

# 颗粒群研究：多相流多尺度数值模拟的基础

毛在砂

(中国科学院过程工程研究所绿色过程与工程重点实验室, 北京 100190)

**摘要:** 用两流体模型及颗粒轨道模型数值模拟过程工程设备中的多相流, 都需要表达浓度较高的分散相和连续相间的作用力的本构方程. 本工作综述了多相流中颗粒受力研究的现状和尚待解决的问题. 对单个颗粒(包括流体颗粒)在静止和运动流体中的受力情况的研究结果比较丰富, 但对颗粒群的研究则很不充分. 对颗粒受的曳力研究较多, 但还缺乏可信的计算升力、非稳态力等的公式. 因此颗粒群的研究成为多相流准确多尺度数值模拟的关键. 开发能处理整体和局部均存在非均匀性的多相流的高效算法也是有待克服的困难.

**关键词:** 颗粒; 液滴; 气泡; 颗粒群; 相间作用力; 多相流; 数值模拟; 颗粒聚团

**中图分类号:** TQ022      **文献标识码:** A      **文章编号:** 1009-606X(2008)04-0645-15

## 1 前言

在化工、石油化工、冶金、能源化工、生物化工、环境工程和食品工程等领域中, 经常涉及多相体系的输送、分离和反应等过程. 除了对多相体系进行系统、深入的实验研究和理论分析以外, 越来越多的研究人员也开展了基于数学模型的数值模拟. 一方面, 数值模拟可以部分地替代实验, 降低实验研究的成本, 同时也能得到许多实验不能测定的详尽信息. 另一方面, 非线性的多相流动体系和流动、传递、反应过程耦合的复杂体系的理论分析往往十分困难, 而性能日益优异的计算机和数值计算却能有效地求解涉及的偏微分方程模型, 以认识多相体系的化学工程性质.

从1957年化学反应工程学诞生起, 数学模型就成为研究单相和多相化学反应器的重要工具, 并且在化学工程整个学科内逐渐得到普及. 化学工程数学模型工作的发展从简化、经验的数学模型向复杂和充分反映过程机理的方向稳步前进. 当然机理性(也称为白箱)模型是比较理想的, 因为能用数学公式反映化工体系内的过程机理, 因而具有预测性, 外推使用的风险较小. 处理大型化工设备时, 一般不能将体系内部的状态视为均匀, 所以不宜使用集中参数模型, 需要将温度、浓度、流速、相含率等状态变量当作是空间坐标的函数. 这样数学模型成为分布参数模型, 通常由一组偏微分方程构成. 而且, 多相体系中一般除了有一个连续相以外, 其他物相通常以分散相的方式存在, 分散为颗粒(或液滴、气泡, 以下通称为颗粒), 以增大相界面积, 促进相间传递过程的速率和多相化学反应的速率.

这样, 在一个多相化学反应器中, 不同物相中的反应物通过相间传递而进行化学反应, 因此反应器的总体行为与固体或流体颗粒的行为密切相关. 一方面颗粒是在反应器内的宏观多相流动形成的局部环境中运动、传递和反应的, 反过来, 颗粒的介观尺度上的性能在全反应器的积分则是反应器的总体操作特性. 因此, 化学反应器等过程设备的数学模型应该在设备尺度和颗粒尺度上耦合进行. 这中间涉及一系列化学工程学科普遍关心的前沿课题: (1) 化学反应器中的多相流动的数值模拟, 这将为分散相颗粒在反应器中的行为提供局部的环境; (2) 在此环境中, 一个颗粒在与周围临近的其他颗粒相互作用中的运动、传递、混合行为, 即颗粒在颗粒群中的行为; (3) 认识颗粒群行为的基础是单颗粒行为的研究; (4) 准确总结介观尺度上颗粒行为的规律, 将其正确地应用于宏观尺度的多相流动、传递和化学反应的数值模拟. 从目前化学工程研究的现状来看, 这些课题还没有很好地解决.

本工作综述了单颗粒(包括液滴和气泡)和颗粒群的研究现状、存在的问题, 以及单颗粒和颗粒群研究对多相流和化工过程设备数值模拟的重要性, 同时也提出了颗粒行为研究和多相流数值模拟必须深入研究的一些学科前沿问题.

## 2 多相流的数值模拟

通常数值模拟研究多相流的方法主要有欧拉-拉格朗日(Euler-Lagrange)方法<sup>[1-3]</sup>和欧拉-欧拉方法<sup>[4-7]</sup>. 欧拉-拉格朗日方法把液体作为连续相, 用连续相速度时均值的 Navier-Stokes 方程求解; 同时追踪每一个颗粒

收稿日期: 2008-06-19, 修回日期: 2008-06-26

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(编号: 20576133; 20676134); 国家自然科学基金和中国石油天然气股份有限公司联合资助项目(编号: 20490206); 国家重点基础研究发展规划(973)基金资助项目(编号: 2004CB217604)

作者简介: 毛在砂(1943-), 男, 四川省成都市人, 博士, 研究员, 化学工程专业, E-mail: zsmiao@home.ipe.ac.cn.

的运动轨迹,将颗粒视为无体积的质点,总计连续相流体作用在质点上的相间作用力,按牛顿定律描述颗粒的运动.而欧拉-欧拉方法(也叫两流体模型)把两相分别当作连续介质,两相在同一空间点上共存,各自遵从自身的动量、质量和能量传递方程,两相间通过相间作用力和共用的压力场互相耦合.更准确的数值模拟也考虑颗粒相对连续相的反作用力,称为双向耦合模型.不论用什么样的多相流模拟方法,在数学模型中正确地表达相间作用力是模拟成功的关键.

欧拉-欧拉两流体模型通常采用雷诺时均方法处理瞬时运动方程组(更严密的理论可参考文献[8,9]),然后封闭因湍流波动而产生的二阶和高阶关联项,最终得到的通用模型方程仍由连续性方程和动量守恒方程构成:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho_k \alpha_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \alpha_k \mathbf{u}_k) &= 0, \quad (1) \\ \frac{\partial(\rho_k \alpha_k \mathbf{u}_k)}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla(\rho_k \alpha_k \mathbf{u}_k) &= \\ -\alpha_k \nabla p + \rho_k \alpha_k \mathbf{g} + \nabla \cdot [\mu_{\text{eff}} \nabla \mathbf{u}_k] &+ \mathbf{F}_k + \mathbf{S}_k, \quad (2) \end{aligned}$$

其中,  $\mathbf{F}_k$  为相间作用力,  $\mathbf{g}$  为重力加速度,  $\mathbf{S}_k$  为将方程写为通用形式而产生的源项,下标  $k=c, d$ , 分别表示连续相和分散相.两相的相含率(体积分数)应满足归一化条件  $\sum \alpha_k = 1$ .两流体模型应用于气液两相流动时,多数研究常常忽略气泡的合并与破碎,其原因之一是,在气液反应器中以 2~8 mm 大小的气泡最常见,而此范围内的气泡的终端(滑移)速度几乎是不变的(0.25 m/s),因此即使考虑了气泡大小的变化,对数值模拟结果的影响并不大<sup>[10]</sup>.若在两流体模型中增加粒数平衡模型,以便同时模拟气泡群中气泡大小分布的发展与变化,能得到与实际结果更一致的模拟结果,但其代价是更复杂的计算程序和更多的计算时间<sup>[11]</sup>.

