13 Couette 流不同时刻的水平流速分布  
Fig. 13. Horizontal velocity profiles at various times in the Couette flow.

第二组有四个算例. 图 14 给出了这 4 次 Couette 流的模拟结果, 图中同时给出  $t = 0.01$  时刻不同比热比  $\gamma$  和不同 Prandtl 数  $Pr$  条件下的 DBM 结果和解析结果. 为了尽快地获得稳态流模拟结果, 我们使用了如下的初始温度场:

$$T = T_1 + (T_2 - T_1) \frac{x}{H} + \frac{\mu}{2\kappa} u_0^2 \frac{x}{H} \left(1 - \frac{x}{H}\right), \quad (77)$$

其中,  $T_1 (= 1.0)$  和  $T_2 (= 1.01)$  分别为下壁和上壁的温度. 初始速度轮廓取为

$$u = u_0 y/H. \quad (78)$$

图 14(a) 和 (b) 分别对应  $\gamma = 1.4$  和  $\gamma = 1.5$  两种情形. 在图 14(a) 和 (b) 中又分别给出  $Pr = 0.2$  和  $Pr = 5.0$  两种情形的结果. 由图 14(a) 和 (b) 可见, 模拟结果均与解析结果一致.

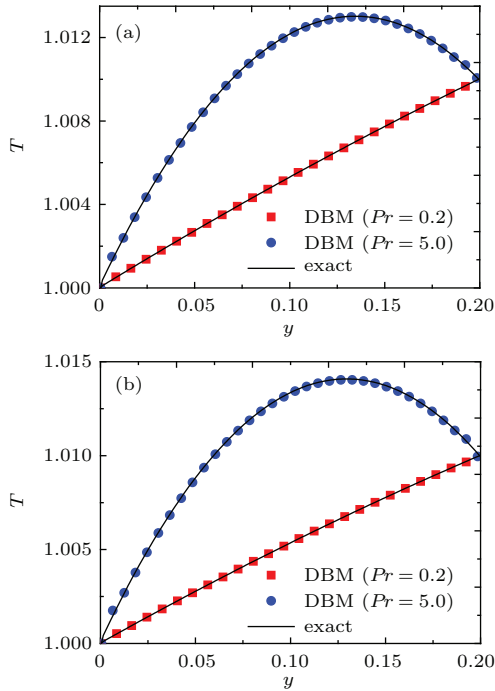


图 14 Couette 流中的温度分布

Fig. 14. Temperature profiles in the Couette flow.

需要强调的是, 在数值实验过程中, 所选用的时间和空间步长必须足够小, 以至于数值黏性远小于物理黏性. 这样, 真实结果才不会被数值误差所淹没. 一种检测方法就是, 逐步减小时间和空间步长, 直至再减小数值结果已经几乎不再改变. 在图 15 所示的算例中, 物理量  $(\rho, T, u_x, u_y, \lambda)$  的初始值与前面模拟一维稳态爆轰时的算例相同, 即由 (75) 式确定. 图 15(a)–(o) 分别给出  $t = 0.35$  时刻下列物理量沿  $x$  方向的分布:  $\rho, T, p, u_x, \lambda, \Delta v_x v_x, \Delta v_x v_y, \Delta v_y v_y, \Delta \eta^2, \Delta v_x v_x v_x, \Delta v_x v_x v_y, \Delta v_x v_y v_y, \Delta v_y v_y v_y, \Delta (v^2 + \eta^2) v_x, \Delta (v^2 + \eta^2) v_y$ . 在每个分图中竖直虚线标注的是压强峰值的位置  $x = 0.8345$ . 这里,  $v_a = 2.7, v_b = 2.2, v_c = 1.2, \eta_a = 1.5, \eta_b = 0.5, \eta_c = 5.0, I = 3, Q = 1$ , 碰撞参数皆取为  $R_i = 100$ . 图中给出三种时间、空间步长的模拟结果: (i)  $\Delta x = \Delta y = 10^{-3}$ ,

$\Delta t = 10^{-5}$ ; (ii)  $\Delta x = \Delta y = 10^{-3}, \Delta t = 10^{-6}$ ; (iii)  $\Delta x = \Delta y = 10^{-4}, \Delta t = 10^{-6}$ . 显然, 三种情形下的模拟结果已没有明显差异. 这一方面说明, 时间、空间步长的第一种选取方式已经足够小; 同时, 它说明了模拟所得非平衡行为是物理上合理的.

