

有反应的双流体模型中两相流量守恒问题的研究

张宇¹ 魏小林¹ 周力行² 盛宏至¹

¹ (中国科学院力学研究所, 北京 10080)

² (清华大学力学系, 北京 100084)

摘要 在单相流动 CFD 数值模拟中, 对计算域出口进行流量守恒的修正是保证程序稳定和计算结果合理的有效手段。本文结合作者实际的模拟工作, 探讨了在复杂的湍流两相流动, 湍流两相反应流动中出口流量修正问题, 给出了基于双流体模型的出流边界条件, 为复杂反应流动的 CFD 模拟提供了有益的经验。

关键词: 两相反应流动; CFD 数值模拟; 流量修正

0 引言

随着计算机运算能力的提高, CFD 逐渐成为工业流动过程研究的重要手段。70 年代末 Patankar 等人提出的基于压力修正的 simple 算法[1]以及相关的改进算法[2][3]至今仍广泛应用于低速流动的数值模拟。Simple 算法中的压力修正方程是由连续方程转化而来, 其形式可类比于绝热边界条件的导热方程, 这种方程不发散的前提条件是在运算过程中, 计算域内各个节点的源项之和必须为零。对于压力修正方程, 各个节点的源项就是流经该节点的流量和, 为了保证压力修正方程各个节点的源项之和为零就必须对计算域的边界进行流量守恒修正。对于复杂的两相流动, 两相反应流动的模拟, 通常采用的是 E-L 模型, 就是连续相用欧拉方法, 离散相采用拉氏方法的轨道模型。与以往不同, 本研究室采用的是 E-E 模型, 就是将气相和颗粒相都当成流体来处理的双流体模型。既然把颗粒相也当成流体来处理, 那么对于颗粒相的出口边界是否需要质量流量修正呢, 修正方法是否和气相相同呢, 当两相间存在反应, 也就是两相间有质量交换的时候, 流量又该如何修正呢? 本文结合作者的煤粉燃烧模拟工作, 对上述问题进行了分析, 讨论了颗粒相质量修正和气相质量修正的异同, 为复杂反应流动的数值模拟提供了有益的经验。

1 两相流动与反应的全双流体模型

对于有反应湍流气粒两相流动和煤粉燃烧的总综合数学模型, 本文采用周力行等提出的纯双流体模型[4], 在欧拉坐标系下导出和求解气粒两相各自的质量守恒、动量守恒和能量守恒方程。各个子模型中对两相湍流采用 $k-\varepsilon-k_p$ 模型, 对气相燃烧采用 EBU-Arrhenius 模型, 对辐射传热采用六热流模型, 对煤粒中水分蒸发采用扩散模型, 对煤热解中甲烷的释放采用双平行反应模型, 对焦炭燃烧采用扩散-动力模型, 详见文献[4]。柱坐标系下三维湍流两相流动与煤粉燃烧的稳态控制方程组可表达为如下通用形式。

气相控制方程组:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x}(\rho u \varphi_s) + \frac{\partial}{r \partial r}(r \rho v \varphi_s) + \frac{\partial}{r \partial \theta}(\rho w \varphi_s) \\ & = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_\varphi \frac{\partial \varphi_s}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{r \partial r} \left(r \Gamma_\varphi \frac{\partial \varphi_s}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{r^2 \partial \theta} \left(\Gamma_\varphi \frac{\partial \varphi_s}{\partial \theta} \right) + S_\varphi + S_{\text{dep}} \end{aligned} \quad (1)$$

颗粒相控制方程组:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x}(\rho_p u_p \varphi_p) + \frac{\partial}{r \partial r}(r \rho_p v_p \varphi_p) + \frac{\partial}{r \partial \theta}(\rho_p w_p \varphi_p) \\ & = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_{\varphi} \frac{\partial \varphi_p}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{r \partial r} \left(r \Gamma_{\varphi} \frac{\partial \varphi_p}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{r^2 \partial \theta} \left(\Gamma_{\varphi} \frac{\partial \varphi_p}{\partial \theta} \right) + S_{\varphi} + S_{\varphi p} \end{aligned} \quad (2)$$

