



论文

耦合流体体积和水平集方法的自由面流动格子 Boltzmann 模型

刘翔, 童自翔, 汪思成, 何雅玲*

西安交通大学能源与动力工程学院, 热流科学与工程教育部重点实验室, 西安 710049

* E-mail: yalinghe@mail.xjtu.edu.cn

收稿日期: 2024-01-15; 接受日期: 2024-03-25; 网络版发表日期: 2024-11-11

国家自然科学基金“双碳”专项(批准号: 52341601)资助项目

摘要 作为实际工程应用中重要的两相流问题, 自由面流动具有两相密度比大、Reynolds数(Re)高和相界面(自由面)拓扑变化复杂等特点. 为实现该类流动问题的数值预测, 需准确捕捉/追踪自由面位置. 本文发展了一种耦合流体体积(volume-of-fluid, VOF)和水平集(level-set, LS)方法的自由面流动格子 Boltzmann(lattice Boltzmann, LB)模型. 在该模型中, 针对传统自由面流动模拟中存在的压缩性影响与稳定性限制, 采用多松弛时间(multiple relaxation time, MRT)不可压缩 LB 模型对流场进行求解. 基于 VOF 的思想, 引入流体体积分数表征自由面信息, 通过介观不可压速度分布函数的迁移过程实现自由面流体体积分数的更新与界面演化, 避免了传统 VOF 方法的复杂界面推进与更新过程. 为准确求解自由面几何信息, 通过界面重构的方法将流体体积分数转换为 LS 函数并计算界面法向量和曲率, 减少了相较于采用高阶格式求解 LS 方程带来的计算量, 且与采用 VOF 方法计算相比, 具有更高的计算精度. 最后通过溃坝问题和液滴撞击薄液膜等典型算例证明了所发展模型的准确性. 该模型为自由面流动问题提供了一种新的求解思路.

关键词 自由面流动, 不可压缩格子 Boltzmann 模型, 流体体积, 水平集

1 引言

两相流是日常生活的常见现象, 也是技术科学与工程应用中广泛涉及的一类问题. 其中, 自由面流动作为典型的两相流问题, 在海洋工程、材料科学和能源动力等实际工程领域得到了广泛应用^[1~3]. 开展自由面流动研究有助于增强对该类问题的认识, 具有重要学术与应用价值.

两相流中, 具有不同物性的流体被相界面分隔并流动, 相界面拓扑结构随之动态演化^[4]. 数值模拟是两相流问题的重要研究手段, 其中移动相界面的预测是两相流问题准确模拟的关键^[4,5]. 在宏观模拟方面, 现有的相界面模拟方法主要包含两类, 分别是界面追踪和界面捕捉方法. 常见的界面追踪类方法为前沿追踪(front tracking, FT)法^[6], 该方法采用一组节点标记相界面位置, 并随界面位置动态更新, 属于拉格朗日方

引用格式: 刘翔, 童自翔, 汪思成, 等. 耦合流体体积和水平集方法的自由面流动格子 Boltzmann 模型. 中国科学: 技术科学, 2024, 54: 2095–2106
Liu X, Tong Z X, Wang S C, et al. Coupled volume-of-fluid and level-set lattice Boltzmann method for free surface flows (in Chinese). Sci Sin Tech, 2024, 54: 2095–2106, doi: 10.1360/SST-2024-0015

法. 但是当界面发生分离和合并等复杂拓扑变化时, 难以准确获得界面演化特征. 与之相比, 基于固定欧拉网格的界面捕捉类方法得到了大量关注, 两种典型的方法分别是流体体积(volume-of-fluid, VOF)方法^[7]和水平集(level-set, LS)方法^[8]. VOF方法具有良好的质量守恒特性, 但在求解VOF方程时需要在欧拉网格上进行界面重构与推进更新, 该过程在三维情况下较为复杂. 且由于流体体积函数的阶跃特性, 法向量和曲率等参数计算不准确^[9]. LS方法常采用符号距离函数作为LS函数, 通过求解LS方程, 实现相界面的更新. 由于LS函数的连续性, 法向量和曲率等几何相关参数计算精度较高. 但LS方程通常采用高阶数值格式直接求解, 界面拓扑结构发生剧烈变化时会发生质量耗散现象. 针对该问题, 发展了LS函数重新初始化等概念, 但质量不守恒的特性仍然存在^[10]. 为克服单一VOF和LS方法存在的问题, 结合两者优势的耦合数值方法得到了发展. Sussman和Puckett^[9]较早提出了一种耦合LS和VOF的CLSVOF方法, 这种方法需要同时求解LS方程和VOF的演化过程, 消耗计算资源较多. 近年来, Sun等人^[11,12]提出了一种耦合LS和VOF的方法(VO-SET), 该方法通过VOF进行相界面推进, 采用相界面重构的方法获得LS函数, 能够得到较为准确的法向量和曲率, 并避免了采用高阶格式离散求解LS方程, 取得了较好的计算结果^[11].

在计算流体力学领域, 格子Boltzmann(lattice Boltzmann, LB)方法基于动理学理论, 具有并行性好、编程简单和复杂边界易于处理等优点, 近年来得到了快速发展, 在复杂流动传热问题等诸多研究领域得到了广泛应用^[13~17]. 基于LB方法的介观物理背景, 国内外学者发展了多种两相/多相流模型. Shan和Chen^[18,19]提出了基于粒子之间相互作用力的伪势模型, 不需要采取额外手段追踪/捕捉相界面, 能够有效模拟相分离、表面张力和相变等现象^[14]. Swift等人^[20,21]引入了压力张量并基于自由能函数对平衡态分布函数进行了调整, 发展了满足热力学理论的两相流模型. He等人^[22]发展了基于求解两相流动的相场模型, 该类模型采用两套分布函数, 其中一组求解Cahn-Hilliard方程, 实现相界面的捕捉, 而另一组分布函数用于求解不可压两相流场. 然而上述均是扩散界面方法, 在求解大密度比和高雷诺数流动时模型的稳定性存在限制.

为克服LB领域两相流模型存在的问题, 与宏观界面追踪/捕捉方法相结合成为拓展LB两相流预测模型的有效手段. 在该类方法中, 使用宏观两相流模拟方法对相界面进行更新, 不可压两相流场则采用LB方法求解. Lallemand等人^[23]建立了一种耦合FT的两相流LB模型, 该模型基于传统的FT方法, 通过一组拉格朗日节点对相界面进行追踪. Thömmes等人^[24,25]发展了一种耦合LS与LB的两相流模拟方法, 通过求解LS方程实现相界面的更新, 并根据LS函数进行密度和物性的更新.

对于两相流动中常遇到的自由面流动, 常具有两相密度比大、 Re 数高和界面拓扑变化复杂等特点, 为两相流的预测带来了新的挑战. 针对该类流动问题, Körner等人^[26]和Thürey等人^[27]引入VOF中的流体体积分数概念, 基于速度分布函数的动理学背景, 利用分布函数的迁移过程实现了单元质量的更新与自由面的演化过程, 避免了采用几何方法对界面进行重构与推进, 并且能够满足界面拓扑发生剧烈变化时的质量守恒特性. 该模型基于反弹格式发展了满足界面外力平衡条件的自由面边界处理方法, 仅在主相区域进行分布函数的演化过程, 具有较高的计算效率. 该类方法又称为自由面LB模型.

