

可压流体 Rayleigh-Taylor 不稳定性的离散 Boltzmann 模拟

李德梅 赖惠林 许爱国 张广财 林传栋 甘延标

Discrete Boltzmann simulation of Rayleigh-Taylor instability in compressible flows

Li De-Mei Lai Hui-Lin Xu Ai-Guo Zhang Guang-Cai Lin Chuan-Dong Gan Yan-Biao

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 67, 080501 (2018) DOI: 10.7498/aps.67.20171952

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.67.20171952>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2018/V67/I8>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

[一种新的光子多普勒速度频谱分析方法](#)

A new method to analyze the velocity spectrograms of photonic Doppler velocimetry

物理学报.2016, 65(10): 104702 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.104702>

[行波驱动下空泡在可压缩流场中的运动特性研究](#)

Cavitation bubble in compressible fluid subjected to traveling wave

物理学报.2013, 62(24): 244701 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.244701>

[凝固前沿和气泡相互作用的大密度比格子玻尔兹曼方法模拟](#)

Modeling of the interaction between solidification interface and bubble using the lattice Boltzmann method with large density ratio

物理学报.2013, 62(12): 120502 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.120502>

[可压缩涡流场中空泡运动规律及声辐射特性研究](#)

The motion and acoustic radiation characteristics for cavitation in the compressible vortex fluid

物理学报.2013, 62(11): 114702 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.114702>

[枝晶生长和气泡形成的数值模拟](#)

Modeling of dendritic growth and bubble formation

物理学报.2012, 61(15): 150501 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.150501>

# 可压流体 Rayleigh-Taylor 不稳定性的离散 Boltzmann 模拟\*

李德梅<sup>1)</sup> 赖惠林<sup>1)†</sup> 许爱国<sup>2)3)‡</sup> 张广财<sup>2)</sup> 林传栋<sup>1)4)</sup> 甘延标<sup>1)5)</sup>

1) (福建师范大学数学与信息学院, 福建省分析数学及应用重点实验室, 福州 350117)

2) (北京应用物理与计算数学研究所, 计算物理国家重点实验室, 北京 100088)

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

4) (清华大学能源与动力工程系, 燃烧能源中心, 北京 100084)

5) (北华航天工业学院, 廊坊 065000)

(2017年9月4日收到; 2018年1月29日收到修改稿)

使用离散 Boltzmann 模型模拟了可压流体系统中多模初始情况下的 Rayleigh-Taylor 不稳定性. 该离散 Boltzmann 模型等效于一个 Navier-Stokes 模型外加一个关于热动非平衡行为的粗粒化模型. 通过模拟 Riemann 问题: Sod 激波管、冲击波碰撞和热 Couette 流问题验证模型的有效性, 所得数值结果与解析解一致. 利用该模型对界面间断随机多模初始扰动的可压 Rayleigh-Taylor 不稳定性进行数值模拟研究, 得到不稳定性界面演化过程的基本图像. 由于黏性和热传导共同作用, 一开始扰动界面被“抹平”, 演化较慢; 随着模式互相耦合而减少, 演化开始加速, 并经历非线性小扰动阶段和不规则非线性阶段, 而后发展成典型的“蘑菇状”, 后期进入湍流混合阶段. 由于扰动模式的耦合与发展, 轻重流体的重力势能、压缩能与动能相互转化, 系统先是趋于热动平衡态, 而后偏离热动平衡态以线性形式增长, 接着再次趋于热动平衡态, 最后慢慢远离热动平衡态.

**关键词:** 离散 Boltzmann 方法, Rayleigh-Taylor 不稳定性, 可压流体, 动理学模型

**PACS:** 05.20.Dd, 47.40.-x, 47.11.-j

**DOI:** 10.7498/aps.67.20171952

## 1 引言

当低密度流体支撑或推动较高密度流体时, 即重力加速度或惯性加速度由重密度流体指向轻密度流体时, 如果流体之间的界面存在扰动, 那么界面的扰动幅度将会增长, 该物理现象称为瑞利泰勒 (Rayleigh-Taylor, RT) 不稳定性. 这种不稳定性最早由 Rayleigh<sup>[1]</sup> 和 Lamb<sup>[2]</sup> 在某种程度上提及, 直到 1950 年, Taylor 明确指出不稳定性现象<sup>[3]</sup>. 因此, 该现象也称为 RT 不稳定性或者 Rayleigh-Lamb-

Taylor 不稳定性. 由于 RT 不稳定性现象在惯性约束聚变<sup>[4-6]</sup>、超新星爆炸<sup>[7]</sup>、核反应堆<sup>[8]</sup> 等领域中起着重要的作用, 因此在过去几十年里, 人们采用各种解析方法和数值方法对其进行研究, 包括分子动力学<sup>[9]</sup>、直接数值模拟<sup>[10]</sup>、大涡模拟方法<sup>[11]</sup> 等. 这些研究对理解 RT 不稳定性现象的动力学机制提供了许多有用的信息.

作为 Boltzmann 方程的特殊离散形式, 格子 Boltzmann 方法 (lattice Boltzmann method, LBM) 在各种复杂流体的研究中取得了巨大的成功<sup>[12]</sup>. LBM 在 RT 不稳定性问题的研究中发展了两类模

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11301082, 11475028, 11772064)、福建省自然科学基金 (批准号: 2014J05003)、福建省教育厅项目 (批准号: JA13069, JB13020)、河北省自然科学基金 (批准号: A2017409014)、河北省教育厅重点项目 (批准号: ZD2017001) 和河北省人才工程培养经费 (批准号: A201500111) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: hllai@fjnu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: Xu\_aiguo@iapcm.ac.cn

型: 不可压 LBM<sup>[13-15]</sup> 和可压 LBM<sup>[16]</sup>. 这些模型的基本思想上是把 LBM 看作 Navier-Stokes (NS) 方程的求解器, 能够模拟得到 NS 方程一致的结果. 近年来, 许爱国课题组<sup>[17-25]</sup> 已将 LBM 发展成为能够同时描述流动和热动非平衡效应的离散 Boltzmann 方法 (discrete Boltzmann method, DBM). 在 2012 年, 许爱国等<sup>[17]</sup> 提出构建 DBM. DBM 与 LBM 最主要的差异在于: 作为偏微分方程解法器的 LBM 必须忠诚于原始物理模型, 而作为流体系统动理学模型的 DBM 必须具有超越原始物理模型的部分功能; LBM 所依赖的演化方程和“矩关系”可以根据算法设计的要求人为构造, 即可以没有物理对应, 而 DBM 所依赖的演化方程和“矩关系”只能是 Boltzmann 方程及其动理学矩关系, 必须与非平衡统计物理学基本理论自洽<sup>[18]</sup>. 例如 DBM 所提供的非平衡行为特征能够恢复真实分布函数的主要特征<sup>[26]</sup>、区分不同类型的界面<sup>[27]</sup>、区分相分离过程的不同阶段<sup>[18,21]</sup>, 所提供的冲击波精细物理结果与分子动力学数值模拟结果相互印证, 相互补充<sup>[28]</sup>. 本文在甘延标等<sup>[29]</sup> 提出的 DBM 模型的基础上, 进一步验证了含外力项的 DBM 模型. 通过数值模拟 Riemann 问题和热 Couette 流等问题验证了 DBM 的有效性. 使用该模型, 本文模拟了可压流体系统多模初始扰动的 RT 不稳定性现象, 能够得到 RT 不稳定的基本物理图像以及相伴随的热动非平衡效应规律, 得出一些相关物理解释.

