



CSTAM 2012-B03-0040
大型流态化多相流欧拉模拟的关键科学
问题——曳力模型的理论分析

祁海鹰，陈程

清华大学热科学与动力工程教育部重点实验室

第七届全国流体力学学术会议
2012年11月12—14日 广西·桂林

大型流态化多相流欧拉模拟的关键科学问题 ——曳力模型的理论分析¹⁾

祁海鹰*, 陈程

(清华大学热科学与动力工程教育部重点实验室, 北京海淀区 100084)

摘要: 为满足大型流态化多相流动和反应过程的模拟需要, 基于颗粒动力学的欧拉双流体方法得到不断发展, 其中决定模拟成败的关键科学问题是描述相间相互作用的曳力模型。本文首先综述了研究稠密非均匀气固流态化系统的曳力模型的方法, 并分析讨论了它们的优缺点。通过分析大型流态化系统的能量特征, 建立了基于最小能量理论 (EMMS) 的曳力模型, 其核心是建立系统机械能守恒方程, 结合欧拉方法, 通过寻求系统处于悬浮输送能最小的稳定状态, 来确定其应具有曳力水平。本文集中分析了 EMMS 理论在有关颗粒团的尺寸和密度等关键参数的本质缺陷, 提出了新的修正方法并进行了试验验证。结果表明, 新模型物理意义明确, 与试验吻合。最后, 本文阐述了需要研究解决的若干关键问题和建立具有普适性的通用曳力模型的发展方向。

关键词 多相流, 数值模拟, 曳力, EMMS, 颗粒团

引言

随着能源、化工和制药等行业的发展, 大型流态化多相流动和反应过程的数值模拟技术得到广泛的重视, 在过程分析、故障诊断以及改进设计等方面, 正发挥着日益重大的作用。欧拉-欧拉双流体方法用统一的方法处理颗粒相和流体相, 不仅节约计算量, 而且能获得工程实际所关心的大量颗粒运动所产生的流动总结果和总效应。因此, 双流体方法适用于大型流态化过程的模拟。

决定双流体方法模拟成败的关键科学问题是曳力模型^[1]。曳力描述了相间相互作用和流体夹带离散颗粒运动的能力。在双流体方法中, 曳力与相间平均速度差成比例, 比例系数即曳力系数由曳力模型来决定。目前采用的曳力模型都是在单颗粒曳力模型的基础上进行修正, 且修正函数又多采用空隙率的幂函数形式。事实上, 多颗粒系统的曳力不仅仅与空隙率有关, 与颗粒群的空间排布情况也有关系, 现有曳力模型仅适用于颗粒均匀分布的情况^[2-6]。若将这种均匀曳力模型用于稠密非均匀流动系统, 将高估曳力和颗粒循环流率, 且无法

捕捉系统内的非均匀结构^[7-11]。为此, 需要对现有曳力系数加入表述空间结构的参数, 建立适用于非均匀系统的曳力模型。

近年来 Andrews 和 O'Rourke 发展了一种新的多相流数值方法——多相质点网格法 (Multiphase Particle-In-Cell, MP-PIC)^[12-14]。该方法混合了连续的欧拉方法与离散的拉格朗日方法来对离散相颗粒群进行描述。相比传统的欧拉-拉格朗日方法中大量计算颗粒间碰撞, MP-PIC 引入颗粒碰撞模型, 大大减小计算量, 适用于大型流态化过程的模拟。相比双流体方法中曳力被简单的认为与相间平均速度差成比例, MP-PIC 对各个离散颗粒的曳力求和, 更准确地求解网格上的曳力。这种曳力求解方法能否捕捉网格内的颗粒空间排布特征从而弱化曳力模型的重要性值得研究。为此, 但本课题组采用 MP-PIC 对 A、B 类颗粒流化床上升管进行模拟, 结果表明曳力仍然被高估, 导致颗粒循环流率远大于实验值^[15]。这是表明叠加求解曳力的方法无法从根本上捕捉介尺度非均匀结构。这是因为 MP-PIC 计算单颗粒曳力时仍用到曳力模型, 决定模拟准确性的关键仍然是曳力模型。文献^[16]将基于能量最小多尺

* Email: hyqi@mail.tsinghua.edu.cn

度原理(EMMS)的非均匀曳力模型与 MP-PIC 方法耦合计算, 成功预测了气固流态化特性。因此, 多相质点网格法也需要非均匀曳力模型。

1 非均匀曳力模型

纵观研究非均匀曳力模型的文献, 大致分为三种研究方法。一是经验型, 通过经验或者半理论的方法得到修正后的曳力系数模型。二是关联型, 通过细网格模拟得到适用于粗网格计算的曳力关系式。三是极值型, 过稳定性条件分析不同尺度间的联系, 揭示产生非均匀结构的主要机理。

1.1 经验型

(1) 修正系数法

Zhang 和 Vanderheyden^[17]采用大于 0 小于 1 的系数乘以传统的均匀曳力模型, 以考虑颗粒团聚引起的曳力下降, 能够准确预测气固流动特征。然而, 由于不同的工况的颗粒团聚程度不同, 曳力下降程度不同, 因而修正系数值也不同, 需要通过大量试算来确定^[18-20]。因此修正系数法的工况适应性差并且缺乏完善可靠的理论依据。

(2) 经验关联式法

O'Brien and Syamlal^[21]通过对 FCC 颗粒流化床进行实验研究, 考虑颗粒团效应的影响, 对传统的均匀曳力模型进行修正, 提出了基于实验的 O-S 曳力模型。

