

# Polar Coordinate Lattice Boltzmann Studying of Shocking Process\*

—Investigation of Non-Equilibrium Effects in Complex System

Chuangdong Lin<sup>1</sup>, Aiguo Xu<sup>2#</sup>, Guangcai Zhang<sup>2</sup>, Yingjun Li<sup>1#</sup>

<sup>1</sup>State Key Laboratory for GeoMechanics and Deep Underground Engineering, China University of Mining and Technology, Beijing

<sup>2</sup>National Key Laboratory of Computational Physics, Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing

Email: #Xu\_Aiguo@iapcm.ac.cn, #lyj@aphy.iphy.ac.cn

Received: Sep. 17<sup>th</sup>, 2013; revised: Oct. 8<sup>th</sup>, 2013; accepted: Oct. 17<sup>th</sup>, 2013

Copyright © 2013 Chuandong Lin et al. This is an open access article distributed under the Creative Commons Attribution License, which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

**Abstract:** The Polar Coordinate Lattice Boltzmann (PCLB) model is used to investigate the shocking processes. The discrete velocity model used in this PCLB is the D2V97 presented by Watari and Tsutahara. The convective term is treated with a modified Warming-Beam scheme. Two shocking processes are investigated. In one case, the evolution of a shock wave travels inwards within an annular area is studied. In the other case, the evolution of a shock wave travels inwards within a circular area is studied. The non-equilibrium effects around the shock fronts are investigated by analyzing the simulated results of velocity moments of local discrete distribution function. To further understand the interface from a more fundamental level, we give the sketch of the actual distribution function in velocity space around the shock front.

**Keywords:** Lattice Boltzmann Method; Shock Wave; Non-Equilibrium Effects

## 使用极坐标格子玻尔兹曼方法研究冲击过程\*

—复杂系统中非平衡效应的探索

林传栋<sup>1</sup>, 许爱国<sup>2#</sup>, 张广财<sup>2</sup>, 李英骏<sup>1#</sup>

<sup>1</sup>中国矿业大学(北京)深部岩土力学与地下工程国家重点实验室, 北京

<sup>2</sup>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

Email: #Xu\_Aiguo@iapcm.ac.cn, #lyj@aphy.iphy.ac.cn

收稿日期: 2013年9月17日; 修回日期: 2013年10月8日; 录用日期: 2013年10月17日

**摘要:** 本文使用极坐标高速可压格子玻尔兹曼模型研究冲击过程。其中离散速度模型是由 Watari 和 Tsutahara 提出的 D2V97, 对流项采用修正的 Warming-Beam 格式处理。分别模拟研究了冲击波在环形区域和圆形区域中向内传播过程中物理量的变化规律, 并通过离散速度分布函数的速度矩分析了冲击波波阵面附近的非平衡效应。为了从更基本层面理解界面行为, 给出了波阵面处真实分布函数在速度空间的示意图。

**关键词:** 格子玻尔兹曼方法; 冲击波; 非平衡效应

\*资助信息: 本研究得到了中国国家自然科学基金项目[批准号: 11074300 和 91130020]、中国国家重点基础研究发展计划[批准号: 2013 CBA01504]的资助

#通讯作者。

## 1. 引言

最近几十年, 格子玻尔兹曼(Lattice Boltzmann, LB)方法作为一种联系宏观和微观行为的介观方法, 在众多复杂流体领域的模拟和应用方面取得了巨大成功<sup>[1-2]</sup>。多数早期的 LB 模型只能用于等温不可压缩流动的模拟。而对于普遍存在的高速可压流体, 比如在航空航天(绕流湍流)、天体物理(射流)、冲击爆轰(瓦斯爆炸)等领域, 流体的压缩效应不可忽略。对于此类问题的研究就需要借助于能够模拟高速可压流体的 LB 模型<sup>[3-20]</sup>。当前的高速可压 LB 模型大都是基于笛卡尔直角坐标系。实际上, 基于极坐标、柱坐标或球坐标的 LB 模型将会更加方便处理一些物理系统, 比如惯性约束核聚变(Inertial Confinement Fusion, ICF)、超新星爆炸、内爆外爆等。

本文使用极坐标 LB 模型模拟研究在二维系统中冲击波向内部传播的物理过程, 并根据离散速度分布函数的速度矩(包括矩和中心距)的数值结果重点分析了冲击波波阵面附近系统的非平衡效应和表现, 进而恢复了真实分布函数在速度空间的部分主要特征。需要说明的是, LB 模型秉承了玻尔兹曼方程可以描述系统非平衡行为的功能和属性。因此, LB 模型可用于模拟研究典型物理过程中的非平衡现象。本文所获得的关于非平衡效应的结果对于流体动力学系统的宏观建模(比如基于 Euler 方程、Navier-Stokes 方程)的改进具有重要的启发和指导作用。

## 2. 模型简介

基于极坐标的 Bhatnager-Gross-Krook 近似下的有限差分 LB 热学模型的演化方程为:

$$\frac{\partial f_{ki}}{\partial t} + v_{kir} \frac{\partial f_{ki}}{\partial r} + \frac{1}{r} v_{ki\theta} \frac{\partial f_{ki}}{\partial \theta} = -\frac{1}{\tau} [f_{ki} - f_{ki}^{eq}] \quad (1)$$

其中  $f_{ki}$  与  $f_{ki}^{eq}$  分别为局部离散分布函数和平衡分布函数,  $\tau$  为决定恢复平衡态速度的松弛因子,  $(r, \theta)$  和  $(v_{kir}, v_{ki\theta})$  分别为物理空间和速度空间的坐标。

### 2.1. 离散速度模型

本文采用由 Watari 和 Tsutahara<sup>[21-23]</sup>提出的离散速度模型, 该模型有 5 组离散速度, 速度大小为  $v_k, k = 0, 1, 2, 3, 4$ , 并且每组都  $N_i$  个分速度, 见图 1。

离散速度的数学表达式为:

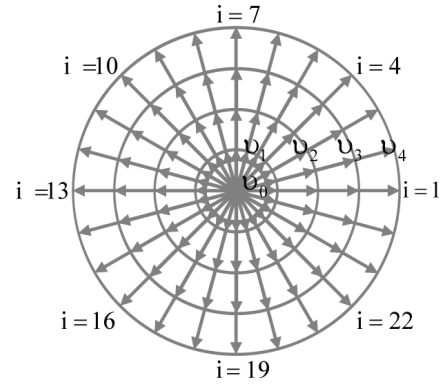


Figure 1. Sketch of discrete velocity model  
图 1. 离散速度模型示意图

$$\begin{aligned} v_{kir} &= v_k \cos[2\pi(i-1)/N_i - \theta] \\ v_{ki\theta} &= v_k \sin[2\pi(i-1)/N_i - \theta] \end{aligned} \quad (2)$$

