# 双扩散对流条件下圆柱容器内温度场 和浓度场分层现象

# 石科峰 卢文强\*

(中国科学院研究生院物理科学学院,北京 100049.\* 联系人, E-mail: <u>luwg@gscas.ac.cn</u>)

摘要 对圆柱容器内的双扩散对流进行了数值模拟、结果给出了在双扩散对流情况下温度场和浓度场 非水平分层的新特征:在分层阶段,温度场竖直壁面附近的等温线高于中心轴处,浓度场则是中心轴附 近的浓度等值线较高。通过与由热浮升力和溶质浮升力单独引起的自然对流产生的分层现象进行对比。 阐述了产生这一非水平分层特征的机理. 同时进一步探讨分析了Le数以及浮升力比 N 等物性参数对这 种温度场和浓度场非水平分层的影响.结果表明,随着Le数的增大(Le = 1~15),一方面浓度场分层所涉 及的区域越来越小、另一方面在Le数较小的时候,温度场的非水平度有所增加,当Le数增大到一定程度 后,温度场的分层在容器上部有趋于水平的趋势;当浮升力比N增大时(N = 0~2),浓度场的非水平分层 逐渐趋于水平;温度场的非水平分层则进一步加剧.

关键词 圆柱容器 自然对流 双扩散对流 浮升力 分层现象

由于流体密度不同而产生的自然对流广泛存在 干工业生产中,一般人们普遍关注的是由温度梯度 引起的热浮升力驱动的对流流动、关于这方面的问 题已有许多研究报道[1-6]. 当流体是由两种或多种组 分组成时, 浓度梯度的存在同样会产生浮升力从而 影响对流的发展。流体在温度梯度和浓度梯度的联 合作用下,由干热扩散率和溶质扩散率的不同将会 产生复杂的流体流动状况,称之为双扩散对流.这种 物理现象存在于很多领域中、如海洋学中的大洋环 流、地质学中软流体在地壳中的运动以及化合物晶体 生长中液相区的熔体对流等[7]. 在双扩散对流中, 能 量和物质的传递与单独由温差驱动的自然对流会有 很大的不同, 温度、浓度和速度场之间的强耦合和相 互作用产生的许多特殊现象吸引了国内外学者.近 年来,随着金属合金凝固过程对技术控制的不断精 细化,以及在电子、半导体等工业中对晶体质量要求 的不断提高,人们也充分认识到双扩散对流对晶体 生长过程中液相区的温度分布与溶质浓度分布有重 要影响,决定了生长所得的晶体的品质,

在研究自然对流问题的过程中,大多数研究者 都是以矩形容器为模型,在不同的壁面上施加不同 的温度或浓度边界条件. 自从Patterson和Imberger<sup>[1]</sup>开 展了矩形容器内瞬态的自然对流的研究之后,研究 人员进行了大量相关的工作,如Phillips<sup>[8]</sup>,November和 Nansteel<sup>[9]</sup>, Upton和Watt<sup>[10]</sup>, Corcione<sup>[11]</sup>以及Murty<sup>[12]</sup>对不

同边界条件下矩形容器内的自然对流进行了详细的 数值模拟和实验研究, 在双扩散对流领域, 一些研究 人员数值模拟了不同边界条件下矩形容器内的双扩 散对流结构及其波动情况[<u>13~16]</u>,还有一些研究人员 则通过实验研究分析了矩形容器内多组元混合物凝 固过程中的双扩散对流现象[17~19]。对于竖直圆柱容 器,由于几何形状的限制,其内部流体的对流特征必 然与矩形容器内的有很大差别. 同时因为竖直圆柱 容器只有一个竖直的外表面,决定了它无法像矩形 容器一样在不同的竖直壁面上施加不同的边界条件. 因此研究者一般在上下底面采用加热或冷却的边界 条件来研究其内部对流<sup>[2.4]</sup>. 目前为止, 针对圆柱形 容器内双扩散对流的研究很少、对其瞬态发展和分 层的研究尚未见到报道.