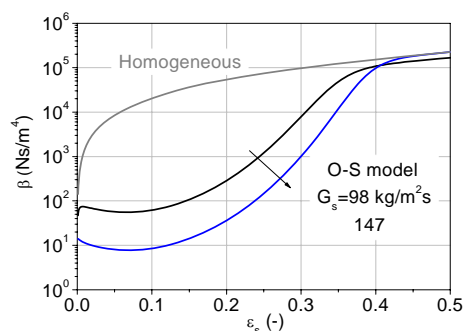


图 1 O-S 模型与均匀曳力模型的曳力系数分布 (Case 1: $U_g=3.7$ m/s, $G_s=98$ kg/m²s; Case 2: $U_g=4.3$ m/s, $G_s=147$ kg/m²s; $\rho_p=1714$ kg/m³, $d_p=76$ μ m, $\epsilon_{mf}=0.5$)

如图 1 所示, 相比传统的均匀曳力模型结果, O-S 模型成功预测了颗粒团导致的曳力下降, 且在当地颗粒浓度为 0.1 附近, 曳力下降

幅度最大。在当地颗粒浓度较小和较大的稀、浓两端, 曳力又逐渐趋于均匀结果。然而受实验工况的限制, O-S 模型仅适用于两种颗粒质量流率($G_s=98/147$ kg/m²s), 不具备普适性。此外, Wang and Li^[22]和 Cruz^[23]等人也采用经验关系式修正了颗粒团的影响, 尽管准确预测了气固流动, 但都受限于特定的工况, 难以推广到其他工况。

(3) 基于颗粒团法

既然稠密气固流动以颗粒团为特征, 就有研究者将颗粒团当成一个整体来考虑。Arastoopour 和 Gidaspow^[24]首先采用颗粒团尺寸代替单颗粒尺寸进行计算, 建立了基于颗粒团的欧拉数值模型。在此基础上, Gu 等人^[25,26]进一步考虑了颗粒团尺寸随颗粒浓度的变化, 而非简单地将颗粒团尺寸设为定值^[24]。尽管基于颗粒团的方法已经被用于预测气固流态化过程^[27,28], 甚至鼓泡床^[29]的计算, 并得到相对准确的结果。但是该方法存在一个关键问题, 如何准确描述颗粒团? 目前, 对于颗粒团的尺寸、密度或内部颗粒浓度, 甚至颗粒团的定义, 还缺乏统一准确的认识^[30-36]。上述文献中假设颗粒团内部颗粒浓度为定值甚至为 1, 这是不符合物理实际的。文献中所采用的颗粒团尺寸经验公式的准确性也有待验证。流化床内的颗粒团不断地形成和破碎, 受到气相固相物性参数、流化床几何尺寸、操作条件等众多因素影响, 正确认识颗粒团并准确描述颗粒团特性还需要大量的研究。因此, 基于颗粒团的方法的可靠性取决于对颗粒团的认知程度。此外, 鼓泡床内乳化相是否存在颗粒团, 也还存在争议^[37,38], 因而基于颗粒团的方法能否适用于鼓泡床也有待深入研究。

1.2 关联型

近年来, 通过细网格计算得到适用于粗网格模拟的关联型曳力模型发展迅速。Agrawal^[39]和 Igci^[40,41]等人认为传统的均匀曳力模型之所以无法捕捉介尺度结构, 是因为网格过粗所致。采用小于颗粒团尺度的细网格, 可以成功捕捉颗粒团尺度结构。然而, 由于颗粒团尺度跨度较大, 大约为 10 倍的单颗粒直径, 因此对整个流化床系统进行细网格模拟的计算量相当

大。但是通过细网格模拟，可以得到适用于粗网格模拟的曳力关系。

模拟区域 (Domain region)

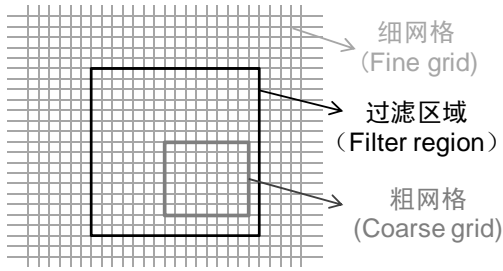


图 2 网格示意图

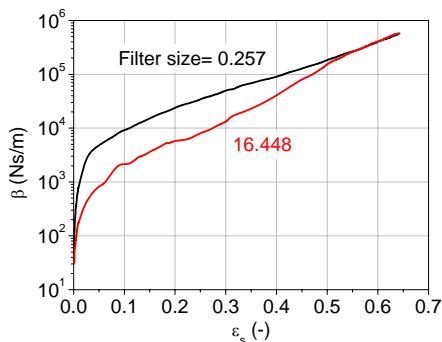
建立关联型曳力模型涉及的模拟区域、过滤区域以及网格如图 2 所示，求解步骤如下：

(1) 对远小于流态化系统的某一区域(Domain region)，采用传统的曳力模型和欧拉方法进行细网格(Fine grid)模拟，瞬态计算达到稳定后，记录多个时刻各细网格内的流动属性。(2) 取模拟区域内的某个小区域，即所谓的过滤区(Filter region)或亚网格区，其尺寸远小于模拟区域，以忽略壁面边界条件的影响。统计各过滤区内的曳力、滑移速度、颗粒应力和粘性等参数以及当地颗粒浓度。(3) 将步骤(2)得到的多个时刻的参数求平均，并建立这些参数随当地颗粒浓度变化关系，包括曳力关系式。

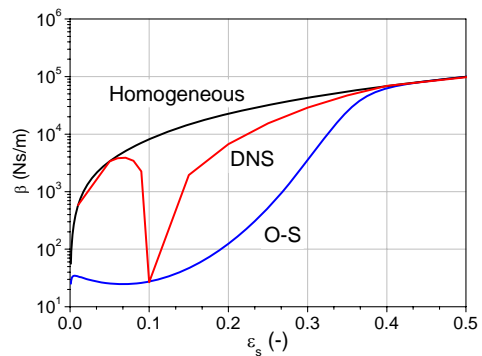
由上述方法得到的曳力关联式可以用于粗网格(coarse grid)计算，能够准确预测流化床内的颗粒团和流动特性^[42-44]。该方法的关键取决于细网格模拟能否准确计算气固流态化运动特

