

液相中单气泡传质影响规律的数值模拟研究

刘玉金¹, 卢艳华², 李 莹², 燕 超², 郭 凯^{1,3,4}, 刘春江^{1,3,4,5}

(1. 天津大学化工学院, 天津 300350;

2. 航天化学能源全国重点实验室(湖北航天化学技术研究所), 襄阳 441003;

3. 天津大学浙江研究院(绍兴), 绍兴 312300; 4. 天津市应用催化科学与工程重点实验室, 天津 300350;

5. 化学工程与低碳技术全国重点实验室, 天津 300350)

摘 要: 气液传质过程是废水处理、吸收分离及生物曝气等多种工业生产过程中的关键步骤。界面传质速率的预测精度受界面性质复杂、模型精度以及实验测量精度等因素的影响, 尤其在气泡流系统中, 气泡表面显著的可变形特性进一步加剧了传质机制的复杂性, 造成了传质速率难以准确预测, 为传质设备的开发带来了极大的挑战。为此, 本文采用基于 VOF 法的新型界面传质算法对伴有传质的气泡自由上升过程进行严格模拟。该算法利用统一的单场公式, 可同步计算气泡的局部体积变化, 适用于研究伴有传质的单气泡自由上升过程。通过对模拟结果进行分析, 本文获得了不同厄特沃什数(Eo)和莫顿数(Mo)条件下气泡的运动行为, 以及不同施密特数(Sc)下气泡传质特性; 探讨了气泡变形、上升路径、局部流场对气泡传质速率以及浓度分布的影响。研究表明, 气泡传质速率及浓度分布与气泡的动态行为密切相关, 气泡形状与运动路径的不稳定性可促进气液间传质, 同时气泡运动诱发的液相漩涡会显著改变液相中溶质的浓度分布。本研究为深入理解气液界面传质机理提供了理论支撑。

关键词: 气液传质; 气泡流; 数值模拟; 尾流; 厄特沃什数; 莫顿数; 施密特数

中图分类号: TQ052.5

文献标志码: A

文章编号: 0493-2137(2026)10-1077-14

Numerical Study on Mass Transfer Characteristics of a Single Bubble Rising in Liquid

Liu Yujin¹, Lu Yanhua², Li Ying², Yan Chao², Guo Kai^{1,3,4}, Liu Chunjiang^{1,3,4,5}

(1. School of Chemical Engineering and Technology, Tianjin University, Tianjin 300350, China;

2. National Key Laboratory of Aerospace Chemical Power, Hubei Institute of Aerospace Chemotechnology, Xiangyang, 441003, China; 3. Zhejiang Institute of Tianjin University (Shaoxing), Shaoxing 312300, China;

4. Tianjin Key Laboratory of Applied Catalysis Science and Engineering, Tianjin 300350, China;

5. State Key Laboratory of Chemical Engineering and Low-Carbon Technology, Tianjin 300350, China)

Abstract: Gas-liquid mass transfer is a critical step in various industrial processes, including wastewater treatment, absorption separation, and biological aeration. However, the prediction accuracy of the interfacial mass transfer rate is limited by several factors, including complex interface properties, model precision, and experimental measurement accuracy. In bubbly flow systems, the significant deformability of bubble surfaces further complicates the mass transfer mechanism, making accurate prediction of the mass transfer rate difficult and posing major challenges for the development of mass transfer equipment. To address these challenges, a novel interface mass transfer algorithm based on the volume-of-fluid method is employed to rigorously simulate the free rise of a single bubble with concomitant mass transfer. The algorithm adopts a unified single-field formulation, enabling the simultaneous calculation of the local bubble volume change, and is therefore suitable for investigating single-bubble free rise behavior with mass transfer. By analyzing the simulation results, the motion behaviors of the bubbles under different Eötvös numbers (Eo) and Morton numbers (Mo), as well as the mass transfer characteristics under different Schmidt numbers (Sc),

收稿日期: 2025-10-27; 修回日期: 2025-12-04.

作者简介: 刘玉金(1999—), 男, 博士研究生, yujin_liu@tju.edu.cn.

通信作者: 郭 凯, kaiguo@tju.edu.cn.

are obtained. The influences of bubble deformation, trajectory, and local flow field on the bubble mass transfer rate and concentration distribution are further investigated. The results indicate that the mass transfer rate and concentration distribution are closely related to the dynamic behavior of the bubble. Instabilities in bubble shape and motion path enhance gas-liquid mass transfer, while liquid-phase vortices induced by bubble motion significantly alter the solute concentration distribution in the liquid. Overall, this study provides theoretical support for an in-depth understanding of gas-liquid interfacial mass transfer mechanisms.

Keywords: gas-liquid mass transfer; bubble flow; numerical simulation; wake; Eo ; Mo ; Sc

气泡动力学作为多相流研究领域的核心课题,在能源、化工、环境及生物医学等众多科学研究和工业过程中扮演着关键角色. 其复杂行为不仅直接决定传质效率与反应器性能,更通过湍流耦合、界面效应及气泡间相互作用深刻影响传质过程与设备的优化设计. 近几年研究表明,气泡振荡、路径失稳以及尾流涡漩等动态特性可显著强化对流传质^[1]. 深刻理解气泡动态行为、传质机制与流体动力学之间的相互关系对提升反应器的效率与安全性至关重要.

气泡在静止液体中自由上升时会发生形状、路径等的振荡变化,即气泡的运动不稳定性. 气泡的不稳定行为与气泡尺寸、液相黏度、表面张力等因素直接相关,这些因素可以通过厄特沃什数(Eo)和莫顿数(Mo)等无量纲参数来描述. 通过这些无量纲数的组合可以对气泡的运动行为进行归类和预测. 早在 1981 年, Bhaga 等^[2]就对气泡流型和气泡的终端上升速度进行了关联性分析,指出对于 $Mo > 4 \times 10^{-3}$ 的情况,阻力系数和无量纲气泡形状仅是雷诺数(Re)的函数. 并且通过氢气气泡示踪和同步摄影技术可视化了气泡周围的流场,发现不同的 Re 、 Mo 条件下气泡尾流结构存在显著差异. Zhou 等^[3]对均匀流动中气泡的变形进行了数值模拟研究,研究发现,气泡的稳定形状是两种变形的叠加,即 O 型变形和 D 型变形. O 型变形主要由表面张力控制,与韦伯数(We)相关; D 型变形则主要取决于压力与黏性法向应力在气泡表面上的竞争,与 Re 相关. 研究还提出了一个新的基于韦伯数的气泡纵横比幂律关系,并给出了一个将气泡对称性映射到 Re - We 区域的相图,可用于预测气泡形状. Ohta 等^[4]采用耦合 level-set 的 VOF 方法对黏性流体中上升气泡的运动进行了二维直接数值模拟研究. 研究发现,高 Eo 和低 Mo 情况下,数值预测的气泡形状最终形态依赖于初始形态;低 Eo 和高 Mo 下,初始条件不影响气泡上升的最终形态,表现出确定的动力学行为.

使用数值模拟方法可以捕捉到气泡在自由上升过程中丰富的运动数据,从而可以深入研究运动不稳定性的内在机理. 关于气泡动力学的模拟方法有很

多,流体体积(volume of fluid, VOF)法是其中重要的方法之一. 在 1999 年, Krishna 等^[5]就通过实验和 VOF 法相结合的方法研究了设备壁面对毫米气泡上升过程的影响,发现随鼓泡塔直径增大,单气泡所受到的向下的曳力会减小,当气泡尺寸于鼓泡塔的直径之比小于 0.125 时,鼓泡塔尺寸对气泡上升速度的影响可以忽略不计. Hussein 等^[6]也做了类似的研究,他们使用 VOF 对单气泡在静止水中的上升行为进行了数值模拟,分析了鼓泡塔直径、气泡尺寸等对气泡上升速度的影响,结果也发现气泡的上升速度会受到鼓泡塔尺寸的影响,此外还发现气泡的上升速度会随着气泡尺寸的增加而增加. Chakraborty 等^[7]和 Abbassi 等^[8]都使用 VOF 对气泡在不同条件下的上升路径和气泡形状进行了研究,结果发现气泡形状和气泡上升路径与液体黏度高度相关,随着液体黏度减小,气泡上升路径开始发生偏转,同时气泡形状变化也更为剧烈.

在气泡运动不稳定行为中,气泡路径的不稳定性是其中最为复杂的不稳定行为,不同尺寸的气泡在不同的液相环境下会呈现出截然不同的运动路径^[9-14]. Clift 等^[15]总结了中等尺寸空气气泡在 28.5 °C 水中的气泡路径,气泡在不同尺寸、不同 Re 、不同变形度下分别表现出直线型、螺旋型、之字形等不同的运动路径. Kawaguchi 等^[16]通过实验研究了气泡在 Hele-Shaw 平板通道中的运动路径不稳定性,研究发现,在纯水与异丙醇溶液中,气泡路径随 Eo 增大经历 3 个阶段:在相对较小的 Eo 下呈现之字形轨迹;在中等 Eo 下保持直线运动;而在较大 Eo 下再次出现之字形轨迹,并且会伴随着明显的气泡形变.

