

DOI: 10.11949/j.issn.0438-1157.20190016

基于EMMS介尺度模型的双分散鼓泡流化床的模拟

佟颖^{1,2}, Ahmad Nouman¹, 鲁波娜^{1,2,3}, 王维^{1,2}

(¹ 中国科学院过程工程研究所多相复杂系统国家重点实验室, 北京 100190; ² 中国科学院大学中丹学院, 北京 100049;
³ 中国科学院洁净能源创新院, 辽宁 大连 116023)

摘要: 双分散气固鼓泡流化床中颗粒通常具有不同粒径或密度, 导致产生颗粒偏析等现象, 影响传递和反应行为。颗粒分离和混合与气泡运动密不可分, 其中相间曳力起关键作用。最近 Ahmad 等提出了一种基于气泡结构的双分散介尺度曳力模型, 能成功预测双分散鼓泡流化床的床层膨胀系数。本研究耦合该曳力模型与连续介质方法, 模拟了两种不同的双分散鼓泡流化床, 通过分析不同流化状态下的气泡运动、颗粒浓度比的轴向分布等参数, 进一步检验模型的适用性。研究表明, 当双分散颗粒处于完全流化状态时, 耦合双分散介尺度曳力模型可合理预测不同颗粒的分离现象; 而其处于过渡流化状态时, 新曳力模型和传统模型均无法获得合理结果, 此时调节固固曳力可改进模拟结果。

关键词: 双分散颗粒; 流化床; 介尺度; 曳力; 计算流体力学; EMMS

中图分类号: TQ 021.1; O 359

文献标志码: A

文章编号: 0438-1157 (2019) 05-1682-11

Numerical investigation of bubbling fluidized bed with binary particle mixture using EMMS mesoscale drag model

TONG Ying^{1,2}, AHMAD Nouman¹, LU Bona^{1,2,3}, WANG Wei^{1,2}

(¹ State Key Laboratory of Multiphase Complex Systems, Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China; ² Sino-Danish College, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China; ³ Dalian National Laboratory for Clean Energy, Dalian 116023, Liaoning, China)

Abstract: Gas-solid bubbling fluidized beds have various industrial applications. The particles involved in practical applications usually display polydisperse characteristics (having different diameter or densities), resulting in segregation phenomena and consequently influencing flow hydrodynamics and reaction performance. Particle separation and mixing are inseparable from bubble motion, where interphase drag plays a key role. Recently, Ahmad *et al.* proposed a bubble-based mesoscale drag considering the effect of bidisperse features which is able to predict the bed expansion of binary bubbling fluidized beds. In this study, in order to investigate the applicability of the new drag model, two bubbling fluidized beds with different binary particle mixtures are simulated using the combination of the new drag model and the continuum model. Then, the bubble motion and axial profiles of jetsam volume ratio under two different fluidization states are mainly analyzed. It is found that the new drag model can predict well the particle segregation and mixing behaviors when the binary particles are fluidized completely.

收稿日期: 2019-01-07 修回日期: 2019-02-22

通信作者: 鲁波娜(1979—), 女, 博士, 副研究员, bnlu@ipe.ac.cn

第一作者: 佟颖(1993—), 女, 硕士研究生, ttongying@126.com

基金项目: 国家自然科学基金项目(21576263, 21625605, 91834302); 中国科学院洁净能源先导科技专项(XDA21030700); 中国科学院青年创新促进会项目(2015033)

引用本文: 佟颖, Ahmad Nouman, 鲁波娜, 王维. 基于EMMS介尺度模型的双分散鼓泡流化床的模拟[J]. 化工学报, 2019, 70(5): 1682–1692

Citation: TONG Ying, AHMAD Nouman, LU Bona, WANG Wei. Numerical investigation of bubbling fluidized bed with binary particle mixture using EMMS mesoscale drag model[J]. CIESC Journal, 2019, 70(5): 1682–1692

However, when the binary particles are fluidized at the transition state, the new drag model shows poor predictions, and the solid-solid drag plays a notable role in improving the prediction.

Key words: binary particle mixture; fluidized bed; mesoscale; drag; CFD; EMMS

引言

气固鼓泡流化床在化工、能源等领域具有广泛应用,如烯烃聚合、煤/生物质燃烧、化学链燃烧、矿石焙烧等。实际应用中的颗粒通常具有多分散性(涉及不同颗粒尺寸或密度),导致床内出现颗粒分离现象^[1-6],影响了相间动量传递和反应行为。

在鼓泡流化床中,颗粒的分离和混合与气泡运动密切相关。颗粒在气泡的带动下围绕其周围运动,随后进入尾涡发生混合。随着气泡上升,部分颗粒从尾涡脱落进入乳化相,其余颗粒继续跟随直到气泡在床层表面破碎被抛入自由区,颗粒分离随之发生^[7]。在这个过程中,沉降颗粒称为“沉料”(jetsam),而上浮颗粒称为“浮料”(flotsam)^[6]。一般来说,大而重的颗粒倾向于聚集在床层底部,而小而轻的颗粒易浮于床层上部。这种由颗粒物性差异引起的分离现象更多地发生在低速流化床(如鼓泡床),而在高速流化床中颗粒混合相对较好^[8]。深入理解多分散流态化中的颗粒分离和混合行为对于反应器的优化设计至关重要。

近年来,随着多相流理论和计算流体力学(CFD)技术的迅速发展,特别是介尺度理论的兴起,使得CFD成为研究多相复杂流动的强大工具。在各种模拟方法中,连续介质模型(又称多流体模型)鉴于其较少的计算量被广泛用于工程计算。而在模拟气固流动时,曳力对于准确捕捉气泡等介尺度结构起到关键作用。van Wachem等^[7]指出,对于双分散体系,在气速较低时气固曳力对颗粒分离起主导作用。在过去的十几年中,基于能量最小多尺度模型(EMMS)的介尺度曳力模型已被成功用于快速床反应器的模拟^[9-11]。随后Shi等^[12-13]采用气泡取代模型中的颗粒团聚物,发展了适合低速流化床的EMMS-bubbling模型。上述介尺度曳力模型都基于均一颗粒的流态化系统,由于单分散和多分散颗粒的流态化特征具有显著区别^[14],因而有必要在模型中考虑颗粒的多分散性。最近,Ahmad等^[15-16]在EMMS-bubbling模型的基础上开发了一种基于双分散颗粒鼓泡流化床的EMMS曳力模型。在稳态条件下,计算发现^[15]该模型可准确预测单分散和双分散

鼓泡流化床的床层气含率等宏观物理量,而它能否预测双分散流态化过程中的颗粒分散和混合行为还需结合CFD进行广泛验证。

本文尝试耦合该曳力模型与连续介质方法,模拟两种不同的双分散鼓泡流化床。通过分析不同流化阶段时的气泡运动、颗粒浓度比的轴向分布等参数,探讨双分散EMMS曳力模型的适用性。

