第 22 卷 第 4 期
2016 年 8 月

中国粉体技术
CHINA POWDER SCIENCE AND TECHNOLOGY

Vol. 22 No. 4
Aug. 2016

doi:10.13732/j.issn.1008-5548.2016.04.004

双组分颗粒瞬态分级过程的三维 CFD 模拟

钟汉斌，郑亚君，张智平

(西安石油大学 化学化工学院，陕西 西安 710065)

摘要：为了深入研究双组分颗粒体系的流态化特性，采用基于欧拉-欧拉方法的多流体模型，对气-固流化床内双组分颗粒混合物的瞬态分级过程进行三维计算流体力学(CFD)模拟，考察残差定义形式、最大颗粒堆积率和壁面反射系数对瞬时分级程度的影响规律。结果表明：残差定义形式改变单位时间步长内的实际迭代次数，对瞬时分级程度产生重大影响；瞬时分级程度随着最大颗粒堆积率的增大而明显增大；壁面反射系数的减小会阻碍双组分颗粒混合物的分级行为，导致瞬时分级程度显著降低。

关键词：计算流体力学；双组分颗粒；分级；流化床

中图分类号：TQ021.1 **文献标志码**：A

文章编号：1008-5548(2016)04-0019-06

3D CFD simulation of instantaneous segregation process for binary particles

ZHONG Hanbin, *ZHENG Yajun*, *ZHANG Zhiping*

(School of Chemistry and Chemical Engineering,
Xi′an Shiyou University, Xi′an 710065, China)

Abstract: In order to reveal the fluidization characteristics of binary particles, the 3D computational fluid dynamics (CFD) simulation on the instantaneous segregation process of binary particles in gas-solid fluidized bed was performed using the multi-fluid model based on Eulerian-Eulerian method. The effects of the definition of residual, maximum packing limit, and specularity coefficient on the instantaneous segregation extent were investigated. The results demonstrate that the definition of residual changes the real iterations per time step, which has a significant influence on the predicted instantaneous segregation extent. The instantaneous segregation extent increases remarkably with the increase of maximum packing limit. The segregation behavior of binary particles is hindered for smaller specularity coefficient, which leads to a lower instantaneous segregation extent.

Keywords: computational fluid dynamics; binary particles; segregation; fluidized bed

收稿日期：2016-01-01，**修回日期**：2016-03-01。

基金项目：重质油国家重点实验室开放基金资助项目，编号：SKLHOP201506；西安石油大学青年科技创新基金项目，编号：2014BS18。

第一作者简介：钟汉斌(1986—)，男，讲师，博士，研究方向为多相流反应工程及计算流体力学。E-mail：hanbinzhong@126.com。

众所周知，实际气-固流化床反应器内的固体颗粒属于存在着粒径和(或)密度差异的多组分颗粒体系，因此表现出与单组分颗粒体系不同的流态化特性，如在较低气速下发生分级，而在较高气速下趋于完全混合。

目前，计算流体力学(CFD)方法已被广泛地用于预测简单多组分颗粒体系，如双组分颗粒体系的流动行为。已有的大量研究表明，众多因素，如气相-颗粒相曳力模型[1]、不同颗粒相之间的曳力模型[2-5]、颗粒相壁面条件(壁面反射系数)[1,6]以及网格尺寸和时间步长[7]等对所预测的流动特性均有着重要影响，但以上研究的重点主要围绕分级完全后的稳定状态，对分级发生时的瞬态过程研究较少[2,8-9]，并且大部分研究将流化床简化为二维结构进行模拟研究，对瞬态分级过程的模拟能够更准确全面地验证所建立的CFD模型。同时，由于二维结构忽略了前、后壁面的影响，即便对于单组分颗粒体系的假二维流化床，其模拟结果与三维模拟结果也存在较大的差异[10-12]，因此，对双组分颗粒体系瞬态分级过程进行三维CFD模拟预测具有重要意义，可更为准确地揭示众多影响因素如残差定义形式、最大颗粒堆积率及壁面反射系数对模拟结果的影响规律，为气-固流化床反应器的准确预测提供借鉴。