对图 15 所示的模拟结果做如下说明. 1) 在  $t = 0.35$  时刻, 系统尚未达到稳定爆轰状态, 在 von Neumann 压强峰处的压强值还将继续增加. 而在图 12 所示的情形, 在  $t = 0.35$  时刻, 爆轰已经到达稳定状态. 其原因是: 这里的物理黏性比图 12 所示情形大得多. 系统的黏性越大, 由同一初态出发, 演化到稳定状态所需要的时间越长. 2) 图 15(a)–(e) 表明, 在该算例中, 密度、温度、压强和流速在爆轰波运行方向上的峰值点并不重合. 这里, 我们将 von Neumann 峰定义为压强曲线的峰. 压强峰出现在  $0 < \lambda < 1$  之间即化学反应快完毕之前. 3) 由图 15(f), (h), (i) 可见, 非平衡量  $\Delta v_x v_x, \Delta v_y v_y$  和  $\Delta \eta^2$  的模拟结果满足关系式:  $\Delta v_x v_x + \Delta v_y v_y + \Delta \eta^2 = 0$ . 从物理上来说, 当系统偏离热动平衡时, 系统在不同自由度上的内能便不再均分, 但各自由度内能偏离其平衡态值的和自然为零. 这里, 松弛因子  $R_5$  和  $R_7$  描述的是  $x$  和  $y$  自由度上内能趋于其平均值的快慢. 4) 非平衡量  $\Delta v_x v_x$  和  $\Delta \eta^2$  在反应区内表现出一个峰和一个谷,  $\Delta v_y v_y$  表现出一个峰和两个谷. 在爆轰波通过时,  $\Delta v_x v_x$  先逐渐达到峰值, 然后开始下降, 直到谷底, 然后回升. 而  $\Delta \eta^2$  则表现出相反的行为.  $\Delta v_y v_y$  的峰出现在两个谷之间. 从物理上来说, 在冲击压缩过程中, 相对于其他自由度, 压缩波所在自由度即  $x$  自由度上的内能先增加. 在这三个非平衡量  $\Delta v_x v_x, \Delta v_y v_y$  和  $\Delta \eta^2$  中, 第一个量  $\Delta v_x v_x$  的幅度最大. 5) 由图 15(g), (k), (m) 和 (o) 可见, 非平衡量  $\Delta v_x v_y, \Delta v_x v_x v_y, \Delta v_y v_y v_y, \Delta (v^2 + \eta^2) v_y$  皆为零. 从物理上来说,  $\Delta v_x v_y$  描述的是剪切效应,  $\Delta v_x v_x v_y, \Delta v_y v_y v_y, \Delta (v^2 + \eta^2) v_y$  描述的是沿  $y$  方向的“非组织能流”. 因为该模拟系统实际上是一维系统, 在  $y$  方向是均匀的, 所以在  $y$  方向的剪切和“非组织能流”均为零. 6) 由图 15(j), (l), (n) 可见,  $\Delta v_x v_x v_x, \Delta v_x v_y v_y, \Delta (v^2 + \eta^2) v_x$  的大小不容忽视. 从物理上来说,  $\Delta v_x v_x v_x, \Delta v_x v_y v_y, \Delta (v^2 + \eta^2) v_x$  描述的是沿  $x$  方向的非组织能流. 尽管化学能释放是连续的, 但作用在反应区上的压强却是先增后减. 这些效应使得化学反应区内分子的速度分布函数围绕平均流速不再对称.

