

基于VOF模型的相界面面积和形心计算方法

于鹏飞 张蒙 刘虎 车得福

(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: 为提升相间传质数值模拟精度, 本研究在VOF模型框架内提出了一个集成速度拓展的界面面积和形心计算方法。该方法由多边形切割算法和质量源分配算法两部分构成, 具有准确度高、计算开销低、鲁棒性好等优点。多边形切割算法将网格内的相界面近似为平面多边形, 从多边形的任一顶点出发将其分割成若干三角形, 进而给出相界面的面积和形心。质量源分配算法利用亥姆霍兹方程, 将传质引起的体积膨胀项转移到主相内, 使得次相速度场无散, 从而确保体积分数方程精确求解。测试发现: 无相间传质时, 多边形切割算法计算液滴表面积的相对误差在 $\pm 1\%$ 以内; 发生相间传质(传质速率 $m'' = 10 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$)时, 单独使用多边形切割算法导致结果失真。当两个算法协同应用时, 模拟结果与液滴理论生长曲线呈现良好的一致性: 液滴表面积最大绝对百分比误差为0.89%, 液滴体积最大绝对百分比误差为0.28%。

关键词: 两相流; 相间传质; VOF模型; 界面重构; 速度拓展

中图分类号: TK124 **文献标志码:** AA

文章编号: 0253-987X(XXXX)XX-0001-17

Algorithms to calculate interface area and centroid based on the VOF model

YU Pengfei, ZHANG Meng, LIU Hu, CHE Defu

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

Abstract: In order to enhance the accuracy of numerical simulation of interphase mass transfer, a method integrated with velocity extension was proposed, whereby the interface area and centroid are calculated within the framework of the VOF model. The method comprises a polygon-cutting algorithm and a mass source distribution algorithm, offering the advantages of high accuracy, low computational cost, and good robustness. The polygon-cutting algorithm works under the assumption that the interface in a grid is a planar polygon. The polygon is then cut into several triangles from a vertex, thereby calculating the area and centroid of the interface. The mass source distribution algorithm utilizes the Helmholtz equation to shift the volume expansion term caused by mass transfer to the primary phase, ensuring that the secondary-phase velocity field is divergence-free and the volume fraction equation is

收稿日期: XXXX-XX-XX。作者简介: 于鹏飞(1995—), 男, 博士生; 刘虎(通信作者), 男, 副教授, 博士生导师。
基金项目: 中央高校基本科研业务费(xzy012024028)

solved accurately. Results show that, in the absence of interphase mass transfer, the polygon-cutting algorithm can calculate the surface area of the droplet with relative errors within $\pm 1\%$. However, the algorithm cannot offer reasonable results once interphase mass transfer occurs (mass transfer rate $m'' = 10 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$). As the two algorithms were applied synergistically, results exhibit good agreement with the theoretical growth curves of the droplet: the maximum absolute percentage error was 0.89% for surface area, and the maximum absolute percentage error was 0.28% for volume.

Keywords: two-phase flow; interphase mass transfer; VOF model; interface reconstruction; velocity extension

含可变形界面的两相流广泛存在于能源、冶金、化工等诸多领域,如制冷系统中工质的蒸发和冷凝过程^[1],RH精炼时提升气和钢液在上升管内的运动过程^[2],石油炼制时滴流床反应器内的复杂流动行为^[3]。这些设备中的传热传质问题关乎整个系统的安全性、运行效率和产品质量,需要精准的定量计算。然而,不断运动和变形的相界面,以及流动、传热、传质之间的相互作用,使得这些问题的研究变得极为复杂。

实验和数值模拟是研究两相流问题的主要手段。实验可以直接提供流型、温度、速度、压力、浓度等数据^[4-6]。接触式测量往往会对研究的问题产生较大的干扰,因此仅能提供有限的信息。非接触式测量通常需要研究对象满足一系列条件才能获得可靠的数据,测量成本较高。此外,两相流条件下设计和开展模化实验变得极为困难,而全尺度实验则耗时费力且成本高昂。数值模拟通过在一系列定解条件下,求解描述两相流行为的控制方程,能够生成高分辨率的信息,已成为揭示实验现象内在机理的重要手段^[7-9]。

采用数值模拟方法研究两相流问题的首要难点是确定两相的分布情况,即追踪或捕捉两相界面,这直接关系到相间相互作用的准确性。VOF模型基于固定网格,通过定义体积分数隐式确定相界面位置^[10],能处理复杂的界面拓扑变化,是一种应用广泛的界面捕捉方法。

表1列举了部分学者使用该方法开展的涉及两相流传热传质问题的研究。可以发现,无论采用何种速率计算式,相间传热传质行为的准确预测都依赖于相界面面积。计算相界面面积的方法有代数法和几何法两类,它们都需要利用所在网格及其周围网格的体积分数。代数法基于相界面总面积表达式 $\int_{\Omega} |\nabla C| dV = \int_{\Gamma} \int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial C}{\partial t} dA dt = A_{\text{tot}}$, 使用 $|\nabla C| V_{\text{cell}}$ 表示网格内的相界面面积^[11,19]。由于便于数值实现,代数法得到广泛使用^[11-13]。然而,体积分数梯度 ∇C 的重构必须要用到相邻网格的信息,这导致 $|\nabla C|$ 在非相界面单元内不为零^[14]。针对这一问题,Guo等人^[15]对原始代数法加以修改,采用 $f(C)|\nabla C| V_{\text{cell}}$ 表示网格内的界面面积,认为修正函数 $f(C)$ 应满

足 $\int_0^1 f(C) dC = 1$ 。简单的 $f(C)$ 形式有 $2C^{[16, 17]}$ 和 $6C(1-C)^{[15, 18]}$ 两种, 前者在相变传热问题的研究中应用的较多。

