

一种基于非结构化网格的流体体积法界面重构方案

黄萌, 武利龙, 陈斌

(西安交通大学动力工程多相流国家重点实验室, 710049, 西安)

摘要: 基于三角形非结构化网格, 发展了一种类似于结构化网格简单直线界面计算方法的界面重构方案. 该方法为纯欧拉方法, 根据位于两相界面网格的相邻网格流体信息在该网格内部构造平行于某边的界面线, 通过界面线与网格边界围成的几何形状计算流体输运, 采用修正系数保证全局的质量守恒. 对均匀平直速度场中的同心双运动界面、旋转速度场中的马蹄形界面和剪切流场中的圆形运动界面模型等 3 个经典算例, 使用速度反向还原法检测了所提方法, 7 600 个非结构化网格上的界面构造效果达到了 6 400 个结构化网格的精度.

关键词: 流体体积法; 简单直线界面计算; 非结构化网格

中图分类号: O351.2 **文献标志码:** A **文章编号:** 0253-987X(2010)09-0099-05

Unstructured Grid Based Volume-of-Fluid Method

HUANG Meng, WU Lilong, CHEN Bin

(State Key Laboratory of Multiphase Flow in Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

Abstract: A simple line interface calculation-volume of fluid(SLIC-VOF) interface reconstruction technology was developed on the basis of the triangular unstructured grid. For a cell containing the interface, a straight line segment parallel with one side of the triangle cell was set on the interface according to the volume fractions in the three neighbor cells. The volume flux of the fluid with the assigned phase was determined by the geometry relation between the interface line and the volume flux on each side. Three tests were performed to verify the feasibility of the present unstructured SLIC-VOF interface reconstruction method, including an advection test of a right-angled triangle, the Zalesak slotted disk rotation test, and a single-vortex shearing flow test. The results show that the accuracy of the present method for the unstructured grid with 7 600 cells is comparative with that of the conventional SLIC-VOF method for the structured grid with 6 400 cells after the interface restoration in the reversed velocity field.

Keywords: volume of fluid; simple line interface calculation; unstructured grid

研究气液/液液两相流体时, 必须考虑相界面在流体运动中的变形和位移. 现有基于欧拉网格的界面捕获方法大致可以分为界面追踪法和界面捕捉法两类^[1]. 前者在欧拉网格上进行离散, 在网格中布置若干标记点或流体质点, 通过对这些标记点或质点的拉格朗日追踪来模拟界面的变化. 利用这种方法可以显式追踪界面, 从而更精确地计算界面的曲率, 但是界面的重构非常复杂, 难以处理界面拓扑结构

发生变化的情形. 后者包括流体体积(VOF)法^[2]和 Level set 方法^[3], 这类方法是完全的欧拉方法, 容易地处理复杂的物质界面以及界面拓扑结构发生变化的情形(如合并、交叉、破碎等). 与 Level set 方法相比, VOF 方法通过求解关于 VOF 函数的标量输运方程将复杂的界面处理为内部的运动边界, 无需特殊处理即可达到处理拓扑结构变化的鲁棒性和计算的简单高效, 同时较好地保持了质量守恒.

VOF 方法的概念最早由 Hirt 等人^[4]提出,采用流体体积比函数(相含率) F 来表示每个网格中指定相流体所占的体积。VOF 函数随流体运动发生改变,根据每个网格对应的 F 值,可以判断两相界面的位置并通过某种方式重构两相界面。他们提出的施主受主原理很大程度上影响了后来其他研究者的改进方法,其基本思想直到现在仍然很受重视,后人主要从方程差分格式和自由面流体传输等方面着手,结合自由面重构格式对 VOF 方法进行改进,发展出了 SLIC^[5]、FLAIR^[6]、PLIC^[7]等各种界面重构方法。到现在为止,结构化网格上的 VOF 方法已经相当成熟,如由 Youngs 发展的 PLIC 方法可以较为准确地构造出清晰的两相界面。但是,结构化网格的适用范围有限。

