

用扩散流模型数值模拟后台阶湍流颗粒输运*

尚智 杨瑞昌

Kenji Fukuda

清华大学, 煤的清洁燃烧技术国家重点实验室, 北京 100084

Graduate School of Engineering, Kyushu University, Fukuoka, 812-8581, Japan

摘要 建立了一个二维气固两相湍流扩散流数学模型, 并且用此模型数值模拟了气固两相绕流后台阶的湍流流动. 预测分析了台阶后固体颗粒的湍流输运速度, 并将预测结果与 Laslandes 等的用两种两流体模型($k-\epsilon-A_p$, $k-\epsilon-k_p$)的数值预测结果及实验结果进行了对比, 结果表明扩散流数学模型可以用于描述气固两相流动. 它的预测效果不但与目前实用的两流体模型相当, 而且还可以正确地预测固体颗粒的横向速度, 在这一点上还超过了两流体模型的预测效果.

关键词 气固两相流 湍流数值模拟 扩散流模型 后台阶 颗粒输运

在两相流动研究的初期, Launder 等建立了单流体模型^[1]; 后来 Crowe 等建立和完善了颗粒轨道模型^[2,3]; 稍后 Soo 等用漂移速度的概念建立了一个描述气固两相流动的模型^[4]. 目前多流体模型特别是两流体模型应用最为广泛, 两流体模型视固相为一渗透在真实流体中的拟流体, 因此用两流体模型描述气固两相流时需要一套描述气相运动的微分方程组和一套描述固相运动的微分方程组, 这样就使得在用两流体模型模拟气固两相流动时的求解过程变得非常复杂, 增加了编程和计算的难度, 而且有关两流体模型的封闭性问题的研究目前还不够充分.

本文针对两流体模型的这些困难之处提出了一个描述气固两相流动的扩散流模型(diffusion flux model, DFM), 该模型是在两流体模型的基础上, 将气固两相的流动看作气固两相混合物的流动, 利用固相在混合物中的扩散来描述气固两相之间的差别. 通过与两种两流体模型($k-\epsilon-A_p$, $k-\epsilon-k_p$)的数值预测结果, 以及实验结果进行对比, 表明该模型可以用于描述气固两相流动.

1 气固两相扩散流数学模型

1.1 基本模型的建立

气固两相扩散流模型是将气固两相流动看作一

种气固两相混合物的流动, 它是在两流体模型的基础之上, 将两流体中的气相与固相的连续方程、动量方程相加形成的一套类似单相流动的控制微分方程组. 在湍流流动时, $k-\epsilon$ 方程与单相流动时的完全一致.

$$\partial \rho_m / \partial t + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{U}_m) = 0, \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \partial (\rho_m \mathbf{U}_m) / \partial t + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{U}_m \mathbf{U}_m) = \\ - \nabla p + \rho_m \mathbf{g} + \nabla \cdot [(\mu_m + \mu_t) \nabla \mathbf{U}_m] - \\ \nabla \cdot \left[\frac{\alpha_s \rho_s \rho_m}{(1 - \alpha_s) \rho_g} \mathbf{U}_{sm} \mathbf{U}_{sm} \right], \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \partial (\rho_m k) / \partial t + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{U}_m k) = \\ \nabla \cdot \left[\left(\mu_m + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + G - \rho_m \epsilon, \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \partial (\rho_m \epsilon) / \partial t + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{U}_m \epsilon) = \\ \nabla \cdot \left[\left(\mu_m + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \nabla \epsilon \right] + \frac{\epsilon}{k} (C_1 G - C_2 \rho_m \epsilon). \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \partial (\alpha_s \rho_s) / \partial t + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \mathbf{U}_m) = \\ \nabla \cdot \left(\frac{\rho_s \nu_t}{\sigma_{\alpha_s}} \nabla \alpha_s \right) - \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \mathbf{U}_{sm}). \end{aligned} \quad (5)$$

式中 $\rho_m = \alpha_s \rho_s + (1 - \alpha_s) \rho_g$ 代表气固两相混合物在单位容积内的质心处的质量; $\mu_m = \alpha_s \mu_s + (1 - \alpha_s) \mu_g$; $\rho_m \mathbf{U}_m = \alpha_s \rho_s \mathbf{U}_s + (1 - \alpha_s) \rho_g \mathbf{U}_g$, 由此式得到速度为气固两相混合物在单位容积内的质心

