

# 含粗颗粒固液两相流的颗粒相分数计算方法

张 岩\*, 鲁晓兵\*, 张旭辉\*

\* (中国科学院力学研究所, 北京 100190)

**摘要:** 含粗颗粒的固液两相流动问题广泛存在于工程实际中, 如深海采矿的水力提升过程, 水合物开采的固态流化过程以及页岩油气开采的水力压裂过程等。粗颗粒可占据管道直径或裂缝宽度的相当比例, 其运动特征对实际工程的作业效率会产生重要影响。数值模拟方法是研究此问题的重要手段, 但是, 当存在粗颗粒时, 常规欧拉-拉格朗日方法会出现颗粒相分数过大的问题, 导致数值模拟结果不准确或者计算发散。因此, 本文提出了一种计算含粗颗粒稠密固液两相介质中颗粒相分数场的方法。此方法的核心思想为扩散方法, 首先建立粗颗粒的虚拟质量分布函数, 将粗颗粒的质量在全场进行重分布, 并保证重分布的守恒性、连续性和有界性。随后基于颗粒的虚拟质量分布函数的积分获得粗颗粒的相分数场, 并基于粗颗粒的相分数场计算连续相的相分数场并更新流场运动及颗粒运动信息。最后, 将本文的颗粒虚拟质量分布函数方法在开源软件 OpenFOAM 中进行算法植入, 编写求解程序。通过颗粒分布实验对本文的数值模型进行验证, 发现本文的数值模型能够准确预测粗颗粒体积分数场。本文提出的数值模型为含粗颗粒两相流的机理研究和工程应用分析提供新的思路和手段。

**关键词:** 固液两相流, 粗颗粒, OpenFOAM, 欧拉-拉格朗日

## 引 言

含粗颗粒的稠密固液两相流动广泛存在于工程实际中, 如化工、煤炭工业中的颗粒输送<sup>[1-4]</sup>、页岩油气开采中的水力压裂<sup>[5-8]</sup>以及水合物开采中的机械热开采<sup>[9-11]</sup>。工程上关注的是固体颗粒输送过程的输送效率问题、输送过程的参数匹配与优化以及潜在的堵塞问题, 以保证最大的经济效益。但是从学科角度看, 固体颗粒输送过程是一个典型的固液两相流动问题, 此过程的特征是含有粗颗粒、颗粒浓度高、颗粒粒径组成跨度大<sup>[12]</sup>且颗粒与流体耦合效应强。当存在粗颗粒时, 常规欧拉-拉格朗日方法会出现颗粒相分数过大、固液相间插值方法不适用等问题, 导致数值模拟结果不准确或者计算发散。

离散相与连续相相互作用力模化时最重要的参数就是相分数, 即离散相的体积分数, 求解含粗颗粒的稠密固液两相流动研究得到离散相的体积分数即可根据相分数和为 1 得到连续相的体积分数。因此体积分数求解的准确度直接影响数值模拟效果的准确度, 若体积分数与实际相差较大, 会出现不可信的结果。目前欧拉-拉格朗日方法中使用最广泛的颗粒体积分数计算方法为颗粒中心法 (Particle Centroid Method, PCM), 具体计算方式为将单个流体网格内的颗粒体积相加然后除以网格体积, 即为此流体网格内的颗粒体积分数。这是一种平均化方法, 物理意义明确、实现方便且求解速度快, 因此在众多 CFD 软件中都采用此种方法。既然是平均化方法, 那么单个流体网格内颗粒数量越多, 求解结果也就越接近实际情况, 这意味着颗粒尺寸需要远远小于流体网格的尺寸。Deen 等<sup>[12]</sup>研究发现 PCM 方法在颗粒尺寸与流体网格尺寸比值小于 0.2 时计算结果能保证精确性。若颗粒尺寸较大, 如图 1 所示, 颗粒同时占据 2 个流体网格, 颗粒中心处于流体网格 1 内。按照 PCM 计算得到网格 1 内颗粒体积分数不为零网格 2 内颗粒体积分数为零, 这显然与实际不符合。正常做法应为将颗粒分为两部分, 占据网格 1 的部分与占据网格 2 的部分分别计算颗粒体积分数。Peng 等<sup>[13]</sup>发现当颗粒处于网格交界区域时计算得到的颗粒体积分数误差达 50%, 这会导致数值模拟结果出现较大差异。当单个流体网格内颗粒数量较多即颗粒尺寸远小于网格尺寸时, 同时占据多个网格的颗粒数量与单个流体网格内颗粒数量相比可忽略不计, 因此采用 PCM 计算得到的颗粒体积分数误差很小。但是当颗粒尺寸较大, 单个流体网格内颗粒数量很少甚至只有一个颗粒时, PCM 方法计算得到的颗粒体积分数误差很大。因此粗颗粒存在时需要特殊处理。

