0254-6124/2008/28(4)-350-06 *Chin. J. Space Sci.* 空间科学学报

Ji Yan, Liu Qiusheng, Zhu Zhiqiang. Numerical simulation of thermocapillary convection in an evaporating liquid layer under microgravity condition. *Chin. J. Space Sci.*, 2008, **28**(4): 350~355

微重力环境下蒸发液层热毛细对流的数值模拟*

纪 岩 刘秋生 朱志强

(中国科学院力学研究所 北京 100080)

摘 要 提出了一种新模型来研究由单一物质构成的液层在其纯蒸气中的蒸发. 液层置于微重力环境中并且受到水平方向温度梯度的作用, 液层的热毛细对流和蒸发耦合在一起, 使得气液界面的传热传质规律更加复杂. 用理论分析的方法求解了不考虑热毛细效应的纯蒸发模型, 得出温度场分布和界面质量流量的解析表达式. 对于热毛细对流和蒸发耦合情况, 采用有限差分的投影算法同时求解 Navier-Stokes 方程和能量方程, 得到了不同蒸发 Biot 数和 Marangoni 数下流场和温度场的稳态数值解. 论述了蒸发 Biot 数和 Marangoni 数对界面传热传质的影响, 提出并解释了蒸发和热毛细对流耦合的三种模式.

关键词 微重力条件; 蒸发; 热毛细对流; 数值模拟

中图法分类号 V524

Numerical Simulation of Thermocapillary Convection in an Evaporating Liquid Layer Under Microgravity Condition

JI Yan LIU Qiusheng ZHU Zhiqiang

(*Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing* 100080)

Abstract A new model of the evaporation of a pure liquid layer underlying its own vapor is proposed and analyzed. The liquid layer is subjected to horizontal temperature gradient under microgravity condition. The thermocapillary convection is coupled with the evaporation, adding complication in the interfacial mass and heat transfer. An analytical expression for temperature distribution is given in pure evaporation case without considering thermocapillarity. For the case of both evaporation and thermocapillary convection, a finite difference algorithm is developed to solve simultaneously the thermal and flow fields in the liquid layer at various evaporation Biot number and Marangoni number until the steady state solution is achieved. The influence of evaporation Biot number and Marangoni number on the interfacial mass and heat transfer has been discussed. Three regimes of the coupling between evaporation and thermocapillary convection are found and explained from our numerical results.

Key words Microgravity condition, Evaporation liquid layer, Thermocapillary convection, Numerical simulation

---

* 国家自然科学基金项目 (10772185, 10372105) 和中国科学院知识创新工程 (KGCX-SW-409) 共同资助
2007-08-22 收到原稿, 2008-04-21 收到修定稿

1　引言

蒸发是自然界普遍存在的现象，也是工程应用中不可缺少的过程．例如，蒸发与冷凝是水循环的重要环节，蒸发在热交换器、蒸馏设备以及燃烧装置中有广泛的应用．近年来，随着国际空间站的建立和空间微重力流体物理的长足发展，具有工程流体技术应用背景的复杂流体界面现象的流动过程研究引起人们的重视, 从而为空间人类生存 (太空舱、太空船、月球站) 的环境控制 (蒸发与冷凝) 和热机械装置 (热管、沸腾传热等) 的开发和工程设计提供理论依据.

蒸发是吸热过程，它往往和流体的热对流同时存在. 液层产生热对流通常有两种方式: 液体密度随温度变化引起的浮力对流，以及液体表面张力随温度变化引起的热毛细对流 [1],[2]. 在微重力环境中，浮力效应的影响减小甚至消失，由表面张力驱动的热毛细对流居于主导地位，成为影响流体热量和质量输运过程的主要因素．本文讨论了界面同时存在蒸发和热毛细效应的液层，数值模拟了液层内部的流动，分析了蒸发和热毛细对流对界面传热传质的影响.