2002-09-26 收稿, 2002-11-04 收修改稿

* 国家重点基础研究发展规划项目(G19990222)资助

E-mail: shangzhi@tsinghua.org.cn

处的速度; $U_{sm} = U_s - U_m$; (3)和(4)式中的湍流产生项 G , 在两维流动时表示为: $G = \mu_t \left\{ 2 \left[\left(\frac{\partial U_x}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial U_y}{\partial y} \right)^2 \right] + \left(\frac{\partial U_x}{\partial y} + \frac{\partial U_y}{\partial x} \right)^2 \right\}$. 在(1)~(4)式中 ρ 表示密度, U 是速度矢量, α 是容积份额, g 是重力加速度矢量, U_{sm} 表示固体颗粒在混合物内的扩散速度矢量, μ 是流体动力学粘性系数, μ_t, ν_t 湍流粘性系数, $\sigma_\alpha, \sigma_k, \sigma_\epsilon, C_1, C_2$ 是湍流常数. 下标 m 代表混合物; s 代表固体颗粒; g 代表气体. 固相的粘性系数 μ_s 可以用文献[5]的方法求取.

固体颗粒在混合物内的扩散速度是气固两相扩散流模型的关键所在, 推导如下:

1.2 扩散速度 U_{sm} 的推导

将固相和气固两相混合物的动量方程写成如下形式:

$$\rho_s \frac{dU_s}{dt} = -\nabla p + \rho_s g + f_s, \quad (6)$$

$$\rho_m \frac{dU_m}{dt} = -\nabla p + \rho_m g + f_m. \quad (7)$$

其中 f_s 是单位固体容积份额固相所受到的作用力(其实就是两流体模型中固相动量方程中的应力项); f_m 是固相与连续相的速度差异所形成的应力总和(其实就是混合物动量方程中的应力项), $f_m = \nabla \cdot [(\mu_m + \mu_t) \nabla U_m] - \nabla \cdot \sum \alpha_s \rho_s U_{sm} U_{sm}$.

(6)式减去(7)式得:

$$\rho_s \frac{\partial U_{sm}}{\partial t} = \rho_{sm} g'_{sm} + f_s, \quad (8)$$

其中 $g'_{sm} = g - dU_m/dt - M_s/\rho_{sm}$, $M_s = f_m + \rho_s (U_{sm} \cdot \nabla U_{sm} + U_{sm} \cdot \nabla U_m + U_m \cdot \nabla U_{sm})$; $\rho_{sm} = \rho_s - \rho_m$. (8)式的左边代表了固相在混合物中的运动, 右边第一项可以看作是由于各种力相互作用而产生的合加速度项, 这个加速度也可以认为是经过修正的重力加速度, 它包含了重力、压力梯度、Reynolds 应力和气固两相的相互作用.

在多流体模型中经常用下述公式来描述无相变时离散相的受力情况, 此时(6)式中固体颗粒的受力 f_s [6], 可表示为: $\alpha_s f_s = -A_{sg} B_{sg} U_{sg}$, 其中 A_{sg} 是气固两相界面面积; B_{sg} 是一气固两相相互作用系数. 进一步定义 $A_{sg} B_{sg} = C_{sg}$, 那么(8)式可表示

为, $\frac{\partial U_{sm}}{\partial t} + \frac{U_{sg}}{T} = \frac{\rho_{sm} g'_{sm}}{\rho_s}$, 其中 $T = \frac{\alpha_s \rho_s}{C_{sg}}$ 具有时间的意义, 其实它就是固体颗粒的松弛时间[6].