气泡在运动过程中发生的传质与气泡的运动特征息息相关. 在化学工程学科领域,所有关于气泡运动特性讨论的目的是研究气液传质效率的影响机制并准确预测传质速率. 因此,关于气泡传质特性的研究大多都基于对运动特征的研究. Khinast 等^[17]通过数值模拟研究了气泡传质与尾涡动力学对气液反应选择性的影响. 研究发现,反应物在气泡顶部和尾涡区域具有不同的停留时间,这会导致不同产物的生

成。此外, 气泡尾涡内的回流会对液相反应物形成传质屏障, 限制其向气泡后部的输运; 尾涡中出现的涡旋脱落会引发强烈的湍动混合, 这种混合机制与无回流闭合尾涡中较为平缓的循环混合有本质区别, 显著影响受传质控制的化学反应的产物分布. Li 等^[18]通过模拟研究了气泡内部流动对气泡传质的影响. 研究发现, 气泡变形会影响气泡内部的流动模式和传质面积, 表明更强的内部流动会强化传质过程. Kure 等^[19]采用拉格朗日模型结合不同液相传质系数关联式, 对气泡上升过程中的体积变化进行了数值模拟, 研究结果进一步揭示: 当气泡直径为 2.1 ~ 2.3 mm 时, 液相传质系数达到最大值; 而对于平均直径小于 1.4 mm 的气泡, 其液相传质系数随直径减小而减小. 并且研究还指出, 现有关联式的模拟结果之间存在显著的差异, 且均无法准确描述气泡在传质现象和静压力梯度共同作用下的瞬态演化方程, 研究还对 Clift 等^[15]提出的液相传质系数关联式进行了改进, 修正后的关联式表现出优异的预测能力. Li 等^[20]对单气泡在静止水中上升过程中的传质过程以及尺寸变化进行了分析研究, 通过建立传质模型, 系统考察了气泡水平速度、释放深度、初始尺寸、背景溶解气体的浓度以及气泡群效应对传质过程的影响. 研究表明, 气泡尺寸沿上升路径的变化同时受到传质作用和局部静压的影响, 但两者在不同的条件下存在相对重要性差异. 此外, 还有研究者研究气泡聚并破碎、气泡表面污染对气泡传质产生的影响^[18-19, 21-29].

综上, 气泡形状、气泡上升路径、上升速度等气泡运动行为, 以及气泡所处液相环境及其湍动程度都会对气泡传质速率产生影响. 文献[30]证实了 Eo 和 Mo 可以预测气泡运动行为, 然而并没有对传质过程规律进行详细的分析. 本文将使用耦合界面传质的 3D-VOF 方法对不同 Eo 和 Mo 条件下的气泡自由运动以及传质过程进行严格的三维模拟, 分析气泡传质尾流的演化特征以及气泡传质速率的变化规律.

1 数值模拟方法

本文采用基于 OpenFOAM 开发的开源工具集 GeoChemFoam^[31]中的 interTransferFoam 求解器对气泡自由上升过程中的运动和传质行为进行模拟. 该求解器在 interFoam 两相流求解器的基础上, 耦合了相界面传质模型与组分输运方程, 能够精确捕捉伴随物质传递的气泡动力学行为.

1.1 控制方程

本文采用 VOF 法对单气泡在三维空间中的自由上升运动进行模拟, 流体域假设为不可压缩, 等温两相流. 控制方程由连续性方程、动量方程以及相方程组成, 具体形式如下.

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \mathbf{T} + \rho \mathbf{g} + \mathbf{F}_\sigma \quad (2)$$

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\alpha(1-\alpha) \mathbf{u}_r) = 0 \quad (3)$$

式中: ρ 为流体密度; t 为时间; $\mathbf{u}$ 为速度矢量; $\mathbf{u}_r$ 为相对速度矢量; p 为压力; $\mathbf{T}$ 为黏性应力张量; $\mathbf{g}$ 表示重力加速度; α 为体积分数, 表示两相流体中某相的占比; $\mathbf{F}_\sigma$ 为表面张力. 表面张力项采用连续表面力 (CSF) 模型^[32], 将表面张力转化为体积力, 即

$$\mathbf{F}_\sigma = \sigma \kappa \nabla \alpha \quad (4)$$

式中: σ 为表面张力系数; κ 为界面曲率, 由体积分数梯度计算, 即

$$\kappa = -\nabla \cdot \left(\frac{\nabla \alpha}{|\nabla \alpha|} \right) \quad (5)$$

当存在界面传质时, 连续性方程和 α 演化方程重写为

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \dot{m} \left(\frac{1}{\rho_l} - \frac{1}{\rho_g} \right) \quad (6)$$

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha \mathbf{u}) + \nabla \cdot [\alpha(1-\alpha) \mathbf{u}_r] = \frac{\dot{m}}{\rho_l} \quad (7)$$

式中: $\dot{m}$ 为相间质量传输速率; $\mathbf{u}_r = \mathbf{u}_l - \mathbf{u}_g$, 通常假设 $\mathbf{u}_r$ 为零. 然而, 为了减少由于数值耗散引起的界面扩散, 通常使用压缩速度 $\mathbf{u}_{\text{comp}}$ 来替代 $\mathbf{u}_r$, 其方向垂直于界面, 且幅值基于单场速度的最大值进行计算^[33], 即

$$\mathbf{u}_r \equiv \mathbf{u}_{\text{comp}} = \bar{n}_\Sigma \left[\min \left(c_\alpha \frac{|\phi_f|}{A_f}, \max_f \left(\frac{|\phi_f|}{A_f} \right) \right) \right] \quad (8)$$

式中: c_α 为压缩系数 (通常取值范围在 0 ~ 4 之间); ϕ_f 为通过 f 面的体积流量; A_f 为 f 面面积. 在所有模拟中, 取 $c_\alpha = 1.0$.

在本研究中, 气相始终被假设为纯相. 此外, 假设气体组分在液相中溶解, 遵循亨利定律 (Henry's law), 并保持稀释状态. 在这种情况下, 计算域中的单场浓度满足连续组分传输 (continuous species transfer, CST) 模型所给出的对流-扩散方程^[34-36], 即

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \quad (9)$$

式中: $\mathbf{F}$ 为对流通量; $\mathbf{J}$ 为扩散通量. 为了保持对流算子的数值一致性, 组分的对流通量同样采用压缩速

度进行建模,使用标准的压缩 CST(compressible CST, C-CST)模型^[31],即

$$\mathbf{F} = c\mathbf{u} + \alpha(1-\alpha) \frac{\nabla c \cdot \nabla \alpha}{\|\nabla \alpha\|^2} \mathbf{u}_{\text{comp}} \quad (10)$$

对于扩散通量, Maes 等^[31]提出其可以表示为

$$\mathbf{J} = -D^{\text{SF}} \nabla c + \Phi \quad (11)$$

其中

$$\Phi = (1-H)D^{\text{SF}} \frac{c}{\alpha + H(1-\alpha)} \nabla \alpha \quad (12)$$

式中: H 为亨利系数; D^{SF} 为单场扩散系数. 关于单场扩散系数的计算公式最早由 Haroun 等^[35]提出,并在 Marschall 等^[36]和 Deising 等^[34]的研究中得到进一步发展,本文采用的计算公式为

$$D^{\text{SF}} = D^e = \frac{\alpha D_l + H(1-\alpha)D_g}{\alpha + H(1-\alpha)} \quad (13)$$

式中: D_l 为液相扩散系数; D_g 为气相扩散系数; D^e 表示扩散系数的平均值.

所以,相间质量传输速率^[31]可表示为

$$\dot{m} = \frac{D^e \nabla c - \Phi}{1-\alpha} \cdot \nabla \alpha \quad (14)$$

1.2 自适应网格技术

为提高计算效率并精确捕捉气液界面动态,本研究采用动态自适应网格加密技术. 该技术根据相含率场梯度特征,在界面区域实施局部网格细化,在流动平缓区域保持粗网格,实现计算资源的最优分配.

自适应网格的加密策略基于气液界面附近的体积分率 α 分布特征,以体积分率 α 作为加密指标,当网格单元满足 $0.01 < \alpha < 0.99$ 时,判定该单元位于气液界面过渡区,触发网格加密. 最大允许加密层级为 3 层,即初始基础网格可经过 3 次递归细分,最小网格尺寸为 $\Delta x_{\min} = \Delta x_0 / 6$,为避免界面移动导致的加密区域突变,设置缓冲区层数 $n_{\text{buffer}} = 4$,确保界面附近加密区域平滑过渡. 图 1 展示了自适应网格在界面附近的加密效果,可见气泡表面网格分辨率显著高于外围区域.