这里选取  $N_i = 24$ ,  $v_0 = 0$ ,  $v_1 = 1.5$ ,  $v_2 = 3.5$ ,  $v_3 = 7.5$ ,  $v_4 = 12.5$ 。

局部平衡分布函数的表达式为:

$$\begin{aligned} f_{ki}^{eq} &= \rho F_k \left[ \left( 1 - \frac{u^2}{2E} + \frac{u^4}{8E^2} \right) + \frac{v_{kie} u_\varepsilon}{E} \left( 1 - \frac{u^2}{2E} \right) \right. \\ &\quad + \frac{v_{kie} v_{ki\pi} u_\varepsilon u_\pi}{2E^2} \left( 1 - \frac{u^2}{2E} \right) + \frac{v_{kie} v_{ki\pi} v_{kiv} u_\varepsilon u_\pi u_\nu}{6E^3} \\ &\quad \left. + \frac{v_{kie} v_{ki\pi} v_{kiv} v_{ki\varepsilon} u_\varepsilon u_\pi u_\nu u_\varepsilon}{24E^4} \right] \end{aligned} \quad (3)$$

式中

$$\begin{aligned} F_k &= \left[ v_k^2 (v_k^2 - v_{k+1}^2) (v_k^2 - v_{k+2}^2) (v_k^2 - v_{k+3}^2) \right]^{-1} \\ &\quad \times \left[ B_4 E^4 + B_3 (v_{k+1}^2 + v_{k+2}^2 + v_{k+3}^2) E^3 + B_2 (v_{k+1}^2 v_{k+2}^2 \right. \\ &\quad \left. + v_{k+2}^2 v_{k+3}^2 + v_{k+3}^2 v_{k+1}^2) E^2 + B_1 v_{k+1}^2 v_{k+2}^2 v_{k+3}^2 E \right] \end{aligned}$$

$$F_0 = 1/B_0 - (F_1 + F_2 + F_3 + F_4)$$

其中  $B_0 = 24$ ,  $B_1 = -1/12$ ,  $B_2 = 1/3$ ,  $B_3 = -2$ ,  $B_4 = 16$ 。

运用 Chapman-Enskog 展开法, 本模型在流体力学条件下能够恢复到 Navier-Stokes 方程:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{E} \mathbf{I} + \rho \mathbf{u} \mathbf{u}) \\ + \nabla \cdot \left[ \mu (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} - \mu (\nabla \mathbf{u})^T - \mu \nabla \mathbf{u} \right] = 0 \end{aligned} \quad (5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \rho E + \frac{1}{2} \rho u^2 \right) + \nabla \cdot \left( 2\rho E \mathbf{u} + \frac{1}{2} \rho u^2 \mathbf{u} \right) - \nabla \cdot \left[ \kappa \nabla E + \mu \mathbf{u} \cdot (\nabla \mathbf{u}) - \mu \mathbf{u} (\nabla \cdot \mathbf{u}) + \frac{1}{2} \mu \nabla (u^2) \right] = 0 \quad (6)$$

其中  $\rho$  为温度,  $\mathbf{u} (= u_r \mathbf{e}_r + u_\theta \mathbf{e}_\theta)$  为速度,  $T$  为温度,  $P (= \rho T)$  为压强,  $E (= T/(\gamma - 1))$  为单位质量的内能,  $\gamma (= 2)$  为绝热系数,  $\mu$  与  $\kappa'$  分别表示粘性系数和热传导系数,  $\kappa' = 2\mu = 2P\tau$ 。

## 2.2. 算法格式

对公式(1)中的时间项采用解析解, 空间项采用修正的 Warming-Beam 格式处理, 并引入符号

$f_{ki}^{it} \equiv f_{ki,ir} \equiv f_{ki,i\theta} \equiv f_{ki}(ir, i\theta, it) \equiv f(ir, i\theta, k, i)$ , 可得极坐标中 LB 方程的演化形式<sup>[18]</sup>:

$$f_{ki}^{it+1} = term^t - term_1^r - term_2^r - term_1^\theta - term_2^\theta \quad (7)$$

其中

$$C_r = v_{kir} \frac{dt}{dr}, \quad C_\theta = \frac{1}{r} v_{ki\theta} \frac{dt}{d\theta}$$

$$term^t = \exp\left(-\frac{dt}{\tau}\right) \left[ f_{ki}^t - f_{ki}^{eq} + f_{ki}^{eq} \exp\left(\frac{dt}{\tau}\right) \right]$$

$$term_1^r = \begin{cases} C_r (f_{ki,ir} - f_{ki,ir-1}) & \text{if } C_r \geq 0 \\ C_r (f_{ki,ir+1} - f_{ki,ir}) & \text{if } C_r < 0 \end{cases}$$

$$term_2^r = \begin{cases} C_r (1 - |C_r|) [1 - S(\eta_r)] S_{2r}^+ & \text{if } C_r \geq 0 \\ C_r (1 - |C_r|) [1 - S(\eta_r)] S_{2r}^- & \text{if } C_r < 0 \end{cases}$$

$$S_{2r}^+ = (f_{ki,ir} - 2f_{ki,ir-1} + f_{ki,ir-2})/2$$

$$S_{2r}^- = (2f_{ki,ir+1} - f_{ki,ir} - f_{ki,ir+2})/2$$

$$term_1^\theta = \begin{cases} C_\theta (f_{ki,i\theta} - f_{ki,i\theta-1}) & \text{if } C_\theta \geq 0 \\ C_\theta (f_{ki,i\theta+1} - f_{ki,i\theta}) & \text{if } C_\theta < 0 \end{cases}$$

$$term_2^\theta = \begin{cases} C_\theta (1 - |C_\theta|) (1 - S(\eta_\theta)) S_{i\theta}^+ & \text{if } C_\theta \geq 0 \\ C_\theta (1 - |C_\theta|) (1 - S(\eta_\theta)) S_{i\theta}^- & \text{if } C_\theta < 0 \end{cases}$$

$$S_{i\theta}^+ = (f_{ki,i\theta} - 2f_{ki,i\theta-1} + f_{ki,i\theta-2})/2$$

$$S_{i\theta}^- = (2f_{ki,i\theta+1} - f_{ki,i\theta} - f_{ki,i\theta+2})/2$$

$$\eta_r = \begin{cases} \frac{f_{ki,ir-1} - f_{ki,ir-2}}{f_{ki,ir} - f_{ki,ir-1}} & \text{if } C_r \geq 0 \\ \frac{f_{ki,ir+2} - f_{ki,ir+1}}{f_{ki,ir+1} - f_{ki,ir}} & \text{if } C_r < 0 \end{cases}$$

$$\eta_\theta = \begin{cases} \frac{f_{ki,i\theta-1} - f_{ki,i\theta-2}}{f_{ki,i\theta} - f_{ki,i\theta-1}} & \text{if } C_\theta \geq 0 \\ \frac{f_{ki,i\theta+2} - f_{ki,i\theta+1}}{f_{ki,i\theta+1} - f_{ki,i\theta}} & \text{if } C_\theta < 0 \end{cases}$$

