

垂直管道中塞状流的模拟

欧阳洁^{1, 2}, 孙国刚³, YU Ai-bing⁴

(1. 西北工业大学应用数学系, 陕西 西安 710072; 2. 中国科学院过程工程研究所, 北京 100080; 3. 北京石油大学, 北京 100083;
4. School of Materials Science and Engineering, University of New South Wales, Sydney 2052, Australia)

摘要 运用简化的硬球模型模拟垂直管道中的塞状流。固相行为通过跟踪离散颗粒的运动轨迹处理,气相运动由局部平均的 Navier-Stokes 方程处理,气固两相间的耦合作用服从牛顿第三定律。每个颗粒的运动过程被分解为颗粒间相互碰撞的过程及流体对其悬浮的过程。该模型定性地模拟了垂直管道中的塞状流,即在细而长的管道中,颗粒形成沿管道运动的塞状物,且塞状物的运动速度独立于塞状物的长度,但随着气体速度的增加而增加。

关键词: 模拟; 硬球模型; 塞状流; 气固两相流

中图分类号: O359 **文献标识码**: A **文章编号**: 1009-606X(2003)03-0193-07

1 前言

近年来,用于介观尺度模拟的颗粒轨道模型在气固流态化领域中取得了重要的研究成果。这类模型可分为两类。第一类是软球模型,该模型通过诸如弹簧、螺栓等力学器件的数学模型考虑颗粒间的相互作用以及颗粒与壁面的相互作用。软球模型由于可考虑其受力特征而应用广泛^[1-5]。第二类是硬球模型,该模型假定颗粒间的碰撞是二体瞬时碰撞,且碰撞按一定的次序进行。尽管 Alder 等^[6]很早就分子系统的相位转换研究中提出了硬球模拟技术,但在 30 多年后才发现,硬球模拟对于颗粒动力学的研究也是有用的工具^[7]。早期将硬球模型应用于水平管道中颗粒密度很稀的气固两相流模拟的先驱是日本的 Tsuji^[8],但他忽略了颗粒和颗粒间的相互作用,而主要运用不规则的反弹模型考虑颗粒与壁面的相互作用。随后 Frank 等^[9]也进行了相似的模拟,但他们重点是对实验进行校验。Hoomans^[10]是最先将硬球模型用于高颗粒密度气固系统之模拟的研究者,后来在气固流态化的研究领域,这一模型又得到进一步的扩展、运用和修改^[11-13]。

软球模型能够处理多个颗粒的相互作用,但必须仔细选取计算中的刚性系数。相对软球模型来说,硬球模型对上述参数的选取无需人工干预,且计算量小。对于鼓泡流化床的模拟,Hoomans^[14]的研究结果表明,两类模型几乎没有显示出任何差别。因此,本文将硬球模型简化,并用之模拟垂直管道中的塞状流。

垂直运输系统中的塞状流是气固密相流的典型代表。在细长的垂直管道中,颗粒在自下而上的气流中,往往形成向上的塞状流。这时,两个塞状物之间几乎没有颗粒。Borzzone 和 Gu^[15, 16]曾经从实验及理论上研究了这种类型的塞状流。对于大多数垂直的气力输送系统而言,悬浮于气流中的颗粒其径向分布几乎均匀。所以本文对垂直气力输送系统采用轴对称假设进行二维模拟,并考察所提出的简化硬球模型模拟两相作用很强的气固密相流的可行性。

2 数学模型

鉴于垂直气力输送系统中的动态行为具有轴对称性,本文取通过管道中心、且平行于管道的

收稿日期: 2002-12-20, 修回日期: 2003-04-22

基金项目: 国家自然科学基金资助(编号: 29976024); 陕西省自然科学基金资助(编号: 2001SL12); 多相反应开放研究实验室资助

作者简介: 欧阳洁(1957-), 女, 安徽省来安县人, 博士, 教授, 主要从事两相流计算及计算数学领域的研究。

平面作为二维模拟系统. 并用 x 表示模拟系统的径向, y 表示模拟系统的轴向.