表1 基于VOF模型的相间传热传质数值研究

Table 1 Numerical study on interphase heat and mass transfer using the VOF model

参考文献	研究对象	界面捕捉方法	相界面面积 A_{int}/m^2	相间传质速率 $m''/kg \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$
Schlottke 和 Weigand ^[11]	空气/水	VOF (几何重构/-)	$ \nabla C V_{cell}$	$\frac{\rho D_i}{1-Y_i} \nabla Y_i \cdot \mathbf{n}$
Banerjee ^[12]	空气/乙醇-异辛烷	VOF (几何重构/方向分裂)	$ \nabla C V_{cell}$	$-\rho D_i \nabla Y_i \cdot \mathbf{n}$
Magnini 和 Matar ^[13]	水蒸气/水	VOF (代数法)	$ \nabla C V_{cell}$	$\alpha(T-T_{sat})$
Hardt 和 Wondra ^[19]	水蒸气/水	-	$NC \nabla C V_{cell}$	$\alpha(T-T_{sat})$
Li 等人 ^[16]	CO ₂ /水	VOF (几何重构/方向分裂)	$2C \nabla C V_{cell}$	$\rho k(Y_{sat}-Y)$
Lu 等人 ^[17]	CO ₂ /单乙醇胺溶液	VOF (几何重构/方向分裂)	$2C \nabla C V_{cell}$	$\rho k(Y_{sat}-Y)$
Zhu 等人 ^[20]	水蒸气/水	VOF (几何重构/方向分裂)	$3kV_{cell}$	$\frac{\lambda \nabla T \cdot \mathbf{n}}{h_{lv}}$
Ling 等人 ^[21]	水蒸气/水	VOSET (几何重构/-)	A_{PLIC}	$\frac{1}{h_{lv}} \left[\lambda_v \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_v - \lambda_l \left(\frac{\partial T}{\partial n} \right)_l \right]$
Soh 等人 ^[14]	CO ₂ /硅油	VOF (代数法)	A_{PLIC}	$D_i \nabla C_i \cdot \mathbf{n}$
Gennari 等人 ^[22]	氢气/水	VOF (几何重构/不分裂)	NA_{PLIC}	$-\frac{M_i D_i}{1-\rho/\rho} \frac{\partial C_i}{\partial n}$

图1是长度为1的均匀网格中的体积分数场及三种代数法的界面面积计算结果。竖直虚线表示两相的分界面, 相界面网格 ($0 < C < 1$) 内的界面面积为1。当 $f(C) = 2C$ 时, 相界面一侧网格 ($C = 0$) 内的面积被纠正, 但相界面面积的分布出现较大偏差。在图1(a)所示体积分数场下, Hardt和Wondra的方法^[19]与修正函数为 $2C$ 的方法等效。当 $f(C) = 6C(1-C)$ 时, 相界面单元两侧单元内的界面面积得以修正, 但相界面单元内的界面面积被低估。在0到1范围内对 $3x(1-x)$ 求积分, 可知相界面

总面积的期望值仅为真实值的一半。Zhu等人方法^[20]的前提是相界面形状接近球面, 在图1(a)所示的体积分数场下, 他们的方法界面面积计算值为零。

代数法虽然能够快速给出相界面面积, 但是全局准确性与局部准确性往往难以兼顾。为解决这一

问题, Scardovelli等人^[23]提出了基于PLIC的几何方法。如图2所示, 该方法将网格内的相界面近似为一平面多边形。已知平面法向量 $\mathbf{m}$, 以及多面体的体积与所处单元格体积之比, 即体积

分数 C 。求解方程 $C=g(\mathbf{m},d)$ 可以得到平面方程 $\mathbf{m}\cdot\mathbf{x}=d$ 的常数项 d 。根据平面方程计算得到网格内多边形的面积,即为单元内相界面的面积。几何法进一步利用了“以直代曲”思想,具有比代数法更加清晰的物理意义,能够保证非相界面单元中的界面面积始终为零。Soh 等人^[18]和 Scardovelli 等人^[23]在三维笛卡尔网格内给出了两种相界面面积计算方案。Soh 等人的方法^[18]似乎存在逻辑上

的矛盾:计算界面面积前需要先确定多边形的形心,但计算形心要用到多边形的面积。Scardovelli 等人的表达式^[23]在相界面平行于任一坐标轴时,会出现分母为零的情况。此外,Bothe 和 Fleckenstein^[24]指出,代数法能够给出更高的全局准确性,而几何法具有更好的局部准确性。他们尝试将二者结合,增加了一个修正因子对几何法计算得到的局部界面面积值加以修正。

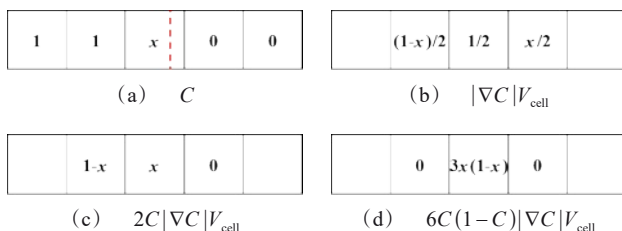


图1 体积分数场与界面面积计算值(网格长度为1)

Fig. 1 Volume fraction field and estimated interface areas (grid length is 1)

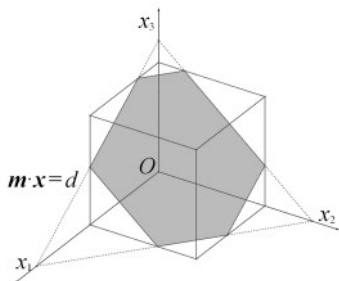


图2 立方体网格中的多边形相界面示意图

Fig. 2 Schematic diagram of a polygonal interface in a cube

相间传质速率的计算是两相流传热传质数值研究的另一难点。利用能量跳跃模型或迁移组分的质量跳跃模型计算相间传质速率,因为物理意义明确且不

需要引入经验参数,得到越来越多的关注^[11, 12, 14, 21, 22, 24]。使用跳跃模型计算相间传质速率需要在相界面处重构一侧甚至是两侧的温度或浓度梯度。Bothe 和 Fleckenstein^[24], Soh 等人^[14], Ling 等人^[21]给出了三种主要的梯度近似计算方法,这些方法都需要利用相界面的位置来构造差分格式。Soh 等人^[14]和 Ling 等人^[21]使用多边形顶点的平均值代表相界面位置。Bothe 和 Fleckenstein^[24]使用多边形的形心表示相界面位置。通常来说,对于均质物体,形心也是几何体的重心和质心,更能代表几何体的空间位置。图3给出了五种主要构型下,不同的相界面位置表示法的计算结果。当空

间构型为图3 (b) - (d) 三种情形时, 顶点平均值与多边形形心间出现较大的偏差。这可能会导致重构的梯度值出现较大偏差, 进而导致数值解偏离真实值。

无散相速度场是体积分数方程准确

求解的重要前提^[25, 26], 而正确的体积分数场关乎相界面面积和形心的计算。相间传质使得相界面网格的速度散度不为零, 因此需要找到一个能够正确反映体积分数对流运输机制的速度场。Schlottke 和 Weigand^[11]认为