当计算区域不规则的时候,非结构化网格可以适应各种形状的计算区域。发展基于非结构化网格的 VOF 方法,可以有效模拟复杂计算区域中的多相流动,比结构化网格具有更加普遍的适用性。当前国际国内针对非结构化网格上的 VOF 方法刚刚开展初步研究,一般采用欧拉-拉格朗日相结合的界面重构方式,如 Ji 等人^[8]用这一方法进行了简单涡和复杂变形场的计算, Yang 等人^[9]描述了在三角形网格内构建任意斜率界面线的思想,李孝伟等人^[10]发展出一种在非结构化四边形网格上的纯欧拉重构方法。本文借鉴结构化网格的 SLIC 界面重构方案,采用纯欧拉的方法发展基于非结构化网格的 VOF 方法,根据速度场的分布计算网格间质量流量,构造出基于三角形网格的两相界面。

1 VOF 方法的基本原理

VOF 方法以两相的速度场作为原始变量,在整个流场中定义 VOF 函数 f ,它在某一相中取值为 1,在另一相中取值为 0。 f 在单个网格内的积分值与网格面积的比值记为体积比函数 F ,其取值介于 0~1 之间。 F 为 0 代表空网格,为 1 代表满网格,介于 0~1 之间则代表存在相界面。VOF 方法的实质就是将界面的拓扑信息转化为单元的体积分数,通过计算 f 在流场中的传输而确定每个时刻每个网格中的 F ,从而通过界面重构获取任意时刻两相界面位置。界面重构的基本思想是用网格内的直线或曲线来近似界面,利用相邻网格的体积分数预测界面的法向和位置,如最早的 SLIC 方法在网格内构造 0 阶的界面线,后来的 PLIC 方法构造任意斜率的界面线,以及后续的更高阶界面线构造方式^[11]。

此外, f 在网格间的输运是该方法的核心内容,从 SLIC 到 PLIC,以及其他高精度的体积流率计算方法,如积分平均法等,主要都是在这面进行的改进。

如前所述,现有的界面重构方案大多基于结构化网格,无法直接适用于非结构化网格,从而限制了它们在复杂几何区域的应用,因此本文着重讨论三角形非结构化网格的 VOF 方法。

2 基于三角形非结构化网格的 VOF 方法

利用上述思想,基于非结构化网格的 VOF 方法同样可以定义 f 和网格 i 中的体积比函数

$$F_i = \frac{1}{\Delta S_i} \iint_{\Delta S_i} f(x, y, t) dS \quad (1)$$

式中: ΔS_i 为该网格的面积。根据连续介质概念, f 随质点运动保持不变,其随体导数为 0,流体体积传输方程的形式如下

$$\frac{\partial f}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) f = 0 \quad (2)$$

对三角形网格控制容积积分,再由高斯定理可将式(2)变形为

$$\frac{\partial}{\partial t} \iint_{\Delta S} f dS + \sum_{k=1}^3 \int_{l_k} (\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_k) f dl = 0 \quad (3)$$

$k = 1, 2, 3$

式中: l_k 为第 k 条边的边长; $\mathbf{n}_k$ 为第 k 条边的外法向。设 $\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}_k = u_k$,将式(3)对时间项进行离散,得到

$$\left(\iint_{\Delta S_i} f dS^{n+1} - \iint_{\Delta S_i} f dS^n \right) + \sum_{k=1}^3 \int_{l_k} (f \cdot u_k dt) dl = 0 \quad (4)$$

根据 F 的定义,可将式(4)变形为

$$F_i^{n+1} - F_i^n = \frac{1}{\Delta S_i} \sum_{k=1}^3 \int_{l_k} (f \cdot u_k dt) dl \quad (5)$$

也就是说,每个时间步长内三角形控制单元的 F 变化等于通过网格各条边的 f 总流量与该单元控制容积之比。等式(5)右边累加项的处理可以对每个网格单元逐边进行,如图 1 所示,采用同位网格,将速度矢量分解为沿 3 条边法线的分量,外