2.1 颗粒运动

假设颗粒为密度均匀的球, 碰撞为双向、瞬时的二体碰撞. 在碰撞过程中, 只考虑冲力而忽略其它力. 故由碰撞动力学可推得碰撞过程中的速度变化为

$$\begin{cases} \mathbf{v}_{a2} = \mathbf{v}_{a1} + \frac{1}{2}(1+e) \frac{(\mathbf{v}_{b1} - \mathbf{v}_{a1}) \cdot \mathbf{k}}{|\mathbf{k}|^2} \cdot \mathbf{k} \\ \mathbf{v}_{b2} = \mathbf{v}_{b1} - \frac{1}{2}(1+e) \frac{(\mathbf{v}_{b1} - \mathbf{v}_{a1}) \cdot \mathbf{k}}{|\mathbf{k}|^2} \cdot \mathbf{k} \end{cases}$$

在不发生碰撞的悬浮过程中, 颗粒 k 的运动由牛顿第二定律描述:

$$m \frac{d\mathbf{v}_k}{dt} = m\mathbf{g} + \frac{V_p \beta_k}{1 - \varepsilon_k} (\mathbf{u}_k - \mathbf{v}_k) - V_p \nabla p_k,$$

式中右端第 1 项与第 3 项由重力与压力梯度引起, 第 2 项由曳力引起. 其中 \mathbf{u}_k , ε_k 和 β_k 分别表示颗粒 k 的局部气体速度、局部空隙率及局部相间交换系数. β_k 的具体表达式与文献[10]相同, 即

$$\begin{aligned} \beta_k &= 150 \frac{(1 - \varepsilon_k)^2}{\varepsilon_k} \frac{\mu_g}{d_p^2} + 1.75(1 - \varepsilon_k) \frac{\rho_g}{d_p} |\mathbf{u}_k - \mathbf{v}_k| & \varepsilon_k < 0.8, \\ \beta_k &= \frac{3}{4} (C_d)_k \frac{\varepsilon_k (1 - \varepsilon_k)}{d_p} \rho_k |\mathbf{u}_k - \mathbf{v}_k| \varepsilon_k^{-2.65} & \varepsilon_k \geq 0.8, \end{aligned}$$

曳力系数 $(C_d)_k$ 根据下列关联式计算^[17]:

$$(C_d)_k = \begin{cases} \frac{24}{(Re_p)_k} [1 + 0.15(Re_p)_k^{0.687}] & (Re_p)_k < 1000 \\ 0.44 & (Re_p)_k \geq 1000 \end{cases},$$

颗粒雷诺数的定义为

$$(Re_p)_k = \frac{\varepsilon \rho_g |\mathbf{u}_k - \mathbf{v}_k| d_p}{\mu_g}.$$

2.2 气体运动

气体运动根据两相耦合的 Navier-Stokes 方程计算. 其向量形式的质量、动量守恒方程为

$$\frac{\partial(\varepsilon \rho_g)}{\partial t} + \nabla \cdot \varepsilon \rho_g \mathbf{u} = 0, \quad \frac{\partial(\varepsilon \rho_g \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon \rho_g \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\varepsilon \nabla p - S_p - \nabla \cdot (\varepsilon \boldsymbol{\tau}_g) + \varepsilon \rho_g \mathbf{g},$$

这里粘性应力张量: $\boldsymbol{\tau}_g = -\{(\lambda_g - \frac{2}{3}\mu_g)(\nabla \cdot \mathbf{u})\mathbf{I} + \mu_g[(\nabla \mathbf{u}) + (\nabla \mathbf{u})^T]\}$.

本文采用 SIMPLER(Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations Revised)算法与局部线性化技术求解二维流场. 其网格剖分与算法的具体细节与文献[18]中模拟气固流态化的算法类似.

