



纳米孔内液体蒸发建模及不凝气影响研究

李冉*, 夏国栋

北京工业大学环境与生命学部, 北京 100124

*联系人, E-mail: liran@bjut.edu.cn

收稿日期: 2023-08-05; 接受日期: 2023-09-28; 网络出版日期: 2024-01-23

北京市自然科学基金(编号: 3232023)、国家自然科学基金(编号: 52206191)和北京市教育委员会科研计划(编号: KM202310005019)资助项目

摘要 纳米多孔介质内的液体蒸发过程及不凝气的影响机制是能源化工等工程领域中的关键科学问题, 基于气体动理论分析了蒸气在纳米孔道内的流动阻力特征, 结合Boltzmann方程矩方法建立了单组分蒸发的理论模型, 采用直接蒙特卡罗方法模拟了含不凝气条件下的纳米孔蒸发过程, 基于模拟数据构建了蒸发速率的预测关联式。结果表明: 纳米孔的蒸发过程可分为孔内蒸气流动、孔外动力学运动和对流-扩散流动3个部分, 孔隙率和蒸气所占孔道长径比对蒸发速率具有显著影响, 孔隙率越大则不凝气对蒸发速率的影响程度越大, 当气体段孔道长径比为2.5时液体蒸发速率可降低约50%。基于单组分模型和无量纲关联式的蒸发速率预测结果与直接蒙特卡罗模拟结果的相对误差基本为 $\pm 10\%$ 。

关键词 纳米孔, 蒸发, 不凝气, 直接蒙特卡罗模拟, 气体动理论

PACS: 05.10.Ln, 05.70.Fh, 47.45.Ab, 51.10.+y, 68.03.Fg

1 引言

纳米多孔材料内流体的能质输运过程具有显著的尺度效应和表面特征^[1], 流体依靠表面张力和特殊的传热路径可获得较低的传热传质阻力, 因此基于纳米多孔材料的液体蒸发技术在太阳能光热水处理^[2,3]、电子器件热管理^[4]、燃料电池^[5]和非常规油气开采^[6]等领域中有着广泛的应用。

研究纳米孔内的气液相变问题需综合考虑流动的非连续性和气液界面蒸发的非平衡性, 其中液体和蒸气的输运阻力, 以及气液相变的界面阻力均对蒸发速率有重要影响。研究者先后通过气体动理论建模^[7]、

DSMC (直接蒙特卡罗模拟)^[8]、LBM (格子-玻尔兹曼方法)^[9]、MD (分子动力学)模拟^[10]和Grad 13矩方法^[11]等手段研究了纳米孔道内的液体蒸发规律, 总结了气体努森数、孔隙率、纳米孔长径比和液气饱和压力比等参数对蒸发速率的重要影响。此外, 相关实验研究证实了蒸气沿纳米孔道的流动阻力对液体蒸发速率有显著影响^[12], 孔道长度增加1 μm , 蒸发速率便可降低50%以上^[13]。笔者所在团队结合实验和DSMC方法, 揭示了纳米孔内蒸气分子的过渡区流动机制^[14,15], 提出了适用于不同努森数和孔道尺寸的流动阻力预测模型^[16]。

目前关于纳米孔内液体蒸发问题的研究主要局限于单一组分流体, 而实际工程应用往往涉及空气或其

引用格式: 李冉, 夏国栋. 纳米孔内液体蒸发建模及不凝气影响研究. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2024, 54: 224705

Li R, Xia G D. Modeling liquid evaporation in nanopore and the effect of noncondensable gas (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2024, 54: 224705, doi: [10.1360/SSPMA-2023-0281](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2023-0281)

率^[7]. 在上述因素影响下, 分子将经历多次的反射和透射叠加过程^[24], 最终形成表观的质量通量.

如图2所示, 以 M_1 和 M_2 分别表示离开弯液面和进入纳米孔的分子质量通量. 在孔内分子多次反射作用下, 弯液面附近不同方向上实际的质量通量分别为 J_1 和 G_1 , 前者中有部分为未凝结而反射的分子. 纳米孔出口处的质量通量记为 J_2 和 G_2 , 则上述变量均可表示为 M_1 和 M_2 的线性组合形式, 其比例系数则为 σ , X 和 η 三者的函数, 具体表达式如下^[16]:

$$\begin{aligned} J_1 &= \sigma_p / \eta \cdot M_1 + (1 - \sigma_p / \eta) M_2, \\ G_1 &= (1 - X\sigma_p / \sigma) M_1 + X\sigma_p / \sigma \cdot M_2, \\ J_2 &= M_2, \\ G_2 &= \sigma_p \cdot M_1 + (1 - \sigma_p) M_2, \end{aligned} \quad (3)$$

其中, $\sigma_p = \sigma\eta / [1 - (1 - \sigma)(1 - X\eta)]$ 为表观蒸发系数.

式(3)中 M_1 和 M_2 由气体分子速度分布函数的积分求得:

$$M_1 = \int_{\xi_x > 0} f_L \xi_x d\xi, \quad M_2 = \int_{\xi_x < 0} \beta f_v |\xi_x| d\xi, \quad (4)$$

其中, β 为待求系数.