征。如果可以，随着计算机技术和并行机技术的迅速发展，将来有可能采用传统的欧拉双流体模型模拟大型工业规模的流化床系统。但是有研究者对该方法提出质疑^[45,46]，认为在系统处于非均匀结构明显的快速流态化时，细网格的模拟不能从根本上解决预测准确度问题。这是因为该方法忽略了流化床内的多尺度结构，微尺度的分子颗粒运动、介尺度的颗粒团聚和宏观尺度的气固流动。研究表明采用足够小的网格尺寸和时间步长，仍无法准确预测颗粒外循环流率和床内颗粒浓度的轴向分布特征^[45,46]。

将细网格模拟得到的曳力系数随局部颗粒浓度的变化曲线作于图 3a，可以发现曳力系数随着当地颗粒浓度单调增大，且过滤尺寸定量相关，因此需要确定合适的过滤尺寸来确定定量结果。图 3b 是均匀曳力系数、基于实验的 O-S 曳力系数^[21]以及直接数值模拟 DNS^[47]得到的非均匀曳力系数。直接数值模拟与基于实验的 O-S 模型类似，成功预测了非均匀结构导致的曳力下降，且在当地颗粒浓度为 0.1 附近，曳力下降幅度最大。而细网格模拟结果却与传统的均匀曳力系数分布相同，随着当地颗粒浓度单调增大，不具备非均匀曳力曲线所呈现出的“先减小后增大”的特征。由此可见，细网格模拟未能准确捕捉介尺度颗粒团对曳力的影响，因而很难准确预测稠密非均匀气固流动。



(a) 不同过滤尺寸下的亚网格曳力系数^[40]



(b) 直接数值模拟、均匀模型和 O-S 模型结果

图 3 曳力系数随当地颗粒浓度的变化 ($d_p=100 \mu\text{m}$, $\rho_g=1.205 \text{ kg/m}^3$, $\mu_g=1.81 \times 10^{-5} \text{ Pa}\cdot\text{s}$, $u_r=1.0 \text{ m/s}$; O-S: $G_s=98 \text{ kg/m}^2\text{s}$)

1.3 极值型

多尺度最小能量原理(Energy Minimum Multi-Scale, EMMS)是极值型曳力模型的代

表。EMMS 模型以局部非均匀结构为核心，将整个流态化系统分解成为颗粒密相、颗粒稀相

以及相互作用相三个子系统，如图 4 所示。通过微观（颗粒层次）、介观（颗粒团聚物层次）和宏观（反应器层次）三个尺度上的作用分解，建立各相的质量和动量守恒方程。再借助于能量分析，颗粒总是趋向保持最小势能，而流体总是选择阻力最小的路径，两种机制相互协调得到稀、密相共存的稳定性条件——悬浮输送能最小，从而实现方程的封闭（表 1）。

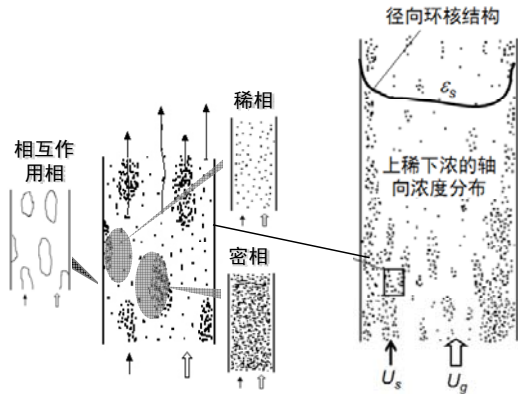


图 4 气固两相流动的整体不均匀性和局部不均匀性

对 EMMS 模型的验证主要从三个方面展开：一是基于物理机制，采用拟颗粒方法^[50,51] (pseudo particle model, PPM)和 LBM^[52] (Lattice Boltzmann Simulations, LBM)证实了最小悬浮输送能这一稳定性条件的物理存在。如图 5 所示，在宏尺度横截面上存在最小悬浮输送能，而微尺度和介尺度上的悬浮输送能不断波动，不存在最小值。因此，在研究过程中应对整个流动横截面进行最小能量分析，而非局部网格。二是将 EMMS 理论扩展到其他流态化系统中，发现单相湍流、气-液流动、颗粒流等系统与气固流态化系统一样，其稳定性条件也都是几个不同控制机制的相互作用和协调^[53-56]。三是实现工业应用，EMMS 模型不仅可以直接用于预测流化床上升管内的宏观流动，而且能与 CFD 双流体方法耦合计算流化床内的动态流动特性，为实际的过程工艺操作和存在的问题提供指导和解决方案^[57-59]。

