

聚式流态化向散式流态化过渡的离散粒子模拟

葛蔚<sup>①②</sup> 李静海<sup>①</sup>

<sup>①</sup>中国科学院化工冶金研究所开放实验室，北京 100089；<sup>②</sup>哈尔滨工业大学机械科学与工程学院，哈尔滨 150001

关键词 粒状流体系统 浊态化 流型演变 离散粒子模拟 刚性圆球

流态化系统广泛存在于自然界和工业过程中,但对其认识还很有限,主要原因是它的强非平衡性<sup>[1]</sup>。颗粒与流体间复杂的相互作用导致系统常处于非线性非平衡状态下,形成多尺度的高度不均匀的耗散结构<sup>[2]</sup>。这些耗散结构的尺度要比相应的单相系统中的流动结构小得多,而颗粒的尺度又要比流体分子大几个到十几个量级,因此很可能找不到满足宏观足够小而微观足够大的尺度。而该尺度的存在是目前流态化系统的主要模拟方法——拟流体模型<sup>[2]</sup>和颗粒轨道模型<sup>[3]</sup>(在经验地描述颗粒流体相互作用时)的基本前提。虽然这两种方法都得到了实际应用,但从机理研究的角度看,仍有很多局限。

## 1 离散粒子模拟的提出

从最基本的层次上看,流化系统是由大量离散粒子,即固体颗粒和流体分子组成的,因此其宏观行为也最终决定于这些粒子的状态、性质和所受的外部约束。直接跟踪它们的运动显然是最接近实际的模拟。国际上对单相流动的离散化模拟出现于 80 年代末<sup>[4]</sup>,近年来已较常见,但我们尚未发现它在流化系统中的应用,主要原因是多颗粒存在下计算量太大。最近我们采用稠密的光滑刚性颗粒作为流体粒子,显著地降低了计算量,成功地模拟了节瘤和鼓泡等典型的流化现象<sup>[5]</sup>。本文采用该方法,进一步模拟了从层式流化向散式流化的流型演变。

## 2 模拟系统的设计与算法

以图1所示的二维垂直流化系统为例,设颗粒是等直径的光滑硬质圆球,而流体由直径 $D_f$ 比颗粒小近10倍的稠密的光滑刚性圆球(即流体粒子)组成。虽然此类流体的物性与通常流体相差很大,目前也难以定量表达,但近年来广义流体力学<sup>[6]</sup>的研究表明:此时单颗粒与它们的相互作用仍属流体力学范畴,模拟系统仍应具有流态化系统的基本现象。

模拟中设流体粒子间及其与侧壁间、固体颗粒与分布板间发生完全弹性的镜面碰撞，而固体颗粒与侧壁相碰时，切向速度变为零，径向速度取反。分布板对流体粒子无任何作用。

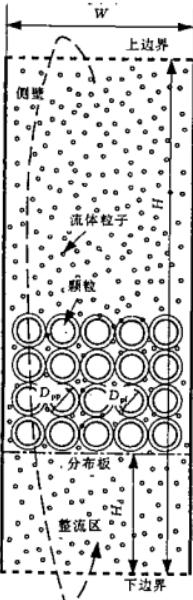


图 1 模拟系统示意图

外二维系统中当颗粒堆积时流体将被阻断,而在三维的实际系统中流体仍能从颗粒的缝隙中穿过,为此让颗粒在与其他颗粒及壁面碰撞时具有较大的直径  $D_{pp}$ ,而与流体粒子相碰时具有较小的直径  $D_{pl}$ ,两者之差至少大于流体粒子的直径  $D_f$ 。模拟开始时颗粒静止于分布板上面的下部床层中;流体静止,而其粒子处于平衡态。然后颗粒和流体粒子均受竖直向下的重力作用,并控制处于底部整流区的流体粒子的平均速度竖直向上且恒为  $U_f$ ,离开上下边界的流体粒子被重新引入对面的相应位置,即采用周期边界,以维持流动。

模拟采用时间驱动算法<sup>[6]</sup>,它只允许碟间碰撞发生在等间距( $\Delta t$ )的离散时刻。一旦两碟中心距小于其半径之和且速度相向(相互靠近),则碰撞发生,两碟位置不变而速度按以下更新:

$$\mathbf{V}_1' = \mathbf{V}_1 + (\mathbf{V}_1 - \mathbf{V}_2) \cdot (\mathbf{P}_2 - \mathbf{P}_1) (\mathbf{P}_1 - \mathbf{P}_2) / (\mathbf{P}_2 - \mathbf{P}_1)^2 \cdot (1 + \epsilon) m_2 / (m_1 + m_2),$$