## 2 离散 Boltzmann 模型

考虑含外力项的 Bhatnagar-Gross-Krook(BGK) 碰撞的 Boltzmann 方程为

$$\begin{aligned} & \frac{\partial f_i}{\partial t} + \mathbf{v}_i \cdot \frac{\partial f_i}{\partial \mathbf{r}} - \frac{\mathbf{a} \cdot (\mathbf{v}_i - \mathbf{u})}{T} f_i^{\text{eq}} \\ & = -\frac{1}{\tau}(f_i - f_i^{\text{eq}}), \end{aligned} \quad (1)$$

其中  $f_i(\mathbf{r}, \mathbf{v}_i, t)$  是离散分布函数,  $\mathbf{r}$  是空间变量,  $t$  是时间;  $\mathbf{v}_i$  是离散速度,  $i = 1, 2, \dots, N$  是离散速度序号;  $\mathbf{u}$  是宏观流速;  $\mathbf{a}$  是加速度;  $\tau$  是动理学松弛时间;  $f_i^{\text{eq}}$  是 Maxwell 分布函数的离散化形式; 其中 Maxwell 分布函数的形式如下:

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

其中,  $D$  为空间维数 (本文考虑  $D = 2$  的情形);  $n$  是除了平动自由度之外的额外自由度数目;  $\eta$  是自

由参数;  $\rho$ ,  $T$  和  $\mathbf{u}$  分别是密度、温度和流速. 这里考虑的包含外力的方程是不包含外力情形下的拓展, 可以处理更加普遍的物理情形, 比如重力场存在下的流体不稳定性问题、分子间相互作用下的多相流问题、电场力、磁场力存在下的等离子体输运问题; 其中的外力项使用了  $f \sim f^{\text{eq}}$  的近似条件, 因而该 DBM 只适用于系统偏离平衡不远的情形.

Chapman-Enskog 分析表明, 当平衡态分布函数  $f_i^{\text{eq}}$  满足以下 7 个矩关系时, 方程 (1) 在连续极限下可以得到 NS 方程<sup>[30,31]</sup>:

$$\sum_i f_i = \sum_i f_i^{\text{eq}} = \rho, \quad (3)$$

$$\sum_i f_i \mathbf{v}_i = \sum_i f_i^{\text{eq}} \mathbf{v}_i = \rho \mathbf{u}, \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \sum_i f_i (\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_i + \eta_i^2) & = \sum_i f_i^{\text{eq}} (\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_i + \eta_i^2) \\ & = \rho [(D+n)T + \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}], \end{aligned} \quad (5)$$

$$\sum_i f_i^{\text{eq}} \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i = \rho (T \mathbf{I} + \mathbf{u} \mathbf{u}), \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \sum_i f_i^{\text{eq}} (\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_i + \eta_i^2) \mathbf{v}_i \\ & = \rho \mathbf{u} [(D+n+2)T + \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}], \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \sum_i f_i^{\text{eq}} \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i \\ & = \rho [T (\mathbf{u}_\alpha \mathbf{e}_\beta \mathbf{e}_\chi \delta_{\beta\chi} + \mathbf{e}_\alpha \mathbf{u}_\beta \mathbf{e}_\chi \delta_{\alpha\chi} + \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\beta \delta_{\alpha\beta} \mathbf{u}_\chi) \\ & \quad + \mathbf{u} \mathbf{u} \mathbf{u}], \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \sum_i f_i^{\text{eq}} (\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_i + \eta_i^2) \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i \\ & = \rho T [(D+n+2)T + \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}] \mathbf{e}_\alpha \mathbf{e}_\beta \delta_{\alpha\beta} \\ & \quad + \rho \mathbf{u} \mathbf{u} [(D+n+4)T + \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}]. \end{aligned} \quad (9)$$

前三个方程代表质量守恒、能量守恒和动量守恒.

借助 Chapman-Enskog 多尺度分析, 可以从离散 Boltzmann 方程 (1) 得到 NS 方程层次的宏观流体力学方程. 首先对密度分布函数、时间导数、空间导数和外力项进行如下多尺度展开:

$$\begin{cases} f_i = f_i^{(0)} + \varepsilon f_i^{(1)} + \varepsilon^2 f_i^{(2)} + \dots, \\ \frac{\partial}{\partial t} = \varepsilon \frac{\partial}{\partial t_1} + \varepsilon^2 \frac{\partial}{\partial t_2} + \dots, \\ \frac{\partial}{\partial r_\alpha} = \varepsilon \frac{\partial}{\partial r_{1\alpha}}, \\ a_\alpha = \varepsilon a_{1\alpha}, \end{cases} \quad (10)$$

其中  $\varepsilon \ll 1$  是一个无量纲小量, 正比于克努森数 (Knudsen number,  $Kn$ )  $Kn = l/L$ ,  $l$  是分子平均自由程或者平均分子间距,  $L$  是宏观上关心的特征尺度.

将方程 (10) 代入方程 (1) 中, 可以得到一系列关于  $\varepsilon$  的各阶等式:

$$O(\varepsilon^0): f_i^{(0)} = f_i^{\text{eq}}, \quad (11)$$

$$O(\varepsilon): \frac{\partial f_i^{(0)}}{\partial t_1} + \frac{\partial}{\partial r_{1\alpha}}(f_i^{(0)}v_{i\alpha}) + \frac{a_{1\alpha}(u_\alpha - v_{i\alpha})}{T}f_i^{(0)} = -\frac{1}{\tau}f_i^{(1)}, \quad (12)$$

$$O(\varepsilon^2): \frac{\partial f_i^{(0)}}{\partial t_2} + \frac{\partial f_i^{(1)}}{\partial t_1} + \frac{\partial}{\partial r_{1\alpha}}(f_i^{(1)}v_{i\alpha}) = -\frac{1}{\tau}f_i^{(2)}, \quad (13)$$

$$O(\varepsilon^j): \frac{\partial f_i^{(0)}}{\partial t_j} + \frac{\partial f_i^{(1)}}{\partial t_{j-1}} + \dots + \frac{\partial f_i^{(j-1)}}{\partial t_1} + \frac{\partial}{\partial r_{1\alpha}}(f_i^{(j-1)}v_{i\alpha}) = -\frac{1}{\tau}f_i^{(j)}. \quad (14)$$

根据宏观物理量的定义

$$\sum_i f_i^{(0)} \begin{pmatrix} 1 \\ \mathbf{v}_i \\ \frac{1}{2}[(\mathbf{v}_i - \mathbf{u})^2 + \eta_i^2] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho\mathbf{u} \\ \frac{D+n}{2}\rho T \end{pmatrix}, \quad (15)$$

有

$$\sum_i f_i^{(j)} \begin{pmatrix} 1 \\ \mathbf{v}_i \\ \frac{1}{2}[(\mathbf{v}_i - \mathbf{u})^2 + \eta_i^2] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (j = 1, 2, \dots), \quad (16)$$

即分布函数的非平衡部分对宏观物理量没有贡献.