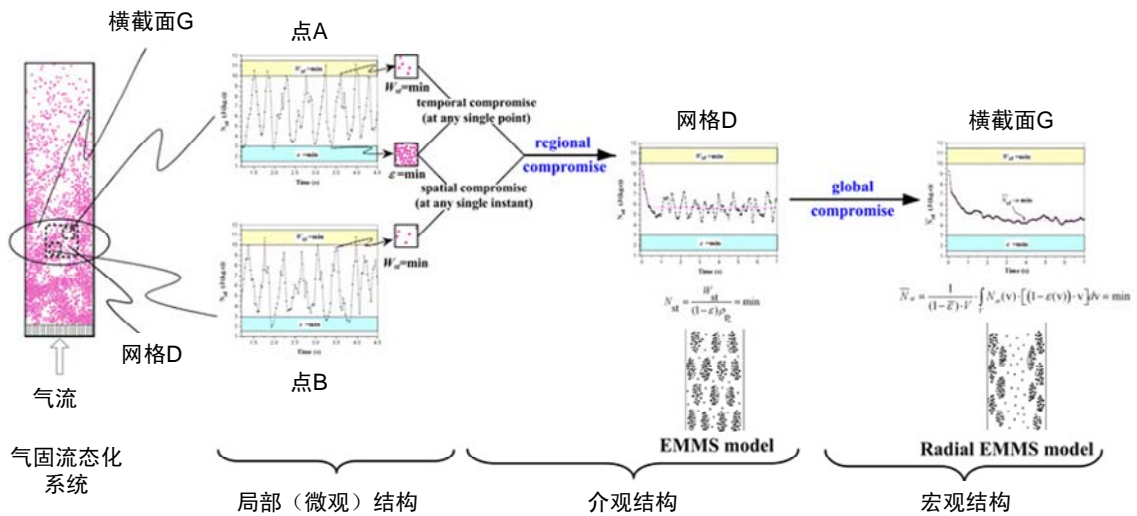


图 5 EMMS 模型在不同尺度上的稳定性分析^[50]

表 1 EMMS 模型基本方程

基本方程		
密相颗粒受力平衡方程	$f n_c F_c + n_i F_i = f (1 - \varepsilon_{gc}) (\rho_s - \rho_g) g$	(T 1)
稀相颗粒受力平衡方程	$(1 - f) n_f F_f = (1 - f) (1 - \varepsilon_{gf}) (\rho_s - \rho_g) g$	(T 2)
压降平衡式	$(\Delta p / \Delta l)_f + (\Delta p / \Delta l)_i / (1 - f) = (\Delta p / \Delta l)_c$ $(\Delta p / \Delta l)_k = n_k F_k, \quad k = c, f, i$	(T 3)
气相质量守恒方程	$U_g = U_{gf} (1 - f) + U_{gc} f$	(T 4)

$$\text{颗粒相质量守恒方程} \quad U_s = U_{sf}(1-f) + U_{sc}f \quad (\text{T } 5)$$

$$\text{平均空隙率} \quad \varepsilon_g = f\varepsilon_{gc} + (1-f)\varepsilon_{gf} \quad (\text{T } 6)$$

$$\text{颗粒团直径} \quad d_{cl} = \frac{\left[\frac{U_s}{1-\varepsilon_{\max}} - \left(U_{mf} + \frac{\varepsilon_{mf}U_s}{1-\varepsilon_{mf}} \right) \right] g}{N_{st} \frac{\rho_s}{\rho_s - \rho_g} - \left(U_{mf} + \frac{\varepsilon_{mf}U_s}{1-\varepsilon_{mf}} \right) g} d_p \quad (\text{T } 7)$$

$$\text{滑移速度} \quad u_r = \frac{U_g}{\varepsilon} - \frac{U_s}{1-\varepsilon} \quad (\text{T } 8)$$

$$\text{悬浮输送能} \quad N_{st} \rightarrow \min$$

$$N_{st} = \frac{\rho_s - \rho_g}{\rho_s} g \left[U_g - \frac{\varepsilon_{gf} - \varepsilon_{gc}}{1-\varepsilon_g} f^2 (1-f) U_{gf} \right] \quad (\text{T } 9)$$

$$\text{曳力系数} \quad \beta = \frac{\varepsilon_g}{u_r} F_d = \frac{\varepsilon_g}{u_r} \left[fn_c F_c + (1-f)n_f F_f + n_i F_i \right] \quad (\text{T } 10)$$

2 EMMS 曳力模型的发展

2.1 完善基本方程阶段

最初的 EMMS 模型讨论的是平衡的状态下的整体气-固流动过程^[48,49]。为了将 EMMS 模型用于实际的非均匀气固流动过程，文献^[60]引入颗粒加速度，并实现了与计算流体力学 CFD 在网格层面的耦合，成功预测了流化床提升管内的颗粒浓度分布和颗粒通量等流动变量。文献^[61]进一步考虑到稀、密相内部颗粒加速度的区别，建立了更加准确的 EMMS-Matrix 模型。后续研究^[57,62,63]表明该模型不仅能准确预测非均匀流动特征，而且具有网格无关性等优点。但是该模型忽略了稀相气体对密相颗粒的作用力，为此本课题组进一步完善了密相颗粒的受力平衡，发展出更加准确的 QL-EMMS 模型^[64,65]。改进后的稀、密相颗粒受力方程分别为：

$$(1-f)n_f F_f = (1-f)(1-\varepsilon_{gf})(\rho_s - \rho_g)(a_f + g) \quad (1)$$

$$fn_c F_c + n_i F_i = f(1-\varepsilon_{gc})(\rho_s - \rho_g)(a_c + g) \quad (2)$$

式 1 和 2 引进了新的状态参数，密相颗粒加速度 a_c 和稀相颗粒加速度 a_f 。其余方程与 EMMS 基本方程(表 1)相同。QL-EMMS 方程分两步法进行求解(图 6)：第一步对 CFB 操作条件(U_g, G_s)进行完整的 EMMS 分析，得到颗粒团内颗粒浓度 ε_{sc} 和颗粒团直径 d_{cl} 与局部平均颗粒浓度 ε_s 的关系 $\varepsilon_{sc}(\varepsilon_s)$ 和 $d_{cl}(\varepsilon_s)$ 。第二步对 CFD 计算给出的局部流动参数(U_g, G_s, ε_s)进行 EMMS 分析，由 $d_{cl}(\varepsilon_s)$ 取代方程(T7)， $\varepsilon_{sc}(\varepsilon_s)$ 作