其中  $P$ 、 $V$  分别表示圆碟的位置和速度矢量,  $m$  为其质量,脚标 1,2 分别标识两碟,上标'表示“碰撞后”。在相邻时刻间各碟运动不相干。与精确的事件驱动算法<sup>[7]</sup>相比,它能简化编程,方便结果动态显示,在流体粒子较稠密和总数较大时还能提高效率。为保证算法的精度,流体粒子每步走过的距离远小于其直径。

### 3 模拟结果与讨论

模拟的有关参数见表1,模拟结果如图2~4。图2为典型的聚式系统,两相密度比相当于常压气固系统,其最显著的特征是床层的节涌和颗粒内循环,即颗粒从较稀一侧迅速上升并抬高

表1 模拟参数汇总表

参数	图2	图3	图4	参数	图2	图3	图4
流体粒子数, $N$	15 000			床层平均空隙率, $\epsilon$	0.561	0.632	0.577
颗粒数, $N_p$	90			颗粒间碰撞的恢复系数, $\epsilon$	0.6		
流体粒子直径, $D_f/\mu\text{m}$	0.255 2			颗粒-流体密度比, $\rho_p/\rho_f$	3 150	100	2
颗粒直径, $D_{pp}/\mu\text{m}$	3.062, 2.042			时间步长, $\Delta t/\mu\text{s}$		0.510 2	
床宽, $W/\mu\text{m}$	36.75			流体宏观流速, $U_f/\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$	1	0.125	0.005
床高, $H/\mu\text{m}$	73.50			重力加速度, $g/\text{m}\cdot\text{s}^{-2}$			9.8
分布板标高, $H_d$	15.31						

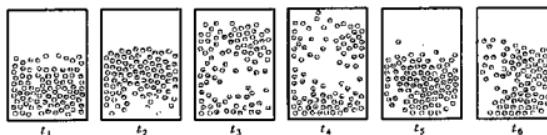


图2 聚式流化模拟中若干时刻的颗粒分布

$$(\rho_p/\rho_f=3 150, t_i - t_{i-1} = 0.071 44 \text{ s})$$

床层,再从较密一侧缓慢下降,床层回落。在图3,4中,两相密度比逐渐减小,分别相当于加压气固系统和液固系统。从中可观察到系统从聚式到散式流化的过渡,这是流化系统中一个

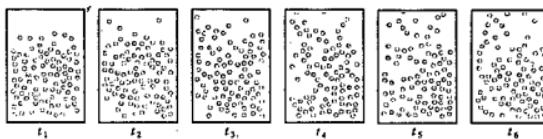


图3 过渡流型模拟中若干时刻的颗粒分布

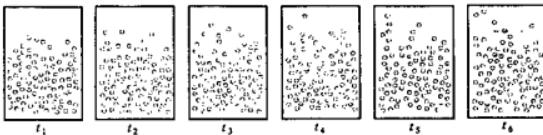
 $(\rho_p/\rho_f = 100, t_i - t_{i-1} = 0.06122 \text{ s})$ 

图4 散式流化模拟中若干时刻的颗粒分布

 $(\rho_p/\rho_f = 2, t_i - t_{i-1} = 0.02552 \text{ s})$ 

非常重要的现象，蕴涵着此类系统的一些深刻机理。这表明离散粒子模拟反映了颗粒流体相互作用的内在机制，是一种值得探讨和深入研究的方法。

**致谢** 本工作为国家杰出青年基金(批准号:29425006)资助项目。

### 参 考 文 献

- 李静海,高蔚,郭有良,等. 颗粒流体系统的非线性行为及其计算机图形仿真. 科学通报, 1996, 41(增刊): 10-21
- Gidaspow D. Hydrodynamics of fluidization and heat transfer: supercomputer modeling. Appl Mech Rev, 1986, 39(1): 1
- Tsuji Y, Kawaguchi T, Tanaka T. Discrete particle simulation of two-dimensional fluidized bed. Powder Technol, 1993, 77 (1): 79
- Rapaport D C. Microscale hydrodynamics: discrete-particle simulation of evolving flow patterns. Phys Rev A, 1987, 36(7): 3288
- Ge W, Li J. Pseudo-particle approach to hydrodynamics of particle-fluid systems. In: Kwauk M, Li J eds. Proceedings of the 5th International Conference on Circulating Fluidized Bed. Beijing, 1996. Beijing: Science Press, 1997. 260-266
- Alder B J, Alley W E. Generalized hydrodynamics. Physics Today, 1984; 56
- Hale J M. Molecular Dynamics Simulation. New York: Wiley, 1992

(1997-05-05 收稿, 1997-08-21 收修改稿)