碰撞模型是自由面LB方法的重要研究内容. 传统自由面LB模型主要采用BGK-LB方法, 存在一定的压缩性误差, 因而会影响自由面的准确更新, 且稳定性受到限制. Sato和Koshimura^[28]为了减弱模型压缩性影响, 采用He和Luo^[29]的不可压模型, 使用多松弛时间(multiple relaxation time, MRT)-LB方法对溃坝过程中的模型压缩性影响进行了研究. Cao等人^[30]结合正则碰撞项, 建立了求解自由面流动的LB模型. 模拟结果表明, 正则化自由面LB模型具有更好的稳定性, 同时能够减弱模拟中出现的压力波动. Sato等人^[31]发展了基于累积量LB方法的自由面模型, 在高 Re 数自由面流动中具有更好的稳定性. 可以看出, 针对传统自由面LB模型在压缩性和稳定性方面的不足, 发展基于不可压模型的自由面模型是一种有效的研究手段.

通过自由面LB模型的原理可以看出, 界面处理方法对自由面流动问题的求解存在重要影响. 在传统自由面LB模型的基础上, Janssen和Krafczyk^[32]采用VOF中界面重构与推进的方法对流体体积分数进行求解, 但该方法破坏了LB方法本身的简单易实施的优势.

Watanabe和Aoki^[33]采用相场方法追踪相界面, 同时将相场参数转换为LS函数以准确求解界面法向量和曲率. 在他们的模拟中使用了随界面位置变化的自适应网格, 流动过程仅在主相流体域中进行. Schwarzmeier等人^[34]对比了自由面与相场模型的计算精度, 研究结果表明自由面LB方法所需的网格分辨率更低. Bogner等人^[35]研究了自由面LB方法中不同曲率计算方式对自由面模型的影响, 并且指出不同曲率计算方法会显著影响界面的捕捉精度.

可以看出, 在自由面流动问题的求解中, 相界面处未知分布函数重构和/或界面演化过程需要首先获得界面曲率和法向量等几何参数信息, 相关参数计算的准确性将显著影响界面预测与自由面流动求解精度. 借鉴传统界面追踪/捕捉技术, 并结合LB方法与传统界面求解方法的优势, 是改善与拓展自由面流动LB模型的重要研究手段.

基于该研究思路, 本文建立了一种针对自由面流动问题的耦合VOF和LS方法的LB(CVOF-LS-LB)模型. 在该模型中, 针对传统自由面流动计算方法中存在的压缩性和稳定性限制, 引入了不可压MRT-LB方法. 在此基础上, 采用VOF的思想发展了基于不可压速度分布函数的自由面流体体积分数(质量)更新与界面推进方法. 为准确求解自由面几何信息, 通过界面重构将流体体积分数转换为LS函数, 能够减少采用高价格式求解LS方程的计算量, 并实现自由面法向量和曲率等几何参数的计算, 相较采用VOF方法计算具有更高的计算精度. 最后通过溃坝流动和液滴撞击薄膜等典型算例对模型进行了验证.

2 数值模型

本节主要介绍CVOF-LS-LB模型的详细建立步骤. 首先给出自由面流动的数学描述, 在此基础上对不可压缩LB方法进行介绍, 然后引入VOF中流体体积分数的概念对自由面质量进行迁移, 实现自由面的演化与更新, 进一步通过几何重构方法获得LS函数, 实现界面法向量和曲率等界面信息的准确求解, 最后给出具体的计算流程.

2.1 控制方程

对于包含相界面的不可压缩两相流动过程, 假设

两相均为牛顿流体, 宏观控制方程包含连续方程和动量方程, 可以分别表示为^[4,5]

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (1)$$

$$\partial_t (\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = \nabla \cdot (-p \mathbf{I} + 2\rho \nu \mathbf{S}) + \mathbf{F}_b + \mathbf{F}_s, \quad (2)$$

式中, ρ , $\mathbf{u}$ 和 p 分别为密度、速度和压力, ν 为运动黏度, $\mathbf{I}$ 为单位张量, 变形率张量 $\mathbf{S}=0.5[\nabla \mathbf{u}+(\nabla \mathbf{u})^T]$. $\mathbf{F}_b$ 为体积力, 当仅存在重力时, $\mathbf{F}_b=\rho \mathbf{g}$, $\mathbf{g}$ 为重力加速度. 表面力 $\mathbf{F}_s$ 可以表示为

$$\mathbf{F}_s = 2\sigma \kappa \delta_s \mathbf{n}, \quad (3)$$

式中, σ 为表面张力系数, κ 和 $\mathbf{n}$ 分别为自由面处的曲率和法向量, δ_s 将表面力转换为体积力, 详细定义在文献^[4]中给出.

自由面流动作为两相流动的典型情况, 当某一相(非主相)作用对两相流的作用较弱时, 可以忽略其黏性与密度的影响, 仅考虑主相的作用. 自由面处的边界条件可以表示为^[5]

$$-p + 2\rho \nu \mathbf{n} \cdot \partial_{\mathbf{n}} \mathbf{u} = -p_g + 2\sigma \kappa, \quad (4)$$

$$\mathbf{t} \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{n} = 0, \quad (5)$$

式中, $\mathbf{t}$ 为自由面处的切向量, p_g 为所忽略的非主相压力. 动量方程(2)中的表面力 $\mathbf{F}_s$ 被转换至了边界条件式(4)中, 简化后的自由面流动宏观控制方程为

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (6)$$

$$\partial_t \mathbf{u} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla (p/\rho) + \nabla \cdot (\nu \nabla \mathbf{u}) + \mathbf{F}_b/\rho. \quad (7)$$

2.2 不可压缩格子Boltzmann方法

对于自由面流动, 现有研究常采用基于BGK碰撞项的标准LB方法, 存在压缩性误差与稳定性限制^[26,27]. 针对该问题, 本文采用不可压缩MRT-LB模型对流场进行求解^[36-38].

首先引入一个具有MRT碰撞项的LB演化方程, 其形式为

$$\begin{aligned} & \mathbf{f}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) - \mathbf{f}(\mathbf{x}, t) \\ &= \mathbf{M}^{-1} \Lambda [\mathbf{m}^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{m}(\mathbf{x}, t)] + \mathbf{M}^{-1} \delta_t (\mathbf{I} - 0.5 \Lambda) \mathbf{F}_m(\mathbf{x}, t), \end{aligned} \quad (8)$$

式中, $\mathbf{f}(\mathbf{x}, t)=[f_0(\mathbf{x}, t), f_1(\mathbf{x}, t), \dots, f_8(\mathbf{x}, t)]^T$ 为速度空间分布函数矢量, $\mathbf{M}$ 为正交转换矩阵, Λ 为松弛矩阵, 矩空间矩函数 $\mathbf{m}(\mathbf{x}, t)=\mathbf{M}\mathbf{f}=[m_0(\mathbf{x}, t), m_1(\mathbf{x}, t), \dots, m_8(\mathbf{x}, t)]^T$, 平衡

态矩函数 $\mathbf{m}^{\text{eq}} = \mathbf{M} \mathbf{f}^{\text{eq}}$, δ_t 为时间步长, $\mathbf{e}_i$ 为离散速度, 对于本文研究的二维自由面流动, 采用二维九速(D2Q9)离散速度模型进行计算.

