



含有可变形界面的两相流和传递数值模拟

柳安军^{1,2}, 陈杰^{2,3*}, 杨超^{2,3*}, 毛在砂²

1. 天津大学化工学院, 天津 300350;

2. 中国科学院绿色过程与工程重点实验室, 中国科学院过程工程研究所, 北京 100190;

3. 中国科学院大学, 北京 100049

*联系人, 陈杰, E-mail: jchen@ipe.ac.cn; 杨超, E-mail: chaoyang@ipe.ac.cn

收稿日期: 2016-10-17; 接受日期: 2016-11-18; 网络出版日期: 2017-03-24

国家自然科学基金(编号: 21606234, 21490584)、国家重点基础研究发展计划(编号: 2016YFB0301701)和恩泽生物质精细化工北京市重点实验室开放课题资助项目

摘要 化工生产过程普遍涉及两相流动. 两相流的数值模拟研究发展迅猛, 对深入理解动量、热量和质量传递现象具有重要的指导意义. 建立两相流和传递过程的数学模型并进行数值求解, 特别是准确描述相界面的变形和运动, 是当今两相流数值模拟研究的重点和难点. 本文围绕含有可变形界面的两相流的数值模拟研究, 主要介绍了两种典型的模拟可变形界面的水平集(Level Set, LS)方法和边界元法(Boundary Element Method, BEM). 本文综述了近年来界面处理算法在含有可变形界面的两相流领域中的微流体、液滴撞击和溅落、气泡聚并破碎等数值模拟研究的现状和发展趋势. 最后简要描述了两相流界面间质量传递的数值模拟方法.

关键词 数值模拟, 两相流, 界面, 传质, 边界元, Level Set

PACS: 47.10.ad, 47.11.Hj, 47.11.-j, 45.20.df

1 引言

化工生产中的气液吸收、液液萃取、精馏、颗粒除尘、物料复合、物料输送、晶体生长、蒸发干燥, 石油开采中的地下油水两相流, 气体的燃烧和爆炸等, 都涉及多相流和界面的物理化学变化. 两相流动和界面行为的研究, 是深入认识多相流动机理和规律的科学基础.

通过先进的光学测量仪器(如粒子图像测速仪、多普勒测速仪、纹影仪等)观测流体流动, 在单相或者低相含率体系中具有良好的精度. 但在高相含率体

系或者界面存在物理化学过程(如蒸发、结晶等), 实验往往无法准确地观测到界面的形状和性质, 以及两相流体之间传热、传质和反应等相互作用. 为此, 很多研究人员采用数值模拟研究辅以实验验证和理论分析来进行两相流研究. 由连续介质假设推导出的Navier-Stokes方程加上相应边界条件可以准确地计算单相流动. 当涉及两相流时, 需要准确地表达相界面的形状和物化性质, 以及动量、能量和质量的相间传递. 从纳微尺度、颗粒尺度到设备尺度, 两相流行为表现不同, 两相间作用以及流体和固体壁面的相互作用也十分复杂, 目前还没有统一的理论用于揭示各个

引用格式: 柳安军, 陈杰, 杨超, 等. 含有可变形界面的两相流和传递数值模拟. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2017, 47: 070009
Liu A J, Chen J, Yang C, et al. Simulation of two-phase flow and mass transfer with deformable interface (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2017, 47: 070009, doi: [10.1360/SSPMA2016-00434](https://doi.org/10.1360/SSPMA2016-00434)

尺度的两相流行为机制. 含有可变形多界面的两相流数值模拟, 最核心的技术是对界面的处理, 需要针对不同的研究对象, 在准确性、鲁棒性、守恒性和易操作之间权衡择优, 考虑是否具有以下性能: (1) 准确描述界面的位置, 使界面始终保持在一定的误差内; (2) 满足计算精度的要求; (3) 能够处理各种界面的拓扑结构; (4) 易于拓展到三维数值模拟; (5) 能否体现流体相界面的真实物理化学性质. 因此, 针对各个尺度和界面处理的要求, 流体力学的数值模拟方法划分为微观(分子尺度)、介观(介尺度)和宏观方法(设备尺度)^[1]. 两相流数值模拟过程中的微观方法, 主要是在分子水平描述, 以分子动力学理论为基础, 结合量子化学相关知识, 求解微观粒子的运动方程. 目前主要有分子动力学(Molecular Dynamics, MD)方法和直接蒙特卡洛模拟方法(Direct Simulation Monte Carlo Method, DSMC). 在MD方法中单个粒子受分子间作用力驱动, 按牛顿第二定律运动, 而在DSMC方法中粒子团运动被认为是完全随机的, 这两种方法都是较新的方法, 但是计算量非常大^[1]. 介观方法, 主要以Boltzmann方程为基础, 以微观足够大、宏观足够小的流体分子微团作为研究对象, 采用分布函数描述流体分子微团, 同时其宏观平均行为又满足宏观微分方程. 经典介观方法有格子玻尔兹曼方法(Lattice Boltzmann Method, LBM)^[2]. LBM的基本思想是从微观粒子角度进行模拟, 应用动量、能量和质量守恒原理, 在分子运动论和统计力学的基础上, 通过简单的线性运算和松弛过程模拟复杂的非线性流体力学问题. 微观和介观方法并不涉及相界面的表述, 而是通过分子间的相互作用来描述两相之间的差异, 因此本文不对此展开讨论.

本文主要介绍宏观的界面处理算法. 宏观方法主要以连续介质假定为基础, 以及以动量、能量和质量守恒方程为基础, 加上边界条件, 描述流体流动. 流体流动本质上是复杂的非线性问题, 但是在特定的条件下, 如当两相流体系 $Re \leq 1$ 时, 忽略惯性项, 可简化成为Stokes方程. 这类线性问题既可以使用传统的界面处理算法求解, 也可以使用边界元法进行求解. 边界元法可以将Stokes方程通过格林函数或变分法转换为通过边界和界面上的点求解整个流场的边界积分方程, 将求解维度降低一维, 简化了计算; 但是当 Re 为有限值时, 要将广义Navier-Stokes方程转化为相应的边界积分方程, 需要更深厚的数学基础, 开

发难度增加. 该算法在界面处理上区别于传统的界面表述方法, 给界面处理算法的开发提供了新的思路. 当两相流体系 $Re > 1$ 时, 可以采用流体体积(Volume of Fluid, VOF)方法^[3-7]、波前跟踪方法(Front-tracking Method, FTM)^[8]、水平集(Level Set)方法^[9]、守恒水平集方法(Conservative Level Set Method)^[10]和相场方法(Phase-field Method, PFM)^[11-16]等捕捉界面, 并用一组Navier-Stokes方程同时求解两相流场, 因此这类方法也被称为“拟单流体”法. 由于Level Set方法界面处理发展较为成熟、有代表性, 本文以Level Set方法为主讨论含有可变形界面的两相流数值模拟, 并与其他类型的“拟单流体法”进行对比.

除了界面处理算法, 本文还重点阐述近年来界面处理方法在多种含有可变形界面的两相流体系的数值模拟研究. 最后, 简介两相流相间传质过程的模拟计算. 希望本文能够使读者在含有可变形界面两相流的研究中得到一些启发.

2 Level Set方法

Level Set方法是美国数学家Osher和Sethian^[9]合作提出的, 可以在任意空间维度上描述可变形界面, 广泛地应用于哈密顿-雅克比类型的问题. 在他们早期的文献中已证明该算法在解决各种界面变形、拓扑和移动等问题中的优越性, 比如火焰燃烧^[17]和晶体生长^[18]问题.

2.1 Level Set模拟两相流的数学模型^[19]

Level Set方法数学模型采用符号距离函数 $\phi(x, t)$ 标记两相流体质点到相界面的距离, 其定义为

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \min(\mathbf{x} - \mathbf{x}_s), \quad (1)$$

其中 S 表示界面, $\mathbf{x}_s$ 是界面位置点. 在 t 时刻 $\phi(\mathbf{x}, t) = 0$ 的位置合集为两相流分界面, 并指定连续相的 $\phi(\mathbf{x}, t)$ 大于0, 分散相中 $\phi(\mathbf{x}, t)$ 小于0. 运动界面的控制方程可以写成

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

Level Set方法关于界面力的表达一般用Brackbill等人^[20]提出的连续表面力模型(Continuum Surface Force, CSF), 将表面张力由表面力转化为体积力, 作为Navier-

Stokes方程中的体积力源项, 避免了将相界面力作为边界条件来处理的复杂性. 由于表面张力项的计算误差, 不可避免地会引发界面“寄生”流的问题. Son^[21]采用标准型和守恒型水平集方法分别对“寄生”流进行研究, 发现若采取尖锐的表面张力表示方法, 则必然会导致“寄生”流和震荡问题, 并且此问题不会随着优化网格而消失; 而采用常规化的表面张力表达方法, 则可保证界面处的力平衡, 但这种方法计算出的曲率不够准确, 仍然会引发“寄生”流. 由此可见, 提高曲率的计算精度才能有效地抑制“寄生”流. Wang等人^[22]提出权重计分法来提高局部曲率的精确度. 该方法在控制容积中所有网格节点上计算表面力, 并采用权重积分的方式计算控制点的表面力. 根据各网格节点到控制点的距离设置不同的权重因子, 成功抑制了因表面张力计算不准确而引发的“寄生”流现象. Coquerelle和Glockner^[23]开发了具有四阶精度的曲率计算方法以抑制“寄生”流. 该算法主要分为两步: 首先, 在单元网格上根据Level Set函数计算出具有四阶精度的局部曲率; 然后根据最近点原理, 准确地将曲率向邻近相界面进行拓展.