1 模拟对象

模拟工况为Goldschmidt等[13]的冷态实验，该实验装置为15 cm×1.5 cm×70 cm(长×宽×高)的假二维气-固流化床。在底部通入空气对2种Geldart D类颗粒进行流态化，颗粒性质如表1所示。初始状态下，床层内堆积有一定高度均匀混合的大、小颗粒混合物。在较低气速的作用下，2种颗粒因粒径的差异而发生分级行为，大颗粒在分级过程中倾于沉积于床层底部，而小颗粒则倾于聚集在床层顶部。

(C)1994-2023 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

表 1 颗粒性质

Tab. 1 Particle properties

颗粒性质	小颗粒	大颗粒
粒径/mm	1.5	2.5
密度/(kg·m^{-3})	2 523	2 526
最小流态化速度/(m·s^{-1})	0.78	1.25
颗粒与颗粒碰撞恢复系数	0.97	0.97
颗粒与壁面碰撞恢复系数	0.97	0.97

采用数码摄像机拍摄瞬态分级过程，通过图像分析技术获得 2 种颗粒的瞬态体积分数分布，并定义分级程度 s，由公式(1)—(4)计算，以反映双组分颗粒体系的分级状态。

$$s=\frac{S-1}{S_{max}-1}\quad , \tag{1}$$

$$S_{max}=(2-x_s)/(1-x_s)\quad , \tag{2}$$

$$S=h_s/h_1\quad , \tag{3}$$

$$h_i=\frac{\sum_j \alpha_i H_j}{\sum_j \alpha_i}\quad , \tag{4}$$

式中：s 的范围在 0~1 之间，0 表示完全混合状态，1 表示完全分级状态；S 为高度比值；S_{max} 为高度比值的最大值；x_s 为整个体系内小颗粒的质量分数，%；h_i 为第 i 类颗粒床层高度，m；H_j 为 j 网格的高度，m；α_i 为 j 网格中第 i 类颗粒的体积分数，%；下标 i 为第 i 类颗粒；s 和 1 分别表示小颗粒和大颗粒；加和符号 $\sum$ 表示对所有网格进行加和。

2 CFD 模型

采用基于欧拉-欧拉方法的多流体模型进行 CFD 模拟研究。在该模型中，将大、小颗粒分别处理为 2 种不同的拟流体相，并结合颗粒动力学理论描述颗粒相性质，如颗粒相压力及黏度等。气相-颗粒相以及颗粒相-颗粒相曳力分别采用 Huilin-Gidaspow 曳力模型[14]和 Syamlal 曳力模型[15]进行描述。具体的数学模型如控制方程组和颗粒动力学相关方程参见相关文献[3, 6]。气相壁面条件采用无滑移条件，大、小颗粒相壁面条件均采用 Johnson-Jackson 壁面条件[16]。

$$\vec{\tau}_i=-\frac{\pi}{3}\sqrt{3}\,\varphi\frac{\alpha_i}{\alpha_{max}}\rho_i g\sqrt{\theta_i}\,\vec{v}_i\,, \tag{5}$$

$$q_i=\frac{\pi}{6}\sqrt{3}\,\varphi\frac{\alpha_i}{\alpha_{max}}\rho_i g\sqrt{\theta_i}\,\vec{v}_i-\frac{\pi}{4}\sqrt{3}\,\varphi\frac{\alpha_i}{\alpha_{max}}(1-e)\rho_i g\theta_i^{\frac{3}{2}}\,。 \tag{6}$$

式中 φ 和 e 分别为壁面反射系数和颗粒-壁面的碰撞恢复系数。φ 用于描述壁面处颗粒相和壁面碰撞时所产生的动量传递比例，取值范围为 0~1 之间。当 $\varphi=0$ 时，为全滑移壁面条件，颗粒与壁面无动量传递；而当 $\varphi=1$ 时，为无滑移壁面条件，颗粒与壁面有显著的动量传递。e 用来描述颗粒与壁面碰撞时所产生的能量耗散；ρ 为颗粒密度，kg/m^3；g 为径向分布函数；θ 为颗粒相温度，m^2/s^2；$\vec{v}_i$ 为壁面处的颗粒速度，m/s；$\vec{\tau}$ 为壁面处的剪切应力张量，kg/(m·s^2)；q_i 为壁面处颗粒相的能量扩散通量，kg/s^3。