一般可以认为在固相较稀的气固两相流动时, 固体颗粒的流动情况类似于单个颗粒的运动. 因此固体颗粒的松弛时间可定义为 $T = \frac{\rho_s |U_{sgT0}|}{\rho_{sm} |g'|}$, U_{sgT0} 是颗粒终端速度[6]. 进一步可定义在修正的重力加速度 g'_{sm} 作用下的固体颗粒的松弛时间 $T' = \frac{\rho_s |U_{sgT}|}{\rho_{sm} |g'_{sm}|}$, 其中 U_{sgT} 表示在加速度 g'_{sm} 作用下的颗粒终端速度. 对于气固两相固相为稀相流动的情况, 可以认为 $T \approx T'$, 这样固体颗粒的扩散速度微分方程可以写为下面的形式

$$\frac{\partial U_{sm}}{\partial t} + \frac{U_{sg} - U_{sgT}}{T} = 0. \quad (9)$$

利用气固两相混合物在单位容积内的质心处的各种参数的定义关系式, 经推导得到气固两相速度差的计算关系式如下

$$U_{sg} = \frac{\rho_m U_{sm}}{(1 - \alpha_s) \rho_g}, \quad (10)$$

将(10)式代入(9)式得

$$\frac{\partial U_{sm}}{\partial t} + \frac{\rho_m U_{sm} - (1 - \alpha_s) \rho_g U_{sgT}}{(1 - \alpha_s) \rho_g T} = 0. \quad (11)$$

这样, 固相的扩散速度 U_{sm} 就可以由(11)式求解得出, 在实际计算中, 不必知道 C_{sg} , 它已包含在松弛时间 T 当中.

1.3 颗粒终端速度的建立

在均匀重力场 g 作用下的固体颗粒终端速度[7]为 $U_{sgT0} = \left[\frac{4d_s (\rho_s - \rho_g) g}{3\rho_g C_D} \right]^{0.5}$, 其中 d_s 为固体颗粒的粒径; $C_D = \begin{cases} 0.44 & \text{当 } Re_s > 1000 \\ \frac{24}{Re_s} (1 + 0.15 Re_s^{0.687}) & \text{当 } Re_s \leq 1000 \end{cases}$ 为拽力系数; $Re_s = \frac{\rho_g d_s |U_s - U_g|}{\mu_g}$ 为固体颗粒 Reynolds 数.

从 U_{sgT0} 的计算式可以看到均匀重力场 g 作用下的固体颗粒终端速度可用重力加速度的函数 $F(g)$ 来表示, 仿此, 经修正的重力加速度 g'_{sm} 作用

后, 颗粒终端速度也用同样的函数形式来表达, 即 $F(\mathbf{g}'_{sm})$, 表示为:
$$U_{sgT} = \left[\frac{4d_s (\rho_s - \rho_g) |\mathbf{g}'_{sm}|}{3\rho_g C_D} \right]^{0.5} \frac{|\mathbf{g}'_{sm}|}{|\mathbf{g}'_{sm}|}$$

这样联立(1)~(5)式并利用 T 的定义式、(11)式和 U_{sgT} 的定义式, 再加上相应的辅助方程, 可以形成一套适合于定常和非定常流动情况的既完整又封闭的气固两相扩散流湍流数学模型. 在利用这套封闭的扩散流湍流数学模型求解得到气固两相混合物的流动速度和固相容积份额后, 联立气固两相混合物在单位容积内的质心处的质量和速度定义式以及(10)式求解, 就可求得固相和气相的分速度, 这样整个气固流场的流动就可以得到完全的模拟.

2 数值模拟及结果比较

2.1 模拟对象

数值模拟的对象是 Laslandes 等的实验及数值模拟的对象^[8], 如图 1 所示. 此实验的气固两相在入口中心线上的速度 U_{ref} 为 10.5 m/s, 质量装载率为 0.1~0.2, 所使用的固体是颗粒直径为 70 μm 的细铜粒, 密度 $\rho_s = 8800 \text{ kg/m}^3$, 气体密度 $\rho_g = 1.2 \text{ kg/m}^3$. 在获得实验数据后, Laslandes 等还用两种两流体模型 ($k-\epsilon-A_p$, $k-\epsilon-k_p$) 对此流动进行了数值模拟. 本文也将对此流动用气固两相扩散流模型进行数值模拟, 并将模拟的流动结果与 Laslandes 等的实验及数值模拟结果进行对比.

