

Coupling of coarse-grained discrete particle method and particle-in-cell method for simulation of gas–solid flow

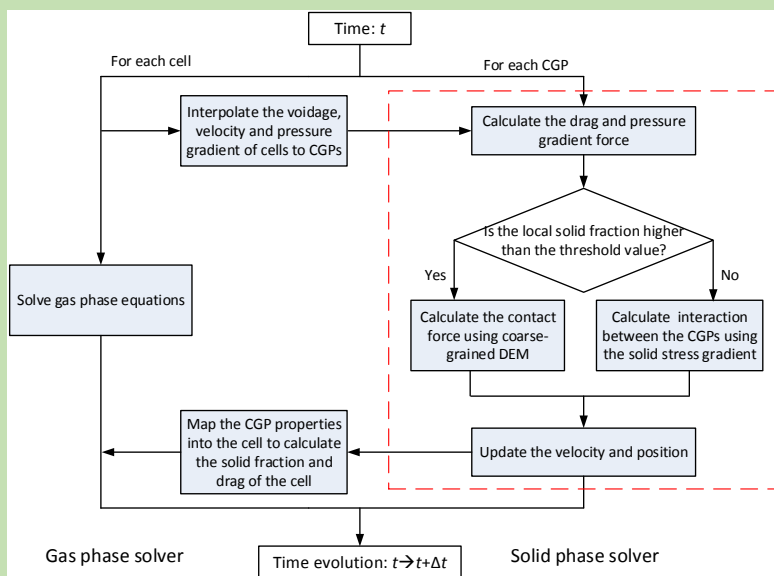
Feiguo CHEN^{1*}, Wei GE^{1,2}

1. State Key Laboratory of Multiphase Complex Systems, Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China

2. School of Chemical Engineering, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

Abstract: Eulerian–Lagrangian (EL) methods for the simulation of gas–solid flow are advantageous over Eulerian–Eulerian (EE) methods in terms of their more rigorous treatment of the particle motion and particle–particle interactions. But conventional EL methods are limited in the number of handled particles. Coarse-grained discrete particle method (CG-DPM) and multiphase particle-in-cell (MP-PIC) are two main methods in this category to increase the simulation scales by treating particle swarms as single computational particles. They are found to be more suitable for dense and dilute particle suspensions, respectively and hence coupled in this study to establish a more general, accurate and efficient EL method. The optimum coupling parameters are determined by comparing the flow patterns from different methods and quantitative analysis on their particle fraction distributions.

Key words: gas–solid flow; Eulerian–Lagrangian approach; coarse-graining; multi-phase particle-in-cell; coupled model



收稿: 2018–12–21, 修回: 2019–01–21, 网络发表: 2019–01–24, Received: 2018–12–21, Revised: 2019–01–21, Published online: 2019–01–24
基金项目: 国家自然科学基金资助项目(编号: 21406238; 91434201); 国防基础科研挑战计划资助项目(编号: TZ2016001); 中国科学院前沿科学重点研究项目(编号: QYZDJ-SSW-JSC029)
作者简介: 陈飞国(1982–), 男, 浙江省玉环市人, 博士, 副研究员, 化学工程专业, E-mail: fgchen@ipe.ac.cn.

引用格式: 陈飞国, 葛蔚. 耦合粗粒化离散颗粒法和多相物质点法的气固两相流模拟. 过程工程学报, 2019, 19(4): 651–660.

Chen F G, Ge W. Coupling of coarse-grained discrete particle method and particle-in-cell method for simulation of gas–solid flow (in Chinese). Chin. J. Process Eng., 2019, 19(4): 651–660, DOI: 10.12034/j.issn.1009-606X.218338.

耦合粗粒化离散颗粒法和多相物质点法的气固两相流模拟

陈飞国^{1*}, 葛蔚^{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. 中国科学院大学化工学院, 北京 100049



摘要: 在气固两相流动的模拟中严格处理颗粒运动和颗粒相互作用时, 欧拉-拉格朗日(EL)方法比欧拉-欧拉(E-E)方法更具优势。但传统的 EL 方法仅能处理少量颗粒。将颗粒群作为单个计算颗粒处理可扩大模拟规模, 粗粒化离散颗粒法(CG-DPM)和多相物质点法(MP-PIC)是其中两种主要方法, 分别更适用于稠密和稀疏的颗粒流体系统。将两种方法耦合建立了更通用、准确和有效的 EL 方法, 比较了不同耦合参数下流型、固相分率分布等定量信息, 确定了最佳耦合参数。

关键词: 气固两相流; 欧拉-拉格朗日法; 粗粒化; 多相物质点法; 耦合模型

中图分类号: TQ021.1

文献标识码: A

文章编号: 1009-606X(2019)04-0651-10

1 前言

通过跟踪单个固体颗粒的运动, 欧拉-拉格朗日(EL)方法^[1-7]比欧拉-欧拉(E-E)方法^[8-14]能更精细而准确地模拟气固两相流动。但即使在超级计算性能急剧提升的当下, EL 方法可以处理的颗粒数仍远达不到工业反应器模拟需求。为了解决这一挑战, 研究人员针对耗时的固相计算提出了各种简化方法。一类方法将一群实际颗粒等价为一个粗颗粒(Coarse-grained Particle, CGP), 即粗粒化离散颗粒法(Coarse-grained Discrete Particle Method, CG-DPM), 如虚拟球体模型(Imaginary Sphere Model, ISM)^[15]、相似模型(Similarity Model, SM)^[16]、似颗粒集(Similar Particle Assembly, SPA)^[17,18]和粗颗粒模型(Coarse Grain Model, CGM)^[19-21]。这些 CGP 的一些属性如质量和动量是其成员(实际)颗粒的直接加和, 而 CGP 之间的接触作用假设为与实际颗粒类似, 如 Sakai 等^[20]假设分属于不同 CGP 的颗粒对之间作用相同, 因此刚度系数与粗化率(Coarse-graining Ratio, CGR, 即 CGP 与其组成颗粒之间的直径比)成正比, 而摩擦系数和恢复系数保持不变, 导致这些方法的粗化率十分有限, 通常只有 2~3, 难以显著降低计算量。Lu 等^[22]利用统计等价的方式构建粗颗粒, 可将粗化率安全地放大到 10~30。实际上, 该方法中粗化率主要受限于固相非均匀结构如颗粒聚团和气泡的特征尺度, 而这些参数可以通过能量最小化多尺度(EMMS)模型预测^[13,14,23]。另一类粗粒化方法^[24,25]忽略实际颗粒间的真实碰撞, 而将其表达为固相应力场, 固相由离散的计算粒子(视为另一种粗颗粒)表达, 采用类似流体所用的拉格朗日方法模拟。固相应力表达式和参数均由对颗粒-颗粒间作用的统计得到。这种方法实际上遵循了用于计算可压缩气体流动的物质点法^[26-28], 因此被称为(EL 计算框架内的)