需要说明的有四点: 第一,  $it$  是演化时刻,  $dt$  是时间步长,  $ir$  与  $i\theta$  是极坐标系中的网格坐标,  $dr$  与  $d\theta$  是空间步长; 第二, 当  $\eta_r$  与  $\eta_\theta$  的分母趋向于零时, 其  $\eta_r$  与  $\eta_\theta$  的绝对值趋向于无穷大; 第三, 公式(7)可以看做是一阶精度的算子分裂格式, 并且没有考虑数值计算的演化顺序; 第四,  $S(\eta_r)$  与  $S(\eta_\theta)$  是开关函数, 如果令  $S(\eta_r) = S(\eta_\theta) = 1$ , 那么  $term_2^r = term_2^\theta = 0$ , 这样公式(7)就变成了一阶迎风格式; 第五, 需要强调的是开关函数要满足  $|(1 - S(\eta))(1 - \eta)| \leq 2$ , 符合此条件的函数有很多, 比如:

$$S(\eta) = \frac{S_1 \times |\eta| + S_2}{S_1 \times |\eta| + 1}, S_1 \geq 1, -1 \leq S_2 \leq 3 \quad (8)$$

或

$$S(\eta) = \frac{\text{Exp}(|S_0 \eta|) - 1}{\text{Exp}(|S_0 \eta|) + 1}, S_0 \geq 1 \quad (9)$$

不同的开关函数对计算精度有影响, 选择什么样开关函数最接近精确解, 这项工作正在探索中。本文的模拟过程采用的是一阶迎风格式。

## 2.3. 边界条件

本文模拟研究的物理系统所在的空间是扇形区域, 角度范围为  $0 < \theta \leq 2\pi N_s / N_i$ , 其中  $N_s = 1, 2, \dots, N_i$ 。当  $N_s = N_i$  时, 扇形就变成了圆。本文选取  $N_s = 1$ 。

### 2.3.1. 径向边界

径向网格节点编号  $ir \in [1, 2, \dots, N_r - 1, N_r]$ , 在物理区域的内侧和外侧分别增加两层虚拟网格 ( $ir = -1, 0, N_r + 1, N_r + 2$ ), 这样网格节点便拓展为  $[-1, 0, 1, \dots, N_r, N_r + 1, N_r + 2]$ 。

环形区域: 内、外半径分别为  $R_1$  与  $R_2$ , 径向步长  $dr = (R_2 - R_1)/(N_r - 1)$ , 节点到原点的距离为  $r = R_1 + (ir - 1) \times dr$ 。假定边界虚拟点上的物理系统处于热力学平衡状态, 那么分布函数就可以通过平衡分布函数公式计算得到:  $f_{ki} = f_{ki}^{eq}$ ; 对于非平衡微观边界条件, 偏离热力学平衡的部分 ( $f_{ki} - f_{ki}^{eq}$ ) 可以通过

插值格式计算得出。虚拟网格点上的宏观物理量可以对边界内的物理场使用插值格式处理。

圆形区域：半径为  $R$ ，径向步长  $dr = R/N_r$ ，节点到原点的距离为  $r = ir \times dr - 1/2$ 。其径向外边界的处理方式与环形区域的处理方法一样，而内边界虚拟网格点 ( $ir = -1, 0$ ) 上的分布函数为<sup>[18]</sup>

$$\begin{cases} f(ir, i\theta, k, i) = f(1-ir, i\theta, k, i+12) & \text{if } (i+12) \leq 24 \\ f(ir, i\theta, k, i) = f(1-ir, i\theta, k, i-12) & \text{if } (i+12) > 24 \end{cases}$$

### 2.3.2. 切向边界

径向网格节点编号  $i\theta \in [1, 2, \dots, N_\theta - 1, N_\theta]$ ，切向角度步长  $d\theta = 2\pi/(24N_\theta)$ ，每个节点所在的角度为  $\theta = i\theta \times d\theta$ 。在切向两侧分别增加两层虚拟网点 ( $i\theta = -1, 0, N_\theta + 1, N_\theta + 2$ )，得到新的网格编号  $[-1, 0, 1, \dots, N_\theta, N_\theta + 1, N_\theta + 2]$ 。在虚拟点的分布函数计算方法如下：

$$f(ir, i\theta, k, i) = \begin{cases} f(ir, N_\theta + i\theta, k, i+1) & \text{if } i\theta < 1 \\ f(ir, i\theta - N_\theta, k, i+23) & \text{if } i\theta > N_\theta \end{cases}$$

其中

$$\{i+1\} = \begin{cases} i+1 & \text{if } i \leq 23 \\ 1 & \text{if } i = 24 \end{cases}, \quad \{i+23\} = \begin{cases} 24 & \text{if } i = 1 \\ i-1 & \text{if } i > 1 \end{cases}$$

