

An Efficient Two-Dimensional Discrete Boltzmann Model of Detonation

Chuangdong Lin¹, Aiguo Xu^{2,3,4*}, Guangcai Zhang^{2,4,5}, Yingjun Li^{1*}

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

²National Laboratory for Science and Technology on Computational Physics, Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing

³Center for Applied Physics and Technology, MOE Key Center for High Energy Density Physics Simulations, College of Engineering, Peking University, Beijing

⁴State Key Laboratory of Theoretical Physics, Institute of Theoretical Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing

⁵State Key Laboratory of Explosion Science and Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing

Email: *Xu_Aiguo@iapcm.ac.cn, *lyj@aphy.iphy.ac.cn

Received: Oct. 8th, 2015; accepted: Oct. 22nd, 2015; published: Oct. 28th, 2015

Copyright © 2015 by authors and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

Abstract

A modified multiple-relaxation-time discrete Boltzmann model is proposed to simulate detonation. Compared with our previous model [A. Xu, C. Lin, G. Zhang, Y. Li, Phys. Rev. E 91 (2015) 043306] adopting 24 discrete velocities, this model employs only 16 ones and consequently has smaller computational cost of simulating reactive or nonreactive fluid flows. Additionally, this model has a better stability than the previous one in our numerical tests. Using this model, we simulate the Richtmyer-Meshkov instability induced by detonation wave in four cases. It is interesting to find that, when a detonation wave travels from the chemical reactant to a lighter nonreactive medium, since the chemical energy does not release any more, the temperature reduces suddenly, and consequently a region with higher density exists around the material interface.

Keywords

Discrete Boltzmann Model, Detonation, Richtmyer-Meshkov Instability, Non-Equilibrium Effect

*通讯作者。

爆轰问题的一个高效二维离散玻尔兹曼模型

林传栋¹, 许爱国^{2,3,4*}, 张广财^{2,4,5}, 李英骏^{1*}

¹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

²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

³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

⁴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

⁵爆炸科学与技术国家重点实验室(北京理工大学), 北京

Email: *Xu_Aiguo@iapcm.ac.cn, *lyj@aphy.iphys.ac.cn

收稿日期: 2015年10月8日; 录用日期: 2015年10月22日; 发布日期: 2015年10月28日

摘要

本文构建了多松弛时间离散玻尔兹曼模型, 并使用该模型模拟爆轰现象。相对于我们之前的一个模型[Xu A., Lin C., Zhang G., Li Y., Phys. Rev. E 91 (2015) 043306], 本模型在模拟有化学反应或无化学反应流体系统时的计算效率更高。这是因为前者使用了24个离散速度, 而本模型只使用16个。在模拟部分高马赫物理系统时, 本模型表现出更高的数值稳定性。使用该模型, 本文分四种情况模拟了爆轰波激发的Richtmyer-Meshkov不稳定性问题。当爆轰波由反应物传向另一种较轻的不反应的物质时, 由于突然失去能量补充, 温度急剧下降, 在物质界附近将会出现一层高密区域。

关键词

离散玻尔兹曼模型, 爆轰波, Richtmyer-Meshkov不稳定性, 非平衡效应

1. 引言

爆轰[1]-[6]是一种超声速燃烧。爆轰波以超声速或者高超声速传播, 波后压力和密度明显升高。爆轰波前沿是预压缩冲击波。该冲击波传向炸药并引发剧烈的化学反应, 释放出大量化学能[1]。爆轰波借助迅速释放的化学反应放热实现自持传播。爆轰在工业生产、航空航天、国防建设等方面具有重要应用, 比如脉冲爆轰发动机、旋转爆轰发动机、斜爆轰冲压推进和爆轰助推系统的研发已经取得了一系列进展。另外, 研究爆轰对于各类爆炸事故的预防和处理等具有重要的现实意义。

本文使用离散玻尔兹曼方法(Discrete Boltzmann Method)研究爆轰问题。离散玻尔兹曼方法与传统的格子玻尔兹曼方法(Lattice Boltzmann Method) [7]不同。传统的格子玻尔兹曼方法只是偏微分方程组(如 Euler 方程组、Navier-Stokes 方程组等)的一种数值逼近解法。而我们构建和使用的离散玻尔兹曼模型等价于一个 Navier-Stokes (NS)模型外加一个关于热动非平衡效应的粗粒化模型。格子玻尔兹曼方法在燃烧模拟方面已有一系列工作[8]-[14], 但这些工作都落脚于低马赫不可压问题, 并且假设化学应对流场没有影响。最近, 我们课题组在燃烧(特别是爆轰)系统的离散玻尔兹曼建模与模拟方面取得一些突破性进展[15]-[18]。

2. 离散玻尔兹曼模型

2.1. 演化方程

在文献[17]中, 我们构建了比热比和普朗特数可调的多松弛时间(Multiple-relaxation-time)离散玻尔兹

曼模型模拟燃烧现象。在玻尔兹曼方程的右侧添加了一个化学项 \mathbf{C} ，表示化学反应引起的分布函数的改变率。通过 Chapman-Enskog 分析可知，为了恢复带有化学反应的 NS 方程组，该模型至少需要满足 24 个独立的矩关系，与之对应，至少需要使用 24 个离散速度。现在，我们引入另一种化学项的计算形式。可以证明，本模型只需满足 16 个矩关系就可以恢复相同的 NS 方程组。这样，离散速度就可以从 24 个减少为 16 个，模型的计算效率大幅度提高。