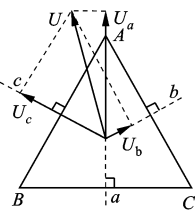


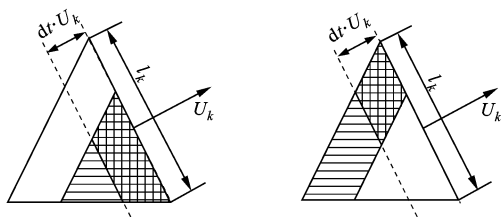
图1 速度矢量分解

法向记为正值。对每个网格只考虑流出的体积,流入该网格的体积流量由其相邻的网格流出量来计算。

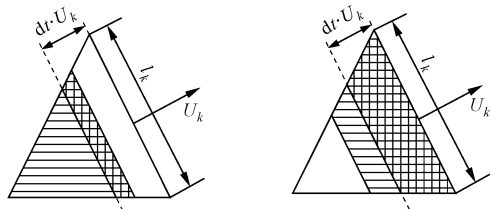
为了保证流体的质量守恒,对整个流场和局部

分别引入一个系数来调整流入和流出的体积流量,以投影在垂直于合速度矢量方向最长边的体积流率为准,用局部系数将另外两条边上的体积流率进行修正,从而得到每条边的总体积流率.对于整个流场,将当前时层与上一时层的总体积进行对比,得到全局系数,将其作用于下一时层的每个单元的体积,从而保证总流量守恒.

对于流体内部表示单相流体的网格,其流量可以不考虑界面线而直接计算,然而对于相界面上混合了两种流体的网格,计算体积流率需要考虑更多的因素.对于三角形非结构化网格,可以借鉴结构化网格的 SLIC 方法思想构造界面,即依据相邻网格内部的 F 分布在当前网格内构造平行于网格边界的界面线,根据界面线位置和网格边体积流率的几何关系来确定指定相的体积流率.如图 2 所示,界面线和速度分量共有 4 种相互关系,需要分别计算.



(a) l_k 与 n 斜交,且指定相处于三角阴影区域
(b) l_k 与 n 斜交,且指定相处于梯形阴影区域



(c) l_k 与 n 正交,且指定相处于三角阴影区域
(d) l_k 与 n 正交,且指定相处于梯形阴影区域
单线阴影表示指定相流体占居的体积;网状阴影表示 l_k 边流出的体积流量

图 2 非满网格指定边流量计算

将 3 条边的体积流量均代入式(5),就可以由 F 在当前时层的分布得到其在下一时层的分布,从而实现界面的连续重构.

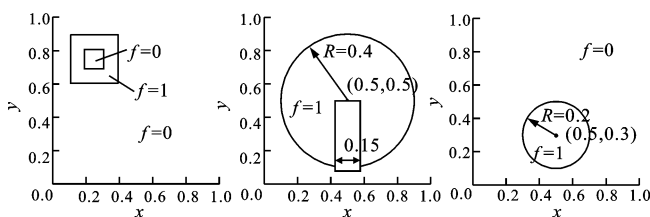
3 算例验证

本节使用经典的运动界面数值模拟实验算例对本文发展的非结构化网格 SLIC 方法进行验证,并

与基于结构化网格的 SLIC 方法进行对比.

3.1 算例描述

如图 3 所示,在边长为 1 的正方形计算区域内分布着两种流体.图 3a 中指定相是正方形同心环状分布,在均匀平直速度场的作用下运动;图 3b 所示的 Zalesak 模型中,指定相为马蹄形分布,受到逆时针方向旋转速度场的作用;图 3c 圆形运动界面模型所示的指定相为圆形,受到逆时针方向剪切速度场的作用.这 3 种算例经常用来考察 VOF 界面重构算法.为了检验方法的效果,令原始速度作用一段时间后再反向作用等长的时间,规定总时长为 T ,理论上来说,两相分布在 $t=T$ 时刻应该恢复初始的状态,可以通过 $t=T$ 和 $t=0$ 时刻流体分布的相似程度来判断界面重构方法的优劣.