## 3. 非平衡效应的宏观表现

在公式(3)中，局部平衡分布函数满足以下七个矩关系：

$$\sum_{ki} f_{ki}^{(0)} = \rho \quad (10)$$

$$\sum_{ki} f_{ki}^{(0)} \mathbf{v}_{ki} = \rho \mathbf{u} \quad (11)$$

$$\sum_{ki} f_{ki}^{(0)} (\mathbf{v}_{ki} - \mathbf{u})^2 / 2 = \rho E \quad (12)$$

$$\sum_{ki} f_{ki}^{(0)} \mathbf{v}_{ki} \mathbf{v}_{ki} = \rho (\mathbf{E} \mathbf{I} + \mathbf{u} \mathbf{u}) \quad (13)$$

$$\begin{aligned} & \sum_{ki} f_{ki}^{(0)} \mathbf{v}_{ki} \mathbf{v}_{ki} \mathbf{v}_{ki} \\ & = \rho \left[ E (\mathbf{u} \mathbf{e}_\beta \mathbf{e}_\gamma \delta_{\beta\gamma} + \mathbf{e}_\alpha \mathbf{u} \mathbf{e}_\gamma \delta_{\gamma\alpha} + \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\beta \mathbf{u} \delta_{\alpha\beta}) + \mathbf{u} \mathbf{u} \mathbf{u} \right] \end{aligned} \quad (14)$$

$$\sum_{ki} f_{ki}^{(0)} \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{v}_{ki} \mathbf{v}_{ki} / 2 = \rho \mathbf{u} (2E + \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} / 2) \quad (15)$$

$$\sum_{ki} f_{ki}^{(0)} \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{v}_{ki} \mathbf{v}_{ki} \mathbf{v}_{ki} / 2 = \rho (2E + \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} / 2) (\mathbf{E} \mathbf{I} + \mathbf{u} \mathbf{u}) \quad (16)$$

在公式(10)~(12)中， $f_{ki}^{eq}$  可以用  $f_{ki}$  替换，而在公式(13)~(16)中如果用  $f_{ki}$  替换  $f_{ki}^{eq}$ ，那么这四个等式将不再成立，此时这四个公式两侧的差异就是系统偏离热力学平衡造成的。这里给出两种物理量：矩  $\mathbf{M}_m$  与中心距  $\mathbf{M}_m^*$ ，

$$\begin{cases} \mathbf{M}_2(f_{ki}) = \sum_{ki} f_{ki} \mathbf{v}_{ki} \mathbf{v}_{ki} \\ \mathbf{M}_3(f_{ki}) = \sum_{ki} f_{ki} \mathbf{v}_{ki} \mathbf{v}_{ki} \mathbf{v}_{ki} \\ \mathbf{M}_{3,1}(f_{ki}) = \sum_{ki} f_{ki} \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{v}_{ki} \mathbf{v}_{ki} / 2 \\ \mathbf{M}_{4,2}(f_{ki}) = \sum_{ki} f_{ki} \mathbf{v}_{ki} \mathbf{v}_{ki} \cdot \mathbf{v}_{ki} \mathbf{v}_{ki} / 2 \end{cases} \quad (17)$$

$$\begin{cases} \mathbf{M}_2^*(f_{ki}) = \sum_{ki} f_{ki} \mathbf{v}_{ki}^* \mathbf{v}_{ki}^* \\ \mathbf{M}_3^*(f_{ki}) = \sum_{ki} f_{ki} \mathbf{v}_{ki}^* \mathbf{v}_{ki}^* \mathbf{v}_{ki}^* \\ \mathbf{M}_{3,1}^*(f_{ki}) = \sum_{ki} f_{ki} \mathbf{v}_{ki}^* \cdot \mathbf{v}_{ki}^* \mathbf{v}_{ki}^* / 2 \\ \mathbf{M}_{4,2}^*(f_{ki}) = \sum_{ki} f_{ki} \mathbf{v}_{ki}^* \mathbf{v}_{ki}^* \cdot \mathbf{v}_{ki}^* \mathbf{v}_{ki}^* / 2 \end{cases} \quad (18)$$

其中  $\mathbf{v}_{ki}^* = \mathbf{v}_{ki} - \mathbf{u}$ ，下标“3,1”表示三阶张量缩并为二阶张量，“4,2”表示四阶张量缩并为二阶张量。矩  $\mathbf{M}_{3,1}$  ( $= M_{3,1,\alpha} \mathbf{e}_\alpha$ ) 是矢量，包含两个组分  $M_{3,1,r}$  和  $M_{3,1,\theta}$ ；矩  $\mathbf{M}_2$  ( $= M_{2,\alpha\beta} \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\beta$ ) 是二阶张量，包含四个组分  $M_{2,rr}$ 、 $M_{2,r\theta}$ 、 $M_{2,\theta r}$ 、 $M_{2,\theta\theta}$ ，其中  $M_{2,r\theta} = M_{2,\theta r}$ ，也就是说  $\mathbf{M}_2$  有三个独立变量  $M_{2,rr}$ 、 $M_{2,r\theta}$ 、 $M_{2,\theta\theta}$ ；同理， $\mathbf{M}_{4,2}$  ( $= M_{4,2,\alpha\beta} \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\beta$ ) 也只有三个独立变量  $M_{4,2,rr}$ 、 $M_{4,2,r\theta}$ 、 $M_{4,2,\theta\theta}$ ； $\mathbf{M}_3$  ( $= M_{3,\alpha\beta\gamma} \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\beta \mathbf{e}_\gamma$ ) 是三阶张量，含有八个组分，其中只有四个独立变量  $M_{3,rrr}$ 、 $M_{3,rr\theta}$ 、 $M_{3,r\theta\theta}$ 、 $M_{3,\theta\theta\theta}$ 。对于中心距  $\mathbf{M}_m^*$  在数学上与矩  $\mathbf{M}_m$  有类似的分析结果。

在概率论里，对于一维分布函数  $f(v)$ ，中心距  $M_3^* = \int f(v)(v-u)^3 dv$  描述的是分布函数  $f(v)$  的“偏斜度”，中心距  $M_4^* = \int f(v)(v-u)^4 dv$  描述的是分布函数  $f(v)$  的“扁平度”。对于高斯分布函数  $f(v) = 1/\sqrt{2\pi} \exp[-(v-u)^2/2]$ ，可以算出  $M_4^* = 3$ 。如果一个分布函数对应的  $M_4^* > 3$  且  $M_2^* = 1$ ，那么这个分布函数在中心位置将比高斯分布函数尖锐；如果一个分布函数对应的  $M_4^* < 3$  且  $M_2^* = 1$ ，那么这个分布函数在中心位置将比高斯分布函数平缓。

在物理意义上， $\mathbf{M}_2$ 、 $\mathbf{M}_3$  描述的是粒子涨落不同自由度的2次和3次关联； $\mathbf{M}_{3,1}$  是粒子涨落在不同自由度3次关联的一次缩并； $\mathbf{M}_{4,2}$  是粒子涨落在不同自由度4次关联的一次缩并。矩  $\mathbf{M}_2$  和中心距  $\mathbf{M}_2^*$  的迹都是守恒量，其迹的数值大小与温度密切相关；矩  $\mathbf{M}_2$  和