对于竖直容器内非稳态的自然对流, 当在竖直 壁面处施加温度和浓度边界条件时,初始等温且均 质的流体流动的发展可以分为3个阶段,即竖直壁面 处边界层的生成阶段、底面附近流体的水平推进阶段 和容器内流体的分层阶段,Lin与Armfield<sup>[5.6]</sup>针对热 浮升力驱动的自然对流作了细致的工作, 通过数值 模拟和理论分析,他们比较了矩形容器和竖直圆柱 容器内热自然对流发展过程的区别,并且指出对于 竖直圆柱容器,最终会形成水平分层的温度场分布. 但在双扩散对流的条件下,由于溶质浮升力的存在, 必然会导致容器内部流体流动状况和温度、浓度场分

层的变化. 鉴于此, 本研究通过有限单元法求解圆柱 坐标系下的涡量、流函数、能量和组分控制方程, 数 值模拟了竖直圆柱容器瞬态的双扩散对流, 结果表 明在分层阶段会产生比较特殊的分层特征.

1 物理模型及数值方法

## 1.1 物理模型

物理模型和坐标系如图 1 所示. 圆柱容器的上下 底面是绝热绝质的, 初始时刻容器内流体静止并且 温度和浓度为常数:  $T^* = T_0^*$  (\*表示此物理量为有量纲 量),  $C^* = C_0^*$ . 在 $t^* = 0$  的时刻,  $T^* = T_w^*$ 和 $C^* = C_w^*$ 突然 施加到外壁面上并一直保持下去, 此时产生了温度 梯度和浓度梯度. 由于这两个梯度的存在, 流体将会 在它们产生的浮升力的作用下开始运动.



假定系统内部不存在内部热源、黏性耗散、化学反 应以及热辐射,并且Boussinesq假设成立,流体密度  $\rho(T^*, C^*) = \rho_0(1-\beta_{\rm T}(T^*-T_0^*)-\beta_{\rm S}(C^*-C_0^*)), 其中\rho_0 = \rho(T_0^*, C_0^*)$ 为温度 $T_0^*$ 和浓度 $C_0^*$ 时的密度,  $\beta_{\rm T} = (-1/\rho_0)$  $(\partial \rho / \partial T^*)_{s^*}$ 和 $\beta_s = (-1/\rho_0)(\partial \rho / \partial C^*)_{r^*}$ 分别为热膨胀系数 和溶质膨胀系数.

在自然对流传热传质中,压力常常不是主要的 求解变量,因此采用涡量流函数方程特别合适. 涡量 流函数法通过引入涡量和流函数,避开了压力和速 度的耦合求解,从而直接得到表示流动状态的流函 数,是一种求解二维不可压流体 Navier-Stokes 方程 的常用方法.

流函数和涡量的定义如下:

$$u_r^* = \frac{1}{r} \frac{\partial \psi^*}{\partial z^*}, \quad u_z^* = -\frac{1}{r^*} \frac{\partial \psi^*}{\partial r^*}, \quad \omega^* = \frac{\partial u_r^*}{\partial z^*} - \frac{\partial u_z^*}{\partial r^*}.$$
 (1)

无量纲化的控制方程为

涡量方程:

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial z} \frac{\partial \omega}{\partial r} - \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \frac{\partial \omega}{\partial z} - \frac{\omega}{r^2} \frac{\partial \psi}{\partial z} = \left(\frac{\partial^2 \omega}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \omega}{\partial r} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial z^2} - \frac{\omega}{r^2}\right) - Gr_T \left(\frac{\partial T}{\partial r} + N \frac{\partial C}{\partial r}\right).$$
(2)

流函数方程:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} = r\omega .$$
(3)

能量方程:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial z} \frac{\partial T}{\partial r} - \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \frac{\partial T}{\partial z}$$
$$= \frac{1}{\Pr} \left( \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right). \tag{4}$$

组分方程:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial z} \frac{\partial C}{\partial r} - \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} \frac{\partial C}{\partial z}$$
$$= \frac{1}{\Pr Le} \left( \frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right). \tag{5}$$