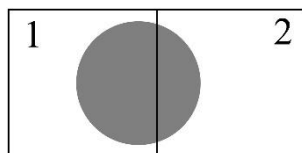


图 1 粗颗粒占据两个网格单元

Fig.1 One coarse particle occupying two cells

常见的处理方法主要有解析方法和非解析方法两大类。解析方法是通过空间几何理论，根据颗粒与流体网格的交叉关系，推导得到单颗粒被流体网格切割开颗粒各部分的真实体积，然后用各部分的真实体积除以流体网格体积，即可得到粗颗粒同时占据多个流体网格时在各个流体网格内的体积分数。这种方法求解精确、与实际情况完全符合，因此计算得到的结果最精确。解析方法已经被推广到结构网格<sup>[13]</sup>和非结构网格中<sup>[14]</sup>，但是解析方法非常复杂，同时此方法计算量较大，因此这种方法应用较少。与解析方法对应的是非解析方法，也叫近似方法，这种方法程序实现容易，可适用于不同的网格和颗粒形状。Goniva 等<sup>[15]</sup>基于解析方法思想，提出一种指示点法。具体实现方式是在每个颗粒内部布置一定数量的指示点，确定指示点在网格中的位置并统计每个网格内指示点的数量，即可得到此网格内颗粒占比。显然指示点法的精确度与布置的指示点数量相关，此种方法仍然计算量较大。Tsuiji 等<sup>[16]</sup>提出的虚拟颗粒法 (Fictitious Particle Method, FPM) 与指示点法的思路类似。Deb 等<sup>[17]</sup>提出的多重网格方法也是一种很好的处理粗颗粒的方法。计算流体时采用细网格，计算颗粒运动时将流体网格重组得到粗网格，令粗网格可以包含更多颗粒，在粗网格中计算得到颗粒体积分数插值回细网格。这种方法在结构网格中实现比较容易，但是在非结构网格中实现较难，因此有其应用的局限性。除了上述几种非解析方法，还有一种比较著名的核函数法 (Statistical Kernel Method, SKM)，通过插值，将当前流体网格内的颗粒体积分数插值到周围流体网格中，从而令颗粒体积分数分布更符合实际，防止出现非物理情况，即单个流体网格中颗粒体积分数大于 1。常见的核函数有高斯分布函数<sup>[18]</sup>、解析函数<sup>[19]</sup>以及反距离权函数<sup>[20]</sup>。SKM 方法程序实现容易且计算速度快，但是缺点是在计算域边界处需要特殊处理。本文基于 SKM 方法颗粒分散到周围网格的思路，提出了颗粒虚拟质量分布函数方法来处理欧拉-拉格朗日方法中粗颗粒的体积分数场，获得了粗颗粒的连续相分数场，为含粗颗粒稠密固液两相流动的颗粒相分数场处理提供了新思路。

## 1 数值方法

### 1.1 模型方程

以单个离散相颗粒为例，单颗粒在流体中的运动主要包括平动和转动。颗粒运动的驱动力来自于流体的曳力、压力梯度力以及颗粒之间的碰撞作用力。基于牛顿第二定律，单个颗粒的运动方程可表示为(Sippola 等, 2018)

$$m_d \frac{d\mathbf{U}_d}{dt} = m_d \mathbf{g} + \mathbf{F}_{dc} + \mathbf{F}_{col} \quad (1)$$

其中  $m_d$  是颗粒质量， $\mathbf{g}$  是重力加速度， $\mathbf{U}_d$  是颗粒运动速度， $\mathbf{F}_{dc}$  是固液相间作用力， $\mathbf{F}_{col}$  是碰撞力 (颗粒-颗粒以及颗粒-壁面)。颗粒相间作用力采用 wenyu 模型<sup>[21]</sup>，碰撞力采用软球模型<sup>[22]</sup>。