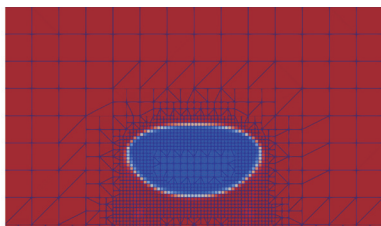


图 1 气泡附近处的自适应网格加密

Fig.1 Near-bubble adaptive mesh refinement

1.3 模型验证

本研究使用课题组高性能计算集群进行模拟计

算,集群配置 6 个计算节点,每个节点配置有 2 个 AMD EPYC 7573 X 32 核处理器. 本文所用计算域为 $80 \text{ mm} \times 80 \text{ mm} \times 240 \text{ mm}$ 的立方体区域,四周壁面以及底面均为无滑移边界(压力边界条件设为 zeroGradient). 计算域上方采用的速度边界条件为 pressureInletOutletVelocity, 压力边界条件为 totalPressure. 计算开始前,在距离计算域底部 0.01 m 处定义一个球形气泡,气泡内部的液相分率设为 0,其余区域设为 1. 为保证定义的气泡具有较好的解析率,初始气泡的位置处进行了 4 层网格加密,即分辨率为背景网格的 2^4 倍,并且在气泡初始上升路径附近进行了 2 层网格加密作为过渡区,以防止气泡由于剧烈的网格分辨率变化导致的数值损失,加密效果如图 2 所示.

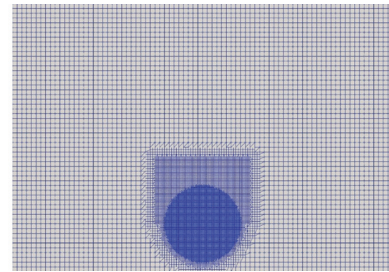


图 2 初始网格加密

Fig.2 Initial mesh refinement

此外,对于组分相关边界均为零压梯度. 计算开始前,除了在对的气泡区域将液相分率设为 0 外,还需要设置气泡内部的摩尔浓度,其余位置设为 0.

为确保数值模拟结果的可靠性,本研究对计算域进行了系统的网格无关性验证. 基于几何特征与流动梯度分布,分别构建 6 套结构化背景网格,每套网格保持 3 个方向上的比例相同,分别为 $40 \times 40 \times 120$ 、 $50 \times 50 \times 150$ 、 $60 \times 60 \times 180$ 、 $70 \times 70 \times 210$ 、 $80 \times 80 \times 240$ 、 $90 \times 90 \times 270$, 网格数量依次为 19.2 万、37.5 万、64.8 万、102.9 万、153.6 万、218.7 万. 选取气泡上升终端速度作为对比参数,气泡上升速度作为描述气泡运动的关键参数,是直接反映模型计算是否正确的关键参照. 对照结果如图 3 所示,随着网格数量增加,模型计算得到的气泡终端速度不断增大,直到网格数量大于 153.6 万 ($80 \times 80 \times 240$) 时不再增大,此时即认为网格数量满足计算精度要求. 因此,此后所有算例均选取此网格配置进行计算.

为验证模型计算结果的准确性,本研究搭建了如图 4 所示实验装置对模型进行实验验证,气泡上升过程的图像由高速 CMOS 相机 (Photron FASTCAM SA3) 捕获. 相机配备了一个 105 mm f1:2.8D 镜头

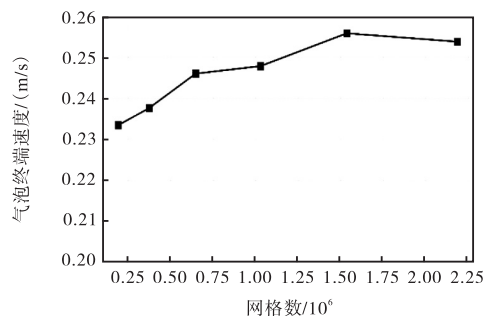


图3 网格无关性验证

Fig.3 Mesh independence validation

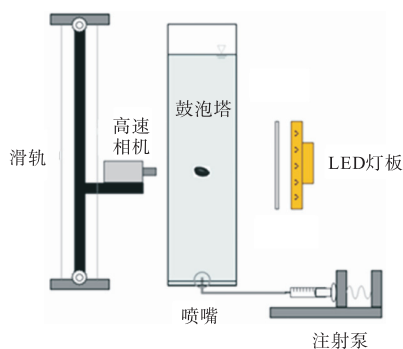


图4 实验装置示意

Fig.4 Schematic of the experimental setup

(Nikon AF MicroNikkor 50 mm F/1.8G). 气泡形状、大小和位置通过使用 Luo 等^[37]开发的图像处理算法对高速摄像拍到的图片进行处理得到. 实验条件采用静止超纯水与二氧化碳气泡. 将气泡体积变化作为对比参数以验证模型的准确性, 对比结果如图 5 所示. 从图中可以看出, 模型计算得到的气泡体积变化与实验结果吻合良好, 平均相对误差为 1.4%, 最大误差为 3.4%.

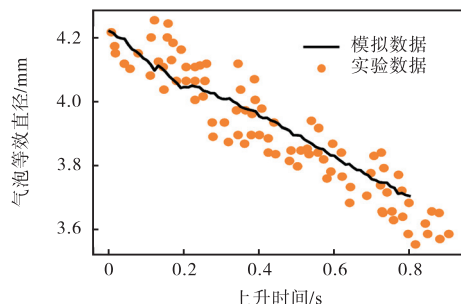


图5 传质模型实验结果验证

Fig.5 Experimental validation of the mass transfer model

2 结果与讨论

厄特沃什数 (Eo) 和莫顿数 (Mo) 是流体力学中用于表征液滴或气泡在连续相流体中运动行为的两个关键无量纲参数. Eo 定义为浮力与表面张力效应的

比值, 其数学表达式为 $Eo = (\Delta\rho g L^2) / \sigma$, 其中, $\Delta\rho$ 为两相密度差, L 为特征长度 (本文中为气泡直径). Eo 的物理意义在于量化浮力对气泡形状的影响: 当 $Eo \gg 1$ 时, 浮力主导, 液滴易发生显著变形甚至破裂; 而当 $Eo \ll 1$ 时, 表面张力占优, 液滴趋于保持球形. Mo 则综合了流体惯性、黏性及表面张力的作用, 在气液密度差异较大时, 其定义为 $Mo = \frac{g\mu^4}{\rho\sigma^3}$, 其中 μ 为流体动力黏度. Mo 通过黏性力与表面张力的四次方关系, 刻画了流体的物性参数对液滴动力学的影响: 高 Mo 值表明黏性效应显著, 液滴运动趋于稳定; 低 Mo 值则意味着表面张力主导, 易引发界面失稳.

Eo 和 Mo 具有十分特殊的意义, 其与 Re 、 We 等无量纲参数的不同点在于 Eo 和 Mo 通过物性条件和气泡 (或液滴) 的特征尺寸即可确定, 而不需要气泡的运动数据 (如 Re 和 We 需要气泡速度). 研究 Eo 和 Mo 对气泡运动的影响, 可以获知气泡运动的可能状态, 对气液、气液固多相反应器的设计具有重要意义.

2.1 Eo - Mo 对气泡上升速度的影响

图 6 为气泡在不同 Eo 和 Mo 条件下气泡上升速度散点图, 不同 Eo 和 Mo 对应的液相性质以及气泡尺寸如表 1 所示. 图 6 中气泡速度为上升 0.4~0.8 s 之间的平均上升速度. 散点的大小和颜色表示气泡平均上升速度的大小, 散点越大, 颜色越深, 气泡上升速度越大. 从图 6 中可以看出, Mo 和 Eo 均会对气泡上升速度产生影响. Mo 减小和 Eo 增大时, 气泡上升速度均会增大, 这是因为 Mo 减小意味着液相对气泡造成的黏性阻力效应相对减弱, 流动逐渐过渡至惯

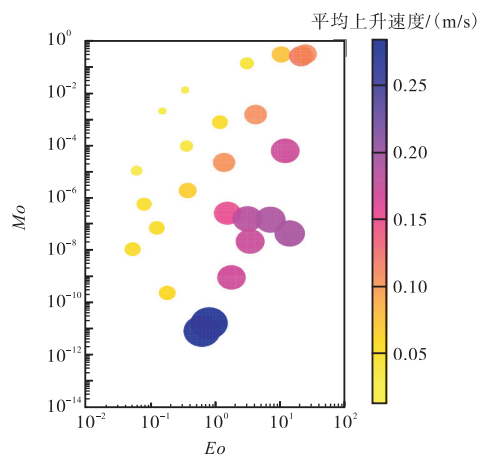
图6 不同 Eo 和 Mo 条件下气泡平均上升速度Fig.6 Average bubble rising velocity under different Eo and Mo conditions