在 Fluent 14.0 软件平台上对双组分颗粒瞬态分级过程进行三维 CFD 模拟，网格尺寸为5 mm×5 mm×10 mm(长×宽×高)，时间步长为 0.001 s。入口为速度入口条件，出口为压力出口条件。初始床层堆积高度为 15 cm，动量和颗粒温度项选用二阶迎风差分格式，体积分数项采用一阶迎风差分格式。收敛标准为残差值小于 0.001。模拟工况如表 2 所示，对表观气速和小颗粒质量分数不同的 2 种工况进行模拟计算，根据 s 的计算方法，采用自定义用户函数对瞬态模拟结果进行分析处理，即可获得双组分颗粒体系内瞬时的分级程度。

表 2 模拟工况

Tab. 2 Simulation conditions

模拟条件	工况 1	工况 2
表观气速/(m·s^{-1})	1.1	1.2
小颗粒的质量分数/%	0.5	0.25

3 结果与讨论

3.1 残差定义形式对瞬时分级程度的影响

在 Fluent 14.0 软件中进行非稳态模拟计算时，每个时间步内的实际迭代次数，由达到收敛标准所需的迭代次数和单位时间步长内最大迭代次数共同决定。如果残差值达到设定的收敛标准或迭代达到最大迭代次数，则模拟计算进入下一时间步长。Fluent 14.0 提供 2 种残差定义形式，一种称为未标度(unscaled)残差，该残差为相应方程左右两侧差值的绝对值之和；另一种称为标度(scaled)残差，为未标度残差除以一定的标度系数得到的值。在默认条件下，Fluent 软件通过标度残差来判断计算是否收敛，因此，在相同收敛标准和最大迭代次数情况下，采取不同的残差定义形式极有可能影响单位时间步长内的实际迭代次数，进而可能影响瞬态的模拟结果。

在双组分颗粒体系瞬态分级过程的模拟研究中，当其他模拟条件一致时，分别采取标度残差和未标度残差进行模拟计算，获得 2 种工况下瞬时小颗粒体积分数分布图如图 1、2 所示。