其中, 热格拉晓夫数  $Gr_T = \frac{g\beta_T \Delta TH^3}{v^2}$ ; 溶质格拉晓夫 数  $Gr_S = \frac{g\beta_S \Delta CH^3}{v^2}$ ; 浮升力比  $N = \frac{Gr_S}{Gr_T}$ ; 普朗特数Pr =  $v/\alpha$ ; 刘易斯数 $Le = \alpha/D$ ; D,  $\alpha$ , v, g分别为溶质扩散 系数、热扩散系数、黏性系数和重力加速度. 在上述 控制方程中, 采用的无量纲化标准为: 尺度用H; 时 间用 $H^2/v$ ; 涡量用 $v/H^2$ ; 流函数用Hv;  $(T^* - T^*_0)$ 用 $\Delta T^* = T^*_0 - T^*_w$ ;  $(C^* - C^*_0)$  用 $\Delta C^* = C^*_0 - C^*_w$ .

相应的初始条件:

$$t = 0: \psi = \omega = 0, T = C = 0.$$
 (6)  
边界条件:

$$z = 0; \ \psi = 0, \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{\partial C}{\partial z} = 0;$$
 (7)

$$z = 1; \ \psi = 0, \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{\partial C}{\partial z} = 0;$$
(8)

$$r = 0; \ \psi = 0, \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{\partial C}{\partial r} = 0;$$
 (9)

$$r = 1/A$$
:  $\psi = 0, T = C = -1.$  (10)

1.2 数值方法

采用有限单元法来求解上述控制方程,计算单

元为四节点的矩形单元, 在单元内构造双线性的插 值函数 $\phi = b_1 + b_2\xi + b_3\eta + b_4\xi\eta$ . 在求解控制方程的 过程中, 首先求解能量方程和组分方程, 计算得到节 点上的温度梯度和浓度梯度, 然后将其代入到涡量、 流函数方程中求解得到涡量值和流函数值. 由流函 数值可以求得各个节点处的速度值, 进入下一时间 步. 其中在求解涡量方程和流函数方程的过程中需 要引入一个确定壁面涡量的内迭代过程, 迭代过程 采用松弛迭代.

本方法用来模拟环形容器和圆柱容器内的双扩 散对流<sup>[20-22]</sup>.为了确定计算网格,分别取 71×71, 101×101 和 121×121 的网格划分,对应的时间步长为  $2.0×10^{-5}$ .图 2 给出了 3 种网格划分情况下z = 0.5, t =0.002 时温度的径向分布.可以看到 3 种网格划分情 况下得到的计算结果相差甚小,因此采用了 101×101 的网格划分.



## 2 结果与分析

在双扩散对流问题中,容器内部流体的流动状况、传热量和传质量取决于以下 5 个参数,它们是长径比*A*,*Gr<sub>T</sub>*, Pr,*Le*以及浮升力比*N* = *Gr<sub>s</sub>/Gr<sub>T</sub>*.在这些参数中,又以*Le*和*N*对双扩散对流的状况影响最大.为了便于描述,我们将温度梯度和浓度梯度单独作用情况下产生的对流分别称为热自然对流和溶质自然对流;当二者联合作用时即为双扩散对流.在下面的研究分析中,我们给定圆柱容器的*H* = 1.0, *A* = 2.0, Pr = 7.0,首先对比分析*Gr<sub>T</sub>* = 10<sup>7</sup>, *Gr<sub>S</sub>* = 10<sup>7</sup>时 3 种对流情况下的分层情况;随后在*Gr<sub>T</sub>* = 10<sup>7</sup>, *N* = 1 的双扩

散对流情况下分析分层情况随*Le*数的变化关系,最 后分析 $Gr_T = 10^7$ , *Le* = 5 的双扩散对流情况下分层情 况随 *N* 的变化关系.