为了避免界面上物性参数的阶跃, Level Set方法在虚拟界面上使用光滑函数Heaviside函数处理两相流体的物性参数, 使其光滑过渡

$$H_\epsilon(\phi) = \begin{cases} 0, & \text{if } \phi < -\epsilon, \\ \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\phi}{\epsilon} + \frac{\sin(\pi\phi/\epsilon)}{\pi} \right), & \text{if } |\phi| \leq \epsilon, \\ 1, & \text{if } \phi > \epsilon. \end{cases} \quad (3)$$

Majumder和Chakraborty^[24]提出了一种新的“基于Level Set函数的体积分数”, 该参数是从流体物理性质导出的, 在数学形式上与Heaviside函数相似, 用来进行物性参数的光滑处理. 采用此方法对气液体系的模拟计算结果表示质量守恒良好. Huang等人^[25]认为采用Heaviside函数平滑两相流体物性参数需要十分精细的网格; 而采用幻影流体法(Ghost Fluid Method, GFM)^[26]显式处理界面处的物性参数阶跃问题, 但在曲线网格中处理变得十分复杂. 因此提出结合Heaviside函数和幻影流体法处理界面处的物性参数阶跃, 推导了速度、压力、密度、分子黏度和湍流黏度等近似阶跃条件, 表明该方法处理船舶流动等具有复杂边界的湍流问题有巨大潜能.

采用Level Set方法计算两相流时往往采用具有1–3个网格厚度的虚拟界面, 因此有必要在界面处加密网格, 保证界面的清晰程度, 但如果全局采用均匀细网格则会造成计算上的浪费. Yang和Mao^[27]采用了非均匀网格, 在界面附近采用均匀细密网格, 在全局采用逐渐疏松的网格; 同时在“密二倍”网格上进行Level Set函数的控制方程和重新初始化等方程的计算, 在保证计算精度的前提下提高了计算效率. 另外一种方式是采用动态网格法, 根据界面的位置实时调整网格设置, 保证界面处网格具有较高分辨率. Di等人^[28]耦合动态网格和Level Set算法用于两相流模拟. 动态网格的实施通常需要从计算域到物理场的变换. 在计算域上采用固定网格, 通过求解动态网格偏微分方程调整网格节点, 以达到在特定区域加密网格的目的. 但是动态网格的缺点也显而易见, 需要额外的网格重构等步骤, 大大增加计算负荷. 在非正交网格上, VOF方法需要复杂的几何计算进行界面重构; 相较而言, Level Set方法更适宜应用于非正交网格^[29], 在非正交网格上, Herrmann^[30]使用Level Set方法展示界面间的精细结构.

原则上可采用任意高阶的双曲方程标准格式离散Level Set函数 ϕ 的控制方程, 如五阶WENO (Weighted Essentially Non-Oscillatory)格式、三阶TVD (Total Variation Nonincreasing)格式, 因此对界面复杂的拓扑结构具有极强的处理能力. 但是, ϕ 随时间的演变并不保证符号距离函数的性质, 造成界面速度矢量和曲率的不精确和质量的不守恒. 所以在整个计算过程中 ϕ 需要频繁地进行重新初始化步骤. 高效且流行的重新初始化方法是使用以下偏微分方程:

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tau} = \text{sgn}(\phi_0)(1 - |\nabla \phi|), \quad (4)$$

$$\phi(x, \tau = 0) = \phi_0(x), \quad (5)$$

τ 是初始化的虚拟时间, ϕ_0 是某时刻 t 的水平集函数, $\text{sgn}(\phi_0)$ 是为了防止发散的一个光滑的符号函数

$$\text{sgn}(\phi_0) = \frac{\phi_0}{\sqrt{\phi_0^2 + L_\epsilon^2}}, \quad (6)$$

L_ϵ 是很小的量以保证分母不为零, (4)式保证了在初始化后界面上收敛到 $\nabla \phi = 1$.

除了求解上述双曲型方程执行Level Set函数的重新初始化之外, 通过直接计算网格点到界面的距离也

可始终保持Level Set距离函数的性质. 但是这种方法需要界面重构, 显式定义界面位置. Strain^[31,32]采用半拉格朗日方法重新计算距离函数, 并且引入基于树(二维空间上基于四叉树, 三维空间上基于八叉树)的自适应网格方法捕捉界面. Cho等人^[33]借鉴了Son和Hur^[34]的界面重构方法, 使用法向量和界面附近的Level Set函数值直接完成重新初始化.

2.2 Level Set方法的改进

传统Level Set方法导致质量损失主要有两方面的原因: 一是由于离散导致的数值扩散, 这个问题可以通过采用高阶或者守恒型离散格式解决; 二是为了保持距离函数的性质而执行重新初始化过程, 使界面偏离原来位置, 致使流体质量发生变化. 目前, 对这个问题的解决办法有两大类, 一类是通过与另外一种质量守恒型方法耦合, 充分利用两种算法的优势, 保证质量守恒, 比如, VOF方法、粒子水平集(Particle Level Set, PLS)方法、LBM、GFM、FTM等, 但是这些方法都大大增加了Level Set方法的复杂程度. 另一种是从方法本身出发, 开发守恒型Level Set方法. 还有一种方法是将Level set方法在有限元框架下结合, 试图通过非网格法描述两相界面.

2.2.1 Level Set方法与其他方法结合

Level Set方法和VOF方法^[3,35]相结合, 既保持了VOF方法的质量守恒性质又确保矢量和曲率等界面几何参数计算的准确性和便捷性, 因此两种方法的结合成为研究热点. Level Set方法和VOF方法结合有两种形式, 一种是耦合LSM-VOF法(CLSVOF)^[21,36,37], 该方法利用流场直接求解控制方程以更新Level Set函数; 另一种是VOSET^[38], 该方法利用VOF方法构造出的界面计算得到Level Set函数, 再进行修正.

Level Set方法与幻影流体法(Ghost Fluid Method, GFM)^[26,39,40]相结合, 利用GFM非常适合求解弱激波和界面相互作用问题的优点, 研究爆炸^[41]、相间传热^[42]和含有相变的化学反应^[43]问题.

Level Set方法与格子玻尔兹曼方法(LBM)结合, 使用格子玻尔兹曼方法用来计算流场, 水平集函数用于捕捉界面, 成功模拟了大密度比(密度比达1000/1)的不混溶两相流动^[44,45]. 另外, 利用LBM方法易于描述复杂几何形状边界的优势来求解含有复杂固体壁面

的多相流问题, 再用Level Set方法处理可变形气液界面或液液界面, 则可以求解涉及气液固三相的流体力学问题^[46].

Level Set方法与波前跟踪方法(Front-Tracking Method, FTM)^[8]结合. FTM是一种跟踪型方法, 采用拉格朗日思想, 引入标志点布置在界面上, 追踪标志点的运动, 即可显式地描述界面的运动状态. 该方法可以准确且可靠地模拟多个可变形相界面. 但是当界面发生剧烈变形, 甚至聚并和破碎时, 需要增加、删除甚至重新排列标识点位置, 以保证界面计算具有较为一致的网格分辨率. 因此, 考虑结合Level Set方法对界面拓扑强大的处理能力, 在必要的时候, 根据Level Set函数提供的重新生成界面标识粒子集. 这种结合了FTM和LSM的新方法, 也称为等高线重构法(Level Contour Reconstruction Method, LCRM)^[47]. Basting和Weismann^[48]通过引入水平集函数隐式地表示界面几何形状, 并利用水平集函数拓展了标准动网格和波前跟踪方法描述几何结构的灵活性.

2.2.2 守恒水平集方法

Olsson和Kreiss^[10]提出了守恒水平集方法(Conservative Level Set Method, CLSM), 解决了质量损失问题同时保留了Level Set方法的便捷性. 该方法提出采用以下Heaviside函数取代传统的符号距离函数:

$$H(\phi) = \begin{cases} 1, & \text{if } \phi > 0, \\ \frac{1}{2}, & \text{if } \phi = 0, \\ 0, & \text{if } \phi < 0, \end{cases} \quad (7)$$

其中 ϕ 是Level Set方法中的符号距离函数, 采用两部分进行 ϕ 的输运以捕捉界面运动. 首先使用一个标准方法对(2)式进行求解, 然后在每一步结束后增加一个人工压缩项^[49]保持 ϕ 的光滑轮廓和过渡层的厚度. 两个步骤都使用守恒的二阶近似, 因此 ϕ 被守恒积分, 很好地保证了界面的形状和轮廓. 数值实验表明, 采用二阶精度离散格式就可以确保界面区域的准确模拟.

Sheu等人^[50]在2009年模拟气液两相流动采用了两步推进界面的CLSM算法. 为了保持极薄虚拟界面的清晰度, 除了界面输运过程, 同时考虑了界面的非线性和稳定性特征. Zhao等人^[51]在有限元框架下使用改进的CLSM方法模拟两相流, 发现标准Level Set方法可以顺利捕捉到界面, 并正确计算界面法向量, 但不

能保证质量守恒; 而CLSM方法表现出很好的质量保护性能, 但是通常界面法向量的计算不够精确. 为了解决这个问题, 他们提出在CLSM方法中仍然采用标准Level Set方法而非Heaviside函数计算界面曲率等参数, 模拟结果证明这样的改进可以在中等网格水平上准确捕捉到复杂界面的细节, 同时具有良好的质量保护性能.