表 1 算例参数
Tab.1 Cases parameters

序号	Eo	Mo	液相黏度/(Pa·s)	表面张力系数/(N/m)	气泡直径/mm	液相密度/(kg/m ³)
1	1.50×10^0	2.30×10^{-7}	4.05×10^{-3}	6.52×10^{-2}	1.6	1 250
2	2.99×10^0	1.23×10^{-1}	9.82×10^{-2}	6.52×10^{-2}	2.2	1 050
3	1.15×10^0	6.94×10^{-4}	2.99×10^{-2}	6.52×10^{-2}	1.4	1 250
4	3.06×10^0	1.39×10^{-7}	3.84×10^{-3}	6.52×10^{-2}	2.4	1 250
5	1.16×10^1	5.57×10^{-5}	1.57×10^{-2}	6.52×10^{-2}	4.4	1 250
6	3.36×10^{-1}	1.17×10^{-2}	9.24×10^{-2}	6.52×10^{-2}	1.0	1 250
7	1.50×10^{-1}	1.87×10^{-3}	9.77×10^{-2}	6.52×10^{-2}	1.0	1 250
8	7.82×10^{-2}	5.09×10^{-7}	1.73×10^{-2}	6.52×10^{-2}	1.0	1 250
9	3.52×10^{-1}	8.50×10^{-5}	2.60×10^{-2}	6.52×10^{-2}	1.0	1 250
10	6.86×10^0	1.30×10^{-7}	3.48×10^{-3}	6.52×10^{-2}	3.4	1 250
11	1.01×10^1	2.70×10^{-1}	9.98×10^{-2}	6.52×10^{-2}	4.0	750
12	1.36×10^1	3.85×10^{-8}	2.58×10^{-3}	6.52×10^{-2}	4.8	1 250
13	2.04×10^1	2.32×10^{-1}	1.00×10^{-1}	6.52×10^{-2}	5.8	800
14	2.38×10^1	2.81×10^{-1}	9.92×10^{-2}	6.52×10^{-2}	5.0	900
15	3.67×10^{-1}	1.69×10^{-6}	9.47×10^{-3}	6.52×10^{-2}	1.0	1 250
16	1.33×10^0	2.00×10^{-5}	1.35×10^{-2}	6.52×10^{-2}	1.6	1 250
17	1.73×10^0	8.05×10^{-10}	1.06×10^{-3}	6.52×10^{-2}	1.8	1 250
18	7.86×10^{-1}	1.43×10^{-11}	1.07×10^{-3}	6.52×10^{-2}	2.4	1 250
19	3.35×10^0	1.91×10^{-8}	2.19×10^{-3}	6.52×10^{-2}	2.4	1 250
20	6.01×10^{-2}	9.68×10^{-6}	3.94×10^{-2}	6.52×10^{-2}	1.0	1 250
21	6.08×10^{-1}	7.14×10^{-12}	1.02×10^{-3}	6.52×10^{-2}	2.2	1 400
22	1.78×10^{-1}	2.06×10^{-10}	1.71×10^{-3}	6.52×10^{-2}	1.0	1 250
23	1.23×10^{-1}	6.32×10^{-8}	9.46×10^{-3}	6.52×10^{-2}	1.0	1 250
24	5.22×10^{-2}	9.69×10^{-9}	7.11×10^{-3}	6.52×10^{-2}	1.0	1 250
25	4.07×10^0	1.36×10^{-3}	3.48×10^{-2}	6.52×10^{-2}	2.6	1 250
26	1.35×10^1	4.01×10^{-7}	4.19×10^{-3}	6.52×10^{-2}	4.0	1 250
27	1.29×10^1	9.24×10^{-8}	2.91×10^{-3}	6.52×10^{-2}	4.0	1 250
28	5.56×10^0	1.01×10^{-4}	2.74×10^{-2}	6.52×10^{-2}	4.0	1 250
29	1.59×10^0	7.21×10^{-8}	1.02×10^{-2}	6.52×10^{-2}	4.0	1 250
30	1.38×10^0	6.24×10^{-11}	1.81×10^{-3}	6.52×10^{-2}	4.0	1 250
31	4.41×10^0	1.13×10^{-2}	9.97×10^{-2}	6.52×10^{-2}	4.0	1 250

性主导. 并且在较低的 Mo 下, 气泡更容易脱离球形而发生非对称的形变, 这种非对称形状减少了压差阻力. 而 Eo 增大, 表明气泡浮力效应增大, 而表面张力对气泡形状的维持作用相对较弱, 因此气泡更容易发生形变. 并且, 大尺寸气泡或者低表面张力条件下, 气泡尾涡作用更加显著, 会对气泡形成持续的上升推动力, 加速气泡上升.

总体来讲, Mo 减小与 Eo 增大的协同作用促使气泡进入惯性作用主导区域, 此区域内黏性阻力和表面张力的约束作用相对较小, 而浮力作用相对较强, 并且此区域内湍流强度较大, 会减弱流体对气泡运动的阻滞作用. 综上, Mo 减小降低了黏性耗散与形变阻力, Eo 增大强化了浮力驱动与尾流升力, 二者的耦合作用导致气泡上升速度显著增大.

为了比较 Eo 和 Mo 对气泡平均上升速度影响的相对大小, 在此引入“弹性系数”的概念来对二者的影响程度进行量化, 弹性系数的计算式为

$$\varepsilon = \frac{\Delta Y}{\Delta X} \frac{X}{Y} \quad (15)$$

式中: Y 为因变量, 此处定义为气泡平均上升速度; X 为自变量, 此处定义为 Mo 或 Eo ; ε 为弹性系数, 可以反映出某个自变量的变化对因变量的影响程度. 对图 6 中的数据进行分析计算可以得到 Eo 弹性系数的绝对值的平均值为 2.63, 而 Mo 弹性系数的绝对值的平均值为 0.82, 因此说明 Eo 对气泡上升速度的影响更大. 从图 6 中散点也能看出, Eo 的变化范围仅为 $1 \times 10^{-2} \sim 1 \times 10^2$, 但是散点的变化程度十分剧烈; 而 Mo 的变化为 $1 \times 10^{-14} \sim 1$, 散点的变化程度与 Eo 相似, 因此也能说明气泡上升速度对 Eo 敏感.

Clift 等^[15]将在液相中自由上升所形成的气泡形状按照不同的 Eo 、 Mo 和 Re 分为不同的区域. 按照气泡形状, 大致可以分为不同的区域, 分别为球形区、椭球形区、形状振荡区、球帽形区等较大变形程度的区域. 根据 Clift 等^[15]的分类方法, 将气泡在 0.4 ~ 0.8 s 内的平均速度绘制在流型图中. 如图 7 所

示, 气泡平均上升速度在形状振荡区和椭球形区内相对较大, 而在球形区内最小, 这是因为在形状振荡区和椭球形区内, 气泡的 Eo 相对较大, 气泡所受浮力作用较强, 上升速度较高. 并且该区域内气泡产生的形变会延缓其表面边界层的分离, 从而减小其压差阻力, 因此该区域内的上升速度会比球形气泡更高.

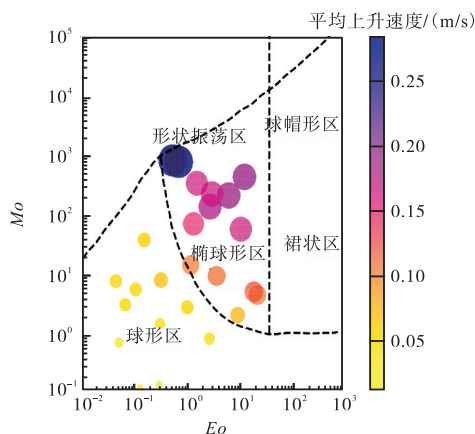


图 7 气泡平均上升速度流型图

Fig.7 Average bubble rising velocity regime

图 8 为不同 Eo 和 Mo 条件下, 气泡上升速度波动的二次差分标准差, 使用二次差分标准差可以避免上升速度的整体趋势对标准差的影响, 从而反映出气泡上升速度的瞬时加速度变化情况. 从图中可以看出, 在 Eo 比较大的区域内, 气泡上升速度的平均振荡强度整体较 Eo 小的区域强, 说明该区域内气泡更容易受到浮力的影响, 上升速度波动较为剧烈. 另外可以看到气泡的振荡情况受到 Mo 的影响也较大, 在 Mo 较大的区域内气泡的振荡幅度较弱. 这说明在 Mo 较大的区域内, 液相黏性阻力相对占主导, 此时气泡运动所受到的阻力作用较为明显, 速度变化较为

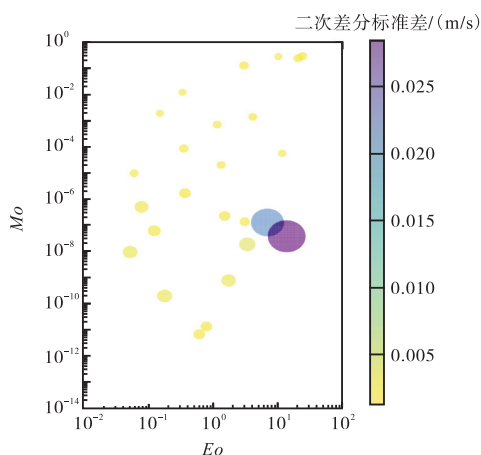


图 8 不同 Eo 和 Mo 条件下气泡上升速度的二次差分标准差

Fig.8 Second-order standard deviation of the bubble rising velocity under different Eo and Mo conditions

平缓.

2.2 $Eo-Mo$ 对气泡形状变化的影响

气泡球形度 (ψ) 为具有相同体积的球体的表面积与其实际表面积的比值, 计算式为

$$\psi = \frac{4\pi \left(\frac{3V_b}{4\pi} \right)^{2/3}}{S_b} \quad (16)$$

式中 V_b 和 S_b 分别为气泡的体积和表面积. 球形度可以用来衡量气泡接近球形的程度, 球形度越接近 1, 气泡越接近圆形, 反之气泡的变形越剧烈.