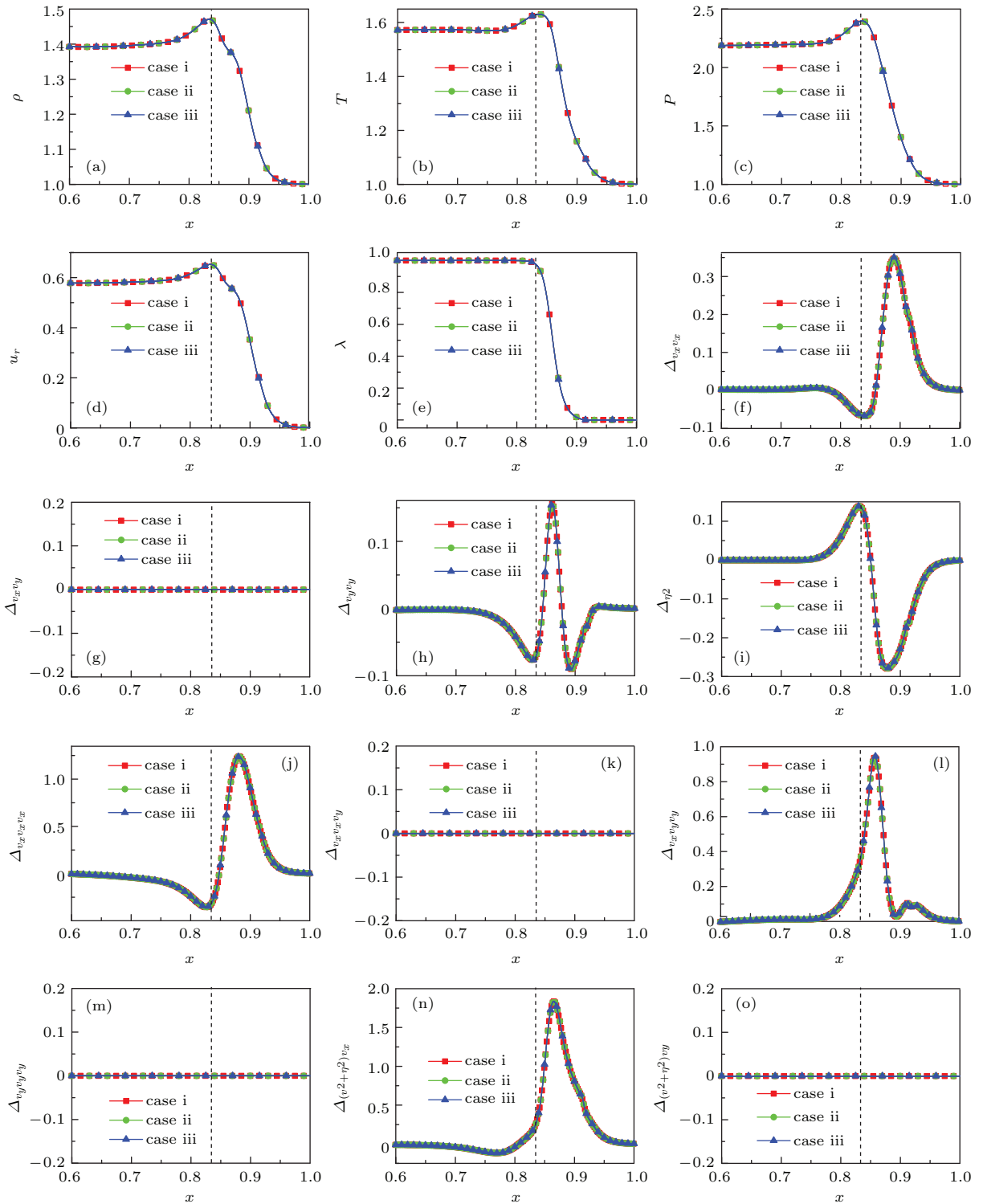


图 15 三种情形下  $t = 0.35$  时刻物理量的空间分布

Fig. 15. Physical quantities versus  $x$  at time  $t = 0.35$  in three cases.

关于不同碰撞参数条件下爆轰行为之间的异同, 图 16 给出三种不同碰撞参数条件下  $t = 0.35$  时刻压强  $P$  和  $\Delta_{v_x v_x}$  沿  $x$  方向的分布. 左中右三列分别对应  $R_i = 10^2$ ,  $R_i = 10^3$  和  $R_i = 10^4$  三种情形. 如果我们用  $(x_m, P_m)$  表示  $x$ - $P$  二维空间中的

压强最大值点, 则在图 16(a)–(c) 中三个压强最大值点分别为  $(0.8345, 2.39850)$ ,  $(0.8635, 3.01522)$  和  $(0.8745, 3.27748)$ . 在每个分图中有三条竖直虚线: 中间一条标注的是压强最大值位置  $x_m$ , 两侧的两条虚线粗略界定爆轰波的宽度. 在最右边竖线的

右侧, 系统处于反应率为零的亚稳态; 在最左边竖线的左侧, 系统处于爆轰波后的稳态. 围绕着爆轰波峰, 系统处于热动非平衡状态. 图 16 (d)—(f) 分别对应图 16 (a)—(c). 可见: 1) 图 16 (a)—(f) 皆表明, 随着碰撞参数  $R_i$  的增加, 爆轰波的厚度变窄, 特别是在冲击预压阶段, 这是因为系统的物理黏性与  $R_\mu$  成反比, 黏性的作用是使冲击波的厚度变宽, 随着爆轰波厚度的变宽, 热动非平衡区域的厚度变宽; 2) 图 16 (a)—(c) 表明, 从左到右,  $x_m$  和  $P_m$  均逐渐增大, 这表明, 随着碰撞参数增大, 即系统黏性减小, 从冲击开始到稳定爆轰的距离在减小, 同时,

von Neumann 峰变得更加锐利; 3) 在图 16 (d)—(f) 中, 被曲线  $\Delta_{v_x v_x}(x)$  和直线  $\Delta_{v_x v_x} = 0$  封闭的部分的面积从一个侧面描述爆轰波附近区域的整体非平衡效应, 可见, 随着碰撞参数  $R_i$  的增加, 整体非平衡效应逐渐变弱; 4) 在图 16 (d)—(f) 中,  $\Delta_{v_x v_x}$  的极小值分别为  $-0.06759$ ,  $-0.07112$  和  $-0.01437$ , 极大值分别为  $0.34753$ ,  $0.42051$  和  $0.10255$ ,  $R = 10^3$  情形的极小值最小, 极大值最大; 5) 随着  $R_i$  增加,  $\Delta_{v_x v_x} = 0$  的位置朝着 von Neumann 峰的位置移动, 反应区的宽度变窄.