多相物质点法(Multiphase Particle-in-cell, MP-PIC)。多相物质点法中, 连续的颗粒属性先在流体网格中计算, 再插值到颗粒位置^[25]。由于物质点法天然的拉格朗日特性, 多相物质点法能提供亚网格的描述精度。

MP-PIC 的计算量比传统离散颗粒法(DPM)大幅降低, 也远低于 CG-DPM。MP-PIC 已用于研究矩形管中砂粒的沉降^[25]、气固流化^[29,30]及循环流化床中的臭氧分解多相反应^[31]等。但也有报道 MP-PIC 对高雷诺数^[32]和高固相分率^[33]的气固流动模拟效果较差, 也可能在接近颗粒紧密堆积时不稳定^[34]。这些问题可能源于用固相连续应力场替代颗粒瞬时碰撞的过度简化, 特别是在高固相分率区域, 其统计方法无法再现流场对多体颗粒作用的复杂依赖关系, 如各向异性和局部异质性^[35]。相比之下, 动力学方法 CG-DPM 仍然可以保持颗粒间作用的高度离散特性, 因此对局部结构变化更敏感。另一方面, 由于计算时间步长受到碰撞处理的限制且颗粒状态的频繁更新耗时巨大, 虽然 CG-DPM 对稀疏固体悬浮体系同样有效, 但效率较低。

因此, 有必要研究将两种方法耦合以充分利用各自优势, 从而获得更高的准确度和/或效率的可能。在气固流动数值模拟中, 依据局部固相分率阈值, CG-DPM 仅用于处理密集区域的颗粒碰撞, 而 MP-PIC 处理稀疏区域中的固相。初步结果表明, 这种耦合方法很有应用前景。

2 方法

CG-DPM 和 MP-PIC 耦合方法的物理模型、数值方法及其在并行计算机上的具体计算过程如下。

2.1 EL 方法的控制方程

CG-DPM 和 MP-PIC 均基于欧拉-拉格朗日框架, 其中流体运动由带局部相分率的 Navier-Stokes 方程描

述:

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

$$\frac{\partial(\varepsilon_g \rho_g \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\varepsilon_g \nabla p_g + \nabla \cdot (\varepsilon \boldsymbol{\tau}_g) + \varepsilon \rho_g \mathbf{g} + \mathbf{S}_p \quad (2)$$

其中, \mathbf{u} , ρ_g , p_g 和 ε_g 分别为流体速度、密度、压强和局部空隙率, t 为时间, $\boldsymbol{\tau}_g$ 为流体相的粘性应力张量, \mathbf{g} 为重力加速度, \mathbf{S}_p 为由施加在网格上的曳力相加计算的动量交换源项:

$$\mathbf{S}_p = -\frac{1}{V_{\text{cell}}} \sum_{i \in \text{cell}} \mathbf{f}_{d,i} \quad (3)$$

式中, V_{cell} 为网格的体积, $\mathbf{f}_{d,i}$ 为流体施加于颗粒 i 的曳力。

传统的和粗粒化离散颗粒法均跟踪每个固相颗粒(实际颗粒或粗颗粒)运动描述固相, 其运动由牛顿运动定律表达:

$$m_p \frac{d\mathbf{v}_p}{dt} = \mathbf{f}_c + \mathbf{f}_d + \mathbf{f}_p + \mathbf{f}_b \quad (4)$$

其中, m_p 为颗粒质量, \mathbf{v}_p 为颗粒速度, \mathbf{f}_b 为体积力(此处为重力):

$$\mathbf{f}_b = m_p \mathbf{g} \quad (5)$$

\mathbf{f}_p 为由下式计算的压强梯度力:

$$\mathbf{f}_p = -V_p \nabla p_g \quad (6)$$

式中, V_p 为颗粒体积。而流体施加于颗粒的曳力 \mathbf{f}_d 为

$$\mathbf{f}_d = \frac{V_p \beta (\mathbf{u}_g - \mathbf{v}_p)}{1 - \varepsilon_g} \quad (7)$$

其中, β 为阻力系数, \mathbf{u}_g 为粒子位置的气体速度。气体速度 \mathbf{u}_g 和粒子速度 \mathbf{v}_p 的差值为滑移速度: $\mathbf{U}_{\text{slip}} = \mathbf{u}_g - \mathbf{v}_p$ 。

接触力 \mathbf{f}_c 是离散模拟最重要的作用项之一, 在传统和粗粒化离散颗粒法中计算方式不同。

2.2 固-固作用

根据局部固相分率 ε_s 确定采用 CG-DPM 或 MP-PIC 计算固-固接触力作用。气固流动粗粒化示意图如图 1 所示, 若粗颗粒位于 $\varepsilon_s > \varepsilon_{st}$ (阈值) 的区域内, 它们之间的接触力由 Lu 等^[22] 基于 EMMS 模型^[23] 建立的 CG-DPM 或 EMMS-DPM 表达[图 1(a)]; 反之, 接触力与 MP-PIC 方法中的固相应力梯度相关[图 1(b)]。当 ε_{st} 趋于零时, 所有颗粒间作用以接触力计算, 耦合模型退化为

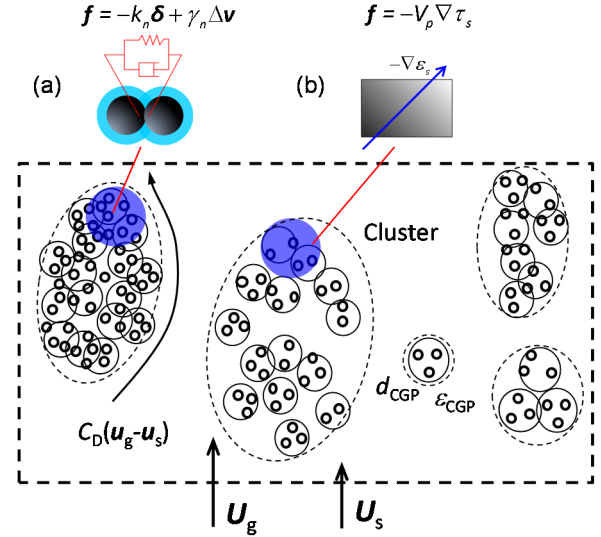


图 1 气固流动粗粒化示意图(修改自文献^[22])

Fig.1 Schematic illustration of coarse graining of gas-solid flow (modified from reference^[22])