2.2.3 Level Set方法在有限元框架下模拟两相流

大多数Level Set方法计算两相流使用有限体积(Finite Volume Method, FVM)和有限差分(Finite Difference Method, FDM)进行离散, 近些年也有许多研究在有限元(Finite Element Method, FEM)框架下执行Level Set算法模拟两相流. Marchandise和Remacle^[52]使用无积分间断Galerkin有限元法结合Level Set方法求解不可压缩两相流问题. 该算法使用了一种快速轮廓法准确地表示界面, 避免了虚拟界面厚度假设和重新初始化步骤. Cho等人^[53]使用一个Q2Q1(速度二次、压力一次)的FEM/Level Set方法用来模拟有表面张力的不可压缩两相流. 使用Q2Q1有限元方法插值Level Set函数, 通过Taylor-Galerkin方法计算Level Set函数对流方程, 并采用直接接近法完成Level Set函数的重新初始化. 该方法显式处理表面张力, 因此时间步长可高于临界步长. Pochet等人^[54]使用Level Set方法和间断Galerkin格式模拟非定常不可压缩惯性两相流. 由于Navier-Stokes方程和Level Set方程的强烈耦合, 采用了Riemann界面通量以保证稳定性. 模拟证明了该方法适用于大密度比和大黏度比两相流; 与低阶的FEM求解器相比具有更好的质量和能量守恒性. Basting和Weismann^[55]发展了新的有限元方法模拟两相流, 该方法最主要的特点是不仅采用Level Set函数隐式表达界面, 同时采用黑箱优化方法调整计算网格使之显式地表示界面, 保证网格质量最佳且不改变网格的拓扑结构. 显式界面可准确处理界面处压力间断, 同时采用变分法可准确估算表面张力. Pillapakam和Singh^[56]将Level Set/FEM方法应用于黏弹性两相流问题的模拟. Quecedo和Pastor^[57]在有限元方法基础上采用Level Set方法求解大密度比两相流. 一方面, 对速度和压力场均采用高效且准确的三节点三角形网格, 为求解Navier-Stokes方程提供了必要的稳定性条件. 另一方面, 使用距离函数 ϕ 描述界面位置. 在每个时间步的

最后, 修正伪浓度函数(Pseudo-Concentration Function, PCM), 可以保证大密度比的两相流模拟的精度. Shepel和Smith^[58]采用有限元方法求解Level Set函数控制方程. 该方法可以模拟密度比达到100–1000和黏度比高达70000的等温两相流动问题, 方法相对简单且收敛性好. 作者将该方法与商业CFD软件CFX4耦合, 极大地拓展了该方法的应用.

Level Set方法由于其突出的界面处理优势在两相流数值模拟中得到了广泛的应用, 已发展了成熟的数学模型和丰富的改进手段. 近年, 应用Level Set方法研究了诸多两相流问题, 如模拟大密度比两相流体^[58–61]、具有磁场力的两相流体^[62,63]、物体投影分布恢复的断层图像重建技术^[64]、两相Stefan问题的自由界面的最优控制(运动规划)^[65]、容器内液体的晃动和移动物体产生的自由表面波^[66]等.

3 边界元法(Boundary Element Method, BEM)

实际上边界元法并非是一种专门的界面处理方法, 而是继有限元之后发展起来求解偏微分方程的一种算法. BEM不需要对整个计算区域进行离散化处理, 只需对边界进行离散和求解. 因此可使待求问题的空间维数降低一维, 所需内存和计算时间大大减少. 与有限差分法、有限体积法和有限元法相比, 具有很强的竞争能力^[67]. BEM通过广义的Green公式将所研究问题的控制微分方程和边界条件变换成为相应的边界积分方程形式, 然后再离散边界积分方程, 进行数值求解. 1828年, Green对位势问题提出了三个Green等式, 其中包括将问题的解表示为单层势和双层势的积分表达式^[68]. 边界积分法具有较高的计算精度, 当插值函数能够精确描述边界变量的分布时, 边界积分法将没有离散误差只有舍入误差. 由于边界积分法降低计算维度, 带来一个重要的好处是便于模拟复杂的几何形状. 在应用边界积分法求解液滴的运动过程中, 液滴界面变化可以通过对界面上一系列离散点的速度进行时间积分求得. 边界元法已经被成功用于求解液滴变形、破裂和聚并的问题^[69,70].

3.1 Stokes两相流的边界元法求解

由于爬流条件下的Stokes方程较为简单, 在边界

元两相流研究中较为广泛. 早在1985年, Higdon^[71]用边界元法模拟一个任意区域二维Stokes流, 表明边界元法可提供一个准确高效、易于实现的Stokes流的解决方案. 文章中模拟了多种简单的剪切流流动形式, 如圆柱形、矩形、脊和空腔流; 详细地分析了沿着固体壁面的流线、速度分布、剪切应力, 同时也指出该方法限制于在低 Re 数下的流动. Occhialini等人^[72]结合谱方法和边界元法, 首先使用经典的边界积分谱方法模拟稳定的Stokes黏性流, 然后扩展了此方法进行非定常的Navier-Stokes方程的求解.

使用边界元描述气泡在黏性拉伸流中的运动变形过程, 当时间步是显式时, 时间步长需要足够小^[73]. 为了避免这种困难, Dimitrakopoulos^[74]开发了一种全隐式的时间积分算法, 通过Jacobian-Free三维牛顿方法导出了数学严谨的隐式组合公式. 该算法保持了隐式时间积分的稳定性, 因此不受Courant条件和物理刚性(比如界面变形条件)的影响. 该隐式算法可通过波谱边界元法来实现. 自由悬浮液滴的数值结果与实验结果吻合良好, 进而建立了全隐式波谱边界元算法. Pozrikidis^[75]以其专著^[76]为基础, 推导了Stokes方程的边界积分方程, 并全面综述了有关Stokes流界面动力学的理论和计算.

Dimitrakopoulos和Wang^[77]通过引入Stokes方程的基础解和互易定理, 无限拉伸流场中单个液滴表面 S 上点 x_0 的速度, 可以用边界积分方程表示为

$$(1 + \lambda)\mathbf{u}(x_0) - 2\mathbf{u}^\infty(x_0) = -\frac{1}{2\pi\mu} \int_S [\mathbf{S} \cdot \Delta \mathbf{f} - (1 - \lambda)\mu \mathbf{T} \cdot \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}] dS, \quad (8)$$

p 为动压力, μ 为液体黏度, $\mathbf{u}$ 为速度向量, λ 是内外液滴黏度比. $\mathbf{S}_{ij}$ 是速度 $\mathbf{u}$ 的基础解, $\mathbf{T}_{ijk}$ 是 σ 的基础解, 分别定义为

$$\begin{cases} \mathbf{S}_{ij}(\hat{\mathbf{x}}) = -\delta_{ij} \ln r + \frac{\hat{x}_i \hat{x}_j}{r^2}, \\ \mathbf{T}_{ijk}(\hat{\mathbf{x}}) = -4 \frac{\hat{x}_i \hat{x}_j \hat{x}_k}{r^4}, \end{cases} \quad (9)$$

式中 $\hat{x}_i$ 等于 $x - x_0$, r 等于 $|\hat{\mathbf{x}}|$ 为界面上任意一点的距离. 其中

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{f} &= \mathbf{f}^{CP} - \mathbf{f} \\ &= \sigma(\nabla \cdot \mathbf{n})\mathbf{n} + (1 - k)\rho(\mathbf{g} \cdot \mathbf{x})\mathbf{n}, \end{aligned} \quad (10)$$

$\mathbf{n}$ 为法向量, k 为密度比.

边界元法在求解过程中只以边界变量为基本变量, 要求解域内未知量时, 需要根据边界变量结合相应的边界积分方程求得.

3.2 Navier-Stokes两相流的边界元法求解

经典的边界元法求解两相流问题限制在Stokes方程的求解上, 限制了边界元在两相流中的应用. 文献中开发了一些混合的边界元法来求解完整的Navier-Stokes方程. Power和Botte^[78]展示了在三维空腔中使用边界元法求解Navier-Stokes方程的数值算法, 将其作为非齐次Stokes方程来求解. 积分格式来自于先前的Stokes方程, 利用非齐次Stokes方程的特殊解来获得完整问题的迭代, 解决了一些非线性问题, 适合于低 Re 数的流体流动. Young等人^[79]在欧拉-拉格朗日边界元法使用速度涡量法求解Navier-Stokes方程. 欧拉-拉格朗日边界元法(Eulerian-Lagrangian Boundary Element Method, ELBEM)是欧拉-拉格朗日方法和边界元法的结合. ELBEM克服了传统的BEM方法不能处理流动场中的任意速度的缺陷. 通过迭代求解包含速度和涡量的速度泊松方程得到螺旋涡成分. 速度泊松方程使用边界积分格式求解, 涡量运输方程使用ELBEM方法求解. 作者计算了低 Re 数下在典型空腔流动的二维Navier-Stokes问题, 和以前的方法相比, 结果令人满意, 该方法可适用的最大 Re 数可达2000. Bozkaya和Tezer-Sezgin^[80]耦合空间上的二重互易边界元法(Dual Reciprocity Boundary Element Method, DRBEM)和时间上微分求积分(Differential Quadrature Method, DQM), 按照涡量方程和流函数方法求解二维非定常Navier-Stokes方程. 在DRBEM方法上, 涡量运输方程的时间导数项和对流项在方程中作为非均匀性质并通过径向基函数来近似. 联合流函数和涡量泊松方程的解, 获得速度分量, 反过来求解涡量运输方程. 涡量运输方程的DRBEM格式在初始值问题上使用时间的一阶常微分方程. 程序大体上是通过流函数之间的迭代, 涡量运输和能量方程模拟空腔流中的二维自然对流问题.

边界元法使用格林函数求解运动方程得到边界积分方程, 可以有效地降维. 边界元法继承了有限元的特点, 但其局限于Stokes方程的求解, 难以处理高 Re 数流动的Navier-Stokes方程. 虽然边界元算法在处理

可变形界面上不够成熟,但是边界元具有高精度低计算负荷的优势,可充分发挥其在低 Re 数下两相流领域的作用,模拟界面上的精细结构,给界面处理的方法提示了一种发展方向.

4 界面处理用于不同类型两相流数值模拟

如前面所述,两相流的模拟方法难点在于复杂相界面的处理,因此需要根据尺度和相态的不同而进行单独研究.近几年来,学者们使用两相流可变形相界面的表达方法对气泡的破碎与聚并、液滴的撞击和溅落、微纳流体^[81-83]、多孔介质内两相流动^[84-90]、波浪运动^[91-96]、含相变(如蒸发、凝固、熔融等)的两相流^[97-101]等两相流问题进行了较为广泛的模拟研究,对工业设计具有参考价值.