(C)1994-2023 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

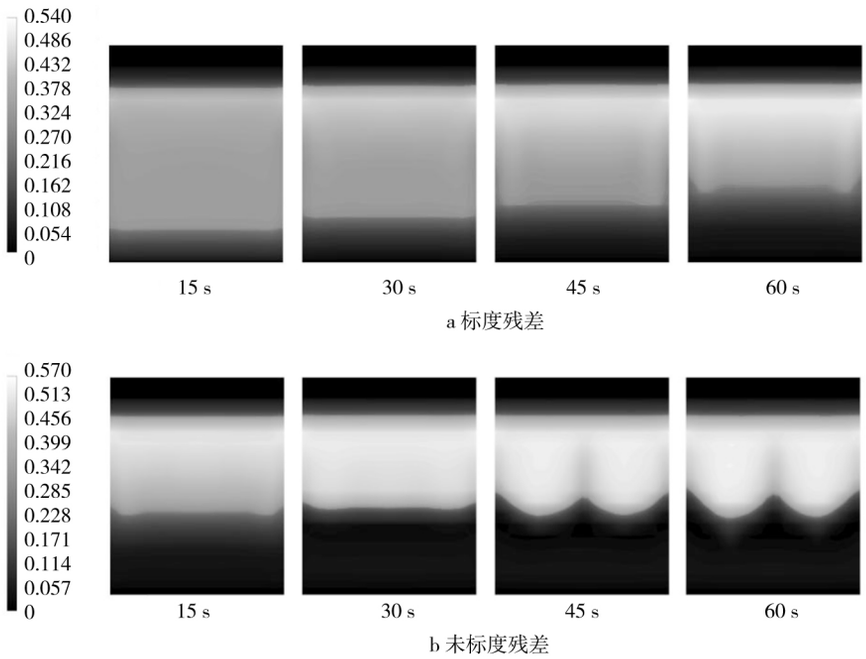


图 1　工况 1 下瞬时小颗粒体积分数分布图

Fig. 1　Instantaneous volume fraction distributions of small particles in case 1

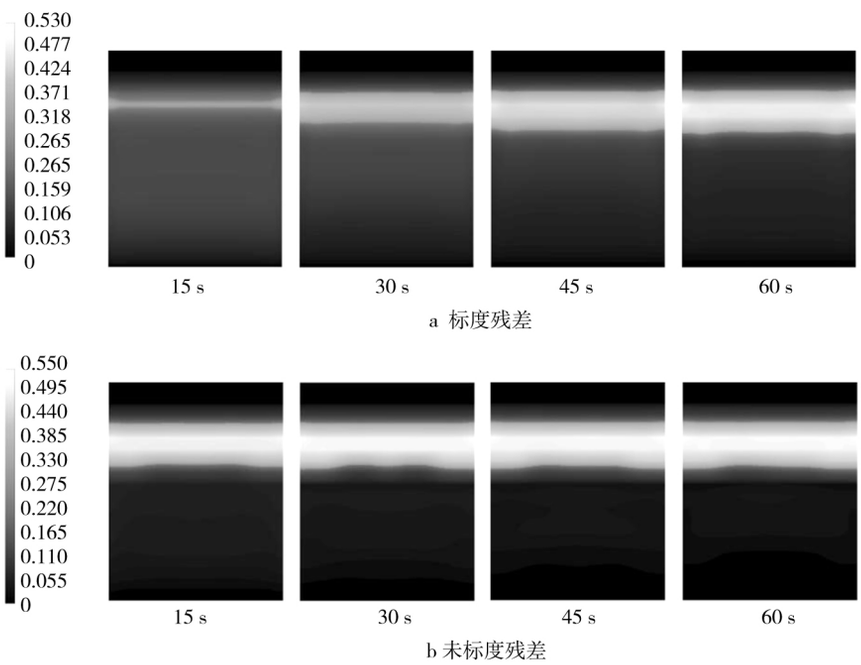


图 2　工况 2 下瞬时小颗粒体积分数分布图

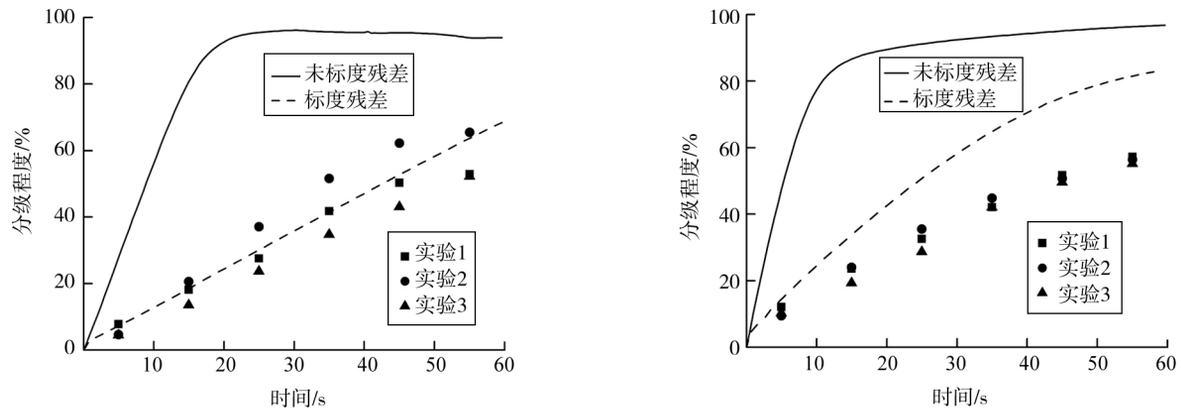
Fig. 2　Instantaneous volume fraction distributions of small particles in case 2