为补充方程，解得局部状态变量后，用式(T10)求局部非均匀曳力系数 β 。

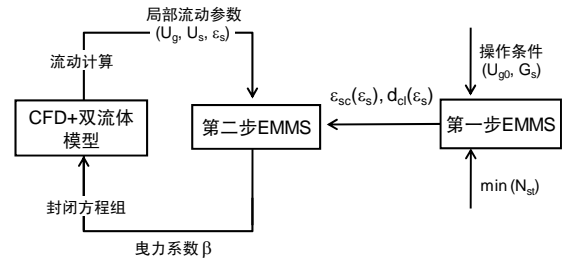


图 6 两步 EMMS 分析求解曳力

CFD 耦合 QL-EMMS 模型计算流化床上升管，相比传统的均匀曳力模型，模拟准确性显著提高，而且能成功预测流态化过程中的“噎塞”(choking)现象^[64]，如图 7 所示。准确描述“噎塞”现象对工业流态化系统的优化设计和稳定运行起到至关重要的作用，以往不考虑颗粒团的连续性方程模拟，始终未能捕捉到这一现象。这也再次说明介尺度颗粒团的重要性，并验证了 EMMS 模型的可靠性。

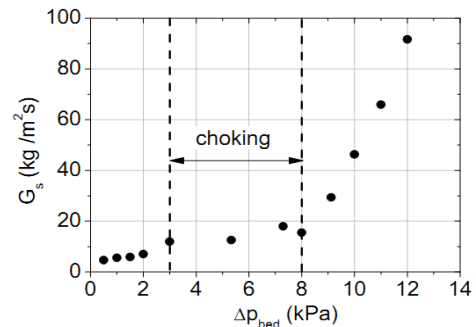


图 7 QL-EMMS 模型模拟流型转换 ($U_g=1.52$ m/s)

在 CFD 框架下检验 EMMS 曳力模型，掩盖了曳力模型本身的特征^[66]。然而到目前为止，还没有文献在 EMMS 框架下检验第一步求出的颗粒团参数和第二步得到的曳力系数的准确性。

2.2 改进颗粒团参数阶段

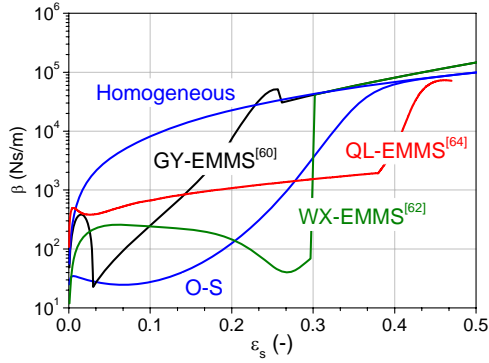


图 8 不同曳力模型的对比 ($d_p=100 \mu\text{m}$, $\rho_g=1.205 \text{ kg/m}^3$, $\mu_g=1.81 \times 10^{-5} \text{ Pa}\cdot\text{s}$, $u_r=1.0 \text{ m/s}$; O-S: $G_s=98 \text{ kg/m}^2\text{s}$; EMMS: $U_g=1.52 \text{ m/s}$, $G_s=98 \text{ kg/m}^2\text{s}$)

将均匀曳力系数、基于实验的曳力系数 O-S 以及几种常见的 EMMS 曳力模型作于图 8，可以发现 EMMS 模型均能够反映非均匀结构导致的曳力下降。相比另外两种 EMMS 模型结果，QL-EMMS 曳力系数更连续光滑且不存在没有物理意义的突变。但相比基于实验的 O-S 结果，QL-EMMS 曳力下降幅度偏小，且不具备 O-S 曲线先减小后增大的连续变化特征。因此，有必要对 QL-EMMS 模型进行详细的分析验证，以保证模型精度。

众所周知，颗粒团聚是导致气固流动的非均匀性分布的关键。QL-EMMS 模型第一步计算得到的颗粒团特性参数必将直接影响第二步计算的曳力系数。因此，本文以颗粒团为核心，提出从三个尺度研究 EMMS 曳力模型：介观尺度——颗粒团参数(密度、尺寸、数量)；网格尺度——曳力系数；宏观尺度——CFD 计算结果。可以发现，每个尺度上的准确性都以前一个尺度上的准确性为前提。