经过一系列代数运算, 可以得到可压 NS 方程:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_\alpha)}{\partial r_\alpha} = 0, \\ \frac{\partial}{\partial t}(\rho u_\alpha) + \frac{\partial}{\partial r_\beta}(p\delta_{\alpha\beta} + \rho u_\alpha u_\beta) - \frac{\partial}{\partial r_\beta} \left[ \mu \left( \frac{\partial u_\alpha}{\partial r_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial r_\alpha} - \frac{2}{D+n} \frac{\partial u_\chi}{\partial r_\chi} \delta_{\alpha\beta} \right) \right] = \rho a_\alpha, \\ \frac{\partial}{\partial t} \left[ \rho \left( e + \frac{1}{2} u^2 \right) \right] + \frac{\partial}{\partial r_\alpha} \left[ \rho u_\alpha \left( e + \frac{1}{2} u^2 \right) + P u_\alpha \right] = \frac{\partial}{\partial r_\alpha} \left( \kappa \frac{\partial T}{\partial r_\alpha} + u_\beta p'_{\alpha\beta} \right) + \rho u_\alpha a_\alpha, \end{cases} \quad (17)$$

其中

$$p = \rho T, \quad (18)$$

$$e = \frac{D+n}{2}T \quad (19)$$

分别是压强和总内能;

$$\mu = p\tau \quad (20)$$

为动力黏性系数;

$$\kappa = \frac{D+n+2}{2}p\tau \quad (21)$$

为热传导系数.

本文选取如下二维十六速度 (D2V16) 的离散速度模型: 其中, 当  $i = 1, 2, \dots, 4$  时,  $\eta_i = \eta_0$ , 当  $i = 5, 6, \dots, 16$  时,  $\eta_i = 0$ .

$$\mathbf{v}_i = \begin{cases} c \left[ \cos \frac{(i-1)\pi}{2}, \sin \frac{(i-1)\pi}{2} \right] & i = 1, \dots, 4, \\ 2c \left[ \cos \frac{(2i-1)\pi}{4}, \sin \frac{(2i-1)\pi}{4} \right] & i = 5, \dots, 8, \\ 3c \left[ \cos \frac{(i-9)\pi}{2}, \sin \frac{(i-9)\pi}{2} \right] & i = 9, \dots, 12, \\ 4c \left[ \cos \frac{(2i-9)\pi}{4}, \sin \frac{(2i-9)\pi}{4} \right] & i = 13, \dots, 16. \end{cases} \quad (22)$$

DBM 摆脱了空间离散化和时间离散化之间的绑定, 使得粒子速度可以灵活选择, 并且可以在离散 Boltzmann 方程的求解中方便地引入多种差分格式.

DBM 被认为是 Boltzmann 方程的特殊离散形式, 自然继承了 Boltzmann 方程可以用来描述非平衡效应的属性. 在 7 个动力学矩关系 (3)—(9) 式中, 只有前面 3 个动力学矩关系 (质量、动能和能量的定义),  $f_i^{\text{eq}}$  可以被  $f_i$  取代, 而后面的 4 个动力学矩关系, 如果用  $f_i$  取代  $f_i^{\text{eq}}$ , 则两侧值会产生偏差. 这个偏差从物理上来看是描述系统状态偏离热力学平衡所引起的宏观效应, 可用于描述系统状态偏离热力学平衡的程度 [22]. 本文考虑扣除宏观流动的微观粒子热涨落特征的热动非平衡效应, 对应的中心矩  $\mathbf{M}_{m,n}^*$  定义如下:

$$\begin{cases} M_2^*(f_i) = \sum_i f_i \mathbf{v}_i^* \mathbf{v}_i^*, \\ M_3^*(f_i) = \sum_i f_i \mathbf{v}_i^* \cdot \mathbf{v}_i^* \mathbf{v}_i^*, \\ M_{3,1}^*(f_i) = \sum_i f_i [\mathbf{v}_i^* \cdot \mathbf{v}_i^* + \eta_i^2] \mathbf{v}_i^*, \\ M_{4,2}^*(f_i) = \sum_i f_i [\mathbf{v}_i^* \cdot \mathbf{v}_i^* + \eta_i^2] \mathbf{v}_i^* \mathbf{v}_i^*, \end{cases} \quad (23)$$

其中  $\mathbf{v}_i^* = \mathbf{v}_i - \mathbf{u}$ . 为了定性分析多模初始扰动下热动非平衡效应的演化规律, 进一步定义总平均热动非平衡效应或者强度:

$$D^* = \sqrt{(\bar{\Delta}_2^*)^2 + (\bar{\Delta}_3^*)^2 + (\bar{\Delta}_{3,1}^*)^2 + (\bar{\Delta}_{4,2}^*)^2}, \quad (24)$$

其中  $\bar{\Delta}_{m,n}^*$  表示各个非平衡效应全场绝对平均值. 其中,  $\Delta_{m,n}^*$  定义为

$$\Delta_{m,n}^* = M_{m,n}^*(f_i) - M_{m,n}^*(f_i^{\text{eq}}). \quad (25)$$

### 3 数值模拟与验证

本节通过一维 Riemann 问题: Sod 激波管、冲击波碰撞和热 Couette 流问题的解析解和数值解的符合程度来验证 DBM 的有效性. 计算动力学方程 (1) 时, 时间导数采用一阶向前差分, 空间格式采用无波动无自由参数的耗散 (non-oscillatory, containing no free parameters and dissipative, NND) 格式 [32]. 事实上, NND 格式是二阶迎风格式、一阶迎风格式、中心差分格式的混合格式, 该格式针对激波上下游采用不同的混合格式, 其总变差 (total variation diminishing, TVD) 是减小的, 空间上具有实质的二阶精度高分辨率, 捕捉激波能力较强, 可以很好地分辨间断.

#### 3.1 Sod 激波管问题

Sod 激波管问题. 计算区域  $[-1, 1]$ , 流场的左半部分和右半部分分别给定如下的初始条件:

$$\begin{cases} (\rho, T, u, v)|_L = (1.0, 1.0, 0.0, 0.0), & x \leq 0, \\ (\rho, T, u, v)|_R = (0.125, 0.8, 0.0, 0.0), & x > 0, \end{cases} \quad (26)$$

其中“L”和“R”分别代表远离间断界面左右两侧的宏观量初始值. 计算网格为  $N_x \times N_y = 2000 \times 2$ , 空间步长为  $\Delta x = \Delta y = 0.001$ , 时间步长选取为  $\Delta t = 10^{-5}$ . 其他模型参数选取为  $\tau = 10^{-5}$ ,  $n = 3$ ,

$c = 1.0$  和  $\eta = 10.0$ .  $y$  方向采用周期边界条件, 对于  $x$  方向, 左边界设置为

$$f_{i,-1,t} = f_{i,0,t} = f_{i,1,t=0}^{\text{eq}}, \quad (27)$$

其中  $-1$  和  $0$  表示左边的虚拟点. 此类边界条件指定系统在边界处一直处于平衡态, 即边界处的宏观量为

$$\begin{aligned} (\rho, T, u, v)|_{I=-1,t} &= (\rho, T, u, v)|_{I=0,t} \\ &= (\rho, T, u, v)|_{I=1,t=0}. \end{aligned} \quad (28)$$

方程 (27) 和 (28) 也被称作微观和宏观边界条件, 两者是互相对应的.

