

# 基于相场模型的三相 Rayleigh-Taylor 不稳定性的 格子 Boltzmann 方法模拟\*

杨旭光<sup>1)</sup> 王欣<sup>2)3)</sup> 袁晓奎<sup>2)3)†</sup>

1) (湖南第一师范学院数学与统计学院, 长沙 410205)

2) (河北大学数学与信息科学学院, 保定 071002)

3) (河北大学, 河北省机器学习与计算智能重点实验室, 保定 071002)

(2025 年 8 月 15 日收到; 2025 年 9 月 25 日收到修改稿)

基于具有守恒性与相容性的  $N$  相相场模型, 发展了一种用于高效模拟  $N$  相非混溶不可压流体流动的正则化格子 Boltzmann 方法. 通过设计辅助矩, 该方法能够精确恢复二阶 Allen-Cahn 方程与修正的动量方程. 通过数值模拟三相液滴透镜铺展与三相 Kelvin-Helmholtz 不稳定性现象, 验证了所发展的  $N$  相正则化格子 Boltzmann 方法的正确性与有效性. 最后, 对三相 Rayleigh-Taylor 不稳定性进行了数值模拟与分析, 重点探究了雷诺数在  $500 \leq Re \leq 20000$  范围内 (特别是高雷诺数  $Re = 20000$  工况下) 相界面的演化过程, 定量分析了两个界面处气泡与尖钉的振幅以及无量纲化速度的变化规律.

**关键词:** 相场模型,  $N$  相不可压流体, 格子 Boltzmann 方法, Rayleigh-Taylor 不稳定性

**DOI:** [10.7498/aps.75.20251095](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251095)

**CSTR:** [32037.14.aps.75.20251095](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20251095)

## 1 引言

多相多组分复杂流体广泛存在于自然界和工业应用中, 其复杂的界面行为和组分间的相互作用为理论分析和数值研究带来了极大的挑战, 具有重要的学术研究意义和应用价值. 在众多复杂的界面现象中, 瑞利-泰勒 (Rayleigh-Taylor, R-T) 不稳定性是多相流体力学中一种基础且重要的失稳机制, 源于密度梯度与加速度场的反向配置导致的势能释放. 它从线性指数增长开始, 迅速演化为复杂的非线性流场, 最终形成湍流混合区. 理解、预测和控制 R-T 不稳定性的增长及混合行为, 对于惯性约束聚变、天体物理过程解释以及众多涉及加速流体界面的工程应用至关重要, 至今仍是理论、

数值模拟和实验研究的活跃领域, 特别是在涉及可压缩性、强冲击、复杂本构关系 (如强度、辐射) 以及极端条件下的多尺度、多物理场耦合问题中.

R-T 不稳定性的动力学行为可由可压缩或不可压缩的 Navier-Stokes (N-S) 方程、耦合能量方程 (如果考虑热效应) 和描述界面的方程 (如 Level Set, Volume of Fluid 方法或相场方程) 控制. 在过去的几十年里, 研究者们采用各种解析方法和数值方法对 R-T 不稳定性的界面演化过程进行了研究, 如线性稳定性分析, 通常基于扰动的模态分解和特征值问题求解, 而非线性阶段的研究高度依赖于高精度数值模拟方法, 如分子动力学模拟<sup>[1]</sup>、直接数值模拟<sup>[2]</sup>、大涡模拟方法<sup>[3]</sup>等. 这些研究为深入理解 R-T 不稳定性现象的动力学机制提供了高质量的参考信息. 基于介观动理学理论发展而来的格

\* 国家自然科学基金 (批准号: 12202130, 12372286)、湖南省科技创新计划 (批准号: 2024RC3228)、河北大学优秀青年科研创新团队 (批准号: QNTD202414)、长沙市杰出创新青年培养计划 (批准号: kq2306023) 和航空科学基金 (批准号: 20220054069001) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: [yuanxl@hbu.edu.cn](mailto:yuanxl@hbu.edu.cn)

子 Boltzmann 方法 (LBM)<sup>[4,5]</sup>, 凭借介观物理基础、高效并行性及天然的多相耦合能力, 成为模拟多相/多组分流体 (尤其是涉及复杂界面、微尺度效应或高并行需求场景) 的理想工具, 其优势在需要精确界面动力学描述或强多场耦合的问题中尤为显著. 近些年, LBM 在 R-T 不稳定性研究方面, 发挥着越来越重要的作用. 如 He 等<sup>[6]</sup> 采用双分布等温 LBM 对三维单模 R-T 不稳定性问题进行了数值模拟, 分析了雷诺数 (Reynolds number,  $Re$ ) 和 Atoowd ( $A_t$ ) 数对不稳定性界面结构的影响. Liang 等<sup>[7-11]</sup> 基于 LBM 针对非混相流体的单模 R-T 不稳定性后期演化过程开展了一系列数值研究, 分析了  $Re$  数和 Atoowd 数对不稳定性的后期增长阶段和相界面动力学行为的影响. 李德梅等<sup>[12]</sup> 利用离散 Boltzmann 方法研究了可压缩流体的二维单模 R-T 不稳定性的非平衡效应. Zhang 等<sup>[13]</sup> 采用多相流 LBM 模拟了表面张力作用下二维单模 R-T 不稳定性的演化过程, 发现表面张力作用的存在可以抑制气泡和尖钉的增长. Hu 等<sup>[14]</sup> 基于相场 LBM, 研究了竖直微通道内的单模 R-T 不稳定性问题, 并系统分析了  $Re$  数, 尤其是高  $Re$  数对 R-T 不稳定性的界面动力学行为以及扰动在各发展阶段演化规律的影响. 对于三相 R-T 不稳定性, Zhan 等<sup>[15]</sup> 以及 Kalantarpour 等<sup>[16]</sup> 基于相场 LBM 模拟了在三相 R-T 不稳定性过程中各相流体随时间的演化, 并分析了三相 R-T 不稳定性过程中每个流体组分的界面的平均、最低以及最高的位置.

通过以上内容可以看到, 目前已有众多学者采用 LBM 对 R-T 不稳定性问题进行了研究, 并取得了一些重要的结果, 丰富了人们对 R-T 不稳定性发展规律的认识. 但大多数研究聚焦于两相流体的 R-T 不稳定性现象, 鲜有研究考虑三相甚至  $N$  相 ( $N > 3$ ) R-T 不稳定性. 在描述  $N$  相流体的相场模型方面, Boyer 等<sup>[17,18]</sup> 通过引入一个适用于三相流的连续自由能模型, 当其中一相消失时, 该模型可简化为两相情形, 进而构造了适用于三相问题的相场模型. Dong<sup>[19]</sup> 通过考虑热力学原理所决定的守恒定律和本构关系, 构造了一个适用于描述  $N$  相流体流动且满足还原一致性和热力学一致性的相场模型. 上述相场模型均采用了四阶 Cahn-Hilliard 方程描述不同相界面的变化. 对于 Allen-Cahn 相场模型, Zheng 等<sup>[20]</sup> 所发展的模型以及 Mirjalili 和 Mani<sup>[21]</sup> 所发展的模型均满足还原一致

性, 形式上比较接近. 此外, Mirjalili 的模型<sup>[21]</sup> 还满足体积守恒、相对称性和质量-动量输运一致性. 由此可见,  $N$  相流体的相场模型已有较为长足的发展. 但在三相甚至  $N$  相 ( $N > 3$ ) R-T 不稳定性研究方面, 有一些学者对三相 R-T 不稳定性开展部分研究<sup>[15,16]</sup>, 主要是通过每个流体组分的界面位置来量化复杂三元体系的 R-T 不稳定性. Xia 等<sup>[22]</sup> 则通过一种改进的相场方法, 用于模拟  $N$  组分不可压缩不混溶流体的界面演化问题, 对四组分流体流动的 R-T 不稳定性进行界面跟踪.  $N$  相 ( $N \geq 3$ ) R-T 不稳定性涉及到多种流体界面的变形、破碎以及合并等现象, 界面动力学行为更为复杂, 对数值方法提出了更高的要求. 因此, 本文基于相场模型, 发展了能够有效模拟  $N$  相 ( $N \geq 3$ ) 非混溶不可压缩流体流动的正则化格子 Boltzmann (LB) 方法. 正则化 LB 方法的核心思路在于, 通过在演化方程中引入一个基于宏观量的预碰撞函数, 并滤除高阶非平衡态项, 从而在不提升计算复杂度的条件下, 显著增强了单松弛 LBM 的数值精度与稳定性<sup>[23]</sup>. 目前, 该方法已成功用于模拟方腔驱动流<sup>[24]</sup>、Womersley 流及传热传质等多种流动问题<sup>[25,26]</sup>. 基于该方法, 本文对三相 R-T 不稳定性进行了数值模拟, 并重点分析了  $Re$  数 ( $500 \leq Re \leq 20000$ ) 的变化对相界面动力学行为的影响.

## 2 $N$ 相非混溶不可压流体的相场模型

基于扩散界面模型和梯度流理论, 本节引入描述  $N$  相非混溶不可压流体流动的相场模型, 其中包含满足质量守恒的 Allen-Cahn (A-C) 方程和耦合的不可压 N-S 方程.

### 2.1 $N$ 相流体系统的自由能模型

本文考虑等温条件下, 由  $N$  个相态构成的流体系统. 根据扩散界面模型和梯度流理论,  $N$  相流体的总 Helmholtz 自由能  $F$  由两部分构成, 一部分来自体相区均匀流体的自由能, 另一部分则是相界面处的密度梯度所产生的自由能. 因此,  $F$  可以表示为以下形式<sup>[19]</sup>:

$$F = \int_{\Omega} \sum_{q \neq p} \left\{ \beta_{pq} [g(\phi_p) + g(\phi_q) - g(\phi_p + \phi_q)] + \frac{k_{pq}}{2} \nabla \phi_p \cdot \nabla \phi_q \right\} d\Omega, \text{ for } 1 \leq p, q \leq N, \quad (1)$$

其中,  $\phi_p$  为序参数, 表示第  $p$  个相态在流体系统中所占的体积分数, 且满足体积守恒条件  $\sum_p \phi_p = 1$ .  $g(\phi)$  为体相区均匀流体的 Helmholtz 自由能密度, 通常写为双势阱形式<sup>[27,28]</sup>,  $g(\phi) = \phi^2(1-\phi)^2$ ,  $\beta_{pq}$  和  $k_{pq}$  是与界面厚度  $\epsilon$  和表面张力  $\sigma_{pq}$  相关的物理量, 定义如下:

$$\beta_{pq} = \frac{3}{\epsilon} \sigma_{pq}, \quad k_{pq} = -\frac{3\epsilon}{4} \sigma_{pq}, \quad (2)$$

其中,  $\sigma_{pq}$  满足对称性质, 即  $\sigma_{pq} = \sigma_{qp} = 0 (p \neq q)$  和  $\sigma_{pp} = 0$ .