动量交换源项 S_p 由离散颗粒所受曳力叠加而得, 其表达式为

$$S_p = \frac{1}{V_{\text{cell}}} \sum_{k=1}^{N^*} \frac{V_p \beta_k}{1 - \varepsilon_k} (\mathbf{u}_k - \mathbf{v}_k),$$

式中 $V_{\text{cell}} = \Delta x \times \Delta y \times d_p$. 这个定义借鉴于 Hoomans^[19]的工作. 尽管也能选择其它公式^[20], 但是要使 V_{cell} 的计算完全合理, 必须进行三维模拟.

2.3 空隙率的计算

在颗粒轨道模型中，空隙率的计算对于气、固相动态行为的模拟具有举足轻重的影响。每个二维控制体中的空隙率根据该控制体上颗粒占据的面积计算。当颗粒粒径较小时，有

$$\varepsilon_{2d} \approx 1 - \frac{N^* \pi r_p^2}{\Delta x \Delta y},$$

式中得出的空隙率属于[0, 1)。但实际气固系统中，空隙率的值应该大于最小空隙率。为了修正实际系统与二维模拟中空隙率的差异，本文将二维空隙率 ε_{2d} 映射为三维空隙率 ε_{3d} ^[12]：

$$\varepsilon_{3d} = 1 - \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi\sqrt{3}}} (1 - \varepsilon_{2d})^{3/2}.$$

3 模拟结果

对细长管道中塞状流的基本特征、塞状物的长度、塞状物的运动速度进行了模拟。模拟中的基本参数如表 1 所示。

表 1 模拟中的基本参数
Table 1 Basic parameters in simulation

Particle	Gas	Pipeline	Discrete variable
$\rho_p=900 \text{ kg/m}^3$	$\rho_g=1.205 \text{ kg/m}^3$	$H=0.90 \text{ m}$	$\Delta t=10^{-5} \text{ s}$
$d_p=0.003 \text{ m}$	$\mu_g=1.80 \times 10^{-5} \text{ kg/(m}\cdot\text{s)}$	$W=0.06 \text{ m}$	$\Delta x \times \Delta y=0.01 \text{ m} \times 0.02 \text{ m}$
$\varepsilon_m=0.4$	$p_0=1.01325 \times 10^5 \text{ Pa}$		$I_{\max} \times J_{\max}=13 \times 91$
$e=0.9$			

由于模拟规模的限制，本文将细而长的管道用周期边界条件处理为无限长的管道。最初，管道底部颗粒在外部大气压为 p_0 、气体速度为 U_g 的初始条件下向上运动。颗粒运动开始后，流场计算采用轴向周期边界条件。颗粒相也用类似的方法处理，即跑出管道的颗粒以同样的速度在入口处横截面的同一位置重新进入管道。

3.1 塞状流的基本特征

为了使计算结果可视化，图 1 给出取不同颗粒数时塞状流中颗粒分布的瞬态图像。由图可见，在上升气流中，颗粒聚集在一起形成塞状物。颗粒运动的平均速度近似等于塞状物的运动速度，以至于塞状物之间的颗粒很少。尽管塞状物后端有一些颗粒下落，但它们落在下一个塞状物的前端，从而导致塞状物的长度几乎保持不变。塞状物运动的这种特征与实验观察完全吻合^[15,16]。图 1 的模拟结果也表明，塞状物有均匀的运动速度，以至于在不同的横截面上有相似的流型。

3.2 塞状物的长度

实验中塞状物的长度约为 20~25 cm^[21]，或因物料的差异从 1 cm 到 40 cm 变化^[15]。而在软球模型的模拟中，它约为 28 cm^[5]。本文模拟中塞状物的长度随颗粒数的变化而变化。在图 1 中，随意选取颗粒数为 4500, 3600 及 2700 则模拟所得塞状物的长度由 20 cm 到 35 cm 变化。与 Borzone^[15]及 Konrad^[21]获得的实验结果相比，本文的模拟能够定性地描述塞状物的长度。