基于Guo等人^[36]提出的不可压缩LB模型, 对平衡态分布函数进行了修正, 具体形式可以表示为

$$f_i^{\text{eq}} = \begin{cases} \rho - (1 - \omega_0) \frac{p}{c_s^2} - \rho \omega_0 \frac{|\mathbf{u}|^2}{c_s^2}, & i = 0, \\ \rho \omega_i \left[\frac{p}{\rho c_s^2} + \frac{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2}{c_s^4} - \frac{|\mathbf{u}|^2}{2c_s^2} \right], & i = 1 \sim 8, \end{cases} \quad (9)$$

式中, $|\mathbf{u}|^2 = u_x^2 + u_y^2$, $\mathbf{u} = (u_x, u_y)$, 格子声速 $c_s = c/\sqrt{3}$, 格子常数 $c = \delta_x/\delta_t$, ω_i 为权重, $\omega_0 = 4/9$, $\omega_{1-4} = 1/9$, $\omega_{5-8} = 1/36$. 分布函数演化方程(8)可以分解为矩函数 $\mathbf{m}(\mathbf{x}, t)$ 在矩空间的碰撞过程和分布函数 $f_i(\mathbf{x}, t)$ 在速度空间的迁移过程, 其中 $\mathbf{m}(\mathbf{x}, t)$ 的碰撞过程可以表示为

$$\mathbf{m}^+(\mathbf{x}, t) = \mathbf{m}(\mathbf{x}, t) - \Lambda[\mathbf{m}(\mathbf{x}, t) - \mathbf{m}^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)] + \delta_t(\mathbf{I} - 0.5\Lambda)\mathbf{F}_m(\mathbf{x}, t), \quad (10)$$

式中, 上标+表示碰撞后变量. 迁移过程的表达式为

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) = f_i^+(\mathbf{x}, t). \quad (11)$$

碰撞后分布函数 $f_i^+(\mathbf{x}, t) = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{m}^+(\mathbf{x}, t)$.

平衡态矩函数 $\mathbf{m}^{\text{eq}}$ 的具体形式为

$$\mathbf{m}^{\text{eq}} = \begin{bmatrix} \rho, -4\rho + 6p + 3\rho(u_x^2 + u_y^2), \\ 4\rho - 9p - 3\rho(u_x^2 + u_y^2), \rho u_x, -\rho u_x, \\ \rho u_y, -\rho u_y, \rho(u_x^2 - u_y^2), \rho u_x u_y \end{bmatrix}. \quad (12)$$

矩空间作用力项 $\mathbf{F}_m$ 的具体形式为

$$\mathbf{F}_m = \begin{bmatrix} 0, 6\mathbf{F}_b \cdot \mathbf{u}, -6\mathbf{F}_b \cdot \mathbf{u}, F_x, -F_x, F_y, \\ -F_y, 2(F_x u_x - F_y u_y), F_x u_x + F_y u_y \end{bmatrix} \quad (13)$$

式中, 外力项 $\mathbf{F}_b = (F_x, F_y)$. 松弛因子矩阵可以表示为

$$\mathbf{S} = \text{diag}(s_\rho, s_e, s_e, s_j, s_j, s_j, s_j, s_p, s_p). \quad (14)$$

宏观速度 $\mathbf{u}$ 和压力 p 的计算式为

$$\rho \mathbf{u} = \sum_i \mathbf{e}_i f_i + 0.5 \delta_t \mathbf{F}_b, \quad (15)$$

$$(1 - \omega_0)p / c_s^2 = \sum_i f_i - f_0 - 1.5\rho |\mathbf{u}|^2. \quad (16)$$

而 $\rho = \sum_i f_i = \sum_i f_i^{\text{eq}}$ 为常数^[36,37]. 经过Chapman-Enskog多尺

度分析, 演化方程(8)可恢复至不可压缩流体力学方程组(6)和(7)^[36,37]. 运动黏度 ν 可以表示为

$$\nu = c_s^2 \delta_t (s_p^{-1} - 0.5). \quad (17)$$

2.3 基于VOF的界面更新方法

为准确捕捉相界面(自由面)位置的动态演化过程, 类比VOF方法, 引入了反映单元充满程度的流体体积分数 $C(\mathbf{x}, t)$, 将计算域内的单元划分为液相、气相和界面单元^[26,27], 不同类型的单元定义如图1所示. 为保证相界面的连续性, 液相单元和气相单元间不能相互转化, 只能首先转化为界面单元. 速度分布函数的演化和质量的迁移过程仅在液相和界面单元进行.

通过 $\rho = \sum_i f_i = \rho_0$ 可以看出, 分布函数之和为常数, 可基于分布函数的介观特性, 通过同一格子的进出分布函数的关系反映流体体积分数(格子质量)的变化规律. 采用 $f_i^+(\mathbf{x}, t)$ 反映流向各个离散方向的质量, 可满足液相单元的质量守恒. 对于界面单元, 本文采用如下方法进行获得相应质量变化规律^[26]:

$$\Delta C_i(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} 0, & \mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t \rightarrow \text{气相单元}, \\ \Delta f_i^+, & \mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t \rightarrow \text{液相单元}, \\ 0.5\zeta \Delta f_i^+, & \mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t \rightarrow \text{界面单元}, \end{cases} \quad (18)$$

式中, $f_i^+(\mathbf{x}, t)$ 为碰撞后的分布函数, $\Delta f_i^+ = f_i^+(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t) - f_i^+(\mathbf{x}, t)$, $-i$ 表示 i 的反方向, 系数 $\zeta = C(\mathbf{x}, t) + C(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t)$, ΔC_i 表示 $\mathbf{e}_i$ 方向的质量交换. 界面单元的质量守恒特性可以通过 $\Delta C_i(\mathbf{x}, t) = -\Delta C_{-i}(\mathbf{x}, t)$ 得到满足. 界面单元的质量分数可以表示为

$$C(\mathbf{x}, t + \delta_t) = C(\mathbf{x}, t) + \sum_i \Delta C_i(\mathbf{x}, t). \quad (19)$$

经过上述计算过程, 界面单元内的流体体积分数

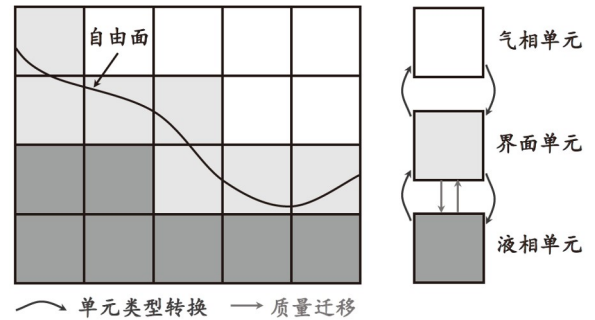


图1 不同类型单元示意图

Figure 1 Diagram of different lattice types.

$C(\mathbf{x}, t)$ 会出现超出 $[0, 1]$ 的情况. 为实现气液界面的迁移, 需要对超出范围的流体进行重新分配. 将 $C(\mathbf{x}, t) > (1+k)$ 的界面单元定义为过满单元, $C(\mathbf{x}, t) < -k$ 的单元定义为过空单元. k 一般取为0.001, 以避免界面单元类型的频繁转换^[27].