从图中可以看出，在 2 种工况下，残差的定义形式对瞬时小颗粒体积分数均有显著影响。相同模拟时间下，采取标度残差时，床层上部小颗粒的富集程度要明显低于采取未标度残差的模拟结果，说明采取标度残差时大、小颗粒的分级过程更为缓慢。由于在该体系的模拟计算过程中，标度残差整体要小于未标度残差，因此，在相同的残差标准下，采取标度残差仅需少量迭代次数即可达到收敛，从而计算进入下一时间步长。而采取未标度残差时，由于其值较大则通常需要较多的迭代次数，因此达到收敛或达到最大迭代次数才进入下一时间步长。

根据 s 的计算方法，通过用户自定义函数对瞬态模拟结果进行分析处理，即可获得 2 种工况下残差定义形式对瞬时分级程度的影响如图 3 所示，并与实验值[13]进行对比。在同一模拟时间下，采取标度残差预测的床层上部小颗粒富集程度较低，其分级程度要明显

(C)1994-2023 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

小于采取未标度残差的分级程度。然而，虽然采用标度残差得到的模拟结果与实验值吻合较好，但是这并不表明是正确的模拟结果。此时残差值虽然达到收敛标准，但是变化梯度仍然较大，说明体系并未达到该时间下真实的收敛状态。此外，当分级逐步完成时，2 种残差定义形式所预测的分级程度越来越接近，可以预见残差定义形式对分级完全后的最终稳定状态影响较小，但对瞬态分级过程影响显著，因此，在模拟瞬态分级过程时，残差的定义形式需引起研究者的重视。



a 工况 1　　b 工况 2

图 3　残差定义形式对瞬时分级程度的影响

Fig. 3　Influence of residual definition on instantaneous segregation extent

在模拟计算过程中发现采取未标度残差时，残差值难以达到收敛标准，通常是达到最大迭代次数 N_{max}（100 次）后才进行下一时间步长，但是此时各项残差的值已趋于稳定，可以认为计算已达到收敛。为了确保模拟结果不受单位时间步长内 N_{max} 的影响，图 4 给出了 N_{max} 对瞬时分级程度的影响。

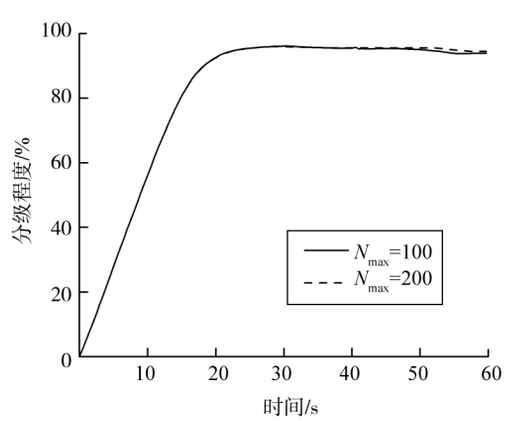


图 4　最大迭代次数对瞬时分级程度的影响（工况 1）

Fig. 4　Influence of maximum interations on instantaneous segregation extent in case 1

显然当 N_{max} 为 100 时即可满足要求。此外，Coroneo 等[7]的研究表明，网格尺寸和时间步长对双组分颗粒体系的分级和混合行为有重要影响。为了验证模拟结果不受网格尺寸和时间步长的影响，图 5 给出了网格尺寸和时间步长对瞬时分级程度的影响。由图可以看出，不同网格尺寸和时间步长下，所获得的瞬时分级程度几乎一致，因此在所考察的范围内，本研究得到的模拟结果不受网格尺寸和时间步长的影响。

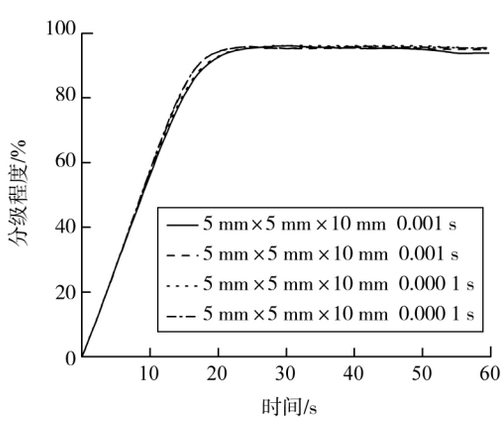


图 5　网格尺寸和时间步长对瞬时分级程度的影响（工况 1）

Fig. 5　Influence of grid size and time step on instantaneous segregation extent in Case 1