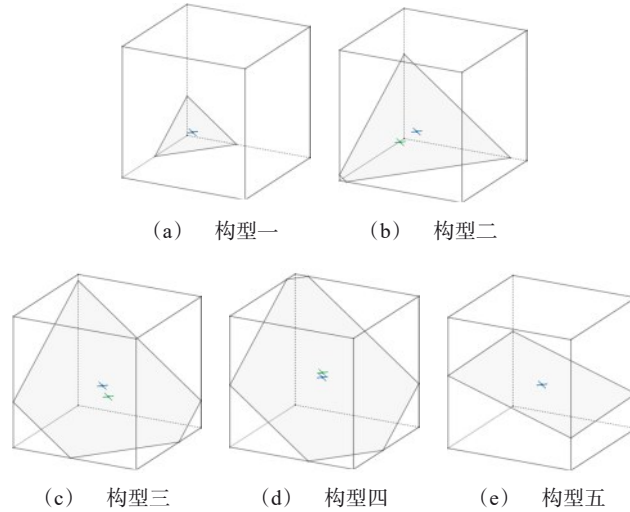


图3 相界面形心与顶点平均值的位置关系 (蓝色标记表示平面多边形的形心, 绿色标记表示顶点平均值)

Fig. 3 Relationship between the centroid of the interface and the mean value of its vertices (blue marker is the centroid of the interface, green marker is the mean value of the vertices)

对于存在相间传质的网格, 不能直接使用混合速度计算体积分数对流通量, 需要根据相界面方向和传质速率对网格面上的混合速度进行修正。Scapin 等人^[25]和 Malan 等人^[26]构建额外的泊松方程, 得到了可用于输运体积分数的无散相速度。以上方法通过对混合速度进行适当修正, 去除了相间传质对体积分数对流通量的影响。由于额外定义了多个变量, 这些方法对计算机内存要求较

高。Gennari 等人^[22]在笛卡尔网格内开发了一个基于索引偏移的质量源分配算法, 能够将相界面单元内的质量传递项分配到与之点相邻的主相网格中, 从而将次相无散速度拓展至相界面网格。利用该算法将压力方程中与相间传质相关的源项移动至主相流体中, 使得NS方程计算得到的混合速度在所有次相网格及相界面网格中均满足无散条件, 能够直接用于体积分数对流通量的计算。由

于仅移动压力方程源项,无需构造新的速度场,该算法在编程和内存上具有一定优势。然而,当过渡区域 ($0 < C < 1$) 较宽时,算法可能找不到满足要求的点相邻网格,从而低估总传质量。此外,主流 CFD 代码大多基于非结构网格并行计算设计, Gennari 等人的算法^[22]在实际运行时需要进程间频繁通信,反而可能增加计算时长。

上述分析表明,采用数值方法研究相间传热传质问题需谨慎对待三个核心要素:相界面面积、相界面形心、无散相速度。相界面面积和形心关系到体积传质速率的计算,无散相速度是获得正确的体积分数场以及界面面积和形心的前提。在计算相界面面积和形心时,代数法局部准确性不足,而现有几何法存在鲁棒性不强,计算成本较高等缺点。在构造无散速度场方面,混合速度修正法对计算机内存要求较高,而原始的质量源分配算法在非结构网格并行计算条件下性能较差。这些不足在一定程度上制约了相间传质问题的数值研究。

本文基于几何法“以直代曲”思想,提出了一个兼顾鲁棒性和计算速度的多边形切割算法,能够同时给出相界面的面积和形心。为获得无散相速度,在 Gennari 等人的算法^[22]的启发下,本文提出了一个基于亥姆霍兹方程的质量源分配算法。利用 Soh 等人^[18]给出的三个基准算例,对比研究了不同方法的性能,验证了本文算法的准确性和可靠性。

1 数值方法

1.1 控制方程与离散求解

单流体模型下,不考虑重力且两相均为牛顿流体时,不可压缩流的连续性方程、动量守恒方程、次相体积分数方程分别为:

$$\nabla \cdot \mathbf{U} = \left(\frac{1}{\rho_1} - \frac{1}{\rho_2} \right) m''' \quad (1)$$

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{U})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \mathbf{U}) = -\nabla p + \quad (2)$$

$$\nabla \cdot [\mu (\nabla \mathbf{U} + \nabla \mathbf{U}^T)] + \sigma \kappa \delta \mathbf{n}$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (C \mathbf{U}) = -\frac{1}{\rho_2} m'' \frac{A_{\text{PLIC}}}{V_{\text{cell}}} \quad (3)$$

式中,密度 ρ 和动力黏度 μ 采用体积分数加权平均计算。曲率 κ , 狄拉克分布函数 δ , 界面法向量 $\mathbf{n}$ 均根据水平集函数 ϕ 计算。水平集函数不是通过求解偏微分方程获得的,而是采用 Ling 等人^[27]发展的 VOSET 方法从三维体积分数场中重构得到的。

采用 PISO 算法处理不可压缩流中的压力-速度耦合。采用 PLIC 法重构相界面,使用方向分裂算法显式求解体积分数方程。其他方程的时间离散采用一阶隐式欧拉格式,对流项空间离散采用 QUICK 格式,扩散项空间离散采用中心差分格式。为保证计算的准确性和稳定性,时间步长设置为 $2.5 \times 10^{-7} \text{ s}$,以确保在所有尺寸网格下最大库朗数都小于 0.1。单个时间层次内的收敛指标为所有方程的迭代误差均低于 10^{-6} 。

1.2 多边形切割算法

图4对比了Soh等人的方法^[18]与本文提出的多边形切割方法,叉号表示其所在三角形的形心。两种方法均假定平面方程已知,据此求出平面与立方体棱的交点,进而确定出待求多边形。这两种方法的核心思想是将三维空间中的平面多边形切割为较小的三角形,而Scardovelli等人的方法^[23]则是将多边形补全为一个大的三角形(图2)。需要指出的是,在充分进行坐标变换后,平面与被切割的立方体实际上仅有五种构型。当处于图3(e)所示的构型且平面法向量的任一分量趋近于零时,平面与坐标轴的交点数小于三个。此时,多边形将无法补全为一个三角形,Scardovelli等人的方法将会失效。

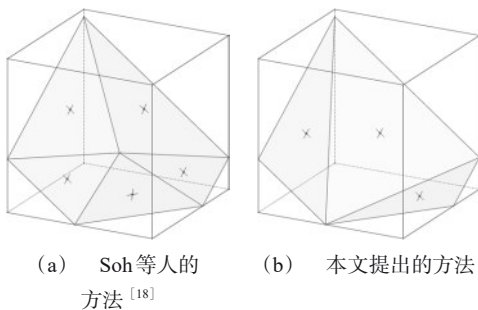


图4 两种平面多边形切割方法

Fig. 4 Two methods for cutting a planar pentagon

已知体积分数分布,确定相界面面积和形心的步骤如下:

(1)确定平面方程 $m \cdot x = d$ 的常数项 d 。常数项的求解在van Sint Annaland等人^[28], Dai和Tong^[29]的文章中已有讨

论,本文不再赘述。应当注意的是,这些方法可能会涉及到坐标系的平移、旋转等操作。需要记录这些操作,以便将局部坐标系内的向量或坐标反变换回全局坐标系。

(2)计算已知平面与网格棱的交点并排序。根据凸多面体的定义,易知这些交点连线构成的图形必定为一平面凸多边形。交点坐标信息除了用于确定相界面的面积和形心,还可用于重构水平集函数^[27]。

(3)切割多边形并计算各部分面积和形心。根据欧拉公式,任取一个顶点可将凸 n 边形切割为 $n-2$ 个三角形。三角形的面积可由向量叉乘取模得到,三角形的形心可直接由顶点算术平均得到。

(4)计算多边形的面积和形心坐标。多边形的面积可直接加和得到。多边形的形心由三角形形心加权得到,权重为各个三角形的面积占多边形面积的比重。最后,经过适当的反变换操作,即可得到全局坐标系下相界面的形心坐标。

多边形面积计算量主要与三角形数目有关。对于一个凸 n 边形,本文方法可分割得到 $n-2$ 个三角形。Soh等人的方法^[18]使用多边形内部一点(顶点平均值),将 n 边形分割成 n 个三角形。当处于图3构型五时,Scardovelli等人的方法^[23]剖分得到4个三角形,本文方法仅得到2个三角形。此外,Scardovelli等人的方法需要预先计算更多的交点坐

标。三者均采用割补法计算面积，精度相当，但从计算量和鲁棒性角度看，本文方法具备一定优势。

1.3 质量源分配算法

首先，定义一个与传质速率相关的变量 ϕ ，通过求解零梯度边界条件下关于 ϕ 的非齐次亥姆霍兹方程，得到 ϕ 的空间分布。根据质量守恒，对式 (4) 范围内 ϕ 的值加以修正，最终得到出现在连续性方程中的体积源项 m''' 。

$$(|\nabla C| > 0) \cap (C = 0) \quad (4)$$

亥姆霍兹方程具体形式及边界条件如下所示：

$$\nabla^2 \phi - \frac{1}{D} \phi = -\frac{1}{D} m'' \frac{A_{\text{PLIC}}}{V_{\text{cell}}} \quad (5)$$

$$\nabla \phi \cdot \mathbf{n} = 0 \quad (6)$$

式中，系数 D 与网格体积有关，可采用下式计算：

$$D = V_{\text{cell}}^{2/3} \quad (7)$$

从形式上看，方程 (5) 与 Hardt 和 Wondra 给出的方程^[19]非常接近，但二者的目的并不相同。Hardt 和 Wondra 使用该方程的目的是将传质引起的体积膨胀项“扩散”至相界面两侧，避免局部源项过大，以提升求解的稳定性。而本文采用此方程的目的是将压力方程源项移至主相内，以保证次相网格和相界面网格的速度场无散，确保存在相间传质时体积分数准确对流。

2 算法验证

2.1 无重力条件下大空间中液滴的弛豫过程

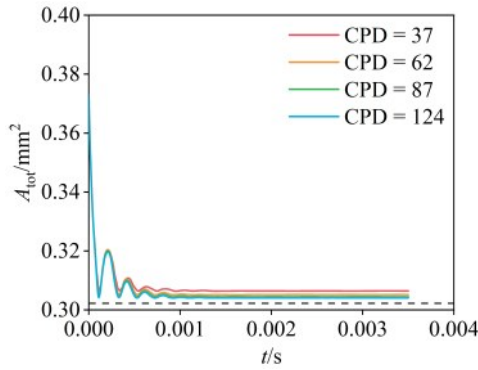
在表面张力作用下，悬浮的静止非球形液滴最终会变为球形。本节追踪了液滴弛豫过程中，不同方法计算的表面积随时间的变化情况，比较了各种方法在相界面形状变化时的性能。

计算域为一边长 0.5 mm 的正方体。初始时刻时的液滴为一边长 0.25 mm 的正方体，位于计算域中央。液滴体积为 0.015625 mm³，根据球形体积和表面积计算公式，可得平衡时的液滴半径约为 0.15509 mm，对应的液滴表面积约为 0.30225 mm²。采用均匀笛卡尔网格，网格尺寸分别为 0.00833 mm，0.005 mm，0.00357 mm，0.0025 mm，对应的液滴直径分辨率 (CPD) 约为 37，62，87，124。液滴和周围流体的密度分别为 1000 kg·m⁻³，500 kg·m⁻³。液滴和周围流体的动力黏度分别为 0.0010 Pa·s，0.0025 Pa·s。表面张力系数为 0.0236 N·m⁻¹。

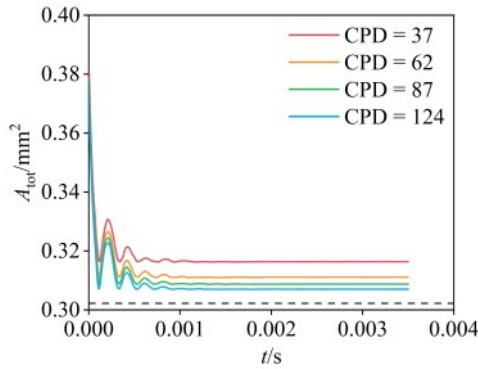
考虑到几何和流动的对称性，将坐标原点置于正方体中心，把原始计算域分割为八个大小相同的正方体，仅在第一卦限内进行计算。将与坐标面重合的表面定义为对称表面，其余表面满足局部单向化假设。

图 5 给出了四种界面面积计算方法的计算结果随时间变化情况。体积分数梯度均采用 Brackbill 等人的方法^[30]重

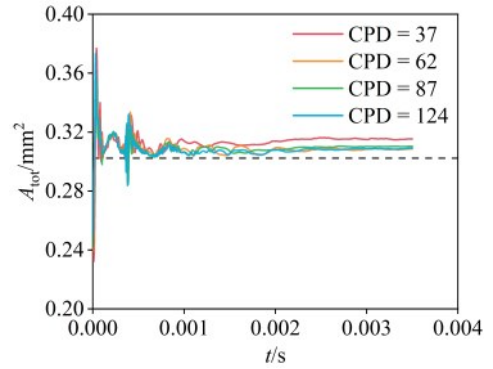
构。对比发现,修正函数为 $6C(1-C)$ 的代数法总面积计算值接近真实值的一半,这与一维分析基本吻合。因此,后续相关计算和分析均将其替换为 $12C(1-C)$ 。对比三种代数法的计算结果,可以看出当采用 $|\nabla C|V_{\text{cell}}$ 和 $2C|\nabla C|V_{\text{cell}}$ 表示网格内的相界面面积时,计算结果显示出更好的稳定性。各种方法的表面积估计值与真实值之间的偏差均随着网格