3.3 塞状物的运动速度

本文模拟中，塞状物运动的平均速度是根据某段时间内塞状物移动的路程来计算。在模拟的初始阶段，由于颗粒惯性的影响，塞状物运动较慢。经过一段时间后，塞状物的运动趋于稳定。图 1 给出颗粒数不同时，塞状物在运动稳定后的图像。由图 1 可见，塞状物在整个运动过程中的速度近似相等，它并不敏感地依赖于模拟中所用的颗粒数。所以，塞状物的运动速度独立于塞状物的长度。这个结果也与实验结果相吻合^[15, 16]。

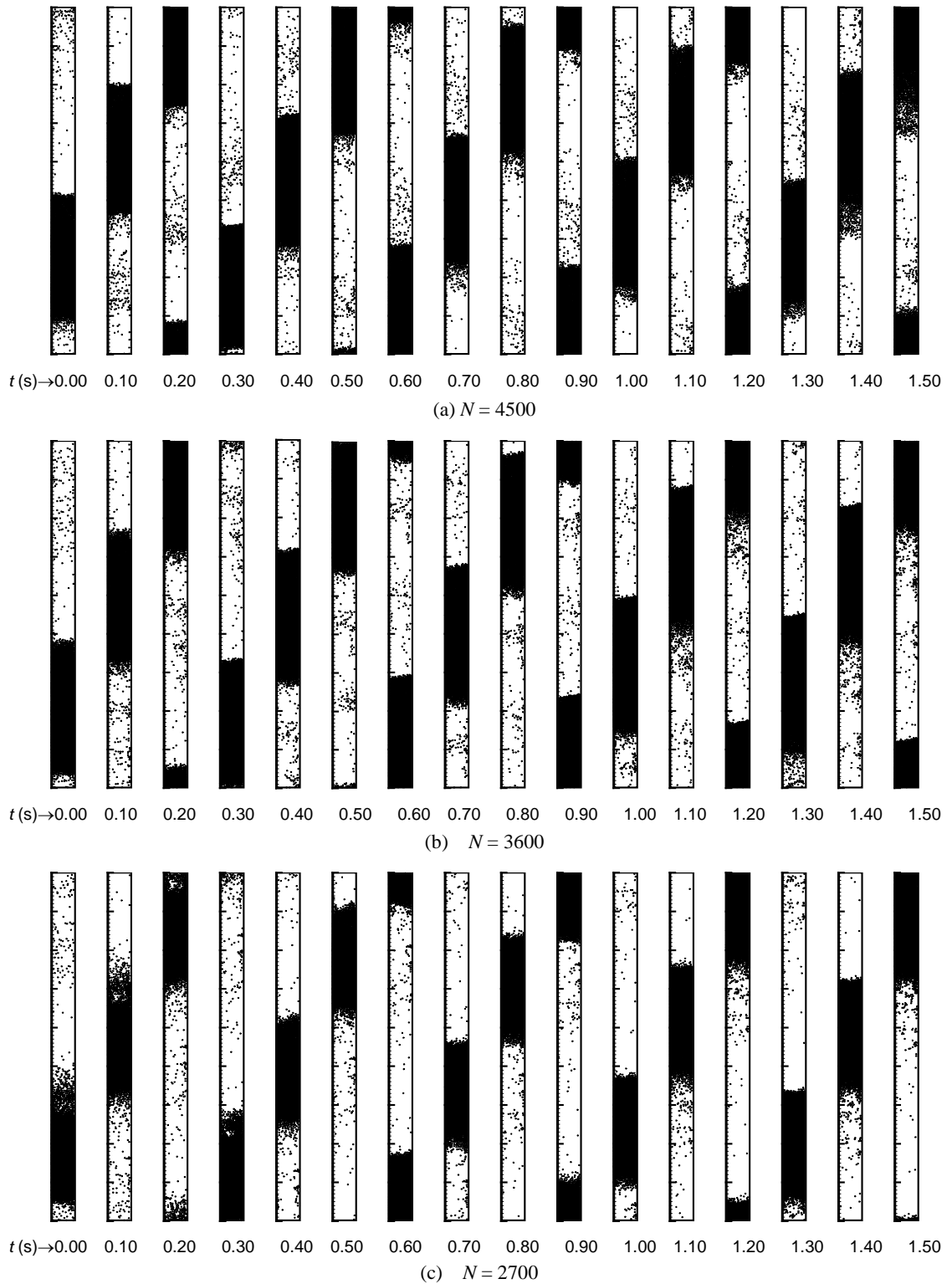


图1 颗粒数不同时塞状流的模拟

Fig.1 Simulation of plug motion with different particle numbers ($U_g=2.9$ m/s)