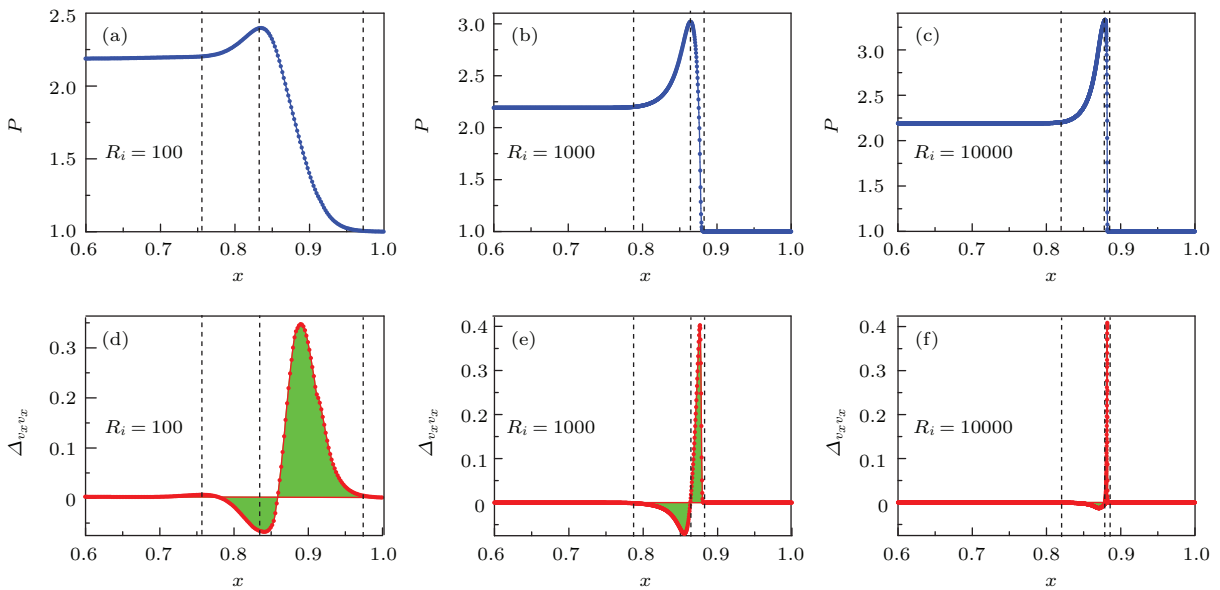


图 16 三套不同碰撞参数下  $t = 0.35$  时刻  $p$  和  $\Delta_{v_x v_x}$  沿  $x$  的分布

Fig. 16. The physical quantities  $p$  and  $\Delta_{v_x v_x}$  versus  $x$  at time  $t = 0.35$  for three sets of collision parameters.

需要指出的是, 多松弛因子模型也可以按如下思路构建:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial f_i}{\partial t} + v_{i\alpha} \frac{\partial f_i}{\partial r_\alpha} \\ &= -M_{ii}^{-1} \left[ \hat{R}_{lk} \left( \hat{f}_k - \hat{f}_k^{eq} \right) + C_i + \hat{A}_l \right], \\ & C_i = \hat{R}_{lk} \left( \hat{f}_k^{eq} - \hat{f}_k^{*eq} \right). \end{aligned} \quad (79)$$

在这种思路下, 模型所需要的离散速度数目可以降低; 模型所提供的用于描述热动非平衡效应的非守恒矩的数目也随着降低.

#### 4 结论与展望

爆轰过程中产生的压强可以达到数十万个大气压, 是多数固体材料屈服应力的几十倍. 当如此强的冲击波在固体材料 (包括炸药) 内进行传播时,

波后物质表现出流体行为, 相当一部分动力学、动力学特征可采用流体模型来描述, 所以燃烧系统的流体建模具有广泛的普适性. 离散 Boltzmann 方法是近年来发展起来的一种新的流体介观建模. 本文评述离散 Boltzmann 方法发展的两个方向 (Navier-Stokes 等偏微分方程的数值逼近解法和微介观粗粒化物理建模) 在燃烧系统建模和模拟方面的进展; 重点在第二个研究方向. 本文所重点传递的信息为: 在燃烧和爆轰等复杂流体系统建模与模拟方面, 作为微介观动力学粗粒化建模出现的 (即第二类) 离散 Boltzmann 模型, 从数学建模上来讲, 它由离散 Boltzmann 方程和唯象反应率方程来构成; 从物理建模上来讲, 它等效于一个传统流体模型外加一个关于热动非平衡行为的粗粒化模型. 它可以同时给出宏观流动特征及其相伴的、与宏观流动关系最密切的那部分非平衡效应; 它为燃烧等

复杂系统中非平衡行为的描述、非平衡信息的提取、非平衡程度的度量提供了一条思路;为同时关注流动和热动两个层面的非平衡以及不同非平衡行为之间的相互作用与相互影响提供了一个微介观动理学模型. 它所提供的非平衡测量量有两类:一类是直接比较分布函数和平衡分布函数的动理学矩得到的,一类是来自于Chapman-Enskog多尺度分析得到的热传导和黏性项.

容易适时俘获非平衡效应和容易并行分别是第二类离散 Boltzmann 模型在物理描述和算法设计方面的两个典型特征. 在内含大量微介观结构的燃烧、爆轰等复杂流体系统中,在微介观结构附近局域 Knudsen 数较高,以至于 Navier-Stokes 方程描述的合理性受到挑战,更合理的宏观控制方程尚未获得的情形下,第二类离散 Boltzmann 建模表现出更多优势:可以通过使用满足更多动理学矩关系的离散速度模型来给出更加合理的物理结果;可以根据局域 Knudsen 数来自适应地调整离散速度模型而实现多尺度物理建模. 另外,基于分子动力学等更小尺度模拟结果的统计信息可以通过非平衡效应建模进入离散 Boltzmann 模型.

总体来讲,这方面研究(包括更加具体的建模研究和物理问题研究)还处于起步阶段. 例如,多分布函数离散 Boltzmann 模型<sup>[124]</sup>、化学反应过程中热动非平衡效应不能忽略的快反应系统的离散 Boltzmann 模型、松弛时间自适应离散 Boltzmann 模型、与分子动力学耦合的离散 Boltzmann 模型等尚在研究过程中. 离散 Boltzmann 建模与模将在燃烧等复杂流体系统研究方面有更多的贡献. 这些研究一方面可以帮助我们从更多的角度和层面、更准确地了解燃烧系统的动理学行为,另一方面它可以为燃烧系统宏观模型的改进提供物理参考.

感谢李华教授、琚诒光教授、陈正教授、王健平教授、蓝可教授、罗开红教授、张鹏教授、王成教授、张永豪教授、秦荣山教授、林传栋、赖惠林、甘延标、闫铂、张玉东等的建议、讨论和各类帮助!