CG-DPM; 如 ε_{st} 趋于紧密堆积值(此时颗粒间作用完全以固相应力表达), 退化为 MP-PIC。

2.2.1 EMMS-DPM 的接触力模型^[22]

与实际颗粒相比, EMMS-DPM 中的 CGP 具有两个额外属性, 即可用表观直径 d_{CGP} 和内部空隙率 ε_{CGP} 表征其内部结构^[22]。CGP 应尽可能大, 以显著降低计算量; 但又应小于最小团聚物直径($d_{cl,min}$)以合理描述介尺度结构。 d_{CGP} 应满足如下不等式:

$$d_p \ll d_{CGP} \leq d_{cl,min} \quad (8)$$

其中, d_p 为实际颗粒直径。

大多数气固流化体系稀相中几乎不含颗粒, 密相(聚团)的空隙率略大于最小流化空隙率 ε_{mf} 。另一方面, 具有最大聚团空隙率($\varepsilon_{cl,max}$)的最小聚团应至少由一个 CGP 表示, CGP 的内部空隙率 ε_{CGP} 应该大于 ε_{mf} 和 $\varepsilon_{cl,max}$ 中的较大值, 即

$$\varepsilon_{CGP} > \max(\varepsilon_{mf}, \varepsilon_{cl,max}) \quad (9)$$

则 CGP 包含的平均粒子数 n_{CGP} 为

$$n_{CGP} = (1 - \varepsilon_{CGP}) a^3 \quad (10)$$

其中, a 为粗化率。一个 CGP 的质量为

$$m_{CGP} = n_{CGP} m_p \quad (11)$$

此处 m_p 为一个实际颗粒的质量, $m_p = \rho_p V_p$ 。

假设 CGP 之间在直径 d_{hc} 的硬核上作用^[22]:

$$d_{hc} = (1 - \varepsilon_{CGP})^{1/3} d_{CGP} \quad (12)$$

该硬核为包含 CGP 所有质量的纯固体。与传统离散颗粒法相同,粗颗粒 i 与其相邻粗颗粒 j 的直接接触力 f_{ij} 由线性弹簧-阻尼模型表达:

$$f_{ij} = (-k_n \delta_n + \gamma_n \Delta v_n) \mathbf{n}_{ij} \quad (13)$$

其中, k_n 为弹簧倔强系数, γ_n 为恢复系数, δ_n 为重叠距离, Δv_n 为速度差, 而 \mathbf{n}_{ij} 则是沿粗颗粒 j 到 i 中心连线的单位矢量。作用于粗颗粒 i 的总接触力 \mathbf{f}_c 为

$$\mathbf{f}_c = \sum_j \mathbf{f}_{ij} \quad (14)$$

接触力阻尼项中的阻尼系数表达为

$$\gamma_n = -\sqrt{2k_n m_{CGP}} \frac{\ln e_{CGP}}{\sqrt{\pi^2 + \ln^2 e_{CGP}}} \quad (15)$$

此处 e_{CGP} 为粗颗粒的弹性恢复系数, 是 2 个粗颗粒接触时动能耗散的关键。粗粒化过程涉及的颗粒间作用的能量耗散量应保持不变, 由此推导得到如下关系式^[22]:

$$e_{CGP} = \sqrt{1 - (1 - e_p^2) a (1 - \varepsilon_{CGP})^{1/3}} \quad (16)$$

其中, e_p 为实际颗粒的恢复系数。这意味着 e_{CGP} 将随粗化率 a 增大而减小。由于粗颗粒比实际颗粒大得多, 且因内部空隙而更易与其它颗粒重叠, 因此其弹簧刚度系数被合理地假设为比实际颗粒小得多。一个常用于实际模拟的约束条件^[1]为

$$\Delta t \leq 2\pi \sqrt{\frac{m_{CGP}}{k_n}} \quad (17)$$

在此限制条件下, 粗颗粒模拟可采用比实际颗粒大得多的时间步长, 计算量较传统 DPM 进一步降低。

通常粗化率 a 越大, 一个粗颗粒代表的实际颗粒数越多, 计算量降低越多; 但另一方面, 高的粗化率会导致统计等价的准确度降低。因此合理的粗化率是平衡计算效率和准确性的折中选择。

2.2.2 MP-PIC 中的固相相互作用

MP-PIC 方法中, 动量方程(4)中的接触力项与固相应力梯度相关:

$$\mathbf{f}_c = -V_p \nabla \tau_s \quad (18)$$

其中固体应力 τ_s 为颗粒间碰撞的连续性估值, 在 MP-PIC 中广泛使用计算快速又鲁棒的固相应力模型^[36]计算:

$$\tau_s = \frac{p_s \varepsilon_s^\alpha}{\varepsilon_{sc} - \varepsilon_s} \quad (19)$$

其中, p_s 是取决于颗粒材料特性的特征压强, $2 \leq \alpha \leq 5$ 为幂指数常数, ε_s 是固体体积分数, ε_{sc} 为紧密堆积时的固相体积分数。 τ_s 受粒子速度与平均速度相对差异的限制, 因此, 由应力梯度引起的速度 $v_{pr} = \Delta t \mathbf{f}_c / m_p$ 将受到如下约束:

$$\begin{aligned} \nabla \tau_s &\leq 0 \\ \mathbf{v}'_{pr} &= \min[\mathbf{v}_{pr}, (1 + e_p)(\bar{\mathbf{v}}_p - \mathbf{v}_p)] \\ \mathbf{v}_{pr} &= \max(\mathbf{v}'_{pr}, 0) \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned} \nabla \tau_s &> 0 \\ \mathbf{v}'_{pr} &= \max[\mathbf{v}_{pr}, (1 + e_p)(\bar{\mathbf{v}}_p - \mathbf{v}_p)] \\ \mathbf{v}_{pr} &= \min(\mathbf{v}'_{pr}, 0) \end{aligned} \quad (21)$$

其中, $\bar{\mathbf{v}}_p$ 为移动参照系(一般为粒子所在流体网格)中的粒子平均运动速度。

计算 MP-PIC 中每个粒子的本地 τ_s 比在 CG-DPM 中逐个处理颗粒间的接触简单。另一方面, MP-PIC 中粒子更新的时间步长不受 CG-DPM 中稳定条件的约束。实际上, 对粒子一般选择与气相求解器相同的时间步长, 且比 CG-DPM 时间步长通常大 1~2 个数量级。MP-PIC 计算量远低于 CG-DPM, 只要精度允许, MP-PIC 为优先选择。

2.2.3 两种方法之间的切换

当 CGP 进入 $\varepsilon_s > \varepsilon_{st}$ 的高固相浓度区域时, 采用 CG-DPM 处理颗粒间的接触。但由于 MP-PIC 中的粒子分布对局部固相间作用相对不敏感^[37], 其粒子可能已经与其它粒子显著重叠。因此, 突然切换可能导致 CGP 之间非物理的极大接触力, 使模拟崩溃。为了解决该问题, 引入先线性增加后保持平稳的瞬时弹簧倔强系数 k_n^t 实现两种处理之间的平滑切换, 如图 2 所示。