在界面单元重新分配过程中, 过满单元转化为液相单元, 多余的体积分数 $\Delta[C(\mathbf{x}, t+\delta_t)-1]$ 向周围非液相单元进行转化. 过空单元转化为气相单元, 不足的质量 $\Delta[C(\mathbf{x}, t+\delta_t)]$ 由周围非气相单元进行补充. 对应的质量重新分配表达式为

$$C(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) = C(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t) + \Delta \eta_i / \eta_{\text{total}}, \quad (20)$$

式中, 对于过满单元, 如果 $\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_i > 0$ 且 $\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t$ 为非液相单元, $\eta_i = \mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_i$, 否则 $\eta_i = 0$; 对于过空单元, 如果 $\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_i < 0$ 且 $\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t$ 为非气相单元, $\eta_i = -\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_i$, 否则 $\eta_i = 0$; $\eta_{\text{total}} = \sum_i \eta_i$. 通过该步骤实现了自由面位置的更新.

由于界面单元与气相单元相邻, 部分分布函数是未知的, 需要进行重构. 文献^[26,27]指出, 在进行未知分布函数重构时, 有些满足 $\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_i$ 但是来自非气相单元的速度分布函数虽然已知, 但仍需采用式(21)进行重构以保证界面上的动量守恒特性, 使边界条件(4)和(5)在忽略黏性作用的条件下得以满足.

$$f_i^+(\mathbf{x} - \mathbf{e}_i, t) = f_i^{\text{eq}}(p_b, \mathbf{u}) + f_i^{\text{eq}}(p_b, \mathbf{u}) - f_i^+(\mathbf{x}, t), \quad (21)$$

式中, $\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_i \leq 0$, p_b 为考虑表面张力作用的压力, 其表达式为

$$p_b = p_g + 2\kappa\sigma. \quad (22)$$

但Schwarzmeier和Rüde^[39]指出, 该处理方法不能准确实现界面两侧外力平衡条件, 而只重构未知分布函数能够保留更多的信息, 具有更高的精度. 本文采用该方法处理自由面边界条件.

应该指出的是, 对于采用标准BGK-LB模型的原始自由面模型, 压力和密度之间的关系为 $p = \rho c_s^2$, 存在压缩性影响. 液相和界面单元的质量满足 $m(\mathbf{x}, t) = \rho(\mathbf{x}, t)C(\mathbf{x}, t)$, 计算体系中流体体积分数 C 会受到密度变化的影响, 进而影响界面的捕捉精度. 而对于本文所采用的不可压缩LB模型, 计算体系的密度是一个定值, 流体体积分数能够准确反映质量, 无须引入界面单元质量 $m(\mathbf{x}, t)$, 可以直接由体积分数 $C(\mathbf{x}, t)$ 准确得到相界

面演化规律.

2.4 Level Set函数计算方法

从自由面的处理方式可以看出, 自由面法向量 $\mathbf{n}$ 和曲率 κ 的准确计算对于界面演化与更新十分重要. 相较于VOF方法通过流体体积分数 $C(\mathbf{x}, t)$ 获得相应几何参数, LS函数在计算法向量和曲率时更为准确. 传统LS方法基于高阶离散格式对LS函数进行离散求解, 在求解过程中引入了数值耗散, 影响了界面追踪精度. 本节通过几何方法获得LS函数, 保证了求解精度的同时提高了计算效率^[11]. 下面对实施步骤进行简要介绍.

由于 $C(\mathbf{x}, t)$ 在自由面处阶跃分布, 难以实现界面单元曲率的准确计算, 需要对流体体积分数 $C(\mathbf{x}, t)$ 进行光顺. 本文采用的光顺核函数为 $K_g(x, \varepsilon)$, 对应的插值半径 $\varepsilon = 2\delta_x$, δ_x 为网格步长. 采用光顺后的流体体积分数 $C'(\mathbf{x}, t)$ 计算界面单元法向量 $\mathbf{n}_C = (n_x, n_y)$, 其表达式为^[40]

$$\mathbf{n}_C = -\nabla C' / |\nabla C'|. \quad (23)$$

得到初始法向量 $\mathbf{n}_C$ 后, 基于分段线性界面计算(piecewise linear interface calculation, PLIC)对界面单元进行重构. 如图2所示, 首先将不同类型的界面规整化为 $n_x \geq 0$ 和 $n_y \geq 0$ 的情况, 界面直线方程可以表示为^[41]

$$n_x x + n_y y = \alpha. \quad (24)$$

界面单元质量分数的计算表达式为

$$C\delta_x^2 = \frac{\left\{ \alpha^2 - H\left[(\alpha - n_x \delta_x)^2\right] - H\left[(\alpha - n_y \delta_x)^2\right] \right\}}{2n_x n_y}, \quad (25)$$

式中, $H(x)$ 为Heaviside阶跃函数. 通过牛顿迭代法或弦割法可以由 C 得到界面方程中的参数 α .

在获得界面方程(24)后, 由三角形几何计算得到单元与界面之间的距离 d , 共包含如图3所示的三种类型^[11]. 由于法向量和曲率计算仅与界面单元周围的LS函数相关, 为减小计算量, 在界面周围 n 层单元进行标记以缩小遍历范围. n 的取值与法向量和曲率的计算方式相关, 本文计算中 n 取为3.

对于每个标记后的单元, 遍历访问所有的界面单元, 得到与界面的最小距离 $d_{\min}$, 该值即LS函数的绝对值. 为提高计算效率, 索引的界面单元范围限制在标记单元周围的 7×7 范围内. 将LS函数记为 $\phi(\mathbf{x}, t)$, 根据流体体积分数 $C(\mathbf{x}, t)$ 设置LS函数 $\phi(\mathbf{x}, t)$ 的符号, 对应的表达

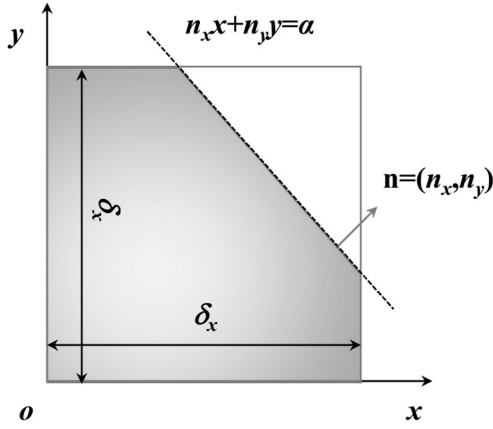


图2 界面单元重构示意图

Figure 2 Diagram of reconstructed interface lattice.

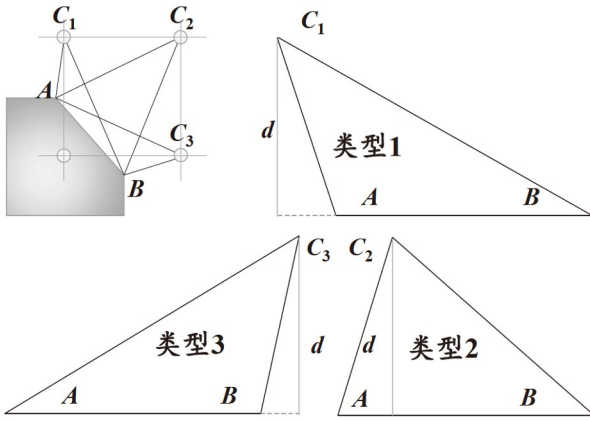


图3 节点与界面单元距离计算示意图

Figure 3 Diagram of the distance between grid node and reconstructed interface lattice.