连续相用欧拉方法描述，通过求解连续相的质量守恒方程和动量守恒方程获得速度分布场和压力分布场。在管道或者裂缝中的固液两相流动是低速流动，因此连续相可以看作是不可压缩流体。当只有一个连续相时，求解的连续相方程为伪单相流方程。与单相流方程的区别在于考虑了相分数的影响，同时考虑了表征连续相与离散相相间作用的动量交换源项。连续相的质量守恒方程和动量守恒方程分别为<sup>[23]</sup>

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_c \rho_c) + \nabla \cdot (\alpha_c \rho_c \mathbf{U}_c) = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_c \rho_c \mathbf{U}_c) + \nabla \cdot (\alpha_c \rho_c \mathbf{U}_c \mathbf{U}_c) - \nabla \cdot (\alpha_c \rho_c \boldsymbol{\tau}_c) = -\nabla P + \rho_c \mathbf{g} - \mathbf{f}_{dc} \quad (3)$$

其中  $\alpha_c$  是连续相相分数,  $\rho_c$  是连续相密度,  $\mathbf{U}_c$  是连续相速度,  $P$  是连续相压力,  $\mathbf{f}_{dc}$  是固液相间动量交换源项。暂未考虑流动过程中的传热与传质效应。连续相为牛顿流体, 粘性应力张量为

$$\boldsymbol{\tau}_c = \nu_c (\nabla \mathbf{U}_c + \nabla \mathbf{U}_c^T) - \frac{2}{3} \nu_c \nabla \cdot \mathbf{U}_c \mathbf{I} \quad (4)$$

其中  $\nu_c$  为连续相运动粘度,  $\mathbf{I}$  是单位张量。由于本文主要介绍粗颗粒相分数场计算方法, 因此此处不对模型方程作详细介绍。

## 1.2 粗颗粒相分数场

OpenFOAM 的底层框架中采用了 PCM 计算颗粒的相分数场。这种方法只适用于网格内包含多个颗粒情况, 当颗粒尺寸大于网格尺寸时, 这种处理方法误差会非常大。为了解决 OpenFOAM 底层框架中 PCM 的缺陷, 使其能够处理本文需要研究的粗颗粒问题, 需要对 OpenFOAM 框架的底层模型进行修改。本文提出了粗颗粒的虚拟质量分布函数 (Virtual Mass Distribution Function, VMDF)。首先定义颗粒的真实质量分布函数 (True Mass Distribution Function, TMDF) 为

$$M_T(r) = \int_{|\gamma|=0}^r m_T(\gamma) d\gamma \quad (5)$$

$$m_T(\gamma) = \begin{cases} \rho_d & |\gamma| \leq R \\ 0 & |\gamma| > R \end{cases} \quad (6)$$

其中  $M_T(r)$  TMDF,  $m_T(\gamma)$  是真实密度分布函数 (True Density Distribution Function, TDDF),  $\gamma = \mathbf{x} - \mathbf{p}$ ,  $\mathbf{x}$  是流场内任意一点的位置矢量,  $\mathbf{p}$  是颗粒中心点位置矢量,  $R$  是颗粒的半径。单网格内颗粒体积分数的一般计算式为

$$\alpha_d = \frac{1}{V_{\text{cell}}} \sum_{i=1}^n \int_{|\gamma| \in V_{\text{cell}}} \frac{1}{\rho_d} m_{T,i}(\gamma) d\gamma \quad (7)$$

存在粗颗粒时, 采用 VMDF 将粗颗粒影响分散到周围网格中。VMDF 需满足: (1) 有界性, 即虚拟密度分布函数的积分收敛且有界; (2) 守恒性, 即变化前与变化后颗粒的总质量不变; (3) 光滑且可导。考虑到高斯分布函数的特性, 本文提出的 VMDF 为

$$m_V(\gamma) = \frac{4}{3} \pi R^3 \rho_d \frac{1}{(4\pi\tau)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{\gamma^2}{4\tau}\right) \quad (8)$$

此时  $M_V(\infty) = \frac{4}{3} \pi R^3 \rho_d = M_T(\infty)$ , 并且上述函数光滑可导且有界。考虑简单情况, 假设流场内只有一个颗粒, 颗粒占据多个网格, 颗粒中心点在网格  $F$  内, 则任意网格  $E$  内颗粒的体积分数为

$$\begin{aligned}
 \alpha_d(\mathbf{x}_E) &= \frac{1}{V_{\text{cell}}(F)} \int_{|\gamma| \in V_{\text{cell}}(E)} \frac{1}{\rho_d} m_v(\gamma) d\gamma \\
 &= \int_{|\gamma| \in V_{\text{cell}}(E)} \frac{4}{3} \frac{\pi R^3}{V_{\text{cell}}(F)} \frac{1}{(4\pi\tau)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{\gamma^2}{4\tau}\right) d\gamma \\
 &= \int_{|\gamma| \in V_{\text{cell}}(E)} \frac{\alpha_{d,\text{PCM}}(\mathbf{x}_F)}{(4\pi\tau)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{\gamma^2}{4\tau}\right) d\gamma
 \end{aligned} \tag{9}$$