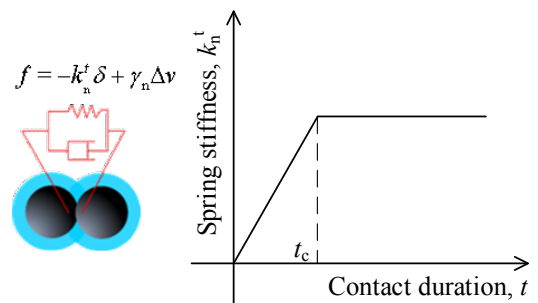


图2 瞬时弹簧倔强系数示意图

Fig.2 Schematic illustration of the transient spring stiffness coefficient

$$k'_n = \begin{cases} \frac{t}{t_c} k_n & t \leq t_c \\ k_n & t > t_c \end{cases} \quad (22)$$

其中, t_c 为根据经验设定为流体求解器若干时间步长的特征时间, 通常大于 CGP 接触持续时间。

2.3 插值和相间作用

在 EL 框架中, 气相和固相通过相间作用耦合。对于固相, 需要根据颗粒位置处的气体速度、压强梯度和空隙率计算作用在颗粒上的相间力(曳力和压强梯度力)。在网格上加和得到的固体体积分率和相间力将被返回给流体求解器。本工作用三线性插值算子将这些属性映射到欧拉网格或从欧拉网格映射。

$$S_{ijk} = S_{x,i} S_{y,j} S_{z,k} \quad (23)$$

对于位于 $\mathbf{x}_p = (x_p, y_p, z_p)$ 位置的颗粒, 线性插值算子为

$$S_{x,i} = \frac{x_{i+1} - x_p}{x_{i+1} - x_i} \quad (24)$$

其中, x_i 和 x_{i+1} 为与颗粒相关的相邻网格中心, 如图 3 所示。 $S_{y,j}$ 和 $S_{z,k}$ 的表达类似。插值算子满足归一性:

$$\sum_i \sum_j \sum_k S_{ijk}(\mathbf{x}_p) = 1 \quad (25)$$

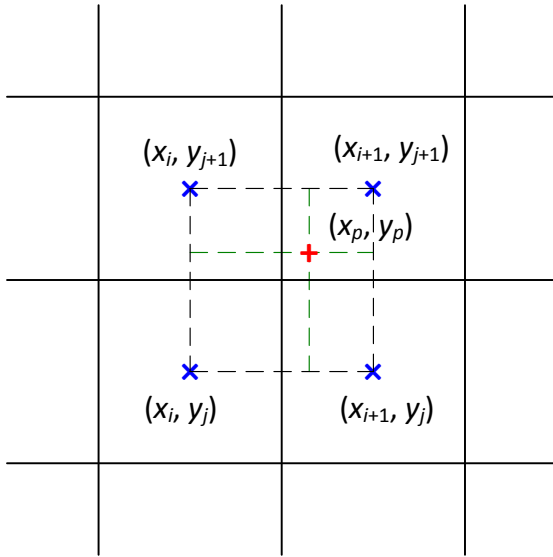


图 3 插值计算示意图

Fig.3 Schematic illustration of interpolation

网格 (i, j, k) 内的固相体积分率 $\varepsilon_{s,ijk}$ 为

$$\varepsilon_{s,ijk} = \frac{1}{V_{\text{cell}}} \sum_p V_p S_{ijk}(\mathbf{x}_p) \quad (26)$$

网格空隙率为 $\varepsilon_{g,ijk} = 1 - \varepsilon_{s,ijk}$ 。网格内曳力为

$$\mathbf{F}_{d,ijk} = \sum_p \mathbf{f}_d S_{ijk}(\mathbf{x}_p) \quad (27)$$

气相的空隙率、速度和压强梯度被映射到颗粒位置, 用于计算作用于颗粒上的曳力和压强梯度力,

$$\varepsilon_g = \sum_i \sum_j \sum_k \varepsilon_{g,ijk} S_{ijk}(\mathbf{x}_p) \quad (28)$$

$$\mathbf{u}_g = \sum_i \sum_j \sum_k \mathbf{u}_{g,ijk} S_{ijk}(\mathbf{x}_p) \quad (29)$$

$$\nabla p_g = \sum_i \sum_j \sum_k \nabla p_{g,ijk} S_{ijk}(\mathbf{x}_p) \quad (30)$$

其中, $\varepsilon_{g,ijk}$, $\mathbf{u}_{g,ijk}$ 和 $\nabla p_{g,ijk}$ 分别为与粒子相邻的网格 (i, j, k) 的空隙率、气体速度和压强梯度。

式(7)表达的曳力是气固两相计算精度的关键。本工作采用 EMMS 曳力模型^[14,38], 相间曳力系数 β 由非均匀校正系数 H_D 修正:

$$\beta = \frac{3}{4} \frac{\varepsilon_g (1 - \varepsilon_g) \rho_g |\mathbf{u}_g - \mathbf{v}_p|}{d_p} C_{D0} \varepsilon_g^{-2.7} H_D \quad (31)$$

其中, d_p 为实际固体颗粒的直径, C_{D0} 为单颗粒标准曳力系数:

$$C_{D0} = \begin{cases} 24/Re_p & (Re_p < 1) \\ 24/Re_p (1 + 0.15 Re_p^{0.687}) & (1 \leq Re_p < 1000) \\ 0.44 & (Re_p \geq 1000) \end{cases} \quad (32)$$

其中, Re_p 为颗粒雷诺数。

$$Re_p = \frac{\varepsilon_g \rho_g d_p |\mathbf{u}_g - \mathbf{v}_p|}{\mu_g} \quad (33)$$

非均匀校正系数 H_D 与颗粒雷诺数相关, 表达式^[38]如下:

$$H_D = A (Re_p + B)^C \quad (34)$$

其中, A , B 和 C 为非均匀因子。

2.4 耦合模型计算

局部固相分率 ε_s 选择根据 CG-DPM 或 MP-PIC 处理固相作用的标准。耦合模型详细实现步骤如图 4 所示。

在计算两相流动前, 应用局部 EMMS 模型^[11,14]确定团聚物直径和空隙率的范围, 确定 CG-DPM 中粗颗粒的性质。

在 EL 框架内, 除相间力外, 连续的气相和离散的固相颗粒的演变是解耦的, 单独完成。气相的演变采用

经修改的开源软件包 OpenFOAM (<http://www.openfoam.com/>) 计算, 在连续性方程中引入空隙率变量, 在动量方程中引入相间力源项。压力隐式分裂(Pressure Implicit with Splitting of Operator, PISO)算法^[39]用于压力-速度耦合, 且选择几何代数多重网格(Geometric Algebraic

Multi-Grid, GAMG)方法作为线性求解器。自编的拉格朗日计算代码跟踪固相颗粒, 颗粒间接触检测采用元胞列表和邻居列表^[40]相耦合的加速算法, 且应用通用 GPU 计算技术^[41]加快计算。整个 EL 框架采用空间分解方法并行计算^[22,42]。