通过上述定义的自由能泛函对序参数  $\phi_p$  进行变分, 可以得到第  $p$  个相态的化学势  $\mu_{\phi_p}$  如下:

$$\begin{aligned} \mu_{\phi_p} = \frac{\delta F}{\delta \phi_p} = & \sum_{q \neq p} 2\beta_{pq} [g'(\phi_p) - g'(\phi_p + \phi_q)] \\ & - \sum_{q \neq p} k_{pq} \nabla^2 \phi_q. \end{aligned} \quad (3)$$

进而可以得到系统的表面张力  $\mathbf{F}_s$ ,

$$\mathbf{F}_s = \sum_p \mu_{\phi_p} \nabla \phi_p. \quad (4)$$

## 2.2 $N$ 相非混溶不可压流体动力学方程组

根据相场模型, 序参数  $\phi_p$  的演化通常由流体速度的对流和化学势的扩散来描述. 为了便于计算, 也经常采用二阶 A-C 方程来描述序参数的演化过程. 这里根据文献<sup>[15,21]</sup> 采用了如下具有守恒性质的二阶 A-C 方程:

$$\frac{\phi_p}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \phi_p) = \nabla \cdot M_p (\nabla \phi_p - \mathbf{R}_p), \quad p=1, \dots, N, \quad (5)$$

其中,  $\mathbf{u}$  为流体速度,  $M$  表示迁移率,  $\mathbf{R}_p$  为源项. 为了保证质量守恒, 通常表示成拉格朗日乘子的形式, 在这里定义为

$$\mathbf{R}_p = \sum_{q \neq p} \frac{\phi_p \phi_q}{\epsilon_{pq}/\epsilon} \mathbf{n}_{pq}, \quad (6)$$

其中,  $\mathbf{n}_{pq}$  为成对法向量, 表达式为

$$\mathbf{n}_{pq} = \frac{\nabla \phi_{pq}}{|\nabla \phi_{pq}|} \quad \text{for } q \neq p, \quad (7)$$

$\phi_{pq}$  为成对体积分数, 定义为

$$\phi_{pq} = \frac{\phi_p}{\phi_p + \phi_q} \quad \text{for } q \neq p. \quad (8)$$

从  $\phi_{pq}$  的定义可以得出  $\phi_{qp} = 1 - \phi_{pq}$ ,  $\nabla \phi_{qp} = -\nabla \phi_{pq}$  和  $\mathbf{n}_{qp} = -\mathbf{n}_{pq}$ . 利用以上关系式, 对方程 (5) 关于  $q$  求和, 可得

$$\frac{\partial \sum_p \phi_p}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \mathbf{u} \sum_p \phi_p \right) = \gamma \epsilon \nabla^2 \left( \sum_p \phi_p \right). \quad (9)$$

注意到在  $t = 0$  时刻,  $\sum_p \phi_p = 1$ , 因此在实际的计算过程中, 只需要计算  $N - 1$  相的序参数, 剩余一相的序参数可以利用关系式  $\sum_p \phi_p = 1$  进行求解.

接下来, 正如参考文献<sup>[21,29,30]</sup> 中所提到的, 我们采用单流体模型来描述  $N$  相不可压流体流动, 也即是  $N$  相 A-C 方程 (5) 与单个动量方程耦合. 其中, 动量方程采用如下的相容和守恒形式:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot [(\rho \mathbf{u} - \mathbf{S}) \otimes \mathbf{u}] \\ = -\nabla P + \nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] + \mathbf{F}_s + \mathbf{G}, \end{aligned} \quad (10)$$

其中,  $P$  表示流体的压力,  $\mathbf{G}$  是外力项,  $\rho$  为流体的密度, 定义为

$$\rho = \sum_p \rho_p \phi_p, \quad (11)$$

$\rho_p$  为  $p$  相流体的密度,  $\mu = \sum_p \mu_p \phi_p$  为流体的黏性,  $\mathbf{S}$  是为了满足相容性的动量修正项, 定义为

$$\mathbf{S} = \sum_p \rho_p M (\nabla \phi_p - \mathbf{R}_p). \quad (12)$$

## 3 格子 Boltzmann 方法

### 3.1 求解二阶 A-C 方程的正则化 LB 方法

为了准确求解具有守恒性的二阶 A-C 方程 (5), 本文采用了正则化 LB 方法, 其演化方程的表达式如下:

$$\begin{aligned} f_{i,p}(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t, t + \delta t) \\ = f_{i,p}^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) + \sum_p (\delta_{ip} - \Lambda_{ip}) \frac{\omega_i \mathbf{c}_i}{c_s^2} \cdot \Pi^{(\text{neq})}(\mathbf{x}, t) \\ + \delta t \sum_p \left( \delta_{ip} - \frac{\Lambda_{ip}}{2} \right) S_{i,p}(\mathbf{x}, t), \\ p = 1, \dots, N, \end{aligned} \quad (13)$$

其中,  $f_{i,p}(\mathbf{x}, t)$  为第  $p$  个相态的离散分布函数.  $\mathbf{c}_i = c \mathbf{e}_i$ ,  $\{\mathbf{e}_i, i = 0, \dots, b-1\}$  为离散速度空间,  $c$  代表格子声速,  $[\Lambda_{ip}]_{N \times N}$  为松弛因子矩阵, 若采用单松弛碰撞算子, 则为数量矩阵.  $\Pi^{(\text{neq})}(\mathbf{x}, t)$  的定义如下:

$$\begin{aligned} \Pi^{(\text{neq})}(\mathbf{x}, t) = \Pi(\mathbf{x}, t) - \Pi^{(0)}(\mathbf{x}, t) \\ = \sum_i \mathbf{c}_i f_{i,p}(\mathbf{x}, t) - \sum_i \mathbf{c}_i f_{i,p}^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t), \end{aligned}$$

其中,  $f_{i,p}^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)$  为平衡态分布函数, 表达式为

$$f_{i,p}^{\text{eq}} = \begin{cases} \phi_p + (\omega_i - 1)\eta\phi_p, & i = 0, \\ \omega_i\eta\phi_p + \omega_i\mathbf{c}_i \cdot \phi_p\mathbf{u}/c_s^2, & i \neq 0, \end{cases} \quad (14)$$

其中,  $\eta$  是为了提高 LBM 的数值稳定性所引入的可调参数, 与  $M$  的数值相关.  $\omega_i$  为权系数, 在本文的数值计算中, 采用经典的 DdQq 格子模型 ( $d$  维  $q$  速)<sup>[31]</sup>. 对于一维问题, 常采用的 D1Q3 格子模型的离散速度空间为  $\{\mathbf{c}_0, \mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2\} = \{0, c, -c\}$ , 权系数为  $\omega_0 = 2/3, \omega_1 = \omega_2 = 1/6$ ; 对于二维问题, 常采用的 D2Q9 模型的速度空间为

$$\{\mathbf{c}_i, i = 0, \dots, 8\} = \{(0, 0), (\pm c, 0), (0, \pm c), (\pm c, \pm c)\},$$

权系数为  $\omega_0 = 4/9, \omega_{1-4} = 1/9, \omega_{5-8} = 1/36$ .

$S_{i,p}(\mathbf{x}, t)$  为源项分布函数, 表达式为

$$S_{i,p}(\mathbf{x}, t) = \omega_i \left[ \frac{\mathbf{c}_i \cdot \partial_t(\phi_p\mathbf{u})}{c_s^2} + \eta\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{R}_p \right]. \quad (15)$$

根据格子模型的对称性, 离散速度  $\mathbf{c}_k$  和权系数  $\omega_k$  满足如下条件:

$$\begin{cases} \sum_{k=1}^q \omega_k = 1, & \sum_{k=1}^q \omega_k \mathbf{c}_k \mathbf{c}_k = c_s^2 \mathbf{I} = c_s^2 \delta_{ij}, \\ \sum_{k=1}^q \omega_k \mathbf{c}_k = 0, & \sum_{k=1}^q \omega_k \mathbf{c}_k \mathbf{c}_k \mathbf{c}_k = 0, \\ \sum_{k=1}^q \omega_k \mathbf{c}_k \mathbf{c}_k \mathbf{c}_k \mathbf{c}_k = 0, \\ \sum_{k=1}^q \omega_k \mathbf{c}_k \mathbf{c}_k \mathbf{c}_k \mathbf{c}_k = c_s^4 \Delta = c_s^4 (\delta_{ij}\delta_{kl} + \delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}). \end{cases} \quad (16)$$

将上述条件应用到平衡态分布函数  $f_{i,p}^{\text{eq}}$  和源项分布函数  $S_{i,p}$ , 可得到如下矩条件:

$$\begin{cases} \sum_i f_{i,p}^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) = \sum_i f_{i,p}(\mathbf{x}, t) = \phi_p, \\ \sum_i \mathbf{c}_i f_{i,p}^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) = \phi_p \mathbf{u}, \\ \sum_i \mathbf{c}_i \mathbf{c}_i f_{i,p}^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) = c_s^2 \eta \phi_p \mathbf{I}, \\ \sum_i S_{i,p}(\mathbf{x}, t) = 0, \\ \sum_i \mathbf{c}_i S_{i,p}(\mathbf{x}, t) = \partial_t(\phi_p \mathbf{u}) + c_s^2 \eta \mathbf{R}_p. \end{cases} \quad (17)$$

通过 Chapman-Enskog 多尺度分析, 上述正则化 LB 方法可正确恢复至二阶 A-C 方程, 并得到迁移率  $M$  与松弛因子  $\tau_{\phi_p}$  的关系为  $M = \eta c_s^2 (\tau_{\phi_p} - 1/2) \delta t$ , 这里采用单松弛碰撞算子, 松弛矩阵与松弛因子的

关系可表示为  $[A_{ip}]_{N \times N} = \tau_{\phi_p} \mathbf{I}$ .

### 3.2 求解动量守恒方程的正则化 LB 方法

本节将建立求解具有相容性和守恒性的动量守恒方程 (10) 的正则化 LB 方法, 演化方程如下:

$$\begin{aligned} h_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \delta t, t + \delta t) &= h_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) \\ &+ \frac{(1 - 1/\tau_h)}{2c_s^4} \omega_i \mathbf{Q}_i : \sum_j \mathbf{c}_j \mathbf{c}_j (h_j(\mathbf{x}, t) - h_j^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)) \\ &+ \delta t F_i(\mathbf{x}, t) + \frac{\delta t^2}{2} D_i F_i(\mathbf{x}, t), \end{aligned} \quad (18)$$

其中,  $\mathbf{Q}_i = \mathbf{c}_i \mathbf{c}_i - c_s^2 \mathbf{I}$ ,  $D_i = \partial_t + \mathbf{c}_i \cdot \nabla$ ,  $h_i(\mathbf{x}, t)$  为分布函数,  $h_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)$  为平衡态分布函数, 表达式如下:

$$h_i^{\text{eq}} = \begin{cases} \rho_0 - (1 - \omega_0)p/c_s^2 + \omega_0 s_0(\mathbf{u}), & i = 0, \\ \omega_i p/c_s^2 + s_i(\mathbf{u}), & i \neq 0, \end{cases} \quad (19)$$

$s_i(\mathbf{u}) = \omega_i \left[ \frac{\mathbf{c}_i \cdot (\rho \mathbf{u})}{c_s^2} + \frac{(\rho \mathbf{u} \mathbf{u} - \mathbf{S} \mathbf{u}) : (\mathbf{c}_i \mathbf{c}_i - c_s^2 \mathbf{I})}{2c_s^4} \right]$ .  $F_i$  为外力分布函数, 表达式为

$$\begin{aligned} F_i &= \omega_i \left[ \frac{\mathbf{c}_i \cdot (\mathbf{F}_s + \mathbf{F}_c)}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{M}_f + c_s^2 \mathbf{u} \nabla \rho) : (\mathbf{c}_i \mathbf{c}_i - c_s^2 \mathbf{I})}{c_s^4} \right. \\ &\left. + \frac{1}{2} \left( \frac{|\mathbf{c}_i|^2}{c_s^2} - D \right) (\mathbf{u} \cdot \nabla \rho) \right], \end{aligned} \quad (20)$$

其中,  $\mathbf{F}_c = \nabla \cdot [\mathbf{S} \mathbf{u} - (\mathbf{S} \mathbf{u})^T] / 2$ ,  $D$  为空间维度,  $\mathbf{M}_f$  是为了正确恢复动量方程而设计的辅助函数, 定义为

$$\mathbf{M}_f = \mathbf{u} \mathbf{F}_s + \frac{1}{2} \partial t (p \mathbf{I} - \mathbf{u} \mathbf{S}) - \mathbf{u} \nabla \cdot (p \mathbf{I} - \mathbf{u} \mathbf{S}).$$