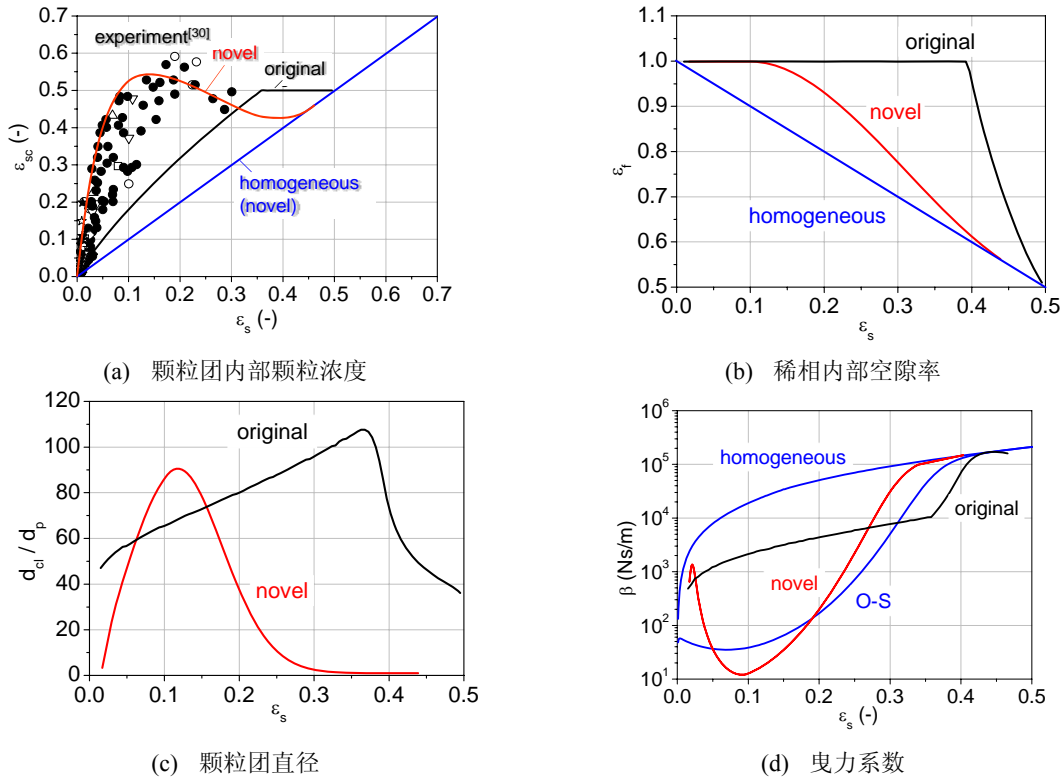


图 9 对比修正前后的 EMMS 模型结果 ($\rho_g=1.205 \text{ kg/m}^3$, $\rho_p=930 \text{ kg/m}^3$, $d_p=54 \mu\text{m}$, $U_g=1.52 \text{ m/s}$, $G_s=14.3 \text{ kg/m}^2\text{s}$)

首先对 QL-EMMS 曳力模型进行敏感性分析，研究颗粒团参数对曳力函数的影响，找出最敏感的颗粒团参数——颗粒团密度或内部颗粒浓度。然后重点研究该参数，以物理分析与

实验结果为依据，提出了新的符合物理判断的分布曲线。如图 9a 所示，首先本文提出代表均匀状态的颗粒团内部浓度是一条斜率为 1 的直线。这是因为，均匀状态不存在颗粒团，所谓

的颗粒团内部浓度即当地颗粒浓度。其次，在极其稀疏、稠密的两端，颗粒团逐渐消失，因此颗粒团内部浓度趋于均匀直线。此外，由于当地颗粒浓度 0.1 对应流化床内径向环-核交界，颗粒团聚最剧烈，颗粒团内部浓度在此达到最大。如图 9a 所示，据此分析得到的新曲线与实验点吻合较好。进一步研究其余颗粒团参数的相互影响，修正稀相内部空隙率和颗粒团直径公式，得到相应的曳力系数，分别如图 9b-d 所示。相比原来的曳力系数，新曳力系数显著下降，并与 O-S 曲线吻合较好，随着当地颗粒浓度的增大，先逐渐减小直至在当地颗粒浓度 0.1 处达到最小，之后增大并趋于均匀。

3 结论

本文综述了稠密非均匀气-固流态化系统中描述气-固相间相互作用曳力的研究，讨论了各研究方法的优劣，指出基于最小能量多尺度原理 EMMS 的曳力模型的可靠性。本课题组经过多年持续不断的研究，通过不断基本守恒方程，改进关键参数，发展了高精度的 EMMS 曳力模型。

后续研究目标是实现 EMMS 曳力模型的普适性。现有的 EMMS 曳力模型对操作条件不敏感，无法准确描述不同工况下的曳力系数变化情况。关键原因在于颗粒团密度几乎不受操作条件影响。然而，已有实验数据表明颗粒团密度在一定操作范围内呈现出明显的变化幅度。因此，后续研究将基于实验数据，归纳颗粒团密度随工况的变化关系，引入 EMMS 模型，实现模型的工况适应性。

参考文献

- Ding J, Gidaspo D. A bubbling fluidization model using kinetic theory of granular flow, *AICHE Journal*, 1990, 36: 523~538.
- Wen CY, Yu YH. *Mechanics of fluidization*. *AICHE Symp.*, 1966, Ser.62: 100~111.
- Ergun S. Fluid flow through packed columns. *Chemical Engineering Progress*, 1952, 48(1):89~94.
- Gidaspo D. Hydrodynamics of fluidization and heat transfer: supercomputer modeling. *Appl. Mech. Rev.*, 1986, 1(39):1~22.
- Di Felice R. The voidage function for fluid particle interaction systems. *International Journal of Multiphase Flow*, 1994, 20(1):153~159.
- Syamlal M, O'Brien TJ. Simulation of granular layer inversion in liquid fluidized beds. *International Journal of Multiphase Flow*, 1988, 14(5): 473~481.
- Li JH, Mooson K. Particle-fluid two-phase flow, the energy minimization multi-scale method. Beijing: Metallurgical Industry Press, 1994.
- Sundaresan S. Modeling the hydrodynamics of multiphase flow reactors: Current status and challenges. *AICHE Journal*, 2000, 46(6): 1102~1105.
- Wang W, Li TC. Simulation of the clustering phenomenon in a fast fluidized bed: The importance of drag correlation. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 2004, 12(3): 335~341.
- Benyahia S. On the effect of sub-grid drag closures. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2010, 49(11): 5122~5131.
- Benyahia S, Sundaresan S. Do we need sub-grid scale corrections for both continuum and discrete gas-particle flow models. *Powder Technology*, 2012, 220(SI): 2~6.
- Andrews MJ, O'Rourke PJ. The multiphase particle-in-cell (MP-PIC) method for dense particulate flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 1996, 22(2):379~402.
- Snider DM. An incompressible three-dimensional multiphase particle-in-cell model for dense particle flows. *Journal of Computational Physics*, 2001,170(2):523~549.
- Snider D.M. Three fundamental granular flow experiments and CPFD predictions. *Powder Technology*, 2007 176: 36~46.
- Chen C, Werther J, Heinrich S, Qi HY, Hartge EU. CPFD simulation of circulating fluidized bed risers. *Powder Technology*, In Press.
- Li F, Song F, Benyahia S, Wang W, Li JH. MP-PIC simulation of CFB riser with EMMS-based drag model. *Chemical Engineering Science*, 2012, 82: 104~113.
- Zhang DZ, Vanderheyden WB. The effects of mesoscopic structures on the macroscopic momentum equations for two-phase flows. *International Journal of Multiphase Flow* 2002, 28: 805~822.
- Ye M, Wang J, Van der Hoef M A, Kuipers, JAM. Two-fluid modeling of Geldart A particles in gas-fluidized beds. *Particuology* 2008, 6, 540~548.
- Das Sharma S., Pugsley T., Delatour, R. Three-dimensional CFD model of the deaeration rate of FCC particles. *AICHE Journal* 2006, 52: 2391~2400.
- McKeen T, Pugsley T. Simulation and experimental validation of a freely bubbling bed of FCC catalyst. *Powder Technology* 2003, 129: 39~152.
- O'Brien TJ, Syamlal M. Particle cluster effects in the numerical simulation of a circulating fluidized bed. In Preprint Volume for CFB-IV, Avidan, A. A. New York: *AICHE*, 1993, 430~435.
- Wang W, Li Y. Simulation of the clustering phenomenon in a fast fluidized bed: The importance of drag correlation. *Chinese Journal of Chemical Engineering* 2004, 12: 335~341.