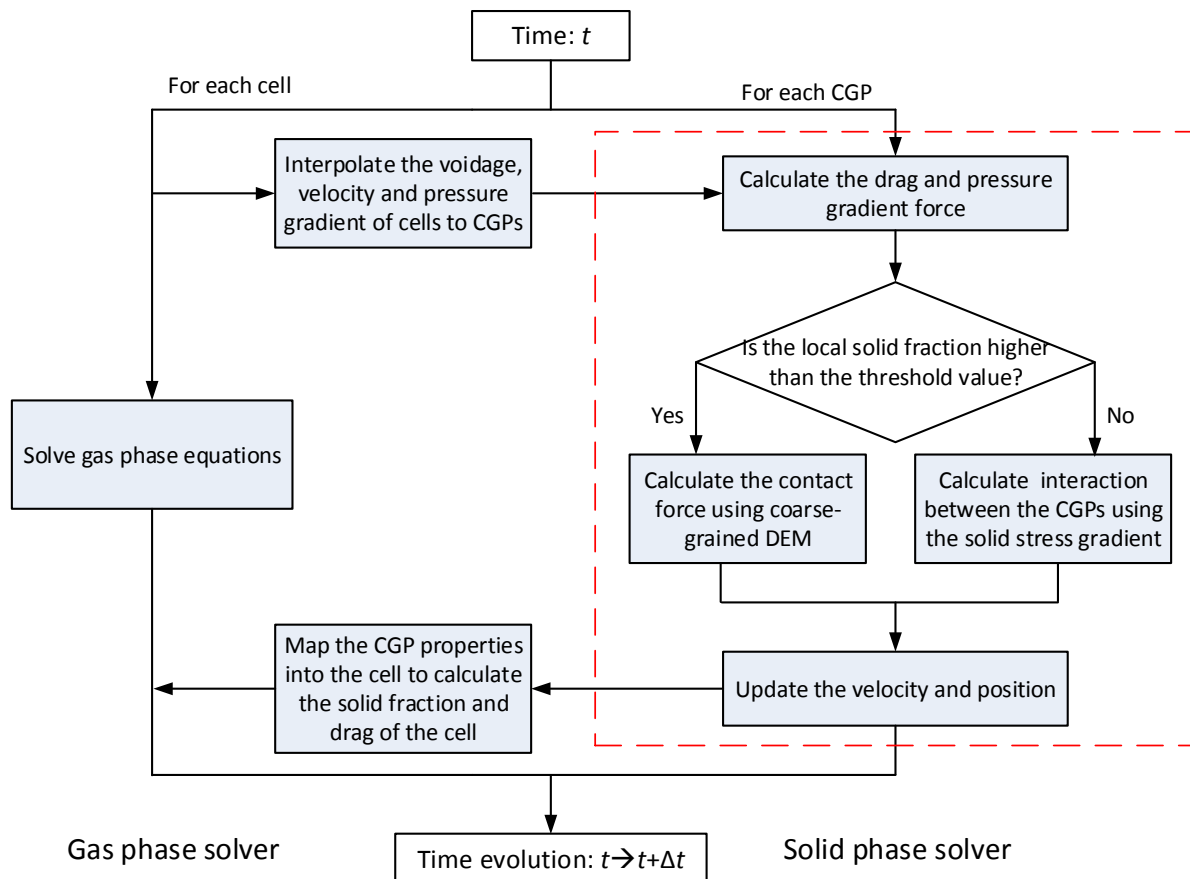


图4 耦合模型的计算流程图

Fig.4 Schematic flowchart of the coupled approach

3 结果与讨论

为验证耦合模型, 将其用于 CFB 提升管的模拟并与实验结果^[43]进行比较。模拟系统的简化设置如图 5 所示。气相的 CFD 计算采用速度入口和压力出口边界条件, 壁面采用无滑移边界条件。最初, 所有颗粒堆积在提升管底部 1/4 区域。随模拟进行, 气相和固相演变形形成复杂的流动结构。空气从底部入口进入提升管, 气相和颗粒均从顶部出口离开模拟区域, 而逃逸的颗粒被直接送回提升管底部以保持床层存料。颗粒-壁面间相互作用与颗粒间作用相同。模拟参数见表 1。

首先, 在 $\varepsilon_{st}=0$ 情况下进行 CG-DPM 模拟验证并寻找确定最佳 ε_{st} 的线索。将 5~10 s, 10~15 s 和 15~20 s 时间段内的轴向固相分率分布与 Horio 的实验结果^[43]进行比较, 结果如图 6 所示。由图可知, 模拟结果与实验结

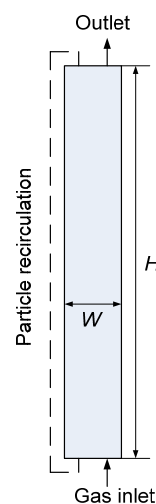
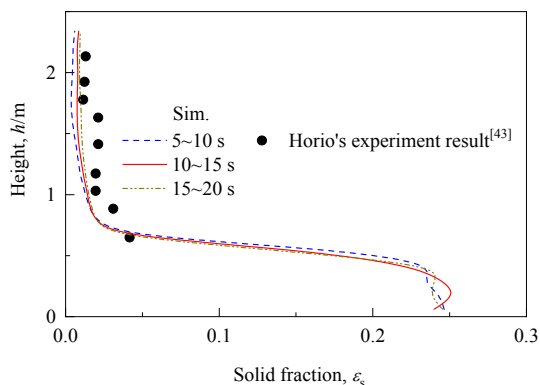


图5 模拟系统示意图

Fig.5 Schematic diagram of the simulated system

表 1 验证算例模拟参数

Table 1 Simulation parameters of validation example		
Parameter		Value
Bed	Bed size, $W \times H \times D/\text{mm}^3$	$50 \times 2400 \times 0.36$
	Density, $\rho_g/(\text{kg}/\text{m}^3)$	1.2
	Kinematic viscosity, $\mu/\text{Pa}\cdot\text{s}$	1.8×10^{-5}
	Operating pressure, p/Pa	1.013×10^5
	Superficial inlet velocity, $U_g/(\text{m}/\text{s})$	0.8
	Grid size, $l_x \times l_y \times l_z/\text{mm}^3$	$2.50 \times 2.50 \times 0.36$
Solid	Time step, $\Delta t_{\text{CFD}}/\text{s}$	1×10^{-4}
	Mean solid fraction, ε_{sm}	0.065
	Density, $\rho_p/(\text{kg}/\text{m}^3)$	1000
	Diameter, d_p/mm	0.06
	Coarse-graining ratio, a	7.46
	Intra-voidage, ε_{GCP}	0.48
	Particle number, N_p	2.48×10^7
	GCP number, N_{GCP}	114, 950
	Spring constant, $k_n/(\text{N}/\text{m})$	200
	Restitution coefficient, e	Computed
	Friction coefficient, λ	0.1
	Threshold solid fraction, ε_{st}	0, 0.10, 0.20, 0.50, 0.58, 0.60
	Time step, $\Delta t_{\text{GCP}}/\text{s}$	2.5×10^{-6}