中心距  $M_2^*$  的斜对角上的组分与流体的剪切作用有关。矩  $M_3$  和  $M_{3,1}$  描述了两部分物理量的叠加：系统宏观流动引起的能量通量和系统非平衡过程的“微观涨落能流”<sup>1</sup>。中心距  $M_3^*$  和  $M_{3,1}^*$  描述了系统非平衡过程(比如热扩散、粘性等过程)的“微观涨落能流”。处于非平衡态的系统存在“微观涨落能流”，矩  $M_3$ 、 $M_{3,1}$  和中心距  $M_3^*$ 、 $M_{3,1}^*$  都不为0。

另外，平衡态系统的粒子速度分布函数满足  $f(\mathbf{v}) = f(-\mathbf{v})$ ，而非平衡态系统的粒子速度分布函数  $f(\mathbf{v}) \neq f(-\mathbf{v})$ 。为了描述非平衡态系统粒子速度分布函数偏离对称性的程度，可以通过矩和中心距进一步定义关系式：

$$\Delta_m = M_m(f_{ki}) - M_m(f_{ki}^{eq}) \quad (19)$$

$$\Delta_m^* = M_m^*(f_{ki}) - M_m^*(f_{ki}^{eq}) \quad (20)$$

通过伽利略不变性可知，矩  $M_m$  和  $\Delta_m$  同时包含宏观流动  $\mathbf{u}$  和微观热力学运动的信息，而中心距  $M_m^*$  和  $\Delta_m^*$  则单纯描述了微观分子的热力学涨落过程。

## 4. 数值模拟与研究

### 4.1. 雨贡纽关系

当冲击波稳定传播时波前和波后的物理量满足雨贡纽(Hugoniot)关系：

$$\begin{cases} \rho_H(D-u) = \rho_0(D-u_0) \\ P_H - P_0 = \rho_0(D-u_0)(u-u_0) \\ E_H - E_0 = (P_H + P_0)(1/\rho_0 - 1/\rho_H)/2 \end{cases} \quad (21)$$

其中下标 0 和 H 分别表示冲击波波前和波后的物理量，D 为冲击波的传播速度。如果波前和波后的状态方程满足理想气体状态方程， $E = (P/\rho)(\gamma-1)$ ，那么公式(21)中的能量方程可写成

$$\left(\frac{P_H}{\rho} - \frac{P_0}{\rho_0}\right)(\gamma-1) = \frac{1}{2}(P_H + P_0)\left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho}\right) \quad (22)$$

### 4.2. 数值模拟

#### 4.2.1. 环形区域

在内外半径分别为  $R_1 = 2000$ ， $R_2 = 2002$  的环形

<sup>1</sup> 目前所使用的物理学概念大都是描述平衡态系统的物理参数，而这里用于描述非平衡现象的高阶矩在流体力学中并没有对应概念。本文使用的新概念与流体语言中的传统概念在微观机理上可能不同。

物理区域内，冲击波由外向内传播，波速  $D = 2$ ，初始时刻的物理场为：

$$\begin{cases} (\rho, u_r, u_\theta, P)_i = (1, 1, 0, 1) \\ (\rho, u_r, u_\theta, P)_o = (1.50000, -0.66667, 0, 2.33333) \end{cases}$$

这里下标  $i$  表示  $2000 \leq r < 2001.6$ ，该部分为冲击波波前区域，下标  $o$  表示  $2001.6 \leq r \leq 2002$ ，该部分为波后区域<sup>2</sup>，波阵面前后的物理量满足雨贡纽关系(21)。计算网格为  $N_r \times N_\theta = 2000 \times 3$ 。

图 2 为冲击波在环形区域向内传播过程中物理量沿径向的一维分布图，模拟得到的波后物理量的大小为  $(\rho, T, P, u_r) = (1.50031, 1.55593, 2.33437, -0.66686)$ ，即相对于初始时刻的波后物理量的数值分别增加了  $(0.2\%_0, 0.2\%_0, 0.4\%_0, 0.3\%_0)$ 。考虑到环形区域的几何效应，冲击波波后区域的物质随着时间演化将不断聚集压缩，数值模拟得到的波后参数应该比初始条件高一些。

#### 4.2.2. 圆形区域

在半径为  $R = 1$  的圆形区域，冲击波以波速  $D = 2$  向内传播，初始时刻的物理场为：

$$\begin{cases} (\rho, u_r, u_\theta, P)_i = (1, 1, 0, 1) \\ (\rho, u_r, u_\theta, P)_o = (1.50000, -0.66667, 0, 2.33333) \end{cases}$$

这里下标  $i$  表示区域  $0 \leq r < 0.8$ ，下标  $o$  表示区域  $0.8 \leq r \leq 1$ 。计算网格为  $N_r \times N_\theta = 1000 \times 3$ 。图 3 为冲击波在圆形区域传播过程物理量沿径向分布的演化

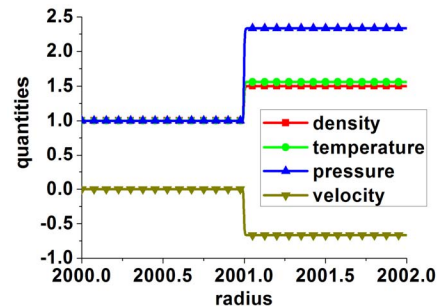


Figure 2. Physical quantities (density, temperature, pressure, velocity) versus radius in the progress of a shock travelling inwards within an annular area

图 2. 冲击波在环形区域向内传播时物理量沿径向的分布图

<sup>2</sup> 初始条件给出的是强间断的物理场，而实际的冲击波波阵面是一个光滑过渡层，因此在数值模拟的初始阶段物理量分布不光滑。在数值模拟一段时间后，冲击波将稳定传播，物理量也会光滑分布。然后，我们可以截取冲击波稳定传播时的物理场作为初始条件再次进行数值模拟。