- 23 Cruz E, Steward FR, Pugsley T. New closure models for CFD modeling of high-density circulating fluidized beds. *Powder Technology*, 2006, 169: 115-122.
- 24 Arastoopour H., Gidaspow D. Analysis of IGT pneumatic conveying data and fast fluidization using a thermo-hydrodynamic model. *Powder Technology*, 1979, 22: 77-87.
- 25 Gu WK. Diameters of catalyst clusters in FCC. *AIChE Symp. Ser.* 1999, 95 (321): 42~47.
- 26 Gu WK, Chen JC. A model for solid concentration in circulating fluidized beds. In *Fluidization IX*; Fan, L. S., Knowlton, T. M., Eds.; Engineering Foundation: Durango, CO, 1998, 501~508.
- 27 Gao J, Chang J, Xu C, Lan X, Yang Y. CFD simulation of gas solid flow in FCC strippers. *Chemical Engineering Science* 2008, 63:1827~1841.
- 28 Manyele SV, Parssinen, JH, Zhu JX. Characterizing particle aggregates in a high-density and high-flux CFB riser. *Chemical Engineering Journal*, 2002, 88:151~161.
- 29 Zhang Y, Lu C. Numerical study of the pressure fluctuation in a bubbling fluidized bed of FCC catalyst, APT 2007, 3rd Asian Particle Technology Symposium, Beijing, China, 2007, 392~400.
- 30 Harris A T, Davidson JF, Thorpe RB. The prediction of particle cluster properties in the near wall region of a vertical riser. *Powder Technology*, 2002, 127:128~143.
- 31 Zou B, Li H, Xia Y, Kwak M. Cluster structure in a circulating fluidized bed. *Powder Technology* 1994, 78: 173~178.
- 32 漆小波, 曾涛, 黄卫星. 循环流化床提升管中团聚物颗粒浓度的实验研究. *四川大学学报(工程科学版)*, 2005, 5: 46~50.
- 33 Guenther C, Breault R. Wavelet analysis to characterize cluster dynamics in a circulating fluidized bed [J]. *Powder Technology*, 2007, 173(3): 163~173.
- 34 Yang TY, Leu LP. Multiresolution Analysis on Identification and Dynamics of Clusters in a Circulating Fluidized Bed. *AIChE Journal*, 2009, 55(3): 612~629.
- 35 Wang J, Ge W, Li, JH. Eulerian simulation of heterogeneous gas-solid flows in CFB risers: EMMS-based sub-grid scale model with a revised cluster description. *Chemical Engineering Science* 2008, 63, 1553~1571.
- 36 Ge W, Wang W, Dong W, Wang J, Lu B, Xiong Q, Li JH. Meso-scale structure: A challenge of computational fluid dynamics for circulating fluidized bed risers. In *The 9th International Conference on Circulating Fluidized Beds*: TuTech Innovation GmbH: Hamburg, Germany, May 13 16, 2008, 19~37.
- 37 Ye M, van der Hoef MA, Kuipers, JAM. The effects of particle and gas properties on the fluidization of Geldart A particles. *Chemical Engineering Science* 2005, 60, 4567~4580.
- 38 Di Renzo A, Di Maio FP. Homogeneous and bubbling fluidization regimes in DEM CFD simulations: Hydrodynamic stability of gas and liquid fluidized beds. *Chemical Engineering Science*, 2007, 62, 116~130.
- 39 Agrawal K, Loezos PN, Syamlal M, Sundaresan S. The role of meso-scale structures in rapid gas-solid flows. *J. Fluid Mech.*, 2001, 445: 151~185.
- 40 Yesim Igci, Arthur T. Andrews IV, Sundaresan S. Filtered two-fluid models for fluidized gas-particle suspensions. *AIChE Journal*, 2008, 54(6): 1431-1448.
- 41 Yesim Igci, Sundaresan S. Constitutive models for filtered two-fluid models of fluidized gas-particle flows. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2011, 50: 13190~13201.
- 42 Arthur T, Andrews IV, Loezos PN, Sundaresan S. Coarse-grid simulation of gas-particle flows in vertical risers. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2005, 44: 6022~6037.
- 43 Yesim Igci, Sundaresan S. Verification of filtered two-fluid models for gas-particle flows in risers. *AIChE Journal*, 2011, 57(10): 2691~2707.
- 44 Yesim Igci, Sreekanth P, Sofiane B, Sundaresan S. Validation studies on filtered model equations for gas-particle flows in Risers. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2012, 51: 2094~2103.
- 45 Wang W, Lu B, Zhang N, Shi Z, Li J. A review of multiscale CFD for gas-solid CFB modeling. *International Journal of Multiphase Flow*, 2010, 36: 109~118.
- 46 Lu B, Wang W, Li J. Searching for a mesh-independent sub-grid model for CFD simulation of gas solid riser flows. *Chemical Engineering Science*, 2009, 64: 3437~3447.
- 47 Wang X, Liu K, You CF. Drag force model corrections based on non-uniform particle distributions in multi-particle systems. *Powder Technology*, 2011, 209: 112~118.
- 48 李静海, 欧阳洁, 高士秋. 颗粒流体复杂系统的多尺度模拟. 北京: 科学出版社, 2005.
- 49 Ge W, Wang W, Yang N. Meso-scale oriented simulation towards virtual process engineering (VPE)-The EMMS Paradigm. *Chemical Engineering Science*, 2011, 66(19SI): 4426~4458.
- 50 Li JH, Zhang J, Ge W, Liu X. Multi-scale methodology for complex systems. *Chemical Engineering Science*, 2004, 59: 1687~1700.
- 51 Zhang Y, Ge W, Li JH. Simulation of heterogeneous structures and analysis of energy consumption in particle-fluid systems with pseudo-particle modeling. *Chemical Engineering Science*, 2005, 60: 3091~3099.
- 52 Zhang Y., Ge W., Wang X.W, et al. Validation of EMMS-based drag model using lattice Boltzmann simulations on GPUs. *Particuology*, 2011, 9(4SI): 365~373.
- 53 Li J.H., Kwak M. Exploring complex systems in chemical engineering- the multi-scale methodology. *Chemical Engineering Science*, 2003, 58(3-6): 521~535.
- 54 Li J.H., Ge W., Zhang J., et al. Multi-scale compromise and multi-level correlation in complex systems. *Chemical Engineering Research & Design*, 2005, 83(A6): 574~582.
- 55 Ge W, Chen F.G., Gao J., et al. Analytical multi-scale