平衡态分布函数  $h_i^{\text{eq}}$  和外力分布函数  $F_i$  满足如下矩条件:

$$\begin{cases} \sum_k h_k^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) = \sum_k h_k(\mathbf{x}, t) = \rho_0, \\ \sum_k \mathbf{c}_k h_k^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) = \sum_k \mathbf{c}_k h_k = \rho \mathbf{u}, \\ \sum_k \mathbf{c}_k \mathbf{c}_k h_k^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) = p \mathbf{I} + \rho \mathbf{u} \mathbf{u} - \frac{\mathbf{S} \mathbf{u} + (\mathbf{S} \mathbf{u})^T}{2}, \\ \sum_k \mathbf{c}_k \mathbf{c}_k \mathbf{c}_k h_k^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) = c_s^2 \rho [\mathbf{u} \mathbf{I}], \\ \sum_k F_k(\mathbf{x}, t) = 0, \\ \sum_k \mathbf{c}_k F_k(\mathbf{x}, t) = \mathbf{F}_s + \mathbf{F}_c, \\ \sum_k \mathbf{c}_k \mathbf{c}_k F_k(\mathbf{x}, t) = [\mathbf{M}_f] + c_s^2 [\mathbf{u} \nabla \rho] + c_s^2 \mathbf{u} \cdot \nabla \rho \mathbf{I}, \end{cases} \quad (21)$$

其中,

$$[\mathbf{u}\mathbf{I}]_{\alpha\beta\gamma} = u_\alpha\delta_{\beta\gamma} + u_\beta\delta_{\alpha\gamma} + u_\gamma\delta_{\alpha\beta},$$

$$[\mathbf{u}\nabla\rho]_{\alpha\beta} = u_\alpha\partial_\beta\rho + u_\beta\partial_\alpha\rho.$$

同样地, 通过 Chapman-Enskog 多尺度分析, 本文发展的正则化 LB 方法能恢复至不可压流体动量方程, 并得到黏性表达式为  $\mu = \rho c_s^2 (\tau_h - 1/2) \delta t$ .

为了显式计算, 对演化方程 (18) 采用迎风格式进行离散, 得到如下形式:

$$\begin{aligned} h_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i\delta t, t + \delta t) &= h_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) \\ &+ (1 - 1/\tau) A_{ij} [h_j(\mathbf{x}, t) - h_j^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)] \\ &+ \frac{\delta t}{2} F_i(\mathbf{x}, t) + \frac{\delta t}{2} F_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i\delta t, t + \delta t), \end{aligned} \quad (22)$$

其中,  $A_{ij} = \frac{\omega_i \mathbf{Q}_i : \mathbf{c}_j \mathbf{c}_j}{2c_s^4}$ . 通过引入一个新的分布函数  $g_i(\mathbf{x}, t) = h_i(\mathbf{x}, t) - \frac{\delta t}{2} F_i(\mathbf{x}, t)$ , 方程 (22) 可以写成如下的显式计算表达式:

$$\begin{aligned} g_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i\delta t, t + \delta t) &= g_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) \\ &+ \frac{(1 - 1/\tau)\omega_i}{2c_s^4} \mathbf{Q}_i : \sum_j \mathbf{c}_j \mathbf{c}_j [g_j(\mathbf{x}, t) - g_j^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)] \\ &+ \frac{\delta t}{2} F_i(\mathbf{x}, t) + \frac{\delta t}{2} \left(1 - \frac{1}{\tau}\right) \frac{\omega_i}{2c_s^4} \mathbf{Q}_i : \sum_j \mathbf{c}_j \mathbf{c}_j F_j(\mathbf{x}, t). \end{aligned} \quad (23)$$

流体速度  $\mathbf{u}$  和压力  $p$  的计算表达式为

$$\mathbf{u} = \left[ \sum_i \mathbf{c}_i g_i + \frac{\delta t}{2} (\mathbf{F}_s + \mathbf{F}_c) \right] / \rho, \quad (24)$$

$$p = \frac{c_s^2}{1 - \omega_0} \left( \sum_{i \neq 0} g_i + \omega_0 s_0(\mathbf{u}) \right). \quad (25)$$

## 4 数值验证

本节通过对几个经典的多相流问题, 如三相液体透镜的铺展和三相 Kelvin-Helmholtz 不稳定性, 进行数值模拟, 来验证本文发展的  $N$  相正则化 LB 方法的正确性和有效性.

### 4.1 三相液体透镜的铺展

液体透镜的铺展问题作为一个经典的基准算例, 经常被用于测试模拟多相流的数值算法 [32-36]. 如图 1 所示, 在初始时刻, 圆形的液滴 (Phase 1) 被放置于其他两种非混溶的流体 (Phase 2 和 Phase 3) 之间, 在表面张力的作用下会发生变形, 最终达到稳态后会在第三相流体的界面形成液体

透镜. 根据 Neumann 定律, 达到平衡态的液体透镜的接触角  $\theta_1$ ,  $\theta_2$  和表面张力系数满足如下关系:

$$\cos(\theta_1) = \frac{\sigma_{12}^2 + \sigma_{23}^2 - \sigma_{13}^2}{2\sigma_{12}\sigma_{23}},$$

$$\cos(\theta_2) = \frac{\sigma_{13}^2 + \sigma_{23}^2 - \sigma_{12}^2}{2\sigma_{13}\sigma_{23}},$$

其中,  $\sigma_{ij}$  表示  $i$  相和  $j$  相之间的表面张力. 此外, 三相接触点之间的距离  $d$  和液体透镜的高度  $h_i$  的解析表达式如下:

$$d = 2\sqrt{A / \sum_i \frac{1}{\sin\theta_i} \left( \frac{\theta_i}{\sin\theta_i} - \cos\theta_i \right)},$$

$$h_i = \left( \frac{d}{2} \right) \frac{1 - \cos\theta_i}{\sin\theta_i}, \quad i = 1, 2,$$

其中,  $A$  为初始时刻液体透镜的面积.

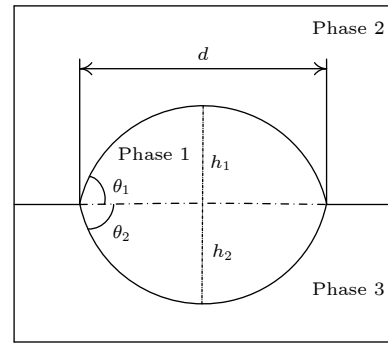


图 1 三相液体透镜示意图

Fig. 1. Schematic of the spreading of a liquid lens.

在数值模拟时, 初始条件设置为

$$\phi_1(x, y) = 0.5 + 0.5 \tanh \frac{2 \left[ R - \sqrt{(x-x_c)^2 + (y-y_c)^2} \right]}{D},$$

$$\phi_2(x, y) = \max \left[ 0.5 + 0.5 \tanh \frac{2(y-y_c)^2}{D} - n_1(x, y), 0 \right],$$

$$\phi_3(x, y) = 1.0 - \phi_1(x, y) - \phi_2(x, y),$$

其中, 圆形液体透镜的半径  $R = 30$ , 界面厚度  $D = 5$ ,  $(x_c, y_c)$  为透镜的圆心, 计算区域所采用的网格为  $150 \times 150$ . 其他物理参数如液体密度和表面张力分别设置为  $\rho_1 = 10$ ,  $\rho_2 = 5$ ,  $\rho_3 = 1$ ,  $\sigma_{12} = 0.01$ . 在  $x$  方向采用周期边界条件, 顶部和底部边界则采用无滑移边界条件.

图 2 给出了在三种不同表面张力比  $\sigma_{12} : \sigma_{13} : \sigma_{23} = 1 : 1 : 1$ ,  $\sigma_{12} : \sigma_{13} : \sigma_{23} = 1 : \sqrt{2} : 1$  和  $\sigma_{12} : \sigma_{13} : \sigma_{23} = 1 : \sqrt{3} : 1$  下, 液体透镜达到平衡态时的密度分布. 结果表明, 液体透镜的平衡形态取决于

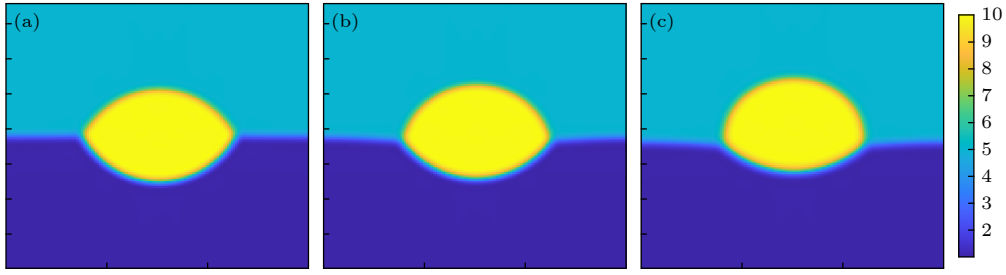


图 2 不同界面张力比下的三相液体透镜平衡态 (a)  $\sigma_{12} : \sigma_{13} : \sigma_{23} = 1 : 1 : 1$ ; (b)  $\sigma_{12} : \sigma_{13} : \sigma_{23} = 1 : \sqrt{2} : 1$ ; (c)  $\sigma_{12} : \sigma_{13} : \sigma_{23} = 1 : \sqrt{3} : 1$

Fig. 2. The equilibrium shapes of liquid by ternary fluids: (a)  $\sigma_{12} : \sigma_{13} : \sigma_{23} = 1 : 1 : 1$ ; (b)  $\sigma_{12} : \sigma_{13} : \sigma_{23} = 1 : \sqrt{2} : 1$ ; (c)  $\sigma_{12} : \sigma_{13} : \sigma_{23} = 1 : \sqrt{3} : 1$ .

表 1 不同表面张力比下液体透镜的长度  $d$  和高度  $h_1, h_2$

Table 1. The length  $d$ , and height  $h_1, h_2$  at equilibrium state with different surface tension ratios.

$\sigma_{12} : \sigma_{13} : \sigma_{23}$	解析解			数值解			相对误差		
	$d$	$h_1$	$h_2$	$d$	$h_1$	$h_2$	$d$	$h_1$	$h_2$
1 : 1 : 1	83.10	23.99	23.99	84.26	24.45	24.42	1.40%	1.92%	1.80%
1 : $\sqrt{2}$ : 1	72.67	36.34	15.05	74.02	37.03	15.34	1.86%	1.90%	1.93%
1 : $\sqrt{3}$ : 1	55.05	47.67	7.38	55.83	48.42	7.48	1.42%	1.57%	1.36%

表面张力比, 且随着表面张力  $\sigma_{13}$  的增大, 其形态趋于球形. 这些界面形状的变化与已发表文献的结果在定性的角度上是一致的. 为了从定量的角度验证本文发展的多相正则化 LB 方法的准确性和有效性, 进一步计算了透镜的长度  $d$  和高度 ( $h_1, h_2$ ), 并与解析解进行了对比, 结果展示在表 1 中. 可以看到, 采用本文提出的多相流正则化 LB 方法计算的透镜长度和高度的数值解与解析解的最大相对误差不超过 1.95%, 验证了该方法模拟三相液体透镜问题的准确性和有效性.

### 4.2 Kelvin-Helmholtz 不稳定性

本节通过对 Kelvin-Helmholtz (K-H) 不稳定性开展数值模拟, 以验证当前所发展的多相流正则化 LB 方法处理复杂界面动力学问题的能力. K-H 不稳定性通常发生于单一连续流体内部存在速度剪切或不同流体界面两侧存在速度差的条件下. 作为一种普遍存在的流体流动现象, K-H 不稳定性广泛存在于自然界中, 其主导作用塑造了从海洋波浪到天空云层等多种基础自然结构. 鉴于其重要性, K-H 不稳定性已得到广泛研究 [22,34,37-39]. 然而, 现有数值模拟研究多局限于两相体系 [37-39]. 为此, 本研究尝试采用当前的 LB 方法, 对三种不可混溶不可压缩流体间的 K-H 不稳定性进行数值模拟.