1 数学模型

1.1 控制方程

本模拟采用连续介质模型描述各相运动。连续介质方法假设控制体微元内的流体和颗粒是连续且相互间可完全渗透的,建立每一相的瞬时、局部的守恒方程和相界面的间断关系,然后采用某种平均方法得到两相流守恒方程和相间作用的表达式。不同推导过程的差异主要体现在平均的方式、各种表面作用和相间作用上^[17]。下面是最常用的连续介质多流体模型的控制方程。

连续性方程

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \mathbf{u}_g) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_{sq} \rho_{sq}) + \nabla \cdot (\varepsilon_{sq} \rho_{sq} \mathbf{u}_{sq}) = 0 \quad (2)$$

$$\varepsilon_g + \sum \varepsilon_{sq} = 1 \quad (3)$$

动量守恒方程

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g \mathbf{u}_g) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \mathbf{u}_g \mathbf{u}_g) = -\varepsilon_g \nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_g +$$

$$\varepsilon_g \rho_g \mathbf{g} - \sum \beta_q (\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_{sq}) \quad (4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_{sq} \rho_{sq} \mathbf{u}_{sq}) + \nabla \cdot (\varepsilon_{sq} \rho_{sq} \mathbf{u}_{sq} \mathbf{u}_{sq}) = -\varepsilon_{sq} \nabla p - \nabla p_{sq} +$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_{sq} + \varepsilon_{sq} \rho_{sq} \mathbf{g} + \beta_q (\mathbf{u}_g - \mathbf{u}_{sq}) + \zeta_{pq} (\mathbf{u}_{sp} - \mathbf{u}_{sq})$$

其中, $\boldsymbol{\tau}$ 是应力张量,通常采用牛顿应力形式

$$\boldsymbol{\tau}_g = \varepsilon_g \mu_g \left[\nabla \mathbf{u}_g + (\nabla \mathbf{u}_g)^T \right] - \frac{2}{3} \mu_g (\nabla \cdot \mathbf{u}_g) \mathbf{I} \quad (6)$$

$$\boldsymbol{\tau}_{sq} = \varepsilon_{sq} \mu_{sq} \left[\nabla \mathbf{u}_{sq} + (\nabla \mathbf{u}_{sq})^T \right] + \varepsilon_{sq} \left(\lambda_{sq} - \frac{2}{3} \mu_{sq} \right) \nabla \cdot \mathbf{u}_{sq} \mathbf{I} \quad (7)$$

式中,下角标g表示气相;s表示固相;q=1,2;p=2,1。

由于连续介质模型将颗粒相处理为连续相,因此引入了颗粒压力的概念,需要额外建模。从气体分子动理论发展而来的颗粒动理论(KTGF)由于其

可调参数相对较少,被认为是封闭快速颗粒流固相压力的一种较为可靠的方法^[18]。严格来说,当涉及多种颗粒时,颗粒动理论模型需考虑多种颗粒存在的影响。目前,对于双分散颗粒的模拟,文献报道的相关方法主要有三类:①将不同颗粒处理为不同的相,每一颗粒相各自采用基于均一颗粒的动理论进行描述,鉴于其收敛性好、计算便利,是目前采用较多的一种形式^[19-20],也是本模拟采用的方式;②与第一种方法类似,仍将双分散颗粒处理为两种颗粒相,颗粒动理论的推导考虑了不同颗粒间的相互作用,如 Chao 等^[21]、Lu 等^[22]发展了针对双分散颗粒的动理论模型;③将不同颗粒处理为一个混合相,即采用双流体模型描述两相运动,但颗粒动理论模型考虑了多分散性带来的影响,如 van Wachem 等^[7]的工作。

1.2 气固曳力模型

在气固流态化中,气固相间曳力的数量级远大于其他气固相间作用力(如 Basset 力、虚拟质量力等,在气固流态化模拟中往往被忽略),且在多数情况下对模拟结果起到关键作用。相比固相压力,更多研究聚焦在气固曳力的构建上。最近, Ahmad 等^[15-16]针对双分散颗粒流化系统提出了一种考虑介尺度结构的气固曳力模型,称为双分散 EMMS-bubbling 模型,其曳力系数的计算公式如下

$$\beta_q^E = \frac{\varepsilon_g^2}{U_{\text{slip},q}} \left[(1-f) \varepsilon_{\text{slq}} (\rho_{\text{slq}} - \rho_g) (a_{\text{slq}} + g) + f \varepsilon_{\text{scq}} (\rho_{\text{scq}} - \rho_g) (a_{\text{scq}} + g) \right] \quad (8)$$

式中, $U_{\text{slip},q}$ 是气相和颗粒相 q 的表观滑移速度, f 表示密相体积分数, ε_{sl} 和 ε_{sc} 分别表示稀相和密相内的颗粒体积分数, a_{sl} 和 a_{sc} 分别是稀相和密相动量方程中的惯性项。引入 H_d 表示介尺度结构对曳力系数的影响,定义为

$$H_{dq} = \frac{\beta_q^E}{\beta_{\text{wyq}}} \quad (9)$$

其中, β_{wyq} 为 Wen 和 Yu 公式^[23]

$$\beta_{\text{wyq}} = \frac{3}{4} C_{\text{d0q}} \frac{\varepsilon_g \varepsilon_{\text{sq}} \rho_g |u_g - u_{\text{sq}}|}{d_{\text{sq}}} \varepsilon_g^{-2.65} \quad (10)$$

模型的具体公式、相关算法和更具体的介绍可参考 Ahmad 等^[15-16]的工作。在计算时,双分散流态化系统的物性和操作参数作为已知条件,通过优化算法得到不同颗粒的 H_d 与空隙率的关系式。本研究采用的 H_d 关联式列于附录(表 A1 和表 A2)。

本研究还采用 Gidaspow 模型^[24]作为对比。

Gidaspow 模型结合了适用于均匀分布的 Ergun 方程^[25]($\varepsilon_g \leq 0.8$)与从散式流化床压降数据关联得到的 Wen 和 Yu 公式^[23]($\varepsilon_g > 0.8$)。若将该模型推广至双分散颗粒系统,相当于每一颗粒相均认为是均匀流化的,不考虑两种颗粒相的相互影响,其表达式如下^[26]

$$\beta_q^G = \begin{cases} \frac{150 \varepsilon_{\text{sq}} (1 - \varepsilon_g) \mu_g}{\varepsilon_g d_{\text{sq}}^2} + \frac{1.75 \varepsilon_{\text{sq}} |u_g - u_{\text{sq}}| \rho_g}{d_{\text{sq}}} & \varepsilon_g \leq 0.8 \\ \frac{3}{4} C_{\text{d0q}} \frac{\varepsilon_g \varepsilon_{\text{sq}} \rho_g |u_g - u_{\text{sq}}|}{d_{\text{sq}}} & \varepsilon_g^{-2.65} \varepsilon_g > 0.8 \end{cases} \quad (11)$$