其中 $\mathbf{x}_E$  和 $\mathbf{x}_F$  是网格 $E$ 和 $F$ 中心点的位置矢量,  $V_{\text{cell}}(E)$  和 $V_{\text{cell}}(F)$  是网格 $E$ 和 $F$ 的体积,  $\alpha_{d,\text{PCM}}(\mathbf{x}_F)$ 是基于 PCM 计算得到的网格 $F$ 内的颗粒相分数。假设单个流体网格内颗粒相分数相同, 用网格中心点相分数代表此网格内颗粒相分数。根据格林函数, 方程(2.151)是下方方程的解

$$\begin{cases} \frac{\partial \varphi(\beta, \tau)}{\partial \tau} = \nabla^2 \varphi(\beta, \tau) \\ \varphi(\beta, \tau)|_{\tau=0} = \alpha_{d,\text{PCM}}(\mathbf{x}_F) \end{cases} \tag{10}$$

因此, 要获得颗粒 $\mathbf{p}$ 的相分数场, 可数值求解方程(10)并将边界条件设为零梯度以保证守恒性。

## 2 模型验证

为了验证本文数值模型的有效性, 本节采用数值算例对 VMDF 方法计算的颗粒相分数场进行验证。在长度( $x$ 方向)和高度( $y$ 方向)尺寸为  $160d \times 160d$  ( $d$ 为颗粒直径)的二维区域的中间和边界的随机分布了 5000 个颗粒(图 2)。计算区域的 $z$ 方向只有一层网格单元,  $z$ 方向的网格厚度与颗粒直径相同, 并且所有颗粒都位于垂直于 $z$ 方向的同一平面上。由于本节主要验证颗粒的相分数场, 因此颗粒和流体都保持静止。本节不仅给出了基于 VMDF 方法获得的计算结果, 还给出了基于多重网格方法和基于 PCM 的计算结果。图 3 给出了不同方法计算得到的颗粒相分数的对比, 数据取自图中红色虚线截面。可以发现, VMDF 方法得到的颗粒相分数和多重网格方法得到的颗粒相分数在中间部分和边界部分都吻合得很好。但是, 由于多重网格方法的网格分辨率较低, 因此 VMDF 方法获得的结果更光滑。然而, 从比较中可以明显看出, PCM 的计算结果的离散性较大, 颗粒相分数最大值约为 0.6, 已经接近颗粒堆积浓度的上限, 显然不符合实际。相比之下, 双网格法和 VMDF 法得到的结果不存在这种现象。