在欧拉-拉格朗日方法中,连续相仍遵从上述两个方程,但分散相的每一个颗粒均视为无体积的质点,在颗粒自身的重力、浮力、其他体积力(例如电磁场产生的力)和相间作用力的合力  $\mathbf{F}_i$  的驱动下,按牛顿第二定律确定此颗粒的速度矢量  $\mathbf{u}_i$  和位置矢量  $\mathbf{x}_i$ :

$$m_i \left( \frac{d\mathbf{u}_i}{dt} \right) = \mathbf{F}_i, \quad \frac{d\mathbf{x}_i}{dt} = \mathbf{u}_i. \quad (3)$$

当分散相的浓度较低、且连续相流动的推动力主要不是相间作用力时,才可以近似地忽略分散相对连续相的作用力,只考虑连续相对分散相颗粒的作用力(单向耦合).当颗粒的浓度较高时,分散相对连续相的总作用力增大,逐渐变得不能忽略,必须在连续相动量方程的  $\mathbf{F}_c$  中包括颗粒对连续相流体的作用力(双向耦合),是概念上更为合理的模型.

相间作用力在欧拉-拉格朗日模型中比在欧拉-欧拉模型中容易处理,例如对单个固体颗粒,两两颗粒间的弹性碰撞、材料的塑性对碰撞能量的吸收、颗粒间的接触摩擦力等,都能较准确地用公式表达出来.欧拉-拉格朗日方法的主要缺点是,由于需要对每个颗粒进行追踪,而实际的化工体系中颗粒总数大到  $10^{10}$  以上,颗粒运动的速度也不小,需要采用很小的时间步长来积分式(3),因此计算量很大,对计算机硬件和软件的要求都很高.近年来的气固两相流化床的数值模拟中,含有超过 2000 个颗粒的体系还难以数值模拟. Ouyang 等<sup>[12]</sup>用欧拉-拉格朗日法数值模拟了高 1 m、宽 0.15 m、含 15000 个直径 0.2 mm、弹性恢复系数为 0.9 的固体颗粒的二维流化床,得到了比较合乎实际的典型的流化床环核结构,但床层固相体积分数仅为 0.24%. Chu 等<sup>[13]</sup>将离散颗粒法(Discrete Element Method, DEM)程序与 CFD 软件 Fluent 结合起来,模拟了含 20000 个直径分别为 0.5, 0.375 和 0.25 mm 球形颗粒的 3D 循环流化床(直径 15 mm,高 50 mm,体积分数 11.5%).相比之下,当分散相相含率较高时,欧拉-欧拉方法所需的计算机时和容量较小,比较适合尺度较大的化工设备的数值模拟.

当反应器中的稳态流动状态是我们关心的对象时,可用两种不同的算法得到数值模拟结果.其一是按式(1)和(2)进行非稳态的模拟,从实际的或假想的初始状态出发,随着时间的推进,流动状态逐渐收敛到稳定不变的状态,优点是采用较小的时间步长,每步的求解过程容易收敛,可以得到真实的发展过程,但得到稳态解需要的计算时间很长;其二是将方程组中的时间导数项去掉,即直接求解稳态的两流体模型:

$$\nabla \cdot (\rho_k \alpha_k \mathbf{u}_k) = 0, \quad (4)$$

$$\mathbf{u} \cdot \nabla(\rho_k \alpha_k \mathbf{u}_k) = -\alpha_k \nabla p + \rho_k \alpha_k \mathbf{g} + \nabla \cdot [\mu_{\text{eff}} \nabla \mathbf{u}_k] + \mathbf{F}_k + \mathbf{S}_k. \quad (5)$$

为了克服微分方程模型的非线性,需要在数值求解过程中采用适当的松弛因子,使实际上用拟线性化方法得到的离散方程系数比较准确,求解过程不至于发散.这种算法得到解的计算时间较短,其收敛过程可以理解为在“变换”的时间坐标轴上,多相流动向稳态过渡的发展过程.如果所模拟的体系实际上真的是稳定的,那一般来说稳态算法是可以得到收敛解的;但我们处理的对象是湍流下的多相流动,其实质是不稳定、动态的,那么也可能用稳态算法不能得到满足收敛判据的稳态解,流场计算的残差会在一个较低的水平上波动,既不收敛,也不发散.在 Rushton 搅拌浆搅拌的气液体系的数值模拟中,曾在通气量在“气泛”点附近情况下的模拟中发现过难以得到收敛的流场,这可能就是真正的非稳态流

动在“扭曲”的时间域上的反映<sup>[14]</sup>。

模拟多相流的方法还有 Lattice-Boltzmann 法 (LBM)，此方法以微观粒子动力学为基础，统计粒子在规则网格上按一定规则游动的平均值，来模拟宏观流体力学和动力学现象，模拟对象已由简单的单相流向有自由界面的多相流动和化学反应流方向发展<sup>[15]</sup>。拟颗粒模型是一种与 LBM 类似的数值模拟方法<sup>[16]</sup>，它将连续性的流体模型化为假想的固体颗粒，在气固两相流数值模拟中的应用正在发展。这两种方法描述相间作用力的概念和方法与经典的方法明显不同，在此不深入讨论。

### 3 分散相和连续相间的相互作用力

常见的相间作用力有曳力、升力、虚拟质量力、Basset 力等，它们的机理各不相同，其物理意义得到普遍承认，在欧拉-欧拉方法的数值计算中一般以体积力的形式出现在动量平衡方程中。

#### 3.1 曳力

颗粒受到的曳力(通常是指颗粒稳态运动时的数值)的算式为

$$F_d = -\frac{1}{2} C_d \rho_c \left( \frac{\pi d_p^2}{4} \right) |u_p - u_c| (u_p - u_c), \quad (6)$$

这也是曳力系数的定义。其中  $C_d$  为曳力系数， $d_p$  为颗粒的当量直径。单个固体和流体颗粒的曳力系数的实验数据总结成的经验关联式很多，由于需要的实验材料、体系种类和纯净程度、实验方法和参数范围不同，关联式的形式也差别很大，甚至数值也有明显不同。不同流动状况下的曳力系数差异较大，因此需要认真核对关联式的适用范围，谨慎选用。

##### 3.1.1 爬流的曳力系数

对于爬流中的流体颗粒<sup>[17]</sup>，即当颗粒雷诺数远小于 1 时，球形颗粒内(颗粒相，下标 p)外(连续相，下标 c)的流体运动的惯性可以忽略，稳态流动的控制方程简化为欧拉方程：

$$\nabla p_k = \mu \nabla^2 u_k \quad (k=p, c), \quad (7)$$

其中，压力已经包含了重力的作用在内。颗粒作直线、轴对称运动的内外流场有所谓的 Hadamard-Rybczynski 解析解，由此得到的颗粒曳力系数值为

$$C_d = (8/Re_p) [(2+3\kappa)/(1+\kappa)] \quad (\kappa = \mu_p/\mu_c), \quad (8)$$

其中， $\kappa$  为粘度比。相应的终端速度为

$$U = [gd_p \Delta \rho / (18\mu_c)] [(2+3\kappa)/(1+\kappa)], \quad (9)$$

对于固体颗粒  $\kappa \rightarrow \infty$ ,  $C_d = 24/Re_p$ ; 而气泡  $\kappa = 0$ ,  $C_d = 16/Re_p$ ; 液滴的曳力系数在固体颗粒和气泡之间，随着液滴的粘