离散玻尔兹曼方程的形式如下¹

$$\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{f} = -\mathbf{M}^{-1} \left[\hat{\mathbf{R}} (\hat{\mathbf{f}} - \hat{\mathbf{f}}^{eq}) - \hat{\mathbf{A}} \right] + \mathbf{C} \quad (1)$$

这里，对角矩阵 $\mathbf{v} = \text{diag}(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_N)$ 表示离散速度，下标 $N=16$ 表示离散速度总数，各个离散速度分别为

$$\mathbf{v}_i = \begin{cases} \text{cyc} : (\pm v_a, 0) & \text{当 } 1 \leq i \leq 4 \text{ 时,} \\ \text{cyc} : (\pm v_b, \pm v_b) & \text{当 } 5 \leq i \leq 8 \text{ 时,} \\ \text{cyc} : (\pm v_c, 0) & \text{当 } 9 \leq i \leq 12 \text{ 时,} \\ \text{cyc} : (\pm v_d, \pm v_d) & \text{当 } 13 \leq i \leq 16 \text{ 时.} \end{cases} \quad (2)$$

其中 cyc 表示循环排列， (v_{ix}, v_{iy}) 是离散速度 \mathbf{v}_i 的两个分量， $(v_a, v_b, v_c, v_d, \eta_a)$ 为可调参数。图 1 给出了离散速度的示意图。

另外， $\mathbf{f} = (f_1, f_2, \dots, f_N)^T$ 为离散分布函数， $\mathbf{f}^{eq} = (f_1^{eq}, f_2^{eq}, \dots, f_N^{eq})^T$ 为离散化的平衡态分布函数， $\hat{\mathbf{f}} = \mathbf{M}\mathbf{f} = (\hat{f}_1, \hat{f}_2, \dots, \hat{f}_N)^T$ 表示分布函数的矩， $\hat{\mathbf{f}}^{eq} = \mathbf{M}\mathbf{f}^{eq} = (\hat{f}_1^{eq}, \hat{f}_2^{eq}, \dots, \hat{f}_N^{eq})^T$ 表示平衡态分布函数的矩，并且 $\hat{f}_1^{eq} = \rho$ ， $\hat{f}_2^{eq} = \rho u_x$ ， $\hat{f}_3^{eq} = \rho u_y$ ， $\hat{f}_4^{eq} = \rho[(D+I)T + u^2]$ ， $\hat{f}_5^{eq} = \rho(T + u_x^2)$ ， $\hat{f}_6^{eq} = \rho u_x u_y$ ， $\hat{f}_7^{eq} = \rho(T + u_y^2)$ ， $\hat{f}_8^{eq} = \rho u_x [(D+I+2)T + u^2]$ ， $\hat{f}_9^{eq} = \rho u_y [(D+I+2)T + u^2]$ ， $\hat{f}_{10}^{eq} = 3\rho u_x T + \rho u_x^3$ ， $\hat{f}_{11}^{eq} = \rho u_y T + \rho u_x^2 u_y$ ， $\hat{f}_{12}^{eq} = \rho u_x T + \rho u_x u_y^2$ ， $\hat{f}_{13}^{eq} = 3\rho u_y T + \rho u_y^3$ ， $\hat{f}_{14}^{eq} = \rho T [(D+I+2)T + u^2] + \rho u_x^2 [(D+I+4)T + u^2]$ ， $\hat{f}_{15}^{eq} = \rho u_x u_y [(D+I+4)T + u^2]$ ， $\hat{f}_{16}^{eq} = \rho T [(D+I+2)T + u^2] + \rho u_y^2 [(D+I+4)T + u^2]$ ；密度为 $\rho = \sum f_i$ ，速度为 $\mathbf{u} = \sum f_i \mathbf{v}_i / \rho$ ，温度为 $T = \sum f_i (\mathbf{v}_i - \mathbf{u}) \cdot (\mathbf{v}_i - \mathbf{u}) / [(D+I)\rho]$ ； \mathbf{M}^{-1} 是 \mathbf{M} 逆矩阵， \mathbf{M} 是 $N \times N$ 的矩阵，其元素为 $M_{1i} = 1$ ， $M_{2i} = v_{ix}$ ， $M_{3i} = v_{iy}$ ， $M_{4i} = v_i^2 + \eta_i^2$ ， $M_{5i} = v_{ix}^2$ ， $M_{6i} = v_{ix} v_{iy}$ ， $M_{7i} = v_{iy}^2$ ， $M_{8i} = (v_i^2 + \eta_i^2) v_{ix}$ ， $M_{9i} = (v_i^2 + \eta_i^2) v_{iy}$ ， $M_{10i} = v_{ix}^3$ ， $M_{11i} = v_{ix}^2 v_{iy}$ ， $M_{12i} = v_{ix} v_{iy}^2$ ， $M_{13i} = v_{iy}^3$ ， $M_{14i} = (v_i^2 + \eta_i^2) v_{ix}^2$ ， $M_{15i} = (v_i^2 + \eta_i^2) v_{ix} v_{iy}$ ， $M_{16i} = (v_i^2 + \eta_i^2) v_{iy}^2$ ； $D=2$ 表示空间维度， I 表示额外自由度数， η_i^2 用来描述在额外自由度上的内能。当 $i=5, 6, 7, 8$ 时， $\eta_i = \eta_a$ ，否则 $\eta_i = 0$ ；对角矩阵 $\hat{\mathbf{R}} = \text{diag}(R_1, R_2, \dots, R_N)$ 表示松弛因子，其中 R_i 描述了物理量 \hat{f}_i 松弛到平衡态 \hat{f}_i^{eq} 的速度； $\hat{\mathbf{A}} = \text{diag}(0, \dots, 0, \hat{A}_8, \hat{A}_9, 0, \dots, 0)^T$ 用来修正碰撞项，其中