其中, C_{d0q} 的表达式为

$$\begin{cases} C_{\text{d0q}} = \frac{24(1 + 0.15 Re_{\text{sq}}^{0.687})}{Re_{\text{sq}}} & Re_{\text{sq}} < 1000 \\ C_{\text{d0q}} = 0.44 & Re_{\text{sq}} \geq 1000 \end{cases} \quad (12)$$

其中

$$Re_{\text{sq}} = \frac{\varepsilon_g \rho_g |u_g - u_{\text{sq}}| d_{\text{sq}}}{\mu_g}$$

1.3 固固相间作用

由于多流体模型将不同颗粒相分别处理为流体相,因此与气固相间作用类似,不同固相间也存在相互作用,其中相互作用系数用 ζ 表示。Arastoopour 等^[27]认为,固固相间作用对颗粒分离也起到重要作用。他们基于实验数据关联得到一个适合稀相输送的固固相间系数表达式。随后, Syamlal^[28]、Gidaspow 等^[29]相继开展了固固相间作用力的研究, Chao^[30]在 Syamlal 模型的基础上考虑长程颗粒间摩擦作用提出了一个半经验的固固曳力表达式。到目前为止,固固曳力的研究仍停留在半经验半理论的水平,缺乏严密的理论推导。本文采用文献报道中常用的 Syamlal-O'Brien symmetric 模型^[31],其表达式如下

$$\zeta_{pq} = \frac{3(1 + e_{pq}) \left(\frac{\pi}{2} + C_{\text{fr}} \frac{\pi^2}{8} \right) \varepsilon_{\text{sp}} \varepsilon_{\text{sq}} \rho_{\text{sp}} \rho_{\text{sq}} (d_{\text{sp}} + d_{\text{sq}})^2 g_{0,pq}}{2\pi(\rho_{\text{sp}} d_{\text{sp}}^3 + \rho_{\text{sq}} d_{\text{sq}}^3)} \times |u_{\text{sp}} - u_{\text{sq}}| \quad (13)$$

式中, g_0 表示径向分布函数, e_{pq} 表示恢复系数。 C_{fr} 表示不同颗粒间的摩擦系数,取决于颗粒材料、表面光滑程度和形状。它在 Ansys®Fluent 的多相流求解器中的默认值为 0,因为传统的颗粒动理论假设颗粒是非塑性的光滑球体(无摩擦)。实际上,摩擦在颗粒长期接触时往往不可忽略。

2 模拟设置

本模拟采用两种不同的双分散流态化系统进行模型验证:①系统1的实验数据来自 Marzocchella 等^[32]的实验,采用石英砂和玻璃珠颗粒,两者粒径不同(分别为125、500 μm),密度相近,其中玻璃珠颗粒倾向于聚集在下层,称为沉料,石英砂颗粒倾向于悬浮在上层,称为浮料,两者的颗粒直径比 $d_2/d_1 = 4$ (下角标1、2分别表示浮料和沉料);②系统2的实验数据来自 Olivieri 等^[33]的实验,采用石英砂颗粒和硅胶,两者粒径分别为125、375 μm ,密度分别为2600、600 $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$,两种颗粒的粒径比和密度比分别为 $d_2/d_1 \approx 0.33$ 和 $\rho_2/\rho_1 \approx 4.3$,更详细的物性列于表1。

表1 两个双分散流态化系统的物性参数

Table 1 Material properties used in two systems of binary particle mixtures

参数	石英砂 (silica sand)	玻璃珠 (glass bead)	硅胶 (silica gel)
系统1	√(浮料)	√(沉料)	
系统2	√(沉料)		√(浮料)
Sauter平均粒径/ μm	125	500	375
球形度	≈ 1	1	≈ 1
密度/ $(\text{kg}\cdot\text{m}^{-3})$	2600	2540	600
Geldart分类	B	B	A-B
终端速度/ $(\text{m}\cdot\text{s}^{-1})$	0.80	4.10	1.25
最小流态化速度/ $(\text{m}\cdot\text{s}^{-1})$	0.022	0.23	0.032

图1描绘了两个系统采用的流化床几何构体和尺寸。Joseph 等^[8]和 Marzocchella 等^[32]指出,不同于单分散颗粒的流化过程,双分散颗粒的流化依次经历固定床、过渡流化状态和完全流化状态。为验证双分散 EMMS-bubbling 模型在不同流化阶段的适用性,本模拟分别选取了处于过渡流化和完全流化状态时的操作条件进行模型验证。对于系统1,选取了表观气速为 $0.07 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 和 $0.09 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 的两个操作点($0.07 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 处于过渡流化区域, $0.09 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 处于完全流化区域),初始堆料高度为0.135 m,沉料的体积比 $X_{20}=0.5$ (X_2 =沉料颗粒体积/沉料和浮料的体积分数之和,下角标0表示初始状态,下角标2表示沉料);对于系统2,选取了表观气速为 $0.032 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 和 $0.152 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 的两个操作点($0.032 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 处于过渡流化区域, $0.152 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 处于完全流化区域),初始堆料高度为0.4 m,沉料的体

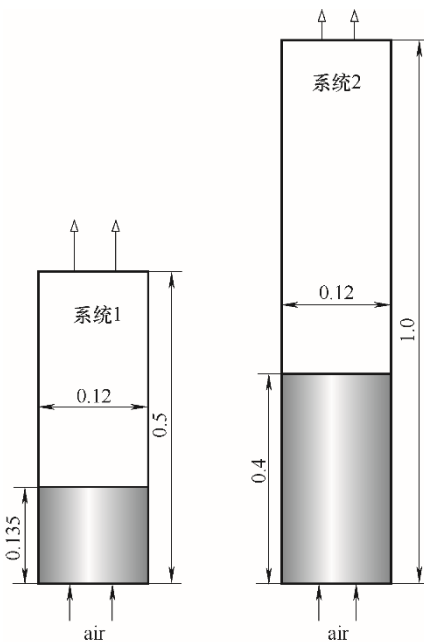


图1 模拟采用的气固流化床几何构体(单位:m)

Fig.1 Schematic diagram of simulated gas-solid fluidized beds (unit: m)

表2 两个双分散流态化系统的操作条件

Table 2 Operating conditions for two systems of binary particle mixtures

操作参数	系统1	系统2
颗粒堆料量/kg	2.8	2.85
沉料的初始体积比 X_{20}	0.5	0.2
初始堆料高度/m	0.135	0.4
表观气速/ $(\text{m}\cdot\text{s}^{-1})$	0.07, 0.09	0.032, 0.152

积比 $X_{20}=0.2$ 。表2列出了本模拟所采用的操作条件。

采用 Gambit®2.4 对上述两个流化床进行了几何构体和均匀网格划分。由于二维模拟可得到与三维模拟接近的流动结果^[34],为节省计算量,本研究均采用二维模拟。流化床底部设为均匀进气,顶部设为压力出口,壁面条件设为无滑移。初始时,两种颗粒均匀混合,模拟时间步长为0.0001 s。详细的模拟设置列于表3,相关公式见文献[18]。