度逐渐增高，液滴内部环流和表面对流速度减小，液滴的曳力系数增大，逐渐逼近固体颗粒的数值。

另外，液液体系中常有微量的表面活性剂杂质，因此液滴表面的对流受阻，行为更接近固体颗粒，因而实验测定的  $C_d$  值往往在式(8)和固体颗粒( $C_d = 24/Re_p$ )之间。气泡的运动也受表面活性剂的影响， $C_d$  也往往高于  $16/Re_p$ 。

当颗粒的雷诺数增大到 0.1 以上、不再满足爬流假设时，流体流动没有解析解，只能通过实验测定得到曳力系数的数值，并将其总结为有一定精度的经验关联式。

#### 3.1.2 固体颗粒

固体颗粒的曳力系数是研究最充分的。比较简单、常用的关联式<sup>[18]</sup>是

$$C_d = \begin{cases} \frac{24}{Re_p} (1 + 0.15 Re_p^{0.687}) & (Re_p < 1000) \\ 0.44 & (Re_p \geq 1000) \end{cases} \quad (10)$$

Clift 等<sup>[17]</sup>总结、分析了在不同雷诺数区间的理论研究和实验数据，推荐了适用于雷诺数直到  $10^6$  的分段表达的曳力系数经验关联式：

$$C_d = \begin{cases} \left( \frac{24}{Re_p} \right) \left[ 1 + \left( \frac{3}{15} \right) Re_p \right] & (Re_p < 0.01) \\ \left( \frac{24}{Re_p} \right) (1 + 0.1315 Re_p^{0.82 - 0.05w}) & (0.01 < Re_p \leq 20) \\ \left( \frac{24}{Re_p} \right) (1 + 0.1935 Re_p^{0.6305}) & (20 < Re_p \leq 260) \\ 1.6435 - 1.1242w + 0.1558w^2 & (260 < Re_p \leq 1500) \end{cases} \quad (11)$$

其中， $\lg w = \lg Re_p$ 。

Morsi 等<sup>[19]</sup>也提出了一个形如  $C_d = A + B/Re_p + C/Re_p^2$  的分段表达的颗粒曳力系数关联式，适用直到  $Re > 50000$  的牛顿区。

图 1 比较了这 3 个关联式，对于工程两相流的计算，它们在雷诺数 1~1000 的范围内几乎是相同的。3 条曲线在  $0.01 < Re < 1000$  区间的相对误差仅为 1.2%。

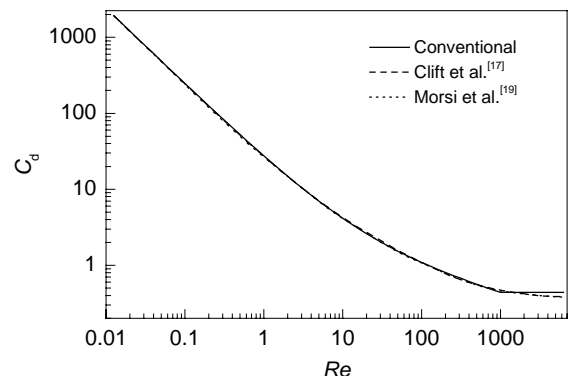


图 1 单个固体球形颗粒 3 个曳力系数关联式的比较  
Fig.1 Comparison of frequently used correlations of drag for single spherical solid particles

### 3.1.3 气泡

气泡的曳力系数与气泡形状有关. 对于球形气泡, 较早的关联式比较简单, 如 Haas 等<sup>[20]</sup>提出

$$C_d = 14.9 Re_p^{-0.78} \quad (Re_p > 2), \quad (12)$$

Peebles 等<sup>[21]</sup>提出

$$C_d = 18.7 Re_p^{-0.68} \quad (2 < Re_p < 4.02 Mo^{-0.214}). \quad (13)$$

Hamielec 等<sup>[22]</sup>用 Galerkin 法数值求解球形流体颗粒的运动, 计算出其曳力, 总结出如下关联式:

$$C_d = \{3.05(783\kappa^2 + 2142\kappa + 1080) / [(60 + 29\kappa)(4 + 3\kappa)]\} Re_p^{-0.74} \quad (2 < Re_p < 100), \quad (14)$$

适用于  $Re = 4 \sim 100$ , 其最大误差是 20%(固体,  $Re = 10$ ).

不少气泡流的数值模拟研究中采用固体颗粒的曳力系数(如文献[1]), 因为多数的实际气液体系中(自来水等)都受微量表面活性剂的污染, 因而小气泡的运动与固体颗粒相近.

同样可以按气泡雷诺数的大小将气泡的运动分为几个不同的流动区域: 低速区、粘性区、变形区和球帽气泡区, 分别关联曳力系数<sup>[23]</sup>.

Tomiyama<sup>[24]</sup>提出了适用于所有流动区域的统一关联式, 对轻微污染体系:

$$C_d = \max \left\{ \min \left[ \frac{24}{Re_p} \left( 1 + 0.15 Re_p^{0.687} \right), \frac{72}{Re_p} \right], \frac{8}{3} \frac{Eo}{Eo + 4} \right\}, \quad (15)$$

对污染体系:

$$C_d = \max \left\{ \left( \frac{24}{Re_p} \right) \left( 1 + 0.15 Re_p^{0.687} \right), \left( \frac{8}{3} \right) \left[ \frac{Eo}{Eo + 4} \right] \right\}, \quad (16)$$

适用范围是  $10^{-2} < Eo < 10^3$ ,  $10^{-3} < Re_p < 10^6$ ,  $10^{-14} < Mo < 10^7$ .

### 3.1.4 液滴

和气泡一样, 液滴变形也是影响液滴曳力系数的重要因素. 当界面张力较大时, 液滴在  $Re < 600$  时基本保持球形或椭球形. 但液滴的曳力系数也与液滴的粘度或粘度比  $\kappa = \mu_p / \mu_c$  有很大关系, 因此总结经验关联式的难度更大, 报道也少. Clift 等<sup>[17]</sup>汇集了  $\kappa = 0.3$  和 55 的液滴曳力系数的一些数据, 并同  $\kappa = 0$ (气泡)及  $\kappa \rightarrow \infty$ (固体颗粒)的曳力系数进行了比较.

单个液滴在另一不互溶的静止液相中的稳态运动的曳力系数趋势如图 2 所示<sup>[25]</sup>, 随  $Re$  增大, 变形逐渐明显, 尾部出现尾涡, 液滴由直线运动过渡到之字形或螺旋形上升. 在液滴雷诺数大致为 600~900 时, 液滴终端速度达到极大值. 之后液滴变形很大, 液滴形状发生振荡, 尾涡不对称地脱落, 致使  $C_d$  急剧增大. 当  $Re >$

1000~3000, 液滴由于流体力学不稳定性而解体, 不能稳定存在.