三相 K-H 不稳定性的示意图如图 3 所示,  $x$  方

向采用周期边界条件, 底部和顶部边界均采用速度边界条件. 计算区域的网格为  $256 \times 256$ , 序参数的初始条件设置为

$$\begin{aligned} \phi_1(x, y) &= 0.5 + 0.5 \tanh \frac{2(y - 2NY/3 - h)}{D}, \\ \phi_2(x, y) &= 0.5 + 0.5 \tanh \frac{2(y - NY/3 - h)}{D} - \phi_1(x, y), \\ \phi_3(x, y) &= 1.0 - \phi_1(x, y) - \phi_2(x, y), \end{aligned} \quad (26)$$

其中,  $h = 0.01NY \times \sin(4\pi x/NX)$  是对界面的扰动. 三相流体的初始速度为

$$\begin{aligned} u &= U_0 + U_0 \left[ \tanh \frac{2(y - 2NY/3 - h)}{D} \right. \\ &\quad \left. - \tanh \frac{2(y - NY/3 - h)}{D} \right], \quad v = 0, \end{aligned}$$

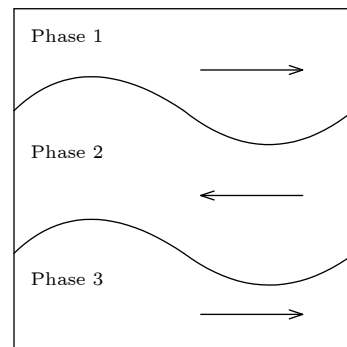


图 3 Kelvin-Helmholtz 不稳定性示意图

Fig. 3. Schematic of the spreading of Kelvin-Helmholtz instability.

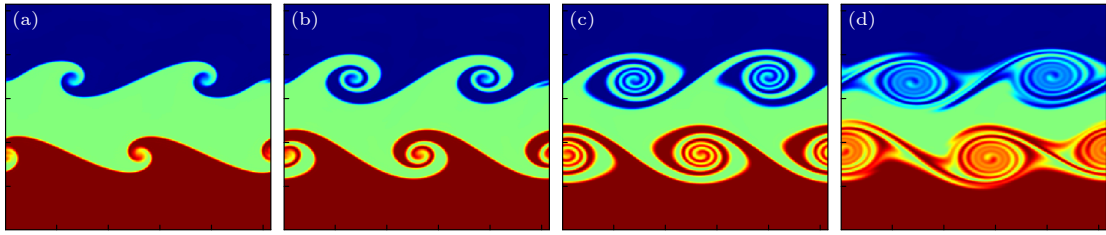


图 4 不同时刻下的密度分布 (a)  $t = 2000$ ; (b)  $t = 3000$ ; (c)  $t = 5000$ ; (d)  $t = 9000$

Fig. 4. Density distribution at different times: (a)  $t = 2000$ ; (b)  $t = 3000$ ; (c)  $t = 5000$ ; (d)  $t = 9000$ .

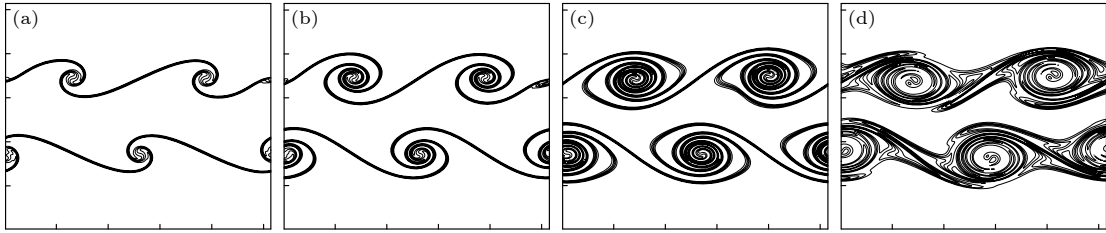


图 5 不同时刻下的涡场图 (a)  $t = 2000$ ; (b)  $t = 3000$ ; (c)  $t = 5000$ ; (d)  $t = 9000$

Fig. 5. Vorticity field at different times: (a)  $t = 2000$ ; (b)  $t = 3000$ ; (c)  $t = 5000$ ; (d)  $t = 9000$ .

其中,  $U_0$  为恒定的速度, 底部和顶部的速度边界条件为  $u = U_0, v = 0$ . K-H 不稳定的主要无量纲参数为雷诺数  $Re$ , 定义为  $Re = NY \times U_0/\nu$ . 在数值模拟中,  $Re = 5000$ , 密度比为  $\rho_1 : \rho_2 : \rho_3 = 0.98 : 0.99 : 1$ ,  $U_0 = 0.04$ ,  $D = 3$ , 表面张力为  $\sigma_{12} = \sigma_{13} = \sigma_{23} = 0.0001$ . 图 4 给出了不同时刻下三相 K-H 不稳定的密度分布的数值结果. 结果表明存在正弦型界面扰动的密度场演化过程在剪切应力作用的影响下, 上、下界面逐渐卷曲并形成涡卷结构. 该卷曲现象随时间推移持续加剧, 其物理机制可归因于涡量的累积效应. 图 5 进一步显示, 涡量在涡卷核心处富集, 促使薄层涡丝 (braids) 与涡核 (cores) 形成, 进而诱发涡旋结构随时间逐渐发展壮大. 当前的数值模拟结果与文献 [34] (对比图 9 与图 10) 中的结果高度符合, 验证了所发展的多相流正则化 LB 方法模拟三相 K-H 不稳定的有效性.

### 5 三相 Rayleigh-Taylor 不稳定性数值研究

本节采用发展的  $N$  相正则化 LB 方法, 对三相非混相流体的 R-T 不稳定性进行研究. 详细探讨了雷诺数对界面不稳定性发展的影响, 定量分析了两个界面的气泡与尖钉的振幅以及无量纲化速度的变化规律. 本文考虑的问题为一个矩形域 (图 6), 其高度和宽度分别为  $H$  和  $W$ , 且  $H \times W =$

$1024 \times 256$ , 水平方向采用周期性边界条件, 上下边界采用无滑移的半反弹边界条件. 初始时刻, 密度较大的重流体 (Phase 1) 置于顶层, 密度较小的轻流体 (Phase 3) 置于底层, 给两个流体界面施加一个波长为  $W$  的微小的余弦扰动:

$$h = H/6 - 0.1W \cos(2\pi x/W),$$

$$h = -H/6 - 0.1W \cos(2\pi x/W).$$

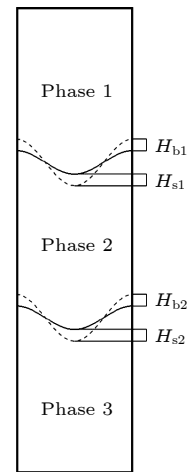


图 6 Rayleigh-Taylor 不稳定性示意图

Fig. 6. Schematic of the Rayleigh-Taylor instability.

在重力场的作用下, 扰动会逐渐发展, 并且随着时间的推移达到混沌融合状态. 另外, 相位界面的最低和最高位置分别代表尖钉面和气泡面, 尖钉和气泡振幅定义为尖钉和气泡的前端与其对应的

初始位置的距离, 由  $H_{s1}$  表示上相 (Phase 1) 向下发展的尖钉振幅,  $H_{s2}$  表示中相 (Phase 2) 向下发展的尖钉振幅,  $H_{b1}$  表示中相 (Phase 2) 向上发展的气泡振幅,  $H_{b2}$  表示下相 (Phase 3) 向上发展的气泡振幅 (图 6). 为了使序参数变量在相界面处光滑连续的变化, 序参数  $\phi$  的初始分布为

$$\begin{aligned} \phi_1(x, y) &= 0.5 + 0.5 \tanh \frac{y - H/6 + 0.1W \cos(2\pi x/W)}{\epsilon/2}, \\ \phi_2(x, y) &= [1 - \phi_1(x, y)] \\ &\times \left[ 0.5 + 0.5 \tanh \frac{y + H/6 + 0.1W \cos(2\pi x/W)}{\epsilon/2} \right], \\ \phi_3(x, y) &= 1.0 - \phi_1(x, y) - \phi_2(x, y), \end{aligned} \quad (27)$$

其中,  $\epsilon$  为界面厚度,  $h = 0.1W \cos(2\pi x/W)$ , 为施加在界面上的余弦扰动. 无量纲的雷诺数 ( $Re$ ) 和阿特伍德数 ( $A_t$ ) 以及毛细管数 ( $Ca$ ) 定义为 [8]

$$Re = \frac{U_0 W}{\nu}, \quad A_t = \frac{\rho_1 - \rho_3}{\rho_1 + \rho_3}, \quad Ca = \frac{\mu_3 W}{\sigma}, \quad (28)$$

式中  $U_0$  为特征速度, 定义为  $U_0 = \sqrt{gW}$ ,  $g$  为重力加速度. 气泡和振幅的无量纲化的演化速度通常被称为弗劳德数 (Froude number), 定义为 [14,40]

$$Fr_s = \frac{u_s}{\sqrt{\frac{A_t g W}{1 + A_t}}}, \quad Fr_b = \frac{u_b}{\sqrt{\frac{A_t g W}{1 + A_t}}}, \quad (29)$$

其中,  $u_s$  和  $u_b$  为尖钉和气泡的速度, 由尖钉和气泡的振幅对演化时间差分计算可得.

### 5.1 还原一致性验证

在对三相非混相流体的 R-T 不稳定性进行研究之前, 为了验证本文发展的正则化 LB 方法满足还原一致性, 也就是验证当其中一相消失时本模型仍适用于  $N - 1$  相系统. 本文采用三相流模型对两相 R-T 不稳定性进行了数值模拟 (令  $\phi_3 = 0$ ), 并将结果与 Liang 等 [7] 的实验进行了比较. 为了确保对比的准确性, 本实验采用雷诺数为  $Re = W \sqrt{A_t g W} / (1 + A_t) / \nu$ , 相关物理参数采用  $W = 256$ ,  $\sqrt{gW} = 0.04$ ,  $A_t = 0.1$ ,  $\sigma = 5.0 \times 10^{-5}$ ,  $\epsilon = 4.0$ . 边界条件也与参考文献 [7] 保持一致的周期性边界条件. 调整序参数的初始分布为

$$\begin{aligned} \phi_1(x, y) &= 0.5 + 0.5 \tanh \frac{y + 0.05W \cos(2\pi x/W)}{\epsilon/2}, \\ \phi_2(x, y) &= 1 - \phi_1(x, y). \end{aligned} \quad (30)$$

图 7 是由本模型获得的在 4 种雷诺数下的相界面演化过程, 图 8 进一步展示了尖钉和气泡振幅随时间的变化. 可以发现, 界面动力学行为与振幅的变化与参考文献 [7] 的实验图像表现出高度一致性.