4.1 气泡破碎与聚并的数值模拟

气泡运动规律的研究一直是国内外研究的热点.气泡在液体中受到重力、浮力和表面张力的作用,呈现出复杂且不稳定的运动行为,比如变形、震荡以及破裂和聚并等现象.数值模拟可以获得界面的瞬间变化以及内部流场信息^[102,103].

Youngren和Acrivos^[73]使用边界元法求解Stokes流,模拟气泡在黏性拉伸流中的运动变形. Guignard等人^[104]使用半拉格朗日流体体积法(Segment Lagrangian-Volume of Fluid, SL-VOF)模拟斜面上的孤立波破碎过程,该过程涉及气液固三相界面的处理,与边界元法对比,SL-VOF方法能够更加精确地模拟界面对整个流场的影响.

Wang等人^[105]使用二阶混合水平集流体体积约束(Hybrid Level Set-Volume Constraint, HLSMVC)方法数值模拟变形气泡和液滴,给出3点新的贡献: (1) 一个新的强制约束气泡和液滴的数量方法; (2) 一个新的二阶半拉格朗日窄带水平集初始化算法; (3) 一个气相流动中的液体射流的线性稳定分析数值方法. Deen和Kuipers^[106]提出一种使用VOF方法的分散气泡两相流中壁液传热的直接数值模拟(Direct Numerical Simulation, DNS)方法. VOF方法涉及一种基于分段线性界面表示的界面重构技术,表面张力采用Brackbill的CSF模型三维形式. 该模型应用到液体和热壁的热交换速率的计算,热壁保持固定的温度. 发现由于气泡中的搅动,液

体和壁面之间的传热速率大大提高,特别是在壁面附近气泡聚并较多的地方. 李彦鹏和关卫省^[107]将Level Set方法与隐式连续流体欧拉(Implicit Continuous-Fluid Eulerian, ICE)^[108]数值格式结合,建立了求解含有运动界面的不可压缩气液两相流动问题的三维数值解法,能准确方便地捕捉到三维气泡和液滴破碎与融合等拓扑结构的变化.

Pillapakkam和Singh^[56]研究了简单剪切和压力驱动流中液滴的变形和宽范围的毛细管数和德博拉数(Deborah Number)^[109]条件下重力驱动的气泡变形. 作者发现,对于一个静态的黏弹性液体中上升的牛顿型气泡,气泡被假定有一个尖尾巴的特征形状,但是在气泡前端仍然是圆形的. 而液滴的前端靠近通道中心,受压力作用成为圆形,尾端靠近通道壁而变得尖锐形.

Müller等人^[110]数值模拟研究了气液两相流中气泡的破碎,可以预测气泡分裂、破碎、液体喷射等物理现象,并通过激光空泡的实验观察与之对比. Sattar等人^[111]对湍动气泡流中气泡的碎裂和聚并进行了数值预测,考虑了湍流下的气泡破碎以及湍流和层流剪切下气泡的聚并. La Forgia等人^[112]对气泡在流场中生长进行了研究,使用扩散界面法(Adaptive Stencil Diffuse Interface Method)分辨界面,用体积力来表达表面张力.

4.2 撞击和溅落的数值模拟

液液体系两相流中以液滴为分散相最为常见,也更为复杂. 工程中,复杂的液滴行为,如液滴和液滴的碰撞聚并、液滴溅落到液面上以及液滴撞击到固体壁面引发的飞溅等,都受到极大关注. 比如,发动机中燃油液滴撞击在管壁或者燃烧室壁时,会在壁面上铺展开形成液膜,或者飞溅生成更细微的雾滴. 最早,Wood^[113]通过拍照记录下了液滴撞击在固体壁面上的壮丽景观,并随着高速摄像技术的发展,在液滴撞击和飞溅领域积累了大量的观测资料和实验研究.

在较低 Re 数下,两个液滴迎面碰撞结果有4种情形: (1) 完全弹回; (2) 聚并为一个液滴; (3) 部分聚并,并产生一个子液滴; (4) 在较高运动速度下粉碎或者破裂为多个液滴. 如果采用光滑边界条件,并不考虑润湿效应,液滴在干燥壁面上的撞击有如下3种情形: (1) 完全弹回; (2) 沉积,比如液滴在固体壁面上完全铺展; (3) 破碎或飞溅成许多更小的液滴. 实验发现,当液滴撞击到湿壁面或者更深的液池中也会发生相似的情

况. 当液膜厚度大于液滴直径时, 会在液滴没入的位置形成一个形似弹坑的凹陷, 当液面恢复时, 可能会产生一个气泡, 即所谓的常规夹带(Regular Entrainment)^[114]. 规则气泡区是一个中间状态, 液滴撞击速度过大或过小都不会产生气泡^[115]. 研究液滴碰撞和飞溅行为的相关无量纲数有 We , Re , Oh 和 Fr . 通常实验研究往往导致实验点过于分散, 或者 We 和 Re 的范围小. 采用数值模拟方法则可以突破这些局限. Harlow和Shannon^[116]首次简化了液滴撞击、溅落和飞溅等行为的数学模型, 忽略黏性和表面张力, 采用原始的MAC (Marker And Cell)方法进行了数值研究. Foote^[117]同样采用了MAC方法, 但考虑了黏性和表面张力的作用, 反弹的液滴行为模拟与Bradley和Stow^[118]实验相吻合. Nobari等人^[119]采用FTM模拟了两个等大液滴迎面碰撞并完全弹回的过程. 通过模拟结果拟合得出液滴碰撞挤压过程中会达到一个最大半径 R_{max} , 其正比于 $We^{1/2}$. Luo等人^[120]使用改进的Level Set方法计算了液滴迎面碰撞部分聚并并产生子液滴的过程和液滴溅落在液面上的过程, 与实验结果对比验证了算法的准确性, 并进而计算了三维的液体雾化过程. 除了固定网格技术, Fukai等人^[121]采用运动有限元法研究了液滴润湿效应.

当液滴在空气中碰撞, 液滴中间会形成很薄的空气膜, 当空气膜破裂, 两个液滴局部连接起来. 采用数值模拟继续进行计算时, 需要足够小的网格尺寸(约为1–10 nm)才能准确描述空气膜中气体排出过程. 目前, 可以采用自适应网格加密技术在二维计算中可达到10 μm , 在三维计算中可达到100 μm , 而这远没有达到要求. 现行的方法中一种采用FTM方法, 从物理角度设置合理的法则, 据此让气膜破裂、液滴局部聚并; 另一种采用VOF或者Level Set方法, 当液滴表面同时存在同一个网格中, 则自然发生聚并, 采用光滑标识的核函数的办法, 可降低对网格精度的要求.

4.3 微流体的两相流数值模拟

微流体学是利用几微米到几百微米的通道来混合、传感、输送、检测和控制微量流体的新兴学科. 微反应器或微流体系统一般由微量注射泵、微型阀、微型传感器和微通道构成, 可控制微量流体的压力、流量和流动方向. 与传统反应器相比, 微反应器的主要优点有: 具有很高的比表面积, 提高了传热传质速率并降低了能耗; 反应器中样品需求量少, 提高了化

学反应过程的安全性; 由于自动控制技术的发展, 可以利用微反应器生产出可控粒径且具有复杂结构的乳液产品. 因此, 微反应器在生物、材料、化工领域得到迅速而广泛的发展. 但是微反应器若要取代传统反应器进行大规模生产, 还需解决微通道易堵塞、放大环节中并联设计和精准控制等问题.

微反应器内流体的速度分布和压力分布是控制液滴形成过程和形状的重要参数, 但目前, 仍很难通过实验获得准确的速度和压力数据. 幸运的是, 由于微反应器尺度小, 流体受黏性力的影响远超过惯性力, 一般情况下为层流状态. 因此, 采用直接数值模拟方法研究微流体行为成为主流. Bashir等人^[122]在T型微通道中模拟了微乳滴的生成, 预测结果发现T型通道上游的压力分布对连续相湿润能力十分敏感, 通道润湿特性是影响液滴断裂的重要因素. 为了进一步研究T型微通道液滴形成动力学, Bashir等人^[123]对不同流体的流量比、毛细管数、黏度比和表面张力等参数进行了探索, 数值模拟发现两相流体之间的润湿能力竞争会引起不稳定的流动模式, 导致液滴破裂和液滴尺寸不均. 因此实验过程中应尽量平衡两相流体的润湿能力. Pinilla等人^[124]使用Level Set方法模拟两不混溶的牛顿流体-黏弹性流体在二维微通道中的流动, 使用Oldroyd-B流变模型来描述黏弹性行为并依据Cox定律描述动态接触角, 采用高精度的WENO五阶离散格式并采用罚函数法描述复杂固体边界, 准确地模拟了三相接触点的位置变化. 在数值模拟中也发现, 黏弹性流体比牛顿流体更容易在微通道中流动.

受流体驱动方式、微通道材料、尺寸和结构等多种因素的影响, 微通道内气液和液液两相流的流型转换问题备受关注, 但微通道内普适性的流型转换理论尚在发展中. Wang等人^[125]使用数字视频录像(Digital Video Recorder, DVR)系统记录微通道内气液两相流的4种不同流型(段塞流流型、塞环状流、环状流和平行分层流)以及它们的转换, 并且考察了流道壁的材料性质和润湿性对流型及流型转变的影响. 有别于以前只将流体性质与微通道中气液两相流型转变相关联, 作者提出了流体性质和微通道润湿性能的新的关联式. Grzybowski和Mosdorf^[126]使用COMSOL Multiphysics软件结合Level Set方法模拟了在3 mm微通道内的气液两相流, 观察到泡状流和两种液弹长度不同的弹状流. 研究表明, 通道入口的不稳定流动导

致气泡和液滴尺寸的混沌特征,降低液速可以获得更加稳定的两相流型.