3 结果讨论

3.1 网格无关性测试

选取系统1进行了网格无关性测试。选取的三组网格尺寸分别为 $5 \text{ mm} \times 5 \text{ mm}$ 、 $3 \text{ mm} \times 3 \text{ mm}$ 和 $2 \text{ mm} \times 2 \text{ mm}$,对应网格数分别为2400、6680和15000

表 3 模拟的具体设置

Table 3 Simulation settings

Parameter	Specification
transient formulation	second-order implicit
pressure-velocity coupling	phase coupled SIMPLE
gradient discretization	green-Gauss cell based
momentum discretization	second-order upwind
volume fraction discretization	quick
granular temperature	algebraic
granular viscosity	Syamlal-O'Brien
granular bulk viscosity	Lun-et-al
frictional viscosity	Schaeffer
angle of internal friction	30
frictional pressure	based-ktgf
frictional modulus	derived
friction packing limit	0.5
solid pressure	Lun-et-al
radial distribution	Ma-Ahmadi
elasticity modulus	derived
gas-solid drag	binary EMMS-bubbling or Gidaspow model
solid-solid interaction	Syamlal-O'Brien symmetric model
packing limit	0.62
restitution coefficient	0.9
physical time step	0.0001 s

个。表观气速为 $0.09 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, 气固曳力采用 Gidaspow 模型, 固固相间作用力采用 Syamlal - O'Brien

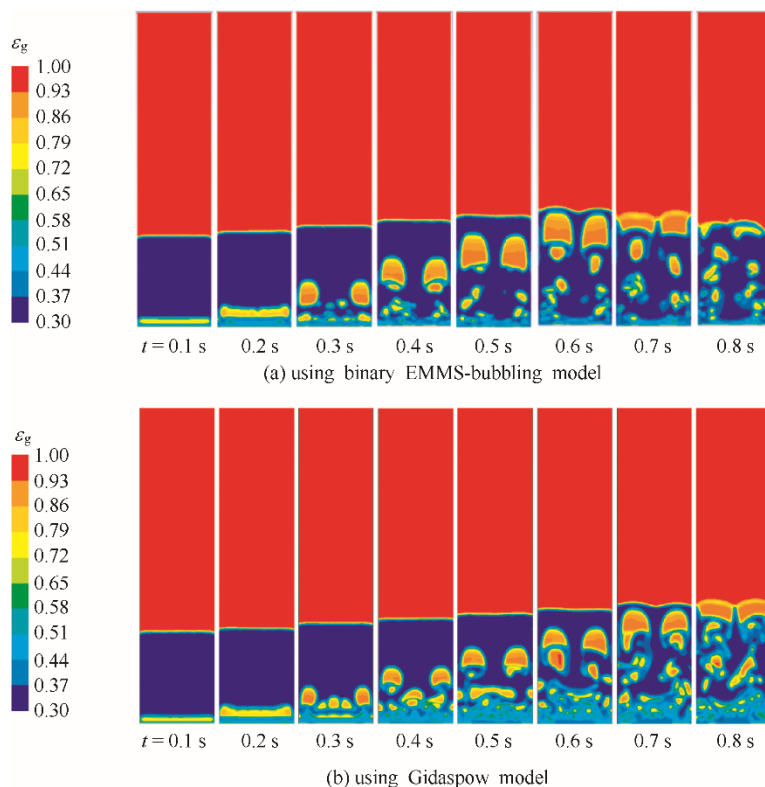
symmetric 模型。初始时, 两种颗粒在床内均匀分布。随着计算推进, 床层逐渐膨胀, 两种颗粒开始分离, 跟踪床内某个高度(这里选为无量纲高度 $H=0.8$)的 X_2 , 待其达到稳定后, 再继续计算 10 s 进行时均数据统计。表 4 列出了时均全床平均气含率以及 $H=0.8$ 时对应的 X_2 。可看到, 随着网格的减小, 全床平均气含率和 X_2 均发生变化, 但变化幅度趋于减小。在以下模拟中, 选择的网格尺寸为 $3 \text{ mm} \times 3 \text{ mm}$ 。

表 4 不同网格下的全床平均气含率和某截面高度的 X_2 Table 4 Average gas volume fraction and X_2 at height of 0.8 under three grid resolutions

网格尺寸	全床平均气含率	$H=0.8$ 对应的 X_2
5 mm × 5 mm	0.8063	0.4460
3 mm × 3 mm	0.8077	0.4572
2 mm × 2 mm	0.8081	0.4610

3.2 床层膨胀过程

图 2 比较了采用两种不同曳力模型时系统 1 在表观气速 $0.09 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ 时的床层膨胀过程。可看到, 气泡先在入口附近处生成, 相对较小。随着时间的推进, 气泡逐渐上升, 同时体积不断增大, 床层高度也随之上升。气泡在到达床层表面时发生破裂, 床层

图 2 系统 1 的气含率分布的演化 ($U_g=0.09 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$)Fig.2 Evolution of distribution of gas holdup for system 1 ($U_g=0.09 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$)

高度随后下降,逐渐趋于稳定。相比采用Gidaspow模型预测的膨胀过程,采用双分散EMMS-bubbling模型的算例更早地捕捉到气泡的生成和上升,在0.7 s时大气泡在床层表面发生了破碎,而采用Gidaspow模型的算例在0.8 s时才捕捉到气泡破碎现象。

图3展示了系统达到稳定时的气含率分布情况。由图3看到,采用Gidaspow模型预测得到的床层膨胀高度均高于采用双分散EMMS-bubbling模型预测的高度,这是因为Gidaspow模型忽略了介尺度结构的影响,过高预测了气固相间作用力,从而导致床层膨胀高度预测偏高。

3.3 完全流化状态下的颗粒分离

气泡运动造成不同颗粒的分离,图4展示了 $U_g=0.09 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 时系统1内两种颗粒空间分布的演化过程。由实验获知,系统1在 $U_g=0.09 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 时处于完全流化状态。从图4看到,当气体通入后,小颗粒率先离开床层底部,在气泡的携带下逐渐在床层上部聚集。而大颗粒在0.7 s时仍有少量堆积在床层底部壁面附近处于未流化状态,直到1 s时才完全流化。由上可知,在表观气速 $0.09 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 的条件下,尽管两种颗粒最后都达到完全流化状态,但小颗粒的流化先于大颗粒。

随后统计了在完全流化状态下两个双分散系统的 X_2 的轴向分布。如图5所示,其中横向坐标 X_2 表示沉降颗粒与全部颗粒的体积比(图中竖直虚线为 X_2 的初值,可表示均匀混合状态)。从图中可看到,在双分散系统处于完全流化状态时,采用双分散EMMS-bubbling模型得到的 X_2 轴向分布与实验吻合很好,而采用Gidaspow模型预测得到的 X_2 轴向