同样, 右边的微观边界设置如下:

$$f_{i,N_x+2,t} = f_{i,N_x+1,t} = f_{i,N_x,t=0}^{\text{eq}}, \quad (29)$$

则对应的宏观边界为

$$\begin{aligned} (\rho, T, u, v)|_{I=N_x+2,t} \\ &= (\rho, T, u, v)|_{I=N_x+1,t} \\ &= (\rho, T, u, v)|_{I=N_x,t=0}. \end{aligned} \quad (30)$$

为验证网格无关性, 先固定其他模型参数,  $x$  方向采用三种不同的网格数:  $N_x = 1000, 2000, 4000$ , 模拟结果见图 1. 可见, 三种不同空间分辨率都能够清晰捕捉激波、接触间断和稀疏波. 采用  $N_x = 2000$  的模拟结果与采用  $N_x = 4000$  的模拟结果区别不大. 为了更好地展示该物理问题不同物理量的非线性间断结构, 图 2 给出 DBM 数值解与解析解在  $t = 0.2$  的对比图, 图中圆圈为 DBM 数值解, 直线为精确解. 结果显示, DBM 数值解与解析解符合较好, 验证了模型的准确性和健壮性.

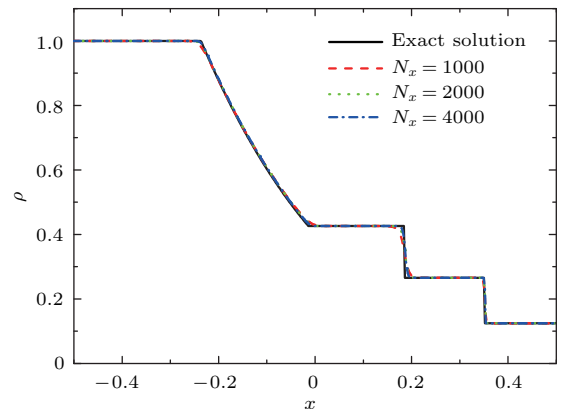


图 1 不同网格数下  $t = 0.2$  时刻一维 Sod 激波管密度剖面的 DBM 数值解与解析解对比

Fig. 1. Comparisons between DBM results with different grids and the exact solution for the one-dimensional Sod problem, at  $t = 0.2$ .



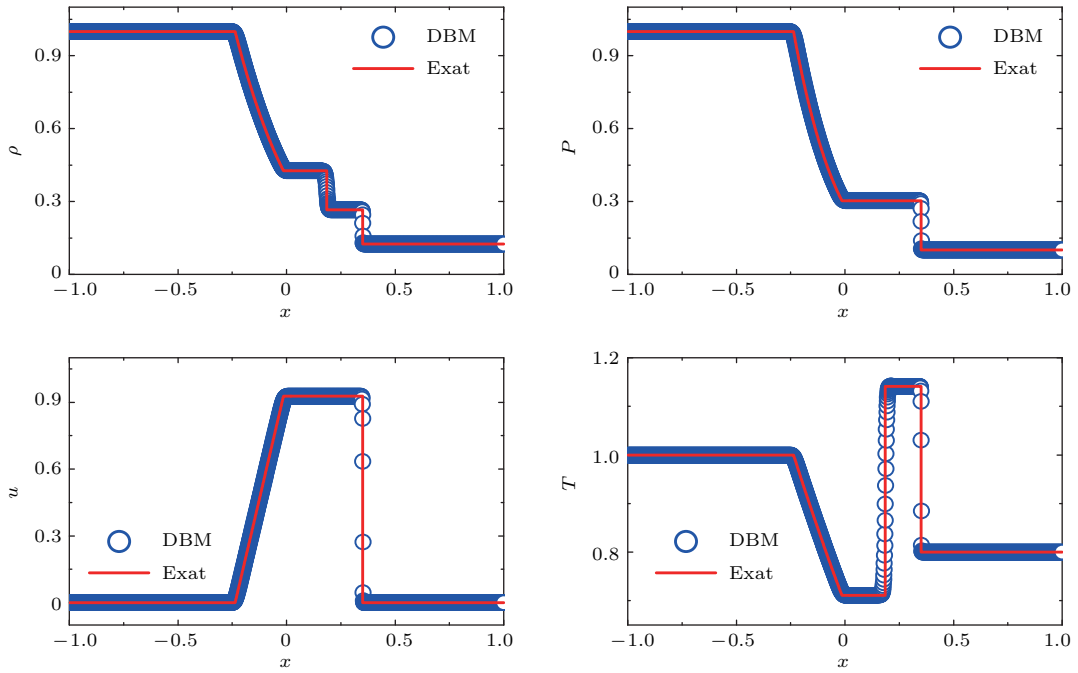


图2  $t = 0.2$  时刻一维 Sod 激波管的密度、压力、速度和温度剖面的 DBM 数值解与解析解的对比  
 Fig. 2. Comparisons between DBM results and the exact solutions for the one-dimensional Sod problem at  $t = 0.2$ .

### 3.2 两个强激波碰撞问题

为了充分验证模型, 考虑冲击波碰撞问题, 该问题涉及两个强激波的碰撞, 其初始条件为:

$$\begin{cases} (\rho, T, u, v)|_L = \\ (5.99924, 76.8254, 19.5975, 0.0), & x \leq 0, \\ (\rho, T, u, v)|_R = \\ (5.99242, 7.69222, -6.19633, 0.0), & x > 0. \end{cases} \quad (31)$$

该问题的精确解包含了一个缓慢向右传播的左激波、向右的接触界面和一个左行激波. 其中, 左激波向右传播很慢给数值方法带来额外的困难, 对模型的稳定性和鲁棒性要求较高.

数值模拟中, 选取参数为: 网格参数为  $N_x \times N_y = 2000 \times 2$ ,  $\Delta x = \Delta y = 0.003$ , 时间步长为  $\Delta t = 10^{-5}$ . 其他参数选取为  $\tau = 2 \times 10^{-5}$ ,  $n = 3$ ,  $c = 8.0$  和  $\eta = 40.0$ . 图3给出了  $t = 0.08$  时刻  $\gamma = 1.4$  的密度、压力、速度和温度剖面的 DBM 数值解与解析解的对比. 对比结果表明, DBM 数值解与解析解符合较好, 进一步说明 DBM 模型具有较好的稳定性和鲁棒性.

### 3.3 热 Couette 流问题

作为经典热传导问题, 热 Couette 流能够用来检测 DBM 模拟流体黏性热传导问题. 该问

题描述如下: 考虑介于两个无限长平行板之间的黏性流体, 平板之间距离为  $H$ . 初始条件为  $(\rho, u, v, T)|_{t=0} = (1.0, 0, 0, 1.0)$ . 当  $t > 0$  时, 温度为  $T_0$  的上板以速度  $u_0 = 0.8$  移动, 温度为  $T_0$  的下板保持静止不动.

网格参数选取为  $N_x \times N_y = 1 \times 200$ , 空间步长为  $\Delta x = \Delta y = 2 \times 10^{-3}$ , 其他参数选取为:  $n = 3$ ,  $\tau = 10^{-3}$ ,  $c = 1.0$ ,  $\eta = 10.0$ ,  $\Delta t = 10^{-5}$ .  $x$  方向采用周期边界条件,  $y$  方向采用非平衡外推格式<sup>[33]</sup>.