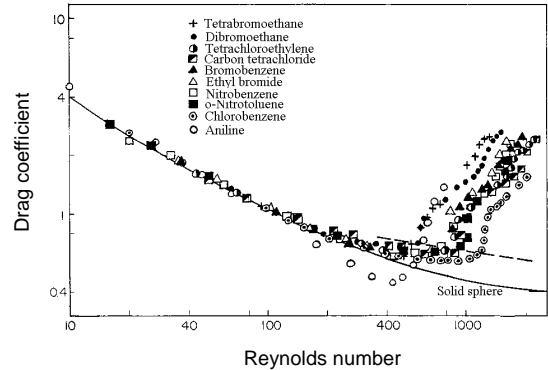


图 2 单液滴曳力系数与液滴雷诺数的关系<sup>[25]</sup>

Fig.2 Drag coefficient of single liquid drops vs.  $Re$ <sup>[25]</sup>

图 2 中的曳力系数曲线最低点与图 3 中液滴终端速度最大值对应. 可按液滴雷诺数来分段关联.

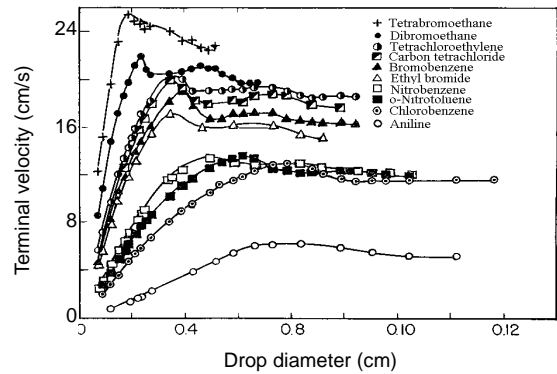


图 3 单液滴终端速度与液滴直径的关系<sup>[25]</sup>

Fig.3 Terminal velocity of single drops versus drop diameter<sup>[25]</sup>

比较简单的曳力系数公式为

$$C_d = 10 Re_p^{-0.5}. \quad (17)$$

Rivkind 等<sup>[26]</sup>总结数值模拟结果和文献实验数据建议, 得到

$$C_d = [(C_{d,b} + \kappa C_{d,s}) / (1 + \kappa)], \quad (18)$$

$Re_p$  在 0.5~200 范围内的误差不超过 5%~7%. 带入适当的  $C_{d,b}$  和固体颗粒的  $C_{d,s}$  关联式, 所得的公式也有足够的准确度:

$$C_d = (1 + \kappa)^{-1} [\kappa (24 / Re_p + 4 / Re_p^{1/3}) + 14.9 / Re_p^{0.78}]. \quad (19)$$

Hu 等<sup>[25]</sup>在大量实验数据基础上归纳出的关联式为

$$C_d We P^{0.15} = \begin{cases} \frac{4}{3} \left( \frac{Re_p}{P^{0.15}} + 0.75 \right)^{1.275} & (2 < C_d We P^{0.15} < 70) \\ 0.045 \left( \frac{Re_p}{P^{0.15}} + 0.75 \right)^{2.37} & (C_d We P^{0.15} \geq 70) \end{cases}, \quad (20)$$

其中, 物性参数  $P=\rho_c^2 \sigma^3 / \mu_c^4 g \Delta \rho$ , 液滴 Weber 数  $We=U^2 d_p \rho_c / \sigma$ .  $Y=C_d We P^{0.15}=70$  和  $X=Re_p / P^{0.15}=21.5$  是上述关联曲线上转折点的坐标, 对应于液滴的最大速度点, 用此坐标预测的液滴最大终端速度的误差小于 10%.

总的说来, 在静止流体中的曳力系数已经比较清楚, 但其他的情况(剪切流、湍流、2 个分散相共存等)还缺乏研究.

### 3.1.5 湍流的影响

单颗粒在静止流体中的受力情况是研究得相对比较清楚的, 而其他情况下的研究则不够充分. 近年来的研究注意到湍流对颗粒受力的影响. 颗粒实际上是在振荡的涡团中运动的, 涡团运动改变了颗粒的尾流, 湍流还使颗粒不断加速和减速, 改变了边界层的状态, 所以湍流的特性(包括强度、尺度和频率)对颗粒的曳力系数有明显的影响. Brucato 等<sup>[27]</sup>提出了用湍流耗散涡团的 Kolmogorov 尺度  $\lambda$  和层流状态的  $C_{d0}$  来关联固体颗粒沉降的曳力系数  $C_d$ :

$$(C_d - C_{d0}) / C_{d0} = 8.76 \times 10^{-6} (d_p / \lambda)^3, \quad (21)$$

$$\lambda = (v_c^3 / \varepsilon_c)^{0.2}. \quad (22)$$

由于缺少湍流对气泡曳力系数影响的研究, Lane 等<sup>[28]</sup>改进了其中的经验系数, 将其用于搅拌槽中气液两相流动的模拟:

$$(C_d - C_{d0}) / C_{d0} = 6.5 \times 10^{-6} (d_p / \lambda)^3, \quad (23)$$

Khopkar 等<sup>[29]</sup>则直接将式(13)应用于气液搅拌槽的模拟.

湍流对液滴的运动和曳力系数的影响尚未见报道.

### 3.1.6 异形颗粒

纤维状固体颗粒的阻力系数也是一些工程应用需要的数据, 但目前的研究还不够充分. Blumberg 等<sup>[30]</sup>根据理论和实验研究圆柱状颗粒的沉降, 发现圆柱轴线垂直于沉降方向时的终端速度最小. Fan 等<sup>[31]</sup>在纤维状颗粒的沉降实验中, 从颗粒沉降的推动力中扣除了虚拟质量力(取  $C_v=0.5$ ), 也包括了非匀速沉降阶段的实验数据, 得到了相当于稳态沉降的曳力系数:

$$C_d \cos \phi = (24 / Re_p) (0.006983 + 0.6224 Re_p^{-1.046}) (\rho_p / \rho_c)^{-1.537} (Ar^*)^{0.8524}, \quad (24)$$

平均相对误差为 9.4%. 其中  $Ar^*$  为修正的 Archimedes 数,  $Ar^* = d^3 (\rho_p - \rho) g / \mu^2$ , 取向角  $\phi$  是颗粒轴线与水平方向的夹角. 上式适用的范围是, 颗粒长径比 4~50, 颗粒密度 1125~8000 kg/m<sup>3</sup>,  $Re_p < 40$ . 由于颗粒的球形度很低, 因此  $C_d$  不能简单地关联为单一  $Re_p$  的函数, 需要用更多的无因次数来构成关联式, 但仍不违反 Buckingham  $\pi$  定理.

## 3.2 虚拟质量力

虚拟质量力(Virtual mass force), 或称附加质量力(Added mass force)的出现是因为一个颗粒在流场中加速运动, 它同时必须使周围的流体也加速或减速运动, 这就需要额外的力, 好像是颗粒的质量增大了. 出于此物理意义, 普遍接受用下面的公式来计算虚拟质量力:

$$F_v = -C_v V_p \rho_c (D\mathbf{u}_{slip} / Dt), \quad (25)$$

其中,  $\mathbf{u}_{slip}$  是颗粒对连续相的滑移速度,  $V_p$  为颗粒体积,  $C_v$  为虚拟质量力系数, 对理想(无粘)流体中的颗粒,  $C_v=0.5$ , 一般的近似处理多数取此数值.

显然, 气泡加速运动时虚拟质量力远大于气泡本身的重力, 一般不能简单地忽略. 但虚拟质量力的计算还存在几个没有解决的问题.