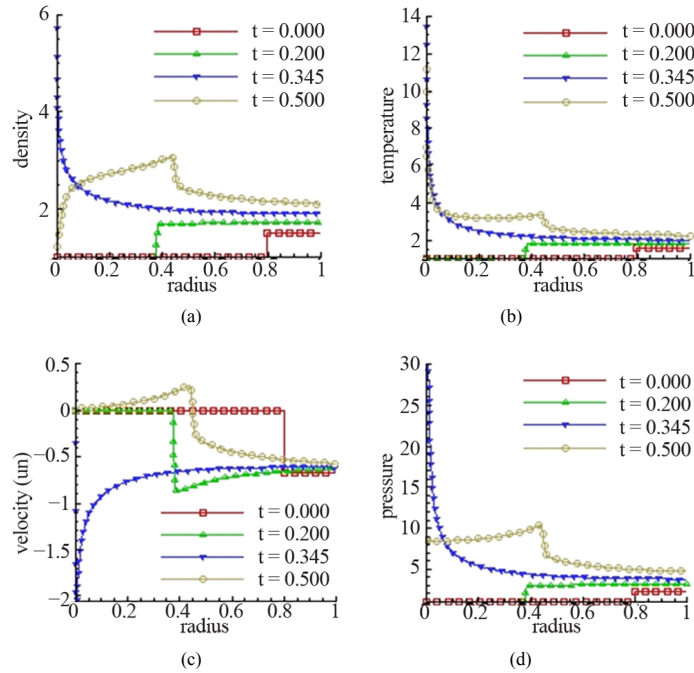


Figure 3. Physical quantities versus radius in the evolution of a shock travelling within a circular area: (a) Density, (b) Temperature, (c) Velocity, (d) Pressure

图 3. 冲击波在圆形区域内传播时的物理量沿径向分布的演化图: (a) 密度, (b) 温度, (c) 速度, (d) 压强

图, 选择的时刻分别是  $t = 0.000, 0.200, 0.345, 0.500$ 。

在初始阶段, 冲击波向内传播, 波后区域的物质具有方向向内的宏观速度, 由于惯性作用波后不断有物质涌入, 该区域的物质不断被挤压, 密度、温度和压强不断上升; 同时, 被挤压的物质将相互排斥, 在斥力的作用下波后区域的这部分物质的速度将不断下降。需要说明的是, 在冲击波向内过程, 波阵面附近的温度不断上升, 冲击波的波速不断加快, 见图 3(c);

当  $t = 0.345$  时, 冲击波到达原点, 此时的密度、温度、压强的大小在径向单调分布, 极点附近的数值最大, 向外依次递减, 见图 3(a)、(b)和(d);

冲击波向外传播时, 波后区域的物质具有向外的宏观速度, 在原点附近的速度最小, 在波阵面处的速度最大。波前区域物质的宏观速度指向内, 并且该部分物质的速度不断减小, 而密度、温度、压强不断上升。

### 4.3. 非平衡效应的分析

#### 4.3.1. 非平衡效应的宏观表现

例如图 2, 在冲击波稳定传播过程, 波前的物理系统处于平衡态, 波后的物理系统也将很快达到新的

平衡态, 而波阵面附近的非平衡效应则表现的比较明显。图 4 给出了对应于图 2 所示冲击波波阵面附近的中心距  $M_2^*, M_3^*, M_{3,1}^*, M_{4,2}^*$  在径向的分布图。这里只给出了各个中心距的独立变量。从图 4 可以看出以下几点:

第一, 图 4(b)、(d)、(f)、(g)中显示  $\Delta_2^*, \Delta_3^*, \Delta_{3,1}^*, \Delta_{4,2}^*$  的数值都比较小, 数量级是  $10^{-3}$ , 这说明我们所研究的非平衡系统偏离平衡态的程度并不是很大;

第二, 图 4(c)中的  $M_3^*$  与图(d)中的  $\Delta_3^*$  的图像一样, 图(e)中的  $M_{3,1}^*$  与图(f)  $\Delta_{3,1}^*$  的图像一样。这是因为在理论上  $M_3^*(f^{eq}) = 0$ ,  $M_{3,1}^*(f^{eq}) = 0$ , 故  $M_3^*(f) = \Delta_3^*$ ,  $M_{3,1}^*(f) = \Delta_{3,1}^*$ ;

第三, 图 4(b)中  $\Delta_{2,rr}^*$  与  $\Delta_{2,\theta\theta}^*$  的大小相等, 正负号相反, 即  $\Delta_{2,rr}^* + \Delta_{2,\theta\theta}^* = 0$ 。这是因为  $M_{2,rr}^*(f^{eq})$  与  $M_{2,\theta\theta}^*(f^{eq})$  的物理量纲分别对应  $r$  与  $\theta$  自由度上的内能, 而  $\Delta_{2,rr}^*$  与  $\Delta_{2,\theta\theta}^*$  分别表示非平衡系统在  $r$  与  $\theta$  自由度上偏离能量均分状态的程度<sup>3</sup>。

第四, 在图 4(d)、(f)、(h)中  $\Delta_{3,rr}^*, \Delta_{3,1,r}^*, \Delta_{4,2,rr}^*$  的峰值最大, 而  $\Delta_{3,\theta\theta}^*, \Delta_{3,1,\theta}^*, \Delta_{4,2,\theta\theta}^*$  的数值接近于零。这是因为它们的物理量纲都与“能量涨落能流”有关。由