## 参考文献

- [1] Ju Y 2014 *Adv. Mech.* **44** 201402
- [2] Chu S, Majumdar A 2012 *Nature* **488** 294
- [3] Jangsuwang W, Fungtammasan B, Kerdsuwan S 2005 *Energ. Convers. Manage.* **46** 3137
- [4] Schott G L 1965 *Phys. Fluids* **8** 850
- [5] Bykovskii F A, Zhdan S A, Vedernikov E F 2006 *Journal of Propulsion and Power* **22** 1204
- [6] Ju Y, Maruta K 2011 *Progress in Energy and Combustion Science* **37** 669
- [7] Fernandez-Pello A C 2002 *Proceedings of the Combustion Institute* **29** 883
- [8] Sabourin J L, Dabbs D M, Yetter R A, Dryer F L, Aksay I A 2009 *ACS Nano* **3** 3945
- [9] Ohkura Y, Rao P M, Zheng X 2011 *Combust. Flame* **158** 2544
- [10] Dec J E 2009 *Proc. Combust. Inst.* **32** 2727
- [11] Starikovskiy A, Aleksandrov N 2012 *Progress in Energy and Combustion Science* **39** 61
- [12] Uddi M, Jiang N, Mintusov E, Adamovich I V, Lempert W R 2009 *Proceedings of the Combustion Institute* **32** 929
- [13] Sun W, Chen Z, Gou X, Ju Y 2010 *Combust. Flame* **157** 1298
- [14] Won S H, Windom B, Jiang B, Ju Y 2014 *Combust. Flame* **161** 475
- [15] Ombrello T, Qin X, Ju Y, Gutsol A, Fridman A, Carter C 2006 *AIAA Journal* **44** 142
- [16] Sun W, Uddi M, Won S H, Ombrello T, Carter C, Ju Y 2012 *Combust. Flame* **159** 221
- [17] Sun W, Ju Y 2013 *J Plasma Fusion Res.* **89** 208
- [18] Chapman D L 1899 *Philos. Mag.* **47** 90
- [19] Jouguet E J 1905 *J. Math. Pures Appl.* **1** 347
- [20] Zeldovich Ya B 1940 *J. Exp. Theor. Phys.* **10** 542
- [21] von Neumann J 1942 *Theory of Detonation Waves* (New York: Macmillan)
- [22] Doering W 1943 *Ann. Phys.* **43** 421
- [23] Fickett W, Davis W C 2000 *Detonation: Theory and Experiment* (Mineola, New York: Dover Publications, INC.)
- [24] Chen Z 2009 *Ph. D Dissertation* (Princeton: Princeton University)
- [25] Dai P, Chen Z, Chen S, Ju Y 2015 *Proc. Combust. Inst.* **35** 3045
- [26] Yu H, Han W, Santner J, Gou X, Sohn C H, Ju Y, Chen Z 2014 *Combust. Flame* **161** 2815
- [27] Bai B, Chen Z, Zhang H, Chen S 2013 *Combust. Flame* **160** 2810
- [28] Ren Z Y, Lu Z, Hou L Y, Lu L 2014 *Sci. China: Phys. Mech. Astron.* **57** 1495
- [29] Huang X F, Li S J, Zhou D H, Zhao G J, Wang G Q, Xu J R 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 178802 (in Chinese) [黄雪峰, 李盛姬, 周东辉, 赵冠军, 王关晴, 徐江荣 2014 物理学报 **63** 178802]
- [30] Yang J C, Xia Z X, Hu J X 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 074701 (in Chinese) [杨晋朝, 夏智勋, 胡建新 2013 物理学报 **62** 074701]
- [31] Shi Y B, Ying Y J, Li J H 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 6911 (in Chinese) [施研博, 应阳君, 李金虹 2007 物理学报 **56** 6911]
- [32] Benzi R, Succi S, Vergassola M 1992 *Phys. Reports* **222** 145
- [33] Succi S 2001 *The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond* (New York: Oxford University Press)