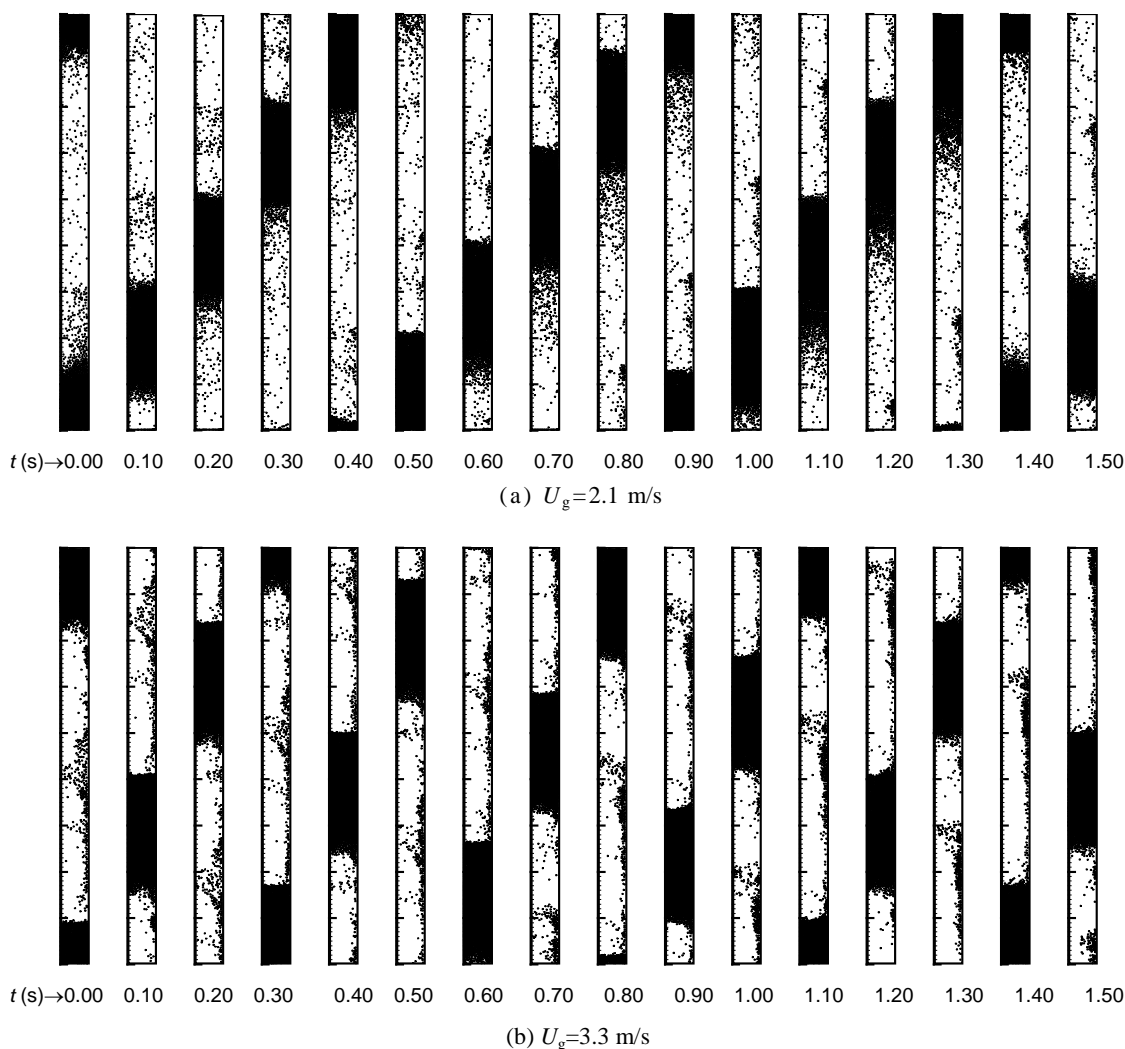


图 2 气速不同时塞状流的模拟

Fig.2 Simulation of plug velocity with different gas velocities ($N=2700$)

图 2 呈现了气体速度对塞状物运动的影响，其中也忽略了塞状物运动的初始惯性。由图 2 可见，塞状物的运动速度取决于气体速度。气体速度越大，塞状物运动越快。

Borzzone 等^[15]用实验得到滑移速度与塞状物速度之比介于 3%~28%，且塞状物速度大致为气体速度的 90%。本文模拟中滑移速度与塞状物速度之比以及塞状物速度与气体速度之比均列于表 2。将表 2 的模拟结果与文献[15]对比可知，本文的模拟结果接近实验值。

表 2 气体速度、塞状物速度及滑移速度
Table 2 Gas velocity, plug velocity and slip velocity

	Fig.1	Fig.2(a)	Fig.2(b)
U_g (m/s)	2.9	2.1	3.3
U_p (m/s)	2.8	1.9	3.2
U_s (m/s)	0.1	0.2	0.1