$$\hat{A}_8 = \rho T \frac{R_5 - R_8}{R_5} \left[u_x \left(4 \frac{\partial u_x}{\partial x} - \frac{4}{D+I} \frac{\partial u_x}{\partial x} - \frac{4}{D+I} \frac{\partial u_y}{\partial y} \right) + 2u_y \left(\frac{\partial u_y}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial y} \right) \right] \quad (3)$$

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

化学项 $\mathbf{C} = (C_1, C_2, \dots, C_N)^T$ ，其计算方式为

$$C_i = f_i^{eq}(\rho, \mathbf{u}, T + T') - f_i^{eq}(\rho, \mathbf{u}, T) \quad (5)$$

¹ 在文献[17]中，公式(1)内修正项 \hat{A} 前的符号应为负号(排版错误)，其余推导过程是正确的，特此声明。As for Ref. [17], there is a typo on the sign in front of the correction term \hat{A} in Eq. (1). It should be “-”. The remaining derivations are correct.

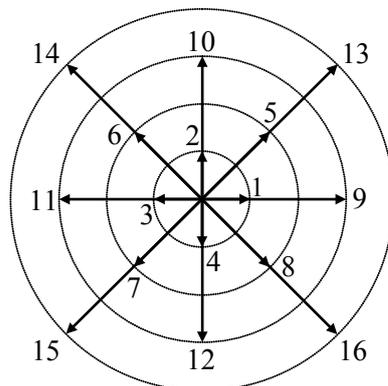


Figure 1. Schematic of the discrete velocity model

图 1. 离散速度示意图

式中上标'为随体导数,表示化学反应引起的物理量的变化率,即 T' 表示化学反应引起的温度的变化率。可以证明, $T' = 2Q\lambda'/(D+I)$,其中 Q 为单位质量的反应物完全反应后释放的化学能, $\lambda' = \rho^B/\rho$ 为产物的质量分数, ρ^B 为产物的密度。产物用符号 B 表示,反应物用 A 表示。在化学反应过程,反应物 A 变成产物 B 。化学反应进程使用科克伦(Cochran)函数描述,

$$\lambda' = a_1 p^{a_2} (1-\lambda) + a_3 p^{a_4} \lambda (1-\lambda) \quad (6)$$

式中 (a_1, a_2, a_3, a_4) 为待定可调参数, $p = \rho T$ 为压强。另外,我们引入点火温度 T_c 。当温度 T 大于点火温度 T_c 时,化学反应进行,否则停止。

本模型与文献[17]的相同点:

- 本模型的假设条件和应用范围与文献[17]一致;
- 演化方程的时间偏微分和空间偏微分的计算方式与文献[17]一样;
- 通过 Chapman-Enskog 分析,本模型可以恢复带有化学反应的可压 NS 方程组,结果与文献[17]相同;
- 可以证明,在一阶精度下,公式(5)给出的化学项与文献[17]中的化学项一致。

本模型与文献[17]的不同点:

- 本模型满足的独立的矩关系只有 16 个,对应的离散速度为 16 个,而文献[17]使用了 24 个矩关系和 24 个离散速度;
- 化学项的计算方法不同;
- 数值测试表明,在模拟高马赫物理系统时,本模型的数值稳定性要比文献[17]中的高。

2.2. 非平衡表征

离散玻尔兹曼方程是玻尔兹曼方程在速度空间的特殊离散化形式。玻尔兹曼方程具有描述非平衡系统的本质属性。离散玻尔兹曼方法继承了这一特点。本文引入非平衡表征 $\mathbf{d} = \hat{\mathbf{f}} - \hat{\mathbf{f}}^{eq} = (\Delta_1, \Delta_2, \dots, \Delta_N)^T$,并将

$$d = \sqrt{\sum \Delta_i^2} \quad (7)$$

作为评估系统偏离平衡态的程度[17]。因此,当系统处于平衡态时 $d = 0$,否则 $d > 0$ 。系统偏离平衡态的越远, d 越大。可以看出,离散玻尔兹曼方法提供了一个简单有效的方法研究非平衡效应。另外,非平衡表征可用于捕获系统中的各类界面。这是因为,非平衡效应与物理量的梯度密切关联。在界面处,物理量梯度的模急剧增加,非平衡表征随之增强。读者可参考文献[15]-[18]关于非平衡表征更加详细的叙述。