微反应器的另一个重要应用领域是乳液制备. 多层乳液滴是制备微胶囊的重要手段,中间的保护介质可以控制药物从一相到另一相的释放,因此微胶囊具有很好的靶向作用. 目前,可以通过微流控制备出具有复杂结构的多层乳液滴. 在微通道中多重乳液滴的变形和破碎是其药物运输和释放的关键过程. Wang等人^[127]开发了一种边界元法研究具有任意数量内部液滴、任意乳液层数以及具有多种不对称结构的多重乳液滴流变行为. 在拉伸流中,随着层数和内部液滴数量的增加,内部液滴之间的碰撞增加导致乳液滴间更加强烈的碰撞. Wang等人^[128]设计一种在低 Re 数下的微流控装置,精准地控制进出口流量,研究了将小液滴黏附到特殊位置的微流控技术并采用边界元法进行模拟. 在微流控装置中心腔的拉伸流和旋转流交替作用下,发现小液滴可以依次黏附在主液滴的指定位置,从而制造出按固定角度布置的子颗粒的液滴. Tao等人^[170]采用边界元算法,研究了多重乳液滴在突缩微通道中的形变和流变性质. 作者实验观察了3种类型的多重乳液,即核壳型双重乳液滴、具有多于两层的同心多层乳液滴、包含多个内部液滴的双乳液滴,并采用边界元法模拟计算了核壳型双重乳液滴的流变特性. 研究表明,在同样的体积流率下,3种结构乳液滴在经过突缩微通道时的行为大致相似,但是由于内部结构的不同,乳液滴内部的流动行为会发生改变,并且内部结构越复杂,进出口压差越大.

5 相间传质的数值模拟

随着计算技术的发展,高效地数值求解Navier-Stokes方程和对流扩散传递方程耦合问题已经发展成为重要的趋势. 为了探索复杂多相系统之间的传质问题,单个液滴与连续相间的传质问题已经用简化模型进行了深入的实验和模拟研究^[129]. 作者总结了单一液滴与连续流体相间的传质问题,表明虽然单个液滴运动的解是唯一的,并不会出现混沌,但目前只能求出特定的简单问题的解析解,对于实际的复杂系统,以前的实验数据和理论分析往往不能完全揭示问题本质,所以需要结合经验和半经验方法完成这些任务.

随着界面模拟技术的发展,在可变形界面上的相

间传质过程得到了极大的关注. 两相传质时,在界面上需要满足溶解平衡和通量连续条件

$$c_2 = mc_1, \quad (11)$$

$$D_1 \frac{\partial c_1}{\partial n_1} = D_2 \frac{\partial c_2}{\partial n_2}, \quad (12)$$

c 为溶质浓度, D 为分子扩散系数, n 表示法向坐标. 下标1, 2分别表示连续相和分散相.

Yang等人^[130,131]研究了单个球形液滴在低 Re 数下简单拉伸流场中的传质运动,在球坐标系下以界面为边界严格满足以上边界条件. 详细考察了 Pe 数、液滴内外黏度比、扩散系数比、分配系数及拉伸方向等各种因素对传质 Sh 数和浓度场分布的影响规律. 若采用VOF, Level Set等方法模拟相间传质时,则因为分配系数 m 往往不等于1,而造成界面上浓度和浓度梯度的双重间断. 如果采用磨光函数处理两相物性参数的方法处理浓度及扩散系数等参数,会导致严重的数值扩散,计算精度远远低于动量控制方程. 下面介绍几种处理浓度不连续问题的方法.

Haroun等人^[132]采用VOF方法计算了层流液膜上化学反应过程,将边界条件(11)和(12)式集合为一个源项,置于对流扩散传质方程中

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla c_i = \nabla \cdot (D_i \nabla c_i + \Phi_i) + W_i, \quad (13)$$

$$\Phi_i = \left(D_i \frac{c_i(1 - m_{D,i})}{\phi + m_{D,i}(1 - \phi)} \nabla \phi \right), \quad (14)$$

其中 W_i 表示化学反应的源项. 上述方程组可以将间断的浓度界面磨光,但是在某些情况下不易收敛.

Kenig等人^[133]则采用特定的系数将边界条件(11)和(12)式控制在虚拟边界层中

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_2}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla c_2 &= \nabla \cdot (D_2 \nabla c_2) \\ &+ \alpha_1 \left(D_1 \frac{\partial c_1}{\partial n} + D_2 \frac{\partial c_2}{\partial n} \right), \end{aligned} \quad (15)$$

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla c_1 = \nabla \cdot (D_1 \nabla c_1) + \alpha_2 \left(c_1 - \frac{c_2}{m} \right), \quad (16)$$

其中 α_1 和 α_2 在界面处取值比较大(如 10^4),在主体相中取0. 由于分配系数耦合在传质方程中,故这种方法可以计算分配系数可变的传质过程. 使用泛函数法分别

在两个方程中各实现一个边界条件, 对两个相中的浓度场产生的影响不对称.

Yang和Mao^[27]提出的浓度变换法, 对两相浓度值做如下变换, 即可得到全场连续的浓度场

$$\hat{c}_1 = \sqrt{m} c_1, \quad (17)$$

$$\hat{c}_2 = \frac{c_2}{\sqrt{m}}, \quad (18)$$

则边界条件可以写成

$$\hat{c}_1 = \sqrt{m} c_1, \quad (19)$$

$$\frac{D_1}{\sqrt{m}} \frac{\partial \hat{c}_1}{\partial n_1} = \sqrt{m} D_2 \frac{\partial \hat{c}_2}{\partial n_2}. \quad (20)$$

两相中的传质方程变换为

$$\frac{\partial \hat{c}_1}{\partial(\sqrt{m}t)} + \frac{1}{\sqrt{m}} \mathbf{u} \cdot \nabla \hat{c}_1 = \nabla \cdot \left(\frac{D_1}{\sqrt{m}} \nabla \hat{c}_1 \right), \quad (21)$$

$$\frac{\partial \hat{c}_2}{\partial(t/\sqrt{m})} + \sqrt{m} \mathbf{u} \cdot \nabla \hat{c}_2 = \nabla \cdot (\sqrt{m} D_2 \nabla \hat{c}_2). \quad (22)$$

因此, 各相中的时间、速度和扩散系数也定义为

$$\hat{t}(\phi) = \begin{cases} \frac{t}{\sqrt{m}}, & \text{if } \phi < 0, \\ \sqrt{m} t, & \text{if } \phi \geq 0, \end{cases} \quad (23)$$

$$\hat{\mathbf{u}}(\phi) = \sqrt{m} \mathbf{u} + \left(\frac{1}{\sqrt{m}} \mathbf{u} - \sqrt{m} \mathbf{u} \right) H_e(\phi), \quad (24)$$

$$\hat{D}(\phi) = \sqrt{m} D_2 + \left(\frac{1}{\sqrt{m}} D_1 - \sqrt{m} D_2 \right) H_e(\phi), \quad (25)$$

其中 $H_e(\phi)$ 是基于Level Set函数的Heaviside磨光函数. 经过以上变换, 可以方便地将浓度场的界面边界条件耦合到对流传质的扩散方程, 使之成为全场统一的传质控制方程, 即拟单相的传质方程

$$\frac{\partial \hat{c}}{\partial \hat{t}} + \hat{\mathbf{u}} \cdot \nabla \hat{c} = \nabla \cdot (\hat{D} \nabla \hat{c}). \quad (26)$$

浓度变换法的优点是消除了界面处的浓度和浓度梯度的双重间断, 界面的特殊性消失, 大大减小了浓度场求解的数值误差. 采用浓度变换法对单液滴及连续相间的传质过程模拟计算, 与实验值对比偏差可满足工程要求. Wang等人^[134]采用改进的Level Set方法耦合浓度变换法求解单液滴的非稳态运动及相间

传质过程, 进一步提高了计算精度.

上述三类方法均可方便地处理相间传质过程中相界面处浓度间断的问题, 但也将导致界面区域的扩散情况与实际物理模型中的扩散情况有差异, 因此出现较严重的数值扩散. 为此, Cheng等人^[135]引入了Semi-Lagrangian (SL)格式处理质量传递方程中的对流项. 拉格朗日类方法本身具有的高度守恒性对数值扩散问题会有很好的抑制作用. Radl等人^[136]指出该方法具有高精度, 在大 Pe 数下, 对具有较大溶质浓度梯度的传质边界层进行了准确模拟.

6 结论与展望

界面捕捉和处理是两相流和图像处理等领域的核心问题. 处理两相流界面的方法多种多样, 每种方法的基本思想, 优缺点如表1所示. 在处理具体问题时, 需权衡利弊, 选择合适的方法. VOF方法、Level Set方法等均采用某个标记函数, 在流场求解完成之后, 通过推进标记函数的控制方程以计算界面变形和运动. 而边界元法首先直接将相界面和边界作为求解域求出相应的值, 然后再对整个流场求解. 两大类方法各有优势, 为成功模拟两相流流体力学行为和相间传质提供了很好的工具.

Level Set法近年来广泛应用在气泡破碎与聚并、颗粒两相流、纳微流体、多孔介质内两相流、含相变(如蒸发、凝固和熔融等)的两相流动等领域. 其中, 气泡变形及复杂拓扑变化和晶体无定形生长等问题更提高了对界面模型精度和效率的要求. 因此, 在高 Re 数下, 两相流动相界面的剧烈变形、破碎与聚并等行为仍需进一步研究高精度高效率的新算法. 目前来看, 联合各种算法的优势开发混合型算法是行之有效的途径之一. 比如, 将Level Set方法与其他界面处理方法进行耦合, 保留Level Set方法处理界面拓扑变化的能力, 又弥补其质量不守恒等缺点. Level Set方法一般在采用有限体积和有限差分法离散计算, 也有一些采用有限元离散模拟的研究工作.

边界元法因其在具体问题上对偏微分方程转化为边界积分方程的复杂性, 目前在化工计算流体力学领域不够活跃, 但是由于其使用理论分析的手段进行降维, 减少误差和计算量, 仍旧对科技工作者具有一定吸引力.