2.1 3种对流情况下分层状况的比较

图 3 和 4 分别表明了 3 种对流情况下t = 00.2 时 刻容器内浓度场和温度场的分层情况.可以看到在 热自然对流和溶质自然对流情况下温度场和浓度场 能够分别形成水平分层,这与Lin等人<sup>[5]</sup>所描述的在热 自然对流情况下温度场会形成水平分层的结果是一 致的.但同时可以看到在热自然对流和溶质自然对 流情况下相应的浓度场和温度场产生了非水平分层, 在两种浮升力联合作用下的双扩散对流则同时出现 了浓度场和温度场非水平的分层现象.



图 3 3 种对流情况下浓度场分层状况 (a) 热自然对流; (b) 溶质自然对流; (c) 双扩散对流



图 4 3 种对流情况下温度场分层状况 (a) 热自然对流; (b) 溶质自然对流; (c) 双扩散对流

由于热扩散系数大于溶质扩散系数,在热自然 对流情况下,其较大的热扩散系数使得热自然对流

发展较快,从而促进了对称轴附近溶质的向上流动, 最终导致除边界层外全场等浓度线的向下倾斜;而 对于溶质自然对流,由于溶质扩散系数相对较小,在 竖直壁面处形成的边界层较薄从而梯度较大,因而 在壁面附近的向下流速以及向上的回流速度都相对 较大(图 5 的流场分布反映了这一现象),从而造成等 温线的向上倾斜. 在双扩散对流情况下. 由于温度梯 度产生的热浮升力和浓度梯度产生的溶质浮升力同 时起作用, 容器内的流体流动相对于热自然对流来 说在竖直壁面附近得到了加强,而相对于溶质自然 对流来说在中心轴附近的流动得到了促进. 从图 3~5 可以看到,双扩散对流的温度场和浓度场分层特征 和流场分布特征介于热自然对流和溶质自然对流之 间,并且因为两种浮升力同时作用、相互促进,流体 流动得到了加强,对流的发展进程相比于其他两种 对流情况得到了加快.



## 2.2 Le 数对双扩散对流分层影响

图 6 和 7 结果显示,  $Gr_T = 10^7$ , N = 1 时, 双扩散 对流情况下浓度场和温度场的分层随 *Le* 的变化情况. 当*Le* = 1 时, 意味着热扩散系数与溶质扩散系数相等, 并且由于 $Gr_T = Gr_s$ . 此时在温度梯度和浓度梯度产生 的浮升力的作用下, 尽管容器内流体对流进程得到了 促进, 但并没有影响到分层特征, 因此此时浓度场和温 度场仍呈现水平分层. 当*Le* > 1 时, 意味着热扩散系 数大于溶质扩散系数, 此时由于两种扩散系数的不 一致性, 容器内局部的流体对流状况发生了改变, 最 终导致了了浓度场分层的向下倾斜和温度场的向上 倾斜. 另外, *Le*数的增大意味着溶质扩散系数的减小, 由于溶质扩散能力的降低,在同一时刻浓度场分层 所涉及的区域越来越小(图 6).此外,溶质扩散能力 的降低导致溶质浮升力对对流的贡献逐渐减少,全 场的对流也会变弱.从图 7 中可以看出,在Le数较小 的时候,温度场的非水平度有所增加,这是因为随着 Le数的增大,壁面附近的浓度梯度的增大导致靠近 壁面处回流的增强;当Le数增大到一定程度后,由于 溶质扩散系数的进一步减小,由溶质浮升力产生的 对流变得很弱,热浮升力产生的对流越来越占主导 地位,使得温度场的分层在容器上部有趋于水平的 趋势.

从图 8(a)中的径向浓度分布可以看出, 溶质扩散 能力降低, 最后导致在同一水平高度上浓度的无量 纲绝对值越来越小. 而对于图 8(b)中的温度分布来说, 在 *Le* 数大于 1 的情况下温度分布均出现了倾斜现象, 这与前面所描述的非水平分层是相一致的; 同时, 随 着 *Le* 数的增大, 由于整体对流的减弱使得中心轴附 近的无量纲温度的绝对值减小, 此外壁面附近温度 分布也由于流体流动随 *Le* 数的增大发生了改变而产 生了变化.