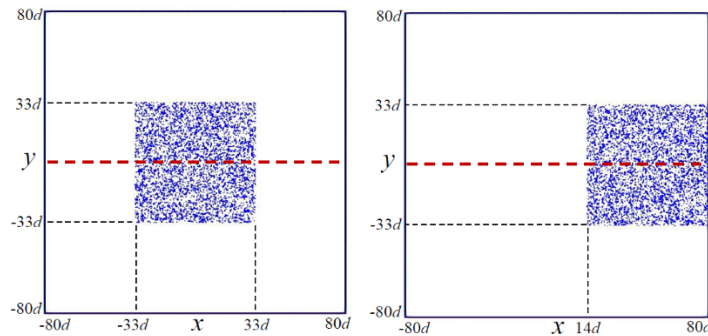


图 2 颗粒分布图

Figure 2 Diagram of particle distribution

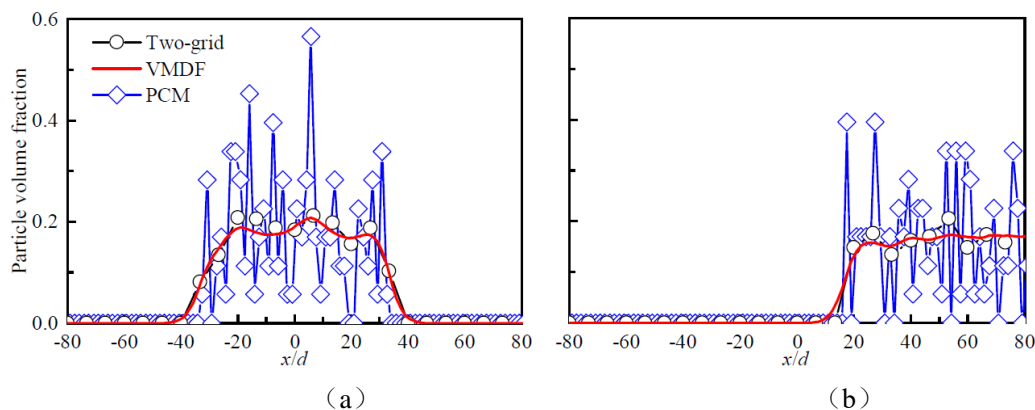


图3 VMDF方法、PCM以及多重网格方法计算得到的颗粒相分数对比，(a)中间区域，(b)边界区域

Figure 12: Comparison of the particle volume fraction between the VMDF method, the two-grid method, and the PCM, (a) in the middle region, and (b) in the boundary region

### 3 结论

含粗颗粒的稠密固液两相流动广泛存在于工程实际中，数值模拟方法是研究此问题的重要手段。但是，常规欧拉-拉格朗日方法在处理此问题时会遇到颗粒相分数过大的非物理情况。因此，针对此问题，本文提出了颗粒虚拟质量分布函数方法来计算粗颗粒的相分数场，核心思路是扩散方法，通过将粗颗粒的影响分散到周围网格中以获得均匀的颗粒相分布。随后将此模型在 OpenFOAM 中进行算法植入，并采用颗粒随机分布算例对算法进行验证。数值结果对比发现本文提出的颗粒虚拟质量分布函数方法可以获得较准确的颗粒相分数分布。本文研究为含粗颗粒的稠密固液两相流动问题的研究提供了新的思路。

### 参考文献

- 1 Asim T and Mishra,R. Optimal design of hydraulic capsule pipelines transporting spherical capsules. The Canadian Journal of Chemical Engineering, 2016, 94(5): 966-979.
- 2 Oh JW, Jung JY, and Hong S. On-board measurement methodology for the liquid-solid slurry production of deep-seabed mining. Ocean Engineering, 2018, 149:170-182.
- 3 Zhou M, Wang S, Kuang S, et al. Cfd-dem modelling of hydraulic conveying of solid particles in a vertical pipe. Powder Technology, 2019, 354:893-905.
- 4 阳宁, 夏建新. 国际海底资源开发技术及其发展趋势. 矿冶工程, 2000, 20(1):1-4. (Yang Ning, Xia Jianxin. Development Techniques for International Sea-floor Resources and Their Future Trend. MINING AND METALLURGICAL ENGINEERING, 2000, 20(1): 1-4. (in Chinese) )
- 5 Osipov A A. Fluid mechanics of hydraulic fracturing: a review. Journal of Petroleum Science and Engineering, 2017, 156:513-535.
- 6 Sahai JR.and Miskimins EOK. Laboratory results of proppant transport in complex fracture systems. SPE Hydraulic Fracturing Technology Conference, 2014:5613.
- 7 沈云琦, 李凤霞, 张岩, 等. 复杂裂缝网络内支撑剂运移及铺置规律分析. 油气地质与采收率, 2020, 27(5):134-142.(Sheng Yunqi, Li Fengxia, Zhang Yan, et al. Analysis of proppant migration and layout in complex fracture network. Petroleum Geology and Recovery Efficiency, 2020, 27(5): 134-142. (in Chinese) )
- 8 Tong S, Singh R, Mohanty KK. A visualization study of proppant transport in foam fracturing fluids. Journal of Natural Gas Science and Engineering, 2018, 52:235-247.
- 9 肖业祥, 杨凌波, 曹蕾, 等. 海洋矿产资源分布及深海扬矿研究进展. 排灌机械工程学报, 2014, 32(4):319-326. (Xiao Yewang, Yang Lingbo,