虽然已有学者在蒸发领域做了大量的研究，但是只有少数文章阐述了蒸发液体中的热毛细对流. Shih 和 Megaridis[3] 建立对称液滴模型，计算了蒸发和热毛细对流同时存在的液滴动态行为． Savino 等 [4] 研究了蒸发悬滴中的热毛细对流. 通过实验测量和数值模拟的结合，分析了瞬态和稳态时热毛细对流对蒸发速率的影响． Hu 和 Larson[5] 从润滑模型出发研究固着液滴的蒸发，给出了简化条件下流场和温度场的解析解，分析了热毛细应力对蒸发的影响． Schmidt 等 [7] 研究了低重力环境下毛细结构或多孔介质的空隙中挥发性液体的蒸发，论述了热毛细对流和蒸发冷凝作用对流场结构的影响.

尽管前人对具有蒸发界面的热毛细流动提出了一些理论和模型，但是该领域的研究还存在许多问题． (1) 很多模型中气相是液体蒸气和其他气体的混合物，由此引出气液界面处于热力学平衡状态的假设．在这些模型中，蒸发流量由蒸气在混合气体中的质量扩散决定．如果蒸发液面上方是液体的纯蒸气，就要考虑界面的非平衡热力学效应 [6]. 这种热力学非平衡的蒸发模型通常用来分析液体的热不稳定性, 很少被用做数值模拟． (2) 一些模型通常是把蒸发问题固定在某个平衡态或非平衡态，很少有研究讨论在不同非平衡程度的蒸发模式和不同强度的热毛细对流下，蒸发和热毛细对流的耦合关系. (3) 蒸 发对热毛细对流流场结构的影响已经得到关注，但是热毛细对流和蒸发效应对于界面的热质传输各有什么影响？它们是如何相互耦合的？这些问题仍有待进一步研究．基于以上的分析，我们提出了新的模型来研究同时存在蒸发和热毛细对流的系统中相变界面的传热传质规律.

2　数学模型

如图 1 所示，高度为 H, 宽度为 D 的二维矩形容器中充满了不可压缩的牛顿流体，液体的上方是它的纯蒸气，可以保持有固定的压强．液层的左侧和右侧壁面都是垂直的刚性固壁，并且能够维持于特定温度．为保证气液界面处于恒定高度，模型采用由多孔介质构成的绝热底面，从而可以向其下方缓慢注入液体.

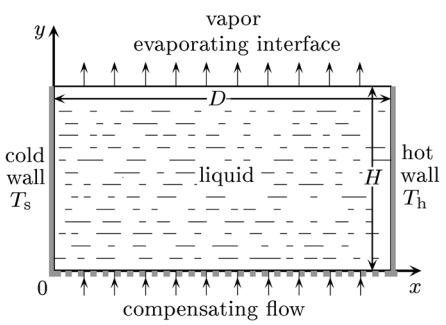

图 1　蒸发-热毛细对流模型

Fig.1　Evaporation-thermocapillary convection model

在初始时刻，整个系统 (液体、蒸气和边界) 处于饱和温度 T_s, 气液界面达到热力学平衡状态，没有净蒸发流量. 液层中没有热对流. 在某个时刻，右侧壁面的温度突然被提高到一个略高于饱和温度的温度 T_h. 液层内部和表面会产生水平方向的温度梯度，进而引起由界面热端流向冷端的热毛细对流. 同时，由于界面温度超过蒸气压对应的饱和温度，热力学非平衡效应会引发正的蒸发流量.

3　控制方程和边界条件

本文重点研究的是热毛细效应，要求热毛细流

动在液体中居于主导地位. 这个条件可以在微重力下实现, 在很薄的液层内也是近似如此. 因此我们采用忽略重力项, 并且应用 Boussinesq 近似的 Navier-Stokers 方程和能量方程来求解速度场和温度场, 有

$$\nabla \cdot \boldsymbol{v} = 0, \tag{1}$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + (\boldsymbol{v} \cdot \nabla)\boldsymbol{v} = -\nabla p + \nabla^2 \boldsymbol{v}, \tag{2}$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + (\boldsymbol{v} \cdot \nabla)\theta = \frac{1}{Pr}\nabla^2 \theta. \tag{3}$$