<sup>3</sup> 能量均分定理描述的是平衡态系统的物理规律, 处于非平衡态的物理系统在各个自由度的能量不一定相等。

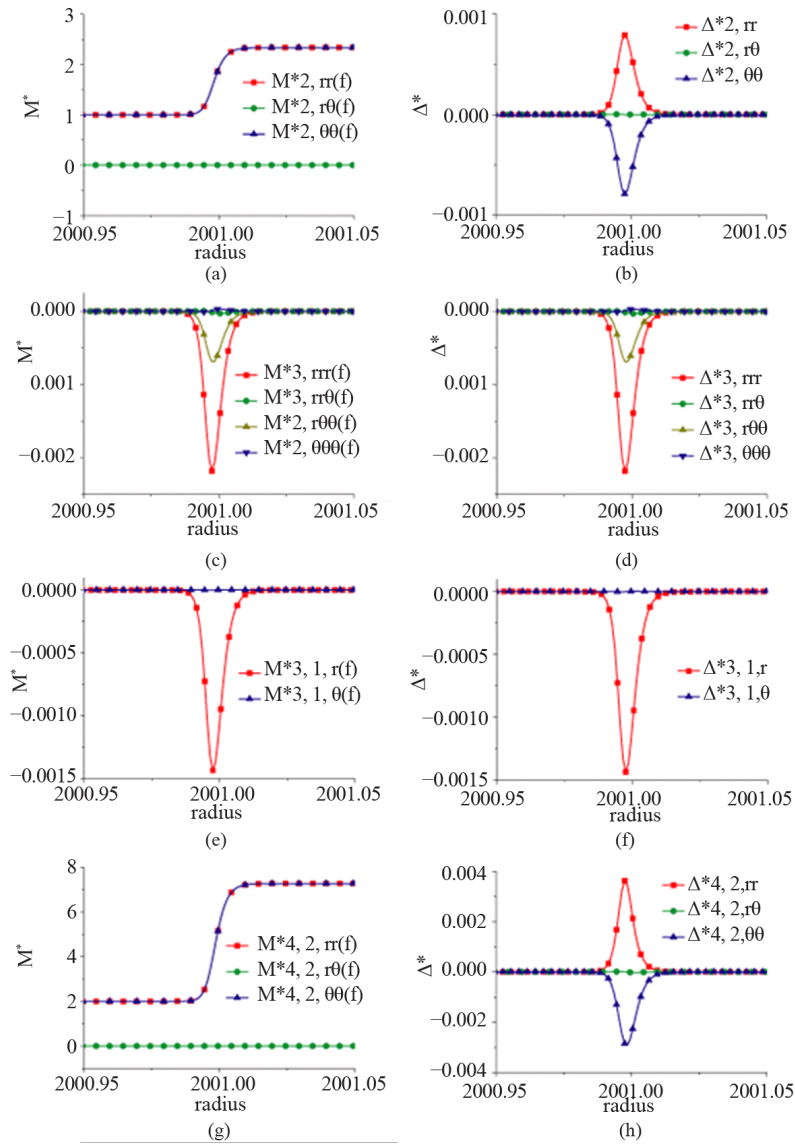


Figure 4. Central moments and their corresponding non-equilibrium manifestations in the progress of a shock wave travelling inwards within an annular area. Figures (a)-(h) are for  $M_2^*$ ,  $\Delta_2^*$ ,  $M_3^*$ ,  $\Delta_3^*$ ,  $M_{3,1}^*$ ,  $\Delta_{3,1}^*$ ,  $M_{4,2}^*$ ,  $\Delta_{4,2}^*$ , respectively

图 4. 冲击波在环形区域向内传播时  $M^*$  与  $\Delta^*$  在径向的数值分布。图(a)-(h)依次对应  $M_2^*$ ,  $\Delta_2^*$ ,  $M_3^*$ ,  $\Delta_3^*$ ,  $M_{3,1}^*$ ,  $\Delta_{3,1}^*$ ,  $M_{4,2}^*$ ,  $\Delta_{4,2}^*$ .

于冲击波的冲击作用，波阵面附近的物质粒子在速度空间分布的对称性将得到破坏，系统在  $r$  自由度上将存在较大的“能量涨落能流”，而在  $\theta$  自由度上基本上没有“能量涨落能流”。

#### 4.3.2. 非平衡效应的微观机制

在冲击波波阵面附近，系统非平衡效应的演化过程可以解释如下：冲击波是一个能量传播的过程，在冲击波附近会产生较大的宏观物理量的梯度。在冲击波作用下，物质粒子在  $r$  自由度上的能量(包括动能、内能)首先得到增加，然后这部分变化的内能将通过分

子间的碰撞传递到  $\theta$  自由度。同时， $r$  自由度的内能在冲击波作用下继续升高，如此往复，直到宏观物理量的梯度完全消失，系统在各个自由度的能量均分，系统将达到新的热力学平衡。

根据  $\Delta_m^*$  的模拟数值，我们可以分析得知真实分布函数在速度空间的一些主要特点，分析步骤如下：

第一步：图4(b)显示，在波阵面附近  $\Delta_{2,rr}^* > 0$ ， $\Delta_{2,\theta\theta}^* < 0$ 。这说明  $f(v_r)$  比麦克斯韦分布函数“扁平”， $f(v_\theta)$  比麦克斯韦分布函数“瘦高”，并且  $f(v_r)$  的峰值低于麦克斯韦分布函数的峰值，而  $f(v_\theta)$  的峰值

高于麦克斯韦分布函数的峰值；根据图4(d)中  $\Delta_3^*$  和(f)中  $\Delta_{3,1}^*$  的分布，我们可以得知  $f(v_\theta)$  是对称分布的，而  $f(v_r)$  是非对称分布的，并且  $f(v_r)$  在  $v_r < 0$  的部分比在  $v_r > 0$  的部分“胖”。我们称之为“负偏斜”。图5给出了在冲击波波振面处分布函数在一维速度空间  $v_r$  与  $v_\theta$  示意图，其中长划线代表  $f(v_r)$ ，短划线代表  $f(v_\theta)$ ，实线代表麦克斯韦分布函数  $f^{eq}$ 。需要指出的是，麦克斯韦分布函数描述的是平衡态系统的粒子速度分布律，此时系统的粒子速度分布具有各向同性，也就是系统满足能量均分定理，所以图5中的麦克斯韦分布函数  $f^{eq}(v_r)$  和  $f^{eq}(v_\theta)$  是重合的，这里统一用  $f^{eq}$  表示。

第二步：由图4(b)中  $\Delta_{2,r\theta}^* = 0$  可知冲击波波振面附近的分布函数在速度空间  $(v_r, v_\theta)$  的轮廓投影应该关于  $v_r$  或  $v_\theta$  成轴对称分布。根据图5给出的分析结果可知分布函数  $f(v_\theta)$  在速度空间  $v_\theta$  是对称分布的，因此分布函数在速度空间的轮廓投影的对称轴就是坐标轴  $v_r$ 。图4(h)可以给出一致的结论。图6给出了冲击波波振面处的真实分布函数在二维速度空间  $(v_r, v_\theta)$  的轮廓投影示意图。

第三步：联立图5和图6的分析结果就可以得到真实速度分布函数在速度空间  $(v_r, v_\theta)$  的三维示意图，见图7。

### 5. 总结

本文使用极坐标高速可压格子玻尔兹曼模型研究了内爆冲击过程。所用离散速度模型是由Watari和Tsutahara提出的D2V97，空间项使用修正的Warming-

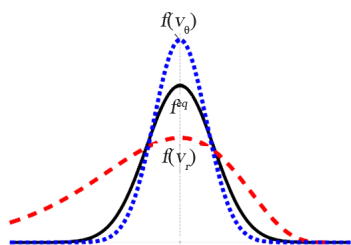


Figure 5. Sketch of the Maxwellian and actual distribution functions versus velocity  $v_r$  and  $v_\theta$ , respectively. The long dashed line is for distribution function  $f(v_r)$ , the shot dashed one is for distribution function  $f(v_\theta)$ , and the solid line is for  $f^{eq}$ .