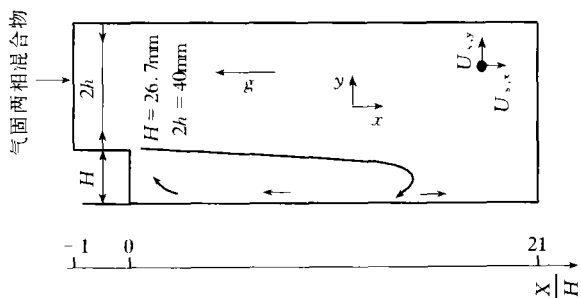


图 1 实验及计算区域示意图

2.2 数值模拟方法

数值模拟的计算区域选定 ($x \times y = 10H \times 2.5H$) 的矩形 ($H = 26.7 \text{ mm}$), 在此矩形内划分了 70×20 的均分网格. 在计算时湍流常数的选取, 如表 1 所示. 流动边界上的湍流粘性系数用常规的高 Reynolds 数壁面函数法求解, 在区域内部的湍流粘

性系数为: $\mu_t = C_\mu \rho_m \frac{k^2}{\epsilon}$.

表 1 $k-\epsilon$ 湍流模型常数

常数	C_μ	C_1	C_2	σ_k	σ_ϵ	σ_{ϵ_s}
数值	0.09	1.44	1.92	1.0	1.3	0.35

在本文中, 利用同位网格与 SIMPLE 算法相结合进行数值计算. 计算过程中认为此气固两相流动为一稳定的湍流流动, 因此在离散方程中可以认为各变量对时间的导数为零. 在离散方程中用中心差分离散扩散项, 用 QUICK 格式离散对流项. 开始时假设流动初场, 然后通过迭代达到收敛解, 收敛判断条件为混合物在各控制体内的质量残差绝对值的和占入口总质量百分数小于 10^{-3} . 数值计算过程中采用亚松弛技术来加速收敛, 各变量的松弛因子如表 2 所示.

表 2 各变量的松弛因子

变量	U_m	V_m	ρ	α_s	k	ϵ
因子	0.7	0.7	0.3	0.7	0.8	0.8

2.3 边界条件

气固两相混合物在入口处的湍动能和湍动能的扩散率采用文献 [9] 中推荐的方法计算: $k_{in} = 0.005 V_{m,in}^2$; $\epsilon_{in} = \frac{k_{in}^{3/2}}{0.025 \times (2.5H)}$. 其中 $V_{m,in}$ 是混合物的入口速度.

在固体壁面上, 由于固体壁面无渗透, 因此与壁面垂直方向的气相和固相的速度为零; 在固体壁面的切向, 气体无滑移, 因此速度为零; 但由于固体颗粒在壁面切向有滑移速度, 固体壁面上的气固两相混合物的速度不为零, 在本文中认为固体颗粒在静止壁面上的滑移速度为颗粒在壁面上静止气体中的颗粒终端速度, 其计算表达式为:
$$U_w = \left[\frac{4d_s (\rho_s - \rho_g) |\mathbf{g}'_{sm}|}{3\rho_g C_D} \right]^{0.5} \frac{|\mathbf{g}'_{sm}|}{|\mathbf{g}'_{sm}|} \Big|_{wall}$$

出口处认为气固两相流动是充分发展的, 因此各变量在出口的法向导数为零.

2.4 数值模拟结果比较

由于 Laslandes 等^[8]只公布了固相的速度分布, 本文只对固相速度的数值模拟值与 $k-\epsilon-A_p$, $k-\epsilon-k_p$ 两种两流体模型以及实验的结果进行了比较. 如图 2 所示为在台阶下游 $X/H = 5$ 和 $X/H = 9$ 两处的沿

x 方向的固相速度比较, 从图中可以看到, 扩散流模型(DFM)的模拟结果与两流体模型和实验值的速度分布形状基本一致, 能够精确地预测速度最大值

点的位置, 并且在某些局部与实验值和两流体模型的预测值相当, 壁面上滑移速度的计算值与两种两流体模型的模拟结果一致, 误差不大.