根据弯液面和孔出口处的质量通量, 计算两处的当地蒸气密度如下:

$$\begin{aligned} \rho_1 &= \frac{1}{2}(J_1 + G_1) / \sqrt{\frac{RT_L}{2\pi}}, \\ \rho_2 &= \frac{1}{2}G_2 / \sqrt{\frac{RT_L}{2\pi}} + \int_{\xi_x < 0} \beta f_v d\xi. \end{aligned} \quad (5)$$

式(5)假设纳米孔内为等温流动, 温度为 T_L . 纳米孔内的平均蒸气密度可表示为 $\rho_m = (\rho_1 + \rho_2) / 2$.

对于过渡区流动, 纳米孔道的分子透射率 η 与其长

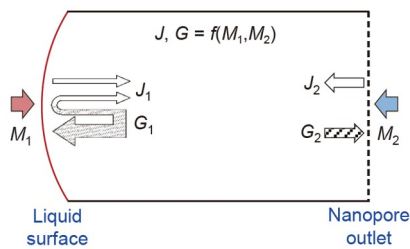


图 2 (网络版彩图) 纳米孔内蒸气分子的运动和质量通量分布
Figure 2 (Color online) Schematic of the vapor molecule motion and mass flux distribution in a nanopore.

径比和努森数有关^[16]:

$$\begin{aligned} \eta &= \frac{\eta_0}{1 + \eta_0}, \\ \eta_0 &= \frac{\pi}{8} \cdot \frac{r_p}{L_p} \left(\frac{1 + a\overline{Kn}}{\overline{Kn}} \right) \left(1 + \frac{4\overline{Kn}}{1 + \overline{Kn}} \right), \quad \text{for nanopore,} \\ \eta_0 &= \frac{\pi}{12} \cdot \frac{h_p}{L_p} \left(\frac{1 + a\overline{Kn}}{\overline{Kn}} \right) \left(1 + \frac{6\overline{Kn}}{1 + \overline{Kn}} \right), \quad \text{for nanochannel,} \end{aligned} \quad (6)$$

其中, $\overline{Kn}$ 为纳米孔内气体的平均努森数, 可由孔内的平均蒸气密度计算得到, 而 a 则为 $\overline{Kn}$ 的单值函数^[25]. 式(6)适用于圆直形纳米孔和矩形纳米通道, 其中 h_p 为纳米通道的宽度.

由上述分析可知, 纳米孔道的综合流动阻力 σ_p 与孔内蒸气努森数 $\overline{Kn}$ 二者相互依赖, 在给定边界条件(1)和(2)的情况下, 需根据式(3)–(6)进行迭代计算.

3.2 纳米孔外气体流动

蒸气分子进入纳米孔外区域后可自由运动和碰撞, 此时气体的流动遵循Boltzmann方程, 分子在碰撞过程中将满足质量、动量和能量的守恒.

采用文献[26]提出的矩方法(Moment Method)建立液体和主流区蒸气热力学量之间的联系, 其中纳米孔出口位置的分子速度分布函数可写为

$$f_p = \begin{cases} \sigma_p \cdot f_L + (1 - \sigma_p)k \cdot f_L, & \xi_x > 0, \\ \beta f_v, & \xi_x < 0, \end{cases} \quad (7)$$

其中, $(1 - \sigma_p)k \cdot f_L$ 表示从外部区域未能进入纳米孔而被反射的部分, 系数 k 须满足质量守恒关系:

$$\int_{\xi_x > 0} k \cdot f_L \xi_x d\xi = M_2. \quad (8)$$

纳米孔出口位置($x=L_p$)和主流区($x \rightarrow \infty$)的气体分子满足守恒关系, 相关守恒量由速度分布函数的矩表示, 即:

$$\begin{aligned} \Phi \int f_p \xi_x d\xi &= \int f_v \xi_x d\xi, \\ \Phi \int f_p \xi_x^2 d\xi + 2(1 - \Phi) \int_{\xi_x < 0} \beta f_v \xi_x^2 d\xi &= \int f_v \xi_x^2 d\xi, \\ \Phi \int f_p \xi_x \xi_x^2 d\xi &= \int f_v \xi_x \xi_x^2 d\xi, \end{aligned} \quad (9)$$

其中, Φ 表示纳米孔的孔隙率. 式(9)中第2行包含了分子碰撞纳米孔外固体表面反射而产生的动量变化.

由式(9)中的3个方程, 可在给定液气饱和压力 $[P_{\text{sat}}(T_L)$ 和 $P_v]$ 的条件下计算蒸气的宏观流速 u_v 以及 β 等其他未知量. 纳米孔内液体的蒸发速率可最终表示为 $m''=\rho_v \cdot u_v$.

4 不凝气的影响

本节采用DSMC方法^[1]研究不凝气对纳米孔内液体蒸发的影响机理, 通过纳米孔内外蒸气流动的变化分析不凝气的作用机制, 并进一步建立经验关联式预测液体的蒸发速率. DSMC是研究稀薄气体动力学的重要数值方法^[27], 在微流控、真空工程和航空航天等领域广泛应用. 该方法主要通过统计大量气体分子的运动规律揭示宏观流动特性, 其数值解与Boltzmann方程理论解具有很好的吻合度.