上述方程中, $\boldsymbol{v}$, θ 和 p 分别代表无量纲的速度矢量、温度和压强. 在无量纲化的过程中, 长度、时间、速度、温度以及压强的特征量分别为 $D, D^2/\nu$, ν/D, $\Delta T = T_{\mathrm{h}} - T_{\mathrm{s}}$, $\rho\nu^2/D^2$. 液层的厚宽比定义为 $a = h/d$. 本模型出现的物理量为密度 ρ、动力学粘性系数 μ、运动学粘性系数 ν、热扩散系数 κ、热传导系数 λ. 在整个蒸发和对流过程中, 尽管液体的自由面会有变形, 但是如果毛细数足够小 [8], 这种变形就可以忽略. 本文研究的问题属于这种情况. 在本模型中, 液体的表面张力是温度的线性函数, 即 $\sigma = \sigma_{\mathrm{s}} - \gamma(T - T_{\mathrm{s}})$. 其中, T_{s} 是对应于蒸气压力的饱和温度. 为了使上述方程组完备, 除了质量守恒、动量守恒和能量守恒的界面边界条件以外, 还需要另外一个方程来描述蒸发流量. 基于界面处的热力学非平衡假设, 我们采用由分子动力学得出并且经过线性近似后的 Hertz-Knudsen 方程 [9], 即

$$j = \alpha\rho_{\mathrm{v}} L\sqrt{\frac{M}{2\pi R T_{\mathrm{s}}^3}}(T_{\mathrm{i}} - T_{\mathrm{s}}). \tag{4}$$

这个关系式把界面处各点的蒸发质量流量 j (定义为当地质量流量) 和相应的界面温度 T 联系起来. α 表示蒸发适应系数, M 表示蒸气的摩尔质量, R 表示普适气体常数, L 表示蒸发潜热, ρ_{v} 表示蒸气的密度.

为表述方便, 约定 u, v 分别为速度矢量的水平与垂直方向分量. 把温度为 T_{s} 和 T_{h} 的左右壁面分别称为冷壁面与热壁面. 壁面处液体速度为 0. 在底部, 液体采用无滑移条件, 其法向速度由整个液层的质量守恒得出, 边界条件如下.

两侧壁面:

$$u = v = 0; \quad \theta = 0(x = 0), \quad \theta = 1(x = 1). \tag{5}$$

底部:

$$u = 0; \quad v(x, 0) = \int_0^1 v(x, A)\mathrm{d}x; \quad \frac{\partial \theta}{\partial y} = 0. \tag{6}$$

在蒸发界面处, 液体和蒸气的速度关系可以由质量流量相等得出. 选取 $\lambda\Delta T/DL$ 作为特征质量流量. 引入无量纲参数 $E = \lambda\Delta T/\rho\nu L$, 即蒸发数 [10], 它表示粘性特征时间尺度和蒸发特征时间尺度之比. 由此可得

$$v = Ej. \tag{7}$$

根据切向应力平衡关系, 且忽略蒸气的剪切应力 (蒸气的动力学粘性系数远小于液体), 有

$$\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} = -\frac{Ma}{Pr}\frac{\partial \theta}{\partial x}. \tag{8}$$

其中, Ma 表示 Marangoni 数, 定义为 $\gamma\Delta T D/(\mu\kappa)$, $Pr = \nu/\kappa$ 为 Prandtl 数.

无量纲的 Hertz-Knudsen 方程为

$$j = Bi_{\mathrm{ev}}\theta. \tag{9}$$

其中的无量纲参数 Bi_{ev} 称为蒸发 Biot 数 [11], 它定义为

$$Bi_{\mathrm{ev}} = \frac{\alpha D\rho_{\mathrm{v}} L^2}{\lambda}\sqrt{\frac{M}{2\pi R T_{\mathrm{s}}^3}}. \tag{10}$$

在方程 (9) 中, 蒸发 Biot 数可用来衡量蒸发界面非平衡的程度. $Bi_{\mathrm{ev}} = \infty$ 对应于蒸发达到准平衡的极限, 此时界面温度是常数, 并且等于饱和温度 T_{s} ($\theta = 0$). $Bi_{\mathrm{ev}} = 0$ 对应于无挥发性液体的情形, 此时虽然界面温度高于饱和温度, 但蒸发流量仍然是 0[10].