U_p/U_g (%)	97	90	97
U_s/U_p (%)	4	11	3

图 1 和 2 均忽略了塞状物的初始惯性，故塞状物的运动速度稍大于实验中所测得的速度。导致模拟中塞状物运动速度偏大的另一个原因是，在简化的模型中忽略了管道壁面的切向摩擦力。如考虑颗粒与管壁间的切向摩擦作用，模拟中塞状物的速度将更接近实验值。尽管在模拟中做了

一些简化处理,但模拟结果仍表明塞状物速度取决于气体速度,且随着气体速度的增加而增加。

4 结论

(1) 简化的硬球模型可用于气固两相耦合作用剧烈的密相流之模拟。它能够给出细长管道中塞状物的运动特征,即在气流自下而上的作用下,垂直管道中的颗粒聚集在一起,象棍棒样地向上运动,从而形成了垂直管道中的塞状流。此时,塞状物之间几乎没有颗粒。在塞状物的运动过程中,尽管有些颗粒从塞状物的后端下落,但它们散落在下一个塞状物的前端,以致于对于一定的操作条件,塞状物的长度总在一个定值附近波动。这些模拟结果均与实验特征相吻合。

(2) 塞状物有几乎均匀的运动速度,它随着气速的增加而增加。但采用不同的颗粒数进行模拟时,塞状物运动的速度几乎相同,即塞状物的运动速度与塞状物长度无关。并且,在不同的横截面上,塞状物有相似的流型。

符号表:

C_d	单颗粒的曳力系数	V_{cell}	控制体的体积 (m^3)
d_p	颗粒直径 (m)	\mathbf{v}	颗粒速度矢量 (m/s)
e	恢复系数 ($0 < e \leq 1$)	W	管道直径 (m)
g	重力加速度 (m/s^2)	β	相间交换系数 [$\text{kg}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$]
H	具有轴向周期边界的管道长度 (m)	$\Delta x, \Delta y$	控制体的径向长度和轴向长度 (m)
I	单位张量	Δt	时间步长 (s)
$I_{\text{max}}, J_{\text{max}}$	水平方向与垂直方向的网格点数	ε	空隙率
k	从颗粒 b 到颗粒 a 的距离矢量 (m)	ε_{m}	最小空隙率
m	单颗粒质量 (kg)	λ_g	体积粘性 [$\text{kg}/(\text{m} \cdot \text{s})$]
N	模拟系统中的颗粒数	μ_g	气相剪切粘性 [$\text{kg}/(\text{m} \cdot \text{s})$]
N^*	二维流场中单个控制体所包含的颗粒数	ρ_p	颗粒密度 (kg/m^3)
p	压力 [$\text{kg}/(\text{m} \cdot \text{s}^2)$]	ρ_g	气体密度 (kg/m^3)
p_0	标准大气压 (Pa)	τ_p	气相应力张量 [$\text{kg}/(\text{m} \cdot \text{s}^2)$]
Re_p	颗粒雷诺数		
r_p	颗粒半径 (m)		
S_p	动量交换源项 [$\text{kg}/(\text{m} \cdot \text{s}^2)$]	下标:	
U_g	气体速度 (m/s)	a, b, k	颗粒标识
U_p	塞状物的平均速度 (m/s)	g	气体
U_s	滑移速度 (m/s)	p	颗粒或塞状物
\mathbf{u}	气相速度矢量 (m/s)	2d, 3d	二维或三维
V_p	单颗粒体积 (m^3)	1,2	碰撞前后的状态

参考文献:

- [1] Tsuji Y, Kawaguchi T, Tanaka T. Discrete Particle Simulation of Two-dimensional Fluidized Bed [J]. Powder Technol., 1993, 77(1): 79-87.
- [2] Xu B H, Yu A B. Numerical Simulation of the Gas-Solid Flow in a Fluidized Bed by Combining Discrete Particle Method with Computational Fluid Dynamics [J]. Chem. Eng. Sci., 1997, 52(16): 2785-2809.
- [3] Mikami T, Kamiya H, Horio M. Numerical Simulation of Cohesive Powder Behavior in a Fluidized Bed [J]. Chem. Eng. Sci., 1998, 53(10): 1927-1940.
- [4] Kawaguchi T, Tanaka T, Tsuji Y. Numerical Simulation of Two-dimensional Fluidized Bed Using the Discrete Element Method (Comparison between the Two- and Three- Dimensional Model) [J]. Powder Technol., 1998, 96(2): 129-138.
- [5] Kawaguchi T, Tanaka T, Tsuji Y. Discrete Particle Simulation of Plug Conveying in a Vertical Pipe [A]. Proceeding of 6th International Conference on Bulk Materials Storage, Handling and Transportation [C]. Australia: The Institution of Engineering, 1998. 321-327.
- [6] Alder B J, Wainwright T E. Phase Transition for Hard-sphere System [J]. J. Chem. Phys., 1957, 27(5): 1208-1209.
- [7] Campbell C S, Brennen C E. Computer Simulations of Granular Shear Flows [J]. J. Fluid. Mech., 1985, 151(1): 167-188.