- method for multi-phase complex systems in process engineering-Bridging reductionism and holism. *Chemical Engineering Science*, 2007, 62(13): 3346~3377.
- 56 Li J.H., Ge W., Wang W., et al. Focusing on the meso-scales of multi-scale phenomena-In search for a new paradigm in chemical engineering. *Particology*, 2010, 8(6SI): 634~639.
- 57 Lu B, Wang W, Li J H, et al. Multi-scale CFD simulation of gas-solid flow in MIP reactors with a structure-dependent drag model. *Chemical Engineering Science*, 2007, 62(18-20SI): 5487~5494.
- 58 Hartge E.U., Ratschow L., Wischniewski R., et al. CFD-simulation of a circulating fluidized bed riser. *Particology*, 2009, 7(4): 283~296.
- 59 Armstrong L.M., Luo K.H., Gu S. Two-dimensional and three-dimensional computational studies of hydrodynamics in the transition from bubbling to circulating fluidised bed. *Chemical Engineering Journal*, 2010, 160(1): 239~248.
- 60 Yang N., Wang W., Ge W., Li J.H. CFD simulation of concurrent-up gas-solid flow in circulating fluidized beds with structure-dependent drag coefficient. *Chemical Engineering Journal*, 2003, 9 (1-3):71~80.
- 61 Wang W., Li J.H. Simulation of gas-solid two-phase flow by a multi-scale CFD approach - Extension of the EMMS model to the sub-grid level. *Chemical Engineering Science*, 2007, 62(1-2):208~231.
- 62 Wang W., Lu B., Li J.H. Choking and flow regime transitions: Simulation by a multi-scale CFD approach. *Chemical Engineering Science*, 2007, 62 (3):814~819.
- 63 王雪瑶, 吴学智, 姜凡, 徐详, 廖良良, 樊保国, 肖云汉. 高密度 CFB提升管内气固两相曳力修正模型及冷态实验验证. *工程热物理学报*, 2009, 30(2): 237~240.
- 64 李飞, 陈程, 王锦生, 等. 稠密气固两相QL-EMMS曳力模型及改进. *工程热物理学报*, 2011(1): 75~79.
- 65 Chen C, Li F, Qi H Y. Modeling of the flue gas desulfurization in a CFB riser using the Eulerian approach with heterogeneous drag coefficient. *Chemical Engineering Science*, 2012, 69(1):659~668.
- 66 Naren P.R., Lali A.M., Ranade V.V. Evaluating EMMS model for simulating high solid flux risers. *Chemical Engineering Research & Design*, 2007, 85(A8):1188~1202.

RESEARCH ON THE KEY SCIENTIFIC PROBLEM IN THE EULERIAN MODLEING OF LARGE-SCLAE MULTI-PHASE FLOWS ——DRAG MODEL

QI Haiying CHEN Cheng

(Key Laboratory for Thermal Science and Power Engineering of Ministry of Education, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

Abstract Eulerian two-fluid model with kinetic theory of granular flow develops quickly for the calculation of large-scale multi-phase flows and reactions. Drag model which describes the interphase interactions is critical to the calculation accuracy. This paper reviewed all the methods to develop drag models for dense heterogeneous gas-solid flows and discussed their merits and defects. Based on the energy analysis of multi-phase flows, energy minimum multi-scale (EMMS) drag model was established. The core of EMMS model is establishing the conservation equations of mechanical energy and solving such equations with the stability condition that the energy for particle suspension and transport reaches minimum. This paper discussed the development process of EMMS model and pointed out its substantial defects in describing cluster characteristics. New descriptions of cluster characteristics were proposed and verified with experimental data. The predicted drag with the new cluster descriptions agrees well with experimental results indicating the effectiveness of the model revision. Finally, this paper expounded the EMMS model defects in universal application and suggested the developing directions.

Key words multi-phase flow, numerical simulation, drag model, EMMS, cluster