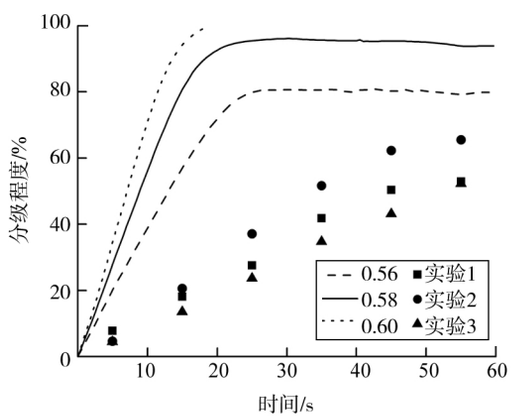
3.2　最大颗粒堆积率对瞬时分级程度的影响

在多流体模型中，最大颗粒堆积率是一个非常重要的参数，它可以通过径向分布函数来影响颗粒相的各项性质，如颗粒相压力、剪切黏度等，并且 Johnson-Jackson 颗粒相壁面条件（公式（5）和（6））也是最大颗粒堆积率的函数，因此，最大颗粒堆积率的取值极有可能影响模拟结果。虽然裴培等[17]的研究表明，最大颗粒堆积率对单组分颗粒体系内射流的形成及发展过程、射流崩塌后形成的气泡形状和大小及气泡

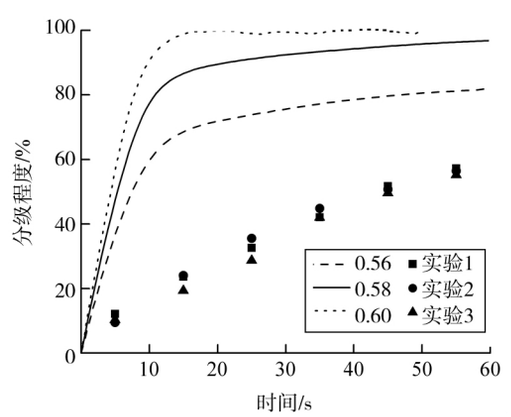
(C)1994-2023 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

的上升速度和射流穿透深度等影响很小，但是由于双组分颗粒体系中存在独特的流动特性，最大颗粒堆积率对双组分颗粒混合物的流动行为可能有重要影响。

对于同样的模拟体系，不同研究者往往采用不同的最大颗粒堆积率，如 Annaland 等[8]及 Olaofe 等[9]的研究取 0.60，而 Chao 等[2]则取 0.58。图 6 给出了最大颗粒堆积率对瞬态分级程度的影响，显然在 2 种工况中，最大颗粒堆积率对模拟结果均有重要影响。当最大颗粒堆积率从 0.56 增大至 0.60，相同模拟时间下所预测的瞬时分级程度明显增大。同时，从图 6 中也可得知，最大颗粒堆积率对分级完全后的稳定状态也有影响，最终的分级程度随着最大颗粒堆积率的增大而增大，因此，在对双组分颗粒混合物分级过程进行模拟研究时，需要注意最大颗粒堆积率的取值，建议通过实验获得准确值。