图5. 真实分布函数和麦克斯韦分布函数在速度空间  $v_r$  与  $v_\theta$  的一维示意图。  $f(v_r)$ 、 $f(v_\theta)$  与  $f^{eq}$  分别用长划线、短划线和实线表示。

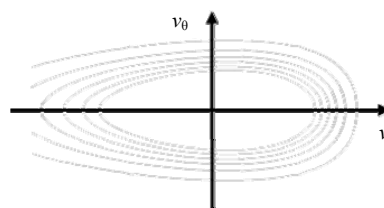


Figure 6. The sketch of contours of the actual distribution functions in velocity space  $(v_r, v_\theta)$

图6. 真实分布函数在速度空间  $(v_r, v_\theta)$  的投影轮廓示意图

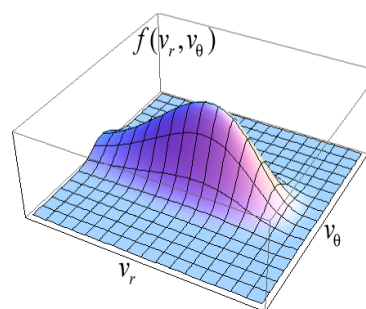


Figure 7. The 3-dimensional sketch of the actual distribution functions in velocity space  $(v_r, v_\theta)$

图7. 真实分布函数在速度空间  $(v_r, v_\theta)$  的三维分布示意图

Beam 格式处理，时间项使用解析算法。模拟研究了冲击波在环形区域和圆形区域中向内传播时宏观物理量(密度、温度、压强和速度)在径向的分布情况。通过分析离散速度分布函数的高阶矩的空间分布特征，研究了冲击波波阵面附近系统的非平衡效应，并给出了真实分布函数在速度空间的主要特征。这些研究结果有助于从更基本的层面上理解界面附近的非平衡行为，也为传统数值模拟中物理建模的修正提供了重要参考。

### 参考文献 (References)

- [1] Succi, S. (2001) The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond. Oxford University Press, New York.
- [2] 许爱国, 张广财, 李华, 朱建士等. (2011) 材料动力学的介观模拟(北京应用物理与计算数学研究所讲义)[Z]. 北京.
- [3] Xu, A., Zhang, G., Gan, Y., Chen, F. and Yu, X. (2012) Lattice Boltzmann modeling and simulation of compressible flows. *Frontiers of Physics*, 7, 582-600.
- [4] Pan, X., Xu, A., Zhang, G. and Jiang, S. (2007) Lattice Boltzmann approach to high-speed compressible flows. *International Journal of Modern Physics C*, 18, 1747-1764.
- [5] Gan, Y., Xu, A., Zhang, G. and Li, Y. (2008) Finite-difference Lattice Boltzmann scheme for high-speed compressible flow: Two-dimensional case. *Communications in Theoretical Physics*, 50, 201-210.
- [6] Gan, Y., Xu, A., Zhang, G., Yu, X. and Li, Y. (2008) Two-dimensional Lattice Boltzmann model for compressible flows with



- high mach number. *Physica A*, **387**, 1721-1732.
- [7] Gan, Y., Xu, A., Zhang, G. and Li, Y. (2011) Flux limiter Lattice Boltzmann scheme approach to compressible flows with. *Communications in Theoretical Physics*, **56**, 490-498.
- [8] Gan, Y., Xu, A., Zhang, G. and Li, Y. (2011) Lattice Boltzmann study on Kelvin-Helmholtz instability: Roles of velocity and density gradients. *Physical Review E*, **83**, Article ID: 056704.
- [9] Chen, F., Xu, A., Zhang, G., Gan, Y., Tao, C. and Li, Y. (2009) Lattice Boltzmann model for compressible fluids: Two-dimensional case. *Communications in Theoretical Physics*, **52**, 681-694.
- [10] Chen, F., Xu, A., Zhang, G., Li, Y. and Succi, S. (2010) Multiple-relaxation-time Lattice Boltzmann approach to compressible flows with flexible specific-heat ratio and prandtl number. *Europhysics Letters*, **90**, Article ID: 54003.
- [11] Chen, F., Xu, A., Zhang, G. and Li, Y. (2010) Three-dimensional Lattice Boltzmann model for high-speed compressible flows. *Communications in Theoretical Physics*, **54**, 1121-1128.
- [12] Chen, F., Xu, A., Zhang, G. and Li, Y. (2011) Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann model for compressible fluids. *Physics Letters A*, **375**, 2129-2139.
- [13] Chen, F., Xu, A., Zhang, G. and Li, Y. (2011) Flux limiter Lattice Boltzmann for compressible flows. *Communications in Theoretical Physics*, **56**, 333-338.
- [14] Chen, F., Xu, A., Zhang, G. and Li, Y. (2011) Prandtl number effects in MRT lattice Boltzmann models for shocked and unshocked compressible fluids. *Theoretical and Applied Mechanics Letters*, **1**, Article ID: 052004.
- [15] Chen, F., Xu, A., Zhang, G. and Li, Y. (2011) Multiple-relaxation-time Lattice Boltzmann approach to Richtmyer-Meshkov. *Communications in Theoretical Physics*, **55**, 325-334.
- [16] Gan, Y., Xu, A., Zhang, G. and Yang, Y. (2013) Lattice BGK kinetic model for high speed compressible flows: Hydrodynamic and nonequilibrium behaviors. *EPL*, **103**, Article ID: 24003.
- [17] Chen, F., Xu, A., Zhang, G. and Wang, Y. (2013) Two dimensional MRT LB model for compressible and incompressible flows. *Frontiers of Physics*, in press. arXiv: 1305.4736.
- [18] Lin, C., Xu, A., Zhang, G., Li, Y. and Succi, S. (2013) Polar coordinate lattice Boltzmann modeling of compressible flows. e-print arXiv: 1302.7104.
- [19] Yan, B., Xu, A., Zhang, G., Ying, Y. and Li, H. (2013) Lattice Boltzmann model for combustion and detonation. *Frontiers of Physics*, **8**, 94-110.
- [20] Lin, C., Xu, A., Zhang, G. and Li, Y. (2013) Polar coordinate lattice Boltzmann modeling of detonation phenomena. e-print arXiv: 1308.0653.
- [21] Watari, M. (2011) Rotational slip flow in coaxial cylinders by the finite-difference lattice Boltzmann methods. *Communications in Computational Physics*, **9**, 1293-1314.
- [22] Watari, M. (2010) Relationship between accuracy and number of velocity particles of the finite-difference lattice Boltzmann method in velocity slip simulations. *Journal of Fluids Engineering*, **132**, Article ID: 101401.
- [23] Watari, M. and Tsutahara, M. (2003) Two-dimensional thermal model of the finite-difference lattice Boltzmann method with high spatial isotropy. *Physical Review E*, **67**, Article ID: 036306.