方程中 φ_s 与 φ_p 为通用因变量, Γ_{φ} 与 $\Gamma_{\varphi p}$ 为扩散系数, S_{φ} , $S_{\varphi gp}$, S_p , $S_{\varphi pp}$ 分别两相自身及其相互作用的源项, 详细表达式见文献[4]。对边界条件, 认为各变量在出口处达到充分发展, 沿纵向梯度为零。轴线处取对称条件。壁面处, 对气体采用速度无滑移条件, 零梯度浓度条件和给定壁面温度。对颗粒, 在壁面处取与壁面平行的速度梯度为零, 对垂直于壁面的速度和颗粒浓度梯度, 取为零。

2 煤粉燃烧器

模拟的对象是本文第二作者在德国斯图加特大学 IVD 研究所做的关于煤粉燃烧器的实验[5], 其几何形状如图 1 所示, 表 1 给出了燃烧器的物理参数, 表 2 给出了煤的化学分析结果。

表 1 燃烧器物理参数

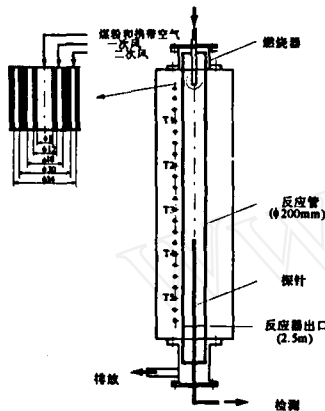


图 1 煤粉燃烧器几何形状

	单位	数值
煤粉流量	kg/h	1.0
过量空气系数	-	1.15
壁面温度	°C	1100
携带煤粉空气的流量	nm ³ /h	1.5
携带煤粉空气的温度	°C	200
一次风+二次风流量	nm ³ /h	8.0
一次风和二次风比例	-	1:2
一次风温度	°C	250
二次风温度	°C	350
煤粉平均粒径	μm	40

表 2 煤的化学分析

工业分析 (收到基)				元素分析 (收到基)					灰分析 (收到基)	
水分	挥发分	灰	固定碳	C	H	N	S	O	Ca	Mg
12.7	46.6	8.2	32.7	53.60	3.55	0.58	0.62	20.87	13.39	2.33

携带煤粉的空气从燃烧器中心进入, 直流一次风和直流二次风分别从两个环型通道进入反应器。反应器长 2.5m, 测量点距进口的距离分别为 0.15m, 0.2m, 0.3m, 0.4m, 0.5m, 0.6m, 0.9m, 1.5m, 2.5m。本文结合对该燃烧器燃烧和 NO 生成的模拟对复杂多相反应流中的质量修正问题进行讨论。

采用自行编制的双流体模型程序, 计算长度为 2m, 非均匀交错网格 (50, 30, 7), 在 P4 的微机计算一个工况需要 5 天。

3 冷态两相流中颗粒相的质量修正

两相流中的单相处理, 采用的方法和纯单相一样。如前所述, 需要对燃烧器出口进行流量修正, 修正的方法如下:

$$U(LP1, J, K) = U(L, J, K) \times \text{SUMGASIN} / \text{massg}(L) \quad (1)$$

其中, U 表示主流速度, SUMGASIN 代表进口流量, $Lp1$ 表示的是 x 方向出口节点, L 是第一内节点, massg 代表不同截面上的流量。第一内截面上的流量 $\text{massg}(i)$ 的表达式如下:

$$\text{massg}(i) = 0.5 \times (\rho(i,j,k) + \rho(i-1,j,k)) \times u(i,j,k) \times A \quad (2)$$

其中, ρ 代表流体的密度, $L-1$ 代表第二内节点, A 代表的是燃烧器的横截面积。关于连续相计算出口流量修正的方法有很多, 公式 (1), (2) 给出了一种比较常见的方法。如前所述, 对于气相出口截面流量进行修正是 simple 算法的基本要求。如果对每个截面都采用流量平衡修正, 则气相的计算相当于加块修正的 simple 算法, 可以明显提高程序收敛速度, 也是实际计算中经常使用的方法。