$x$  方向速度的解析解为

$$u = \frac{y}{H} u_0 + \frac{2}{\pi} u_0 \sum_{j=1}^{\infty} \left[ \frac{(-1)^j}{j} \exp\left(-j^2 \pi^2 \frac{\mu t}{\rho H^2}\right) \times \sin\left(\frac{j \pi y}{H}\right) \right]. \quad (32)$$

图4给出了 DBM 数值解与解析解在不同时刻的对比图, 两者十分符合, 表明 DBM 能够精确计算黏性耗散下的流体问题. 计算结果与 NS 模型得到的结果一致.

当系统达到稳态时, 沿  $y$  方向温度场的理论解为

$$T = T_0 + \frac{u_0^2}{2c_p} \frac{y}{H} \left(1 - \frac{y}{H}\right), \quad (33)$$

其中  $c_p = \gamma/(\gamma - 1)$ . 图5展示了不同  $\gamma$  对应的 DBM 数值解与解析解在稳态时的对比图. 数值解与解析解符合较好, 表明 DBM 能够精确模拟不同热传导情形下的流体问题.

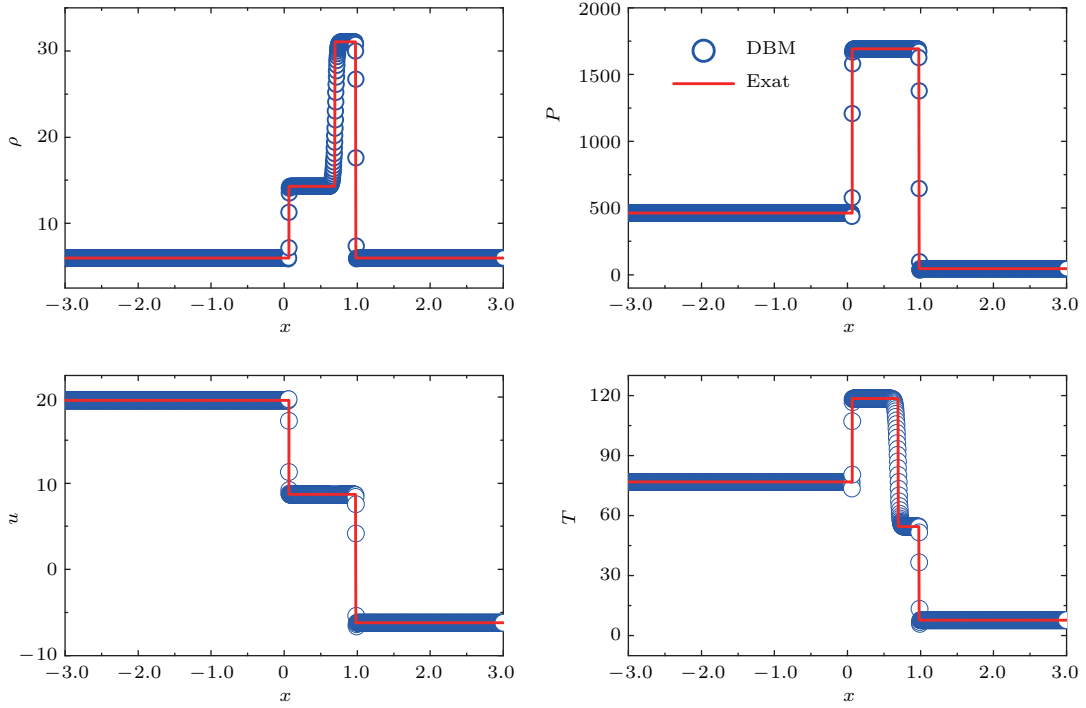


图3  $t = 0.08$  时刻两个强激波碰撞问题的密度、压力、速度和温度剖面的 DBM 数值解与解析解对比

Fig. 3. Comparisons between DBM results and the exact solutions for collision of two strong shocks problem at  $t = 0.08$ .

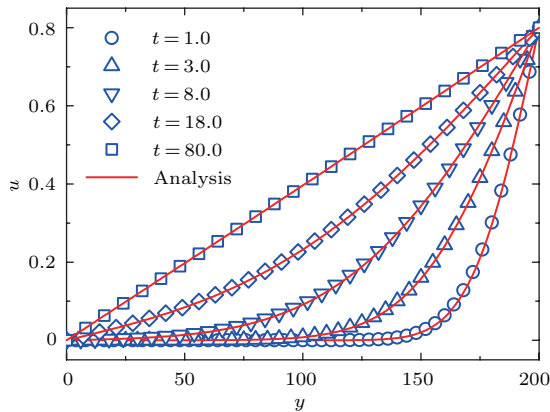


图4  $\gamma = 1.4$  时热 Couette 流在不同时刻速度剖面的 DBM 数值解与解析解对比

Fig. 4. Comparisons between DBM results and the exact solutions for the velocity profiles in thermal Couette flow for the case with  $\gamma = 1.4$  at various times.

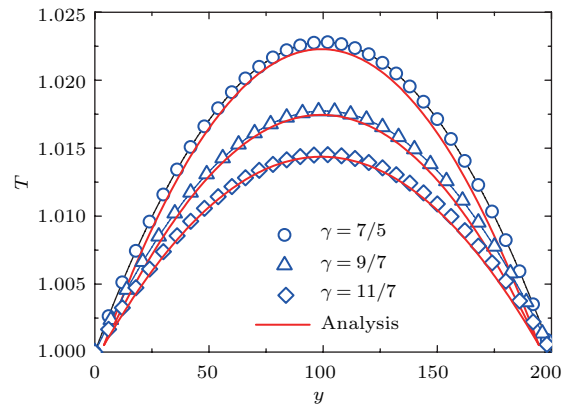


图5 不同  $\gamma$  值下热 Couette 流的稳态温度剖面的 DBM 数值解与解析解对比

Fig. 5. Comparisons between DBM results and the exact solutions for the temperature profiles in steady thermal Couette flow for various values of  $\gamma$ .

#### 4 可压流体 RT 不稳定性数值模拟

对于 RT 不稳定性的数值模拟, 以往模型主要采用等温不可压模型, 即上下密度是常数而温度始终不变的情形, 而实际系统往往是可压的且温度是变化的. 本文考虑单介质流体的可压非等温情形, 即温度自适应情形. 该流体系统由上下两部分组成, 上下温度不同, 系统密度满足力学平衡条件呈

指数分布<sup>[16-27]</sup>. 例如, 考虑上流体是冷空气下流体是热空气. 当中间界面处没有发生扰动, 则系统只有热扩散作用, 界面始终处在中间位置. 当中间界面出现小扰动之后, 由于重力的作用, 扰动会随着时间的演变而慢慢放大, 形成“气泡-尖钉”结构, 而后出现典型的“蘑菇头”形状, 即 RT 不稳定性发生. 在数值模拟过程中, 边界影响比较大, 本文采用如下边界条件: 上下边界采用绝热、无滑移边界条件; 左右采用周期边界条件. 模型从最简单的