#### 2.3 浮升力比 N 对双扩散对流分层的影响

当保持*Gr<sub>T</sub>*不变的情况下,浮升力比*N*的变化意 味着溶质浮升力*Gr<sub>s</sub>*发生了改变.在下面的分析中, 保持*Gr<sub>T</sub>* = 10<sup>7</sup>, *Le* = 5.图9显示,当*N*从0变化到2 的过程中,由于溶质浮升力的增大,浓度场分层的 非水平度逐渐减小,趋于水平.与之相反,溶质浮升 力的变大最终导致热浮升力所占比重的减小,因此从图 10 中可以看到,当*N*从0变化到2时,温度场的分层 从水平变得倾斜,并且随着*N*的增大这种倾斜度逐渐 加大.

图 11 分别表明了双扩散对流情况下径向浓度分 布(z = 0.25)和温度分布(z = 0.5)随浮升力比 N 的变化 情况. 从图 11(a)中可以看到,随着浮升力比 N 从 0 开始逐渐增大,在同一水平高度上浓度的径向分布 曲线逐渐趋于水平;图 11(b)则显示同一水平高度上 温度的径向分布曲线的倾斜度则越来越大.这与前 面所述容器内浓度场和温度场分层情况是一致的.

## 3 结论

通过对竖直圆柱容器内流体的自然对流的数值 模拟,可以看到,当热浮升力单独起作用的时候(热 自然对流),随着时间的推进,温度场会呈现水平分



图 6 双扩散对流情况下浓度场随 Le 数的变化情况(t = 0.02)







图 8 双扩散对流情况下径向浓度分布(z = 0.25)(a)和温度分布(z = 0.35)(b)随 Le 数的变化情况(t = 0.02)

层而浓度场的分层则是中心轴附近偏高;与之相反, 溶质浮升力单独起作用的时候(溶质自然对流),温度 场分层是中心轴附近偏低而浓度场则呈水平分层. 当两种浮升力同时起作用的时候(双扩散对流),温度 场和浓度场均呈现倾斜分层,并且是在中心轴附近 温度场的分层偏低而浓度场的分层偏高.

在双扩散对流的发展过程中,如果保持浮升力

比不变(*N* = 1),当 *Le*数由小变大时,由于溶质扩散 系数的减小,浓度场分层所涉及的区域越来越小.另 一方面,在 *Le*数较小的时候,壁面附近的浓度梯度 的增大导致靠近壁面处回流的增强,使得温度场的非 水平度有所增加;当 *Le*数增大到一定程度,由溶质浮 升力产生的对流变得很弱,热浮升力产生的对流越来 越占主导地位,使得温度场的分层在容器上部趋



图 11 双扩散对流情况下径向浓度分布(z = 0.25)(a)和温度分布(z = 0.5)(b)随浮升力比 N 的变化情况(t = 0.02)

于水平. 若热浮升力和刘易斯数保持不变, 在 N 从 0 变化到 2 的过程中, 溶质浮升力从小逐渐变大, 这时, 在双扩散对流中溶质浮升力所起的作用逐渐加强, 浓度场的非水平分层逐渐趋于水平; 但此时由于热 浮升力相对作用的降低和竖直壁面附近流体流动的 变化,温度场非水平分层的程度却进一步加剧.

综上所述,在热浮升力和溶质浮升力同时起作 用的双扩散对流中,不一致的热扩散系数和溶质扩 散系数最终使得温度场和浓度场呈非水平分层;此 外,不同的 Le 数和浮升力比 N 均会对这种非水平分 层产生影响. 温度场和浓度场分布对晶体生长等工 程问题至关重要, 而这些数值结果揭示了对于相关 问题控制温度场和浓度场的方法与方向.

致谢 本工作为国家自然科学基金(批准号: 50336040)资 助项目.