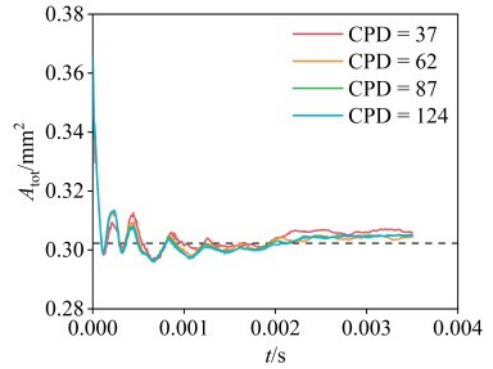
(a) $\Sigma|\nabla C|V_{\text{cell}}$



(b) $\Sigma 2C|\nabla C|V_{\text{cell}}$



(c) $\Sigma 12C(1-C)|\nabla C|V_{\text{cell}}$



(d) ΣA_{PLIC}

图5 不同分辨率下液滴自由弛豫过程中表面积变化情况

Fig. 5 Variation of the surface area of a droplet during its free relaxation at different resolutions

尺寸的减小而减小。除修正函数为 $2C$ 的情况外,相界面总面积在 $\text{CPD} \geq 62$ 后几乎不再变化,可认为此时已经达到网格收敛。

表2给出了 CPD 为62时,液滴达到平衡态后各种方法的表面积估计值及其偏差。从相界面面积的全局准确性角度来看,当网格分辨率足够时,各种方法的表面积估计值与真实值相差都不大。本文提出的多边形切割算法相对偏

差最小（约0.68%），无修正的代数法次之（相对偏差约0.97%）。如果只是为了统计相界面总面积，无修正代数法误差不大且形式简单，推荐使用。

表2 相界面总面积估计值及其偏差
(CPD = 62)

Table 2 Estimates of the surface area of the droplet and Their deviation
(CPD = 62)

表面积计算方法	稳定后的估计值/mm ²	相对偏差/%
$\Sigma \nabla C V_{\text{cell}}$	0.30518	0.97
$\Sigma 2C \nabla C V_{\text{cell}}$	0.31110	2.93
$\Sigma 12C(1-C) \nabla C V_{\text{cell}}$	0.30841	2.04
ΣA_{PLIC}	0.30432	0.68

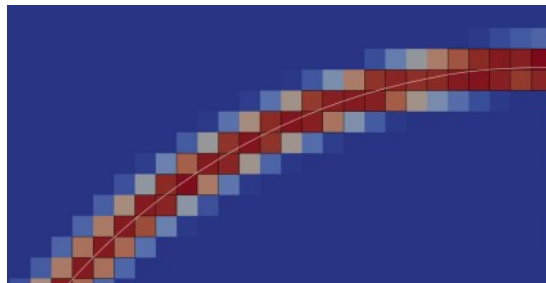
图6给出了0.003 s时相界面面积密度 $A_{\text{int}}/V_{\text{cell}}$ 相对大小的局部分布情况。黑色轮廓线用于标记相界面网格，白色曲线（ $\varphi = 0$ 等值面）用于表示相界面。图6（d）所示方法基于总面积相等对

相界面单元的 $|\nabla C|$ 加以修正，修正系数表达式为：

$$N = \int_{\Omega} |\nabla C| dV / \int_{\Omega_{\text{int}}} |\nabla C| dV \quad (8)$$

式中， Ω 代表整个计算域网格， Ω_{int} 表示所有相界面单元。

可以看出，随着 $f(C)$ 阶数的提高，前三种代数法计算的相界面面积非零区域厚度逐渐减小。后三种方法都能保证在非相界面单元内界面面积为零。比较面积密度高值区、相界面、相界面网格的相对位置，可以发现，除修正函数为 $2C$ 的情形外，三者空间位置基本一致。比较界面面积密度的相对大小，可以发现， $12C(1-C)|\nabla C|$ 在接近 C 的上下限时减小得更快，而 $N|\nabla C|$ 对 C 并不敏感。这表明函数形式过于简单不能准确地反映相界面面积与体积分数及其梯度间的真实关系。



(a) $|\nabla C|$

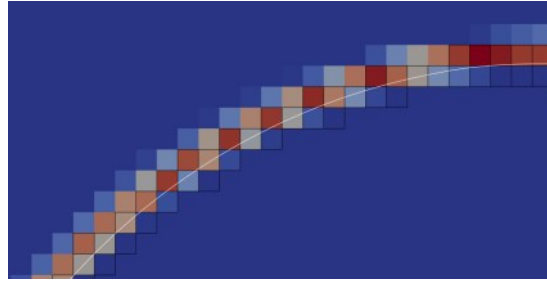
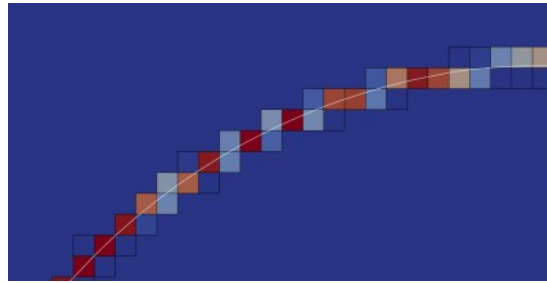
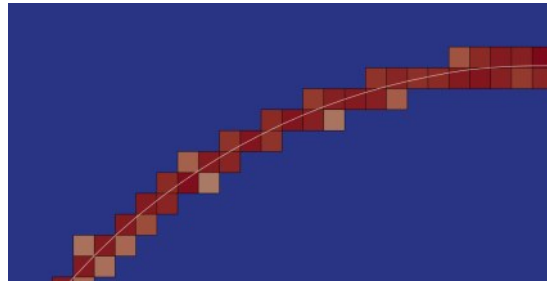
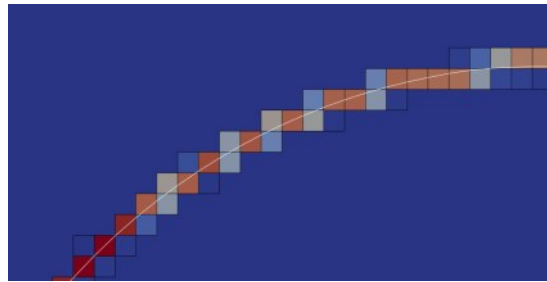
(b) $2C|\nabla C|$ (c) $12C(1-C)|\nabla C|$ (d) $N|\nabla C|$ (e) A_{PLIC}/V_{cell}