- Cao Lei, et al. Distribution of marine mineral resource and advances of deep-sea lifting pump technology. *Journal of Drainage and Irrigation Machinery Engineering*, 2014, 32(4):319-326. (in Chinese)
- 10 Li P, Zhang X, and Lu X. Three-dimensional eulerian modeling of gas-liquid-solid flow with gas hydrate dissociation in a vertical pipe. *Chemical Engineering Science*, 2019, 196:145-165.
- 11 Li P, Zhang X, and Lu X. Dissociation equilibrium height and friction coefficient in pipeline transportation of gas hydrate-bearing sediment particles. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 2020, 81:103470.
- 12 Deen N, Van Sint Annaland M, Van der Hoef M, et al. Review of discrete particle modeling of fluidized beds. *Chemical Engineering Science*, 2007, 62(1):28-44.
- 13 Peng Z, Doroodchi E, Luo C, et al. Influence of void fraction calculation on fidelity of CFD-DEM simulation of gas-solid bubbling fluidized beds. *AIChE Journal*, 2014, 60(6):2000-2018.
- 14 Wu C, Zhan J, Li Y, et al. Accurate void fraction calculation for three-dimensional discrete particle model on unstructured mesh. *Chemical Engineering Science*, 2009, 64(6):1260-1266.
- 15 Goniva C, Kloss C, Deen N G, et al. Influence of rolling friction on single spout fluidized bed simulation. *Particuology*, 2012, 10(5):582-591.
- 16 Tsuji T, Higashida K, Okuyama Y. Fictitious particle method: A numerical model for flows including dense solids with large size difference. *AIChE Journal*, 2014, 60(5):1606-1620.
- 17 Deb S, Tafti D K. A novel two-grid formulation for fluid-particle systems using the discrete element method. *Powder Technology*, 2013, 246:601-616.
- 18 Glasser B J, Goldhirsch I. Scale dependence, correlations, and fluctuations of stresses in rapid granular flows. *Physics of Fluids*, 2001, 13(2):407-420.
- 19 Gui N, Yang X, Tu J, et al. A fine LES-DEM coupled simulation of gas-large particle motion in spouted bed using a conservative virtual volume fraction method. *Powder Technology*, 2018, 330:174 - 189.
- 20 Zhang Y, Zhao Y, Gao Z, et al. Experimental and Eulerian-Lagrangian-Lagrangian study of binary gas-solid flow containing particles of significantly different sizes. *Renewable Energy*, 2019, 136:193-201.
- 21 Wen C Y, Yu Y H. A generalized method for predicting the minimum fluidization velocity. *AIChE Journal*, 1966, 12(3):610-612.
- 22 Tsuji Y, Tanaka T, Ishida T. Lagrangian numerical simulation of plug flow of cohesionless particles in a horizontal pipe. *Powder Technology*, 1992, 71(3):239-250.
- 23 Zhou Z, Kuang S, Chu K, et al. Discrete particle simulation of particle-fluid flow: Model formulations and their applicability. *Journal of Fluid Mechanics*, 2010, 661:482-510.

# Calculation of particle phase fraction for solid-liquid two-phase flow containing coarse particles

Zhang Yan\*, Lu Xiaobing\*, Zhang Xuhui\*

*\*(Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)*

**Abstract:** The problem of solid-liquid two-phase flow containing coarse particles is widely found in engineering practice, such as the hydraulic lifting process in deep-sea mining, the solid fluidization process in hydrate extraction and the hydraulic fracturing process in shale oil and gas extraction. Coarse particles can occupy a considerable proportion of the pipe diameter or fracture width, and their motion characteristics have a significant impact on the operational efficiency of the actual project. Numerical simulation method is an important tool to investigate this problem. However, the conventional Euler-Lagrange method can suffer from excessive particle phase fraction, resulting in inaccurate numerical simulation results with coarse particles. Therefore, this paper proposes a method to calculate the particle phase fraction field in dense solid-liquid two-phase media containing coarse particles. The core idea of this method is the diffusion method, which firstly establishes the virtual mass distribution function of coarse particles, redistributes the mass of coarse particles in the whole field, and ensures the conservation, continuity and boundedness of the redistribution. Then, the phase fraction field of coarse particles is obtained based on the integration of the virtual mass distribution function of particles, and the phase fraction field of continuous phase is calculated based on the phase fraction field of coarse particles and the information of flow field motion and particle motion is updated. Finally, the particle virtual mass distribution function method of this paper is implanted in the open source software OpenFOAM and the solution procedure is coded. The numerical model of this paper is validated by particle distribution experiments. It is found that the numerical model of this paper can accurately predict the volume fraction field of coarse particles. The numerical model proposed in this paper provides new ideas and means for the mechanistic study and engineering application analysis of two-phase flow containing coarse particles.

**Key words:** Solid-liquid two-phase flow, Coarse particles, OpenFOAM, Eulerian-Lagrangian