3. 数值模拟

本文的数值模拟有两部分。在第一部分，为了检测模型的正确性，我们模拟了一维稳定爆轰波，并将数值结果与解析解进行对比。在第二部分，我们模拟了爆轰波激发的 RM 不稳定性现象，并讨论了四种不同的情形。在下面的数值模拟中，我们使用参数 $Q = 8$ ， $(a_1, a_2, a_3, a_4) = (0.5, 1, 200, 1)$ ， $T_c = 2.2$ 控制化学反应。

3.1. 稳定爆轰

现在我们模拟一维稳定爆轰现象。初始的物理场为

$$\begin{cases} (\rho, T, u_x, u_y, \lambda)_L = (1.62430, 4.88707, 1.63299, 0, 1) \\ (\rho, T, u_x, u_y, \lambda)_R = (1, 1, 0, 0, 0) \end{cases} \quad (8)$$

其中下标 L 和 R 分别代表左侧区域 $x < 0.1$ 和右侧区域 $x \geq 0.1$ 。这里使用的参数为 $I = 3$ ，

$(v_a, v_b, v_c, v_d, \eta_a) = (2.0, 2.9, 4.9, 6.9, 3.9)$ ， $\Delta x = \Delta y = 5 \times 10^{-4}$ ， $\Delta t = 10^{-5}$ ， $R_5 = R_6 = R_7 = 10^5$ ，其它碰撞参数为 5×10^4 。

图 2 给出了一维稳定爆轰波在演化过程中压强沿 x 轴的分布情况。图 2(a) 给出了在时刻 $t = 0.07, 0.08$ 和 0.09 的 DBM 数值结果，图 2(b) 给出了在时刻 $t = 0.09$ 的 DBM 数值结果、CJ 理论解[2] [3]和 ZND 理论解[4]-[6]。根据图(a)的数值结果可知爆轰波的传播速度为 4.2，这与解析解 4.24870 的相对误差为 1%。在图 2(b)中，爆轰波波后的数值结果为 $p = 7.91847$ ，与解析解 7.93809 的相对误差为 0.25%。图 2(b)显示，在冯·诺依曼峰峰后 DBM 的数值结果与 ZND 解析解符合的较好。在峰前它们之间存在差异的原因是，ZND 理论假设在冯·诺依曼峰处是一个强间断并忽略粘性和热传导的存在，而 DBM 的数值理论包含粘性和热传导效应。因此我们的数值结果更加真实。

3.2. RM 不稳定性

当冲击波经过不同物质的界面时，会对界面产生一个加速度，界面将会获得速度。如果初始界面有扰动，那么在界面附件将会出现 Richtmyer-Meshkov (RM)不稳定性现象[19] [20]。爆轰波是带有化学反应的冲击波。当爆轰波冲击扰动界面时，就会产生 RM 不稳定性现象。RM 不稳定性对爆轰过程有着非常重要的作用。现在模拟爆轰波激发的 RM 不稳定性现象。数值模拟区域是长 \times 宽 = 0.3×0.05 的长方形，

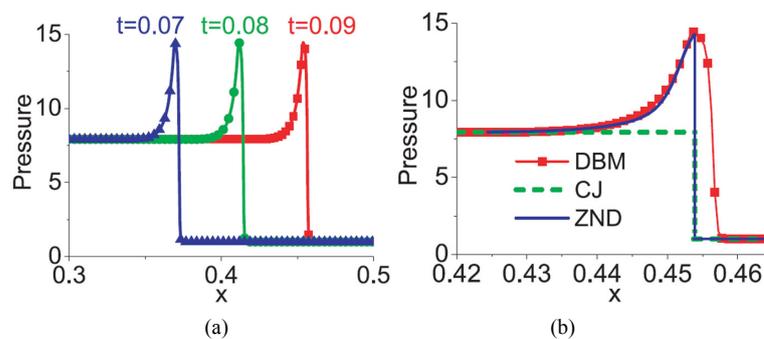


Figure 2. The pressure versus x in the evolution of a steady detonation: (a) the DBM results at various instants $t = 0.07, 0.08$, and 0.09 ; (b) the DBM, CJ and ZND results at time $t = 0.09$

图 2. 一维稳定爆轰波演化过程的压强轮廓图: (a) 在 $t = 0.07, 0.08$ 和 0.09 时刻的 DBM 数值结果; (b) 在 $t = 0.09$ 时刻的 DBM 数值结果、CJ 理论解和 ZND 理论解

沿 x 轴分为三个部分： $0 \leq x < 0.06$ 、 $0.06 \leq x < 0.075$ 和 $0.075 \leq x < 0.3$ 。左侧区域是向右传播的稳定爆轰波，中间区域充满了炸药。这两个区域的物理场分布与图 2(b) 的一样。右侧区域是另一种物质。通过更换右侧区域的物质，我们可以得到不同情形的数值模拟。本文模拟了四种情况。第一种情况，爆轰波由炸药传向较重介质，在重介质中化学反应不再进行；第二种情况，爆轰波由炸药传向较重介质，在重介质中化学反应仍然进行；第三种情况，爆轰波由炸药传向较轻介质，在轻介质中化学反应不再进行；第四种情况，爆轰波由炸药传向较轻介质，在轻介质中化学反应仍然进行。另外，为了激发出 RM 不稳定性现象，我们在中间区域和右侧区域之间的物质界面上施加了初始扰动 $x = 0.075 - 0.005 \cos(40\pi y)$ 。