在多相流的计算中, 如果采用双流体模型, 相对于气相, 颗粒相的收敛比较缓慢, 而且容易出现崩溃的情况。编制双流体程序的研究人员, 往往希望把单相出口质量修正的方法, 以及内截面流量修正的方法推广到颗粒相, 增强程序的稳定性和收敛性。如果把公式(1),(2)的方法简单的推广到颗粒相则有:

$$UP(LP1,J,K) = UP(L,J,K) \times \text{SUMGASINP} / \text{massp}(L) \quad (3)$$

$$\text{massp}(i) = 0.5 \times (\rho_p(i,j,k) + \rho_p(i-1,j,k)) \times up(i,j,k) \times A \quad (4)$$

类似于气相, UP 代表颗粒相主流速度, massp 代表的是颗粒相截面流量, ρ_p 代表的是颗粒相的表观密度。根据公式 (2), (4) 计算截面流量的方法称为 Method1。

遗憾的是, 如果用上述方法修正颗粒相, 在某些情况下, 程序非但不能很快的收敛, 反而会出现发散的情况, 因此一些研究人员认为颗粒相不能采用质量修正的方法。

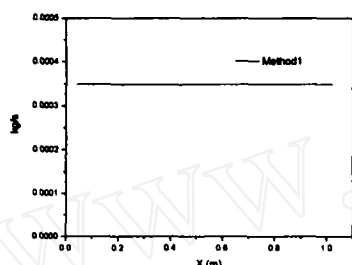


图2 气体截面平均质量流量

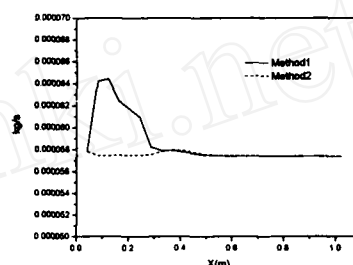


图3 颗粒截面平均质量流量

图2给出了用公式(2)计算的气相截面流量在流动方向上的变化。图3给出了用公式(4)计算的燃烧器颗粒截面质量流量在流动方向上的变化。图2图3的结果是在气相仅做了出口截面流量修正, 颗粒相没有做任何质量修正情况下模拟的结果。

从图2中可以看出, 气相截面流量在流动方向上没有变化, 在两相没有质量交换情况下, 这显然是正确的, 用图2中的直线去修正各个截面流量也是合理的。然而, 用同样的方法计算的颗粒截面流量(图中用 Method1 表示)却在流动方向上剧烈变化, 开始上升, 随之下落, 这显然是错误的, 如果用这条曲线去修正各个截面上颗粒的流量, 程序崩溃是必然的。即便仅进行出口截面的流量修正, 也难保证程序不出问题。

本文提出了一种的用于双流体颗粒相质量修正的方法, 将计算颗粒截面流量的公式(4)变为如下形式:

$$\begin{aligned} \text{massp}(i) &= \text{massp}(i) + up(i,j,k) \times \rho_p(i-1,j,k) \times A_{jk} & (up(i,j,k) > 0) \\ \text{massp}(i) &= \text{massp}(i) + up(i,j,k) \times \rho_p(i,j,k) \times A_{jk} & (up(i,j,k) < 0) \end{aligned} \quad (5)$$

根据公式(5)计算颗粒截面流量的方法称为 method2。从图3可以看出, method2 得到的曲线是合理的, 颗粒截面流量在流动方向上没有明显变化, 可以近似为直线, 作者用 method2 得到的曲线对不同工况下颗粒出口流量, 内截面流量进行修正, 没有程序崩溃的情况发生。Method1 和 Method 2 的根本区别在于对颗粒表观密度的处理, 前者采用中心格式将颗粒密度插到速度截面上, 而后者采用的是迎风格式。在实际的程序编制中, 对于气相的连续方程和颗粒相的连续方程处理方法是不同的, 气相的连续性方程被转化为压力修正方程, 不同于一般的输运方程, 采用的是中心差分格式。而对于颗