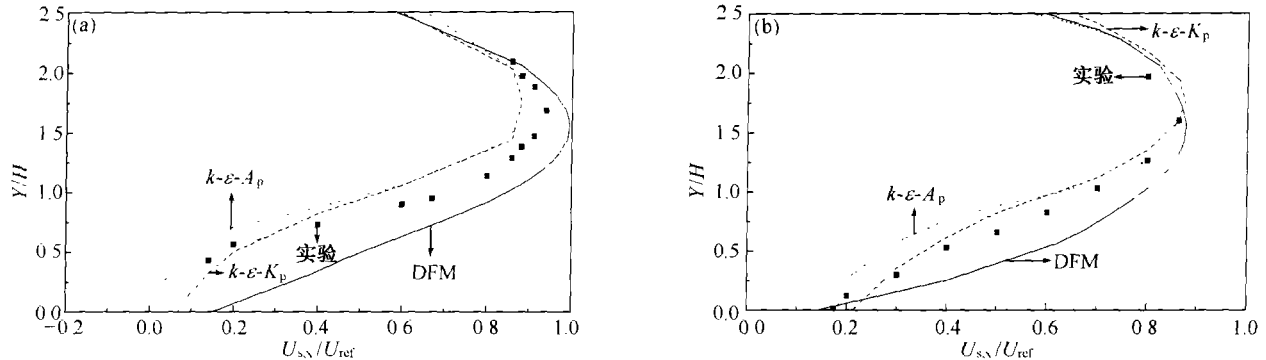


图2 $U_{s,x}/U_{ref}$ 的比较
(a) $X/H=5$; (b) $X/H=9$

在台阶后面, 固体颗粒的横向速度也要对颗粒的运动产生一定的影响, 使得固体颗粒在流动中生成横向的运输. 图3示出了用扩散流模型(DFM)预测的固体颗粒分别在 $X/H=5$ 和 $X/H=9$ 两处, 横向速度分布与两流体模型和实验值的比较. 从图中可以看到, 只有扩散流模型(DFM)的预测结果与

实验值最接近, 并且速度分布以及数值大小都与实验基本一致, 在这一点上扩散流模型(DFM)明显优于两流体模型. Laslandes等^[8]认为两流体模型低估了颗粒在壁面上的法向速度, 由此导致颗粒在 y 方向的速度分布主要取决于湍流质量扩散, 最终产生了数值计算偏差.

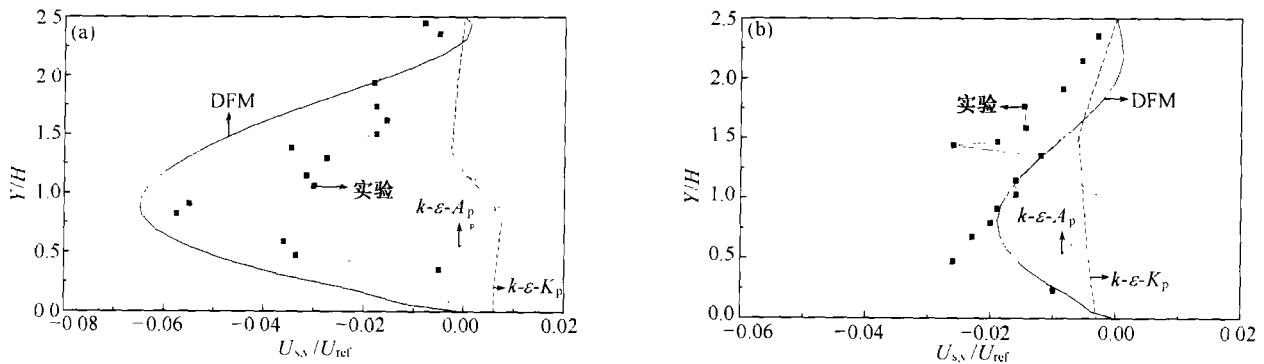


图3 $U_{s,y}/U_{ref}$ 的比较
(a) $X/H=5$; (b) $X/H=9$

3 结论

气固两相扩散流模型(DFM)简化了对气固两相流动的描述, 它是利用单相流动的框架, 并在此框架中引入固相扩散速度来考虑气固两相流动中气相和固相的流动差异. 由此建立起描述气固两相流动的微分方程组, 不但简单方便, 而且有利于编程进行数值模拟. 从模拟的结果与两种两流体模型以及实验数据的比较, 可以看到此模型的模拟结果与两

流体模型相当, 而且有些方面的效果还超过两流体模型. 从数值模拟结果可知, 气固两相扩散流模型(DFM)可以用于研究气固两相流动绕流台阶后的固体颗粒的运输.