3.2.1. 第一种情况

我们首先考虑第一种情况：稳定爆轰波由炸药传向另一种不反应的较重介质。这种介质的初始物理量为 $(\rho, T, u_x, u_y) = (3, 1/3, 0, 0)$ 。其它数值参数与图 2 一样。

图 3 给出了 RM 不稳定性演化过程的密度场，从上到下依次对应时刻 $t = 0.00$ 、 0.01 、 0.03 和 0.13 。图(a)给出了初始时刻爆轰波从左侧炸药传向右侧一种较重的物质。图(b)显示，由于爆轰波的压缩作用，扰动振幅大幅度减小。之后，振幅开始增长，见图(c)~(d)。在图(d)中可以清晰地看到轻介质中的泡状结构和重介质中的钉状结构。可以看出，RM 不稳定性的发展能够促进流体系统中不同介质的相互混合渗透。

图 4 给出了非平衡表征 d 在时刻 $t = 0.00$ 、 0.01 、 0.02 、 0.03 、 0.04 、 0.05 、 0.06 和 0.13 的数值结果。图(a)显示，初始时刻在爆轰波附近非平衡表征非常明显。从图(b)~(g)可以清晰地辨认出反射冲击波、物质界面和透射冲击波的演化过程。当平面爆轰波与物质界面相撞后，该爆轰波转变成一个透射冲击波

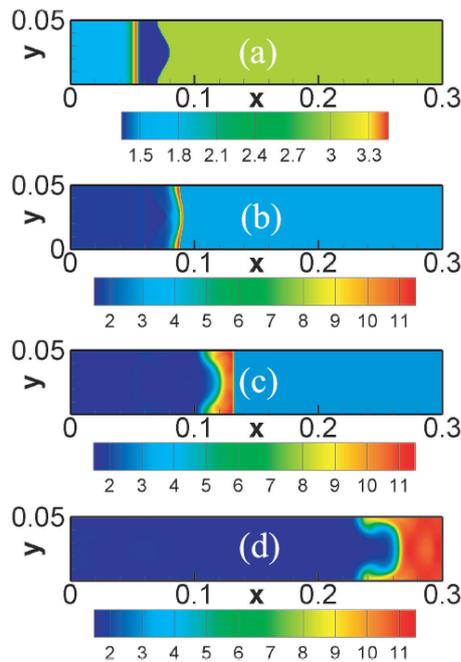


Figure 3. Snapshots of RM instability in the first case. Panels (a)-(d) show the density fields at the times, $t = 0.00$, 0.01 , 0.03 , and 0.13 , respectively

图 3. 第一种情况下的 RM 不稳定性。(a)~(d) 给出了在时刻 $t = 0.00$ 、 0.01 、 0.03 和 0.13 的密度场

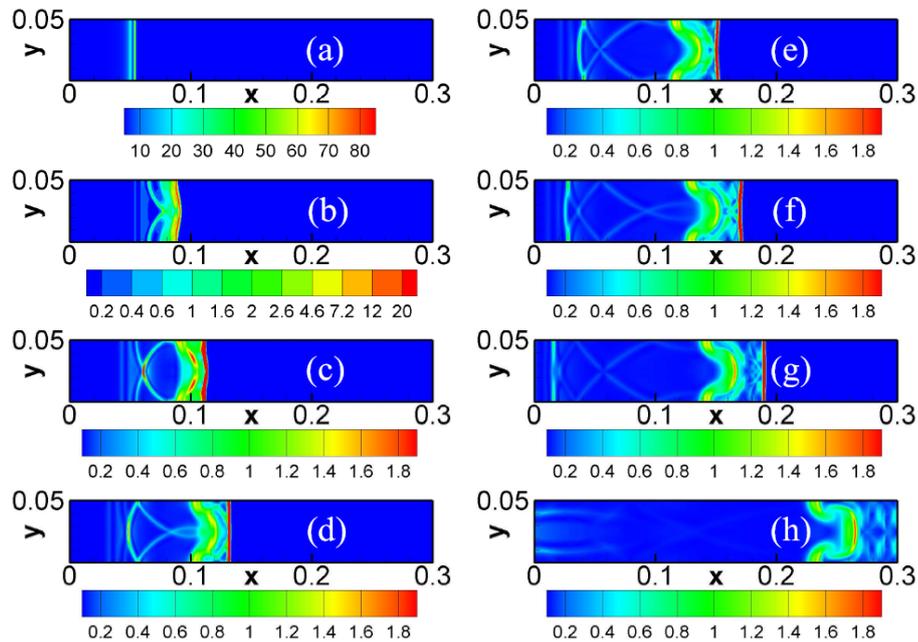


Figure 4. Contours of nonequilibrium manifestation d in the evolution of RM instability in the first case. Panels (a)-(h) are for the times, $t = 0.00, 0.01, 0.02, 0.03, 0.04, 0.05, 0.06, 0.13$, respectively

图 4. 第一种 RM 不稳定性情况下非平衡表征 d 的演化图。(a)~(h) 依次对应时刻 $t = 0.00$ 、 0.01 、 0.02 、 0.03 、 0.04 、 0.05 、 0.06 和 0.13