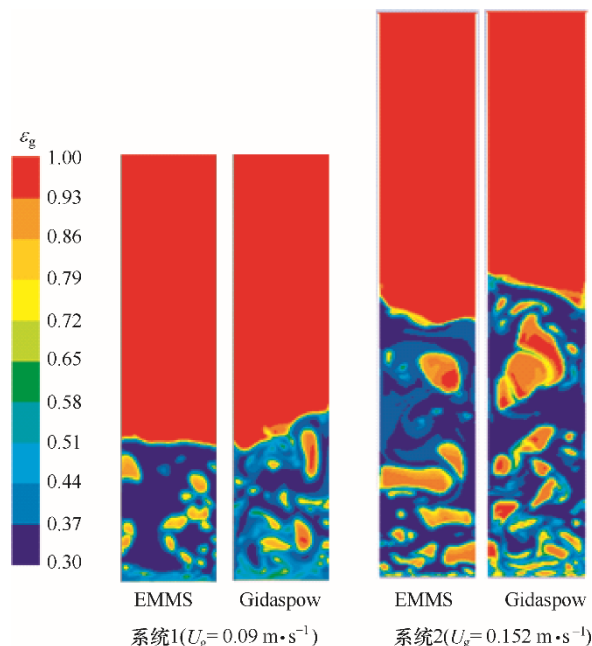


图3 系统稳定后采用不同曳力模型得到的气含率分布

Fig.3 Distribution of gas holdup for systems 1 and 2 when reaching quasi-steady state using both gas-solid drag models

分布曲线更接近于初始分布曲线,与实验值有明显偏差。

3.4 过渡流化状态下的颗粒分离

当上述两个系统的操作气速分别降至 0.07 、 $0.032 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 时,由实验可知它们都处于过渡流化状态。图6展示了过渡流化状态下两个系统的沉降颗粒体积比 X_2 的轴向分布,可看到,采用双分散EMMS-bubbling模型和Gidaspow模型得到的 X_2 轴向分布曲线都与实验值偏差较大。相比较于实验值,模拟值与均匀混合线更为接近,尤其对于系统1。

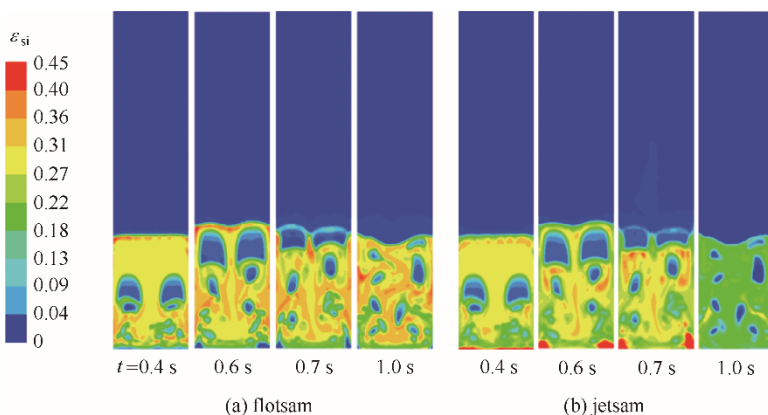


图4 系统1的固相体积分数的演化过程($U_g=0.09 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$)

Fig.4 Evolution of distribution of solid volume fraction for system 1 ($U_g=0.09 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$)

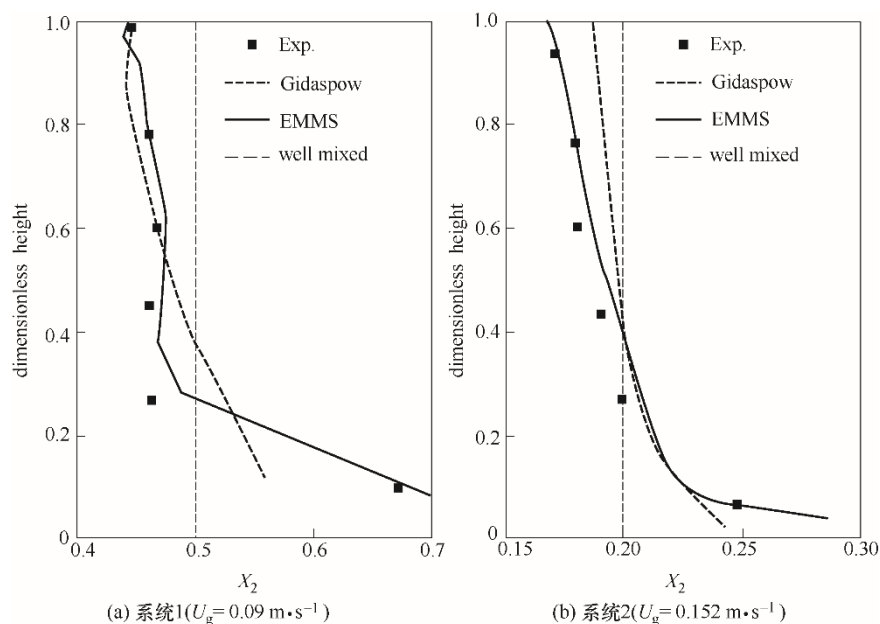


图 5 完全流化状态下沉降颗粒体积比的轴向分布

Fig.5 Axial profiles of volume ratio of jetsam fluidized completely

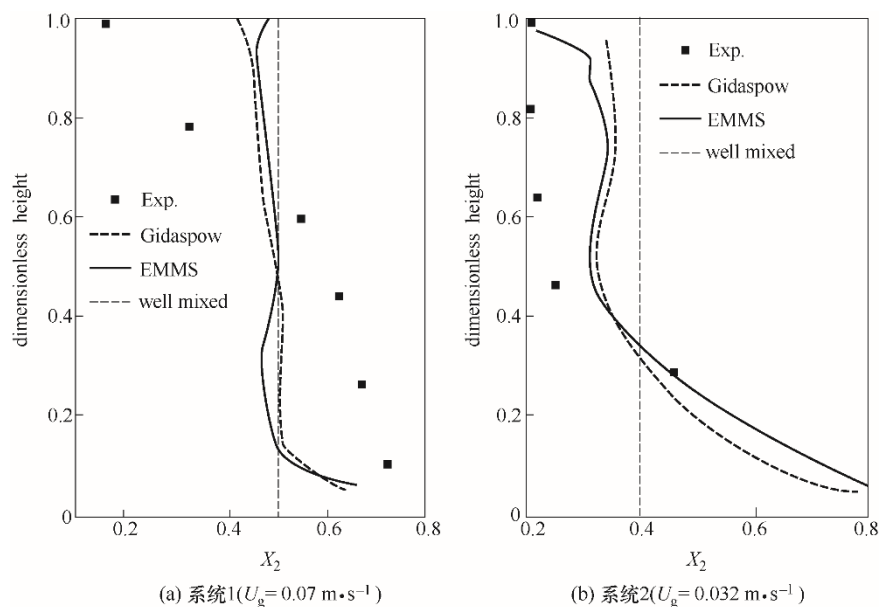


图 6 过渡流化状态下沉降颗粒体积比的轴向分布

Fig.6 Axial profiles of volume ratio of jetsam fluidized at transition state

已有研究表明^[7-8],除气固曳力外,固固相互作用力对颗粒分离也起着重要作用。上述模拟中采用是 Syamlal-O'Brien symmetric 固固作用力模型。在该模型前乘以校正系数 K ,通过调节 K 值改变固固作用力,考察其对颗粒分离行为预测的影响。