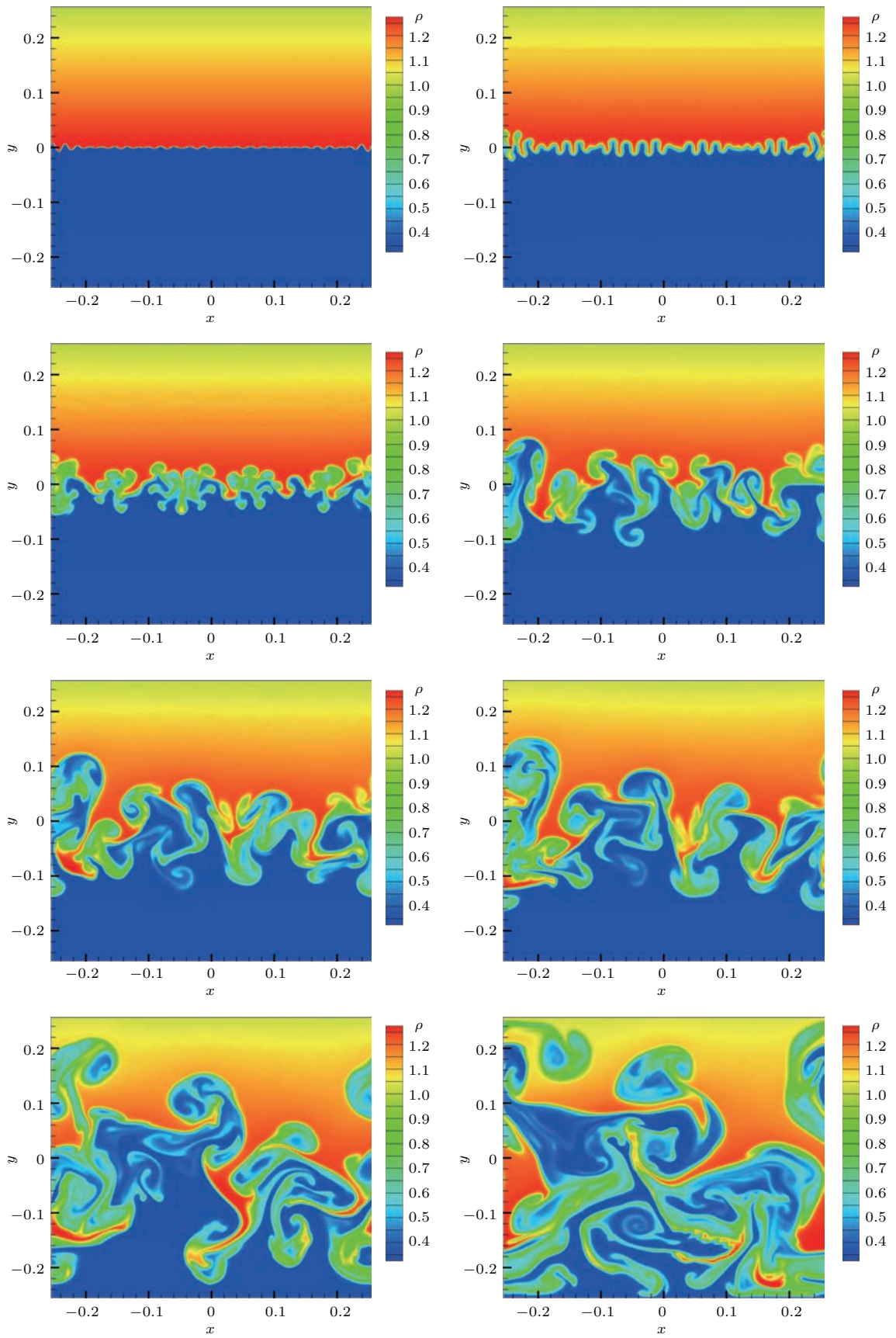


图6 多模 RT 不稳定性在不同时刻的密度演化图:  $t = 0, 0.5, 1.0, 1.5, 1.8, 2.0, 2.5, 3.0$

Fig. 6. Density evolution of Rayleigh-Taylor instability from a multiple mode perturbation at different times:  $t = 0, 0.5, 1.0, 1.5, 1.8, 2.0, 2.5, 3.0$ .



理想气体状态方程出发,暂时忽略表面张力的影响.

本文考虑二维区域  $[-d/2, d/2] \times [-2d, 2d]$ , 系统处于重力加速度为常数的重力场下, 界面的初始扰动满足

$$y_c(x) = \sum_{n=21}^{30} [a_n \cos(k_n x) + b_n \sin(k_n x)], \quad (34)$$

其中  $k_n = 2n\pi/L_x$ ,  $a_n, b_n$  是 0—1 之间均匀分布的随机数. 上下部分流体的温度不同, 每部分流体的密度分布满足如下静力学平衡条件:

$$\partial_y p_0(y) = -g\rho_0(y). \quad (35)$$

所以系统的不稳定性初始条件满足:

$$\begin{cases} T_0(y) = T_u, \\ \rho_0(y) = \frac{p_0}{T_u} \exp\left[\frac{g}{T_u}(2d-y)\right], & y > y_c(x), \\ T_0(y) = T_b, \\ \rho_0(y) = \frac{p_0}{T_b} \exp\left[\frac{g}{T_u}(2d-y_c(x)) - \frac{g}{T_b}(y-y_c(x))\right], & y < y_c(x), \end{cases} \quad (36)$$

其中,  $p_0$  是上部分流体顶部的初始压强,  $T_u$  和  $T_b$  代表上下部分流体的初始温度. 在这种条件下, 界面处的压强满足

$$\rho_u T_u = \rho_b T_b, \quad (37)$$

其中  $\rho_u$  和  $\rho_b$  是上下部分流体临近界面两侧网格处的密度, 则界面处初始 Atwood 数可以定义为<sup>[16]</sup>

$$At = \frac{\rho_u - \rho_b}{\rho_u + \rho_b} = \frac{T_b - T_u}{T_b + T_u}. \quad (38)$$

在数值模拟中, 计算区域为  $512 \times 512$  的均为网格, 空间步长为  $\Delta x = \Delta y = 0.001$ , 顶部初始压强为  $p_0 = 1.0$ , 时间步长为  $\Delta t = 1 \times 10^{-5}$ , 松弛因子为  $\tau = 1 \times 10^{-5}$ , 上部分温度为  $T_u = 1.0$ , 下部分温度为  $T_b = 4.0$ , 因此, 初始  $At = 0.6$ . 其他参数为  $c = 1.3$ ,  $\eta = 15$ ,  $n = 3$ ,  $a_x = 0.0$ ,  $a_y = -g = -1.0$ .

图 6 展示了 RT 不稳定性的密度分布随时间变化的时空演化图, 可以看出, 初始阶段, 热扩散作用迅速抹平了间断界面, 产生有限宽度的过渡层, 降低了界面处局部  $At$  数. 经过短暂的线性阶段, RT 不稳定性进入了非线性阶段. 在重力场的作用下, 随着时间的发展, 重流体下降, 轻流体上升, 又由于重流体相对较“硬”, 轻流体相对较“软”, 因而呈现典型的“气泡”和“尖钉”的界面结构. 之所以形成这种结构, 是因为当密度较大时, 惯性力较大, 较难改变速度, 从而向上的扰动形成较平的“气泡”

结构, 向下的扰动形成较尖锐的“尖钉”结构. 后期由于界面切向速度差变大(即 KH 不稳定性慢慢起作用), “尖钉”尾部翻转起来, 形成“蘑菇头”形状. 由于热扩散和黏性作用, “蘑菇头”尾部渐渐模糊且变狭长. 事实上, 一开始 ( $t = 0.5$  之前) 演化较慢, 且界面整体下移, 这是由于一开始热传导起主导作用, 在界面附近的上下流体交换内能, 上流体吸收热量, 体积膨胀, 界面附近的上流体下移, 而下流体释放热量, 体积缩小, 界面附近的下流体下移. 同时, 初始多模互相竞争合并, 模式慢慢变少, 界面被“抹平”; 而后 ( $t = 0.5$ ) 之后演化加速, 界面演化变成重力主导, 上下流体开始以交换重力势能为主, 呈现非线性演化阶段. 后期两流体在界面附近相互渗透, 相互混合, 进入湍流混合阶段.