表 1 界面追踪技术一览
Table 1 An overview of interface tracking method

方法	基本思想	优点	缺点
IR-VOF 方法	定义体积函数, 分别取数值0和1指示某一相在界面两边的体积分数	体积和质量守恒	格式较为复杂, 曲率计算不精确
Level set方法	采用符号距离函数表征流体质点到界面的距离, 该函数的零水平集即为界面	概念简单, 易实现; 对界面拓扑变化具有极强的处理能力; 易于计算曲率等界面几何性质参数	需要重新初始化, 保持符号距离函数的性质; 质量损失
波前跟踪方法	采用粒子标记界面, 追踪标记粒子的轨迹, 显式地描述界面运动行为	精确稳定	需要储存大量标记粒子信息; 当界面发生聚并和破碎等剧烈拓扑变形时需要根据特别的判断法则并重新分配标记粒子
相场方法	采用具有物理意义的参数标记两相流体, 界面是具有连续变化物理性质的有一定宽度的相间过渡区域	无需显式追踪界面; 界面具有真实的物理意义	计算量较大, 限制其在较大尺度领域内的发展
边界元法	将偏微分方程转换为相界面上的具有基本解的边界积分方程	计算维度降低一维; 没有离散误差只有舍入误差	对于复杂的方程, 难以求出基础解

众多的界面处理手段广泛应用于可变形界面的两相流数值模拟中. 由于微流体似于爬流, 因此边界元法可以应用在微流体中的气泡破碎和聚并的研究. 相比于边界元法, Level Set方法目前研究极为广泛, 各种类型两相流问题的数值模拟都有应用. 将边界元法和Level Set方法两种方法的思想相互结合, 将是一个值得尝试的问题.

化学化工中的溶解、化学反应等都会涉及两相质量传递, 由于界面上物性参数的间断, 增加了数值模拟相界面上传质的难度. 浓度变换法通过一个简单的数学变换将界面上的质量传递有关变量连续起来, 浓度变换法与边界元法结合模拟两相流的相间传质, 可能是一个值得探索的数值模拟问题.

参考文献

1 Wörner M. Numerical modeling of multiphase flows in microfluidics and micro process engineering: A review of methods and applications. *Microfluid Nanofluid*, 2012, 12: 841–886

2 Succi S. *The Lattice Boltzmann Equation for Fluid dynamics and Beyond*. Oxford: Oxford University Press, 2001. 1–10

3 Hirt C W, Nichols B D. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *J Comp Phys*, 1981, 39: 201–225

4 Deng B. A numerical study on three-dimensional fluid flow with free surface based on gas-liquid two-phase flow model (in Chinese). Dissertation for Master Degree. Changsha: Changsha University of Science And Technology, 2010 [邓斌. 气液两相流三维自由面流动问题的数学模型研究. 硕士学位论文. 长沙: 长沙理工大学, 2010]

5 López J, Hernández J, Gómez P, et al. An improved PLIC-VOF method for tracking thin fluid structures in incompressible two-phase flows. *J Comp Phys*, 2005, 208: 51–74

6 Ahn H T, Shashkov M. Adaptive moment-of-fluid method. *J Comp Phys*, 2009, 228: 2792–2821

7 Jemison M, Loch E, Sussman M, et al. A coupled level set-moment of fluid method for incompressible two-phase flows. *J Sci Comput*, 2013, 54: 454–491

8 Chern I L, Glimm J, McBryan O, et al. Front tracking for gas dynamics. *J Comp Phys*, 1986, 62: 83–110

9 Osher S, Sethian J A. Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. *J Comp Phys*, 1988, 79: 12–49

10 Olsson E, Kreiss G. A conservative level set method for two phase flow. *J Comp Phys*, 2005, 210: 225–246

11 Steinbach I, Pezzolla F, Nestler B, et al. A phase field concept for multiphase systems. *Phys D-Nonlinear Phenom*, 1996, 94: 135–147

12 He Q, Kasagi N. Phase-field simulation of small capillary-number two-phase flow in a microtube. *Fluid Dyn Res*, 2008, 40: 497–509

13 Zhou C, Yue P, Feng J J, et al. 3D phase-field simulations of interfacial dynamics in Newtonian and viscoelastic fluids. *J Comp Phys*, 2010, 229: 498–511

- 14 Yue P, Feng J J, Liu C, et al. A diffuse-interface method for simulating two-phase flows of complex fluids. *J Fluid Mech*, 1999, 515: 293–317
- 15 Yue P, Zhou C, Feng J J. Spontaneous shrinkage of drops and mass conservation in phase-field simulations. *J Comp Phys*, 2007, 223: 1–9
- 16 Hua H, Shin J, Kim J. Level set, phase-field, and immersed boundary methods for two-phase fluid flows. *J Fluids Eng*, 2014, 136: 021301
- 17 Frankel M L, Sivashinsky G I. The effect of viscosity on hydrodynamic stability of a plane flame front. *Combust Sci Tech*, 1982, 29: 207–224
- 18 Chorin A J. Curvature and solidification. *J Comp Phys*, 1985, 57: 472–490
- 19 Chao Y. Numerical Simulation of Multiphase Reactors with Continuous Liquid Phase. London: Chemical Industry Press, 2015
- 20 Brackbill J U, Kothe D B, Zemach C. A continuum method for modeling surface tension. *J Comp Phys*, 1992, 100: 335–354
- 21 Son G. Efficient implementation of a coupled level-set and volume-of-fluid method for three-dimensional incompressible two-phase flows. *Numer Heat Transf Part B-Fundam*, 2003, 43: 549–565
- 22 Wang J, Yang C, Mao Z. A simple weighted integration method for calculating surface tension force to suppress parasitic flow in the level set approach. *Chin J Chem Eng*, 2006, 14: 740–746
- 23 Coquerelle M, Glockner S. A fourth-order accurate curvature computation in a level set framework for two-phase flows subjected to surface tension forces. *J Comp Phys*, 2016, 305: 838–876
- 24 Majumder S, Chakraborty S. New physically based approach of mass conservation correction in level set formulation for incompressible two-phase flows. *J Fluids Eng*, 2005, 127: 554–563
- 25 Huang J, Carrica P M, Stern F. Coupled ghost fluid/two-phase level set method for curvilinear body-fitted grids. *Int J Numer Meth Fluids*, 2007, 55: 867–897
- 26 Fedkiw R P, Aslam T, Merriman B, et al. A non-oscillatory Eulerian approach to interfaces in multimaterial flows (the ghost fluid method). *J Comp Phys*, 1999, 152: 457–492
- 27 Yang C, Mao Z S. Numerical simulation of interphase mass transfer with the level set approach. *Chem Eng Sci*, 2005, 60: 2643–2660
- 28 Di Y, Li R, Tang T, et al. Level set calculations for incompressible two-phase flows on a dynamically adaptive grid. *J Sci Comput*, 2007, 31: 75–98
- 29 Son G, Hur N. A level set formulation for incompressible two-phase flows on nonorthogonal grids. *Numer Heat Transf Part B-Fundam*, 2005, 48: 303–316
- 30 Herrmann M. A balanced force refined level set grid method for two-phase flows on unstructured flow solver grids. *J Comp Phys*, 2008, 227: 2674–2706
- 31 Strain J. Tree methods for moving interfaces. *J Comp Phys*, 1999, 151: 616–648
- 32 Strain J. Fast tree-based redistancing for level set computations. *J Comp Phys*, 1999, 152: 664–686
- 33 Cho M H, Choi H G, Yoo J Y. A direct reinitialization approach of level-set/splitting finite element method for simulating incompressible two-phase flows. *Int J Numer Meth Fluids*, 2011, 67: 1637–1654
- 34 Son G, Hur N. A coupled level set and volume-of-fluid method for the buoyancy-driven motion of fluid particles. *Numer Heat Transf Part B-Fundam*, 2002, 42: 523–542
- 35 Aniszewski W, Ménard T, Marek M. Volume of fluid (VOF) type advection methods in two-phase flow: A comparative study. *Comp Fluids*, 2014, 97: 52–73
- 36 Sussman M, Puckett E G. A coupled level set and volume-of-fluid method for computing 3D and axisymmetric incompressible two-phase flows. *J Comp Phys*, 2000, 162: 301–337
- 37 Ningegowda B M, Premachandran B. A coupled level set and volume of fluid method with multi-directional advection algorithms for two-phase flows with and without phase change. *Int J Heat Mass Transf*, 2014, 79: 532–550
- 38 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. *Comp Fluids*, 2015, 118: 293–304
- 39 Liu T G, Khoo B C, Yeo K S. Ghost fluid method for strong shock impacting on material interface. *J Comp Phys*, 2003, 190: 651–681
- 40 Wang C W, Liu T G, Khoo B C. A real ghost fluid method for the simulation of multimedium compressible flow. *SIAM J Sci Comput*, 2006, 28: 278–302
- 41 Wang C, Ding J X, Shu C W, et al. Three-dimensional ghost-fluid large-scale numerical investigation on air explosion. *Comp Fluids*, 2016, 137: 70–79
- 42 Tanguy S, Ménard T, Berlemont A. A level set method for vaporizing two-phase flows. *J Comp Phys*, 2007, 221: 837–853
- 43 Houim R W, Kuo K K. A ghost fluid method for compressible reacting flows with phase change. *J Comp Phys*, 2013, 235: 865–900
- 44 Mehravaran M, Hannani S K. Simulation of incompressible two-phase flows with large density differences employing lattice Boltzmann and level set methods. *Comp Methods Appl Mech Eng*, 2008, 198: 223–233