图 6 Horio 提升管轴向固相分率分布实验结果^[43]和 CG-DPM 模拟结果Fig.6 Axial solid fraction distribution from experiment result^[43] and CG-DPM simulation on Horio's riser

果非常吻合, 后两个时间段的差异几乎可以忽略不计, 表明模拟体系 10 s 后已经完全发展。因此各模拟持续 20 s, 其中前 10 s 用于发展流化状态, 后 10 s 用于统计分析。

在 CG-DPM 模拟过程中, 测量了不同局部固体分率的粒子及碰撞比重, 其累积分布与局部固体分率的关系如图 7 所示。由图可知, 大约 1/4 的粒子位于几乎不发生碰撞的 $\varepsilon_s < 0.20$ 区域内, 而 $\varepsilon_s > 0.50$ 区域内的粒子则贡献了大部分碰撞(小于 20% 的颗粒贡献了超过 70% 的碰撞), 在 $\varepsilon_s > 0.58$ 区域中约 1% 的颗粒贡献了小于 2% 的碰撞。选择几个典型的固体分率阈值(0.10, 0.20, 0.50, 0.58)验证 CG-DPM 和 MP-PIC 耦合方法。

图 8 为应用耦合模型、CG-DPM($\varepsilon_{\text{st}}=0$)和 MP-PIC($\varepsilon_{\text{st}}=0.60$)模拟得到的流动结构。由图可知, 所有模拟

都复现了径向的环-核结构和轴向上稀下浓结构。采用中间阈值(0.10, 0.20, 0.50, 0.58)的耦合模拟结果与 CG-DPM 模拟非常一致, 而 MP-PIC 模拟给出的结构不清晰, 床层膨胀更高, 也可从轴向固体分布图[图 9(a)]和轴向压力梯度[9(b)]中看出。

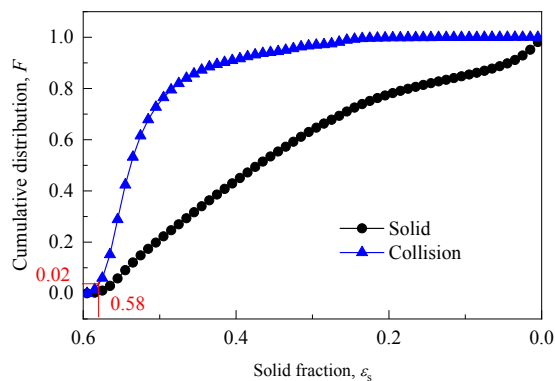


图 7 CG-DPM 模拟中粒子和碰撞比重的累积分布随固相分率的变化

Fig.7 Variation of cumulative particle and collision probability distributions from CG-DPM simulation with solid fraction

MP-PIC 模拟结果的差异也反映在颗粒的均方速度波动上, 如图 10 所示。颗粒的均方速度波动定义为

$$\langle C^2 \rangle = \langle |\mathbf{v}_p - \mathbf{V}_s|^2 \rangle \quad (35)$$

其中, \mathbf{V}_s 为固相平均速度。颗粒温度 θ 可由下式计算:

$$\theta = \frac{1}{3} \langle C^2 \rangle \quad (36)$$

粗颗粒之间的碰撞接触将粒子系统的动能有效地耗散为波动的热能, 但 MP-PIC 中以固体应力表示的接触不能很好地完成耗散, 系统的颗粒温度明显偏低(图 10)。相应地, 固体分率阈值不超过 0.58 的耦合模拟与 CG-DPM 之间的差异是可接受的。

由以上比较可得出, 引入一小部分碰撞(小于 2%)虽然计算成本略有增加, 但可大幅提升耦合模型中固相作用表达的准确性。目前的研究工作表明, 固体分率最佳阈值 $\varepsilon_{\text{st}}=0.58$ 。

4 结论与展望

建立了 MP-PIC 与 CG-DPM 耦合模型, 通过判断固相分率是否超过阈值切换 MP-PIC 和 CG-DPM, 分别处理低和高固相分率区域内的颗粒间相互作用, 模拟比较不同阈值下的气固流型和压力、浓度分布, 可获得固相分率最佳阈值, 并通过与文献实验结果比较验证了其准确性和高效性。