在推导蒸发界面能量守恒边界条件时, 我们用质量流量和密度来表示速度, 并且认为蒸气的热传导系数和密度远小于液体, 忽略粘性耗散能、离开液面的蒸气分子动能和表面张力做的功, 得到

$$Bi_{\mathrm{ev}}\theta = -\frac{\partial \theta}{\partial y}. \tag{11}$$

它表示蒸发吸收的热量等于界面法向液体的热通量密度, 也就是说, 维持蒸发的能量主要是由界面处液体垂直方向的热传导来提供的.

4 数值方法

本文采用有限差分离散求解连续性方程、动量方程和能量方程. 对于不可压缩流动, 用投影方法 [12] (或称分裂步长算法) 实现速度和压力的解耦. 在时间方向上, 动量方程采用 Crank-Nicolson

格式离散，对流项用 Adams-Bashforth 格式显式计算．所有的空间微分都采用二阶精度的中心差分进行近似．通过模拟和对比方腔内液层的热毛细对流[13]验证了程序的可靠性．本模型是要研究蒸发和热毛细对流达到稳态的流场，因此计算收敛的判定准则是速度、压力和温度在相邻两个时间步的相对差值小于 10^{-8}．对于大宽厚比的液层，一定强度的热毛细对流会出现失稳，为了避免复杂流动模式的出现，这里取液层的宽厚比为 1 ($A=1$).

5　尺度分析和参数取值

计算采用饱和水和水蒸气在接近 4°C 的物性参数来确定本文的无量纲参数，因为在这个温度下水的热膨胀系数最小. 同时, 液层厚度取为毫米量级, 从而可以进行相关的地面实验来模拟微重力环境下热毛细对流占主导地位的流动．液层内的最大温差 ΔT 受到线性化 Hertz-Knudsen 方程的限制，本模型取 $\Delta T = T_{\mathrm{h}} - T_{\mathrm{s}}$ 小于 1 K. 根据上文确定的这些模型参数，可以计算得到无量纲参数的取值范围，$E = 10^{-4} \sim 10^{-5}$, $Ma = 10^{1} \sim 10^{3}$, $Pr = 13.0$, 毛细数 $Ca = 10^{-6}$, $Bi_{\mathrm{ev}} = 10^{2}\alpha \sim 10^{3}\alpha$. 蒸发适应系数 α 表示离开液面的分子最终进入气体的比例，其值在 0 到 1 之间变化，不同的环境下会跨越好几个量级．本文认为可以取 0 到 1 之间的任意值，对应的 Bi_{ev} 可以在 0 到 10^3 之间变化.

6　结果与分析

同时存在蒸发和热毛细对流的液层其物理规律是复杂的，为了能清晰反映出它们各自的作用机理，我们先研究不考虑热毛细效应的理想的纯蒸发问题，然后再加入热毛细效应，分析热毛细对流对界面热质传输的贡献．上文已经引入了蒸发界面各点的质量流量 $j(x, A)$, 也称为当地质量流量．此处再定义界面的积分质量流量

$$J = \int_0^1 j(x, A)\mathrm{d}x,$$

也称其为总质量流量.

6.1　纯蒸发理论分析

本节的讨论不考虑热毛细效应，即认为 $\nu = 0$. 在此假设下，对流场进行了数值模拟．当 Bi_{ev} 在 0 到 10^3 变化时，积分质量流量 J 和液体的无量纲温度 θ 处于同一个量级．由于蒸发数 E 很小，根据方程 (7), 液层中补液的速度也会很小．因此可以忽略能量方程 (3) 中的对流项，简化为二维拉普拉斯方程求解．利用分离变量法，得到用无穷项级数表示的解析解，有

$$\theta(x, y) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{4\sin\mu_n}{2\mu_n + \sin 2\mu_n} \frac{\mathrm{e}^{\mu_n x} - \mathrm{e}^{-\mu_n x}}{\mathrm{e}^{\mu_n} - \mathrm{e}^{-\mu_n}} \cos\mu_n y. \tag{12}$$