4.1 模拟设置

建立如图1所示的二维纳米通道蒸发模型, 考虑铜和硅等典型传热材料的特性, 设置弯液面与固体之间的接触角为 60° . 液体温度和饱和蒸气压分别为 $T_L = 373.15 \text{ K}$, $P_{\text{sat}}(T_L) = 101325 \text{ Pa}$. 纳米通道宽度为 $h_p = 100 \text{ nm}$, 蒸气所占长度 $L_p = 0\text{--}250 \text{ nm}$. 计算域总长度设为 $2.5 \mu\text{m}$, 以确保单组分蒸发时主流区蒸气性质的均匀分布. 模拟中, 蒸气分子以给定的速度分布函数从左右边界进入计算域中; 当蒸气分子碰撞弯液面时, 分子离开计算域(即发生凝结)的概率为 σ , 而其余部分则反射回计算域中. 由于真实材料表面分子发生镜面反射的概率较低, 且工程中难以保证纳米孔道内壁的光滑度, 因此假设分子与固体表面之间为完全漫反射条件. 纳米孔道外部虚线边界则设为镜面反射, 气体分子与之碰撞不产生质量和能量交换, 在 y 方向上利用对称性取计算域的1/2进行模拟.

液体的蒸发/凝结系数 σ 与物质结构、表面分子排列取向、分子振动频率和液体表面纯净度等因素有复杂的联系^[28], 其具体取值尚存在一定的争议而不在本文的研究范围内. Bird等人^[20]采用MD方法研究了水在空气中的蒸发过程, 发现 σ 主要与液体温度有关, 受其他因素的影响较小, 在 $360\text{--}500 \text{ K}$ 温度范围内 σ 大约从1.0降低至0.7. 考虑到本文固定液体温度为 373.15 K

不变, 为方便起见取蒸发/凝结系数为0.8进行模拟.

初始时刻在系统中加入一定量的不凝气分子, 其总质量在模拟进程中保持不变, 即不允许不凝气分子透过系统的任意边界. 不凝气分子可与蒸气分子发生碰撞, 从而对蒸气产生附加的扩散阻力.

本文分别采用水和氮气模拟蒸气和不凝气组分, 其相关分子性质如表1所示, 其中变径系数和参考温度为可变软球(VSS)模型中的相关参数. VSS模型是一种描述球形分子间弹性碰撞的理想化模型, 其假设分子的有效直径和碰撞散射角均与相对速度有关, 从而确保气体的黏度-温度特性与实验相符^[29].

模拟过程中固定液体的性质不变, 改变主流区蒸气的压力或者温度, 计算不同压力比 $P_{\text{sat}}(T_L)/P_v$ 条件下的蒸气速度 u_v 和蒸发速率 m'' . 此外, 不凝气的质量分数 w 定义为稳定状态下, 计算域中不凝气总质量占混合气体总质量的比. 本文模拟的参数范围为: $P_{\text{sat}}(T_L)/P_v \in [1.19, 6.55]$, $w \in [0, 39.14\%]$, $\Phi \in [0.31, 1.0]$, $L_p/h_p \in [0, 2.5]$.

DSMC分子模拟的空间网格和时间步长选取遵循以下原则: 网格尺寸须小于分子平均自由程的大小, 时间步长须小于分子跨越单个网格的平均耗时^[30]. 对于每个算例, 监测计算域中的总分子数, 待分子数随时间不再显著变化则认为系统已达到稳定状态. 此外, 控制单个网格内的平均粒子数约为100以提高模拟结果的精度.

4.2 蒸气流场分析

图3给出了两种孔隙率情况下蒸气密度分布随不凝气质量分数变化的规律, 插图两种孔隙率对应的示意图, 曲线数据均是沿图1中 x 轴提取, 横坐标表示离开液体表面的距离. 由图3可知, 当 $w = 0$ 时, 蒸气密度 ρ_v 随 x 先快速降低后趋于稳定, 其中靠近液体表面且物性剧烈变化的区域称为努森层, 在该区域以外蒸气的物性趋于均匀分布. 随 w 逐渐增大, ρ_v 在快速降低后又呈现逐渐降低的趋势, ρ_v 的最终降幅随 w 的增大而增大. 这是由于不凝气造成了组分间扩散阻力, 蒸气密度需维持一定的空间梯度以保证蒸发的进行. 当蒸发速度相同时, 不凝气含量越大则蒸气密度 ρ_v 的空间梯度也越大. 如图3(a)所示, 可将蒸气的流动划分为两种

1) Plimpton S J, Gallis M A. Sparta direct simulation Monte Carlo (DSMC) simulator, <http://sparta.sandia.gov>. 2015.

表 1 蒸气和不可凝气的分子性质参数

Table 1 Molecular properties of vapor and noncondensable gas

组分	分子质量 (kg)	分子参考直径 ($\text{\AA}$)	变径系数 ω	参考温度 T_{ref} (K)
水蒸气	2.987×10^{-26}	5.507	1.047	350
氮气	4.65×10^{-26}	4.07	0.74	273.15