式为

$$\varphi(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} d_{\min}, & C(\mathbf{x}, t) < 0.5, \\ -d_{\min}, & C(\mathbf{x}, t) \geq 0.5. \end{cases} \quad (26)$$

基于获得的LS函数 $\varphi(\mathbf{x}, t)$, 可以重新计算得到界面法向量 $\mathbf{n}_\varphi$, 计算式为^[10]

$$\mathbf{n}_\varphi = \nabla \varphi / |\nabla \varphi|. \quad (27)$$

为获得更为准确的LS函数, 根据得到的 $\mathbf{n}_\varphi$ 对界面进行重构并更新 $\varphi(\mathbf{x}, t)$. 根据文献[11]的推荐, 重复上述步骤3次, 可以得到较为合理的LS函数 $\varphi(\mathbf{x}, t)$ 的结果.

最后采用更新后的法向量 $\mathbf{n}_\varphi$ 计算界面曲率, 可以表示为^[10,42]

$$\kappa = \nabla \cdot \mathbf{n}_\varphi. \quad (28)$$

2.5 计算流程

对于本文发展的求解自由面流动的CVOF-LS-LB方法, 具体计算流程如下:

- (1) 计算域宏观和介观模拟参数初始化;
- (2) 根据式(10)和(11)实施速度分布函数 $f_i(\mathbf{x}, t)$ 的碰撞迁移过程, 采用式(21)处理自由面边界条件, 使用式(15)计算宏观量;
- (3) 采用式(18)和(19)计算自由面质量交换过程, 获得更新后的界面单元体积分数 $C(\mathbf{x}, t)$;
- (4) 通过几何方式计算LS函数 $\varphi(\mathbf{x}, t)$, 根据式(27)和(28)分别计算界面法向量 $\mathbf{n}_\varphi$ 和曲率 κ ;
- (5) 基于式(20)对界面类型与体积分数进行更新, 实现自由面的动态演化;
- (6) 重复步骤(2)~(5), 直至达到给定计算时间.

3 模型验证与结果讨论

为验证本文所提出的耦合VOF和LS方法的自由面流动LB模型, 采用了溃坝流动和液滴撞击薄膜过程验证了模型在自由面拓扑发生变化时的界面捕捉精度. 若未特殊说明, 在模拟中 $\delta_x = \delta_t = 1$, 密度 $\rho = 1$, 分布函数均采用平衡态初始化. 为表征不同的法向量和曲率计算方式对结果的影响, 将采用式(23)和(28)的界面几何参数计算方式记为VOF-LB方法.

3.1 溃坝问题

作为自由面流动的经典算例, 溃坝问题得到了广泛实验与模拟研究^[31,33,43]. 图4为该问题的示意图. 初始条件下, 水柱宽度和高度分别为 L_c 和 $2L_c$. 容器的宽度和高度分别为 $4L_c$ 和 $3L_c$. 在重力作用下, 水柱发生流动. 所有物理边界均为无滑移速度边界条件.

计算域最大速度可以通过特征速度 u_c 表征, 其定义式为^[31]

$$u_c = 2\sqrt{2gL_c}, \quad (29)$$

式中, g 为重力加速度. 无量纲时间 t^* 和位置 x^* 参数可以

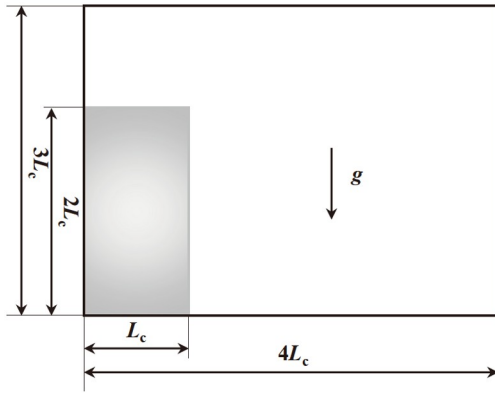


图 4 溃坝问题示意图

Figure 4 Schematic diagram of the dam break problem.

表示为

$$t^* = t\sqrt{2g/L_c}, x^* = x/L_c. \quad (30)$$

对应的几何与物性参数分别为: $L_c=0.292$ m, $\rho=1000$ kg m⁻³, $\nu=10^{-6}$ m² s⁻¹, $g=9.81$ m s⁻², $\sigma=$

0.072 kg m⁻². 在模拟中, 为保证不可压条件, 特征速度 u_c 设置为 0.02 (格子单位). 采用的计算网格分别为 $N_x \times N_y = 240 \times 180$, 360×270 和 480×360 . 为满足求解精度和计算过程的质量守恒特性, 无滑移速度边界采用半步长反弹格式进行处理^[31], 计算参数在表 1 中给出.

首先给出不同网格数目下自由面前沿位置 x^* 随时间 t^* 的变化关系, 结果如图 5 所示. 可以看出, 对于 VOF-LB 和 CVOF-LS-LB 两类方法, 不同网格下的自由面前沿计算结果基本一致, 随网格数目的增加, 逐渐收敛至稳定值. 所得数值计算结果与文献[11,31,33,43]中的实验与模拟结果符合均较好, 验证了数值模型实施的准确性.

如图 6 所示, 进一步给出了 480×360 网格下, 无量纲时间 $t^*=1, 2$ 和 3 (即 $t=0.1, 0.2$ 和 0.3 s) 时的自由面位置. 可以看出, VOF-LB 和 CVOF-LS-LB 方法得到界面位置基本一致, 均与文献[31,33,43]的模拟结果一致, 但 CVOF-LS-LB 结果的界面较为光顺, 液相区域的体积分数分布更为合理, 与文献中的相界面演化特征符合

表 1 溃坝问题模拟参数

Table 1 Simulation parameters of dam break problem

网格数目	物理单位		格子单位	
	网格步长 δ_x (m)	时间步长 δ_t (s)	格子黏性 ν	重力加速度 g
240×180	2.433×10^{-3}	1.43772×10^{-5}	2.428×10^{-6}	8.333×10^{-7}
360×270	1.622×10^{-3}	9.585×10^{-6}	3.642×10^{-6}	5.556×10^{-7}
480×360	1.217×10^{-3}	7.189×10^{-6}	4.856×10^{-6}	4.167×10^{-7}