图 9 为不同 Eo 和 Mo 条件下气泡上升 0.4 ~ 0.8 s 内, 气泡非球形度变化的平均值. 非球形度定义为 $1-\psi$, 其值越大, 气泡变形程度越大. 从图中可以看出, 在 Eo 较大的区域内, 气泡平均变形程度较大, 并且相同区域内, 随着 Mo 的增大, 气泡的变形程度变小. 这说明气泡的变形程度受到 Eo 和 Mo 的共同影响, 即液相阻力、浮力、气泡表面张力三者的共同作用. 在 Eo 较大的区域内, 表面张力对气泡形状的维持作用相对较弱, 气泡较易发生形变; 而在 Mo 较大的区域内, 液相黏性阻力相对较大, 液层之间的摩擦力相对较强, 液膜更不容易发生形变, 气泡接近于一个刚性球体^[30].

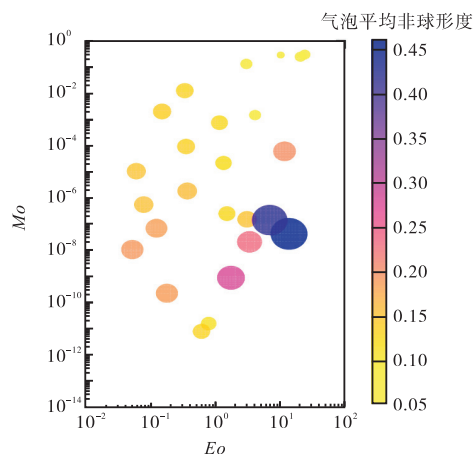


图 9 不同 Eo 和 Mo 条件下气泡平均非球形度

Fig.9 Mean bubble nonsphericity under different Eo and Mo conditions

图 10 为不同 Eo 和 Mo 条件下气泡上升 0.4 ~ 0.8 s 内, 气泡非球形度变化的二次差分标准差, 从图中可以看到气泡形状的波动情况在 Eo 和 Mo 变化时几乎不呈现规律性. 这说明气泡形状的实时变化情况不能简单地通过物性参数和特征尺寸决定, 需要考虑气泡在运动过程中的动态特性. 因此, 本文进一步考虑了气泡上升过程中雷诺数的影响.

图 11 为气泡上升过程中非球形度二次差分标准差的流型图, 从图中可以看到气泡在球形区和形状振

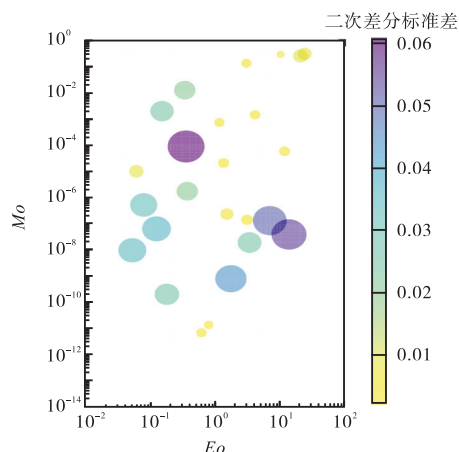


图 10 不同 Eo 和 Mo 条件下气泡非球形度的二次差分标准差

Fig.10 Second-order standard deviation of the bubble asphericity under different Eo and Mo conditions

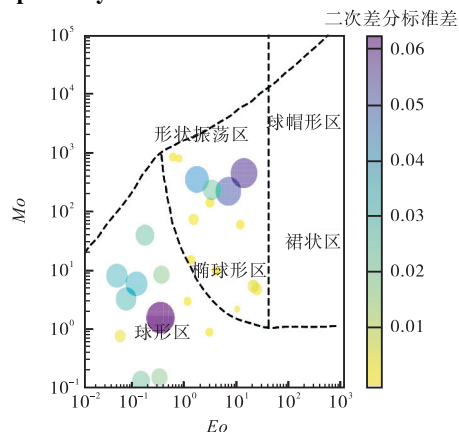


图 11 气泡非球形度的二次差分标准差流型图

Fig.11 Regime of the second-order standard deviation of the bubble nonsphericity

荡区内的气泡形状变化的速度都较强,在椭圆形区气泡形状变化较为平缓.这是因为,在球形区内,气泡处于表面张力主导的区域内,对外界的作用力变化敏感,当有微小压力波动打破平衡时,高表面张力会快速调整气泡形状,呈现出较高的瞬时形状变化强度,

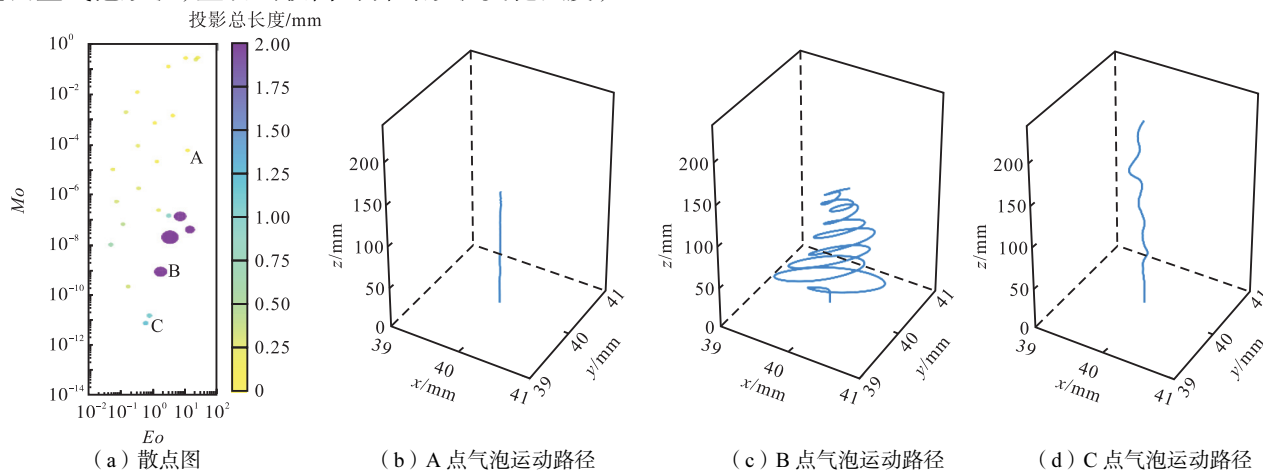


图 12 气泡运动路径在 x - y 平面上的投影长度之和散点图

Fig.12 Scatter plot of the sum of the projected lengths of the bubble motion path on the x - y plane

这与此前得到的结论^[30]相同.而在形状振荡区域内,惯性力与表面张力形成动态竞争关系,尾涡不断形成和脱落会造成气泡表面压力分布不均匀,引发气泡的不规则形状变化,这种不稳定的流动状态会引发气泡形状的剧烈变化.而在椭圆形区内,气泡的表面张力作用相对较弱,同时流动处于低雷诺数区,流动状态相对稳定,因此该区域内气泡保持相对稳定的形态运动,而不发生剧烈的形状变化.

2.3 Eo - Mo 对气泡上升路径的影响

气泡在不同的 Eo 和 Mo 条件下表现出完全不同的上升路径,气泡在某些条件下会发生偏转而在某些条件下则保持直线运动,气泡运动路径的不同对溶质在液相中的分布具有十分重要的影响,因此研究液相条件和特征尺寸对气泡运动路径的影响对多相反应器的设计具有十分重要的意义.本研究对不同条件下的气泡运动路径做了分析,如图 12 所示.图中采用气泡运动路径在 x - y 平面的投影长度之和来表征气泡运动路径的振荡情况,计算式为

$$L_{x-y \text{ projection}} = \sum_i \sqrt{\Delta x_i^2 + \Delta y_i^2} \quad (17)$$

式中 $L_{x-y \text{ projection}}$ 为投影路径长度.