首先考察了系统 1 ($U_g = 0.07 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$),气固曳力模型采用双分散 EMMS-bubbling 模型,而固固相互作用系数的校正系数 K 分别设为 0、0.001、0.005、1 和 4,得到的 X_2 轴向分布如图 7 所示。从图中可看到,随

着 K 值的不断增大, X_2 轴向分布曲线逐渐趋于完全混合线,即固固间作用力增强,不同颗粒容易混合;随着 K 值的不断减小,颗粒分离明显,当 $K=0$ 时,意味着两种颗粒间无相互作用力,此时在流化床上部全部是上浮颗粒 ($X_2=0$),流化床的底部全部是沉降颗粒 ($X_2=1$)。上述结果表明,在过渡流化区,固固相互作用力对不同颗粒的分离和混合行为的预测起到重要作用。

此外,可以发现,当 $K=0.005$ 时,模拟结果与实

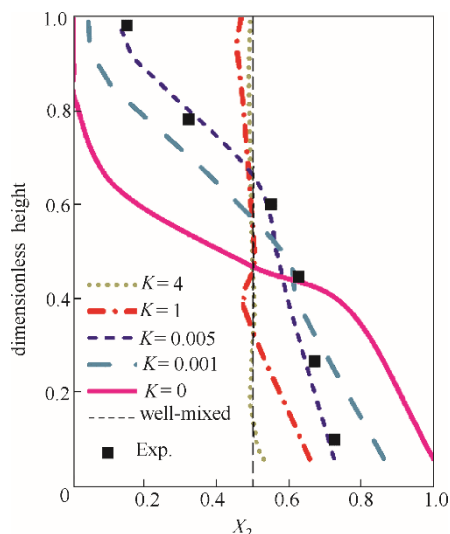


图7 不同 K 值下的沉降颗粒体积比 X_2 的轴向分布
(系统1: $U_g=0.07 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$)

Fig.7 Axial profiles of volume ratio of jetsam
(system 1: $U_g=0.07 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$)

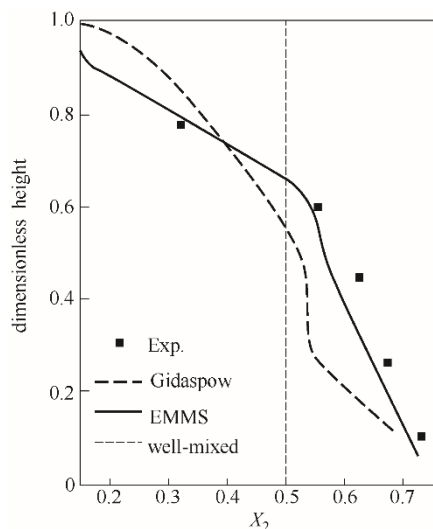


图8 采用不同气固曳力模型的 X_2 轴向分布
(系统1: $U_g=0.07 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, $K=0.005$)

Fig.8 Comparison of axial profiles of volume ratio of jetsam
using different gas-solid drag models
(system 1: $U_g=0.07 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$, $K=0.005$)

验数据最接近。此时,改变气固曳力(将双分散EMMS-bubbling模型改为Gidaspow模型),比较两者结果(图8),发现采用双分散EMMS-bubbling气固曳力模型得到的 X_2 曲线与实验值更接近。

同理,对系统2也进行了类似考察($U_g=0.032 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$),气固曳力仍采用双分散EMMS-bubbling模型,改变 K 值调节固固相互作用力。如图9所示,当 $K=0.1$ 时, X_2 的轴向分布预测值与实验数据吻合很好。该 K 值与系统1($K=0.005$)有所差异,这是因为固固

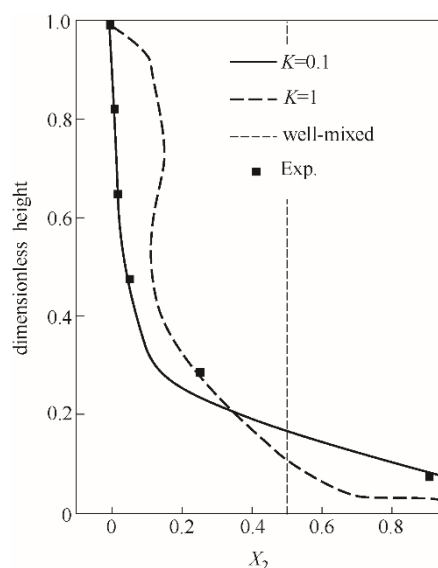


图9 不同 K 值下的沉降颗粒体积比 X_2 的轴向分布
(系统2: $U_g=0.032 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$)

Fig.9 Axial profiles of volume ratio of jetsam
(system 2: $U_g=0.032 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$)

相互作用系数依赖于颗粒物性以及颗粒组分比值。从上述结果可知,当系统处于过渡流化状态时,校正系数 K 值设成小于1时的预测值与实验相符,这是因为此时部分颗粒处于未流化状态,部分沉降颗粒未与上浮颗粒进行有效接触,而固固相互作用力的推导基于完全流化的假设,此时适当减小固固作用力有利于改进模拟结果。

4 结 论

本文耦合多流体模型和最新发展的双分散EMMS-bubbling曳力模型,模拟了两个双分散颗粒鼓泡流化床,检验了新曳力模型在不同双分散体系以及不同流化状态下的适用性,结论如下。

(1)当双分散颗粒处于完全流化状态时,采用双分散EMMS-bubbling曳力模型可合理预测两个不同双分散系统的床层膨胀过程和颗粒分离现象。而采用传统的不考虑介尺度结构影响和双分散特征的曳力模型(如Gidaspow模型)预测得到的颗粒分离行为与实验偏差大。

(2)当双分散颗粒处于过渡流化状态时,采用双分散EMMS-bubbling曳力模型和Gidaspow模型预测得到的颗粒分离行为均与实验值偏差较大。此时,调节固固相互作用系数可改变颗粒分离曲线,当其校正值小于1时,与实验值较为接近。