和一个反射冲击波。这两冲击波在初始阶段都是曲面波。现在分析反射冲击波的演化过程。如图(b)所示，在计算区域内反射波上下对称。上部分与下部分的反射波在传播过程相互叠加，产生出新的曲面冲击波，见图(b)~(d)。新生的曲面冲击波不断得到后面追来的冲击波的能量补充，其形状不断被矫正，很快变成一个平面冲击波，见图(e)~(g)。透射冲击波的演化机理类似。另外，可以从图(h)看出，在物质界面两侧具有明显的非对称特征。

3.2.2. 第二种情况

现在模拟第二种情况的 RM 不稳定性：爆轰波由炸药传向较重的介质后继续进行化学反应。在初始时刻，这种较重的介质内 $\lambda = 0$ 。计算参数 $(v_a, v_b, v_c, v_d, \eta_a) = (2.5, 3.9, 6.9, 6.1, 3.9)$ ，其它参数与第一种情况的数值模拟参数一样。在图 5 中从上到下依次给出了在时刻 $t = 0.00, 0.01, 0.03$ 和 0.13 的密度场。这四个时刻与图 3 中的四个时刻一致。对比图 3 和图 5 可以发现明显的不同：一方面，图 3 中的透射冲击波传播速度比图 5 中的传播速度慢，但是图 3 中的物质界面速度改变量比图 5 中的大；另一方面，图 3 中轻介质内气泡体积大于图 5 中的，相应地，图 3 中重介质内钉状体积小于图 5 中的。也就是说，与图 5 相比，图 3 中 RM 不稳定性更早地进入非线性阶段。

3.2.3. 第三种情况

本部分模拟第三种情况的 RM 不稳定性：爆轰波透过物质界面后不再进行化学反应，且物质界面右侧的物质比界面左侧的物质轻。物质界面右侧的物理量为 $(\rho, T, u_x, u_y) = (0.5, 2, 0, 0)$ 。数值参数 $(v_a, v_b, v_c, v_d, \eta_a) = (2.5, 3.9, 6.9, 6.1, 4.9)$ ，其它参数与第一种情况的数值模拟参数一样。图 6 给出了在时刻 $t = 0.000, 0.005, 0.015, 0.020, 0.050$ 和 0.080 的密度场。物理过程如下：当爆轰波扫过物质界面时，在界面两侧分别产生一个向左传播的反射稀疏波和一个向右传播的冲击波。由于在扰动界面波峰左侧的压强比右侧的压强低，所以在压强差的驱动下扰动界面的振幅减小，并导致初始界面的波峰和波谷发生反

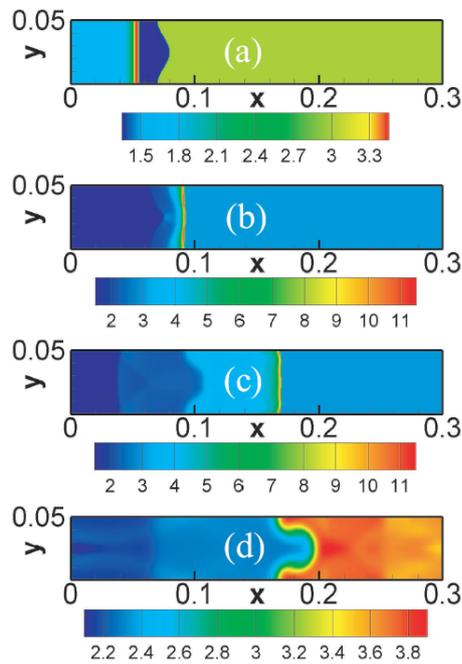


Figure 5. Snapshots of RM instability in the second case. Panels (a)-(d) show the density fields at the times, $t = 0.00, 0.01, 0.03,$ and $0.13,$ respectively

图 5. 第二种情况下的 RM 不稳定性。(a)~(d)给出了在时刻 $t = 0.00、0.01、0.03$ 和 0.13 的密度场

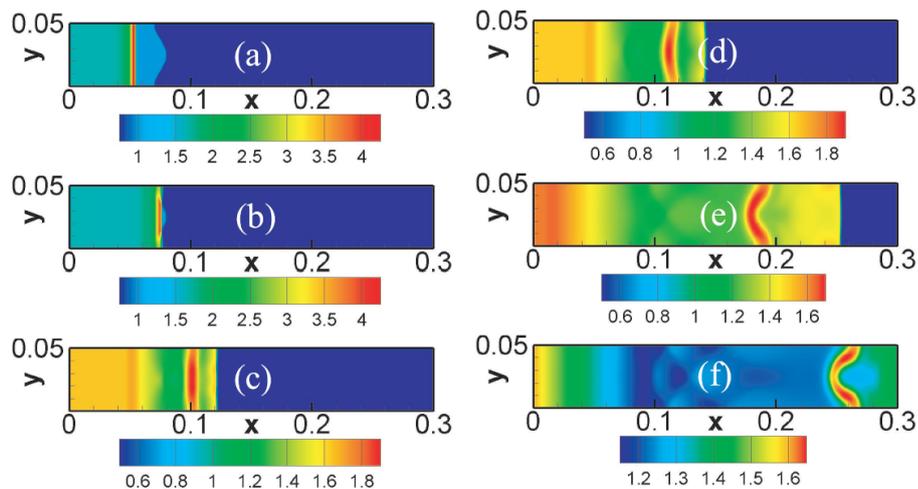


Figure 6. Snapshots of RM instability in the third case. Panels (a)-(f) show the density fields at the times, $t = 0.000, 0.005, 0.015, 0.020, 0.050,$ and $0.080,$ respectively