### 5.2 不同雷诺数下的三相 R-T 不稳定性数值研究

本文模拟了不同雷诺数下的三相 R-T 不稳定性的相界面的演化过程, 给出了六种雷诺数 ( $500 \leq Re \leq 20000$ ) 下的情况. 在本文的模拟中,

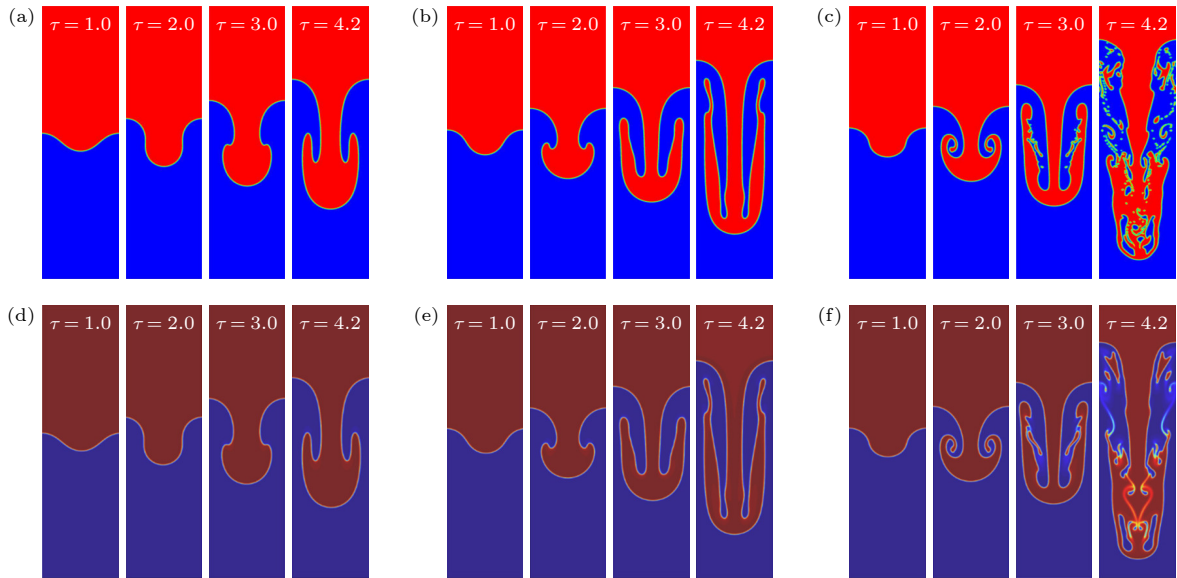


图 7 两相情况相界面扰动演化过程 (a)  $Re = 30$ ; (b)  $Re = 150$ ; (c)  $Re = 3000$ ; (d)  $Re = 30$  [7]; (e)  $Re = 150$  [7]; (f)  $Re = 3000$  [7]  
Fig. 7. Phase interface disturbance evolution process in two-phase situation: (a)  $Re = 30$ ; (b)  $Re = 150$ ; (c)  $Re = 3000$ ; (d)  $Re = 30$  [7]; (e)  $Re = 150$  [7]; (f)  $Re = 3000$  [7].

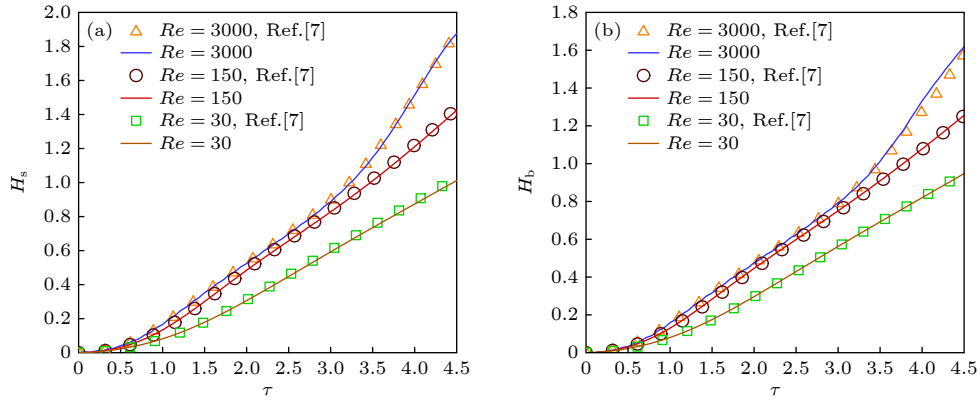


图 8 两相情况尖钉与气泡振幅随时间的变化 (a) 尖钉振幅; (b) 气泡振幅

Fig. 8. Variation of spike and bubble amplitudes with time in two-phase situation: (a)  $H_s$ ; (b)  $H_b$ .

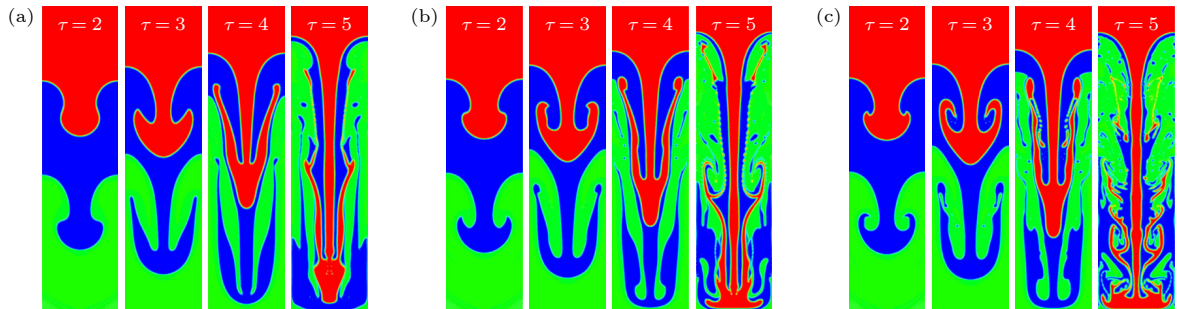


图 9 较低雷诺数对 R-T 不稳定性中相界面演化过程的影响 (a)  $Re = 500$ ; (b)  $Re = 1000$ ; (c)  $Re = 2000$

Fig. 9. The effect of lower Reynolds numbers on the evolution of the phase interface in RTI: (a)  $Re = 500$ ; (b)  $Re = 1000$ ; (c)  $Re = 2000$ .

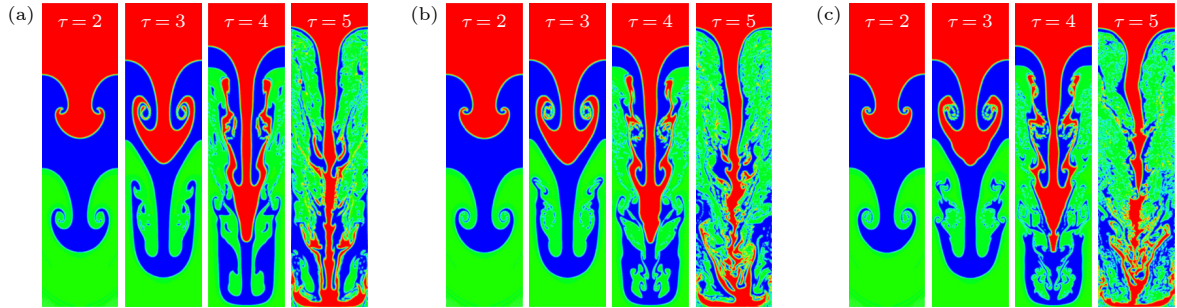


图 10 较高雷诺数对 R-T 不稳定性中相界面演化过程的影响 (a)  $Re = 5000$ ; (b)  $Re = 10000$ ; (c)  $Re = 20000$

Fig. 10. The effect of higher Reynolds numbers on the evolution of the phase interface in RTI: (a)  $Re = 5000$ ; (b)  $Re = 10000$ ; (c)  $Re = 20000$ .

$\Delta x = \Delta t = 1$ , 网格大小为  $256 \times 1024$ , 无量纲时间定义为  $\tau = t/\sqrt{W/gA_t}$ , 物理参数固定为  $A_t = 0.5$ ,  $W = 256$ ,  $U_0 = 0.02$ ,  $Ca = 0.28$ ,  $\epsilon = 5.0$ ,  $\rho_1 : \rho_2 : \rho_3 = 3 : 2 : 1$ ,  $\mu_1 : \mu_2 : \mu_3 = 1$ . 松弛因子  $\tau_{\phi_p}$  和  $\tau_h$  可由迁移率  $M_p$  和流体黏度  $\mu$  给定. 从图 9 和图 10 可以看出, 不同雷诺数条件下的 R-T 不稳定性, 在初始阶段表现出相似的界面动力学: 重流体在重力的作用下向下流动, 中等密度的流体向上下两个方向运动, 轻流体向上升, 三相流体相互渗透. 尖钉和气泡在不同雷诺数下表现出不同的行

为, 在较低的雷诺数的情况下, 重流体和中等密度的流体的尖钉向下运动, 经过一段演化时间, 由于 K-H 不稳定性出现并作用于相界面, 尖钉在尾端部分卷起, 两个尖钉分别形成一对旋涡. 通过对比可得, 随着雷诺数的增加, 卷起现象出现的时间越早, 旋涡的卷吸幅度也在增大. 在雷诺数大于 5000 时, 卷起形成的旋涡数量比低雷诺数时更多, 在多个旋涡的作用下, 尖钉卷起的长度增加. 在重流体的向下运动和轻流体的上升作用下, 中等密度流体分散成多个斑点, 随着时间的推移, 流体之间

的相互作用越来越强烈,三个流体相都破碎分散成多个斑点.

下面通过尖钉和气泡的振幅和速度进一步考察雷诺数对 R-T 不稳定性的影响. 由上文已知分别用  $H_s$  和  $H_b$  来表示尖钉和气泡的振幅, 图 11 给出在不同雷诺数下不同界面的尖钉和气泡振幅随时间的变化. 从图 11 可以发现, 在不同雷诺数的情况下, 尖钉和气泡的振幅都随着时间增加, 其中下层界面的尖钉振幅增加速度更快, 更先到达下层固壁, 并且可以观察到, 上层界面的尖钉振幅变化程度大于下层界面, 且发展时程相对较长. 这是由于迁移距离的不同导致的, 由于上下壁面的约束, 界面失稳演化会呈现差异. 同理上层界面气泡因为迁移空间不足, 振幅变化程度也会比下层气泡的小. 此外, 通过图 11 可以看出, 当雷诺数增大的时候, 同一时刻的尖钉和气泡的振幅也增大; 当雷诺数增大到一定程度时, 雷诺数对振幅的影响将不再明显. 此时对于尖钉处, 黏性耗散已经很小, 因此对尖端振幅的影响也不再明显. 对于气泡振幅, 后期在 R-T 不稳定性和 K-H 不稳定性的共同作用下,

系统中产生的各种旋涡在一定程度上减缓了气泡向上运动. 图 11(a) 和图 11(b) 后期尖钉振幅趋于不变是因为后期尖钉已运动至下壁面, 而图 11(b) 的振幅更早趋于不变, 正是由上文所说迁移距离较短所导致的. 通过相界面变化图像可以看出, 不同雷诺数下, 在时间  $\tau = 5$  到  $\tau = 6$  的时间内, 流体已经在相互作用下开始分散, 此时本文的振幅计算方法不再适用, 从而气泡振幅会出现波动, 为确保分析的有效性, 本文将主要分析流体分散前振幅的变化.