其中，μ_n 是下面方程的第 n 个根：

$$Bi_{\mathrm{ev}} \cos\mu_n = \mu_n \sin\mu_n. \tag{13}$$

积分质量流量的解析形式为

$$J = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{4\sin^2\mu_n}{2\mu_n + \sin 2\mu_n} \tanh\frac{\mu_n}{2}. \tag{14}$$

根据这个关系，当 $Bi_{\mathrm{ev}} = 0$ 时，液体不挥发，蒸发流量为 0; 当 $Bi_{\mathrm{ev}} \to \infty$ 时，取极限可得

$$J = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2}{\mu_n} \tanh\frac{\mu_n}{2}. \tag{15}$$

这个无穷级数不收敛，表明在方程 (15) 中出现了奇异性. 因为当 $Bi_{\mathrm{ev}} \to \infty$ 时, 界面热端的温度梯度会无限制增长，该点当地质量流量为无限大．这要求蒸气离开液面的速率以及壁面的热流量为无穷大，这是现实中无法达到的状态，因为壁面材料有限的导热能力和蒸气有限的离开液层的速率决定了 J 是有限的.

6.2　热毛细效应对界面热质传输的影响

本小节引入热毛细效应, 通过数值模拟得到 Ma 和 Bi_{ev} 取不同值的情况下流场的等温线. 如图 2 和图 3 所示.

液体的表面张力随温度的升高而降低，表层的热毛细流动把液体从界面热端输运到冷端，对热量的传输起促进作用，如图 2 所示．图 3 显示出随着蒸发 Biot 数增大，不仅界面温度降低，而且界面在热端以外部分的水平温度梯度也会降低．这就导致界面的热毛细对流被限制在热端附近，对流对界面热量传输的贡献被蒸发所削弱．由于蒸发过程会显著降低液体表面的温度，蒸发 Biot 数越大影响就越明显．在图 3(c), 等温线几乎全部被压缩到界面热端角落，热毛细对流只在壁面热端附近存在，对界面其他部分的影响很小.

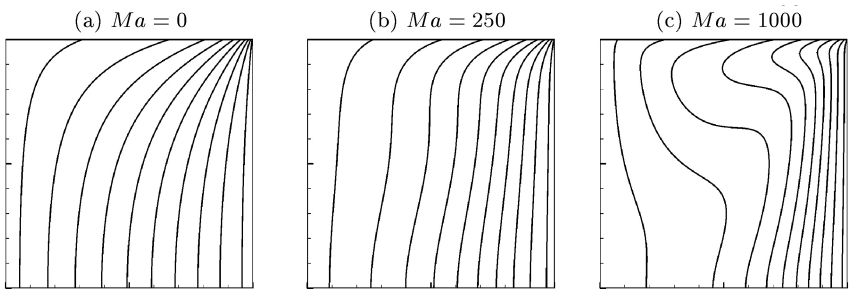

图 2 不同 Ma 数下间隔为 0.1 的等温线 ($Bi_{\rm ev} = 10$)

Fig.2 Isotherms at contour intervals of 0.1 with different Ma number ($Bi_{\rm ev} = 10$)

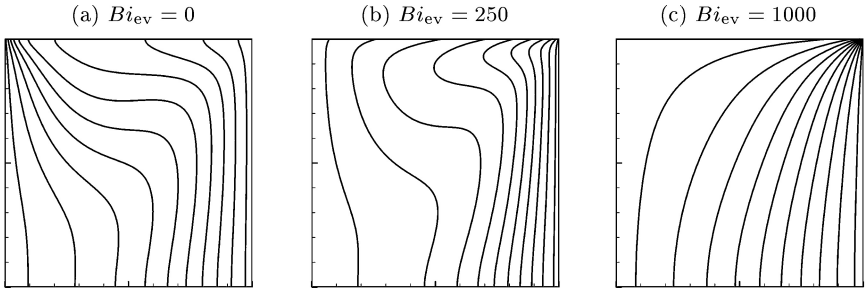

图 3 不同 $Bi_{\rm ev}$ 数下间隔为 0.1 的等温线 ($Ma = 1000$)