图 7 展示了在不同初始多模扰动下总平均热动非平衡效应的演化情形. 由于初始条件处于热动非平衡, 系统有趋于热动平衡态趋势,  $D^*$  有下降的趋势. 而后, 随着模式的耦合以及混合层厚度不断增加, 界面越来越复杂, 系统偏离热动平衡态的演化以线性形式增长. 而后, 在  $t^* = 0.7$  后系统趋向平衡态,  $t^* = 1.2$  后系统又慢慢远离平衡态, 这是因为系统重力势能和压缩能得到释放, 部分转化为动能, 促进了 RT 不稳定性的发展, 界面越来越复杂, 非平衡模式越来越丰富.

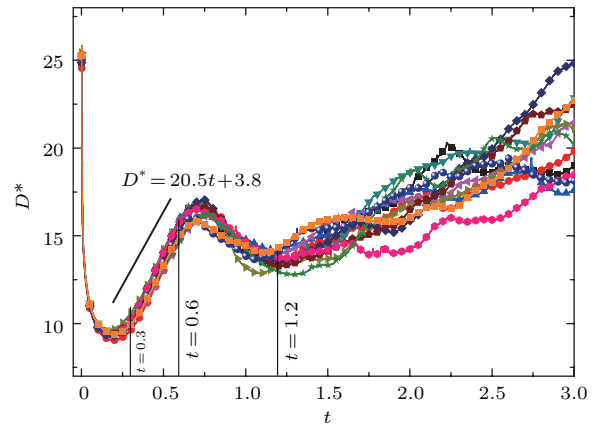


图 7 不同初始多模扰动下 RT 不稳定性演化引起的总平均热动非平衡效应随时间的演化

Fig. 7. The time evolution of the global average TNE strength due to Rayleigh-Taylor instability with different multi-mode initial conditions.

## 5 结 论

应用含外力项的 DBM 数值模拟研究可压流体多模初始扰动的 RT 不稳定性问题. Chapman-Enskog 多尺度分析表明该模型在连续极限可恢复

到 Navier-Stokes 方程. 模型通过了热 Couette 流问题和三个一维 Riemann 问题的检测, 表明模型能够精确模拟黏性耗散和热传导以及复杂激波之间的相互作用. 采用 DBM 对多模、可压、具有间断界面的多模初始扰动 RT 不稳定性进行数值模拟. 结果表明, 在 RT 不稳定性发展的初期由于多模的设置, 界面处的黏性和热传导效应突出, 这些耗散效应会“抹平”界面, 多模之间相互竞争和吸收, 形成较少的主导模式; 在这一阶段系统内没有形成明显的“气泡”和“尖钉”结构. 在 RT 不稳定性的中后期, 由于模式的合并导致界处的耗散效应减弱, 重力占主导地位, 扰动界面逐渐变形、长大, 形成典型的“气泡-尖钉”结构, 即出现典型的“蘑菇头”形状, 而后进入湍流混合阶段. 这些现象与经典的实验结果一致. 同时给出系统整体非平衡程度随时间发展的演化情况, 一开始系统先趋于平衡态, 这是由于系统处于调整阶段, 从多模初始界面扰动调整到本征模阶段; 而后系统以线性形式偏离平衡态, 这是由于系统界面被抹平, 压缩能部分转化为内能; 然后系统又趋于平衡态, 这是由于模式的耦合与扰动界面进一步被“抹平”, 系统处于相对稳定状态; 最后系统越来越远离平衡态, 此时是由于系统轻重流体的重力势能相互转换, 系统的压缩能进一步被释放出来, 系统动能进一步增加所致. 在最近的一系列学术报告中, 许爱国等<sup>[34–37]</sup>进一步给出了非平衡程度更深、超越 Navier-Stokes 描述能力的复杂流动系统的 DBM 建模思路.

## 参考文献

- [1] Rayleigh L 1882 *Proc. London Math. Soc.* **s1-14** 170
- [2] Lamb H 1932 *Hydrodynamics* (6th Ed.) (London: Cambridge University press) p501
- [3] Taylor G 1950 *Proc. R. Soc. London A* **201** 192
- [4] Betti R, Goncharov V, McCrory R, Verdon C 1998 *Phys. Plasmas* (1994–present) **5** 1446
- [5] Wang L F, Ye W H, Wu J F, Liu J, Zhang W Y, He X T 2016 *Phys. Plasmas* **23** 052713
- [6] Wang L F, Ye W H, He X T, Wu J F, Fan Z F, Xue C, Guo H Y, Miao W Y, Yuan Y T, Dong J Q, Jia G, Zhang J, Li Y J, Liu J, Wang L M, Ding Y K, Zhang W Y 2017 *Sci. China: Phys. Mech. Astron.* **60** 055201
- [7] Cabot W, Cook A 2006 *Nat. Phys.* **2** 562
- [8] Berthoud G 2000 *Annu. Rev. Fluid Mech.* **32** 573
- [9] Barber J L, Kadau K, Germann T C, Alder B J 2008 *Eur. Phys. J. B* **64** 271
- [10] Celani A, Mazzino A, Vozella L 2006 *Phys. Rev. L.* **96** 134504
- [11] Moin P 1991 *Comput. Meth. Appl. Mech. Eng.* **87** 329
- [12] Succi S 2001 *The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond* (New York: Oxford University Press) pp179–255
- [13] He X Y, Chen S Y, Zhang R Y 1999 *J. Comput. Phys.* **152** 642
- [14] Li Q, Luo K H, Gao Y J, He Y L 2012 *Phys. Rev. E* **85** 026704
- [15] Liu G J, Guo Z L 2013 *Int. J. Numer. Method H.* **23** 176
- [16] Scagliarini A, Biferale L, Sbragaglia M, Sugiyama K, Toschi F 2010 *Phys. Fluids* **22** 055101
- [17] Xu A G, Zhang G C, Gan Y B, Chen F, Yu X J 2012 *Front. Phys.* **7** 582
- [18] Xu A G, Zhang G C, Gan Y B 2016 *Mech. Eng.* **38** 361 (in Chinese) [许爱国, 张广财, 甘延标 2016 力学与实践 **38** 361]
- [19] Gan Y B, Xu A G, Zhang G C, Yu X J, Li Y J 2008 *Physica A* **387** 1721
- [20] Gan Y B, Xu A G, Zhang G C, Li Y J 2011 *Phys. Rev. E* **83** 056704
- [21] Gan Y B, Xu A G, Zhang G C, Li Y J, Li H 2011 *Phys. Rev. E* **84** 046715
- [22] Yan B, Xu A G, Zhang G C, Ying Y J, Li H 2013 *Front. Phys.* **8** 94
- [23] 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]
- [24] Xu A G, Zhang G C, Ying Y J 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 184701 (in Chinese) [许爱国, 张广财, 应阳君 2015 物理学报 **64** 184701]
- [25] Xu A G, Zhang G C, Ying Y J, Wang C 2016 *Sci. China: Phys. Mech. Astron.* **59** 650501
- [26] Lin C D, Xu A G, Zhang G C, Li Y J, Succi S 2014 *Phys. Rev. E* **89** 013307
- [27] Lai H L, Xu A G, Zhang G C, Gan Y B, Ying Y J, Succi S 2016 *Phys. Rev. E* **94** 023106
- [28] Liu H, Kang W, Zhang Q, Zhang Y, Duan H L, He X T 2016 *Front. Phys.* **11** 115206
- [29] Gan Y B, Xu A G, Zhang G C, Yang Y 2013 *Europhys. Lett.* **103** 24003
- [30] Gan Y B, Xu A G, Zhang G C, Succi S 2015 *Soft Matter* **11** 5336
- [31] Watari M, Tsutahara M 2004 *Phys. Rev. E* **70** 016703
- [32] Zhang H X 1988 *Acta Aerodyn. Sin.* **6** 43 (in Chinese) [张涵信 1988 空气动力学学报 **6** 43]
- [33] Guo Z L, Zheng C G, Shi B C 2002 *Phys. Fluids* **14** 2007
- [34] Xu A G, Zhang G C 2016 *The 9th National Conference on Fluid Mechanics* Nanjing, China Oct. 20–23, 2016 (in Chinese) [许爱国, 张广财 2016 第九届全国流体力学学术会议, 南京, 2016年10月20–23日]
- [35] Xu A G, Zhang G C 2016 *Special Academic Report of Electromechanical College of Nanjing Forestry University* Nanjing, China, Oct. 25, 2016 (in Chinese) [许爱国, 张广财 2016 南京林业大学机电学院专题学术报告, 中国南京, 2016年10月25日]

