LBE MRT 方法模拟 Marangoni 对流

马斌^①, 李莉^②

① 兰州交通大学机电工程学院热能与动力工程系, 兰州 730000;

② 兰州电力学校, 兰州 730000

E-mail: mabin@tsinghua.org.cn

2010-10-09 收稿, 2010-12-08 接受

国家自然科学基金资助项目(50876040)

摘要 有机溶液在水表面溶解会引起表层表面张力变化, 产生表面张力梯度, 从而诱发 Marangoni 对流. 采用 LBE MRT 方法对室温下圆柱烧杯中滴加低浓度乙醇溶液诱发的 Marangoni 对流现象进行模拟, 结果表明由表面张力梯度诱发的 Marangoni 对流在表面薄层区域强度较大且速度梯度较大, 但在主液相区流速相对很低. 本文模拟的最大表层速度数值和表层速度分布结果与同条件下的实验结果基本相符.

关键词

表面张力

Marangoni 对流

LBE MRT

数值模拟

Marangoni 对流指气液相际传质过程中, 液相表面张力梯度超过一定临界值而导致液相近界面区域发生流体湍动的物理现象^[1,2]. 大量研究表明, Marangoni 对流对界面的流动传质有极大的影响, 其效应促进了表面流体的更新, 增强了传质速率. 文献[3,4]结果表明, 同种条件下, 存在 Marangoni 对流的传质速率是无 Marangoni 对流时传质速率的数倍.

表面张力梯度强度很大程度上决定了 Marangoni 对流的强度, 而传质过程中往往伴随着显著的界面表面张力梯度的变化, 因此 Marangoni 对流对诸多传质过程影响显著. 文献[1,5,6]实验证明, 当 Marangoni 对流发生时界面处传质速率明显增强, 界面流体运动速度在 0.1~0.6 m/s 之间. 总体来说, 由于对近界面区域流动观测手段的匮乏, 目前 Marangoni 对流的研究更多关注的是流体表面速度或宏观传质系数的测量, 很难得到 Marangoni 对流的详细信息^[6], 而计算流体力学的方法则可以解决这个问题. 本文用 LBE MRT 方法, 通过在流动边界加入实测的表面张力数据, 对传质过程中由表面张力梯度导致的 Marangoni 对流进行定量数值研究, 以获得实验难以测量的流场详细信息, 为研究 Marangoni 对流增强传质机理提

供有益探索.

1 物理模型及简化

本文探讨的是文献[1]提供的实验条件下的 Marangoni 对流, 即在室温下(25℃), 在直径为 0.132 m 的圆柱形烧杯内部盛放深度为 0.07 m 的蒸馏水, 将低浓度乙醇或甲醇水溶液通过毛细管滴入置满水的圆形烧杯水表面中心点, 该有机溶液沿界面延展溶解, 从而在水表面上建立表面张力梯度, 诱发 Marangoni 对流. 该种人工诱发 Marangoni 对流的方法也可见文献[5,6].

为了便于结果比较, 本文采用的边界条件与文献[1]相同. 考虑到文献实验条件的对称性, 本文将计算模型简化为二维状况. 计算区域如图 1 所示的二维矩形区域, 长为 0.132 m, 宽为 0.07 m, 计算介质为水, 诱发表面张力梯度的有机溶剂为 3%浓度的乙醇, 施加位置在上边界中央, 区域内并假定表面张力梯度在表面上以自由液面中心处左右对称分布.