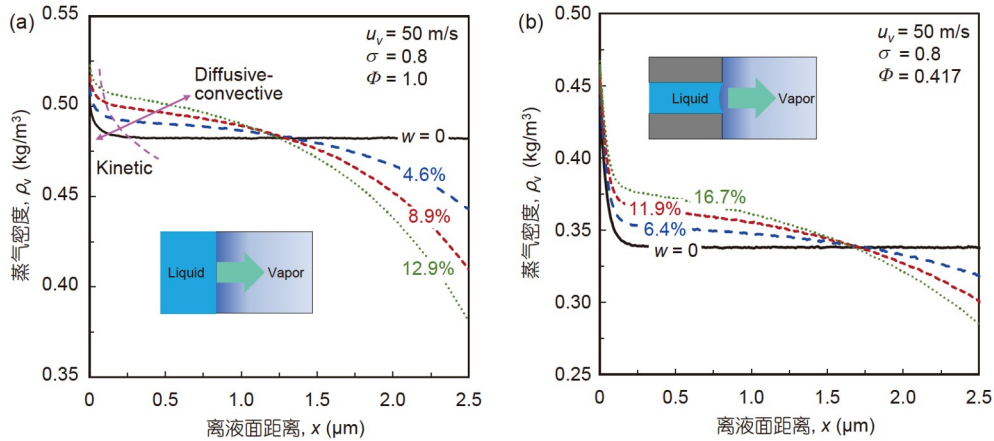


图 3 (网络版彩图)孔隙率为1.0 (a)和0.417 (b)时蒸气密度沿x轴的分布规律, 其中插图分别为两种孔隙率的示意图

Figure 3 (Color online) Distributions of the vapor density along the x-axis for the porosities of 1.0 (a) and 0.417 (b), and the inserts are schematics of different porosities.

机制: 一是紧邻液体表面努森层内的分子动力学运动, 该区域内以蒸气分子的运动和碰撞为主导, 蒸气表现为快速的膨胀和加速; 二是努森层以外部分的气体对流和扩散, 对于单组分情况蒸气以均匀的速度向外流动, 而不可凝气存在时蒸气则为对流-扩散两种流动机制。

对比图3(a)和(b), 可以发现孔隙率为0.417时蒸气密度在动力学主导区域内的降幅相比孔隙率为1.0时更大, 这是由于前者蒸气在离开弯液面时沿 x 和 y 两个方向膨胀, 而后者蒸气仅沿 x 方向变化。另外, 孔隙率为0.417时对流-扩散主导区域内的蒸气密度降幅明显小于孔隙率为1.0时。以不可凝气含量相近的两组数据为例, 图3(a)中 $w = 12.9\%$ 对应的对流-扩散区蒸气密度降幅约为 0.126 kg/m^3 , 而图3(b)中 $w = 11.9\%$ 时相应的密度降幅仅为 0.064 kg/m^3 。因此, 在相同蒸发速度和不可凝气含量的条件下, 孔隙率越大则不可凝气对液体蒸发的影响似乎也越大。当孔隙率较小时, 液体表面附近的蒸气密度降(即压降)所占比重上升, 因此不可凝气的影响程度相对降低。

图4对比了 $\Phi = 0.417$ 时有无不可凝气两种情况下的蒸气密度分布云图, 由于比例限制图中仅展示了自弯液面向右 $0.6 \mu\text{m}$ 的范围, 即 $x \leq 0.6 \mu\text{m}$ 的结果。由图可见两种情况下蒸气离开弯液面后均沿轴向和径向膨胀, 蒸气密度快速减小。当 $w = 0$ 时, 蒸气密度在离开液面一定距离后不再变化, 此时蒸气以均匀的速度和密度向 x 正方向对流运动。当 $w > 0$ 时, 蒸气密度在离开液面一定距离后沿 y 方向不再变化, 但其沿着 x 方向持续降低, 此时蒸气主要通过对流-扩散机制向下游流动。

图4还表明当系统中存在不可凝气时, 弯液面附近的蒸气密度大于不含不可凝气的情况, 其原因同样是组分扩散阻力导致蒸气分子向上游聚集, 而下游末端的蒸气密度则小于无不可凝气的情况(对应图3(b)中 $x = 2.5 \mu\text{m}$ 位置)。由于凝结速率主要与液体表面附近的蒸气密度成正比, 而净蒸发速率为蒸发量和凝结量之差, 因此不可凝气降低蒸发速率的机制便是扩散阻力导致蒸气向液体表面附近集中, 进而引起凝结量增大和净蒸发量减小^[21]。

4.3 蒸发速率结果

当系统的孔隙率和纳米孔长径比确定时, 液体的蒸发速率主要受饱和压力比 $P_{\text{sat}}(T_L)/P_v$ 和不凝气质量分数 w 的影响, 此处 P_v 指计算域下游末端蒸气的分压,

w 指计算域中不凝气的平均质量分数. 图5给出了液体蒸发速率 m'' 随 $P_{\text{sat}}(T_L)/P_v$ 和 w 的变化规律, 其中数据点为DSMC模拟结果, 黑色虚线代表第3节单组分蒸发模型的预测结果. 以 $L_p/h_p = 2.5$, $\Phi = 0.625$ 工况为例, 当给定压力比 $P_{\text{sat}}(T_L)/P_v$ 时蒸发问题的未知量为 T_v , u_v 和 β .

