

循环床内气固两相流中稠密 颗粒间碰撞的数值模拟

张 蓓 由长福 徐旭常

(清华大学热能工程系 北京 100084)

摘 要

循环床内部的流动属于复杂不均匀的稠密气固两相流,稠密颗粒间的相互作用是影响颗粒运动和浓度分布的不可忽视的重要因素,本文采用直接模拟 Monte-Carlo 算法(DSMC 算法)来模拟颗粒间的相互碰撞过程,并与随机轨道模型结合起来综合考虑流和颗粒碰撞对颗粒运动和浓度分布的影响,模拟结果预报了床内分层流动结构和颗粒在稀相区的不均匀分布,计算结果与实验定性符合。

关键词 数值模拟,稠密颗粒流动,颗粒碰撞

1 前 言

长期以来,对气固两相流动的研究主要集中在假定颗粒间无相互碰撞的稀相流动方面,这些研究对了解气固两相相互作用机理、发展两相流动的数学模型起了很大的作用。随着气固两相流体力学的日益完善以及测试技术和计算技术的迅猛发展,对稠密颗粒流动的研究逐渐引起人们的重视。在稠密颗粒气固两相流中,颗粒间的相互碰撞不能忽视,当颗粒尺寸足够小,流动包括了足够多颗粒时,可以将颗粒间碰撞与稀薄气体分子运动论中分子间的碰撞进行类比。目前,按这种思路来研究颗粒间相互碰撞过程的数值模拟方法有以下三个方面:

- (1) 直接求解 Boltzmann 方程,获得颗粒的速度分布函数^[1]
- (2) 假设环境粒子的串行轨道跟踪法^[2]
- (3) 直接模拟 Monte-Carlo 算法(DSMC 算法)^[3]

DSMC 算法将颗粒的自由运动和颗粒间的相互碰撞解耦,避免了直接计算分布函数,大大缩短了计算时间,并且该方法用碰撞概率来研究真实粒子间的碰撞,比较符合碰撞的实际过程,因此,它是模拟稠密颗粒气固两相流中颗粒碰撞过程的行之有效的办法。

2 颗粒碰撞的数学模型

根据颗粒碰撞与稀薄分子运动论中分子间碰撞的相似性,可以借用描述分子运动和碰撞的 Boltzmann 方程和 DSMC 算法来研究颗粒的运动和碰撞。DSMC 算法的基本思路是将颗粒的自由运动和颗粒间的相互碰撞解耦,从而避免了直接求解 Boltzmann 方程。

2.1 颗粒间碰撞的判断

描述分子运动和碰撞的 Boltzmann 方程是:

本文曾于 1997 年 11 月在天津召开的中国工程热物理学会燃烧学学术会议上宣读,
修改稿于 1997 年 11 月 25 日收到。

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial v} + g \frac{\partial f}{\partial v} = Q(f) \quad (1)$$

式中 f 为速度分布函数, $Q(f)$ 为碰撞项.

Nambu 从 δ 函数的近似出发, 通过一系列推导, 得到关于分布函数的差分算法:

$$f(\Delta t, v) = (1 + Q\Delta t)f(0, v) = \frac{1}{V} \sum_{i=1}^N (1 - P_i)\delta(v - v_i) + Q_i(v) \quad (2)$$

$$P_i = \frac{\Delta t}{V} \sum_{j=1}^N \sigma_T(g_{ij})|g_{ij}| = \sum_{j=1}^N P_{ij} \quad (3)$$

$$Q_i(v) = \frac{\Delta t}{V} \sum_{j=1}^N \frac{1}{|g_{ij}|} \sigma_{a_{ij}} \left(\frac{v}{|v_i|} \right) \delta_{\text{spr}(i,j)}(v) = \sum_{j=1}^N Q_{ij}(v) \quad (4)$$

式中 P_{ij} 为 i 与 j 发生碰撞的碰撞概率, Q_{ij} 为 i 与 j 发生碰撞后 v_i' 的速度分布.

类似公式 (4), 颗粒碰撞概率的计算由网格内的颗粒性质决定, 即:

$$P_{ij} = n\sigma_T g_{ij} \Delta t / N \quad (5)$$

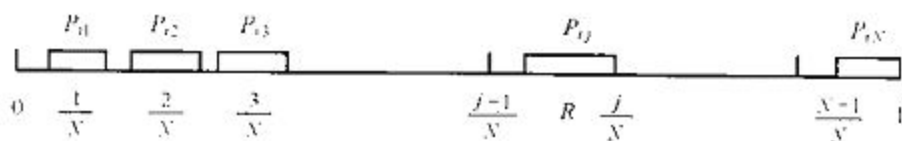
式中 n 为网格内颗粒数密度, σ_T 为碰撞横截面积 $\sigma_T = \pi d^2$, g_{ij} 为 i 与 j 颗粒的相对速度, N 为网格内总颗粒数. 该式的物理意义是: 颗粒 i 、 j 在 Δt 时间内相对运动所形成的以 σ_T 为底面积, $g_{ij}\Delta t$ 为高的圆柱体体积内的颗粒数与网格内总颗粒数之比.