图 12 中将 3 种比较典型的气泡运动路径做了示意,可以看到,气泡的投影路径长度越长,气泡运动路径越不稳定,反之气泡则保持近乎直线运动.但值得注意的是,考虑到计算时长,本文只对 $0 \sim 0.8$ s 时间内气泡运动过程进行了模拟,因此不同条件下气泡的上升高度是不同的,对不同条件下的气泡模拟采用相同的运动时间也可以反映出气泡在不同条件下的运动特征.从图中可以看出,在较低 Mo 和较高 Eo 的区域内,气泡运动路径更易发生偏转.这是因为在这些区域内,液相的黏性阻力作用较弱,而惯性力作用较强,气泡运动状态更容易受到周围液相环境的影

响,当气泡受到不平衡的外部作用力时,气泡很容易发生偏转。

此外,气泡是否发生偏转的很重要的一个原因是气泡形状变化与周围的液相涡漩之间的相互作用,当气泡发生不对称形变、周围的涡漩失去轴对称性后,二者会发生协同作用,相互加剧对方的不对称性,从而造成气泡运动路径发生较为强烈的偏转。从图 13 中可以明显地看到,气泡在形状振荡区内,气泡运动路径的偏转程度较其他区域内明显更大,这主要是因为该区域内气泡较易发生不对称形变。

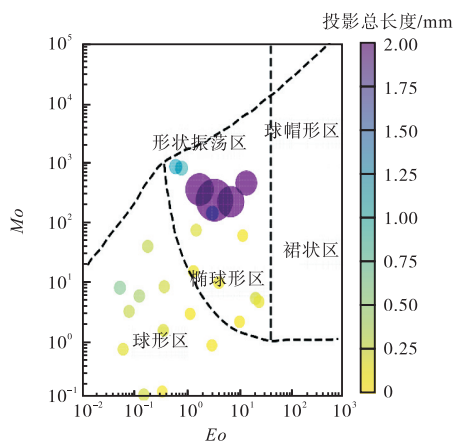


图 13 气泡运动路径在 x - y 平面上的投影长度流型图

Fig.13 Regime of the projected lengths of the bubble motion path on the x - y plane

2.4 Sc 对传质尾流形态的影响

当需要描述气泡在运动过程中发生的传质过程时,除了 Eo 和 Mo , 还需引入施密特数 (Sc), Sc 表示动量黏性扩散速率和质量扩散速率的比值,即

$$Sc = \frac{\nu}{D} = \frac{\mu}{\rho D} \quad (18)$$

式中: ν 为运动黏度; D 为分子扩散系数. Sc 常用于分析和预测流体中溶质的扩散行为,当 Sc 值较大时,说明黏性扩散比质量扩散更快,溶质主要集中在流体边界层附近,反之则说明质量扩散比较强,溶质可以迅速向流体内部扩展。

图 14 为气泡发生传质时纵切面的浓度云图,从图中可以看出,在气泡与液相发生质量传递的过程中,溶质从气泡表面扩散到周围液体中,并在气泡上升运动中随着流动被带向气泡后方,最终在流动分离时带入尾流区。由于溶质的扩散速度较慢,而气泡由于上升所产生的对流效应较强,因此会在气泡表面形成一个薄的浓度边界层。这个边界层紧贴气泡表面,包裹着整个气泡的迎风面,并随着上升中的剪切流动不断压缩、拉伸并向尾部输运。如图 14(b) ~ (d) 所示,当气泡上升速度较大时,在气泡运动的尾部区

域,由于液相流体绕过气泡边缘之后的速度变化和压力梯度作用,流体会在气泡尾部发生流动分离。溶质会随着分离的流体进入尾流区而不继续沿着气泡表面输运,形成传质的分离点,即溶质离开气泡表面的位置。

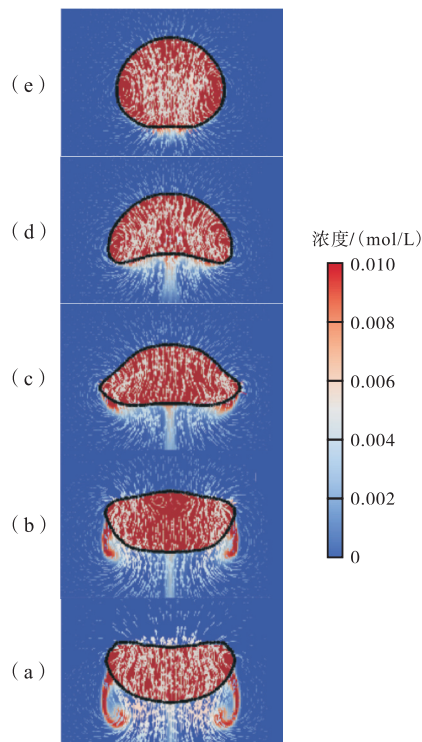


图 14 气泡尾流形成示意

Fig.14 Schematic of bubble wake formation

如图 14(a) 所示,当气泡上升速度较小时,压力梯度较小,流体会紧贴着气泡表面向尾部输运,气泡侧面不会发生流动分离,来自气泡两侧的流体会在尾部会聚,无法继续沿着气泡表面输运,从而迫使界面附近的溶质向液相主体扩散,此时溶质主要是从气泡尾部进入液相主体而不是从气泡侧边分离,因此溶质会在气泡尾部会聚的位置形成分离点如图 15 所示。

这些分离点可以是对称或非对称的,取决于气泡的变形程度和运动的稳定性,气泡表面发生的这一过程是气泡界面溶质进入液相主体的主要路径。

图 16 所示为 $Sc = 39850$ ($\nu = 1.98 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$, $D = 5 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$) 条件下气泡在上升过程中,气泡周围以及尾部的浓度等值面,图中两个等值面从外到内分别为 $5 \times 10^{-4} \text{ mol/L}$ 和 $1 \times 10^{-3} \text{ mol/L}$ 。从图中可以看出,在此条件下,气泡侧边不会发生流动分离,溶质不会随着流体从侧边进入液相主体,而是在尾部汇聚后向液相扩散;并且此条件下 Sc 较大,流动较为稳定,尾部会形成一条较为稳定的直尾流,漩涡强度较

低,尾流不易发生分散,不利于溶质在液相中的分布。

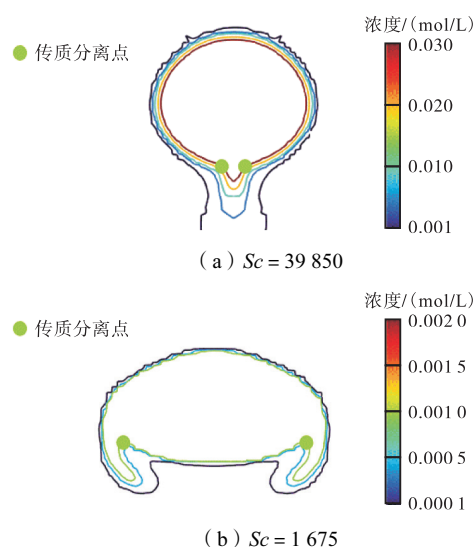


图 15 气泡周围浓度分布等值线

Fig.15 Near-bubble concentration contour

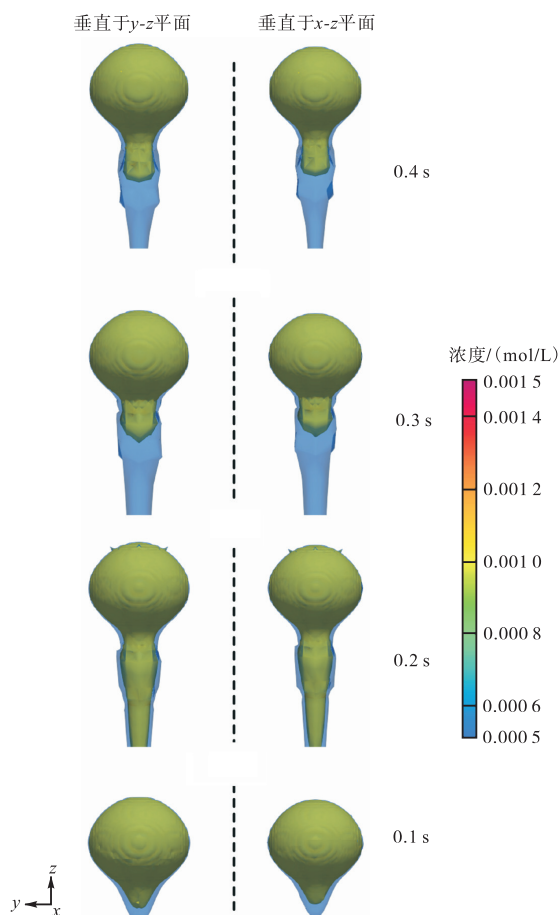


图 16 $Sc = 39\,850$ 条件下, $0.1 \sim 0.4\text{ s}$ 时间内气泡周围浓度等值面图

Fig.16 Isosurface of the near-bubble concentration when $Sc = 39\,850$ and $t = 0.1 \sim 0.4\text{ s}$

图 17 展示了 $Sc = 200$ ($\nu = 1 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$, $D = 5 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$) 条件下, 气泡上升初期的气泡周围浓度

等值面图, 从图中可以看出, 在气泡上升速度较小时, 气泡侧边不会发生流动分离, 因此溶质也只能在尾部汇聚后进入液相主体. 随着气泡上升速度加快, 气泡表面的流体便会在气泡侧边发生流动分离, 溶质随着分离的流体进入液相主体, 而不再从尾部进入. 并且从图中可以发现, 随着气泡的运动, 溶质会快速离开气泡表面, 并且在尾部形成强烈且周期性脱离的涡旋, 而不是在尾部形成连续尾流, 这与 Huang 等^[38]通过 LIF/HPTS 观察到的 CO_2 在纯水中溶解所产生现象一致.