图6 液滴自由弛豫过程界面面积密度相对大小分布情况 (CPD = 62, $t = 0.003$ s)
 Fig. 6 Two-dimensional distribution of relative value of interfacial area density during droplet's free relaxation (CPD = 62, $t = 0.003$ s)

2.2 无重力条件下亲水表面上液滴的弛豫过程

无重力条件下,壁面处的非平衡态液滴将弛豫至平衡态,其最终形态由固体壁面的平衡接触角决定。本节计算了液滴在亲水表面上达到平衡过程中的表面积,以揭示壁面润湿性对算法的影响。

计算域为一尺寸为 $0.75\text{ mm} \times 0.75\text{ mm} \times 0.25\text{ mm}$ 的立方体,初始时刻的液滴是一尺寸为 $0.25\text{ mm} \times 0.25\text{ mm} \times 0.125\text{ mm}$ 的长方体,二者相对位置和大小如图7所示。流体物性与上一节相同,网格尺寸为 0.005 mm 。当接触角为 40° 时,直径分辨率约为147,而当接触角为 80° 时,直径分辨率约为69。液滴体积为 0.0078125 mm^3 ,接触角为 40° 时液滴的表面积约为 0.19758 mm^2 ,接触角为 80° 时液滴的表面积约为 0.15235 mm^2 。基于几何和流动的对称性,将坐标原点设置在几何体下表面的中心,仅使用四分之一区域进行计算。与 xOz 平面、 yOz 平面重合的两个表面采用对称边界条件,下表面设置为无滑移无渗透的静止壁面,其余表面满足局部单向化假设。

图8是接触角为 40° 和 80° 时,四种相界面面积计算方法的计算结果。可以看出,固体壁面的润湿性对代数法的准确性产生了一定的影响。当接触角为 40° 时,无修正代数法的估计值偏离真实值最远。当接触角增加到 80° 时,该方法的准确性大幅提升。不同的接触角

下,本文给出的几何法均表现出较高的准确性,液滴形状稳定后的估计值与真实值间的相对误差均低于1%。

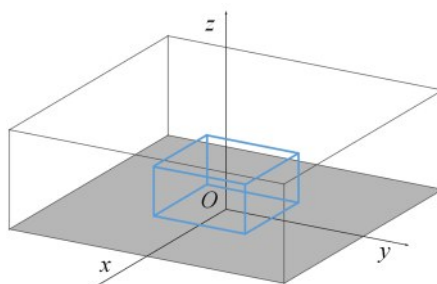


图7 初始时刻液滴的位置和形态示意图

Fig. 7 Schematic diagram of droplet position and morphology ($t = 0\text{ s}$)

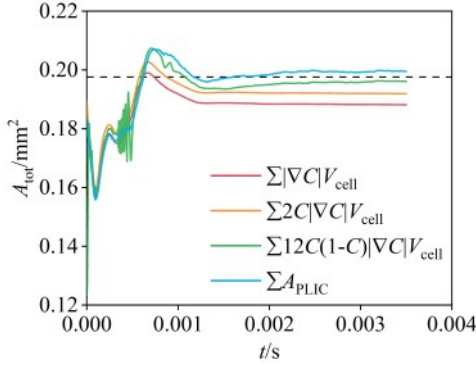
图9给出了 0.003 s 时液滴在壁面上的形态。蓝色曲面为 $\phi = 0$ 等值面,用于表示两种流体间的分界面。根据图8中曲线的走势,可知此刻液滴已达到平衡态。两个接触角下稳定后的液滴均呈球冠形且相界面与固体壁面间的夹角接近设定的接触角,说明本研究中植入的VOSET方法能够正确的处理壁面

附近的表面张力。由于图9(a)中接触角更小,接触线附近的液膜更薄,在网格尺寸固定的前提下,此处的分辨率可能不足。这会对 ∇C 的重构产生不利的影响,可能是无修正代数法误差较大的原因。

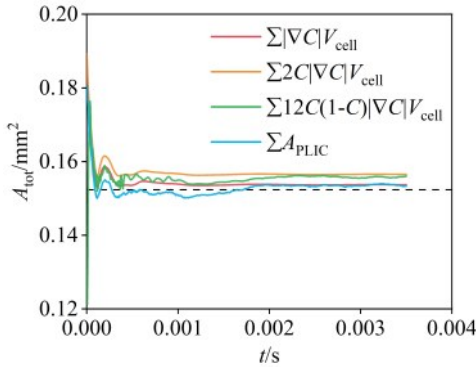
2.3 给定传质速率条件下液滴的生长过程

为简化计算,本节直接设定周围流体向液滴的传质速率 m'' 为 $10\text{ kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ 。

通过对比速度拓展前后的计算结果,探究存在相间传质时速度拓展对于维持计算准确性的作用。



(a) $\theta = 40^\circ$



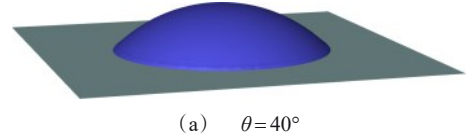
(b) $\theta = 80^\circ$

图8 不同接触角的壁面上液滴弛豫过程相界面面积变化

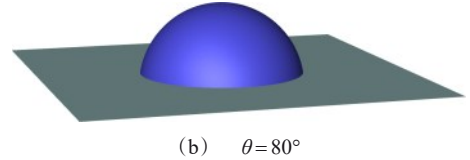
Fig. 8 Variation of droplet area during its relaxation on walls with different contact angles

液滴初始形状为球形,半径为0.15509 mm,网格尺寸为0.005 mm。液滴和周围流体的密度分别为 $500 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$, $1000 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ 。液滴和周围流体的动力黏度分别为 $0.0025 \text{ Pa} \cdot \text{s}$, $0.0010 \text{ Pa} \cdot \text{s}$ 。其他条件均与2.1节相同。液滴的生

长过程可由质量守恒方程描述:



(a) $\theta = 40^\circ$



(b) $\theta = 80^\circ$

图9 壁面上液滴达到平衡时的形态

Fig. 9 Morphology of droplets on the wall at the equilibrium state

$$\frac{d}{dt} \left(\rho \frac{4\pi}{3} R^3 \right) = 4\pi R^2 m'' \quad (9)$$

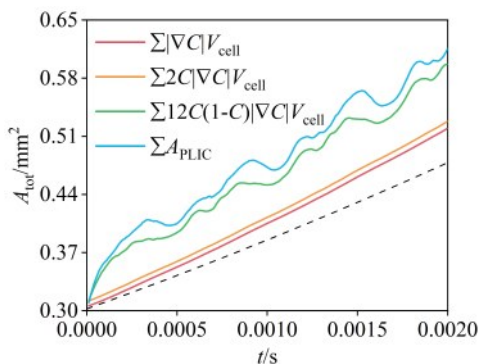
在 $0 \sim t$ 时间内对方程(9)进行积分,可以获得液滴半径与时间的函数,最终得到的液滴表面积和体积的表达式如下:

$$A_{\text{tot}}(t) = 4\pi \left(R_0 + \frac{m''}{\rho} t \right)^2 \quad (10)$$

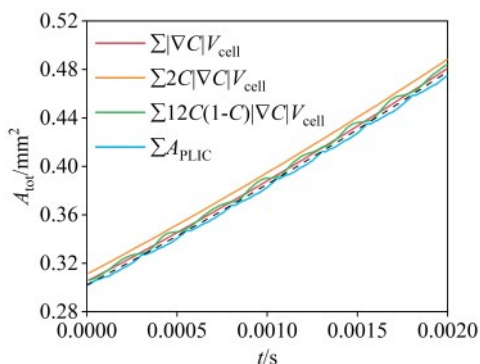
$$V_d(t) = \frac{4\pi}{3} \left(R_0 + \frac{m''}{\rho} t \right)^3 \quad (11)$$

图10中对比了不进行速度拓展和采用本文提出的方法计算得到的液滴表面积随时间变化情况。可以看出,不进行速度拓展,预测值将偏离真实的相界面面积值。修正函数 $12C(1-C)$ 的代数法和几何法都显示出明显的误差,这很可能与相界面厚度增加有关。采用质量源分配算法进行速度拓展后,数值模拟结果与理论曲线的一致性得到显著提升,各种方法的表面积估计值均能正确

地反映液滴生长过程的表面积变化情况,多边形切割算法计算的表面积最大绝对百分比误差仅为0.89%。



(a) 不进行速度拓展



(b) 采用本文提出的方法

图10 液滴生长过程表面积变化情况
($m'' = 10 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$)

Fig. 10 Variation of the surface area during droplet growth
($m'' = 10 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$)

液滴生长过程中的体积变化如图11所示。事实上,为了在更短时间内凸显二者间的差异,此处选用的传质速率($10 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$)远高于工程实践中常见的数值范围。在如此极端的情况下,使用质量源分配算法进行速度拓展后的

计算结果仍能呈现出良好的准确性,液滴体积最大绝对百分比误差为0.28%。与之相比,不采用速度拓展算法的数值计算结果逐渐偏离真实曲线:在液滴体积增加一倍时,相对误差已接近10%,且偏离程度仍在持续增大。

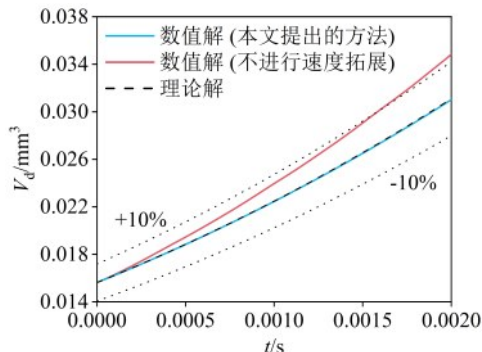
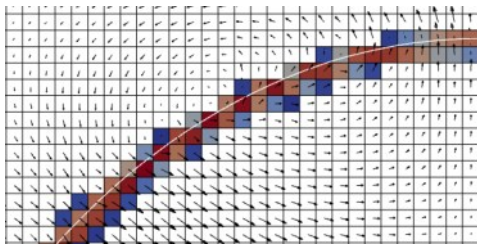


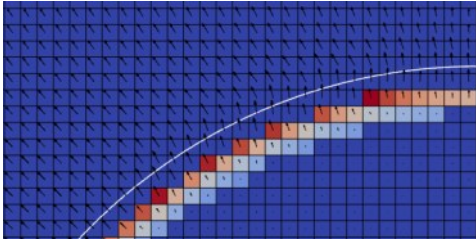
图11 液滴生长过程体积变化情况
($m'' = 10 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$)

Fig. 11 Variation of the volume during droplet growth
($m'' = 10 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$)

图12是0.002 s时的局部速度矢量图。白色曲线是($\varphi = 0$ 等值面),用于表示相界面,彩色色带表示连续性方程源项的相对大小和分布。如图所示,本文提出的质量源分配算法成功将压力方程源项移动到主相内部,确保了次相速度场散度为零。由 $(1/\rho_1 - 1/\rho_2)m'' > 0$ 可知,次相(即液滴周围流体)中真实的速度方向必定背离球心。然而,图12(a)中出现了一个非物理的旋涡,说明了速度拓展对于相间传质问题的数值研究至关重要。



(a) 不进行速度拓展



(b) 采用本文提出的方法

图12 液滴生长过程中的速度场和压力方程源项 ($m''=10\text{kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$, $t=0.002\text{ s}$)

Fig. 12 Velocity field and source term of pressure equation during droplet growth ($m''=10\text{kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$, $t=0.002\text{ s}$)

3 结论

本文提出了一个集成速度拓展的界面面积和形心计算方法。该方法由多边形切割算法和质量源分配算法两部分构成。利用三个基准算例测试算法,得到如下结论:

(1)与各种代数法相比,多边形切割算法在无传质时表现出较高的准确性。壁面接触角对算法的准确性影响很小。

(2)基于亥姆霍兹方程的质量源分配算法能够将传质引起的体积膨胀项移动到主相内,确保次相和相界面网格速

度散度为零。

(3)本文提出的集成速度拓展的相界面面积和形心计算方法在发生相间传质时,能够给出令人满意的数值解,具备一定的应用价值。

参考文献

- [1] 汤志轩,郭文华,吴思远,等.微通道蒸发器优化两相制冷剂分配及沸腾传热研究进展[J].化工学报.2023,74(10):4020-4036.
- TANG Z, GUO W, WU S, et al. Research progress on optimizing two-phase refrigerant distribution and boiling heat transfer in microchannel evaporators [J]. CIESC Journal. 2023, 74(10): 4020-4036.
- [2] 刘畅,李树森,张立峰. RH精炼过程中气液两相流动及混匀现象的模拟研究[J].金属学报.2018,54(2):347-356.
- LIU C, LI S, ZHANG L. Simulation of gas-liquid two-phase flow and mixing phenomena during RH refining process[J]. Acta Metallurgica Sinica. 2018, 54(2): 347-356.
- [3] 罗成,范晓勇,朱永红,等.中低温煤焦油加氢反应器不同分配器中液体分布的CFD模拟[J].化工进展.2023,42(9):4538-4549.
- LUO C, FAN X, ZHU Y, et al. CFD simulation of liquid distribution in different distributors in medium-low temperature coal tar hydrogenation reactor [J]. Chemical Industry and Engineering Progress. 2023, 42(9): 4538-4549.
- [4] FRANCOIS J, DIETRICH N, GUIRAUD P, et al. Direct measurement of mass transfer around a single bubble by micro-PLIFI [J]. Chemical Engineering Science. 2011,