(3)当模拟双分散/多分散流态化系统时,需首先

判断其所处的流化状态,然后再选择相应的物理模型。本研究模拟了两个双分散颗粒流化系统(涉及A类颗粒和B类颗粒),模型是否适用于更多的颗粒组合有待进一步检验。

(4) 目前的气固曳力模型基于颗粒完全流化假设,未来还需考虑更多因素拓展其适用性。

符 号 说 明

C_{d0}	——单颗粒曳力系数
C_{fr}	——摩擦系数
d	——直径, m
e	——恢复系数
f	——密相体积分数
g_0	——径向分布函数
H_d	——非均匀结构因子
p	——压力, Pa
Re	——Reynolds 数
t	——时间, s
$U_{slip,q}$	——气相和颗粒相 q 的表观滑移速度, $m \cdot s^{-1}$
u	——真实速度, $m \cdot s^{-1}$
X_2	——沉降颗粒体积占沉料和浮料颗粒总体积的比例
β	——曳力系数, $kg \cdot (m^3 \cdot s)^{-1}$
ε	——体积分数
ζ	——固固曳力系数
μ	——动力黏度系数, $Pa \cdot s$
ρ	——密度, $kg \cdot m^{-3}$
τ	——应力张量, Pa
下角标	
c	——密相
f	——稀相
g	——气相
q,p	——第 q, p 种组分
s	——固相

参考文献

- [1] Formisani B, Girimonte R, Vivacqua V. Fluidization of mixtures of two solids: a unified model of the transition to the fluidized state[J]. *AIChE Journal*, 2013, **59**(3):729–735.
- [2] Geldart D, Baeyens J, Pope D J, et al. Segregation in beds of large particles at high velocity[J]. *Powder Technology*, 1981, **30**(2): 195–205.
- [3] Grace J R, Sun G. Influence of particle size distribution on the performance of fluidized bed reactors[J]. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 2010, **69**(5): 1126–1134.
- [4] Hoffmann A C, Janssen L P B M, Prins J. Particle segregation in fluidised binary mixtures[J]. *Chemical Engineering Science*, 1993, **48**(9): 1583–1592.
- [5] Lu H L, Gidaspow D. Hydrodynamics of binary fluidization in a riser: CFD simulation using two granular temperatures[J]. *Chemical Engineering Science*, 2003, **58**(16):3777–3792.
- [6] Rowe P N. A preliminary quantitative study of particle segregation in gas fluidised beds—binary systems of near spherical particles[J]. *Transactions of the Institution of Chemical Engineers*, 1972, **50**: 324–333.
- [7] van Wachem B G M, Schouten J C, van den Bleek C M, et al. CFD modeling of gas–fluidized beds with a bimodal particle mixture[J]. *AIChE Journal*, 2001, **47**(6):1292–1302.
- [8] Joseph G G, José L, Hrenya C M, et al. Experimental segregation profiles in bubbling gas fluidized bed[J]. *AIChE Journal*, 2007, **53** (11):2804–2813.
- [9] Lu B, Wang W, Li J. Searching for a mesh-independent sub-grid model for CFD simulation of gas–solid riser flows[J]. *Chemical Engineering Science*, 2009, **64**(15):3437–3447.
- [10] Wang W, Li J. Simulation of gas–solid two-phase flow by a multi-scale CFD approach –extension of the EMMS model to the sub-grid level[J]. *Chemical Engineering Science*, 2007, **62**(1 / 2): 208–231.
- [11] Yang N, Wang W, Ge W, et al. CFD simulation of concurrent-up gas – solid flow in circulating fluidized beds with structure-dependent drag coefficient[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2003, **96**(8): 71–80.
- [12] Hong K, Shi Z, Wang W, et al. A structure-dependent multi-fluid model (SFM) for heterogeneous gas–solid flow[J]. *Chemical Engineering Science*, 2013, **99**(9): 191–202.
- [13] Hong K, Shi Z, Ullah A, et al. Extending the bubble-based EMMS model to CFB riser simulations[J]. *Powder Technology*, 2014, **266** (12): 424–432.
- [14] Chew J W, Hays R, Findlay J G, et al. Cluster characteristics of Geldart group B particles in a pilot-scale CFB riser (I): Monodisperse systems[J]. *Chemical Engineering Science*, 2012, **68** (1):72–81.
- [15] Ahmad N, Tian Y, Lu B, et al. Extending the EMMS/bubbling model to fluidization of binary particle mixture: formulation and steady-state validation[J]. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 2019, **27**(1): 54–62.
- [16] Ahmad N. Mesoscale modeling and CFD simulation of gas–fluidized bed with binary particle mixture [D]. Beijing: University of Chinese Academy of Sciences, 2018.
- [17] 刘大有: 二相流体动力学[M]. 北京: 高等教育出版社, 1993. Liu D Y. Fluid Dynamics of Two-phase Systems [M]. Beijing: Higher Education Press, 1993.
- [18] Gidaspow D. Multiphase Flow and Fluidization: Continuum and Kinetic Theory Descriptions [M]. Boston: Academic Press, 1994.
- [19] 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 Technology*, 2015, **280**: 154–172.
- [20] Tagliaferri C, Mazzei L, Lettieri P, et al. CFD simulation of bubbling fluidized bidisperse mixtures: effect of integration methods and restitution coefficient[J]. *Chemical Engineering Science*, 2013, **102**(3): 324–334.
- [21] Chao Z, Wang Y, Jakobsen J P, et al. Derivation and validation of a binary multi-fluid Eulerian model for fluidized beds[J]. *Chemical Engineering Science*, 2011, **66**: 3605–3616.
- [22] Lu H L, Liu W T, Bie R S, et al. Kinetic theory of fluidized binary

- granular mixtures with unequal granular temperature[J]. *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*, 2000, **284**(1/2/3/4): 265–276.
- [23] Wen C Y, Yu Y H. Mechanics of fluidization[J]. *Chemical Engineering Progress Symposium Series*, 1966, **62**(62): 100–111.
- [24] Gidaspow D. Hydrodynamics of fluidization and heat transfer: supercomputer modeling[J]. *Applied Mechanics Reviews*, 1986, **39**(123): 1–22.
- [25] Ergun S. Fluid flow through packed columns[J]. *Chemical Engineering and Processing*, 1952, **48**(2): 89–94.
- [26] Bell R A. Numerical modelling of multi-particle flows in bubbling gas-solid fluidised beds [D]. Melbourne: Swinburne University of Technology, 2000.
- [27] Arastoopour H, Wang C H, Weil S A. Particle-particle interaction force in a dilute gas-solid system[J]. *Chemical Engineering Science*, 1982, **37**(9): 1379–1386.
- [28] Syamlal M. Multiphase hydrodynamics of gas-solid flow[D]. Chicago: Illinois Institute of Technology, 1985.
- [29] Gidaspow D, Ding J, Jayaswal U K. Multiphase Navier-Stokes equation solver[C]// *Numerical Methods for Multiphase Flow*. ASME, New York, 1990, **91**: 47–56.
- [30] Chao Z, Wang Y, Jakobsen J P, et al. Investigation of the particle-particle drag in a dense binary fluidized bed[J]. *Powder Technology*, 2012, **224**: 311–322.
- [31] Syamlal M. The particle-particle drag term in a multiparticle model of fluidization[R]. National Technical information service, Springfield, VA. DOE / MC / 21353–2373, NTIS / DE87006500, 1987.
- [32] Marzocchella A, Salatino P, Pastena V D, et al. Transient fluidization and segregation of binary mixtures of particles[J]. *AIChE Journal*, 2000, **46**(11): 2175–2182.
- [33] Olivieri G, Marzocchella A, Salatino P. Segregation of fluidized binary mixtures of granular solids[J]. *AIChE Journal*, 2004, **50**(12): 3095–3106.
- [34] Li T, Pannala S, Shahnam M. CFD simulations of circulating fluidized bed risers (II): Evaluation of differences between 2D and 3D simulations[J]. *Powder Technology*, 2014, **265**: 13–22.