一是相对加速度给出不同的表达式, 如 Anderson 等<sup>[32]</sup>给出下列两种表达式, 认为第二种更合理一些:

$$D(\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_c) / Dt = (\partial \mathbf{u}_d / \partial t + \mathbf{u}_p \cdot \nabla \mathbf{u}_p) - (\partial \mathbf{u}_c / \partial t + \mathbf{u}_c \cdot \nabla \mathbf{u}_c), \quad (26)$$

$$D(\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_c) / Dt = \partial(\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_c) / \partial t + \mathbf{u}_p \cdot \nabla(\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_c). \quad (27)$$

Homsy 等<sup>[33]</sup>采用了如下的表达式:

$$D(\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_c) / Dt = [\partial \mathbf{u}_p / \partial t + (\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_c) \cdot \nabla \mathbf{u}_p] - [\partial \mathbf{u}_c / \partial t + (\mathbf{u}_c - \mathbf{u}_p) \cdot \nabla \mathbf{u}_c], \quad (28)$$

Jakobsen 等<sup>[34]</sup>使用以下方程:

$$D(\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_c) / Dt = D\mathbf{u}_p / Dt - D\mathbf{u}_c / Dt, \quad (29)$$

以上公式在  $\mathbf{u}_c=0$  时都没有疑义地蜕化为同一形式.

Sokolichin 等<sup>[10]</sup>建议采用略加简化的方程:

$$D(\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_c) / Dt = d\mathbf{u}_p / dt - D\mathbf{u}_c / Dt, \quad (30)$$

其中左端第一项是分散相颗粒沿着其运动轨迹的加速度. 到底采用哪一种展开形式才是真正合理的, 至今尚未见充分和公认的论证.

第二, 虚拟质量力系数如何取值也是一个久悬不决的问题. 对有势流(理想流动)中球形颗粒的理论值是  $C_v=0.5$ . 对真实的粘性流体, 此系数取决于颗粒的实际形状. 对于椭圆形固体颗粒, 有  $C_v$  取 1.12 的报道. Kuo 等<sup>[35]</sup>对气泡的实验结果与  $C_v=2$  或 3 相符. Sankaranarayanan 等<sup>[36]</sup>用 LBM 数值模拟了单个气泡的  $C_v$ , 其数值在 0.5~2.8 之间. Kendoush 等<sup>[37]</sup>最近实验测定了小球的加速运动, 按 Odar<sup>[38]</sup>建议的 Basset 力系数[第 5 节式(67)]将 Basset 力扣除, 得到了虚拟质量力系数的关联式:

$$C_v = 0.5 + \begin{cases} 15 Re_p^{-1.125} & (100 < Re_p < 300) \\ 10 Re_p^{-1.125} & (300 < Re_p < 500) \\ 5 Re_p^{-1.125} & (Re_p > 500) \end{cases}, \quad (31)$$

发现  $C_v$  在 0.55~0.5 之间, 随瞬时雷诺数增大而下降. 这与固定  $C_v=0.5$  而从实验数据取关联 Basset 力系数的方法思路相似. 若能得到有效的关联式, 应用时会更方便.

第三, 实际的多相流场比多数文献报道的静止或上游流速均匀的流场复杂得多, 其中经常出现局部的剪切流动, 或是湍流中尺度、频率不同的涡团产生的近周期性的振荡流动, 它们对虚拟质量力的影响化学工程和多相流学科尚未给出可用的答案.

第四, 除了在爬流( $Re \ll 1$ )的情况下, 流体的运动是非线性的, 曳力和虚拟质量力, 以及后面还要谈到的升力、Basset 力等, 是否能从颗粒所受合力中线性地分解出来, 然后在应用时又线性地叠加起来? 理论上这是不可能实现的, 但在实际工程应用中是否能近似地成立? 许多工程技术人员怀有这样的期望, 希望早些看到有说服力的答案.

Sokolichin 等<sup>[10]</sup>认为在气液鼓泡塔的数值模拟中可以忽略虚拟质量力的影响, 在气液搅拌槽中的搅拌使多相流动有较高频率的假湍流波动, 但在数值模拟中仍然可以忽略. Khopkar 等<sup>[29]</sup>指出, 虚拟质量力在气体分布器附近区域十分重要, 而在主体流动区域则远小于曳力. Ranade 等<sup>[39]</sup>认为搅拌槽的流动主要受浆的泵送能力控制, 可以近似地忽略虚拟质量力和升力. Gosman 等<sup>[40]</sup>认为液固搅拌槽的模拟中可以不计虚拟质量力.

在搅拌槽的模拟中考虑虚拟质量力会增加模拟的难度. 但在搅拌槽的浆区和排出流区, 加速度值较大, 浆区是流体获得动能的来源区域. 因此, 气液搅拌槽的模拟应该重视虚拟质量力的作用.

### 3.3 Basset 力

Basset 力又称为历史力(History force), 也是在颗粒加速(或减速)运动时额外需要的推动力. Basset 在 1988 年研究简谐振动的均匀爬流中固体颗粒的运动时发现颗粒也受到一个涉及颗粒过去加速度历史的用积分表示的非稳态力:

$$F_B = -\frac{3d_p^2\mu_c}{2} \sqrt{\frac{\pi}{v}} \int_0^t \frac{d\mathbf{u}_p/d\tau}{\sqrt{t-\tau}} d\tau. \quad (32)$$

它的产生是因为颗粒表面产生的涡度向周围流体扩散的滞后<sup>[41]</sup>, 但颗粒加速度数值大时, 它与稳态曳力相比就不可忽略了. 式中的  $\mathbf{u}_p$  也可以推广到用  $\mathbf{u}_{slip}$ , 以体现连续相流体流动的影响.

当颗粒有初速度时, 它也对颗粒后来的运动有影响, 因此, 得下式<sup>[42]</sup>

$$F_B = -\frac{3d_p^2\mu_c}{2} \sqrt{\frac{\pi}{v}} \left( \frac{\mathbf{u}_{slip,0}}{\sqrt{t}} + \int_0^t \frac{d\mathbf{u}_p/d\tau}{\sqrt{t-\tau}} d\tau \right). \quad (33)$$

关于 Basset 力的研究也很多, 其中一个比较实际的问题是, Basset 的推导是在爬流情况下得到的, 是否适用于有限大小的雷诺数的情况? 是否适用于工程中的湍流流动? 其中值得一提的工作是, Mei 等<sup>[43]</sup>的理论分析表明, 加速度历史的影响在短时间区间的衰减正比于  $t^{-1/2}$ , 而长时间域中的衰减则正比于  $t^{-2}$ , 据此提出了一个形式较复杂的核(Kernel)函数  $k(\xi)$  来计算 Basset 力:

$$F_B = -3\pi\mu_c d_p \int_0^t k(t-\tau) \frac{d\mathbf{u}_{slip}}{d\tau} d\tau, \quad (34)$$

能较满意地模拟雷诺数到 100 的单颗粒的直线非稳态运动. Mei 等<sup>[44]</sup>用有限差分法模拟了有限雷诺数条件下流体有小幅度脉动时的球形颗粒受力, 发现颗粒受力与脉动频率呈线性关系, 而不是像经典的 Basset 力表达式表示的与脉动频率的平方根有线性关系. 因此, 式(32)在实际工程情况下的应用是不准确的.