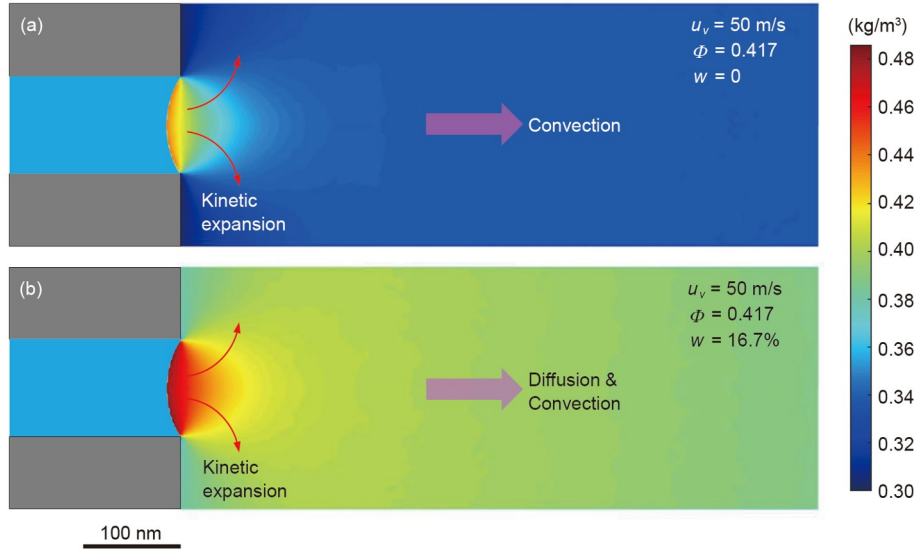


图 4 (网络版彩图) 不凝气质量分数为 0 (a) 和 16.7% (b) 时蒸气密度的分布云图 ($0 \leq x \leq 0.6 \mu\text{m}$)

Figure 4 (Color online) Contour plots of the vapor density with the mass fraction of noncondensable gas being 0 (a) and 16.7% (b) ($0 \leq x \leq 0.6 \mu\text{m}$).

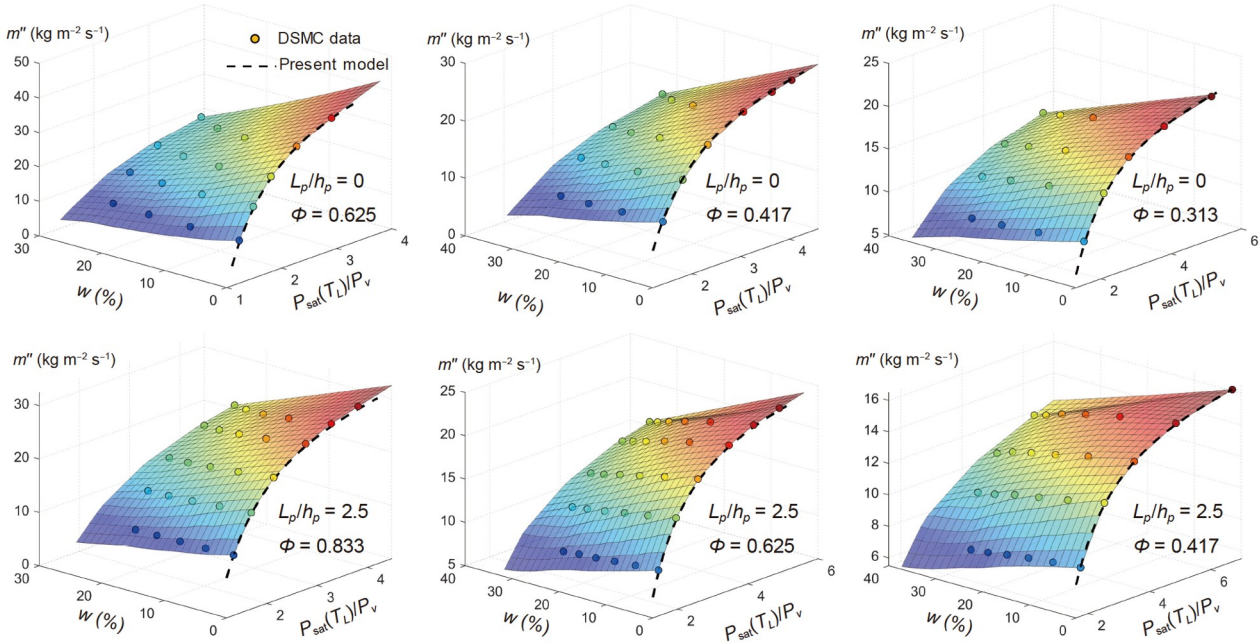


图 5 (网络版彩图) 不同条件下纳米孔道内液体蒸发速率模拟及理论计算结果

Figure 5 (Color online) Simulated and calculated liquid evaporation rates within nanoscale channels under various conditions.

首先假设未知量的初值并结合式(6)计算通道的分子透射率 η , 其中 η_0 选取nanochannel对应表达式且参数 α 确定为常数1.3. 由 η 可计算 σ_p 并进一步验证式(9)是否成立, 若不成立则调整未知量的取值直至式(9)中3个等式成立. 根据3个方程可确定3个未知量的唯一取值, 最终获得液体的蒸发速率. 由图可知, 本文建立的单组分模型可精确预测 $w = 0$ 时对应的DSMC模拟数据, 预测误差在不同孔隙率和纳米孔长径比条件下均保持较低水平, 该结果验证了理论模型和模拟结果的可靠性.