a 工况 1



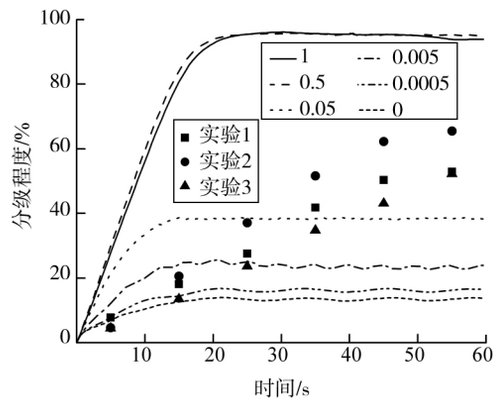
b 工况 2

图 6　最大颗粒堆积率对瞬时分级程度的影响

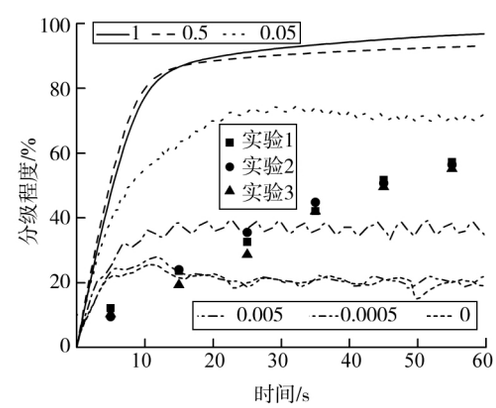
Fig. 6　Influence of maximum packing limit on instantaneous segregation Extent

3.3　壁面反射系数对瞬时分级程度的影响

壁面反射系数作为 Johnson－Jackson 颗粒相壁面条件中重要参数，众多研究表明，其取值对流化床的流动行为有着重要影响[18-21]。虽然已有研究考察了壁面反射系数对双组分颗粒混合物流动特性的影响[1, 6]，但均采用简化的二维模拟体系，并注重于分级完成后的稳定状态；因此，本研究考察了壁面反射系数对瞬态分级过程三维 CFD 模拟结果的影响规律，壁面反射系数对瞬时分级程度的影响如图 7 所示。



a 工况 1



b 工况 2

图 7　壁面反射系数对瞬时分级程度的影响

Fig. 7　Influence of specularity coefficient on instantaneous segregation extent

由图可以看出，壁面反射系数在 2 种工况下，对所预测的瞬时分级程度均有显著影响。整体而言，随着壁面反射系数的减小，相同时间下所预测的瞬时分级程度明显减小。当壁面反射系数为 0，即全滑移壁面条件时，即使分级完成后，体系内大、小颗粒的分级程度仍然非常小，接近于完全混合的状态。这与先前报道的结论一致[1, 6]，壁面反射系数减小将会阻碍双组分颗粒混合物的分级行为，增强该体系的混合行为。

4　结论

通过采用多流体模型对双组分颗粒体系的瞬态分级过程进行三维 CFD 模拟，考察残差定义形式、最大颗粒堆积率和壁面反射系数对所预测瞬时分级程

(C)1994-2023 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

度的影响规律，获得以下结论：

1) 残差定义形式通过改变单位时间步长内的实际迭代次数，从而对瞬时分级程度有着重要影响。采用标度残差时残差值虽然容易达到收敛标准，但是此时变化梯度仍然较大，说明体系并未达到该时间下的真实收敛状态，模拟结果并非为该瞬态下的正确结果。而采用未标度残差可以保证在每个时间步内残差值达到收敛标准或稳定状态，得到正确的模拟结果。

2) 随着最大颗粒堆积率的增大，所预测的瞬时分级程度明显增大。

3) 壁面反射系数减小会阻碍双组分颗粒混合物的分级行为，增强该体系内的混合行为，从而使所预测的瞬时分级程度显著降低。

为此，对双组分颗粒体系进行 CFD 模拟时，需重视残差的定义形式以及最大颗粒堆积率和壁面反射系数的取值，以获得更为准确的模拟结果并有助于验证其它模型的准确性。

参考文献 (References)：

[1] LUNGU M，ZHOU Y，WANG J，et al. A CFD study of a bi-disperse gas–solid fluidized bed: effect of the EMMS sub grid drag correction [J]. Powder Technol，2015，280: 154–172.

[2] CHAO Z，WANG Y，JAKOBSEN J P，et al. Investigation of the particle–particle drag in a dense binary fluidized bed[J]. Powder Technol，2012，224: 311–322.

[3] ZHONG H，LAN X，GAO J，et al. Effect of particle frictional sliding during collisions on modeling the hydrodynamics of binary particle mixtures in bubbling fluidized beds[J]. Powder Technol，2014，254: 36–43.