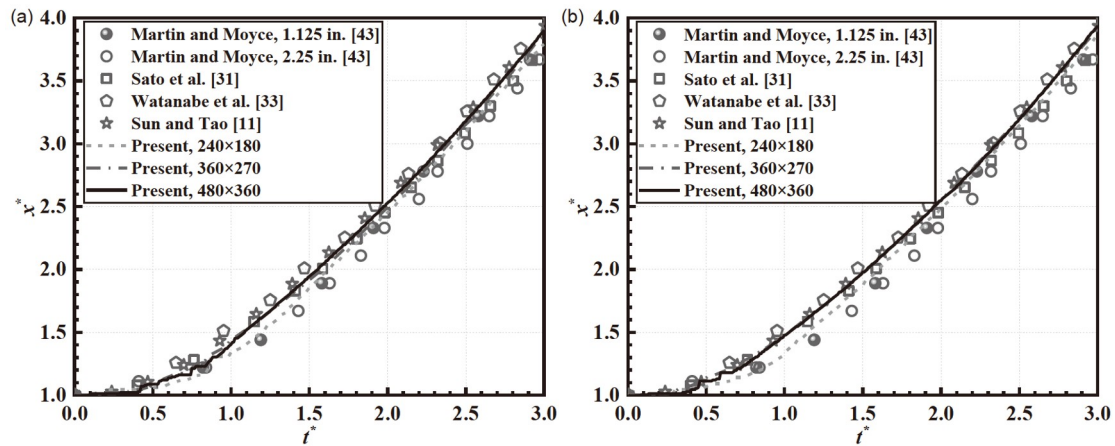


图 5 自由面前沿随时间演化过程. (a) VOF-LB方法; (b) CVOF-LS-LB方法

Figure 5 Front of free surface versus time. (a) VOF-LB method; (b) CVOF-LS-LB method.

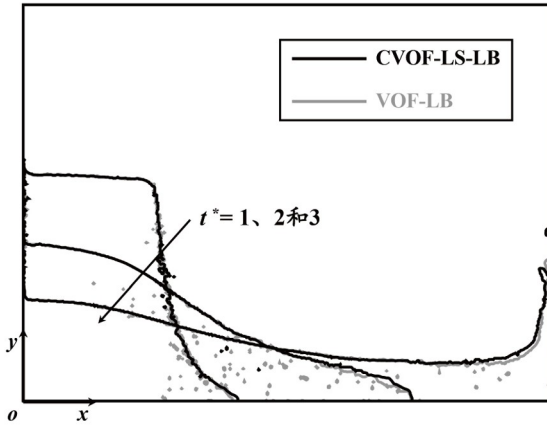


图6 不同无量纲时间下溃坝流动的自由面位置

Figure 6 Free surface location of dam break at different dimensionless times t^* .

更好, 说明了本文发展的CVOF-LS-LB模型具有更好的自由面流动模拟与界面捕捉精度。

3.2 液滴撞击薄液膜过程

液滴撞击薄液膜是一种常见的流动现象, 在实际工程中具有重要应用, 例如燃烧室中油滴撞击壁面和飞机结冰表面的过冷液滴撞击过程。在该类问题中, 界面拓扑发生剧烈变化, 对界面捕捉的准确性提出了较高要求, 目前有许多学者对这一现象进行了实验^[44]和模拟研究^[45-47]。

图7展示了液滴撞击薄液膜问题示意图, 液滴半径为 R , 初始速度为 u_0 , 液膜厚度为 H 。控制该过程的特征数为Reynolds数(Re)和Webber数(We), 其定义可以分别表示为

$$Re = \frac{2u_0R}{\nu}, \quad We = \frac{2\rho u_0^2 R}{\sigma}. \quad (31)$$

对于该问题, 采用的 We 为8000, Re 分别为20, 100和500, 计算网格为 $N_x \times N_y = 800 \times 300$, 初始速度 $u_0 = 0.01$, 液滴半径 $R = 50$, 液膜厚度 $H = 5$ (均为格子单位)。左右边界采用周期边界进行处理, 上下壁面无滑移边界采用半步长反弹格式进行处理。在该问题的模拟中, 忽略了重力的影响^[45]。

不同 Re 和 We 下的模拟结果如图8所示, 采用基于相场方法的模拟结果^[45]进行对比。可以看出, 本文发展的CVOF-LS-LB模型有效模拟出了不同 Re 和 We 下液

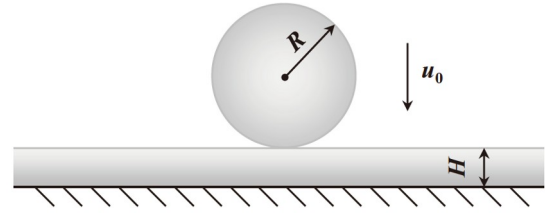


图7 液滴撞击薄液膜示意图

Figure 7 Schematic diagram of a droplet impacting a thin liquid film.

滴撞击液膜过程中的飞溅和铺展现象, 与文献模拟结果吻合较好, 说明该模型能够实现自由面拓扑随时间的演化过程预测。对比CVOF-LS-LB和VOF-LB计算结果可以看出, 两者得到的界面演化趋势基本相同, 但是CVOF-LS-LB得到的相界面更为光滑, 与文献^[45,47]中的模拟结果符合更好, 因而本文发展的计算模型能够更准确地获得相界面的演化特征。此外, 在 Re 较大($Re=100$)时, 相较于文献^[45]中的结果, CVOF-LS-LB模型得到结果中出现了破裂的小液滴, 反映了Rayleigh-Plateau不稳定性的作用^[47], 更能体现该模型在较高 Re 下的精度, 进一步证明了CVOF-LS-LB模型在自由面拓扑结构发生复杂变化时的界面捕捉能力。

4 结论

针对实际技术科学与工程应用中广泛存在的自由面流动, 本文发展了一种耦合VOF和LS方法的格子Boltzmann(CVOF-LS-LB)模型, 实现了自由面流动过程的准确预测。该模型有以下特征:

(1) 相较于传统采用弱可压模型的自由面流动BGK-LB方法, 引入了多松弛时间不可压缩LB模型, 计算体系密度为定值, 求解的宏观变量为压力与速度, 改善了模型压缩性和稳定性等方面的不足;

(2) 基于VOF方法的思想, 引入流体体积分分数表征自由面信息, 通过不可压模型的介观速度分布函数的迁移过程实现界面单元体积分数(质量)的更新与自由面的动态演化, 避免了传统VOF的复杂界面推进求解过程;

(3) 采用界面重构方法将流体体积分分数转换为LS函数, 无须采用高阶格式离散求解LS方程, 实现了自由面法向量和曲率等几何参数的计算。在减少了LS函数求解计算量的同时, 相较于VOF中使用流体体积分