Fig.3 Isotherms at contour intervals of 0.1 with different $Bi_{\rm ev}$ number ($Ma = 1000$)

为了研究不同强度的热毛细对流对界面传质的影响, 本模型分别取 Ma 为 100, 250, 500 和 1000, 同时控制 $Bi_{\rm ev}$ 取 12 个跨越 4 个量级的不同值, 数值模拟每一种 Ma-$Bi_{\rm ev}$ 组合的稳态流动. 图 4 给出了总蒸发流量随 $Bi_{\rm ev}$ 变化的曲线. 不同的 $Bi_{\rm ev}$ 表示蒸发处于不同的热力学非平衡状态. 其中最下面的一条曲线是由 6.1 节解析解得到的纯蒸发情况下的结果. 我们把此时 (纯蒸发) 的总蒸发流量记为 J_0. 另外三条曲线均为热毛细对流存在下数值模拟的结果.

从图 4 可以看到, 无论在何种蒸发模式下, 热毛细对流的引入都会增大总蒸发流量. 在小 Ma 下, 数值模拟的结果接近由解析解得到的纯蒸发曲线, 这从另一个侧面说明了数值模拟结果的可靠性. 当热毛细对流达到一定强度时 (例如 $Ma = 1000$), 总蒸发流量随 $Bi_{\rm ev}$ 单调递增的性质发生改变, J 在中间某处 ($Bi_{\rm ev} = 30$) 出现极大值.

图 5 给出了存在热毛细对流的总蒸发流量减去纯蒸发时总蒸发流量得出的曲线, 即 $J - J_0$ 曲线. 该图便于分析热毛细对流对于总蒸发流量的贡献.

图 5 显示出热毛细对流使总蒸发流量增大的程度与液层的蒸发非平衡程度有关, 即取决于 $Bi_{\rm ev}$ 的大小. 根据图 3 得到的结论, $Bi_{\rm ev}$ 的增大会削弱热毛细对流. 因此, 对于 $Bi_{\rm ev} > 10^2$ 的接近热力学平衡态的蒸发, 液面绝大部分的温度都接近饱和温度, 在热端以外的部分只能引起微弱的热毛细对流. 这就限制了热毛细对流对蒸发流量的贡献. $Bi_{\rm ev} < 10^0$ 的蒸发处于强烈的非平衡状态, 尽管界面存在显著的温度梯度, 由它所引起的强烈的热毛细对流促进

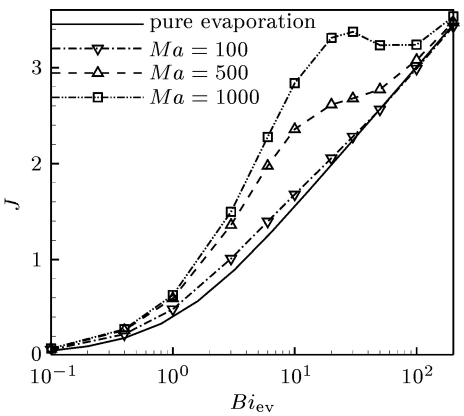

图 4 不同蒸发非平衡状态下的总蒸发流量

Fig.4 Total evaporation flux at different evaporation non-equilibrium mode

了液层内的热量传输，但是蒸发会被流体不容易挥发的特性所阻碍，使得热毛细对流对蒸发质量流量的提高很有限．只有在 $Bi_{\rm ev}$ 取适中值的时候，热毛细对流在界面的大部分区域仍然能维持一定的强度，而且液体的蒸发能力也比较可观，热毛细对流才对界面的质量传输有明显提高．如图 5 所示，对于不同 Marangoni 数的热毛细对流，$J-J_0$ 都在蒸发 Biot 数约为 10^1 时达到最大值．