(a) 同心双运动界面模型
(b) Zalesak 模型
(c) 圆形运动界面模型

图 3 运动界面的数值模拟实验算例

3.2 计算结果

利用课题组发展的 Bubble Packing 方法^[12]生成了网格数为 7 600 的三角形非结构化网格,用上述 3 个算例对本文提出的非结构化网格 SLIC 方法进行检验,并与网格数为 6 400 的正方形网格上的传统 SLIC 方法进行对比,3 个算例的结果分别示于图 4~图 6.

方形同心相界面在平直均匀流场中的运动情况示于图 4.非结构化网格的方法由于网格边界与运动方向和界面斜率不一致而造成界面产生轻微的扭曲变形,结构化网格上的方法则得到了较好的结果.马蹄形相界面在旋转流场中的运动情况示于图 5.在非结构化网格的结果中,马蹄形凹陷部位的张角发生了轻微增大,但总体形状的保持大大优于结构化网格的 SLIC 方法.圆形相界面在剪切流场中的运动情况如图 6 所示.指定相外部产生一定的起伏,且尾部略有脱离,在反向速度的作用下未能完全恢复初始形状,这是由 SLIC 方法的原理所决定的,但结果直观上仍优于结构化网格上的方法.后两个算例的情形说明,在旋转和剪切流场中,结构化网格不再有网格形状上的优势,非结构化网格更具优势.