接下来讨论雷诺数的变化对两个界面的尖钉和气泡的演化速度的影响, 重流体和中等密度流体之间的相界面的尖钉和气泡的速度记为  $u_{s1}$  和  $u_{b1}$ , 中等密度流体和轻流体之间的相界面的尖钉和气泡速度记为  $u_{s2}$  和  $u_{b2}$ , 其中速度是通过尖钉和气泡的振幅对演化时间差分计算得到的. 通过 (29) 式可以得出尖钉和气泡的 Froude 数, 不同雷诺数下两个界面对应的尖钉和气泡的 Froude 数由图 12 给出. 从图 12 可以看到, 上层界面在重力的作用下引起 R-T 不稳定现象, 由于 K-H 不稳定性的出

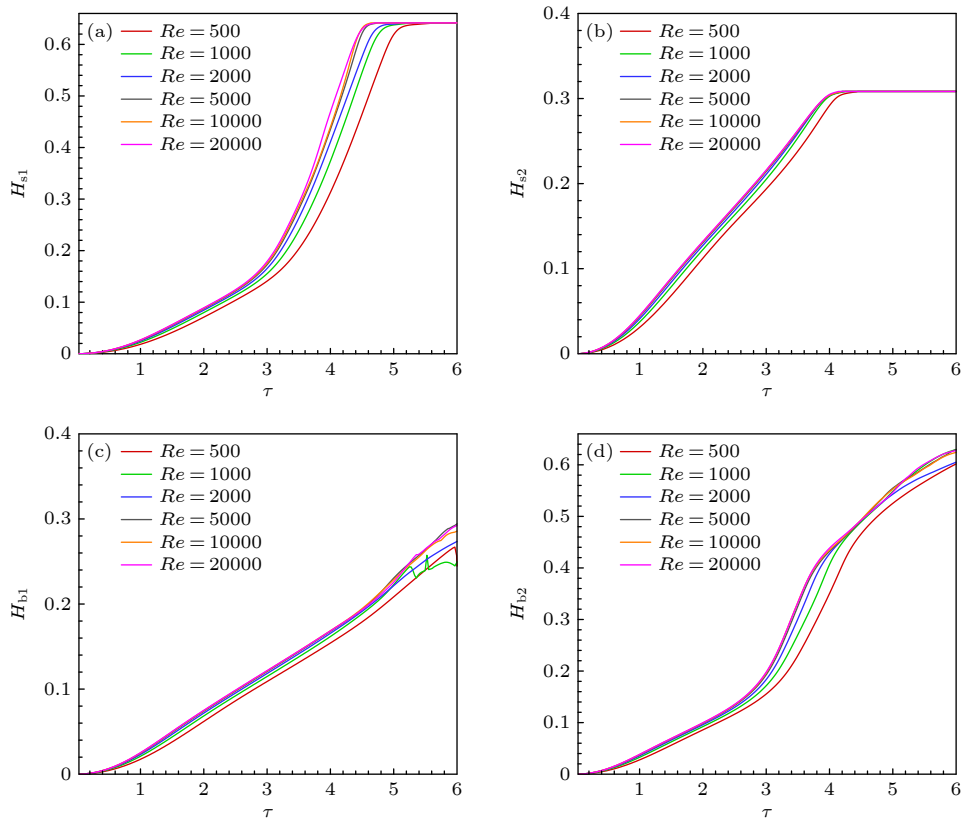


图 11 雷诺数对气泡与尖钉振幅随时间演化的影响 (a) 界面一尖钉振幅; (b) 界面二尖钉振幅; (c) 界面一气泡振幅; (d) 界面二气泡振幅

Fig. 11. Effect of Reynolds number on the temporal evolution of bubble and spike amplitudes: (a)  $H_{s1}$ ; (b)  $H_{s2}$ ; (c)  $H_{b1}$ ; (d)  $H_{b2}$ .

现, 尖钉在尾部卷起形成旋涡, 尖钉速度在早期呈现加速的过程, 当尖钉穿透至下层界面时, 会在旋涡的作用下进行二次加速, 后期旋涡在一定程度上减小了在尖钉触底前的速度. 而对于下层界面的尖钉的演化速度, 在卷起部分产生的旋涡的作用下经历一个先加速的过程, 后期由于旋涡的运动抑制尖钉速度的增大, 在触底前尖钉速度减小. 从图 12 同样可以观察到, 对于下层气泡的演化速度, 在多个旋涡作用下, 也同样经历先加速和二次加速的过程, 而对于上层气泡的演化速度, 在旋涡运动的影响下, 先加速然后被抑制速度变化. 通过图 12 可以得到与前文相似的结论, 随着雷诺数的增大, 尖钉和气泡的演化速度增大, 当雷诺数增大到一定程度后, 其对演化速度的影响不再显著. 而在时间  $\tau = 5$  之后, 图像出现较大幅度振动, 这是由于流体发生了混沌破裂, 系统中的流体分散, 本文使用的对速度的研究方法不再适用.

前文研究的是两个相界面都施加微小扰动的三相 R-T 不稳定性, 接下来研究只有一个相界面扰动情况下对 R-T 不稳定性演化过程的影响, 并分析雷诺数对相界面演化过程的影响和气泡与尖

钉振幅的变化.

首先, 初始时刻仍然是上层为重流体, 下层为轻流体, 中层流体密度介于重流体和轻流体之间. 先对上层相界面 (上层流体和中层流体之间的相界面) 施加一个为  $h = 0.1W \cos(2\pi x/W)$  的余弦扰动. 序参数  $\phi$  的初始分布为

$$\begin{aligned} \phi_1(x, y) &= 0.5 + 0.5 \tanh \frac{y - H/6 + 0.1W \cos(2\pi x/W)}{\epsilon/2}, \\ \phi_2(x, y) &= [1 - \phi_1(x, y)] \left[ 0.5 + 0.5 \tanh \frac{y + H/6}{\epsilon/2} \right], \\ \phi_3(x, y) &= 1.0 - \phi_1(x, y) - \phi_2(x, y). \end{aligned} \quad (31)$$

接下来模拟 4 种雷诺数情况下相界面的演化过程. 从图 13 可以看出, 与上面的研究类似, 上层重流体在重力的作用下向下运动, 不同的是, 由于下层界面没有扰动, R-T 不稳定性首先在上层界面发展, 随时间推移形成的旋涡会逐渐影响到下层界面. 在时间  $\tau = 3$  之后, 流体运动产生的旋涡开始逐渐触发下层相界面的失稳. 此外, 与两个界面扰动的 R-T 不稳定性不同, 随着流体的运动, 上层重流体会在时间  $\tau = 6$  之后穿透中层流体.

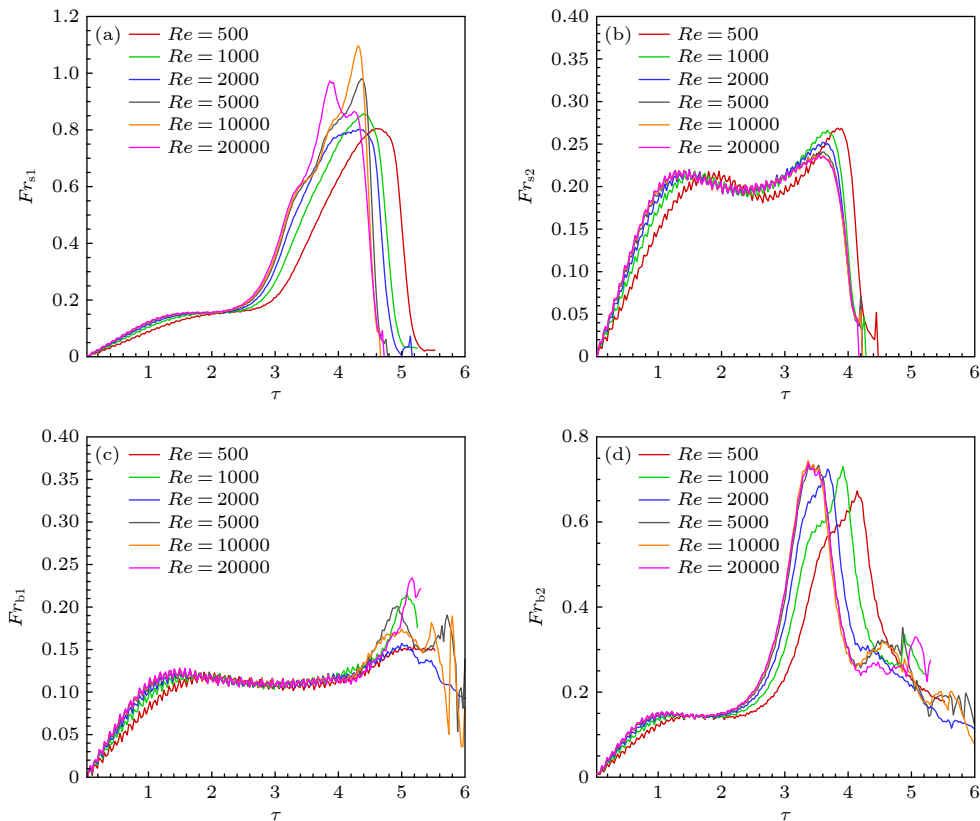


图 12 雷诺数对无量纲化的气泡和尖钉演化速度的影响 (a) 界面一尖钉; (b) 界面二尖钉; (c) 界面一气泡; (d) 界面二气泡  
Fig. 12. Effect of Reynolds number on the normalized growth rate of bubbles and spikes: (a)  $Fr_{s1}$ ; (b)  $Fr_{s2}$ ; (c)  $Fr_{b1}$ ; (d)  $Fr_{b2}$ .

下面讨论上述情况下气泡和尖钉振幅的变化, 振幅定义与前文相同. 从图 14 可以发现, R-T 不稳定性首先在上层发展, 因此重流体在重力作用下向下运动产生的尖钉和

气泡振幅较为明显. 作为对比, 下层相界面的尖钉和气泡振幅在  $\tau = 3$  之后才有明显变化, 这是因为在时间  $\tau = 3$  之后, 中层和下层流体在旋涡的影响下, 开始参与不稳定运动, 中层流体开始下沉形成

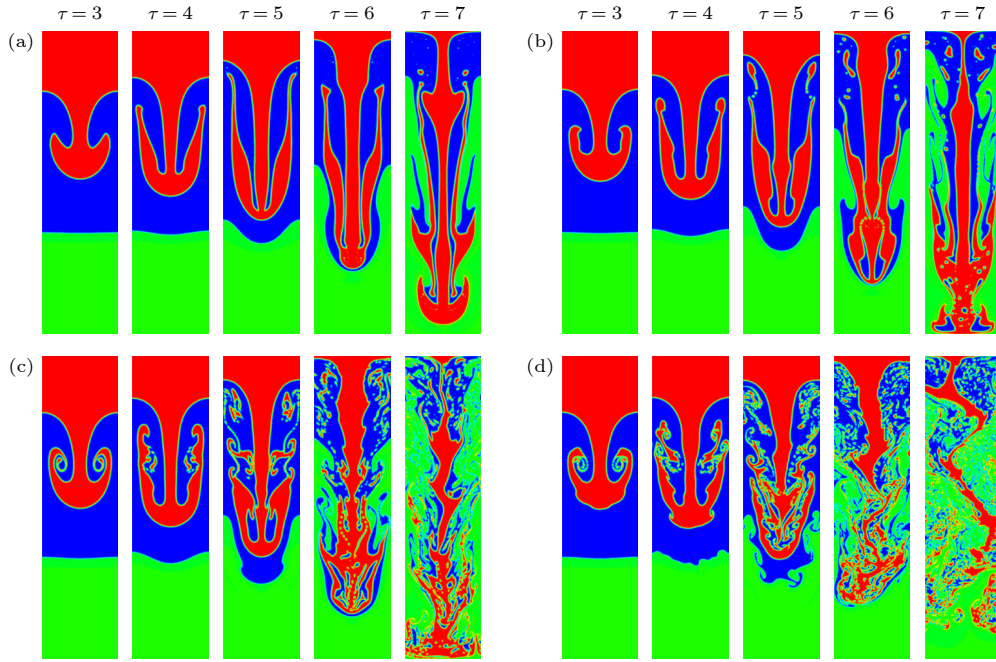


图 13 上层相界面扰动相界面演化过程 (a)  $Re = 500$ ; (b)  $Re = 1000$ ; (c)  $Re = 5000$ ; (d)  $Re = 20000$ .  
Fig. 13. Upper interfacial perturbation and evolution: (a)  $Re = 500$ ; (b)  $Re = 1000$ ; (c)  $Re = 5000$ ; (d)  $Re = 20000$ .