由长福等<sup>[45]</sup>分析了何时应该和何时可不用考虑 Basset 力的问题. 一般说来, 气泡在液体中的非稳态运动, 当运动的脉动频率很大或很小时, 可以不计 Basset 力; 固体和液体颗粒在气体中运动可以忽略 Basset 力; 而其他类型的颗粒运动问题需要根据具体情况(如颗粒大小、两相密度差、加速度的大小等)才能确定 Basset 力是否必须考虑.

Basset 力的存在得到了公认, 但对它的认识还很不充分. Basset 力的计算公式比较复杂, 不便于实际应用, 因此探索简化的 Basset 力计算方法也很有意义. 一个值得思考的疑问是, 虚拟质量力和 Basset 力都是沿颗粒运动方向的非稳态力, 这二者是一个力, 还是两个力? 它们是按照什么原则来拆分的? 这在理论上尚未明确地回答. 从工程应用的角度看, 迫切需要确定的是: 在什么情况下 Basset 力是可以忽略不计的? 在不可忽略的情况下, 应该用什么公式来计算? 可惜的是, 这些问题还没有明确的答案.

### 3.4 升力

升力(Lift force)这个名词是从空气动力学的研究中产生的, 是指飞机机翼在向前运动时, 由于空气绕机翼的环流, 产生了垂直于前进方向的横向升力. 同样如果连续相流场在颗粒运动方向的左右不对称, 也会在颗粒表面出现环流而产生升力. 文献中根据升力产生的机理将其分为两种: 由于流场的剪切而产生的称为 Saffman 力, 由于颗粒自身的旋转而产生的升力称为 Magnus 力. 但这样的分类只有理论上的意义, 因为颗粒在不均匀的流场中会旋转, 两种升力同时存在, 实验上无法区分.

在垂直管中上升的多相流中,  $C_1 > 0$ , 升力指向管壁,

分散相会形成有壁面峰的相含率分布，而  $C_1 < 0$  时升力指向管中心轴线，相含率的峰值在轴线上。许多实验证实了颗粒在不均匀流场中有垂直于主体运动方向的横向运动，支持升力的存在。但也有人不以为然，如 Sokolichin 等<sup>[10]</sup>认为升力没有坚实的实验基础，而目前升力也主要是起到对气相的横向分布模拟结果作经验性的调整、以使其与实验测定符合的作用。

横向升力有许多不同的表达式。在一些简单的情况下可以对升力进行理论计算。如刚性球体颗粒，在低雷诺数的情况可以计算 Saffman 升力，在理想流体中可以计算 Magnus 升力。然而，实际多相流的流场结构十分复杂，存在颗粒尾流不对称、气泡变形、液滴内部的环流等，这些因素还没有在目前提出的升力系数的关联式中准确地表达。

Drew 等<sup>[46]</sup>给出了理想流动中 Saffman 升力的一般表达式：

$$F_l = -C_1 V_p \rho_c (\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_c) (\nabla \times \mathbf{u}_c), \quad (35)$$

还给出了圆柱坐标系中升力的 3 个分量的表达式，其中的径向分量是

$$F_{l,r} = -C_1 V_p \rho_c \left\{ (u_{p,\theta} - u_{c,\theta}) \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r u_{c,\theta}) - \frac{1}{r} \frac{\partial u_{c,r}}{\partial \theta} \right] - (u_{p,z} - u_{c,z}) \left[ \frac{\partial u_{c,r}}{\partial z} - \frac{\partial u_{c,z}}{\partial r} \right] \right\}, \quad (36)$$

而垂直圆柱管中的轴对称流动中则简化为

$$F_{l,r} = -C_1 V_p \rho_c (u_{p,z} - u_{c,z}) (\partial u_{c,z} / \partial r). \quad (37)$$

实验研究发现，影响升力系数的因素较多，现阶段还没有一个适用范围较广的数学表达式。Auton<sup>[47]</sup>给出了理想流体剪切流中球形颗粒升力系数  $C_1 = 0.5$ 。许多文献报道了升力系数与流场剪切雷诺数  $Re_v$ 、颗粒滑移雷诺数  $Re_p$ 、颗粒直径及局部湍动强度的关系。

Moraga 等<sup>[48]</sup>分析了固体粒子在剪切流动中的 LDA 数据，提出了与流场剪切速率和颗粒滑移速度有关的关联式：

$$C_1 = \{0.12 - 0.2 \exp[-Re_p Re_v / (3.6 \times 10^5)]\} \exp[-Re_p Re_v / (3 \times 10^7)], \quad (38)$$

适用于  $6000 < Re_p Re_v < 5 \times 10^8$  的情况，当雷诺数大到一定程度时，升力系数会改变符号。其中的雷诺数  $Re_p = \rho_c |\mathbf{u}_p - \mathbf{u}_c| d_p / \mu_c$ ,  $Re_v = \rho_c |\nabla \times \mathbf{u}_c| d_p^2 / \mu_c$ 。

借助单气泡在简单剪切流场中的实验测定和数值模拟，Tomiya 等<sup>[49]</sup>提出了与气泡直径有关的关联式：

$$C_1 = -0.04 Eo + 0.48, \quad (39)$$

在甘油溶液的层流剪切流中，Tomiya 等<sup>[50]</sup>得到

$$C_1 = \begin{cases} \min [0.288 \tanh(0.121 Re_p), f(Eo_d)] & (Eo_d < 4) \\ f(Eo_d), & (4 \leq Eo_d \leq 10.7), \\ -0.29, & (Eo_d > 10.7) \end{cases} \quad (40)$$

其中，

$$f(Eo_d) = 0.00105 Eo_d^3 - 0.0159 Eo_d^2 - 0.0204 Eo_d + 0.474, \quad (41)$$

$Eo_d$  是按气泡的横向最大尺寸定义的，适用范围为  $1.39 < Eo_d < 5.74$ ,  $-5.5 < \lg Mo < -2.8$ ,  $0 < |\nabla \times \mathbf{u}_c| < 8.3 \text{ s}^{-1}$ 。

值得注意的是不同表达式计算得到的升力系数差别较大。同样是气泡在水中的升力系数，若用式(39)，则气泡直径大于 9 mm 时升力系数为负值，但 Tomiyama 等<sup>[50]</sup>所得的升力系数如图 4 所示，气泡大于 5.8 mm 时升力系数就成了负值。Sokolichin 等<sup>[10]</sup>把升力列为对模拟计算有关系、但其计算方法尚未充分验证的相间作用力。Ranade 等<sup>[39]</sup>和 Gosman 等<sup>[40]</sup>也认为在搅拌槽的模拟中可以近似地忽略虚拟质量力和升力。因此，在数值模拟多相流动时，是否包含升力，以及选用升力系数的数值，需要审慎地考虑。在气泡流的数值模拟中，升力系数有时被作为调节气含率分布的可调参数， $C_1$  的取值也有更低的 0.01 甚至  $-0.5 \sim -3.0$  之间的负值。