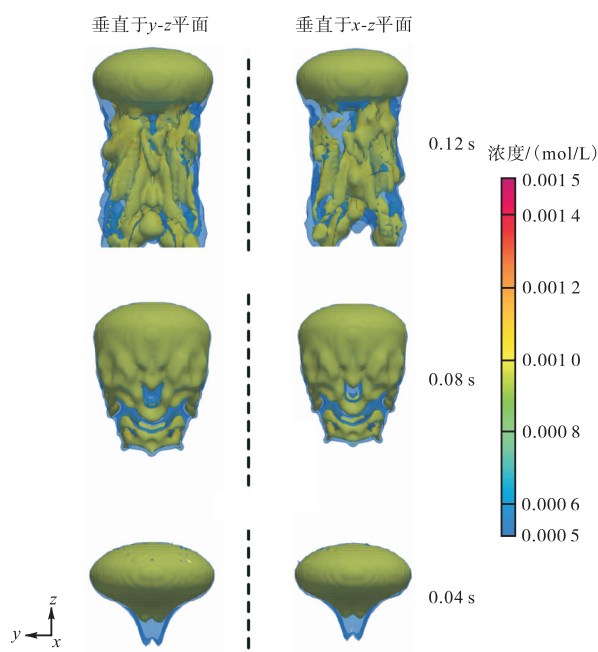


图 17 $Sc = 200$ 条件下, $0 \sim 0.12\text{ s}$ 时间内气泡周围浓度等值面图

Fig.17 Isosurface of the near-bubble concentration when $Sc = 200$ and $t = 0 \sim 0.12\text{ s}$

当气泡运动发生偏转时, 其尾部的浓度分布会发生复杂的变化, 如图 18 所示. 图 18 展示了不同方向上气泡在不同姿态下的浓度尾流的变化情况, 从图中可以看出, 当气泡发生偏转时, 其尾流也会产生不对称浓度分布. 从图 8 还可以看出, 传质主要发生在气泡发生偏转位置处的迎风面, 这是因为迎风面流体流速较高, 流体不断冲刷气泡表面, 新鲜流体于气泡表面接触更加频繁, 传质速率更高. 而气泡背风面则相反, 传质速率较低.

2.5 $Eo-Mo$ 对气泡传质速率的影响

进一步分析尾流中的涡量分布与浓度分布可以发现, 浓度分布与涡量分布呈现相似性, 如图 19 所示, 左侧为涡量分布, 右侧为浓度分布. 尾流中浓度的聚集点与涡量值较大的位置十分相似, 这与 Kück

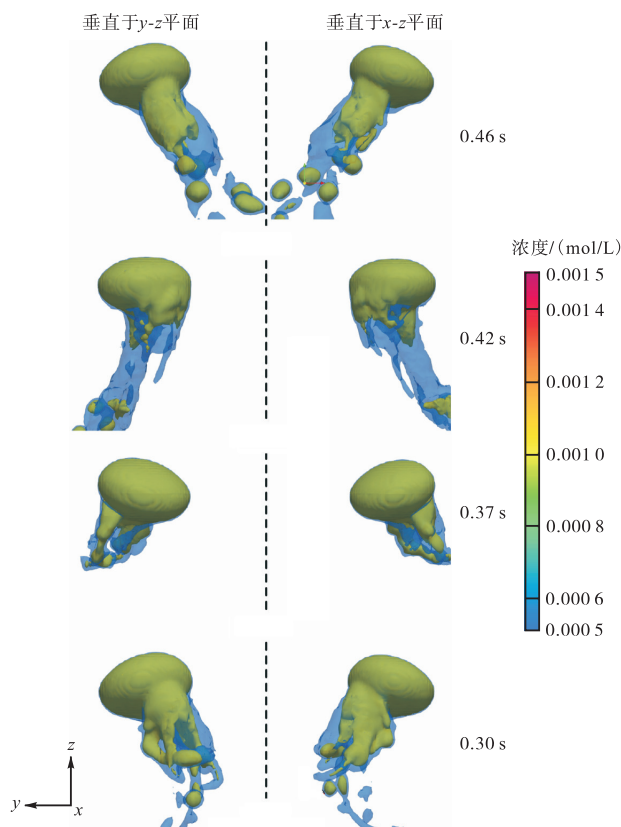


图 18 $Sc = 200$ 条件下, 0.30 ~ 0.46 s 时间内气泡周围浓度等值面图

Fig.18 Isosurface of the near-bubble concentration when $Sc = 200$ and $t = 0.30 \sim 0.46$ s

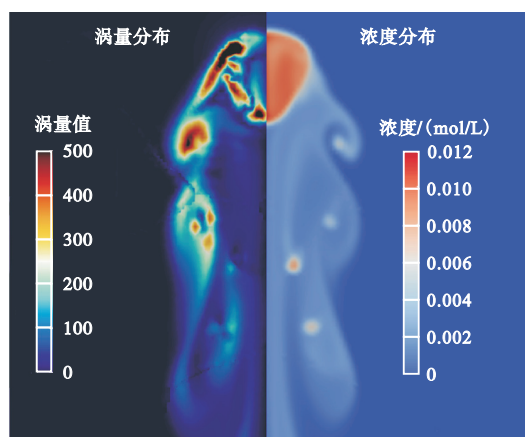


图 19 气泡尾流涡量分布与浓度分布

Fig.19 Vorticity and concentration distributions of the bubble wake

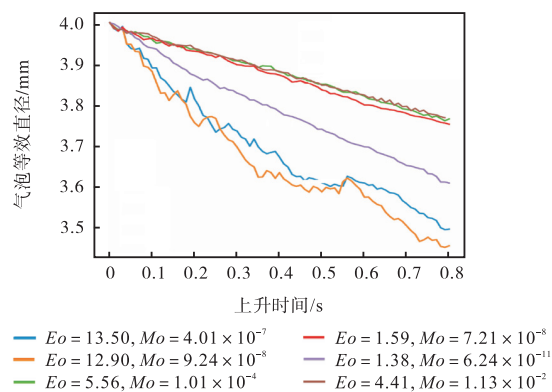
等^[39]在实验中观察到的结果一致. 尾流中的涡流通过卷吸作用将带有溶质的周围流体带入尾流, 高涡量区对应流体剧烈运动的区域, 溶质受涡流作用在此聚集. 此外, 涡量和浓度的输运均依赖流体速度场, 尾流中的涡流导致流体旋转, 同时驱动溶质的被动输运.

图 20(a) 为气泡在不同 Eo 和 Mo 条件下所发生

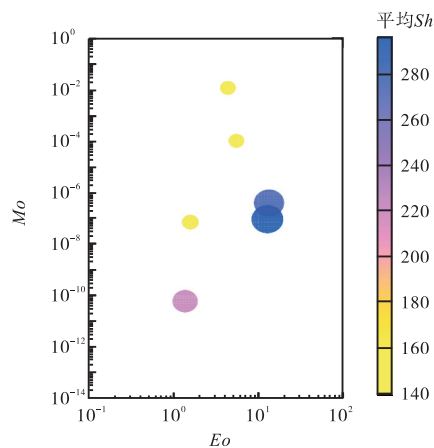
的体积变化情况, 图 20(b) 为不同 Eo 和 Mo 条件下的舍伍德数(Sh)分布, Sh 计算式为

$$Sh = \frac{k_L d}{D} \quad (19)$$

式中: k_L 为液相传质系数; d 为气泡等效直径.



(a) 气泡等效直径变化



(b) Sh 分布

图 20 不同 Eo 和 Mo 条件下气泡的等效直径变化和 Sh 分布

Fig.20 Equivalent diameter variations and Sh distribution of bubbles under different Eo and Mo conditions

气泡体积的变化可以直观反映出气泡传质速率, 气泡体积变化越快, 表示气泡传质速率越高. 从图 20(b) 中可以看出, 不同条件下气泡传质速率差异明显. 气泡在 Eo 较大的区域传质速率更快, Sh 相对较大, 在 Mo 相当条件下, Sh 变化的最大幅度为从 114 升高到 294. 在 Eo 较大的区域内, 气泡受浮力驱动发生显著形变, 表面积增大, 这直接导致气液接触面积增大, 传质速率通常与气液接触面积成正比, 因此形变直接提升了传质能力. 另一方面, 气泡由于发生显著形变导致气泡表面更新频率提高, 提高了传质速率; 此外, Sh 较大说明表面的扰动还促进了气泡附近的对流传质速率, 提高了传质速率.

另外,从图 20(b)可以发现,随着液相 Mo 增大,气泡体积变化逐渐变小,传质速率减慢, Sh 变小,在 Eo 相当条件下, Sh 变化的最大幅度为从 220 降到 137. 这是因为 Mo 较大时,液相黏度较高,气泡更易保持球形,气液接触面积较小. 同时,气泡界面附近的流场基本处于停滞状态,与周围新鲜流体的交换较少,降低了界面更新速率,对流传质速率较小,从而降低了气泡传质速率. 此外,低 Mo 时较小的气泡上升速度可能导致气泡周围形成局部浓度平衡,降低气泡传质推动力.

3 结 论

本文使用耦合传质算法的 VOF 方法结合自适应网格技术,对不同 Eo 和 Mo 条件下的气泡自由上升过程进行了严格模拟,分析了气泡运动不稳定行为以及其对气泡传质速率的影响,获得了不同 Eo 、 Mo 、 Sc 条件下的气泡界面、速度、路径以及液相流场、浓度场的动态演化过程,分析了气泡传质速率的变化规律,得到了如下结论.