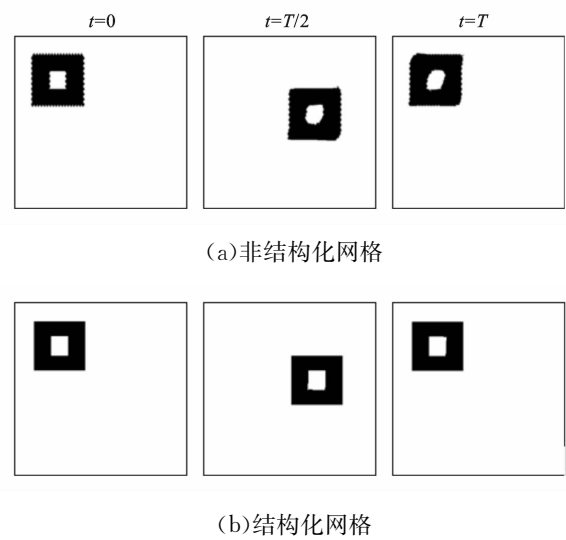


图 4 均匀平直流场方向同心相界面模拟结果

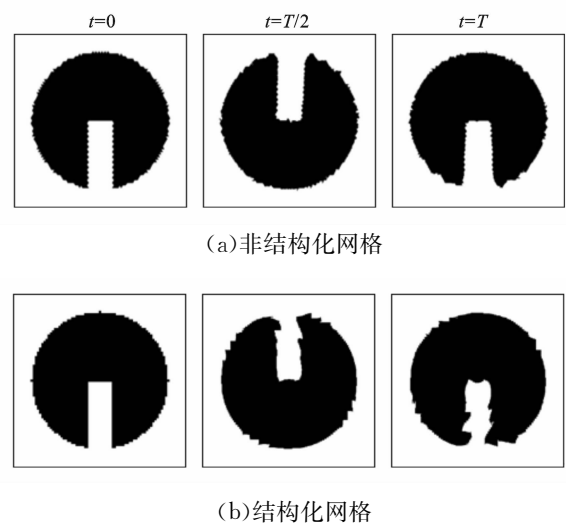


图 5 旋转流场马蹄形相界面模拟结果

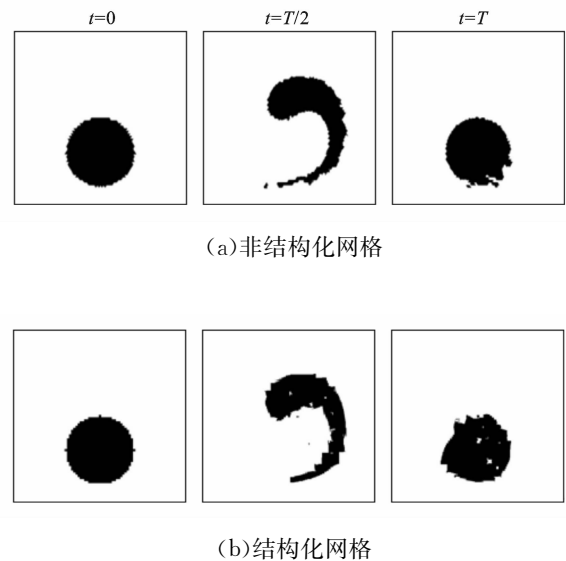


图 6 剪切流场圆形相界面模拟结果

从结果可以看出,该方法可以基于非结构化网格重构两相流体的相界面,但由于 SLIC 方法判断界面线的角度精确性不够,以及网格间较高的数值耗散,导致计算的结果与理想的情况还有一定偏差,仍需要进一步改进.

4 结 论

本文发展了一种基于三角形非结构化网格的 SLIC-VOF 界面重构方法,该方法保留了一般 VOF 方法的计算快速、硬件要求低、界面尖锐等特点,能够初步完成非结构化网格上捕捉两相界面的任务,实现了基于三角形网格的流体输运和界面重构.利用 3 个算例分别考察了该方法在平直流场、旋转流场、剪切流场作用下的界面重构效果,并与传统的基于结构化网格的 SLIC 方法进行了对比,结果显示该方法达到了基本的界面重构要求,精度与结构化网格的 SLIC 方法相当.

参考文献:

[1] 陈斌, KAWAMURA T, KODAMA Y. 静止水中单个上升气泡的直接数值模拟 [J]. 工程热物理学报, 2005, 26(6):980-982.
CHEN Bin, KAWAMURA T, KODAMA Y. Direct numerical simulations of a single bubble rising in still water [J]. Journal of Engineering Thermophysics, 2005, 26(6):980-982.
[2] 张健,方杰,范波芹. VOF 方法理论与应用综述[J]. 水利水电科技进展,2005, 25(2): 67-70.
ZHANG Jian, FANG Jie, FAN Boqin. Advances in research of VOF method [J]. Advances in Science and Technology of Water Resources, 2005, 25(2):67-70.
[3] OSHER S, SETHIAN J A. Fronts propagating with curvature-dependent speed; algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations [J]. Journal of Computational Physics, 1988, 79(1):12-49.
[4] HIRT C W, NICHOLS B D. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundary [J]. J Comput Phys, 1981, 39(1):201-225.
[5] NOH W F, WOODWARD P. SLIC (simple line interface method) [M]. Berlin, Germany: Springer-Verlag, 1976:330.
[6] ASHGRIZ N, POO J Y. FLAIR flux line-segment model of advection and interface reconstruction [J]. J Comput Phys, 1991, 93(2): 449-468.
[7] YOUNGS D L. Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion [M] // Numerical Methods

- for Fluid Dynamics. New York, USA: Academic Press, 1982:273-285.
- [8] JI Chunling, WANG Yuanzhan, WANG Jianfeng. A novel VOF-type volume-tracking method for free-surface flows based on unstructured triangular mesh [J]. China Ocean Engineering, 2005, 19(4):529-538.
- [9] YANG Xiaofeng, ASHLEY J J, LOWENGRUB J, et al. An adaptive coupled level-set/volume-of-fluid interface capturing method for unstructured triangular grids [J]. Journal of Computational Physics, 2006, 217(2):364-392.
- [10] 李孝伟,樊俊飞. 一种自由界面追踪的模板化 VOF 方法[J]. 应用数学和力学, 2008, 29(7):799-805.
- LI Xiaowei, FAN Junfei. A stencillike volume-of-fluid (VOF) method for tracking free interface [J]. Applied Mathematics and Mechanics, 2008, 29(7):799-805.
- [11] 刘儒勋, 王志峰. 数值模拟方法和运动界面追踪 [M]. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 2001.
- [12] 武利龙, 陈斌. 基于 Bubble Packing 的非结构化网格生成技术[J]. 西安交通大学学报, 2009, 43(1):29-33.
- WU Lilong, CHEN Bin. Bubble packing method based unstructured grid generation [J]. Journal of Xi'an Jiaotong University, 2009, 43(1):29-33.