为了在实际体系中更广泛地应用该方法,需要在不同系统的不同条件下验证固相分率阈值的一般性,并且

需要开发多重时间步长算法以进一步获取更高计算效率。

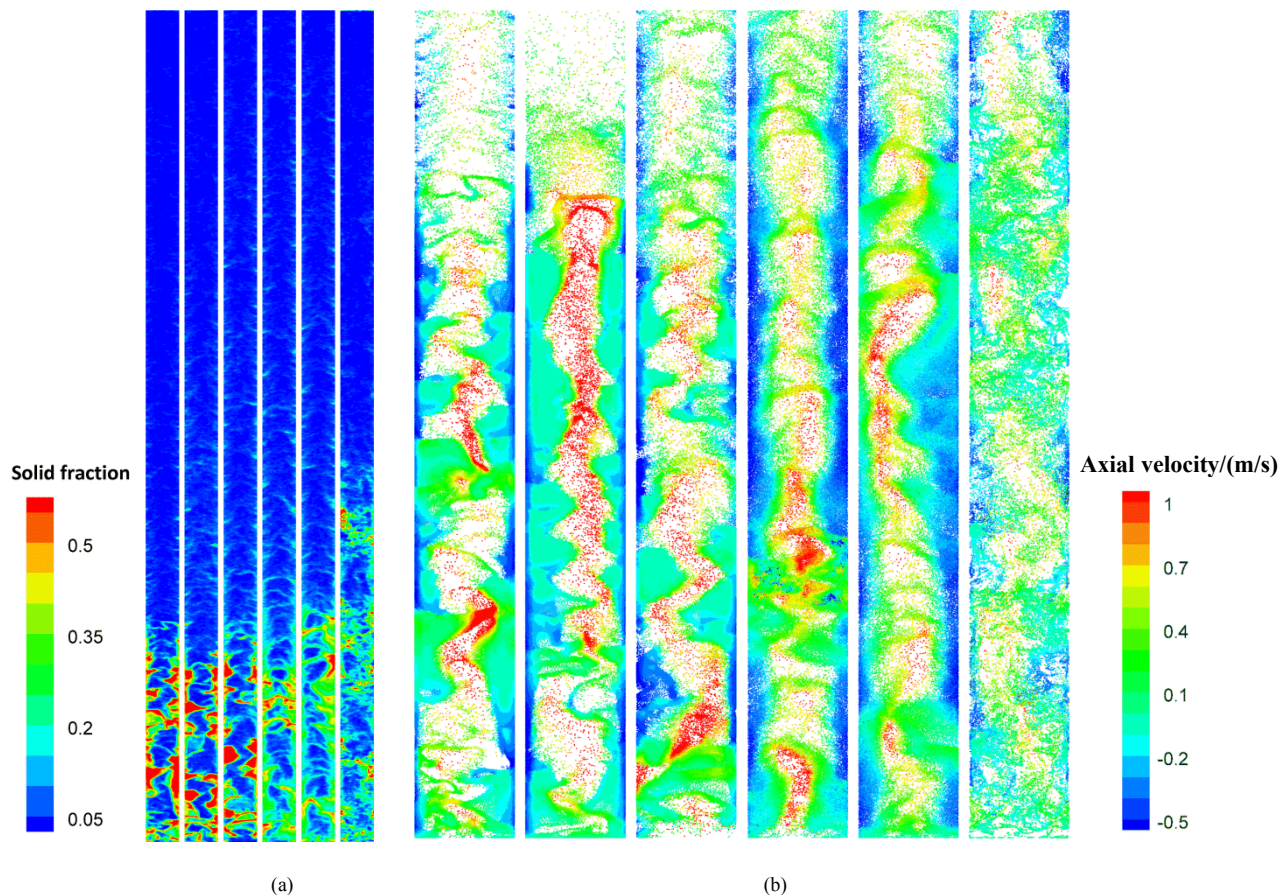


图8 不同固相分率阈值下的典型固相分率等高云图(a)及底部0.8 m区域的颗粒分布(b)

[从左到右: $\varepsilon_{st}=0$ (CG-DPM), 0.10, 0.20, 0.50, 0.58, 0.60 (MP-PIC)]

Fig.8 Typical solid fraction contours [colored by solid fraction, (a)] and particle distributions in the bottom 0.8 m zone [colored by the axial velocity, (b)] with different threshold solid fractions [from left to right: $\varepsilon_{st}=0$ (CG-DPM), 0.10, 0.20, 0.50, 0.58, 0.60 (MP-PIC)]

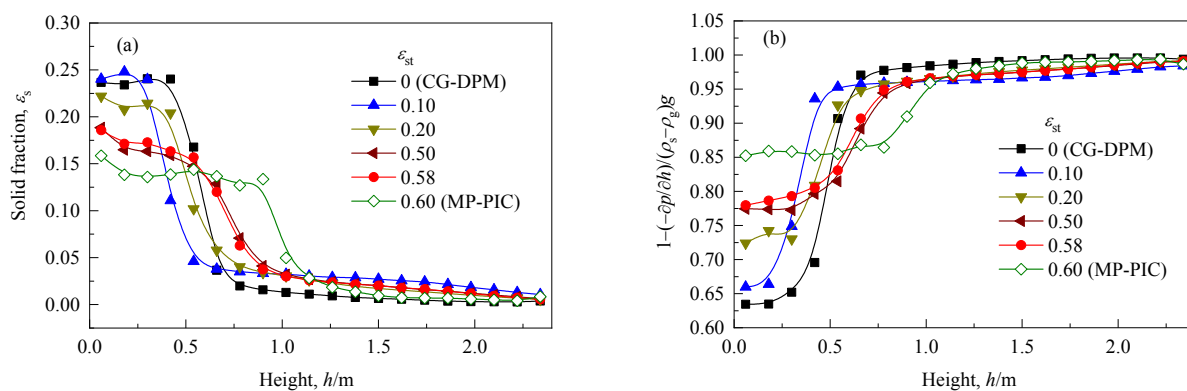


图9 不同固相分率阈值下的轴向固相分率和压力梯度分布

Fig.9 Axial solid fraction and pressure distributions with different threshold solid fraction ε_{st}

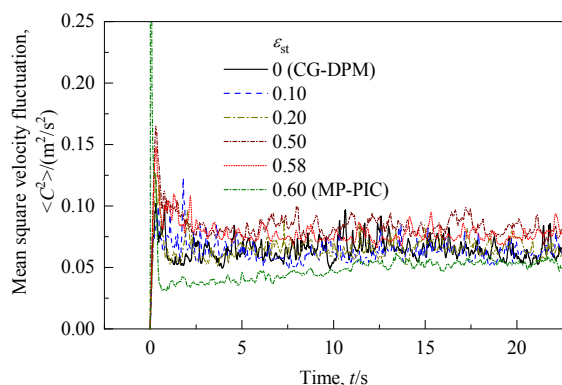


图10 不同固相分率阈值下的均方速度波动

Fig.10 Mean square velocity fluctuation with different threshold solid fraction ϵ_{st}