[36] Xu A G, Zhang G C 2016 *Academic Report on Physics Department of Renmin University of China* Beijing, China, Nov. 23, 2016 (in Chinese) [许爱国, 张广财 2016 中国人民大学物理系专题学术报告, 中国北京, 2016 年 11 月 23 日]

[37] Xu A G, Zhang G C 2016 *The 4th Academic Seminar of LBM and Its Applications* Beijing, China, Nov. 26, 2016 (in Chinese) [许爱国, 张广财 2016 第四届 LBM 及其应用学术研讨会, 中国北京, 2016 年 11 月 26 日]

## Discrete Boltzmann simulation of Rayleigh-Taylor instability in compressible flows\*

Li De-Mei<sup>1)</sup> Lai Hui-Lin<sup>1)†</sup> Xu Ai-Guo<sup>2)3)‡</sup> Zhang Guang-Cai<sup>2)</sup>  
Lin Chuan-Dong<sup>1)4)</sup> Gan Yan-Biao<sup>1)5)</sup>

1) (*Key Laboratory of Analytical Mathematics and Application in Fujian Province, College of Mathematics and Informatics, Fujian Normal University, Fuzhou 350007, China*)

2) (*National Key Laboratory of Computational Physics, Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China*)

3) (*Center for Applied Physics and Technology, Key Center for High Energy Density Physics Simulations of Ministry of Education, College of Engineering, Peking University, Beijing 100871, China*)

4) (*Center for Combustion Energy, Department of Energy and Power Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China*)

5) (*North China Institute of Aerospace Engineering, Langfang 065000, China*)

( Received 4 September 2017; revised manuscript received 29 January 2018 )

### Abstract

We use a discrete Boltzmann model (DBM) to simulate the multi-mode Rayleigh-Taylor instability (RTI) in a compressible flow. This DBM is physically equivalent to a Navier-Stokes model supplemented by a coarse-grained model for thermodynamic nonequilibrium behavior. The validity of the model is verified by comparing simulation results of Riemann problems, Sod shock tube, collision between two strong shock waves, and thermal Couette flow with analytical solutions. Grid independence is verified. The DBM is utilized to simulate the nonlinear evolution of the RTI from multi-mode initial perturbation with discontinuous interface. We obtain the basic process of the initial disturbance interface which develops into mushroom graphs. The evolution of the system is relatively slow at the beginning, and the interface moves down on a whole. This is mainly due to the fact that the heat transfer plays a leading role, and the exchange of internal energy occurs near the interface of fluid. The overlying fluid absorbs heat, which causes the volume to expand, and the underlying fluid releases heat, which causes the volume to shrink, consequently the fluid interface moves downward. Meanwhile, due to the effects of viscosity and thermal conduction, the perturbed interface is smoothed. The evolution rate is slow at the initial stage. As the modes couple with each other, the evolution begins to grow faster. As the interface evolves gradually into the gravity dominated stage, the overlying and underlying fluids begin to exchange the gravitational potentials via nonlinear evolution. Lately, the two parts of fluid permeate each other

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11301082, 11475028, 11772064), the Natural Science Foundation of Fujian Province, China (Grant No. 2014J05003), the Office of Fujian Province Education Fund, China (Grant Nos. JA13069, JB13020), the Natural Science Foundation of Hebei Province, China (Grant No. A2017409014), the Natural Science Foundation of Hebei Educational Commission, China (Grant No. ZD2017001), and the Training Funds for Talent Engineering in Hebei Province, China (Grant No. A201500111).

† Corresponding author. E-mail: [hllai@fjnu.edu.cn](mailto:hllai@fjnu.edu.cn)

‡ Corresponding author. E-mail: [Xu\\_aiguo@iapcm.ac.cn](mailto:Xu_aiguo@iapcm.ac.cn)

near the interface. The system goes through the nonlinear disturbance and irregular nonlinear stages, then develops into the typical “mushroom” stage. Afterwards, the system evolves into the turbulent mixing stage. Owing to the coupling and development of perturbation modes, and the transformation among the gravitational potential energy, compression energy and kinetic energy, the system first approaches to a transient local thermodynamic equilibrium, then deviates from it and the perturbation grows linearly. After that, at the beginning, the fluid system tends to approach to an equilibrium state, which is caused by the adjustment of the system, and the disturbance of the multi-mode initial interface moves toward a process of the eigenmode stage. Then, the system deviates from the equilibrium state linearly, which is due to the flattening of the system interface and the conversing of the compression energy into internal energy. Moreover, the system tends to approach to the equilibrium state again, and this is because the modes couple and the disturbance interface is further “screened”. The system is in a relatively stable state. Furthermore, the system is farther away from the equilibrium state because of the gravitational potential energy of the fluid system transformation. The compression energy of the system is released further, and the kinetic energy is further increased. After that, the nonequilibrium intensity decreases, and then the system is slowly away from thermodynamic equilibrium. The interface becomes more and more complicated, and the nonequilibrium modes also become more and more abundant.

**Keywords:** discrete Boltzmann method, Rayleigh-Taylor instability, compressible flows, kinetic model

**PACS:** 05.20.Dd, 47.40.-x, 47.11.-j

**DOI:** [10.7498/aps.67.20171952](https://doi.org/10.7498/aps.67.20171952)