#### 参考文献

- 1 Patterson J, Imberger J. Unsteady natural convection in a rectangular cavity. J Fluid Mechan, 1980, 100: 65~86
- 2 Neumann G. Three-dimensional numerical simulation of buoyancy-driven convection in vertical cylinders heated from below. J Fluid Mechan, 1990, 214: 559~578
- 3 Lin Y S, Akins R G. Thermal description of pseudosteady-state natural convection inside a vertical cylinder. Intl J Heat Mass Transfer, 1986, 29: 301~307[DOI]
- 4 Vargas M, Sierra F Z, Ramos E, et al. Steady natural convection in a cyinder cavity. Intl Commun Heat Mass Transfer, 2002, 29: 213~221[DOI]
- 5 Lin W X, Armfield S W. Direct simulation of convection cooling in a vertical cylinder. Intl J Heat Mass Transfer, 1999, 42: 4117~4130[DOI]
- 6 Lin W X, Armfield S W. Natural convection cooling of rectangular and cylindrical containers. Intl J Heat Fluid Flow, 2001, 22: 72~81[DOI]
- 7 Turner J S. Double-diffusive phenomena. Annu Rev Fluid Mechan, 1974, 6: 37~56[DOI]
- 8 Phillips T N. Natural convection in an enclosed cavity. J Comput Phys, 1984, 54(3): 365~381[DOI]
- 9 November M, Nansteel M W. Natural convection in rectangular enclosures heated from below and cooled along one side. Intl J Heat Mass Transfer, 1987, 30(11): 2433~2440[DOI]
- 10 Upton T D, Watt D W. Experimental study of transient natural convection in an inclined rectangular enclosure. Intl J Heat Mass Transfer, 1997, 40(11): 2679~2690[DOI]
- 11 Corcione M. Effects of the thermal boundary conditions at the sidewalls upon natural convection in rectangular enclosures heated

from below and cooled from above. Intl J Therm Sci, 2003, 42(2): 199~208[DOI]

- Murty V D. A finite element solution of double diffusive convection. Intl Commun Heat Mass Transfer, 1988, 15(2): 165~ 177[DOI]
- 13 Nishimura T, Wakamatsu M, Morega A M. Oscillatory double-diffusive convection in a rectangular enclosure with combined horizontal temperature and concentration gradients. Intl J Heat Mass Transfer, 1998, 41(11): 1601~1611[DOI]
- 14 Ghorayeb K, Khallouf H, Mojtabi A. Onset of oscillatory flows in double-diffusive convection. Intl J Heat Mass Transfer, 1999, 42(4): 629~643[DOI]
- 15 Sundaravadivelu K, Kandaswamy P. Double diffusive nonlinear convection in a square cavity. Fluid Dynam Res, 2000, 27(5): 291~303[DOI]
- 16 Bennacer R, Mohamad A A, Akrour D. Transient natural convection in an enclosure with horizontal temperature and vertical solutal gradients. Intl J Therm Sci, 2001, 40(10): 899~910[DOI]
- 17 Nishimura T, Imoto T, Miyashita H. Occurrence and development of double-diffusive convection during solidification of binary system. Intl J Heat Mass Transfer, 1994, 37(10): 1455~1464[DOI]
- 18 Chen F L. Formation of double-diffusive layer in the directional solidification of binary solution. J Cryst Growth, 1997, 179(1-2): 277~286[DOI]
- 19 Ghenai C, Mudunuri A, Lin C X, et al. Double-diffusive convection during solidification of a metal analog system (NH<sub>4</sub>CL-H<sub>2</sub>O) in a differentially heated cavity. Exper Therm Fluid Sci, 2003, 28(1): 23~35[DOI]
- 20 石科峰, 卢文强. 环形容器内双扩散对流的数值模拟研究. 中国科学院研究生院学报, 2005, 22 (2): 152~156
- 21 石科峰, 卢文强. 正交梯度下双扩散对流的数值模拟. 工程热 物理学报, 2005, 26 (2): 328~330
- 22 Shi K F, Lu W Q. Numerical simulation of transient process of double-diffusive convection in a vertical circular cylinder. 5th International Symposium on Multiphase Flow, Heat Mass Transfer and Energy Conversion. Xi'an, China, 2005

(2005-07-01 收稿, 2005-09-28 接受)