参考文献

- [1] Tsuji Y, Tanaka T, Ishida T. Lagrangian numerical simulation of plug flow of cohesionless particles in a horizontal pipe [J]. Powder Technology, 1992, 71(3): 239–250.
- [2] Kafui K D, Thornton C, Adams M J. Discrete particle-continuum fluid modelling of gas–solid fluidised beds [J]. Chemical Engineering Science, 2002, 57(13): 2395–2410.
- [3] Chiesa M, Mathiesen V, Melheim J A, et al. Numerical simulation of particulate flow by the Eulerian–Lagrangian and the Eulerian–Eulerian approach with application to a fluidized bed [J]. Computers & Chemical Engineering, 2005, 29(2): 291–304.
- [4] Patankar N A, Joseph D D. Modeling and numerical simulation of particulate flows by the Eulerian–Lagrangian approach [J]. International Journal of Multiphase Flow, 2001, 27(10): 1659–1684.
- [5] Wang S, Luo K, Hu C S, et al. Impact of operating parameters on biomass gasification in a fluidized bed reactor: an Eulerian–Lagrangian approach [J]. Powder Technology, 2018, 333: 304–316.
- [6] Zahari N M, Zawawi M H, Sidek L M, et al. Introduction of discrete phase model (DPM) in fluid flow: a review [J]. AIP Conference Proceedings, 2018, 2030(1): 020234.
- [7] Xie J, Zhong W Q, Jin B S, et al. Eulerian–Lagrangian method for three-dimensional simulation of fluidized bed coal gasification [J]. Advanced Powder Technology, 2013, 24(1): 382–392.
- [8] Durst F, Milojevic D, Schönung B. Eulerian and Lagrangian predictions of particulate two-phase flows: a numerical study [J]. Applied Mathematical Modelling, 1984, 8(2): 101–115.
- [9] Van Wachem B G M, Schouten J C, Krishna R, et al. Eulerian simulations of bubbling behaviour in gas–solid fluidised beds [J]. Computers & Chemical Engineering, 1998, 22: S299–S306.
- [10] Wu Y, Liu D Y, Ma J L, et al. Effects of gas–solid drag model on Eulerian–Eulerian CFD simulation of coal combustion in a circulating fluidized bed [J]. Powder Technology, 2018, 324: 48–61.
- [11] Wang J W, Ge W, Li J H. Eulerian simulation of heterogeneous gas–solid flows in CFB risers: EMMS-based sub-grid scale model with a revised cluster description [J]. Chemical Engineering Science, 2008, 63(6): 1553–1571.
- [12] Cammarata L, Lettieri P, Micale Giorgio D M, et al. 2D and 3D CFD simulations of bubbling fluidized beds using Eulerian–Eulerian models [J]. International Journal of Chemical Reactor Engineering, 2003, 1(1): A84.
- [13] 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(1): 71–80.
- [14] Wang W, Li J. Simulation of gas–solid two-phase flow by a multi-scale CFD approach—of the EMMS model to the sub-grid level [J]. Chemical Engineering Science, 2007, 62(1): 208–231.
- [15] Sakano M, Yaso T, Nakanishi H. Numerical simulation of two-dimensional fluidized bed using discrete element method with imaginary sphere model [J]. Japanese Journal of Multiphase Flow, 2000, 14(1): 66–73.
- [16] Washino K, Hsu C, Kawaguchi T, et al. Similarity model for DEM simulation of fluidized bed [J]. Journal of the Society of Powder Technology, Japan, 2007, 44(3): 198–205.
- [17] Mokhtar M A, Kuwagi K, Takami T, et al. Validation of the similar particle assembly (SPA) model for the fluidization of Geldart's group A and D particles [J]. AIChE Journal, 2012, 58(1): 87–98.
- [18] Kuwagi K, Takeda H, Horio M. The similar particle assembly (SPA) model: an approach to large-scale discrete element (DEM) simulation [J]. Fluidization IX, 2004, 160: 243–250.
- [19] Sakai M, Takahashi H, Pain C C, et al. Study on a large-scale discrete element model for fine particles in a fluidized bed [J]. Advanced Powder Technology, 2012, 23(5): 673–681.
- [20] Sakai M, Koshizuka S. Large-scale discrete element modeling in pneumatic conveying [J]. Chemical Engineering Science, 2009, 64(3): 533–539.
- [21] Sakai M, Abe M, Shigeto Y, et al. Verification and validation of a coarse grain model of the DEM in a bubbling fluidized bed [J]. Chemical Engineering Journal, 2014, 244: 33–43.
- [22] Lu L Q, Xu J, Ge W, et al. EMMS-based discrete particle method (EMMS–DPM) for simulation of gas–solid flows [J]. Chemical Engineering Science, 2014, 120: 67–87.
- [23] Li J H, Kwauk M. Particle–fluid two-phase flow: the energy-minimization multi-scale method [M]. Beijing: Metallurgical Industry Press, 1994: 204.
- [24] Andrews M J, O'Rourke P J. The multiphase particle-in-cell (MP-PIC) method for dense particulate flows [J]. International Journal of Multiphase Flow, 1996, 22(2): 379–402.
- [25] Snider D M. An incompressible three-dimensional multiphase particle-in-cell model for dense particle flows [J]. Journal of Computational Physics, 2001, 170(2): 523–549.
- [26] Evans M W, Harlow F H, Bromberg E. The particle-in-cell method for hydrodynamic calculations [R]. Los Alamos, N.M.: Los Alamos Scientific Laboratory of the University of California, 1957: 76.
- [27] Harlow F H. The particle-in-cell computing method for fluid dynamics [J]. Methods in Computational Physics, 1964, 3(3): 319–343.
- [28] Greengard L, Rokhlin V. A fast algorithm for particle simulations [J]. Journal of Computational Physics, 1987, 73(2): 325–348.
- [29] Karimipour S, Pugsley T. Application of the particle in cell approach for the simulation of bubbling fluidized beds of Geldart A particles [J]. Powder Technology, 2012, 220: 63–69.
- [30] Solnordal C B, Kenche V, Hadley T D, et al. Simulation of an internally circulating fluidized bed using a multiphase particle-in-cell method [J]. Powder Technology, 2015, 274: 123–134.
- [31] Snider D, Banerjee S. Heterogeneous gas chemistry in the CPFD Eulerian–Lagrangian numerical scheme (ozone decomposition) [J]. Powder Technology, 2010, 199(1): 100–106.
- [32] Zhang W, You C F. Numerical approach to predict particle breakage

- in dense flows by coupling multiphase particle-in-cell and Monte Carlo methods [J]. *Powder Technology*, 2015, 283: 128–136.
- [33] Wang Q G, Yang H R, Wang P N, et al. Application of CPFD method in the simulation of a circulating fluidized bed with a loop seal Part II—investigation of solids circulation [J]. *Powder Technology*, 2014, 253: 822–828.
- [34] Abbasi A, Islam M A, Ege P E, et al. CPFD flow pattern simulation in downer reactors [J]. *AIChE Journal*, 2013, 59(5): 1635–1647.
- [35] Xiong Q G, Li B, Chen F G, et al. Direct numerical simulation of sub-grid structures in gas–solid flow—GPU implementation of macro-scale pseudo-particle modeling [J]. *Chemical Engineering Science*, 2010, 65(19): 5356–5365.
- [36] Harris S, Crighton D. Solitons, solitary waves, and voidage disturbances in gas-fluidized beds [J]. *Journal of Fluid Mechanics*, 1994, 266: 243–276.
- [37] Chen X Z, Wang J W. A comparison of two-fluid model, dense discrete particle model and CFD–DEM method for modeling impinging gas–solid flows [J]. *Powder Technology*, 2014, 254: 94–102.
- [38] Lu B N, Wang W, Li J H. Eulerian simulation of gas–solid flows with particles of Geldart groups A, B and D using EMMS-based meso-scale model [J]. *Chemical Engineering Science*, 2011, 66(20): 4624–4635.
- [39] Issa R I. Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting [J]. *Journal of Computational Physics*, 1986, 62(1): 40–65.
- [40] Rapaport D C. *The art of molecular dynamics simulation* [M]. 2nd Ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2004: 549.
- [41] NVIDIA. *NVIDIA CUDA compute unified device architecture programming guide* [M]. 1.0 Ed. Santa Clara: NVIDIA, 2007: 112.
- [42] Lu L Q, Xu J, Ge W, et al. Computer virtual experiment on fluidized beds using a coarse-grained discrete particle method—EMMS–DPM [J]. *Chemical Engineering Science*, 2016, 155: 314–337.
- [43] Horio M, Ishii H, Nishimuro M. On the nature of turbulent and fast fluidized beds [J]. *Powder Technology*, 1992, 70(3): 229–236.