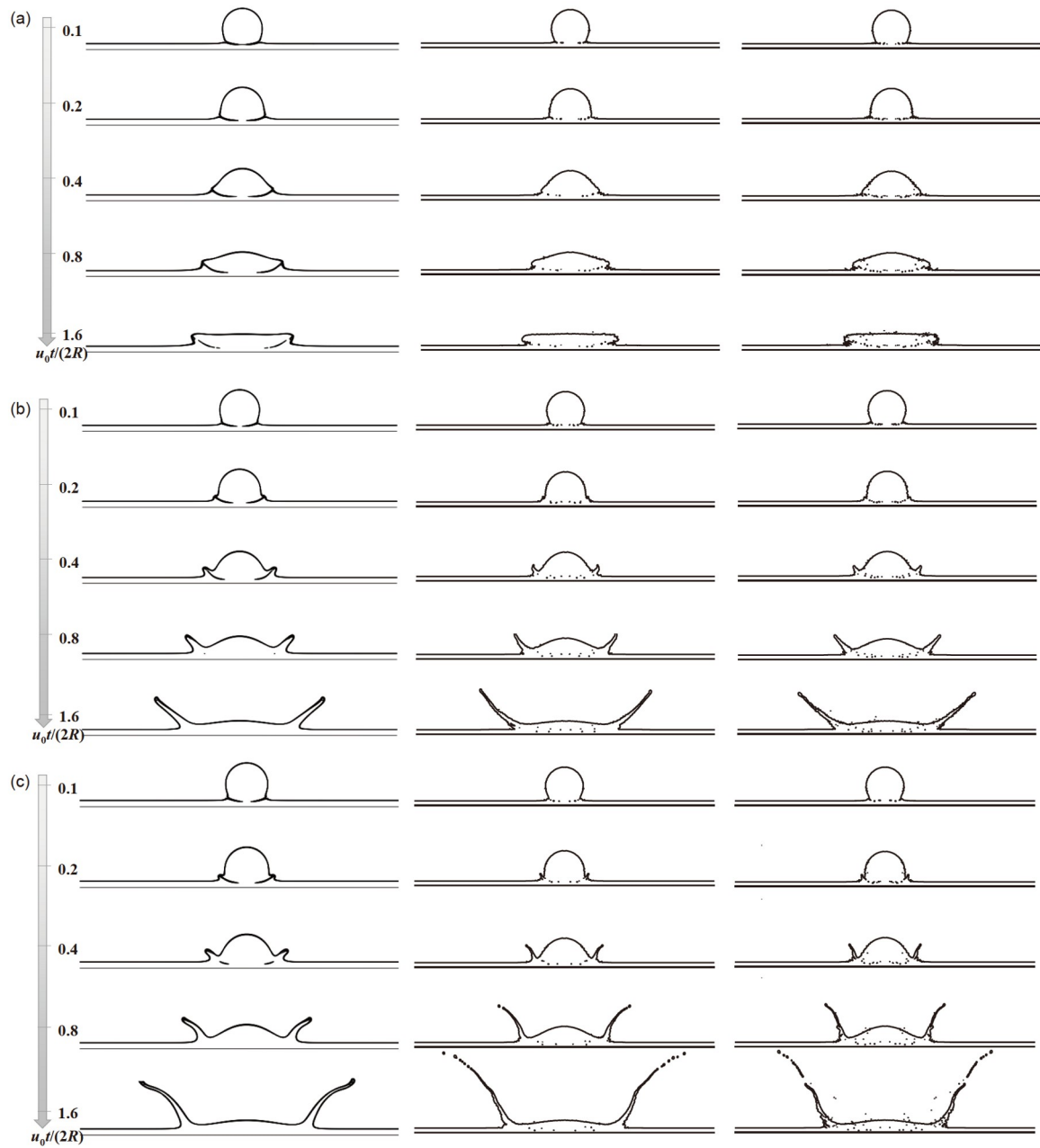


图 8 不同 Re 和 We 下液滴撞击薄液膜自由面演化过程(左侧: 文献[45]; 中间: CVOF-LS-LB; 右侧: VOF-LB). (a) $Re=20$, $We=8000$; (b) $Re=100$, $We=8000$; (c) $Re=500$, $We=8000$

Figure 8 Free surface evolution of droplet impacting a thin liquid film at different Re and We (left column: Ref. [45], middle column: CVOF-LS-LB, right column: VOF-LB). (a) $Re=20$, $We=8000$; (b) $Re=100$, $We=8000$; (c) $Re=500$, $We=8000$.

数的法向量和曲率计算方法, 具有更高的求解精度.

采用了溃坝流动和液滴撞击薄液膜等典型自由面流动过程验证了模型在自由面拓扑发生变化时的界面捕捉精度. 结果表明, 相较于基于VOF方法的自由面流

动LB方法, 本文所提出的CVOF-LS-LB方法对自由面的计算更加准确, 能够有效实现自由面流动问题的模拟. 后续研究中, 该模型将进一步应用于更加复杂自由面流动过程的求解.

参考文献

- 1 Kumar E D, Sannasiraj S A, Sundar V. Lattice Boltzmann simulation of free surface flow impact on a structure. *Phys Rev E*, 2019, 99: 023308
- 2 Cattenone A, Morganti S, Auricchio F. Basis of the lattice Boltzmann method for additive manufacturing. *Arch Computat Methods Eng*, 2020, 27: 1109–1133
- 3 Li M J, Tong Z X, Zhou Z J, et al. A numerical model coupling bubble flow, light transfer, cell motion and growth kinetics for real timescale microalgae cultivation and its applications in flat plate photobioreactors. *Algal Res*, 2019, 44: 101727
- 4 Tryggvason G, Scardovelli R, Zaleski S. *Direct Numerical Simulations of Gas-Liquid Multiphase Flows*. Cambridge: Cambridge University Press, 2011
- 5 Scardovelli R, Zaleski S. Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow. *Annu Rev Fluid Mech*, 1999, 31: 567–603
- 6 Unverdi S O, Tryggvason G. A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. *J Comput Phys*, 1992, 100: 25–37
- 7 Hirt C W, Nichols B D. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *J Comput Phys*, 1981, 39: 201–225
- 8 Osher S, Sethian J A. Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. *J Comput Phys*, 1988, 79: 12–49
- 9 Sussman M, Puckett E G. A coupled level set and volume-of-fluid method for computing 3D and axisymmetric incompressible two-phase flows. *J Comput Phys*, 2000, 162: 301–337
- 10 Osher S, Fedkiw R, Piechor K. Level set methods and dynamic implicit surfaces. *Appl Mech Rev*, 2004, 57: B15
- 11 Sun D L, Tao W Q. A coupled volume-of-fluid and level set (VOSET) method for computing incompressible two-phase flows. *Int J Heat Mass Transfer*, 2010, 53: 645–655
- 12 Ling K, Li Z H, Sun D L, et al. A three-dimensional volume of fluid & level set (VOSET) method for incompressible two-phase flow. *Comput Fluids*, 2015, 118: 293–304
- 13 He Y L, Li Q, Wang Y, et al. *Lattice Boltzmann Method: Theory and Applications (in Chinese)*. Beijing: Higher Education Press, 2023 [何雅玲, 李庆, 王勇, 等. 格子Boltzmann方法的理论及应用. 北京: 高等教育出版社, 2023]
- 14 Li Q, Luo K H, Kang Q J, et al. Lattice Boltzmann methods for multiphase flow and phase-change heat transfer. *Prog Energy Combust Sci*, 2016, 52: 62–105
- 15 He Y L, Liu Q, Li Q, et al. Lattice Boltzmann methods for single-phase and solid-liquid phase-change heat transfer in porous media: A review. *Int J Heat Mass Transfer*, 2019, 129: 160–197
- 16 Aidun C K, Clausen J R. Lattice-Boltzmann method for complex flows. *Annu Rev Fluid Mech*, 2010, 42: 439–472
- 17 Tong Z X, He Y L, Tao W Q. A review of current progress in multiscale simulations for fluid flow and heat transfer problems: The frameworks, coupling techniques and future perspectives. *Int J Heat Mass Transfer*, 2019, 137: 1263–1289
- 18 Shan X, Chen H. Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components. *Phys Rev E*, 1993, 47: 1815–1819
- 19 Shan X, Chen H. Simulation of nonideal gases and liquid-gas phase transitions by the lattice Boltzmann equation. *Phys Rev E*, 1994, 49: 2941–2948
- 20 Swift M R, Osborn W R, Yeomans J M. Lattice Boltzmann simulation of nonideal fluids. *Phys Rev Lett*, 1995, 75: 830–833
- 21 Swift M R, Orlandini E, Osborn W R, et al. Lattice Boltzmann simulations of liquid-gas and binary fluid systems. *Phys Rev E*, 1996, 54: 5041–5052
- 22 He X, Chen S, Doolen G D. A novel thermal model for the lattice Boltzmann method in incompressible limit. *J Comput Phys*, 1998, 146: 282–300
- 23 Lallemand P, Luo L S, Peng Y. A lattice Boltzmann front-tracking method for interface dynamics with surface tension in two dimensions. *J Comput Phys*, 2007, 226: 1367–1384
- 24 Thömmes G, Becker J, Junk M, et al. A lattice Boltzmann method for immiscible multiphase flow simulations using the level set method. *J Comput Phys*, 2009, 228: 1139–1156
- 25 Becker J, Junk M, Kehrwald D, et al. A combined lattice BGK/level set method for immiscible two-phase flows. *Comput Math Appl*, 2009, 58: 950–964
- 26 Körner C, Thies M, Hofmann T, et al. Lattice Boltzmann model for free surface flow for modeling foaming. *J Stat Phys*, 2005, 121: 179–196