粒相连续方程,需要直接求解其输运方程,采用的是上风格式。正是两种连续性方程差分格式的不同,导致了两相流量修正方法的不同,因此 Method1 对颗粒流量的计算方法是错误的。

需要指出的是,颗粒流量修正的意义和气相不同,如前所述,气相的出口必须进行流量修正,这是 simple 算法的基本要求。气相流量内截面的修正仅仅是一种为了加快收敛而采用的手段,不是必须的。而对于颗粒相,无论是对于出口截面的流量修正还是内截面的流量修正,作用都是为了加快收敛,都不是必须的,因此对颗粒相不加修正也可以得到收敛的结果,区别仅在于收敛速度。

3 有两相质量交换时气相出口流量修正的矛盾

如前所述,对于气相的模拟,出口边界一定要进行流量修正。对于没有两相质量交换的情况,各截面上的流量应该恒等于进口流量。在有两相质量交换的情况下,出口截面的气相流量应该等于进口流量和全部流场内气相从颗粒相获得的质量和,也就是要将各个截面上两相反应引起的流量变化都叠加到出口流量上。本文提出的问题是,对于离出口最近的第一内截面上的两相反应要不要考虑?

如果考虑第一内截面上的两相反应,则出口流量的修正方法如下:

$$U(LP1,J,K)=U(L,J,K)\times(\text{SUMGASIN}+\text{SUOUTSUM1}(L))/\text{massg}(L) \quad (6)$$

其中 SUOUTSUM1(L)是包含 L 截面上反应的全部流场内气相从颗粒相获得的质量和。而对于气相各组分浓度以及气相密度,温度都进行了梯度为 0 的假设,如果用 B 表示这些输运量,则有:

$$B(LP1,j,k)=B(L,j,k) \quad (7)$$

公式(6),(7)所表达的意思是,第一内截面上两相反应既没有引起出任何气相组分的变化,也没有引起气相温度,密度的变化。反应引起的气相流量改变完全反应在出口截面和第一内截面的速度差上。这种出口流量修正的方法不会给程序的收敛造成任何问题,但是显然是不合理的。

如果不考虑第一内截面上的两相反应,则出口流量的修正方法改为

$$U(LP1,J,K)=U(L,J,K)\times(\text{SUMGASIN}+\text{SUOUTSUM1}(L-1))/\text{massg}(L) \quad (8)$$

仍然用公式(7)表示其它输运量的出口条件。对于出口截面和第一内截面,温度,密度,组分,流量都没有变化,符合充分发展条件。但是这种方法也有缺陷,人为的假设第一内截没有两相反应,这也只是一种近似。

最佳的解决方法当然是实际测出出口截面各种输运量,而不用梯度假设,但是实际的实验数据中往往缺少这些内容。还有一种方法就是延长计算域,直到计算域出口真正满足充分发展,则上面给出的两种修正方法效果是一样的,也是合理的。

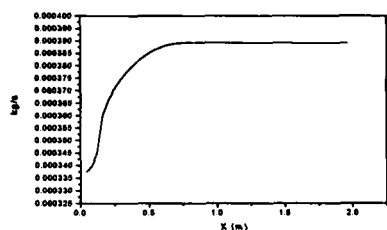


图4 气体截面平均质量流量(颗粒燃烧)

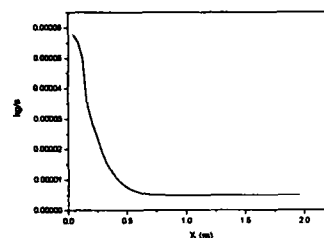


图5 颗粒截面平均质量流量(颗粒燃烧)

图4,图5分别给出了本文计算的气体和颗粒在有两相质量交换时截面的流量变化。从中可以看出,气相流量由于燃烧而增加,颗粒流量由于燃烧而减少。大约1m以后,两者流量没有明显变化,两相反应结束。本文计算域长2m,已经足够避免上述气相出口质量修正矛盾的产生。