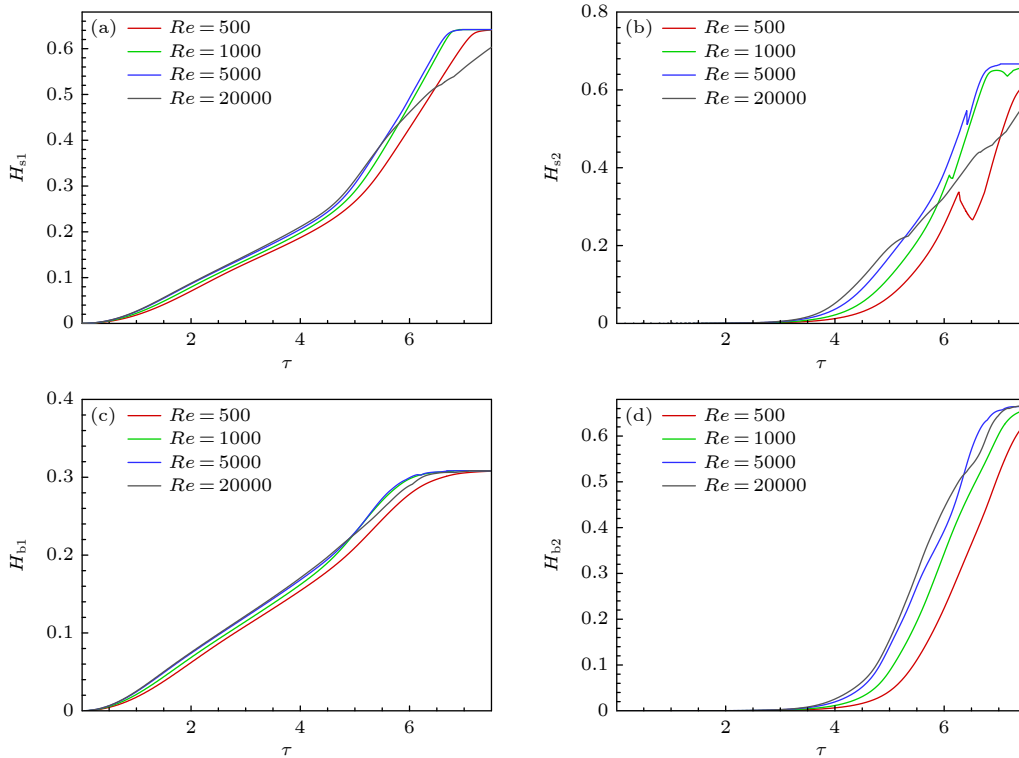


图 14 上层相界面扰动时气泡与尖钉振幅随时间的变化 (a) 界面一尖钉振幅; (b) 界面二尖钉振幅; (c) 界面一气泡振幅; (d) 界面二气泡振幅

Fig. 14. Bubble and spike amplitude evolution during upper interface perturbation: (a)  $H_{s1}$ ; (b)  $H_{s2}$ ; (c)  $H_{b1}$ ; (d)  $H_{b2}$ .

尖钉, 下层则开始产生上升的气泡. 需要注意的是, 图 14(b) 中  $Re = 500$  时下层相界面的尖钉振幅会有波动, 在时间  $\tau = 6$  到时间  $\tau = 7$  之间, 由于重流体会穿透中层流体, 中层流体会逐渐分散成斑点, 本文的振幅计算方法不再适用, 因此讨论与分析主要基于流体分散前.

下面研究第二种情况, 只对下层相界面 (中层流体和下层流体之间的界面) 施加一个同样的余弦扰动. 序参数  $\phi$  的初始分布为

$$\begin{aligned} \phi_1(x, y) &= 0.5 + 0.5 \tanh \frac{y - H/6}{\epsilon/2}, \\ \phi_2(x, y) &= [1 - \phi_1(x, y)] \\ &\times \left[ 0.5 + 0.5 \tanh \frac{y + H/6 + 0.1W \cos(2\pi x/W)}{\epsilon/2} \right], \\ \phi_3(x, y) &= 1.0 - \phi_1(x, y) - \phi_2(x, y). \end{aligned} \quad (32)$$

接下来同样模拟 4 种雷诺数情况下相界面的演化过程. 从图 15 可以看出, R-T 不稳定性首先会在下层相界面发展, 中间流体穿透下层流体产生尖钉, 而下层流体上升生成气泡, 后面随着时间的推移, 在  $\tau = 3$  之后, 由于旋涡作用触发上层相界面失稳, 产生 R-T 不稳定现象.

图 16 则是在下层相界面扰动的情况下流体间相互作用产生的尖钉和气泡的振幅变化. 由于 R-T 不稳定性首先在下层相界面发展, 尖钉和气泡振

幅的变化能被较早观察到, 而上层相界面的尖钉和气泡振幅则在  $\tau = 3$  之后才有明显变化, 这也是因为在时间  $\tau = 3$  之后, 上层和中间层才开始参与不稳定运动. 同样地, 在时间  $\tau = 6$  到  $\tau = 7$  之间, 由于下层界面上升产生的气泡穿透了中间层流体, 中间层流体开始分散成斑点, 本文使用的振幅计算方法同样不再适用.

将图 13 和图 15 进行对比, 可以发现随着雷诺数 ( $Re$ ) 的增大, 无论扰动施加在哪一层相界面, 激发的 R-T 不稳定性所产生的向下穿透的尖钉结构都发生显著涡旋卷曲, 并加速流体的破碎离散化. 通过图 14 和图 16 可以观察到在不同扰动情况下, 随着雷诺数的增大, 同一时刻尖钉和气泡的振幅也增大; 当雷诺数增大到一定程度时, 对振幅的影响将不再显著. 这与两个相界面都施加微小扰动的情況所产生的结果类似.

## 6 结 论

本文首先基于扩散界面模型和梯度流理论发展了一个能够有效模拟  $N$  相非混溶不可压流体流动的正则化相场格子 Boltzmann 模型, 该模型能有效模拟  $N$  相 ( $N \geq 3$ ) 非混溶不可压流体流动问题. 基于此, 本文对三相 R-T 不稳定性进行了数值模拟, 分析了不同雷诺数 ( $500 \leq Re \leq 20000$ ) 对相

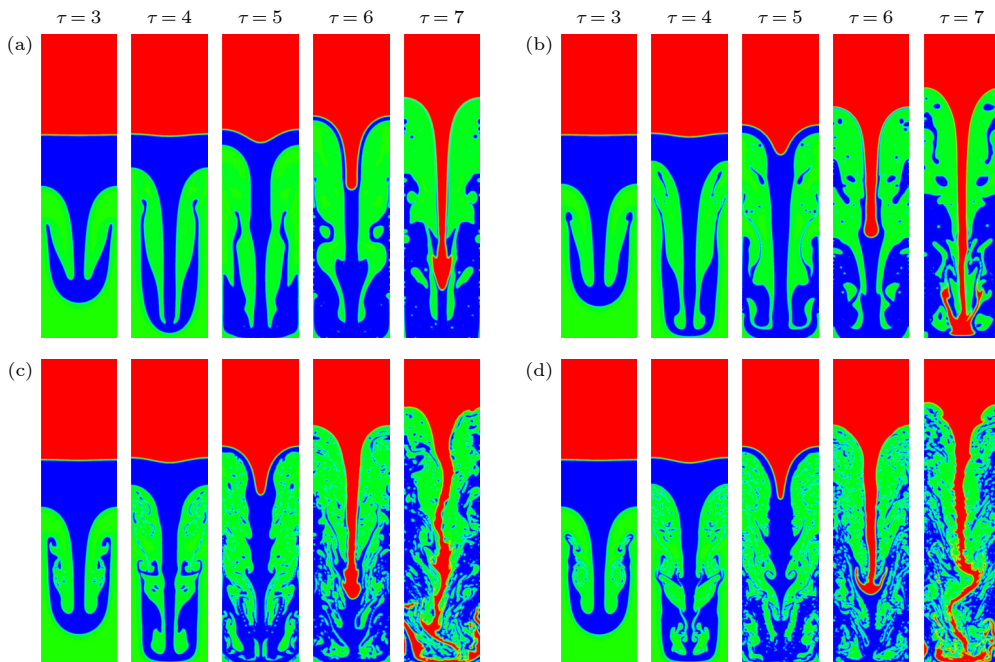


图 15 下层相界面扰动相界面演化过程 (a)  $Re = 500$ ; (b)  $Re = 1000$ ; (c)  $Re = 5000$ ; (d)  $Re = 20000$

Fig. 15. Lower interfacial perturbation and evolution: (a)  $Re = 500$ ; (b)  $Re = 1000$ ; (c)  $Re = 5000$ ; (d)  $Re = 20000$ .

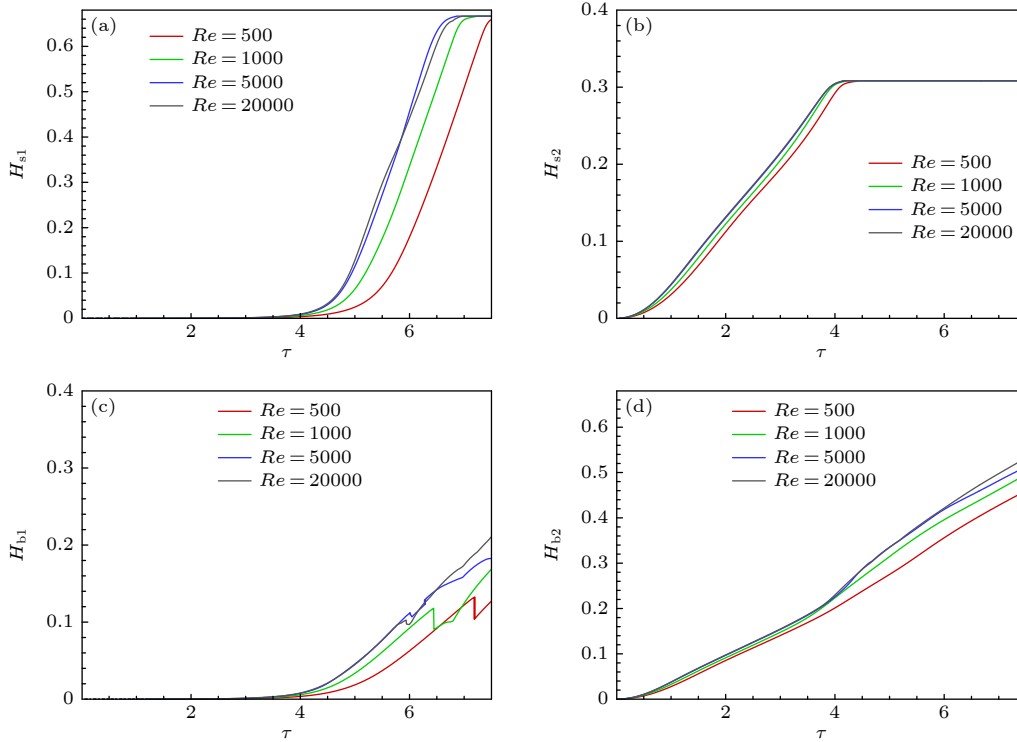


图 16 下层相界面扰动时气泡与尖钉振幅随时间的变化 (a) 界面一尖钉振幅; (b) 界面二尖钉振幅; (c) 界面一气泡振幅; (d) 界面二气泡振幅

Fig. 16. Bubble and spike amplitude evolution during lower interface perturbation: (a)  $H_{s1}$ ; (b)  $H_{s2}$ ; (c)  $H_{b1}$ ; (d)  $H_{b2}$ .

界面的演化过程和尖钉与气泡定量增长的影响. 研究发现, 在两个相界面都施加扰动的情况下, 雷诺 ( $Re$ ) 数较低时, 流体界面相对光滑, 当雷诺数逐渐升高时, 由于 K-H 不稳定性, 相界面会在多个位置卷起, 流体更易分散破碎. 在较大雷诺数的情况下, 同一时刻产生的尖钉和气泡振幅也更大, 但雷诺数增大到一定程度时对振幅的影响不再显著. 另外本文通过分析 Froude 数, 发现雷诺数在一定范围内增大时, 同一时刻的尖钉和气泡的演化速度也增大.