- 27 Thürey N, Körner C, Rüde U. Interactive free surface fluids with the lattice Boltzmann method. Technical Report 05-4. Germany: University of Erlangen-Nuremberg, 2005
- 28 Sato K, Koshimura S. Validation of the MRT-LBM for three-dimensional free-surface flows: an investigation of the weak compressibility in dam-break benchmarks. *Coast Eng J*, 2020, 62: 53–68
- 29 He X, Luo L S. Lattice Boltzmann model for the incompressible Navier-Stokes equation. *J Stat Phys*, 1997, 88: 927–944
- 30 Cao W, Li Z, Li X, et al. A regularized single-phase lattice Boltzmann method for free-surface flows. *Comput Math Appl*, 2020, 80: 2194–2211
- 31 Sato K, Kawasaki K, Koshimura S. A comparative study of the cumulant lattice Boltzmann method in a single-phase free-surface model of violent flows. *Comput Fluids*, 2022, 236: 105303
- 32 Janssen C, Krafczyk M. A lattice Boltzmann approach for free-surface-flow simulations on non-uniform block-structured grids. *Comput Math Appl*, 2010, 59: 2215–2235
- 33 Watanabe S, Aoki T. Large-scale flow simulations using lattice Boltzmann method with AMR following free-surface on multiple GPUs. *Comput Phys Commun*, 2021, 264: 107871
- 34 Schwarzmeier C, Holzer M, Mitchell T, et al. Comparison of free-surface and conservative Allen–Cahn phase-field lattice Boltzmann method. *J Comput Phys*, 2023, 473: 111753
- 35 Bogner S, Rüde U, Harting J. Curvature estimation from a volume-of-fluid indicator function for the simulation of surface tension and wetting with a free-surface lattice Boltzmann method. *Phys Rev E*, 2016, 93: 043302
- 36 Guo Z, Shi B, Wang N. Lattice BGK model for incompressible Navier-Stokes equation. *J Comput Phys*, 2000, 165: 288–306
- 37 Du R, Shi B, Chen X. Multi-relaxation-time lattice Boltzmann model for incompressible flow. *Phys Lett A*, 2006, 359: 564–572
- 38 McCracken M E, Abraham J. Multiple-relaxation-time lattice-Boltzmann model for multiphase flow. *Phys Rev E*, 2005, 71: 036701
- 39 Schwarzmeier C, Rüde U. Analysis and comparison of boundary condition variants in the free-surface lattice Boltzmann method. *Numer Methods Fluids*, 2023, 95: 820–850
- 40 Williams M W. Numerical methods for tracking interfaces with surface tension in three-dimensional mold-filling processes. Dissertation for Doctoral Degree. Davis: University of California, Davis, 2000
- 41 Gueyffier D, Li J, Nadim A, et al. Volume-of-fluid interface tracking with smoothed surface stress methods for three-dimensional flows. *J Comput Phys*, 1999, 152: 423–456
- 42 Brackbill J U, Kothe D B, Zemach C. A continuum method for modeling surface tension. *J Comput Phys*, 1992, 100: 335–354
- 43 Martin J C, Moyce W J. Part IV. An experimental study of the collapse of liquid columns on a rigid horizontal plane. *Phil Trans R Soc Lond A*, 1952, 244: 312–324
- 44 Josserand C, Zaleski S. Droplet splashing on a thin liquid film. *Phys Fluids*, 2003, 15: 1650–1657
- 45 Lee T, Lin C L. A stable discretization of the lattice Boltzmann equation for simulation of incompressible two-phase flows at high density ratio. *J Comput Phys*, 2005, 206: 16–47
- 46 Li Q, Luo K H. Achieving tunable surface tension in the pseudopotential lattice Boltzmann modeling of multiphase flows. *Phys Rev E*, 2013, 88: 053307
- 47 Banari A, Janßen C F, Grilli S T. An efficient lattice Boltzmann multiphase model for 3D flows with large density ratios at high Reynolds numbers. *Comput Math Appl*, 2014, 68: 1819–1843

Coupled volume-of-fluid and level-set lattice Boltzmann method for free surface flows

LIU Xiang, TONG ZiXiang, WANG SiCheng & HE YaLing

Key Laboratory of Thermo-Fluid Science and Engineering of Ministry of Education, School of Energy and Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China

As a representative two-phase flow problem in practical engineering applications, the free surface flow is often characterized by a high two-phase density ratio, high Reynolds number (Re), and a complex topological change of the phase interface (free surface). To numerically simulate a free surface flow, it is necessary to accurately capture/track the location of the free surface. In this work, a lattice Boltzmann (LB) model coupled with the volume-of-fluid (VOF) and level-set (LS) method is developed for free surface flows. To reduce the compressibility error and limited stability of the standard LB method, the incompressible LB model with the multiple-relaxation-time collision term is used to solve the flow field. Based on the idea of VOF, mass streaming and interface evolution of free surface are performed through the streaming process of mesoscopic incompressible distribution functions. The complex interface advancing and updating process of the traditional VOF method is avoided. To accurately solve the geometric information of a free surface, the interface reconstruction method is used to convert the fluid volume fraction into the LS function. The normal vector and curvature of the interface are calculated using the reconstructed LS function. Through this treatment, computational efficiency can be improved compared with solving the LS equation directly based on a higher-order numerical scheme. Further, a higher numerical accuracy can be obtained for the geometric information of the free surface compared with the VOF method. Finally, the accuracy of the developed model is validated using benchmarks such as the dam break problem and droplet impacting the thin liquid film process. Therefore, the proposed model provides a new strategy to solve free surface flows.

free surface flow, incompressible lattice Boltzmann method, volume of fluid, level set

doi: [10.1360/SST-2024-0015](https://doi.org/10.1360/SST-2024-0015)