- [34] Succi S, Karlin I V, Chen H 2002 *Rev. Mod. Phys.* **74** 1203
- [35] Chen H, Kandasamy S, Orszag S, Shock R, Succi S, Yakhot V 2003 *Science* **301** 633
- [36] Xu A, Zhang G, Gan Y, Chen F, Yu X 2012 *Front. Phys.* **7** 582
- [37] Xu A G, Zhang G C, Li Y J, Li H 2014 *Prog. Phys.* **34** 136 (in Chinese) [许爱国, 张广财, 李英骏, 李华 2014 物理学进展 **34** 136]
- [38] Guo Z, Shu C 2013 *Lattice Boltzmann Method and Its Applications in Engineering (advances in computational fluid dynamics)* (Singapore: World Scientific Publishing Company)
- [39] Chen S 2010 *Non-equilibrium Statistical Mechanics* (Beijing: Scientific Press) (in Chinese) [陈式刚 编著 2010 非平衡统计力学 (北京: 科学出版社)]
- [40] Shokhov E M 1968 *Fluid Dyn.* **3** 95
- [41] Bhatnagar L, Gross E P, Krook M 1954 *Phys. Rev.* **94** 511
- [42] Holway Jr L H 1966 *Phys. Fluids* (1958–1988) **9** 1658
- [43] Rykov V A 1975 *Fluid Dyn.* **10** 959
- [44] Liu G 1990 *Phys. Fluids A: Fluid Dyn.* (1989–1993) **2** 277
- [45] Frisch U, Hasslacher B, Pomeau Y 1986 *Phys. Rev. Lett.* **56** 1505
- [46] Koelman J 1991 *EPL* **15** 603
- [47] Chen S, Chen H, Martinez D, Matthaeus W 1991 *Phys. Rev. Lett.* **67** 3776
- [48] Qian Y, d'Humieres D, Lallemand P 1992 *EPL* **17** 479
- [49] He X Y, Luo L S 1997 *Phys. Rev. E* **55** R6333
- [50] Nie X B 1988 *M.S. Dissertation* (Beijing: Graduate School, China Academy of Engineering Physics) (in Chinese) [聂小波 1988 硕士学位论文 (北京: 中国工程物理研究院研究生部)]
- [51] MeNamara G R, Zanetti G 1988 *Phys. Rev. Lett.* **61** 2332
- [52] Higuera F L, Jimenez J 1989 *EPL* **9** 663
- [53] He Y L, Wang Y, Li Q 2009 *Lattice Boltzmann Method: Theory and Applications* (Beijing: Scientific Press) (in Chinese) [何雅玲, 王勇, 李庆 2009 格子 Boltzmann 方法的理论及应用 (北京: 科学出版社)]
- [54] Yan B 2013 *Ph. D. Dissertation* (Changchun: Jilin University) (in Chinese) [闫铂 2013 博士学位论文 (长春: 吉林大学)]
- [55] Gonnella G, Orlandini E, Yeomans J M 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 1695
- [56] Denniston C, Yeomans J M 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 275505
- [57] Toth G, Denniston C, Yeomans Y M 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 105504
- [58] Shan X, Chen H 1993 *Phys. Rev. E* **47** 1815
- [59] Chen S, Doolen G D 1998 *Annu. Rev. Fluid Mech.* **30** 329
- [60] Kang Q, Zhang D, Chen S, He X 2002 *Phys. Rev. E* **65** 036318
- [61] Fang H, Wang Z, Lin Z, Liu M 2002 *Phys. Rev. E* **65** 051925
- [62] Dawson S, Chen S, Doolen G D 1993 *J. Chem. Phys.* **98** 1514
- [63] Weimar J R, Boon J P 1996 *Physica A* **224** 207
- [64] Zhang R, Xu Y, Wen B, Sheng N, Fang H 2014 *Sci. Reports* **4** 5738
- [65] Chen S, Martinez D, Mei R 1996 *Phys. Fluids* **8** 2527
- [66] Lai H, Ma C 2011 *Phys. Rev. E* **84** 046708
- [67] Xu A, Gonnella G, Lamura A 2006 *Phys. Rev. E* **74** 011505
- [68] Xu A, Gonnella G, Lamura A, Amati G, Massaioli F 2005 *EPL* **71** 651
- [69] Xu A, Gonnella G, Lamura A 2006 *Physica A* **362** 42
- [70] Xu A, Gonnella G, Lamura A 2004 *Physica A* **344** 750
- [71] Xu A, Gonnella G, Lamura A 2004 *Physica A* **331** 10
- [72] Xu A, Gonnella G, Lamura A 2003 *Phys. Rev. E* **67** 056105
- [73] Gan Y, Xu A, Zhang G, Li Y 2012 *Front. Phys.* **7** 481
- [74] Gan Y, Xu A, Zhang G, Li Y 2012 *Commun. Theor. Phys.* **57** 681
- [75] Gan Y, Xu A, Zhang G, Wang J, Yu X, Yang Y 2014 *Int. J. Mod. Phys. C* **25** 1441002
- [76] Gan Y, Xu A, Zhang G, Li Y 2011 *Phys. Rev. E* **83** 056704
- [77] Gan Y, Xu A, Zhang G, Zhang P, Li Y 2012 *EPL* **97** 44002
- [78] Gan Y, Xu A, Zhang G, Li Y, Li Y 2011 *Phys. Rev. E* **84** 046715
- [79] Chen F, Xu A, Zhang G, Li Y 2011 *Phys. Lett. A* **375** 2129
- [80] Pan X F, Xu A, Zhang G, Jiang S 2007 *Int. J. Mod. Phys. C* **18** 1747
- [81] Yan B, Xu A, Zhang G, Ying Y, Li H 2013 *Front. Phys.* **8** 94
- [82] Lin C, Xu A, Zhang G, Li Y 2014 *Commun. Theor. Phys.* **62** 737
- [83] Xu A, Lin C, Zhang G, Li Y 2015 *Phys. Rev. E* **91** 043306
- [84] Xu A, Zhang G, Gan Y 2014 *arXiv:1403.3744*
- [85] Gan Y, Xu A, Zhang G, Succi S 2015 *Soft Matter* **11** 5336
- [86] Chen F, Xu A, Zhang G, Wang Y 2014 *Front Phys.* **9** 246
- [87] Lin C, Xu A, Zhang G, Li Y, Succi S 2014 *Phys. Rev. E* **89** 013307
- [88] Lai H 2015 *Postdoctoral Research Report* (Beijing: Institute of Applied Physics and Computational Mathematics) (in Chinese) [赖惠林 2015 博士后出站报告 (北京: 应用物理与计算数学研究所)]
- [89] Lai H, Xu A, Zhang G, Gan Y, Ying Y, Succi S 2015 *arXiv:1507.01107*
- [90] Gan Y B, Xu A G, Zhang G C 2015 *Guest Professor Research Report* (Beijing: Institute of Applied Physics and Computational Mathematics) (in Chinese) [甘延标, 许爱国, 张广财 2015 Kelvin-Helmholtz 不稳定性的离散 Boltzmann 建模、模拟与非平衡效应研究 (北京: 北京应用物理与计算数学研究所客座研究报告)]
- [91] Succi S, Bella G, Papetti F 1997 *J. Sci. Comput.* **12** 395
- [92] Filippova O, Hanel D 1998 *Int. J. Mod. Phys. C* **9** 1439
- [93] Filippova O, Hanel D 2000 *J. Comput. Phys.* **158** 139