在 Nambu 算法中, 与 v_i 发生碰撞的 v_k 的选择如下图所示



将 $[0, 1]$ 分成若干区间 $[0, P_1], [P_1, P_1 + P_2], [\sum_{j=1}^k P_{ij}, \sum_{j=1}^{k+1} P_{ij}]^P, [P_i, 1]$ 取 R 是 $[0, 1]$ 均匀分布的随机数, 如果 $R \in [P_i, 1]$ 不发生碰撞, 如果 $R \in [\sum_{j=1}^{k-1} P_{ij}, \sum_{j=1}^k P_{ij}]$ 与第 K 个分子发生碰撞, 该方法要求计算所有的 P_{ij} 和 ij , 其计算时间为 $O(N^2)$. Babovsky 修正了 Nambu 算法, 将计算时间缩小到 $O(N)$, 其修正方法为:

由于 $[0, 1]$ 分配 P_{ij} 是任意的, Babovsky 按照下图所示分配 P_{ij}



取 R 为 $[0, 1]$ 均匀分布的随机数, 若 $\frac{k-1}{N} < R < \frac{k}{N}$, 我们只计算 P_{ik} . 如果 $R < \frac{k}{N} - P_{ik}$, 不发生碰撞, 如果 $R \geq \frac{k}{N} - P_{ik}$, i 分子与 k 分子发生碰撞. 这里要求所有 $P_{ij} < \frac{1}{N}$, 通过选择足够小 Δt 可以满足要求, 这个算法计算时间为 $O(N)$.

2.2 直接模拟 Monte-Carlo 算法 (DSMC 算法)

DSMC 算法的基本假设为:

- (1) 对实际颗粒流进行抽样, 计算的颗粒数远小于实际流动的颗粒数;
- (2) 积分时间间隔 Δt 远小于颗粒平均自由程时间, 以至于颗粒间的相互碰撞可以和颗粒的自由运动解耦;
- (3) 流场区域被划分为许多小网格, 碰撞概率的计算以及碰撞伙伴的寻找在每个小网格内进行。

DSMC 算法的计算流程为:

- (1) 不考虑颗粒间的相互碰撞, 计算 Δt 时间内所有颗粒的轨迹, 如果颗粒与壁面碰撞, 颗粒的速度用反弹后的速度代替;
- (2) 用 Monte-Carlo 方法计算 Δt 时间内发生的颗粒碰撞, 碰撞概率和碰撞伙伴的计算用 Monte-Carlo 方法;
- (3) 如果颗粒与另一颗粒发生碰撞, 用碰撞冲量方程计算双方碰后的速度, 颗粒速度用碰撞后速度代替, 颗粒的位置不变。

2.3 碰撞动力学

当两个颗粒相互碰撞, 双方碰撞后的速度用碰撞冲量力计算, 由恢复系数概念可以推出法向冲量力:

$$J_n = (1 + e)(v_{jn} - v_{in}) / (1/m_i + 1/m_j) \quad (6)$$

若两颗粒间存在切向相对滑动, 用库仑定律求切向冲量力:

$$|J_t| = \mu |J_n| \quad (7)$$

两颗粒间的切向相对滑动在碰撞的某一时刻停止下来, 假设滑动停止后不再产生相对滑动, 则切向冲量力的计算为:

$$|J_t| = |g_{jt}| / (1/m_i + 1/m_j) \quad (8)$$

这样, 由碰撞冲量力 J_n 与 J_t 可以计算碰撞后的颗粒速度。

3 算法描述

为同时考虑湍流和颗粒碰撞对颗粒运动和浓度分布的影响, 本文将随机轨道模型和 DSMC 算法结合起来, 用 Lagrangian 轨道法并行计算所有的轨道, 颗粒运动是自身时均运动、湍流脉动和颗粒碰撞的综合作用结果, 首先用随机轨道模型计算颗粒相的运动, 获得颗粒相的初始数密度分布, 然后将 DSMC 算法和随机轨道模型结合起来, 并行跟踪所有的颗粒轨道, 在积分步长 Δt 内同时计算所有颗粒, 在 Δt 时刻未考虑所有颗粒间的碰撞, 根据碰撞概率来判断碰撞是否发生并计算碰撞后的速度, 这样反复积分, 直到所有颗粒飞出流场, 将所有颗粒轨道计算完毕后, 即可得到每个网格中颗粒的反作用源项, 气相湍流场的计算采用标准的 $k-\epsilon$ 双方程模型, 用 SIMPLE 算法求解, 在颗粒轨道的计算中, 使用 PSIC 算法考虑颗粒相与气相的相互作用。