(编辑 荆树蓉)

[优秀博士论文摘登]

金、铂纳米结构形状控制合成及其生长机制研究

作者: 杨生春 导师: 丁秉钧

单位: 西安交通大学理学院

贵金属及其材料因具有独特的物理、化学性质和重要应用而在国民经济、国防建设及社会发展中起着重要作用,既是国防建设中的战略物资,又是社会可持续发展的关键材料. 贵金属纳米材料因纳米结构固有的量子尺寸效应、表面效应和界面效应的有效叠加,无疑会使这些材料的特性发生新的、质的飞跃. 贵金属纳米材料的性能与其尺寸和形貌密切相关,因此形貌和尺寸控制合成贵金属纳米粒子的研究是目前纳米材料领域研究的热点. 本文采用紫外辐射法制备了不同形貌和尺寸的金纳米粒子,在有机液相溶液中通过热化学还原法制备了不同形貌的贵金属铂纳米粒子和铂铅合金纳米棒.

(1)采用紫外辐射法研究了溶液 pH 值对金纳米粒子生长过程的影响,发现在低 pH 值条件下,粒子直接由团簇生长形成颗粒,并且粒子的尺寸和形貌分布不均. 当溶液接近中性条件时,粒子的生长经过了形核生长-团聚-聚集体瓦解-生长的过程,同时也伴随着粒子形貌和尺寸的变化. 利用紫外-可见吸收光谱表征了粒子形貌转变过程中光学性质的变化. 在高 pH 值条件下,粒子的生长仍然遵循形核-长大的生长过程. 本文探讨并解释了不同 pH 值条件下的粒子生长机制.

(2)当采用连续的紫外辐射法时,发现在保护剂 PVP 存在的条件下,所制备的粒子直径约为 2 nm,当无 PVP 时,高浓度的柠檬酸会导致金纳米片的形成. 当增加辐射时间、减低柠檬酸浓度时,粒子形貌出现了球形-三维珊瑚状-网状-多孔片状-完整片状的系列转变过程. 通过 TEM、HRTEM、紫外可见光谱等表征手段,揭示了片状金纳米粒子的形成和生长过程中存在的自修复机制.

(3)有机液相热化学还原法是合成具有特殊结构纳米粒子的最有效的方法之一. 通过改变反应参数,如温度、保护剂和还原剂种类、反应时间等,制备了具有不同表面类型的铂纳米粒子. 当优化反应条件后,合成了形貌独特的多臂三维铂纳米粒子,这种三维结构的铂纳米粒子可以自组装形成多孔的网状结构,是一种良好的纳米器件的“建筑”模块,并在燃料电池领域有极富潜力的应用价值.

(4)采用铂基合金纳米粒子是目前提高燃料电池催化剂性能的重要手段. 通过有机液相热化学还原法,合成了立方和六方相的铂/铅纳米棒. 实验发现,纳米棒生长初期形成的是铂元素占优的立方相纳米棒,随着反应时间增加或反应温度升高,这种立方相结构的铂铅纳米棒逐渐转变为六方相结构. 粒子相的转变伴随着形貌和长径比的变化;随反应时间增加和温度升高,粒子的长径比变小. 结合 XRD、HRTEM 和 EDX 的表征结果,探讨了粒子形貌和相转变机制.