2 LBE MRT 模型

考虑到 Marangoni 对流发生在气液界面, 且是由

英文引用格式: Ma B, Li L. Marangoni convection simulating by LBE-MRT method (in Chinese). Chinese Sci Bull (Chinese Ver), 2011, 56: 556-559, doi: 10.1360/972010-1695

图1 计算区域示意图

于界面上的剪切向的表面张力梯度诱导,而普通的LBE模型对剪切力不敏感,无法准确捕捉界面处流场分布,故本文采取二维九速多松弛时间模型^[7,8]进行计算.二维九速模型如图2,取LBE BGK平衡分布表达式为

$$f_i^{\text{eq}} = \begin{cases} \frac{4}{9}\rho \left[1 - \frac{3}{2c^2}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}) \right], & i=0, \\ \frac{1}{9}\rho \left[1 + \frac{3}{c^2}(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}) + \frac{9}{2c^4}(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{3}{2c^2}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}) \right], & i=1,3,5,7, \\ \frac{1}{36}\rho \left[1 + \frac{3}{c^2}(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}) + \frac{9}{2c^4}(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{3}{2c^2}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}) \right], & i=2,4,6,8. \end{cases} \quad (1)$$

其对应的动力学演化方程为

$$f(x + \mathbf{e}_i, t + 1) = f(x, t) - M^{-1} S(m(x, t) - m_{\text{eq}}(x, t)) + F_i^{\text{total}} (i = 0, 1, 2, \dots, 8), \quad (2)$$

其中 f 为 i 方向上的密度分布函数, m 和 m_{eq} 为九维动量列向量和它们的平衡分布,相应的 $M(9 \times 9)$ 为将密度分布和其平衡分布由速度空间转换为动量空间的转换矩阵,即 $m = Mf$ 和 $m_{\text{eq}} = Mf_{\text{eq}}$,其中 f_{eq} 为标准

图2 D2Q9离散速度示意图

D2Q9的分布函数, $S = \text{diag}(s_0, s_1, \dots, s_8)$ 为 9×9 的对角矩阵,其中 $s_i \geq 0$ 为松弛因子, F_i^{total} 为外力在 i 方向上的分量,本文中需要考虑的外力是界面处的表面张力和区域内部的重力.

每个格点处宏观密度和宏观动量密度如下:

$$\rho = \sum_i f_i, \quad \rho \mathbf{u} = \sum_i f_i \mathbf{e}_i. \quad (3)$$

本文采用的计算网格为 228×100 的均匀网格,左边、右边、下边的边界为无滑移,上边的边界为自由液面,在结果稳定后停止计算.

3 模拟结果及分析

本文的数值模拟结果与文献[1]的实验结果吻合,二者均表明,甲醇水溶液和乙醇水溶液中发生的Marangoni对流有类似的特点.以下以质量百分比为3%的乙醇水溶液在净水表面上溶解导致的Marangoni对流模拟为例,介绍模拟结果.本文算例对应的 Ma 数为96.15.

图3为根据计算结果绘制的Marangoni对流流场流线分布.可以看出,流场分布为沿中心呈对称涡状环流,这是由于表面张力较大的水面在表面中心处滴入表面张力较小的乙醇水溶液,导致容器中心处表面平衡被打破,中心处由于乙醇水溶液作用表面张力变小,中心两侧表面张力较大,由此产生的表面张力梯度将液面流体拖向边壁,中心下方液体流过来补充,正是由于这种机制的驱使,水从中间区域上升,并由界面中心点附近向两侧沿表面运动,在两面侧壁和底部的作用下,沿边壁下降、延伸,然后再在中间区域上升补充,从而形成了两个对称的涡状流动;由于几何条件和物理条件(表面张力梯度)均对称,

图3 Marangoni对流场流线图

所以流场也呈对称分布. 这种人工诱导的 Marangoni 对流在达到相对稳定时表面张力梯度等于界面附近的黏性剪切应力, 即 $\mu \frac{\partial u}{\partial y} = \frac{\partial \sigma}{\partial x}$, 由于水的黏度非常小, 故由上式, 表面附近梯度变化应该非常大, 而模拟结果也充分证明了这一点, 流线在界面区域非常密集, 这体现出 Marangoni 对流在临近界面区域变化十分强烈. 本文的模拟结果表明, Marangoni 效应在界面以下 1.4×10^{-3} 范围内导致了非常强的质传递作用.