附 录

表A1 系统1的非均匀结构因子 H_d

Table A1 Heterogeneity indexes for system 1

公式	范围
$U_g=0.07 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$	
$H_{d1} = \begin{cases} 1 & 0.4 \leq \varepsilon_g < 0.4098 \\ 0.1416 + \frac{1.0033}{1 + \left(\frac{\varepsilon_g}{0.4378}\right)^{24.9252}} & 0.4098 \leq \varepsilon_g < 0.5 \\ -0.0655 + \frac{0.2620}{1 + \left(\frac{\varepsilon_g}{0.6719}\right)^{7.5982}} & 0.5 \leq \varepsilon_g < 0.69 \\ 9.3577 - \frac{9.3565}{1 + \left(\frac{\varepsilon_g}{2.2117}\right)^{4.7642}} & 0.69 \leq \varepsilon_g < 0.9997 \\ 1 & 0.9997 \leq \varepsilon_g \leq 1 \end{cases}$	
$H_{d2} = \begin{cases} 1 & 0.4 \leq \varepsilon_g < 0.4017 \\ -0.4785 + \frac{5.9240}{1 + \left(\frac{\varepsilon_g}{0.3393}\right)^{12.2579}} & 0.4017 \leq \varepsilon_g < 0.4401 \\ 196.3327 - \frac{196.3325}{1 + \left(\frac{\varepsilon_g}{3.0182}\right)^{4.6635}} & 0.4401 \leq \varepsilon_g < 0.9997 \\ 1 & 0.9997 \leq \varepsilon_g \leq 1 \end{cases}$	
$U_g=0.09 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$	
$H_{d1} = \begin{cases} 1 & 0.4 \leq \varepsilon_g < 0.4098 \\ 0.1416 + \frac{1.0033}{1 + \left(\frac{\varepsilon_g}{0.4378}\right)^{24.9252}} & 0.4098 \leq \varepsilon_g < 0.5 \\ -0.0655 + \frac{0.2620}{1 + \left(\frac{\varepsilon_g}{0.6719}\right)^{7.5982}} & 0.5 \leq \varepsilon_g < 0.69 \\ 9.3577 - \frac{9.3565}{1 + \left(\frac{\varepsilon_g}{2.2117}\right)^{4.7642}} & 0.69 \leq \varepsilon_g < 0.9997 \\ 1 & 0.9997 \leq \varepsilon_g \leq 1 \end{cases}$	
$H_{d2} = \begin{cases} 1 & 0.4 \leq \varepsilon_g < 0.4017 \\ -0.4785 + \frac{5.9240}{1 + \left(\frac{\varepsilon_g}{0.3393}\right)^{12.2579}} & 0.4017 \leq \varepsilon_g < 0.4401 \\ 82.1341 - \frac{82.1335}{1 + \left(\frac{\varepsilon_g}{2.6842}\right)^{4.6842}} & 0.4401 \leq \varepsilon_g < 0.9997 \\ 1 & 0.9997 \leq \varepsilon_g \leq 1 \end{cases}$	

表A2 系统2的非均匀结构因子 H_d

Table A2 Heterogeneity indexes for system 2

公式	范围
$U_g=0.032 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$	
$H_{d1} = \begin{cases} 1 & 0.4 \leq \varepsilon_g < 0.4017 \\ -0.4785 + \frac{5.9240}{1 + \left(\frac{\varepsilon_g}{0.3393}\right)^{12.2579}} & 0.4017 \leq \varepsilon_g < 0.4401 \\ 97.2668 - \frac{97.2668}{1 + \left(\frac{\varepsilon_g}{3.3502}\right)^{4.6597}} & 0.4401 \leq \varepsilon_g < 0.9997 \\ 1 & 0.9997 \leq \varepsilon_g \leq 1 \end{cases}$	
$H_{d2} = \begin{cases} 1 & 0.4 \leq \varepsilon_g < 0.41 \\ 0.0934 + \frac{1.3633}{1 + \left(\frac{\varepsilon_g}{0.4300}\right)^{19.3788}} & 0.41 \leq \varepsilon_g < 0.5 \\ -16.0489 + \frac{16.2235}{1 + \left(\frac{\varepsilon_g}{1.3583}\right)^{7.7716}} & 0.5 \leq \varepsilon_g < 0.72 \\ 17.3345 - \frac{17.334}{1 + \left(\frac{\varepsilon_g}{2.5967}\right)^{4.7052}} & 0.72 \leq \varepsilon_g < 0.9997 \\ 1 & 0.9997 \leq \varepsilon_g \leq 1 \end{cases}$	
$U_g=0.152 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$	
$H_{d1} = \begin{cases} 1 & 0.4 \leq \varepsilon_g < 0.4017 \\ -0.4785 + \frac{5.9240}{1 + \left(\frac{\varepsilon_g}{0.3393}\right)^{12.2579}} & 0.4017 \leq \varepsilon_g < 0.4401 \\ 167.8284 - \frac{167.8282}{1 + \left(\frac{\varepsilon_g}{3.0161}\right)^{4.6637}} & 0.4401 \leq \varepsilon_g < 0.9997 \\ 1 & 0.9997 \leq \varepsilon_g \leq 1 \end{cases}$	
$H_{d2} = \begin{cases} 1 & 0.4 \leq \varepsilon_g < 0.4098 \\ 0.1415 + \frac{1.0033}{1 + \left(\frac{\varepsilon_g}{0.4378}\right)^{24.9252}} & 0.4098 \leq \varepsilon_g < 0.5 \\ -0.0655 + \frac{0.2620}{1 + \left(\frac{\varepsilon_g}{0.6719}\right)^{7.5982}} & 0.5 \leq \varepsilon_g < 0.69 \\ 9.3576 - \frac{9.3565}{1 + \left(\frac{\varepsilon_g}{2.2117}\right)^{4.7642}} & 0.69 \leq \varepsilon_g < 0.9997 \\ 1 & 0.9997 \leq \varepsilon_g \leq 1 \end{cases}$	