- 66(14): 3328-3338.
- [5] LI H, HRNJAK P. Heat transfer coefficient, pressure gradient, and flow patterns of R1233zd(E) and R1336mzz(Z) evaporating in a microchannel tube[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2022, 182: 121992.
- [6] 宗潇, 刘继平, 杨赅石, 等. 矩形通道内蒸汽射流凝结换热面积的实验研究[J]. *西安交通大学学报*. 2018, 52(7): 46-51.
- ZONG X, LIU J, YANG C, et al. Experimental study on the interfacial heat transfer area of steam jet condensation in a rectangular mix chamber[J]. *Journal of Xi'an Jiaotong University*. 2018, 52(7): 46-51.
- [7] ZHAN S, YUAN R, HUANG Y, et al. Numerical simulation of hydrogen bubble growth and mass transfer on horizontal microelectrode surface under electrode-normal magnetic field[J]. *Physics of Fluids*. 2022, 34(11): 112120.
- [8] 支长双, 李创业, 李金波, 等. 气液两相流分配器参数敏感性分析与优化[J]. *西安交通大学学报*. 2024, 58(6): 90-102.
- ZHI C, LI C, LI J, et al. Sensitivity analysis and parametric optimization of distributors with vapor-liquid two-phase flow [J]. *Journal of Xi'an Jiaotong University*. 2024, 58(6): 90-102.
- [9] CHEN Y, JIN S, YU B, et al. Modeling and study of microlayer effects on flow boiling in a mini-channel[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2023, 208: 124039.
- [10] HIRT C W, NICHOLS B D. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries[J]. *Journal of Computational Physics*. 1981, 39(1): 201-225.
- [11] SCHLOTTKE J, WEIGAND B. Direct numerical simulation of evaporating droplets [J]. *Journal of Computational Physics*. 2008, 227(10): 5215-5237.
- [12] BANERJEE R. Numerical investigation of evaporation of a single ethanol/isooctane droplet[J]. *Fuel*. 2013, 107: 724-739.
- [13] MAGNINI M, MATAR O K. Numerical study of the impact of the channel shape on microchannel boiling heat transfer[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2020, 150: 119322.
- [14] SOH G Y, YEOH G H, TIMCHENKO V. A CFD model for the coupling of multiphase, multicomponent and mass transfer physics for micro-scale simulations[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2017, 113: 922-934.
- [15] GUO Z, FLETCHER D F, HAYNES B S. A review of computational modelling of flow boiling in microchannels[J]. *The Journal of Computational Multiphase Flows*. 2014, 6(2): 79-110.
- [16] LI W, WANG J, CHEN H, et al. CFD analysis on the intensified mechanism of gas-liquid mass transfer in a microporous tube-in-tube microchannel reactor[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2022, 182: 121914.
- [17] LU C, DING Y, WANG H, et al. Numerical simulation study on the flow dynamics and reaction kinetics of CO₂ bubble in monoethanolamine solution[J]. *Physics of fluids*. 2024, 36(11): 113331.
- [18] SOH G Y, YEOH G H, TIMCHENKO V. An algorithm to calculate interfacial area for multiphase mass transfer through the volume-of-fluid method[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2016,

- 100: 573-581.
- [19] HARDT S, WONDRA F. Evaporation model for interfacial flows based on a continuum-field representation of the source terms[J]. *Journal of Computational Physics*. 2008, 227(11): 5871-5895.
- [20] ZHU C, LI Y, XIE F, et al. Development of a modified mass transfer model based on height function method to capture the pressure oscillation occurred in direct contact condensation process[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2023, 201: 123619.
- [21] LING K, SON G, SUN D, et al. Three dimensional numerical simulation on bubble growth and merger in microchannel boiling flow[J]. *International Journal of Thermal Sciences*. 2015, 98: 135-147.
- [22] GENNARI G, JEFFERSON-LOVEDAY R, PICKERING S J. A phase-change model for diffusion-driven mass transfer problems in incompressible two-phase flows[J]. *Chemical Engineering Science*. 2022, 259: 117791.
- [23] SCARDOVELLI R, AULISA E, MANSERVISI S, et al. A marker-VOF algorithm for incompressible flows with interfaces[Z]. Montreal: 2002.
- [24] BOTHE D, FLECKENSTEIN S. A volume-of-fluid-based method for mass transfer processes at fluid particles[J]. *Chemical Engineering Science*. 2013, 101: 283-302.
- [25] SCAPIN N, COSTA P, BRANDT L. A volume-of-fluid method for interface-resolved simulations of phase-changing two-fluid flows[J]. *Journal of Computational Physics*. 2020, 407: 109251.
- [26] MALAN L C, MALAN A G, ZALESKI S, et al. A geometric VOF method for interface resolved phase change and conservative thermal energy advection[J]. *Journal of Computational Physics*. 2021, 426: 109920.
- [27] LING K, LI Z, SUN D, et al. A three-dimensional volume of fluid & level set (VOSET) method for incompressible two-phase flow[J]. *Computers & Fluids*. 2015, 118: 293-304.
- [28] VAN SINT ANNALAND M, DEEN N G, KUIPERS J A M. Numerical simulation of gas bubbles behaviour using a three-dimensional volume of fluid method[J]. *Chemical Engineering Science*. 2005, 60 (11): 2999-3011.
- [29] DAI D, TONG A Y. Analytical interface reconstruction algorithms in the PLIC-VOF method for 3D polyhedral unstructured meshes[J]. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*. 2019, 91 (5): 213-227.
- [30] BRACKBILL J U, KOTHE D B, ZEMACH C. A continuum method for modeling surface tension[J]. *Journal of Computational Physics*. 1992, 100(2): 335-354.