图 6. 第三种情况下的 RM 不稳定性。(a)~(f)给出了在时刻 $t = 0.000、0.005、0.015、0.020、0.050$ 和 0.080 的密度场

转，见图(a)~(d)。之后，扰动振幅继续发展，经历线性阶段后再进入非线性阶段。从图(d)~(f)可以看出，在界面两侧的不同流体逐渐向彼此渗透。

3.2.4. 第四种情况

最后，我们模拟第四种情况：在物质界面右侧的物质比左侧的轻，并且在爆轰波的冲击压缩下会产生化学反应。图 7 绘制了密度场的演化过程。下面比较图 6 和图 7 的异同点。相同点：爆轰波与物质界

面相遇后都会产生反射稀疏波和透射冲击波，并且反射波和透射波在远离物质界面过程逐渐变成平面波；物质界面都会发生反转过程，RM 不稳定性现象明显。不同点：图 6 显示当爆轰波扫过物质界面后，在物质界面附近会出现一个高密度带，其密度明显高于两侧部分，而图 7 显示当爆轰波扫过物质界面后，从物质界面左侧向右侧系统的密度单调光滑递减。这是因为在图 6 中，当爆轰波经过物质界面后进入不反应的物质，能量突然降低，温度急剧下降，因而在物质界面形成一个低温区域，在与之相对应处形成一个高密区域。而在图 7 中，当爆轰波经过物质界面后进入另一种化学物质后，仍然有化学能释放，能量仍有部分补充，温度缓慢下降，密度单调分布。

4. 总结和讨论

本文构建了一个多松弛时间离散玻尔兹曼模型，并使用该模型模拟部分爆轰现象。本模型与文献[17]的相同点：假设条件和应用范围一致；演化方程的时间偏微分和空间偏微分的计算方式一样；通过 Chapman-Enskog 分析，可以恢复同样带有化学反应的可压 NS 方程组，并且比热比和普朗特数可调；在一阶精度下，化学项的处理结果一致。本模型与文献[17]的不同点：本模型基于 16 个独立的动理学矩关系，使用 16 个离散速度，而文献[17]基于 24 个矩关系和 24 个离散速度；化学项的计算方法不同；数值测试表明，在模拟部分高马赫物理系统时，本模型的数值稳定性要比文献[17]中的高。

使用该模型，本文分四种情况模拟对比了爆轰波在不同情况下激发的 Richtmyer-Meshkov 不稳定性问题。第一种情况，爆轰波由炸药传向较重介质，在重介质中化学反应不再进行；第二种情况，爆轰波由炸药传向较重介质，在重介质中化学反应仍然进行；第三种情况，爆轰波由炸药传向较轻介质，在轻介质中化学反应不再进行；第四种情况，爆轰波由炸药传向较轻介质，在轻介质中化学反应仍然进行。在第三种情况，由于突然失去能量补充，降温急剧下降，在物质界附近形成一层低温区域，相应地会出现一层高密区域。

需要强调的是，爆轰具有很重要的实际意义。目前，理论推导、数值模拟和实验方法已经成为研究爆轰[1]等诸多学科的三大基本手段。这三大研究方法相互补充、相互验证。离散玻尔兹曼方法是介观层次上的数值模拟方法，在模拟研究爆轰现象中的非平衡问题方面具有本质优势。本文模拟了一维稳定爆轰波，并比较了数值结果、CJ 理论解和 ZND 理论解。关于爆轰波激发的 Richtmyer-Meshkov 不稳定性问

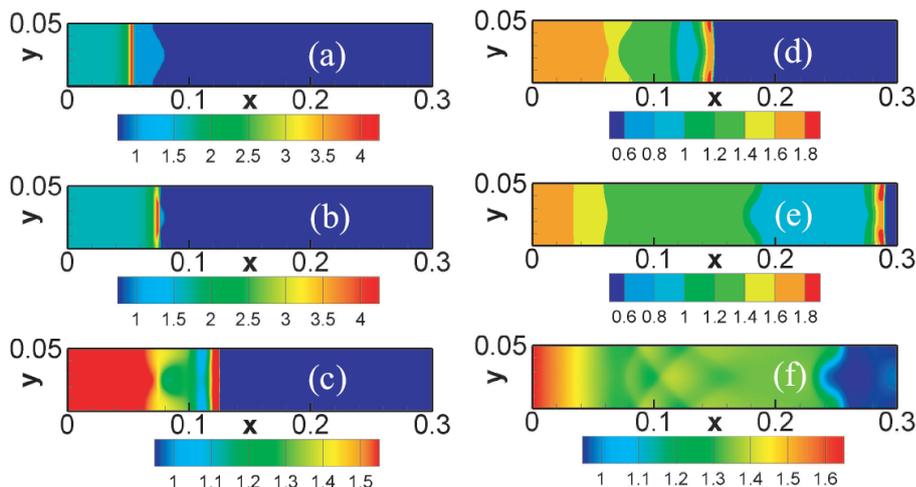


Figure 7. Snapshots of RM instability in the fourth case. Panels (a)-(f) show the density fields at the times, $t = 0.000, 0.005, 0.015, 0.020, 0.050,$ and 0.080 , respectively