本文还模拟了不同相界面扰动下 R-T 不稳定性的演化过程, 研究发现 R-T 不稳定性会先在受到扰动的界面发展, 其演化会逐渐引发另一个界面的失稳. 对于尖钉和气泡振幅, 比起添加扰动的相界面, 后失稳的相界面的振幅出现变化的时间略微滞后. 而随着雷诺数的增大, 其呈现的演化规律与两个相界面都受到扰动相似, 两个相界面的尖钉和气泡振幅随着雷诺数的增加而增加, 但是当雷诺数增大到一定程度时对振幅的影响不再显著.

### 参考文献

[1] Barber J L, Kadau K, Germann T C, Alder B J 2008 *Eur.*

*Phys. J. B* **64** 271  
 [2] Celani A, Mazzino A, Bjorkholm J E, Vozella L 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 134504  
 [3] Moin P 1991 *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* **87** 329  
 [4] Guo Z L, Zheng C G 2009 *Theory and Applications of Lattice Boltzmann Method* (Beijing: Science Press) (in Chinese) pp156-200 [郭照立, 郑楚光 2009 格子 Boltzmann 方法的原理及应用 (北京: 科学出版社) 第 156—200 页]  
 [5] He Y L, Wang Y, Li Q 2009 *Lattice Boltzmann Method: Theory and Applications* (Beijing: Science Press) (in Chinese) pp31-55 [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) 第 31—55 页]  
 [6] He X Y, Chen S Y, Zhang R Y 1999 *J. Comput. Phys.* **152** 642  
 [7] Liang H, Shi B C, Guo Z L, Chai Z H 2014 *Phys. Rev. E* **89** 053320  
 [8] Liang H, Li Q X, Shi B C, Chai Z H 2016 *Phys. Rev. E* **93** 033113  
 [9] Liang H, Xia Z H, Huang H W 2021 *Phys. Fluids* **33** 082103  
 [10] Li Y, Su T, Liang H, Xu J R 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 224701 (in Chinese) [李洋, 苏婷, 梁宏, 徐江荣 2018 物理学报 **67** 224701]  
 [11] Ma C, Liu B, Liang H 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 044701 (in Chinese) [马聪, 刘斌, 梁宏 2022 物理学报 **71** 044701]  
 [12] Li D M, Lai H L, Xu A G, Zhang G C, Lin C D, Gan Y B 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 080501 (in Chinese) [李德梅, 赖惠林, 许爱国, 张广财, 林传栋, 甘延标 2018 物理学报 **67** 080501]  
 [13] Zhang R Y, He X Y, Chen S Y 2000 *Comput. Phys. Commun.* **129** 121  
 [14] Hu X L, Liang H, Wang H L 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 044701 (in Chinese) [胡晓亮, 梁宏, 王会利 2020 物理学报 **69** 044701]  
 [15] Zhan C J, Liu X, Chai Z H, Shi B C 2024 *Commun. Comput. Phys.* **36** 850

- [16] Kalantarpour R, Ebadi A, Hosseinalipour S M, Liang H 2020 *Comput. Fluids* **204** 104480
- [17] Boyer F, Lapuerta C 2006 *ESAIM: Math. Model. Numer. Anal.* **40** 653
- [18] Boyer F, Lapuerta C, Minjeaud S, et al. 2010 *Transp. Porous Media* **82** 463
- [19] Dong S 2018 *J. Comput. Phys.* **361** 1
- [20] Zheng L, Zheng S, Zhai Q L 2020 *Phys. Rev. E* **101** 043302
- [21] Mirjalili S, Mani A 2024 *J. Comput. Phys.* **498** 112657
- [22] Xia Q, Yang J X, Li Y B 2023 *Phys. Fluids* **35** 012120
- [23] Latt J, Chopard B 2006 *Math. Comput. Simulat.* **72** 165
- [24] Montessori A, Falcucci G, Prestininzi P, et al. 2014 *Phys. Rev. E* **89** 053317
- [25] Liu X, Chen Y, Chai Z H, Shi B C 2024 *Phys. Rev. E* **109** 025301
- [26] Huang Y H, Chen X M, Chai Z H, Shi B C 2025 *Adv. Appl. Math. Mech.* **17** 1370
- [27] Huang H W, Liang H, Xu J R 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 114701 (in Chinese) [黄皓伟, 梁宏, 徐江荣 2021 物理学报 **70** 114701]
- [28] Li C Y, Guo Z L 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 064702 (in Chinese) [李春熠, 郭照立 2025 物理学报 **74** 064702]
- [29] Huang Z Y, Lin G, Ardekani A M 2021 *J. Comput. Phys.* **434** 110229
- [30] Mirjalili S, Mani A 2021 *J. Comput. Phys.* **426** 109918
- [31] Qian Y H, d'Humières D, Lallemand P 1992 *Europhys. Lett.* **17** 479
- [32] Yang X F, Zhao J, Wang Q, Shen J 2017 *Math. Models Methods Appl. Sci.* **27** 1993
- [33] Hu Y, Li D C, He Q 2020 *Int. J. Multiph. Flow* **132** 103432
- [34] Yuan X L, Shi B C, Zhan C J, Chai Z H 2022 *Phys. Fluids* **34** 023311
- [35] Wu J W, Yang J X, Tan Z J 2022 *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* **398** 115291
- [36] Zhang S T, Xiao H W, Zhou J X, Niu X D 2022 *Acta Aerodyn. Sin.* **40** 75 (in Chinese) [章诗婷, 肖鸿威, 周锦翔, 牛小东 2022 空气动力学学报 **40** 75]
- [37] Fakhari A, Lee T 2013 *Phys. Rev. E* **87** 023304
- [38] Fakhari A, Geier M, Lee T 2016 *J. Comput. Phys.* **315** 434
- [39] Zhou X, Dong B, Li W Z 2020 *Int. J. Aerosp. Eng.* **2020** 8885226
- [40] Ramaprabhu P, Dimonte G, Young Y N, Calder A C, Fryxell B 2006 *Phys. Rev. E* **74** 066308

# Numerical simulation of three-phase Rayleigh-Taylor instability based on phase field model using lattice Boltzmann method\*

YANG Xuguang<sup>1)</sup> WANG Xin<sup>2)3)</sup> YUAN Xiaolei<sup>2)3)†</sup>

1) (*School of Mathematics and Statistics, Hunan First Normal University, Changsha 410205, China*)

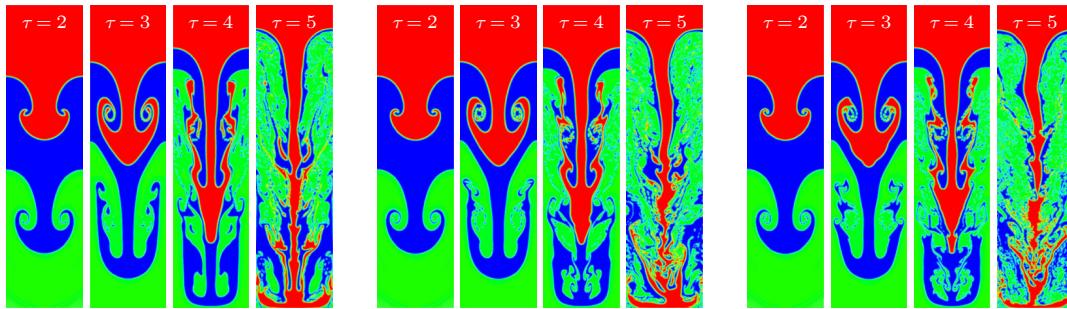
2) (*College of Mathematics and Information Science, Hebei University, Baoding 071002, China*)

3) (*Hebei Key Laboratory of Machine Learning and Computational Intelligence, Hebei University, Baoding 071002, China*)

( Received 15 August 2025; revised manuscript received 25 September 2025 )

## Abstract

This paper develops a regularized lattice Boltzmann method for efficiently simulating the flow of  $N$ -phase immiscible incompressible fluids based on the phase field model that satisfies conservation and compatibility. By designing auxiliary moments, this method can accurately recover the second-order Allen-Cahn equation and the modified momentum equation. The correctness and effectiveness of the developed  $N$ -phase regularized lattice Boltzmann method are validated through numerical simulations of three-phase liquid lens spreading and Kelvin-Helmholtz instability phenomena. Finally, numerical simulations and analyses of three-phase Rayleigh-Taylor instabilities (RTI) are conducted, focusing on the evolution of the phase interface within the Reynolds number range of  $500 \leq Re \leq 20000$  (particularly under high Reynolds number condition of  $Re = 20000$ ). Quantitative analyses are performed on the amplitude variations of bubbles and spikes at the two interfaces, as well as the changes in dimensionless velocity. We find that as the Reynolds number increases, the phase interface curls up at multiple locations due to Kelvin-Helmholtz instability, making the fluid more prone to dispersion and fragmentation. This study also simulates the evolutionary processes of RTI under different interface perturbations. These results demonstrate that RTI first develops at the perturbed interface, with its subsequent evolution inducing instability at a secondary interface.



**Keywords:** phase field model,  $N$ -phase incompressible fluid, lattice Boltzmann method, Rayleigh-Taylor instability

**DOI:** [10.7498/aps.75.20251095](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251095)

**CSTR:** [32037.14.aps.75.20251095](https://cstr.net/urn:nid:CN:32037.14.aps.75.20251095)

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12202130, 12372286), the Science and Technology Innovation Program of Hunan Province, China (Grant No. 2024RC3228), the Excellent Youth Research Innovation Team of Hebei University, China (Grant No. QNTD202414), the Excellent Youth Foundation of Changsha Scientific Committee, China (Grant No. kq2306023), and the Aeronautical Science Foundation of China (Grant No. 20220054069001).

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



基于相场模型的三相Rayleigh–Taylor不稳定性的格子Boltzmann方法模拟

杨旭光 王欣 袁晓垒

**Numerical simulation of three–phase Rayleigh–Taylor instability based on phase field model using lattice Boltzmann method**

YANG Xuguang WANG Xin YUAN Xiaolei

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 011001 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251095

CSTR: 32037.14.aps.75.20251095

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251095>

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

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

三相流体的轴对称格子 Boltzmann 模型及其在 Rayleigh–Plateau 不稳定性的应用

Axisymmetric lattice Boltzmann model for three–phase fluids and its application to the Rayleigh–Plateau instability

物理学报. 2023, 72(4): 044701 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221967>

表面张力对高雷诺数Rayleigh–Taylor不稳定性后期增长的影响

Effect of surface tension on late–time growth of high–Reynolds–number Rayleigh–Taylor instability

物理学报. 2021, 70(11): 114701 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201960>

磁场对激光驱动Rayleigh–Taylor不稳定性影响的数值研究

Numerical study of effect of magnetic field on laser–driven Rayleigh–Taylor instability

物理学报. 2022, 71(15): 154701 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220362>

耦合界面张力的三维流体界面不稳定性的格子Boltzmann模拟

Lattice Boltzmann simulation of three–dimensional fluid interfacial instability coupled with surface tension

物理学报. 2022, 71(4): 044701 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212061>

基于准不可压相场理论的精确平衡两相格子Boltzmann方法

A well–balanced lattice Boltzmann method based on quasi–incompressible phase–field theory

物理学报. 2025, 74(6): 064702 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241513>

大晶粒UO<sub>2</sub>燃料裂变气体释放行为相场模拟研究

Phase–field simulation on fission gas release behavior of large grain UO<sub>2</sub> fuel

物理学报. 2024, 73(6): 066102 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231773>