图4显示了模拟结果中乙醇水溶液中水平方向速度沿界面的分布状况, 流体沿界面从中心点在表面张力的驱动下向两侧流动, 相对稳定时界面最大速度为 0.52 m/s, 文献[1]中同等条件下实验测量的流体界面最大速度通常在 0.5 m/s 左右, 本文计算结果基本与此相符, 可见模拟结果还是比较可靠的.

图5为距离左边界 $x=0.080, 0.104, 0.130$ m 处垂直方向上水平速度的分布状况. 从图中可以看出, 除了在临近界面区域外, 水平方向上速度变化缓慢, 液

图4 界面流体水平速度沿表面分布图

图5 不同位置水平速度分量沿垂直方向分布图

相主区平均流速与界面处流速几乎差两个数量级; 与图3表述的结果一致的是, Marangoni 效应主要集中在临近界面区域非常薄的一层、厚度约为 1.4×10^{-3} m 的液膜中, 在这层液膜中速度梯度非常大. 上述结果同时表明, 本文条件下的 Marangoni 对流主要是界面上的水平流动, 除了在中心点和边壁处外, 并没有垂直于界面与液相主体之间的流动, 因此其质传递以扩散为主.

4 结论

本文利用 LBE MRT 模型对人工诱发的 Marangoni 对流现象进行了数值模拟研究, 考察了其流体动力学特性. 模拟结果表明, 对称表面张力梯度导致的 Marangoni 对流为双涡状流动, 并且在界面区域具有很强的质传递增强作用和很大的速度梯度, Marangoni 效应导致的表面最大速度达到 0.52 m/s, 液相主区平均流速与界面处流速几乎差两个数量级; Marangoni 对流主要集中在界面下厚度为 1.4×10^{-3} m 的液膜中.

参考文献

- 1 Vazquez G, Antorrena G, Navaza J M. Estimation of the turbulence induced by the Marangoni effect at a gas liquid interface. *Int Chem Eng*, 1990, 30: 228–235
- 2 沙勇, 江桂枝, 叶李艺, 等. Marangoni 对流数值模拟. *厦门大学学报*, 2009, 48: 95–98
- 3 Yu L L, Zeng A W, Yu K T. Effect of Marangoni convection on mass transfer in liquid phase. *Trans Tianjin Univ*, 2006, 12: 391–398
- 4 Golovin A A. Mass transfer under interfacial turbulence: Kinetic regularities. *Chem Eng Sci*, 1992, 47: 2069–2080
- 5 Vazquez G, Antorrena G, Navaza J M, et al. Absorption of CO₂ by water and surfactant solutions in the presence of induced Marangoni effect. *Chem Eng Sci*, 1996, 51: 3317–3324
- 6 Lu H H, Yang Y M, Maa J R. Effect of artificially provoked Marangoni convection at a gas liquid interface on absorption. *Ind Eng Chem Res*, 1996, 35: 1921–1928

- 7 Tubbs K. Lattice boltzmann modeling for shallow water equation using high performance computing. Dissertation for the Doctoral Degree. Baton Rouge, LA: Louisiana State University, 2010. 30–31
- 8 Yu H D, Luo L S, Girimaji S S, et al. LES of turbulent square jet flow using an MRT lattice Boltzmann model. *Comput Fluids*, 2006, 35: 957–965

Marangoni convection simulating by LBM-MRT method

MA Bin¹ & LI Li²

¹*Department of Thermal Energy and Power Engineering, Lanzhou Jiaotong University, Lanzhou 730000, China;*

²*Lanzhou Electric Power School, Lanzhou 730000, China*

Numerical simulation was conducted to investigate the Marangoni convection induced by deposition of the surface tension lowering organic solution on the water interface by LBM-MRT method. Boundary conditions were set as experiments done before. Simulation results showed that Marangoni convection induced by the surface tension gradient has significant intensity and sharp velocity gradient near the interface, while the horizontal velocity in the main region of water is much lower than that near the interface. Both the maximum interface velocity and the distribution of the interface velocity in this simulation are consistent with the experimental measurement published before.

surface tension, Marangoni convection, LBM MRT, numerical simulation

doi: 10.1360/972010-1695