(1) Eo 和 Mo 对气泡上升速度、变形程度和运动路径都会产生影响. 在 Mo 较小、 Eo 较大的区域内,液层之间的摩擦力相对较小,气泡所受黏性阻力较小,同时气泡所受到的浮力相对较大,因此,该区域内气泡上升速度相对较快,并且上升速度的波动也相对更为强烈,运动不稳定性相对较强,气泡更容易发生形变,并且也更容易发生偏转. 而在 Mo 相对较大、 Eo 相对较小的区域内,液相的黏性阻力相对较大,气泡表面张力的作用也相对较高,因此,气泡上升速度相对较慢,上升速度的波动也相对较弱,气泡维持球形的能力也更强. 此区域内,气泡运动较为稳定,运动路径也更不容易发生变化. 气泡形状的瞬时波动情况需要综合考虑 Re - Eo - Mo 的影响,气泡在椭球形区内的形状波动较为稳定,而在球形和形状振荡区内较为剧烈.

(2) 传质尾流形态受到液相黏度的影响,在相同扩散系数下,液相黏度越大,传质尾流越稳定. 气泡表面传质速率分布受到气泡路径不稳定性影响,气泡的迎风面传质速率较大,这是因为在气泡的迎风面,气泡表面与液相主体之间的交换频率更高,表面更新速率更快. 气泡传质速率随着 Eo 升高而增大,随着 Mo 升高而降低. 这是因为,当 Eo 升高、 Mo 降低时,气泡运动不稳定性增强,液相湍动程度更高,强化了近界面处的液体混合,提高了气泡表面更新

速率.

参考文献:

- [1] Huang J, Saito T. Discussion about the differences in mass transfer, bubble motion and surrounding liquid motion between a contaminated system and a clean system based on consideration of three-dimensional wake structure obtained from lif visualization[J]. Chemical Engineering Science, 2017, 170(11): 105-115.
- [2] Bhaga D, Weber M E. Bubbles in viscous liquids: Shapes, wakes and velocities[J]. Journal of Fluid Mechanics, 1981, 105: 61-85.
- [3] Zhou Z C, Cheng X S, Peng K, et al. Numerical study on the deformation of a gas bubble in uniform flow[J]. Ocean Engineering, 2022, 254: 111164.
- [4] Ohta M, Imura T, Yoshida Y, et al. A computational study of the effect of initial bubble conditions on the motion of a gas bubble rising in viscous liquids[J]. International Journal of Multiphase Flow, 2005, 31(2): 223-237.
- [5] Krishna R, van Baten J M. Rise characteristics of gas bubbles in a 2D rectangular column: VOF simulations vs experiments[J]. International Communications in Heat and Mass Transfer, 1999, 26(7): 965-974.
- [6] Hussein E Q, Rashid F L, Hussein A K, et al. Hydrodynamics of single bubble rising through water column using volume of fluid (VOF) method[J]. Journal of Thermal Engineering, 2021, 7(Suppl 14): 2107-2114.
- [7] Chakraborty I, Biswas G, Ghoshdastidar P S. A coupled level-set and volume-of-fluid method for the buoyant rise of gas bubbles in liquids[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2013, 58(1): 240-259.
- [8] Abbassi W, Besbes S, Elhajem M, et al. Numerical simulation of free ascension and coaxial coalescence of air bubbles using the volume of fluid method (VOF) [J]. Computers & Fluids, 2018, 161: 47-59.
- [9] Prosperetti A. Bubbles[J]. Physics of Fluids, 2004, 16(6): 1852-1865.
- [10] Ellingsen K, Risso F. On the rise of an ellipsoidal

- bubble in water: Oscillatory paths and liquid-induced velocity[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2001, 440: 235-268.
- [11] Tripathi M K, Sahu K C, Govindarajan R. Dynamics of an initially spherical bubble rising in quiescent liquid [J]. *Nature Communications*, 2015, 6: 6268.
- [12] Bonnefis P, Fabre D, Magnaudet J. When, how, and why the path of an air bubble rising in pure water becomes unstable[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2023, 120(11): e2300897120.
- [13] Bonnefis P, Sierra-Ausin J, Fabre D, et al. Path instability of deformable bubbles rising in Newtonian liquids: A linear study[J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 2024, 980: A19.
- [14] Cano-Lozano J C, Martinez-Bazan C, Magnaudet J, et al. Paths and wakes of deformable nearly spheroidal rising bubbles close to the transition to path instability [J]. *Physical Review Fluids*, 2016, 1(5): 053604.
- [15] Clift R, Grace J R, Weber M E. Bubbles, Drops, and Particles[M]. New York: Dover Publications, 1978.
- [16] Kawaguchi M, Niga S, Gou N, et al. Buoyancy-driven path instabilities of bubble rising in simple and polymer solutions of hele-shaw cell[J]. *Journal of the Physical Society of Japan*, 2006, 75(12): 124401.
- [17] Khinast J G. Impact of 2D bubble dynamics on the selectivity of fast gas-liquid reactions[J]. *AIChE Journal*, 2001, 47(10): 2304-2319.
- [18] Li X, Wang W W, Zhang P, et al. Interactions between gas-liquid mass transfer and bubble behaviours [J]. *Royal Society Open Science*, 2019, 6(5): 190136.
- [19] Kure I K, Jakobsen H A, Solsvik J. Experimental study of interfacial mass transfer from single CO₂ bubbles ascending in stagnant water[J]. *Chemical Engineering Science*, 2024, 287: 119684.
- [20] Li P C, Ma Y Y, Zhu D Z. Mass transfer of gas bubbles rising in stagnant water[J]. *Journal of Environmental Engineering*, 2020, 146(8): 04020084.
- [21] Griffith R M. The effect of surfactants on the terminal velocity of drops and bubbles[J]. *Chemical Engineering Science*, 1962, 17(12): 1057-1070.
- [22] Hlawitschka M W, Oßberger M, Backes C, et al. Reactive mass transfer of single no bubbles and bubble bouncing in aqueous ferric solutions—A feasibility study [J]. *Oil & Gas Science and Technology—Revue D'ifp Energies Nouvelles*, 2017, 72(2): 11.
- [23] Jia H W, Zhang P. Mass transfer of a rising spherical bubble in the contaminated solution with chemical reaction and volume change[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2017, 110(7): 43-57.
- [24] Jin Y, Schlüter M. Direct numerical simulation of the interfacial mass transfer of a bubble in self-induced turbulent flows[J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2019, 135: 1248-1259.
- [25] Kentheswaran K, Dietrich N, Tanguy S, et al. Direct numerical simulation of gas-liquid mass transfer around a spherical contaminated bubble in the stagnant-cap regime [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2022, 198: 123325.
- [26] Pinheiro M N C. Liquid phase mass transfer coefficients for bubbles growing in a pressure field: A simplified analysis[J]. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 2000, 27(1): 99-108.
- [27] Saboni A, Alexandrova S, Mory M. Flow around a contaminated fluid sphere[J]. *International Journal of Multiphase Flow*, 2010, 36(6): 503-512.
- [28] Takemura F, Yabe A. Rising speed and dissolution rate of a carbon dioxide bubble in slightly contaminated water [J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 1999, 378: 319-334.
- [29] Wu W Y, Agarwal P K. The effect of bed temperature on mass transfer between the bubble and emulsion phases in a fluidized bed[J]. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 2003, 81(5): 940-948.
- [30] Liu Y J, Zheng L Y, Xia Y N, et al. Investigation of the bubble deflection using graphics processing unit accelerated multiple relaxation time lattice Boltzmann method: The effect of bubble size and liquid viscosity [J]. *Physics of Fluids*, 2024, 36(7): 073335.
- [31] Maes J, Soullaine C. A unified single-field volume-of-fluid-based formulation for multi-component interfacial transfer with local volume changes[J]. *Journal of*

- Computational Physics, 2020, 402: 109024.
- [32] 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.
- [33] Fleckenstein S, Bothe D. A volume-of-fluid-based numerical method for multi-component mass transfer with local volume changes[J]. Journal of Computational Physics, 2015, 301: 35-58.
- [34] Deising D, Marschall H, Bothe D. A unified single-field model framework for volume-of-fluid simulations of interfacial species transfer applied to bubbly flows[J]. Chemical Engineering Science, 2016, 139: 173-195.
- [35] Haroun Y, Legendre D, Raynal L. Volume of fluid method for interfacial reactive mass transfer: Application to stable liquid film[J]. Chemical Engineering Science, 2010, 65(10): 2896-2909.
- [36] Marschall H, Hinterberger K, Schüler C, et al. Numerical simulation of species transfer across fluid interfaces in free-surface flows using OpenFOAM[J]. Chemical Engineering Science, 2012, 78: 111-127.
- [37] Luo Y, Wang Z C, Zhang B, et al. Experimental study of the effect of the surfactant on the single bubble rising in stagnant surfactant solutions and a mathematical model for the bubble motion[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2022, 61(26): 9514-9527.
- [38] Huang J, Saito T. Discussion about the differences in mass transfer, bubble motion and surrounding liquid motion between a contaminated system and a clean system based on consideration of three-dimensional wake structure obtained from lif visualization[J]. Chemical Engineering Science, 2017, 170: 105-115.
- [39] Kück U D, Mießner U, Aydin M, et al. Mixing time and mass transfer of rising bubbles in swarm turbulence [J]. Chemical Engineering Science, 2018, 187: 367-376.
- (责任编辑: 田 军)