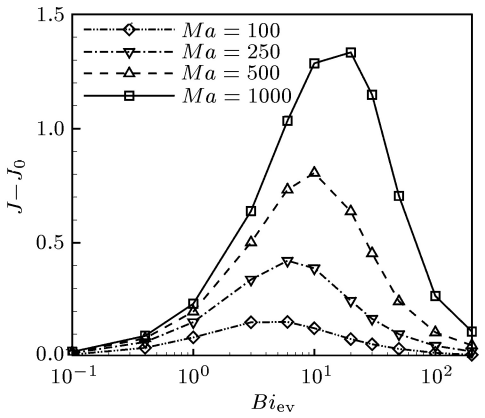

图 5　不同蒸发非平衡状态下热毛细对流对总蒸发流量的贡献

Fig.5　Contribution of thermocapillary convection to evaporation flux at different evaporation non-equilibrium mode

综上所述，以上三种不同稳态蒸发模式的产生是相变效应和热毛细效应耦合的结果．一方面，热毛细对流把热量从热壁面带到冷壁面，提高了界面冷端部分的温度．另一方面，方程 (9) 表明，在界面温度固定时，蒸发 Biot 数的增大会带来蒸发质量流量的提高．然而，增大蒸发 Biot 数还会对蒸发流量的提高带来两个负面影响：不仅会使界面温度降低至接近饱和温度，也会使界面在热端壁面以外的温度梯度明显降低，削弱了热毛细对流及其对蒸发流量的贡献．

7　结论

本文论述了在微重力环境下，存在热毛细对流的液层中用以描述蒸发界面稳定状态热质传输的三个蒸发模式，阐述了蒸发和热毛细对流的耦合机理，并且用该机理解释了这三个蒸发模式的物理作用机制. 通过对纯蒸发模型的研究, 用解析的方法给出了温度场分布以及气液界面质量流量的表达式.

参考文献

[1] Scriven L E, Sternling C V. The Marangoni effects. *Nature*, 1960, **187**:186∼188

[2] Kenning D B R. Two-Phase flow with nonuniform surface tension. *Appl. Mech. Rev.*, 1968, **21**:1101∼1111

[3] Shih A T, Megaridis C M. Thermocapillary flow effects on convective droplet evaporation. *Int. J. Heat Mass Trans.*, 1996, **39**:247∼257

[4] Savino R, Fico S. Transient Marangoni convection in hanging evaporating drops. *Phys. Fluids*, 2004, **16**: 3738∼3754

[5] Hu H, Larson R G. Analysis of the effects of Marangoni stresses on the microflow in an evaporating sessile droplet. *Langmuir*, 2005, **21**:3972∼3980

[6] Colinet P, Legros J C, Velarde M G. Nonlinear Dynamics of Surface-Tension-Driven Instabilities. Berlin: Wiley-VCH, 2001

[7] Schmidt G R, Chung T J, Nadarajah A. Thermocapillary flow with evaporation and condensatin at low gravity, Part 1, Non-deforming surface. *J. Fluid Mech.*, 1995, **294**:323∼347

[8] Davis S H. Thermocapillary instabilities. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 1987, **19**:403∼435

[9] Palmer H J. The hydrodynamic stability of rapidly evaporating liquids at reduced pressure. *J. Fluid Mech.*, 1976, **75**:487∼511

[10] Burelbach J P, Bankoff S G, Davis S H. Nonlinear stability of evaporating/condensing liquid films. *J. Fluid Mech.*, 1988, **195**:463∼494

[11] Liu R, Liu Q S, Hu W R. Marangoni-B'enard instability with the exchange of evaporation at liquid-vapor interface. *Chin. Phys. Lett.*, 2005, **22**:402∼404

[12] Brown D L, Cortez R, Minion M L. Accurate projection methods for the incompressible Navier-Stokes equations. *J. Comput. Phys.*, 2001, **168**:464∼499

[13] Zebib A, Homsy G M, Meiburg E. High Marangoni number convection in a square cavity. *Phys. Fluids*, 1985, **28**:3467∼3476