- 45 Becker J, Junk M, Kehrwald D, et al. A combined lattice BGK/level set method for immiscible two-phase flows. *Comp Math Appl*, 2009, 58: 950–964
- 46 Tanaka Y, Washio Y, Yoshino M, et al. Numerical simulation of dynamic behavior of droplet on solid surface by the two-phase lattice Boltzmann method. *Comp Fluids*, 2011, 40: 68–78
- 47 Shin S. Direct numerical simulation of rising bubble interaction with free surface using level contour reconstruction method. *J Mech Sci Tech*, 2012, 26: 3141–3148
- 48 Basting S, Weismann M. A hybrid level set-front tracking finite element approach for fluid-structure interaction and two-phase flow applications. *J Comp Phys*, 2013, 255: 228–244
- 49 Harten A. The artificial compression method for computation of shocks and contact discontinuities. I. Single conservation laws. *Comm Pure Appl Math*, 1977, 30: 611–638
- 50 Sheu T W H, Yu C H, Chiu P H. Development of level set method with good area preservation to predict interface in two-phase flows. *Int J Numer Meth Fluids*, 2011, 67: 109–134
- 51 Zhao L, Mao J, Bai X, et al. Finite element implementation of an improved conservative level set method for two-phase flow. *Comp Fluids*, 2014, 100: 138–154
- 52 Marchandise E, Remacle J F. A stabilized finite element method using a discontinuous level set approach for solving two phase incompressible flows. *J Comp Phys*, 2006, 219: 780–800
- 53 Cho M H, Choi H G, Choi S H, et al. A Q2Q1 finite element/level-set method for simulating two-phase flows with surface tension. *Int J Numer Meth Fluids*, 2012, 70: 468–492
- 54 Pochet F, Hillewaert K, Geuzaine P, et al. A 3D strongly coupled implicit discontinuous Galerkin level set-based method for modeling two-phase flows. *Comp Fluids*, 2013, 87: 144–155
- 55 Basting S, Weismann M. A hybrid level set/front tracking approach for finite element simulations of two-phase flows. *J Comp Appl Math*, 2014, 270: 471–483
- 56 Pillapakkam S B, Singh P. A level-set method for computing solutions to viscoelastic two-phase flow. *J Comp Phys*, 2001, 174: 552–578
- 57 Quecedo M, Pastor M. Application of the level set method to the finite element solution of two-phase flows. *Int J Numer Meth Eng*, 2001, 50: 645–663
- 58 Shepel S V, Smith B L. New finite-element/finite-volume level set formulation for modelling two-phase incompressible flows. *J Comp Phys*, 2006, 218: 479–494
- 59 Takahira H, Horiuchi T, Banerjee S. An improved three-dimensional level set method for gas-liquid two-phase flows. *J Fluids Eng*, 2004, 126: 578–585
- 60 Sussman M, Fatemi E, Smereka P, et al. An improved level set method for incompressible two-phase flows. *Comp Fluids*, 1998, 27: 663–680
- 61 Deng S, Li H X, Zhao J F, et al. Numerical simulation of the interface movement in gas-liquid two-phase flows (in Chinese). *J Xi'an Jiaotong Univ*, 2004, 38: 1123–1127 [邓晟, 李会雄, 赵建福, 等. 气-液两相流界面迁移现象的数值模拟研究. 西安交通大学学报, 2004, 38: 1123–1127]
- 62 Ansari M R, Hadidi A, Nimvari M E. Effect of a uniform magnetic field on dielectric two-phase bubbly flows using the level set method. *J Magn Magn Mater*, 2012, 324: 4094–4101
- 63 Ki H. Level set method for two-phase incompressible flows under magnetic fields. *Comp Phys Commun*, 2010, 181: 999–1007
- 64 Bieberle M, Hampel U. Level-set reconstruction algorithm for ultrafast limited-angle X-ray computed tomography of two-phase flows. *Philos Trans R Soc A-Math Phys Eng Sci*, 2015, 373: 20140395
- 65 Bernauer M K, Herzog R. Optimal control of the classical two-phase stefan problem in level set formulation. *SIAM J Sci Comput*, 2011, 33: 342–363
- 66 Price W G, Chen Y G. A simulation of free surface waves for incompressible two-phase flows using a curvilinear level set formulation. *Int J Numer Meth Fluids*, 2006, 51: 305–330
- 67 Yin Z X. Progress in boundary element method (in Chinese). *Marine Forecasts*, 1986, 3: 52–58 [尹曾欣. 边界元法应用的进展. 海洋预报, 1986, 3: 52–58]
- 68 Yao Z H, Wang H T. Boundary Element Method (in Chinese). Beijing: Higher Education Press, 2010 [姚振汉, 王海涛. 边界元法. 北京: 高等教育出版社, 2010]
- 69 Han J J. Numerical simulation of droplet rheology in microfluidic devices (in Chinese). Dissertation for Master Degree. Tianjin: Tianjin University, 2012 [韩俊杰. 微通道中液滴流变学的数值模拟. 硕士学位论文. 天津: 天津大学, 2012]
- 70 Tao J, Song X, Liu J, et al. Microfluidic rheology of the multiple-emulsion globule transiting in a contraction tube through a boundary element

- method. *Chem Eng Sci*, 2013, 97: 328–336
- 71 Higdon J J L. Stokes flow in arbitrary two-dimensional domains: Shear flow over ridges and cavities. *J Fluid Mech*, 1985, 159: 195–226
- 72 Occhialini J M, Muldowney G P, Higdon J J L. Boundary integral/spectral element approaches to the Navier-Stokes equations. *Int J Numer Meth Fluids*, 1992, 15: 1361–1381
- 73 Youngren G K, Acrivos A. On the shape of a gas bubble in a viscous extensional flow. *J Fluid Mech*, 1976, 76: 433–442
- 74 Dimitrakopoulos P. Interfacial dynamics in Stokes flow via a three-dimensional fully-implicit interfacial spectral boundary element algorithm. *J Comp Phys*, 2007, 225: 408–426
- 75 Pozrikidis C. Interfacial dynamics for Stokes flow. *J Comp Phys*, 2001, 169: 250–301
- 76 Pozrikidis C. *Boundary Integral and Singularity Methods for Linearized Viscous Flow*. Cambridge: Cambridge University Press, 1992
- 77 Dimitrakopoulos P, Wang J. A spectral boundary element algorithm for interfacial dynamics in two-dimensional Stokes flow based on Hermitian interfacial smoothing. *Eng Anal Boundary Elements*, 2007, 31: 646–656
- 78 Power H, Botte V. An indirect boundary element method for solving low Reynolds number Navier-Stokes equations in a three-dimensional cavity. *Int J Numer Meth Eng*, 1998, 41: 1485–1505
- 79 Young D L, Yang S K, Eldho T I. Solution of the Navier-Stokes equations in velocity-vorticity form using a Eulerian-Lagrangian boundary element method. *Int J Numer Meth Fluids*, 2000, 34: 627–650
- 80 Bozkaya C, Tezer-Sezgin M. Solution to transient Navier-Stokes equations by the coupling of differential quadrature time integration scheme with dual reciprocity boundary element method. *Int J Numer Meth Fluids*, 2009, 59: 215–234
- 81 Kalteh M, Abbassi A, Saffar-Avval M, et al. Eulerian-Eulerian two-phase numerical simulation of nanofluid laminar forced convection in a microchannel. *Int J Heat Fluid Flow*, 2011, 32: 107–116
- 82 Qi C, He Y, Yan S, et al. Numerical simulation of natural convection in a square enclosure filled with nanofluid using the two-phase Lattice Boltzmann method. *Nanoscale Res Lett*, 2013, 8: 56
- 83 Sheikholeslami M, Hatami M, Domairry G. Numerical simulation of two phase unsteady nanofluid flow and heat transfer between parallel plates in presence of time dependent magnetic field. *J Taiwan Inst Chem Eng*, 2015, 46: 43–50
- 84 Ahmadi A, Abbasian Arani A A, Lasseux D. Numerical simulation of two-phase inertial flow in heterogeneous porous media. *Transp Porous Med*, 2010, 84: 177–200
- 85 Sowiński J, Krawczyk M, Dziubiński M. Comparison of experimental data and numerical simulation of two-phase flow pattern in vertical minichannel. *Chem Process Eng*, 2012, 33: 63–70
- 86 Zhang N, Yao J, Huang Z, et al. Accurate multiscale finite element method for numerical simulation of two-phase flow in fractured media using discrete-fracture model. *J Comp Phys*, 2013, 242: 420–438
- 87 Mozolevski I, Schuh L. Numerical simulation of two-phase immiscible incompressible flows in heterogeneous porous media with capillary barriers. *J Comp Appl Math*, 2013, 242: 12–27
- 88 De la Cruz L M, Monsivais D. Parallel numerical simulation of two-phase flow model in porous media using distributed and shared memory architectures. *Geofisica Int*, 2014, 53: 59–75
- 89 Yin Y, Wu T, He P, et al. Numerical simulation of two-phase cross flow in microstructure of gas diffusion layer with variable contact angle. *Int J Hydrogen Energy*, 2014, 39: 15772–15785
- 90 Gasmi S, Nouri F Z. Numerical simulation for two-phase flow in a porous medium. *Bound Value Probl*, 2015, 2015: 7
- 91 Hieu P D, Tanimoto K. Verification of a VOF-based two-phase flow model for wave breaking and wave-structure interactions. *Ocean Eng*, 2006, 33: 1565–1588
- 92 Karim M F, Tanimoto K, Hieu P D. Modelling and simulation of wave transformation in porous structures using VOF based two-phase flow model. *Appl Math Modell*, 2009, 33: 343–360
- 93 Bakhtyar R, Barry D A, Yeganeh-Bakhtiary A, et al. Numerical simulation of two-phase flow for sediment transport in the inner-surf and swash zones. *Adv Water Resour*, 2010, 33: 277–290
- 94 Holmås H. Numerical simulation of transient roll-waves in two-phase pipe flow. *Chem Eng Sci*, 2010, 65: 1811–1825
- 95 Higuera P, Del Jesus M, Lara J L, et al. Numerical simulation of three-dimensional breaking waves on a gravel slope using a two-phase flow Navier-Stokes model. *J Comp Appl Math*, 2013, 246: 144–152
- 96 Wemmenhove R, Luppés R, Veldman A E P, et al. Numerical simulation of hydrodynamic wave loading by a compressible two-phase flow method. *Comp Fluids*, 2015, 114: 218–231
- 97 Dinselmeyer R, Fourmigue J F, Caney N, et al. Numerical simulation of evaporating two-phase flow: Application to concentrated solar plants with direct steam generation. *MATEC Web Conf*, 2014, 18: 03003