- [94] Filippova O, Hanel D 2000 *Comput. Phys. Commun.* **129** 267
- [95] Yu H, Luo L, Girimaji S 2002 *Int. J. Comput. Eng. Sci.* **3** 73
- [96] Yamamoto K, He X, Doolen G 2002 *J. Stat. Phys.* **107** 367
- [97] Yamamoto K 2003 *Int. J. Mod. Phys. B* **17** 197
- [98] Yamamoto K, Takada N, Misawa M 2005 *Proc. Comb. Inst.* **30** 1509
- [99] Lee T, Lin C, Chen L 2006 *J. Comput. Phys.* **215** 133
- [100] Chiavazzo E, Karlin I V, Gorban A N, Boulouchos K 2009 *J. Stat. Mech.: Theory and Experiment* P06013
- [101] Chiavazzo E, Karlin I V, Gorban A N, Boulouchos K 2010 *Combust. Flame* **157** 1833
- [102] Chiavazzo E, Karlin IV, Gorban A N, Boulouchos K 2011 *Int. J. Numerical Methods for Heat & Fluid Flow* **21** 494
- [103] Chen S, Liu Z, Zhang C, He Z, Tian Z, Shi B, Zheng C 2007 *Appl. Math. Comput.* **193** 266
- [104] Chen S, Liu Z, Tian Z, Shi B, Zheng C 2008 *Comput. Math. Appl.* **55** 1424
- [105] Chen S, Krafczyk M 2009 *Int. J. Therm. Sci.* **48** 1978
- [106] Chen S 2010 *Int. J. Hydrogen Energy.* **35** 1401
- [107] Chen S, Li J, Han H, Liu Z, Zheng C 2010 *Int. J. Hydrogen Energy.* **35** 3891
- [108] Chen S, Han H, Liu Z, Li J, Zheng C 2010 *Int. J. Hydrogen. Energy.* **35** 4736
- [109] Chen S, Zheng C 2011 *Int. J. Hydrogen Energy.* **36** 15403
- [110] Chen S, Mi J, Liu H, Zheng C 2012 *Int. J. Hydrogen. Energy.* **37** 5234
- [111] Sun J S, Zhu J S 1995 *Theoretical Explosion Physics* (Beijing: National Defense Industry Press) (in Chinese) [孙锦山, 朱建士 1995 理论爆轰物理 (北京: 国防工业出版社)]
- [112] Cochran S G, Chan J 1979 *Lawrence Livermore National Laboratory Report UCID-18024*
- [113] Lee E L, Tarver C M 1980 *Phys. Fluids* **23** 2362
- [114] Gou X, Sun W, Chen Z, Ju Y 2010 *Combust. Flame* **157** 1111
- [115] Pan X, Xu A, Zhang G, Jiang S 2007 *Int. J. Mod. Phys. C* **18** 1747
- [116] Gan Y, Xu A, Zhang G, Yu X, Li Y 2008 *Physica A* **387** 1721
- [117] Chen F, Xu A, Zhang G, Li Y, Succi S 2010 *EPL* **90** 54003
- [118] Chen F, Xu A, Zhang G, Li Y 2011 *Commun. Theore. Phys.* **55** 325
- [119] Gan Y, Xu A, Zhang G, Yang Y 2013 *EPL* **103** 24003
- [120] Chen F, Xu A, Zhang G, Li Y 2011 *Commun. Theore. Phys.* **56** 333
- [121] Chen F, Xu A, Zhang G, Li Y 2011 *Theore. & Appl. Mech. Lett.* **1** 052004
- [122] Gan Y, Xu A, Zhang G, Li Y 2011 *Commun. Theore. Phys.* **56** 490
- [123] Chen F, Xu A, Zhang G, Li Y 2011 *Commun. Theore. Phys.* **55** 325
- [124] Lin C, Xu A, Zhang G, Li Y 2014 *arXiv:1405.5500*

SPECIAL ISSUE—Recent developments and applications of computational physics

# Progress of discrete Boltzmann modeling and simulation of combustion system\*

Xu Ai-Guo<sup>1)2)3)†</sup> Zhang Guang-Cai<sup>1)3)4)</sup> Ying Yang-Jun<sup>1)</sup>

1) (National Laboratory for Science and Technology on Computational Physics, Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China)

2) (Center for Applied Physics and Technology, MOE Key Center for High Energy Density Physics Simulations, College of Engineering, Peking University, Beijing 100871, China)

3) (State Key Laboratory of Theoretical Physics, Institute of Theoretical Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

4) (State Key Laboratory of Explosion Science and Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

( Received 4 February 2015; revised manuscript received 2 April 2015 )

## Abstract

Detonation is a kind of self-propagating supersonic combustion where the chemical reaction is rapid and violent under an extreme condition. The leading part of a detonation front is pre-shocked by a strong shock wave propagating into the explosive and triggering chemical reaction. The combustion system can be regarded as a kind of chemical reactive flow system. Therefore, the fluid modeling plays an important role in the studies on combustion and detonation phenomena. The discrete Boltzmann method (DBM) is a kind of new fluid modeling having quickly developed in recent thirty years. In this paper we review the progress of discrete Boltzmann modeling and simulation of combustion phenomena.