分析图5中单幅图结果, 可发现蒸发速率随压力比 $P_{\text{sat}}(T_L)/P_v$ 增大而增大, 随不凝气质量分数 w 增大而减小. 对比不同数据图结果, 可发现孔隙率和长径比对蒸发速率亦有显著影响. 以 $L_p/h_p = 0$, $w = 0$ 的情况为例, 孔隙率为 $\Phi = 0.625$ 时压力比1.8对应的蒸发速率为 $27.5 \text{ kg m}^{-2} \text{ s}^{-1}$, 而孔隙率为 $\Phi = 0.417$ 时相同压力比对应的蒸发速率仅为 $16.8 \text{ kg m}^{-2} \text{ s}^{-1}$, 二者相差近38.9%. 另外, 对比孔隙率为0.625而长径比分别为0和2.5的两组结果, 压力比为1.8对应的蒸发速率分别为27.5和 $13.9 \text{ kg m}^{-2} \text{ s}^{-1}$, 相差约50%. 当弯液面处于纳米孔道内部时, 蒸气沿孔内的流动阻力成为限制液体蒸发速率的主要因素, 该结果与相关文献结论一致^[12,13].

鉴于单组分蒸发速率可由理论模型较好地预测, 因此可将 $w = 0$ 作为基准对不同条件下的蒸发速率进行无量纲化处理. 图6所示为不同孔隙率条件下的无量纲蒸发速率结果, 其中 m_0'' 表示其他参数相同而 $w = 0$ 时的蒸发速率. 从图中可发现随着不凝气质量分数的

增加, 无量纲蒸发速率迅速降低, 而无量纲蒸发速率对压力比 $P_{\text{sat}}(T_L)/P_v$ 的敏感程度相对较低. 此外, 随着孔隙率的降低, 无量纲蒸发速率呈上升趋势, 说明在小孔隙率下不凝气对液体蒸发的影响相对更弱. 这主要与小孔隙率下蒸气的轴向和径向膨胀有关, 由于此时纳米孔附近的蒸气压降占主导, 因此不凝气引起的附加阻力和压降的相对比重降低.

5 预测关联式

由前文分析可知, 纳米孔道内液体蒸发速率的主要影响因素包括液气压力比、不凝气质量分数、孔隙率和蒸气所占纳米孔长径比. 通过建立无量纲蒸发速率与上述4个因素之间的经验关联式, 再由单组分理论模型得出 m_0'' 的结果, 以此可获得任意给定条件下的液体蒸发速率.

首先分析不同影响因素的取值范围: 液气压力比 $P_{\text{sat}}(T_L)/P_v$ 的取值范围为 $[1, +\infty)$, 不凝气质量分数 w 和孔隙率 Φ 的范围为 $[0, 1]$, 而长径比 L_p/h_p 的范围为 $[0, +\infty)$. 对于取值范围包含零的因素适宜采用指数函数, 其余因素适宜采用幂函数形式进行拟合, 最终形成的关联式如下所示:

$$\frac{m''}{m_0''} = a_1 \left[\frac{P_{\text{sat}}(T_L)}{P_v} \right]^{a_2} + a_3 \exp(a_4 \cdot w) + a_5 \exp(a_6 \cdot \Phi) + a_7 \exp \left(a_8 \cdot \frac{L_p}{h_p} \right). \quad (10)$$

通过DSMC模拟获得不同条件下的无量纲蒸发速率结果, 其中孔隙率涵盖0.313, 0.417, 0.625, 0.833和1.0, 气体所占长径比涵盖0, 1.2和2.5, 而压力比和不凝气质量分数的范围则分别为 $[1.19, 6.55]$ 和 $[0, 39.14\%]$. 基于以上参数范围, 共获得了150组无量纲蒸发速率的模拟数据, 经过优化最终确定关联式的系数如表2

表2 经验关联式系数优化结果

Table 2 Optimized coefficients of the empirical correlation

参数	数值	参数	数值
a_1	0.0436	a_5	121.924
a_2	1.0615	a_6	-0.0035
a_3	-141.683	a_7	20.8192
a_4	0.0112	a_8	0.00282

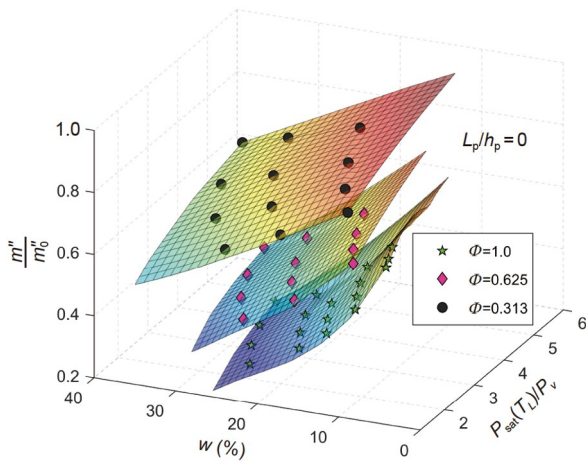


图6 (网络版彩图)无量纲蒸发速率结果

Figure 6 (Color online) Dimensionless evaporation rates.

所示.

表2中, 系数 a_1 接近于零, 证实了无量纲蒸发速率与压力比呈弱相关. 系数 a_3 为负且绝对值较大, 同时 a_4 为正, 说明无量纲蒸发速率随 w 快速减小; 系数 a_5 为正且绝对值较大, 同时 a_6 为负, 说明无量纲蒸发速率随孔隙率衰减较为显著; 系数 a_7 和 a_8 为正, 说明无量纲蒸发速率与气体段孔道长径比呈正相关. 利用上述经验关联式并结合单组分理论模型计算结果, 得到不同条件下的液体蒸发速率, 与DSMC模拟数据进行对比, 结果如图7所示.