4 计算结果

本文计算对象为排烟循环流化床脱硫实验台上升段, 其几何形状为长 5 m、直径 280 mm 的圆柱形圆筒, 根据计算对象的特点, 采用二维轴对称圆柱坐标系, 计算初始条件

为: 气相进口速度为 8 m/s , 颗粒进口速度为 2 m/s , 颗粒密度为 1038 kg/m^3 , 颗粒直径为 0.406 mm , 积分步长为 0.002 s , 颗粒碰撞恢复系数为 0.94 , 图 1、图 2 为整理后的计算结果, 其中, 图 1 为考虑颗粒碰撞后的颗粒分布图, 图 2 为不考虑颗粒碰撞后的颗粒分布图。

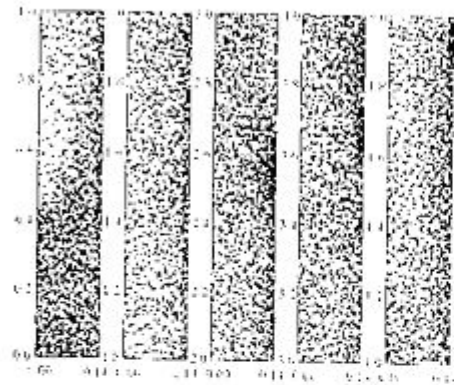


图 1 考虑颗粒碰撞后沿床高的颗粒分布图

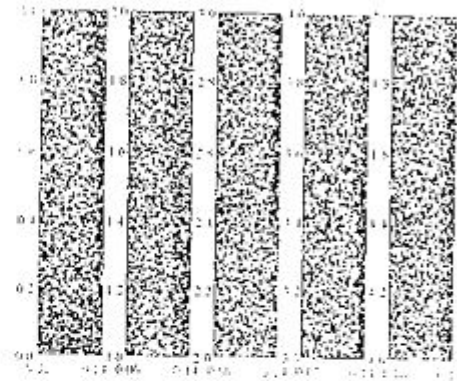


图 2 不考虑颗粒碰撞后沿床高的颗粒分布图

5 结 论

(1) 稠密颗粒气固两相流中的颗粒碰撞与稀薄气体分子运动论中的分子间的碰撞具有类似性, 借用描述稀薄气体分子运动以及碰撞的 Boltzmann 方程和求解 Boltzmann 方程的 DSMC 算法来模拟颗粒间的碰撞。

(2) 对循环流化床内稠密颗粒流动的计算结果表明, 当不考虑颗粒碰撞时, 颗粒浓度大致呈现均匀分布, 采用 DSMC 算法考虑颗粒碰撞后, 计算结果预报出床内的两层流动结构, 即底部的密相区和上部的核心-环形流动区, 并且在稀相区内出现了局部较浓的带状颗粒团, 颗粒碰撞导致了不均匀的颗粒分布和局部稠密的颗粒团聚现象。

参 考 文 献

- [1] I. Lourenco, M. L. Riethmuller, J. A. Essers. The Kinetic Model of Gas Particle Flow and Its Numerical Implementation. In: Proc. of Inter. Conf. on the Physical Modelling of Multi-Phase Flow, England, 1983. 501-525
- [2] B. Oesterle, A. Petitjean. Simulation of Particle-to-Particle Interaction in Gas-Solid Flow. J. Multi-phase Flow, 1992, 19(1): 199-211
- [3] T. Tanaka, K. Kirihayashi, Y. Tsuji. Monte Carlo Simulation of Gas-Solid Flow in Vertical Pipe or Channel. In: Proc. of the Inter. Conf. on Multiphase Flows '91-Tsuguba, Japan, 1991. 439-442
- [4] 张强. 稠密气固流颗粒碰撞的数值模拟. [学位论文]. 北京: 清华大学, 1997
- [5] G. A. Bird. Molecular Gas Dynamics. Oxford Univ. Press, 1976
- [6] 周力行. 湍流多相流动与燃烧的数值模拟. 北京: 清华大学出版社, 1992

NUMERICAL SIMULATION ON INTER-PARTICLE
COLLISION IN DENSE GAS-SOLID
OF CIRCULATING BED

ZHANG Jian YOU Changfu XU Xuchang

(Thermal Engineering Department, Tsinghua University, Beijing 100084)

Abstract

In this paper, based on the similarity between the collision of dense particles in gas-solid flow and that of gas molecules in rarefied gas, inter-particle collision is investigated according to Direct Simulate Monte Carlo algorithm. The stochastic trajectory model and DSMC algorithm are used to take into account the turbulence diffusion and inter-particle collision. Computational results are generally consistent with experimental data. In comparison with the case in which inter-particle collision is neglected, the computational results indicate interparticle collision results in nonuniform distribution of particle and formation of cluster.

Keywords numerical simulation dense gas-solid flow, inter-particle collision