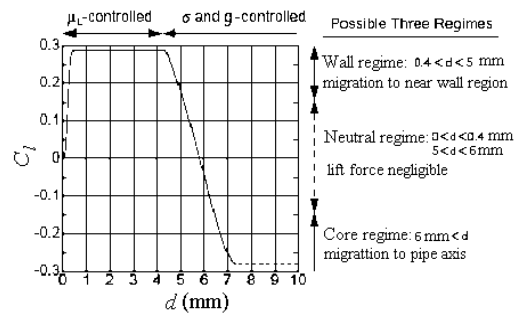


图 4 Tomiyama 等<sup>[50]</sup>提出的升力系数关联式与气泡直径关系  
Fig.4 Relationship of lift coefficient with bubble diameter proposed by Tomiyama et al.<sup>[50]</sup>

还有一些力的物理存在尚未得到一致公认，有时它们就是数值模拟中的一种权宜之计，用来作为可调因数，使模拟结果能接近实验数据。气液两相流动模拟中的湍流分散力、壁面润滑力、压力梯度力等就属于这一类。需要对颗粒群的运动进行科学设计的精密实验和透彻的理论、数值模拟研究，才能回答这些力是否存在、什么情况下存在、什么情况下应该考虑的问题。

## 4 颗粒群的相间作用力

### 4.1 颗粒群的研究方法

实际上，为了提高过程工业设备的利用效率，多相体系中分散相颗粒的粒数密度都比较高，因此颗粒的运



动和传递过程都伴随着颗粒间的相互影响. 颗粒有时互相接触、碰撞, 但即使互不接触, 临近的颗粒也会改变连续相流体在颗粒周围流动的方式, 也间接地影响了颗粒的操作性质.

因此, 在多相流的数值模拟中, 直接需要的本构方程是针对颗粒群的, 而不是在静止或剪切流动中单颗粒的各种相间作用力的理论或经验关联式. 一方面可直接针对颗粒群进行实验, 得到数据和关联式; 另一方面也可以进行理论或数值模拟的研究, 得到颗粒群性质与单颗粒特性之间的关系, 通过对单颗粒特性进行校正的方法, 得到颗粒群相间作用力的表达和计算公式.

从理论或用数值方法来研究颗粒间的相互影响大致有两种方式: 一是研究两个、多个或成百上千个颗粒的运动; 第二种是将稠密的颗粒群看作完全相同的平均单元(cell)的集合, 每个单元包含一个中心颗粒, 外面包围着每个颗粒平均分配到的连续相流体层, 只需研究这样的 1 个典型单元<sup>[51]</sup>, 称为单元胞模型(Cell model, 图 5).

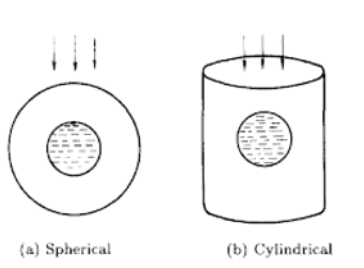


图 5 球形和圆柱形的单元胞  
Fig.5 Spherical and cylindrical cell models

用数值方法研究多颗粒体系, 早期的研究对象比较简单, 如沿 1 条直线运动的几个颗粒, 或并排运动的 2 个颗粒等. 随着近年来计算机技术和数值计算方法的长足进步, 已经能用数值方法模拟上千个固体颗粒<sup>[12,52]</sup>、125 个液滴(边界元法<sup>[53]</sup>)和占体积分数 6% 的 91 个气泡(直接数值模拟法<sup>[54]</sup>)的运动, 但与实际工程应用的要求仍差得太远.

因为单元胞模型只需处理 1 个典型的颗粒, 因此目前的计算技术和计算机软硬件的能力可以满足数值计算的要求. LeClair 等<sup>[55]</sup>用单元胞模型研究了  $Re < 1000$ 、气含率在 0.4~1 之间的球形气泡群, 但仅在低雷诺数的情况下数值模拟结果与实验结果比较符合. Sankaranarayanan 等<sup>[56]</sup>用 Lattice-Boltzmann 方法离散和 VOF 方法追踪界面, 数值模拟了水中低气含率条件下单个气泡在三维周期域中的运动(相当于长方体单元胞), 考察了气含率对升力的影响.

在单元胞模型中, 颗粒间的相互影响用模型的外边

界条件来表达, 因此合理地选择和改进数学模型的外边界条件是得到合理、可靠的计算结果的关键. 毛在砂<sup>[57,58]</sup>尝试提出了一些改进意见, 但有很多问题还有待探讨. 单元胞模型已被用于研究固体颗粒的运动<sup>[57]</sup>和传质<sup>[59]</sup>、液滴群的传质<sup>[60,61]</sup>(图 6)以及气泡群的运动<sup>[62]</sup>. Chhabra<sup>[63]</sup>也在用单元胞模型研究非牛顿流体中的颗粒群方面作了很多工作.

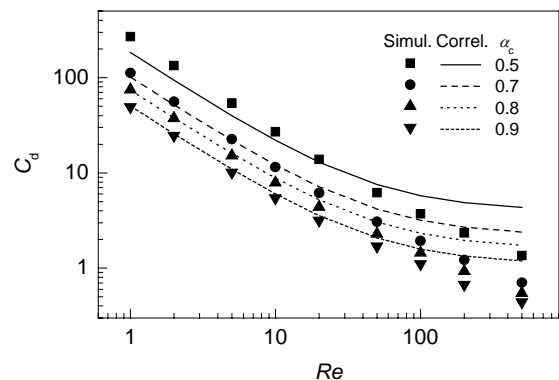


图 6 用 Happel 边界条件的单元胞模型模拟的液滴群曳力系数(点)与关联式(曲线)的比较<sup>[60]</sup>

Fig.6 Drag coefficient of drops predicted by the cell model with the Happel boundary condition versus the correlation<sup>[60]</sup>

单元胞模型计算层流状态下的颗粒群有较好的准确性, 但多数过程工程设备是在湍流的情况下操作, 将此模型推广到湍流环境中去是应当首先解决的一个问题. 至于为什么多数研究都采用球形单元胞, 其形状的对称性最好、简单等优点还不足以充分支持这个选择. 在某些情况下, 椭球形可能是更好的选择. 颗粒位于单元胞正中心的选择也需要仔细论证<sup>[58]</sup>. 单元胞模型发展为实用的工具还要经过艰巨的努力.

## 4.2 固体颗粒群

气固两相流的研究, 包括对流化床、快速流化床、循环流化床的研究, 多年来经久不衰. 用欧拉-拉格朗日方法和欧拉-欧拉方法的数值模拟研究都很多.