Roughly speaking, the discrete Boltzmann models can be further classified into two categories. In the first category the DBM is regarded as a kind of new scheme to numerically solve partial differential equations, such as the Navier-Stokes equations, etc. In the second category the DBM works as a kind of novel mesoscopic and coarse-grained kinetic model for complex fluids. The second kind of DBM aims to probe the trans- and supercritical fluid behaviors or to study simultaneously the hydrodynamic non-equilibrium (HNE) and thermodynamic non-equilibrium (TNE) behaviors. It has brought significant new physical insights into the systems and promoted the development of new methods in the fields. For example, new observations on fine structures of shock and detonation waves have been obtained; The intensity of TNE has been used as a physical criterion to discriminate the two stages, spinodal decomposition and domain growth, in phase separation; Based on the feature of TNE, some new front-tracking schemes have been designed. Since the goals are different, the criteria used to formulate the two kinds of models are significantly different, even though there may be considerable overlaps between them. Correspondingly, works in discrete Boltzmann modeling and simulation of combustion systems can also be classified into two categories in terms of the two kinds of models. Up to now, most of existing works belong to the first category where the DBM is used as a kind of alternative numerical scheme. The first

\* Project supported by the Science Foundations of National Laboratory for Science and Technology on Computational Physics, the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11475028, 11202003), the Open Project Program of State Key Laboratory of Theoretical Physics, Institute of Theoretical Physics, Chinese Academy of Sciences (Grant No. Y4KF151CJ1), and the Opening Project of State Key Laboratory of Explosion Science and Technology (Beijing Institute of Technology) (Grant No. KFJJ14-1M).

† Corresponding author. E-mail: [Xu\\_Aiguo@iapcm.ac.cn](mailto:Xu_Aiguo@iapcm.ac.cn)

DBM for detonation [Yan, et al. 2013 *Front. Phys.* **8** 94] appeared in 2013. It is also the first work aiming to investigate both the HNE and TNE in the combustion system via DBM. In this review we focus mainly on the development of the second kind of DBM for combustion, especially for detonation. A DBM for combustion in polar-coordinates [Lin, et al. 2014 *Commun. Theor. Phys.* **62** 737] was designed in 2014. It aims to investigate the nonequilibrium behaviors in implosion and explosion processes. Recently, the multiple-relaxation-time version of DBM for combustion [Xu, et al. 2015 *Phys. Rev. E* **91** 043306] was developed. As an initial application, various non-equilibrium behaviors around the detonation wave in one-dimensional detonation process were preliminarily probed. The following TNE behaviors, exchanges of internal kinetic energy between different displacement degrees of freedom and between displacement and internal degrees of freedom of molecules, have been observed. It was found that the system viscosity (or heat conductivity) decreases the local TNE, but increases the global TNE around the detonation wave. Even locally, the system viscosity (or heat conductivity) results in two competing trends, i.e. to increase and decrease the TNE effects. The physical reason is that the viscosity (or heat conductivity) takes part in both the thermodynamic and hydrodynamic responses to the corresponding driving forces. The ideas to formulate DBM with the smallest number of discrete velocities and DBM with flexible discrete velocity model are presented.

As a kind of new modeling of combustion system, mathematically, the second kind of DBM is composed of the discrete Boltzmann equation(s) and a phenomenological reactive function; physically, it is equivalent to a hydrodynamic model supplemented by a coarse-grained model of the TNE behaviors. Being able to capture various non-equilibrium effects and being easy to parallelize are two features of the second kind of DBM. Some more realistic DBMs for combustion are in progress. Combustion process has an intrinsic multi-scale nature. Typical time scales cover a wide range from  $10^{-13}$  to  $10^{-3}$  second, and typical spatial scales cover a range from  $10^{-10}$  to 1 meter. The hydrodynamic modeling and microscopic molecular dynamics have seen great achievements in combustion simulations. But for problems relevant to the mesoscopic scales, where the hydrodynamic modeling is not enough to capture the nonequilibrium behaviors and the molecular dynamics simulation is not affordable, the modeling and simulation are still keeping challenging. Roughly speaking, there are two research directions in accessing the mesoscopic behaviors. One direction is to start from the macroscopic scale to smaller ones, the other direction is to start from the microscopic scale to larger ones. The idea of second kind of DBM belongs to that of the first direction. It will contribute more to the studies on the nonequilibrium behaviors in combustion phenomena.

**Keywords:** discrete Boltzmann model/method, non-equilibrium effects, combustion, complex fluids

**PACS:** 47.11.-j, 47.40.Rs, 47.70.-n

**DOI:** [10.7498/aps.64.184701](https://doi.org/10.7498/aps.64.184701)