图 7. 第四种情况下的 RM 不稳定性。(a)~(f)给出了在时刻 $t = 0.000, 0.005, 0.015, 0.020, 0.050$ 和 0.080 的密度场

题, 同样可以将数值结果与理论解或实验结果进行比较。比如, 在实验方案中, 可以设定爆轰波在预混可燃气体中产生并传播, 将惰性气体填充在不反应区域, 可以用 X 光设备测量气体密度并追逐爆轰波界面和物质界面, 以及在实验装置中预设压力和温度探测器测量系统的压力和温度。这方面的工作有待进一步研究。

基金项目

本研究得到了计算物理重点实验室基金、国家自然科学基金项目[批准号: 11475028 和 11574390]、中国国家重点基础研究发展计划[批准号: 2013 CBA01504]的资助。

参考文献 (References)

- [1] Fickett, W. and Davis, W.C. (2000) Detonation: theory and experiment. Dover publications, Inc., New York.
- [2] Chapman, D.L. (1899) On the rate of explosion in gases. *Philosophical Magazine*, **47**, 90-104. <http://dx.doi.org/10.1080/14786449908621243>
- [3] Jouguet, E. (1905) On the propagation of chemical reactions in gases. *Journal de Mathématiques Pures et Appliquées*, **1**, 347-425.
- [4] Zeldovich, Y.B. (1940) On the theory of the propagation of detonation in gaseous systems. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, **10**, 542-568.
- [5] von Neumann, J. (1942) Theory of detonation waves. Macmillan, New York.
- [6] Döering, W. (1943) On detonation processes in gases. *Annals of Physics*, **435**, 421-436.
- [7] Succi, S. (2001) The lattice Boltzmann equation for fluid dynamics and beyond. Oxford University Press, New York.
- [8] Succi, S., Bella, G. and Papetti, F. (1997) Lattice kinetic theory for numerical combustion. *Journal of Scientific Computing*, **12**, 395-408. <http://dx.doi.org/10.1023/A:1025676913034>
- [9] Filippova, O. and Hänel, D. (2000) A novel numerical scheme for reactive flows at low mach numbers. *Computer Physics Communications*, **129**, 267-274. [http://dx.doi.org/10.1016/S0010-4655\(00\)00113-2](http://dx.doi.org/10.1016/S0010-4655(00)00113-2)
- [10] Yu, H., Luo, L.S. and Girimaji, S.S. (2002) Scalar mixing and chemical reaction simulations using lattice Boltzmann method. *International Journal of Computational Engineering Science*, **3**, 73-87. <http://dx.doi.org/10.1142/S1465876302000551>
- [11] Yamamoto, K., Takada, N. and Misawa, M. (2005) Combustion simulation with lattice Boltzmann method in a three-dimensional porous structure. *Proceedings of the Combustion Institute*, **30**, 1509-1515. <http://dx.doi.org/10.1016/j.proci.2004.08.030>
- [12] Lee, T., Lin, C. and Chen, L.D. (2006) A lattice Boltzmann algorithm for calculation of the laminar jet diffusion flame. *Journal of Computational Physics*, **215**, 133-152. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2005.10.021>
- [13] Chiavazzo, E., Karlin, I.V., Gorban, A.N. and Boulouchos, K. (2011) Efficient simulations of detailed combustion fields via the lattice Boltzmann method. *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, **21**, 494-517. <http://dx.doi.org/10.1108/09615531111135792>
- [14] Chen, S., Mi, J., Liu, H. and Zheng, C. (2012) First and second thermodynamic-law analyses of hydrogen-air counter-flow diffusion combustion in various combustion modes. *International Journal of Hydrogen Energy*, **37**, 5234-5245. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijhydene.2011.12.039>
- [15] 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. <http://dx.doi.org/10.1007/s11467-013-0286-z>
- [16] Lin, C., Xu, A., Zhang, G. and Li, Y. (2014) Polar coordinate lattice Boltzmann kinetic modeling of detonation phenomena. *Communications in Theoretical Physics*, **62**, 737-748. <http://dx.doi.org/10.1088/0253-6102/62/5/18>
- [17] Xu, A., Lin, C., Zhang, G. and Li, Y. (2015) Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann kinetic model for combustion. *Physical Review E*, **91**, Article ID: 043306. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.91.043306>
- [18] 许爱国, 张广财, 应阳君 (2015) 燃烧系统的离散 Boltzmann 建模与模拟研究进展. *物理学报*, **64**, 184701.
- [19] Richtmyer, R.D. (1960) Taylor instability in shock acceleration of compressible fluids. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, **13**, 297-319. <http://dx.doi.org/10.1002/cpa.3160130207>
- [20] Meshkov, E.E. (1969) Instability of the interface of two gases accelerated by a shock wave. *Fluid Dynamics*, **4**, 101-104. <http://dx.doi.org/10.1007/BF01015969>