4 本文模拟结果

图6给出了气相温度场,从中可以看出,燃烧主要发生在进口附近,下游温度分部均匀。图7给

出了颗粒表观密度分部,体现了双流体模型的特色,如果使用轨道模型,很难给出各种颗粒密度的分部。图8是氧浓度截面分部的实验与计算值,计算和实验模拟的趋势一致,氧浓度在进口附近迅速降低,而后则相对不变,这也说明该实验的燃烧主要发生在进口附近。在进口附近,模拟结果和实验结果符合较好,下游模拟值大于实验值。图9是二氧化碳截面平均浓度实验计算曲线,两者趋势完全一致,计算值高于实验值。图10是NO截面平均浓度的计算实验曲线,趋势符合,数值上有一定的误差。总体看来,模拟的结果是合理的,也说明了本文使用程序的合理性。进口附近,模拟值和实验值接近,下游则误差较大,这也许是由于本程序使用的燃烧模型为E-A的缘故,进口附近湍流较强,预测的反应速率和实际接近,模拟结果也接近,在下游,对于本实验而言,湍流强度非常低,预测的反应速率将低于实际反应速率,从而影响了浓度预报的准确性。

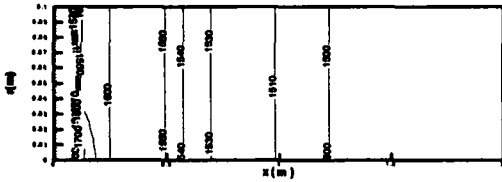


图6 气相燃烧温度 (K)

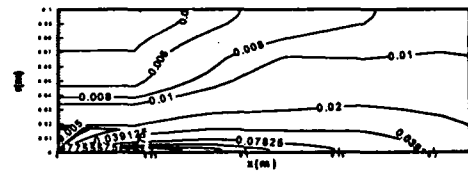


图7 颗粒表观密度 (kg/s)

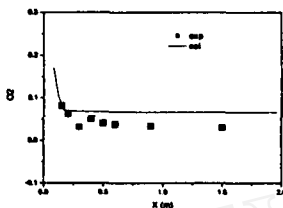


图8 截面氧浓度

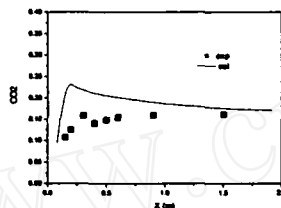


图9 截面二氧化碳浓度

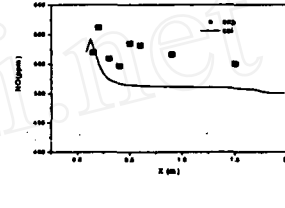


图9 截面NO浓度

5 结论

1. 在双流体模型中,气相出口必须进行流量修正,颗粒相可以进行流量修正,但是二者的修正方法不同,意义也不同。
2. 当有两相反应时,通常的气相出口流量修正方法都会造成误差。延长计算域,自然形成第一内截面无两相反应是一种解决问题的方法。
3. 本文的模拟结果是合理的,和实验基本符合,但在数值上有一定的偏差,需要继续改进各种物理模型。

参考文献

- 1 Patankar S V, Spalding D B. A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. *Int J Heat Mass Transfer*, 1972. 15:1787-1806
- 2 Patankar S V. *Numerical heat transfer and fluid flow*. New York: McGraw-Hill, 1980
- 3 Van Doormaal J P, Raithby G D. Enhancement of the SIMPLE method for predicting incompressible fluid flow, *Numer Heat Transfer*, 1984.7:147-163
- 4 Zhou L X, Guo Y C and Lin W Y. Two-fluid models for simulation reacting gas-particle flows, coal combustion and NO_x Formation. *Combustion Science and Technology*, 2000, 150: 161~180
- 5 Xiaohai Han, Xiaolin Wei, Uwe Schnell, Klaus R.G.Hein. Detailed modeling of hybrid reburn/SNCR processes for NO_x reduction in coal-fired furnaces, *Combustion and Flame*, 2003.132:374-386.