图7表明本文构建的模型和关联式可较好地预测含不凝气条件下纳米孔道内的液体蒸发速率, 图中数据点基本落在 $\pm 10\%$ 误差线内. 表2中的关联式系数适用于矩形纳米通道, 关联式中的 h_p 对应纳米通道的宽度. 本文的单组分理论模型和关联式(10)同样适用于圆直形纳米孔, 仅需对相应的关联式系数进行调整. 此外, 蒸发/凝结系数 σ 和弯液面接触角等因素对不凝气存在时纳米孔蒸发速率的影响则需在未来工作中进一步深入探讨.

6 结论

(1) 蒸气在纳米孔道内的流动阻力包含蒸发/凝结系数 σ 、弯液面角系数 X 和孔道透射率 η 三部分, 表观蒸发系数 σ_p 为上述3者的函数.

(2) 单组分蒸发模型可准确预测给定压力比、孔隙率和孔道长径比条件下的液体蒸发速率, 对于圆形纳米孔和矩形纳米通道同样适用.

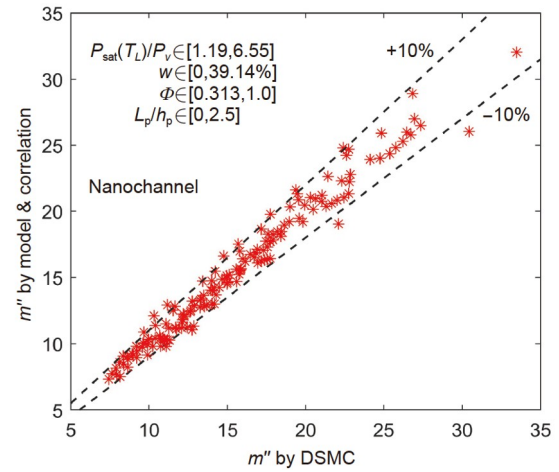


图7 (网络版彩图) 纳米孔道内液体蒸发速率DSMC模拟与关联式预测结果对比

Figure 7 (Color online) Comparison of liquid evaporation rate within nanopores by DSMC simulation and by model and correlation.

(3) 液体蒸发速率随压力比和孔隙率增大而增大, 随不凝气含量和孔道长径比增大而减小. 相同条件下蒸气所占孔道长径比 L_p/h_p 从0增加至2.5, 则蒸发速率降低约50%.

(4) 纳米孔孔隙率越大, 则不凝气对蒸发速率的影响越显著, 原因是在小孔隙率条件下靠近液体附近的蒸气压降占主导, 导致不凝气引起的额外阻力和压降的占比减小.

(5) 利用单组分蒸发模型和无量纲蒸发速率经验关联式, 可较好地预测不同条件下的纳米孔内液体蒸发速率, 在本文参数范围内蒸发速率的相对预测误差基本在 $\pm 10\%$ 以内.

参考文献

- Wang F C, Zhu Y B, Wu H A. Structure and transport of confined liquid in nanochannels (in Chinese). *Sci Sin-Phys Mech Astron*, 2018, 48: 094609 [王奉超, 朱银波, 吴恒安. 纳米通道受限液体的结构和输运. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2018, 48: 094609]
- Khoei J K, Bafqi M S S, Saeidiarzand S, et al. Upcycled graphene integrated fiber-based photothermal hybrid nanocomposites for solar-driven interfacial water evaporation. *Desalination*, 2023, 562: 116707
- Liu H Z, Yu X Q, Li J L, et al. Plasmonic nanostructures for advanced interfacial solar vapor generation (in Chinese). *Sci Sin-Phys Mech Astron*, 2019, 49: 124203 [刘海舟, 喻小强, 李金磊, 等. 基于等离激元微纳结构的太阳能界面光蒸汽转换. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2019, 49: 124203]
- Hanks D F, Lu Z, Sircar J, et al. Nanoporous membrane device for ultra high heat flux thermal management. *Microsyst Nanoeng*, 2018, 4: 1
- Zhang Q, Dong S, Shao P, et al. Covalent organic framework-based porous ionomers for high-performance fuel cells. *Science*, 2022, 378: 181–186
- Wang H, Chen L, Qu Z, et al. Modeling of multi-scale transport phenomena in shale gas production—A critical review. *Appl Energy*, 2020, 262:

114575

- 7 Lu Z, Narayanan S, Wang E N. Modeling of evaporation from nanopores with nonequilibrium and nonlocal effects. *Langmuir*, 2015, 31: 9817–9824
- 8 John B, Enright R, Sprittles J E, et al. Numerical investigation of nanoporous evaporation using direct simulation Monte Carlo. *Phys Rev Fluids*, 2019, 4: 113401
- 9 Zheng W, Li J, Hong F, et al. Mesoscale simulations on the ultrahigh heat flux evaporation of R143a within ultrathin nanoporous membrane using a modified dimensionless lattice Boltzmann method. *Int J Heat Mass Transfer*, 2022, 192: 122939
- 10 Liu R, Liu Z. Self-pumping ultra-thin film evaporation on CNT-embedded silicon nitride nanopore membrane. *Nano Res*, 2022, 15: 1725–1729
- 11 De Fraja T C, Rana A S, Enright R, et al. Efficient moment method for modeling nanoporous evaporation. *Phys Rev Fluids*, 2022, 7: 024201, arXiv: [2201.04912](https://arxiv.org/abs/2201.04912)
- 12 Jatukaran A, Zhong J, Persad A H, et al. Direct visualization of evaporation in a two-dimensional nanoporous model for unconventional natural gas. *ACS Appl Nano Mater*, 2018, 1: 1332–1338
- 13 Wilke K L, Barabadi B, Lu Z, et al. Parametric study of thin film evaporation from nanoporous membranes. *Appl Phys Lett*, 2017, 111: 171603
- 14 Xia G, Wang J, Zhou W, et al. Orientation effects on liquid-vapor phase change heat transfer on nanoporous membranes. *Int Commun Heat Mass Transfer*, 2020, 119: 104934
- 15 Wang J, Xia G, Li R. Numerical analysis of evaporation from nanopores using the direct simulation Monte Carlo method. *J Mol Liquids*, 2022, 347: 118348
- 16 Li R, Wang J, Xia G. New model for liquid evaporation and vapor transport in nanopores covering the entire knudsen regime and arbitrary pore length. *Langmuir*, 2021, 37: 2227–2235
- 17 Almarzooqi N, Hong S, Verma P, et al. Photothermal surface heating membrane distillation using 3D-printed $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$ MXene-based nanocomposite spacers. *ACS Appl Mater Interfaces*, 2023, 15: 20998–21007
- 18 Wang H, Lin G, Shen X, et al. Effect of evaporator/condenser elevations on a loop heat pipe with non-condensable gas. *Appl Therm Eng*, 2020, 180: 115711
- 19 Lu Z, Wilke K L, Preston D J, et al. An ultrathin nanoporous membrane evaporator. *Nano Lett*, 2017, 17: 6217–6220
- 20 Bird E, Gutierrez Plascencia J, Keblinski P, et al. Molecular simulation of steady-state evaporation and condensation of water in air. *Int J Heat Mass Transfer*, 2022, 184: 122285
- 21 Liang Z, Keblinski P. Molecular simulation of steady-state evaporation and condensation in the presence of a non-condensable gas. *J Chem Phys*, 2018, 148: 064708
- 22 Wang F C, Qian J H, Fan J C, et al. Molecular transport under extreme confinement. *Sci China-Phys Mech Astron*, 2022, 65: 264601
- 23 Aursand E, Ytrehus T. Comparison of kinetic theory evaporation models for liquid thin-films. *Int J Multiphase Flow*, 2019, 116: 67–79
- 24 Li R, Wang J, Xia G. Theoretical and numerical study of nanoporous evaporation with receded liquid surface: Effect of Knudsen number. *J Fluid Mech*, 2021, 928: A9
- 25 Karniadakis G, Beskok A, Aluru N. *Microflows and Nanoflows: Fundamentals and Simulation*. New York: Springer, 2005. 117–166
- 26 Ytrehus T, Østmo S. Kinetic theory approach to interphase processes. *Int J Multiphase Flow*, 1996, 22: 133–155
- 27 Bird G A. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. New York: Oxford University Press, 1994
- 28 Persad A H, Ward C A. Expressions for the evaporation and condensation coefficients in the Hertz-Knudsen relation. *Chem Rev*, 2016, 116: 7727–7767
- 29 Koura K, Matsumoto H. Variable soft sphere molecular model for air species. *Phys Fluids A-Fluid Dyn*, 1992, 4: 1083–1085
- 30 Oran E S, Oh C K, Cybyk B Z. Direct simulation Monte Carlo: Recent advances and applications. *Annu Rev Fluid Mech*, 1998, 30: 403–441

Modeling liquid evaporation in nanopore and the effect of noncondensable gas

LI Ran^{*} & XIA GuoDong

Department of Environment and Life, Beijing University of Technology, Beijing 100124, China

**Corresponding author (email: lihan@bjut.edu.cn)*

The liquid evaporation process in a nanoporous medium under the influence of noncondensable gasses is a fundamental problem in energy and chemical engineering. Based on the kinetic theory of gasses and the moment method for the Boltzmann equation, the flow resistance of vapor in nanoscale pores or channels was analyzed, and a theoretical model for the single-component evaporation problem was proposed. Further, direct simulation Monte Carlo was performed to study evaporation in the presence of noncondensable gasses. An empirical correlation was established to predict the liquid evaporation rate. The results showed that nanoporous evaporation can be divided into three parts: vapor flow within the nanopore or channel, kinetic expansion out of the nanopore, and convection-diffusion flow of vapor downstream. The porosity and aspect ratio of the vapor-occupied pore section have a profound influence on the evaporation rate. Moreover, the effect of noncondensable gas is more outstanding at larger porosities than at smaller porosities. The liquid evaporation rate can be reduced by 50% when the vapor-occupied pore section has an aspect ratio of 2.5. The model of single-component evaporation combined with the empirical correlation for dimensionless evaporation rate can predict direct simulation Monte Carlo results within 10%.

nanopore, evaporation, noncondensable gas, direct simulation Monte Carlo, kinetic theory of gasses

PACS: 05.10.Ln, 05.70.Fh, 47.45.Ab, 51.10.+y, 68.03.Fg

doi: [10.1360/SSPMA-2023-0281](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2023-0281)