- 98 Chen F Z, Qiang H F, Gao W R. Numerical simulation of heat transfer in gas-particle two-phase flow with smoothed discrete particle hydrodynamics (in Chinese). *Acta Phys Sin*, 2014, 63: 1–17 [陈福振, 强洪夫, 高巍然. 气粒两相流传热问题的光滑离散颗粒流体动力学方法数值模拟. *物理学报*, 2014, 63: 1–17]
- 99 Bigham S, KouhiKamali R, Noori Rahim Abadi S M A. Two-phase flow numerical simulation and experimental verification of falling film evaporation on a horizontal tube bundle. *Desalination Water Treat*, 2015, 55: 2009–2022
- 100 Bansch E, Basting S, Krah R. Numerical simulation of two-phase flows with heat and mass transfer. *Discrete Cont Dyn-A*, 2015, 35: 2325–2347
- 101 Gjennestad M A, Munkejord S T. Modelling of heat transport in two-phase flow and of mass transfer between phases using the level-set method. *Energy Procedia*, 2015, 64: 53–62
- 102 Huang J T. Numerical Simulation of the Complicated Physical Phenomena During the Collapse of Bubbles By Level Set Method (in Chinese). Dissertation for Post-Doctoral. Shnghai: Fudan University, 2004 [黄军涛. 气泡溃灭时一些复杂物理现象数值模拟的Level Set方法. 博士后论文. 上海: 复旦大学, 2004]
- 103 Sun T. Numerical Investigation on Characteristics of Bubble Thermokinetics on Boiling Heat Transfer Surfaces Using Lattice Boltzmann Method (in Chinese). Dissertation for Doctoral Degree. Dalian: Dalian University of Technology, 2013 [孙涛. 加热表面上气泡传热及动力学特性的LBM模拟. 博士学位论文. 大连: 大连理工大学, 2013]
- 104 Guignard S, Marcer R, Rey V, et al. Solitary wave breaking on sloping beaches: 2-D two phase flow numerical simulation by SL-VOF method. *Eur J Mech-B/Fluids*, 2001, 20: 57–74
- 105 Wang Y, Simakhina S, Sussman M. A hybrid level set-volume constraint method for incompressible two-phase flow. *J Comp Phys*, 2012, 231: 6438–6471
- 106 Deen N G, Kuipers J A M. Direct numerical simulation of wall-to liquid heat transfer in dispersed gas-liquid two-phase flow using a volume of fluid approach. *Chem Eng Sci*, 2013, 102: 268–282
- 107 Li Y P, Guan W S. Simulation of bubble motion and droplet with level set method (in Chinese). *J Earth Sci Environ*, 2007, 29: 217–220 [李彦鹏, 关卫省. 应用Level Set方法模拟三维气泡与液滴的运动. *地球科学与环境学报*, 2007, 29: 217–220]
- 108 Westbrook C K. A generalized ICE method for chemically reactive flows in combustion systems. *J Comp Phys*, 1978, 29: 67–80
- 109 Reiner M. The Deborah number. *Phys Today*, 1964, 17: 62
- 110 Müller S, Helluy P, Ballmann J. Numerical simulation of a single bubble by compressible two-phase fluids. *Int J Numer Meth Fluids*, 2010, 62: 591–631
- 111 Sattar M A, Naser J, Brooks G. Numerical simulation of two-phase flow with bubble break-up and coalescence coupled with population balance modeling. *Chem Eng Process-Process Intensification*, 2013, 70: 66–76
- 112 La Forgia N, Fernandino M, Dorao C A. Numerical simulation of evaporation process of two-phase flow in small-diameter channels. *Heat Transf Eng*, 2014, 35: 440–451
- 113 Wood R W. A study of splashes. *Science*, 1909, 29: 464–465
- 114 Pumphrey H C, Elmore P A. The entrainment of bubbles by drop impacts. *J Fluid Mech*, 1990, 220: 539–567
- 115 Prosperetti A, Oguz H N. The impact of drops on liquid surfaces and the underwater noise of rain. *Annu Rev Fluid Mech*, 1993, 25: 577–602
- 116 Harlow F H, Shannon J P. The splash of a liquid drop. *J Appl Phys*, 1967, 38: 3855–3866
- 117 Foote G B. The water drop rebound problem: Dynamics of collision. *J Atmos Sci*, 1975, 32: 390–402
- 118 Bradley S G, Stow C D. Collisions between liquid drops. *Philos Trans R Soc A-Math Phys Eng Sci*, 1978, 287: 635–675
- 119 Nobari M R, Jan Y J, Tryggvason G. Head-on collision of drops—A numerical investigation. *Phys Fluids*, 1996, 8: 29–42
- 120 Luo K, Shao C, Yang Y, et al. A mass conserving level set method for detailed numerical simulation of liquid atomization. *J Comp Phys*, 2015, 298: 495–519
- 121 Fukai J, Shiiba Y, Yamamoto T, et al. Wetting effects on the spreading of a liquid droplet colliding with a flat surface: Experiment and modeling. *Phys Fluids*, 1995, 7: 236–247
- 122 Bashir S, Rees J M, Zimmerman W B. Investigation of pressure profile evolution during confined microdroplet formation using a two-phase level set method. *Int J Multiphase Flow*, 2014, 60: 40–49
- 123 Bashir S, Rees J M, Zimmerman W B. Simulations of microfluidic droplet formation using the two-phase level set method. *Chem Eng Sci*, 2011, 66: 4733–4741
- 124 Pinilla J, Bruneau C H, Tancogne S. Front-tracking by the level-set and the volume penalization methods in a two-phase microfluidic network. *Int J Numer Meth Fluids*, 2016, 80: 23–52
- 125 Wang X, Yong Y, Fan P, et al. Flow regime transition for cocurrent gas-liquid flow in micro-channels. *Chem Eng Sci*, 2012, 69: 578–586
- 126 Grzybowski H, Mosdorf R. Modelling of two-phase flow in a minichannel using level-set method. *J Phys-Conf Ser*, 2014, 530: 012049

- 127 Wang J, Liu J, Han J, et al. Effects of complex internal structures on rheology of multiple emulsions particles in 2D from a boundary integral method. *Phys Rev Lett*, 2013, 110: 066001
- 128 Wang J, Yu D, Jing H, et al. Hydrodynamic control of droplets coalescence in microfluidic devices to fabricate two-dimensional anisotropic particles through boundary element method. *Chem Eng Res Des*, 2014, 92: 2223–2230
- 129 Wegener M, Paul N, Kraume M. Fluid dynamics and mass transfer at single droplets in liquid/liquid systems. *Int J Heat Mass Transfer*, 2014, 71: 475–495
- 130 Yang C, Zhang J, Koch D L, et al. Mass/heat transfer from a neutrally buoyant sphere in simple shear flow at finite Reynolds and Peclet numbers. *AIChE J*, 2011, 57: 1419–1433
- 131 Zhang J, Yang C, Mao Z S. Mass and heat transfer from or to a single sphere in simple extensional creeping flow. *AIChE J*, 2012, 58: 3214–3223
- 132 Haroun Y, Legendre D, Raynal L. Volume of fluid method for interfacial reactive mass transfer: Application to stable liquid film. *Chem Eng Sci*, 2010, 65: 2896–2909
- 133 Kenig E Y, Ganguli A A, Atmakidis T, et al. A novel method to capture mass transfer phenomena at free fluid-fluid interfaces. *Chem Eng Process-Process Intensification*, 2011, 50: 68–76
- 134 Wang J, Wang Z, Lu P, et al. Numerical simulation of the Marangoni effect on transient mass transfer from single moving deformable drops. *AIChE J*, 2011, 57: 2670–2683
- 135 Cheng D, Feng X, Cheng J, et al. Experimental study on the dispersed phase macro-mixing in an immiscible liquid-liquid stirred reactor. *Chem Eng Sci*, 2015, 126: 196–203
- 136 Radl S, Tryggvason G, Khinast J G. Flow and mass transfer of fully resolved bubbles in non-Newtonian fluids. *AIChE J*, 2007, 53: 1861–1878

Simulation of two-phase flow and mass transfer with deformable interface

LIU AnJun^{1,2}, CHEN Jie^{2,3*}, YANG Chao^{2,3*} & MAO ZaiSha²

¹ School of Chemical Engineering and Technology, Tianjin University, Tianjin 300350, China;

² Key Laboratory of Green Process and Engineering, Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China;

³ University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

Two-phase flow and interphase mass transfer are very popular in chemical processes. Rapid development of numerical simulation plays a crucial role in deep understanding of the mechanism of momentum, mass and heat transfer in two-phase systems. However, establishing and solving the mathematical models of two-phase flow and transport processes, especially the accurate description of deformable moving interface, are critical and difficult. This review addresses the level set method and the boundary element method, which are involved with the numerical simulation of two-phase flow of deformable surfaces, and presents a detailed discussion of the limits and advantages of these typical methods. We show the research status and prospect of the mathematical methods of deformation interface of fluid particle coalescence and breakage, micro-fluidics and droplets in two-phase flow field. In the end, we briefly introduce the numerical simulation methods of interphase mass transfer across deformable interface.

numerical simulation, two-phase flow, interface, interphase mass transfer, boundary element, level set

PACS: 47.10.ad, 47.11.Hj, 47.11.-j, 45.20.df

doi: 10.1360/SSPMA2016-00434