[4] GAN J，ZHAO H，BERROUK A S，et al. Impact of the drag law formulation on the predicted binary–particle segregation patterns in a gas–solid fluidized bed[J]. Powder Technol，2012，218: 69–75.

[5] 钟汉斌，蓝兴英，高金森，等. 鼓泡床内双组分颗粒流动行为的数值模拟[J]. 中国粉体技术，2013，19 (3)：1–5.

[6] ZHONG H，GAO J，XU C，et al. CFD modeling the hydrodynamics of binary particle mixtures in bubbling fluidized beds: effect of wall boundary condition[J]. Powder Technol，2012，230: 232–240.

[7] CORONEO M，MAZZEI L，LETTIERI P，et al. CFD prediction of segregating fluidized bidisperse mixtures of particles differing in size and density in gas–solid fluidized beds [J]. Chem Eng Sci，2011，66 (11)：2317–2327.

[8] VAN SINT ANNALAND M，BOKKERS G A，GOLDSCHMIDT M J V，et al. Development of a multi-fluid model for poly-disperse dense gas–solid fluidised beds，part II: segregation in binary particle mixtures [J]. Chem Eng Sci，2009，64 (20)：4237–4246.

[9] OLAOFE O O，PATIL A V，DEEN N G，et al. Simulation of particle mixing and segregation in bidisperse gas fluidized beds[J]. Chem Eng Sci，2014，108: 258–269.

[10] LI T，GRACE J，BI X. Study of wall boundary condition in numerical simulations of bubbling fluidized beds[J]. Powder Technol，2010，203 (3)：447–457.

[11] CLOETE S，JOHANSEN S T，ZAABOUT A，et al. The effect of frictional pressure，geometry and wall friction on the modelling of a pseudo-2D bubbling fluidised bed reactor[J]. Powder Technol，2015，283: 85–102.

[12] ALTANTZIS C，BATES R B，GHONIEM A F. 3D Eulerian modeling of thin rectangular gas–solid fluidized beds: estimation of the specularity coefficient and its effects on bubbling dynamics and circulation times[J]. Powder Technol，2015，270: 256–270.

[13] GOLDSCHMIDT M J V，LINK J M，MELLEMA S，et al. Digital image analysis measurements of bed expansion and segregation dynamics in dense gas-fluidised beds[J]. Powder Technol，2003，138 (2/3)：135–159.

[14] HUILIN L，GIDASPOW D，BOUILLARD J，et al. Hydrodynamic simulation of gas–solid flow in a riser using kinetic theory of granular flow[J]. Chem Eng J，2003，95 (1/2/3)：1–13.

[15] GERA D，SYAMLAL M，O'BRIEN T J. Hydrodynamics of particle segregation in fluidized beds [J]. Int J Multiphas Flow，2004，30 (4)：419–428.

[16] JOHNSON P，JACKSON R. Frictional-collisional constitutive relations for granular materials，with application to plane shearing [J]. J Fluid Mech，1987，176 (1)：67–93.

[17] 裴培，王其成，张锴，等. 网格尺度、时间步长和颗粒堆积率对射流床 CFD 模拟的影响[J]. 过程工程学报，2008，8 (6)：1057–1063.

[18] 周新宇，高金森，徐春明，等. 颗粒相壁面条件对提升管内气固流动模拟的影响[J]. 化工学报，2012，63 (4)：1063–1069.

[19] 卢竟蔓，蓝兴英，徐春明，等. 壁面条件对 FCC 颗粒湍动床气固流动影响的模拟[J]. 化学反应工程与工艺，2014，30 (1)：57–62.

[20] KONG L，ZHANG C，ZHU J. Evaluation of the effect of wall boundary conditions on numerical simulations of circulating fluidized beds[J]. Particuology，2014，13，114–123.

[21] LAN X，XU C，GAO J，et al. Influence of solid-phase wall boundary condition on CFD simulation of spouted beds[J]. Chem Eng Sci，2012，69 (1)：419–430.

(C)1994-2023 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net