参 考 文 献

- 1 Launder B E, et al. Mathematical Models of Turbulence. London and New York: Academic Press, 1972. 71 ~ 130
- 2 Crowe C T, et al. The particle-source-in-cell for gas droplet flows. J Fluids Engr, 1977, 99: 325

- 3 Yuu S, et al. Particle turbulent diffusion in a dump laden jet. *AIChE J.* 1978, 24: 509
- 4 Soo S L. Dynamics of multiphase flow systems. *I & Fund.* 1965, 4: 426
- 5 Cao J, et al. Gas-particle two-phase turbulent flow in a vertical duct. *Int J Multiphase Flow.* 1995, 21(6): 1203
- 6 Morita K, et al. Application of the drift-flux model for analysis of multi-dimensional, multi-phase, multi-component flows. *J At Energy Soci Japan.* 2000, 42 (2): 124
- 7 Brucato A, et al. Particle drag coefficients in turbulent fluids. *Chem Eng Sci.* 1998, 53(18): 3295
- 8 Laslandes S, et al. Transport of particles by a turbulent flow around an obstacle—a numerical and a wind tunnel approach. *J of Wind Eng and Industrial Aerodynamics.* 1998, 74(76): 577
- 9 Yang Y L, et al. Investigation and modeling of cocurrent downflow circulating fluidized bed (downer). *Chem Eng Comm.* 1998, 170: 133

“拟生物体系的物理有机和自由基化学”研究成果 获 2002 年度国家自然科学基金一等奖

由兰州大学刘中立教授主持，南开大学程津培院士、中国科学院上海有机化学研究所蒋锡夔院士、中国科学院理化研究所佟振合院士和中国科学技术大学刘有成院士共同承担的国家自然科学基金“九五”重点项目“拟生物体系的物理有机和自由基化学”的研究成果，最近荣获 2002 年度国家自然科学基金一等奖。

该项目利用物理有机化学的理论和方法与生命体系相关的化学问题进行了深入细致的研究。研究内容涉及电子转移、自由基化学、超分子化学，一氧化氮转移等在生命体系中起重要作用的化学过程。通过该项目的实施，取得了以下重要进展：

(1) 详细研究了辅酶模型化合物 NADH 的还原反应机理，并应用手性辅酶模型化合物 NADH 进行了不对称环丙烷化反应。用 Marcus 理论研究了吡啶氧铵盐与酚噻嗪衍生物的电子转移反应，并将单电子转移反应应用于生源合成的研究。b-环糊精衍生物(NBCD)设计合成了既是电子受体又是底物受体的辅酶模型分子，并研究了其与萘衍生物形成的超分子体系的电子转移反应。

(2) 对含有取代基自旋离域效应参数和极性参数的双参数方程进行了原创性的系统研究，考察了其有机化合物光谱性质的相关性。应用各种光谱手段研究了有机分子的簇集，解簇集作用以及分子簇集体内的电子，能量转移。利用分子间氢键以及给体-受体相互作用合成、组装了若干新的轮烷及索烃超分子体系。

(3) 应用一系列由刚性链段连接的给体-受体超分子体系，通过光谱方法的研究，进一步证实通过 s 键进行分子内的电子转移及能量转移。利用胶束等超分子体系中的电子、能量转移以及光化学转换，获得了超长寿命的电荷分离态，并研究了该体系的光电转换性能。利用双光束驱动以及开链冠醚为离子传输体，研究了超分子体系中离子的跨膜传输，提高了离子传输的效率。以囊泡等超分子体系为微反应器，实现了分子内环化，烯烃光敏氧化等有机反应的高选择性控制。

(4) 首次设计合成了 6 个系列的模型化合物，并定量测定了 N—NO 键，S—NO 键，O—NO 键以及 Co—NO 键的均裂能和异裂能。通过比较，对于 NO 亲合势的变化规律，结构效应以及 NO 转移的趋势，方向等获得了规律性的认识。以此为基础，研究了若干体系中 NO 转移的机理以及电子转移对于 Y—NO(Y = N, S, O, Co 等)键的活化作用。

(5) 应用 ESR 等技术研究了若干绿茶多酚以及香豆素衍生物的抗氧化作用以及它们与 α -生育酚的抗氧化协同作用。详细研究了胶束体系中 α -生育酚抗氧化-促氧化作用的相互转化机理，并测得在胶束中促氧化反应的速率常数。合成了白藜芦醇类似物，研究了它们的抗氧化作用以及抗癌作用。

(供稿：杜灿屏 陈拥军)