- [8] Tsuji Y, Morikawa Y, Tanaka T, et al. Numerical Simulation of Gas-Solid Two-phase Flow in a Two-dimensional Horizontal Channel [J]. *Int. J. Multiphase Flow*, 1987, 13(5): 671–684.
- [9] Frank Th, Schade K P, Petrak D. Numerical Simulation and Experimental Investigation of a Gas-Solid Two-phase Flow in a Horizontal Channel [J]. *Int. J. Multiphase Flow*, 1993, 19(1): 187–211.
- [10] Hoomans B P B, Kuipers J A M, Briels W J, et al. Discrete Particle Simulation of Bubble and Slug Formation in a Two-dimensional Gas-fluidized Bed: A Hard-sphere Approach [J]. *Chem. Eng. Sci.*, 1996, 51(1): 99–108.
- [11] Lun C C K, Liu H S. Numerical Simulation of Dilute Turbulent Gas-Solid Flows in Horizontal Channels [J]. *Int. J. Multiphase Flow*, 1997, 23(3): 575–605.
- [12] Ouyang J, Li J. Particle-motion-resolved Discrete Model for Simulating Gas-Solid Fluidization [J]. *Chem. Eng. Sci.*, 1999, 54(13): 2077–2083.
- [13] Ouyang J, Li J. Discrete Simulation of Heterogeneous Structure and Dynamic Behavior in Gas-Solid Fluidization [J]. *Chem. Eng. Sci.*, 1999, 54(22): 5427–5440.
- [14] Hoomans B P B. *Granular Dynamics of Gas-Solid Two-phase Flow* [M]. Netherlands: Maastricht, 1999. 146–149.
- [15] Borzone L A, Klinzing G E. Dense-phase Transport: Vertical Flow [J]. *Powder Technol.*, 1987, 53(3): 273–283.
- [16] Gu H, Klinzing G E. Vertical Plug Flow of Cohesive Coal in 2- and 4-Inch Pipes [J]. *Powder Technol.*, 1989, 57(1): 59–67.
- [17] Wen C Y, Yu Y H. *Mechanics of Fluidization* [J]. *Chem. Eng. Prog. Symp. Ser.*, 1966, 62(62): 100–105.
- [18] 欧阳洁, 李静海. 模拟气固流化系统的数值方法 [J]. *应用基础与工程科学学报*, 1999, 7(4): 335–345.
- [19] Hoomans B P B, Kuipers J A M, Briels W J, et al. Discrete Particle Simulation of Segregation Phenomena in Dense Gas-fluidized Beds [A]. *Proceeding of 9th International Engineering Foundation Conference on Fluidization* [C]. New York: United Engineering Foundation Inc., 1998. 485–492.
- [20] Delnoij E, Kuipers J A M, Van Swaaij W P M. Dynamic Simulation of Gas-Liquid Two-phase Flow: Effect of Column Aspect Ratio on the Flow Structure [J]. *Chem. Eng. Sci.*, 1997, 52(21–22): 3759–3772.
- [21] Konrad K, Totah T S. Vertical Pneumatic Conveying of Particle Plugs [J]. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 1989, 67(2): 245–252.

Simulations of Plug Conveying in a Vertical Pipe

OUYANG Jie^{1,2}, SUN Guo-gang³, YU Ai-bing⁴

(1. Dept. Appl. Math., Northwestern Polytechnical University, Xi'an, Shanxi 710072, China;

2. Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China;

3. Department of Chemical Engineering, University of Petroleum, Beijing 100083, China;

4. School Mater. Sci. & Eng., University of New South Wales, Sydney 2052, Australia)

Abstract: The phenomena of plug conveying in a vertical pipe have been simulated by using the simplified hard-sphere model. In the model, the behavior of solid phase is simulated by calculating the motion of individual particles while gas flow is obtained by solving the locally averaged equation, taking account of the interaction between fluid and particles. For the calculation of solid phase, the motion process of each particle is decomposed into the collision process accounting for the inter-particle interaction and the suspension process related to the interaction with fluid. Momentum conservation of collision mechanics controls the interaction between colliding particles, while the state of each suspended particle is fully dominated by the equation of force balance over that particle. The coupling relation between two phases is subjected to the Newton's third law of motion, in which the action of fluid to individual particle will react on the fluid phase from the individual particle in a computational cell. As a result, the proposed model has shown the typical behavior of vertical plug. In simulations, the particles are observed to move up as "plug" of bulk solids that occupy the entire cross-section of pipe. There are almost no particles between two plugs. Although some particles go out from the back of the plug and come in front of the plug, the length of the plug fluctuates around a certain fixed value for a certain set of operating condition. At the same time, the plug moves has almost uniform velocity and similar pattern in different cross sections. The plug velocity is independent of the plug length and it increases with increasing gas velocity. These results are qualitatively coincident with experiments. Compared with the soft-sphere model, the simplified hard-sphere model based on the method of resolving particle's motion process is simple and takes less time without special attention to be paid in calculations.

Key words: simulation; hard-sphere model; plug conveying; gas-solid two-phase flow