目前多数气固流态化数值模拟的文献所用的曳力系数考虑了空隙率的影响. 一般表示为单颗粒的曳力系数  $C_{d0}$  乘以某个颗粒体积分数的函数:

$$C_d = C_{d0} f(\alpha_p), \quad (42)$$

但关于函数  $f(\alpha_p)$  的形式现在还没有统一的认识, 用得较多的是 Wen 等<sup>[64]</sup>的形式:

$$f(\alpha_p) = (1 - \alpha_p)^{-4.7}, \quad (43)$$

因此, 固体颗粒的曳力系数随相含率的变化可用下式表示:



$$C_d = \begin{cases} \frac{24}{Re_p} (1+0.15Re_p^{0.687}) (1-\alpha_p)^{-4.7} & (Re_p < 1000) \\ 0.44 & (Re_p \geq 1000) \end{cases} \quad (44)$$

Koch 等<sup>[65]</sup>用 Lattice-Boltzmann 方法模拟导出了一个形式较为复杂的公式：

$$\begin{aligned} f(\alpha_p) &= f_0(\alpha_p) + f_1(\alpha_p) Re_p^2 \quad (Re_p < 20), \\ f(\alpha_p) &= f_0(\alpha_p) + f_3(\alpha_p) Re_p^2 \quad (Re_p > 20), \end{aligned} \quad (45)$$

其中的函数为

$$f_0(\alpha_p) = \begin{cases} \frac{1+3(\alpha_p/2)^{1/2} + (135/64)\alpha_p \ln \alpha_p + 16.14\alpha_p}{1+0.681\alpha_p - 8.48\alpha_p^2 + 8.16\alpha_p^3} & (\alpha_p < 0.4) \\ \frac{10\alpha_p}{(1-\alpha_p)^3} & (\alpha_p > 0.4) \end{cases}, \quad (46)$$

$$f_1(\alpha_p) = 0.110 + 5.10 \times 10^{-4} \exp(11.6\alpha_p),$$

$$f_3(\alpha_p) = 0.0673 + 0.212\alpha_p + 0.0232/(1-\alpha_p)^5.$$

Li 等<sup>[52]</sup>通过细致的数值模拟比较，认为 Wen 等<sup>[64]</sup>和 Koch 等<sup>[65]</sup>的公式用于气固两相流的模拟结果比较合理，推荐今后用 Koch 等的公式代替 Wen 等的公式。

Homsy 等<sup>[33]</sup>讨论了流化床颗粒群的虚拟质量力系数，认为按有势流理论和单元胞模型，则 Lamb<sup>[66]</sup>早已经推导出：

$$C_v = (1+2\alpha_p)/[2(1-\alpha_p)]. \quad (47)$$

与此相反，也有 Mokeyev<sup>[67]</sup>的实验数据表明分散相相含率  $\alpha_p$  增大时  $C_v$  会从 0.5 下降。

### 4.3 气泡群

在多气泡体系中，由于气泡之间存在相互作用，曳力系数很复杂，目前尚无完善的理论。至今气泡群的集体行为及对单个气泡阻力的影响还不清楚<sup>[10]</sup>，所以也有一些数值模拟研究直接使用单气泡的曳力表达式。

一般来说，气泡之间的相互作用(小气泡之间的碰撞使之凝并成大气泡，大气泡在湍动的情况下破碎成小气泡，最后达到破碎与凝并的平衡)使气泡群受到的作用力与单个气泡不同，应当进行适当校正。多数文献报道将气泡群的曳力系数  $C_d$  与单气泡曳力系数  $C_{d0}$  用一个气含率的函数  $f(\alpha_g)$  联系起来：

$$C_d = C_{d0} f(\alpha_g). \quad (48)$$

王铁峰<sup>[68]</sup>提出了如下的关联式：

$$C_d = C_{d0} (u_{b0}/u_b)^2 (1-\alpha_g), \quad (49)$$

与 Kendoush 等<sup>[69]</sup>提出的关联式：

$$C_d = C_{d0} (u_{b0}/u_b)^2 [1 - \rho_g \alpha_g / (\rho_L \alpha_L)], \quad (50)$$

相似。其中  $u_b, u_{b0}, \alpha_g$  分别表示多气泡上升速度、单气泡上升速度和气含率。由于  $u_b$  的数值也与气含率有关，将  $u_b$  包含在计算式中应用不太方便。

关于气含率的影响和函数的形式，文献报道中多有不一致的地方。

较多的文献认为气含率增大使曳力增大。Sokolichin 等<sup>[10]</sup>也认为这个趋势与物理的直觉一致。毛在砂<sup>[62]</sup>用单元胞模型对气泡群的数值模拟也支持这一观点，但单元胞预测的  $C_d/C_{d0}$  值远大于 Marrucci<sup>[70]</sup>和 Kendoush<sup>[71]</sup>给出的结果。Marrucci<sup>[70]</sup>用单元胞模型和粘性能量耗散分析得到了气泡群的曳力和上升速度，其升速与单个气泡升速的关系为

$$u_b/u_{b0} = (1-\alpha)^2 / (1-\alpha^{5/3}), \quad (51)$$

经数学演算即为 Manjunath 等<sup>[72]</sup>表示的

$$C_d = 48(1-\alpha_g^{5/3}) / [Re_p(1-\alpha_g)^2]. \quad (52)$$

但 Kendoush<sup>[71]</sup>认为 Marrucci<sup>[70]</sup>的推导有误，他基于单元胞模型的概念重新推导出的近似解析表达式为

$$C_d = 48/[Re_p(1-\alpha_g)^2], \quad u_b/u_{b0} = (1-\alpha_g)^3, \quad (53)$$

这些结果在  $\alpha_g < 0.1, Re_p < 100$  范围内与经典的结果一致。

Azbel<sup>[73]</sup>指出，曳力增加的程度与气含率有关，修正因子可表示为

$$f(\alpha_g) = (1-\alpha_g^{5/3}) / (1-\alpha_g)^2. \quad (54)$$

Rampure 等<sup>[74]</sup>在模拟鼓泡塔内的气液两相流时采用  $C_d = C_{d0} / (1-\alpha_g)^p$ ，认为指数  $p$  与表观气速密切相关，低气速(如表观气速小于 0.2 m/s)时  $p=2$ ，高气速(>0.4 m/s)时  $p=4$ 。

Wen 等<sup>[64]</sup>提出的固体颗粒群的曳力系数随相含率变化的关联式被许多研究者应用于气液两相流中，如文献<sup>[75,76]</sup>等。

较少的研究认为气泡间的相互影响使气泡群的曳力系数减小。Harper<sup>[77]</sup>从理论上解释了成串气泡的上升速度比单气泡的上升速度快的现象，相当于曳力系数下降。Hills 等<sup>[78]</sup>研究了单个帽状气泡的上升速度，发现它在小气泡形成的气泡群中升速明显提高。

Pan 等<sup>[79]</sup>重新定义气泡的雷诺数  $Re_\alpha$ ，考虑了气含率对曳力系数的影响，将 Tomiyama<sup>[24]</sup>提出的含有杂质的气泡曳力系数修正为

$$C_d = \max \left[ \frac{24}{Re_\alpha} (1+0.15Re_\alpha^{0.687}), \frac{8}{3} \frac{Eo}{Eo+4} f \right], \quad (55)$$

$$Re_\alpha = \rho_c |u_p - u_c| d_p (1-\alpha_g) / \mu_c, \quad (56)$$

$$f = \left\{ \left[ 1 + 17.67(1 - \alpha_g)^{9.7} \right] / \left[ 18.67(1 - \alpha_g)^{3.2} \right] \right\}^2. \quad (57)$$

Ishii 等<sup>[80,81]</sup>研究了鼓泡流中的气泡上升速度,按流型提出了从 Stokes 流区、牛顿区、变形气泡区直至腾涌流区的曳力系数关联式,很有实用价值.

关于气泡群的虚拟质量力, Mudde 等<sup>[76]</sup>用两流体模型对气泡羽流进行三维模拟,认为在模型中包括虚拟质量力是必要的,但简单地采用了  $C_v=0.5$ . Sokolichin 等<sup>[82]</sup>在气含率较小的环流反应器和鼓泡床反应器的数值模拟计算中,取  $C_v=0.5$ . Van Winjgaarden<sup>[83]</sup>从理论上分析了理想流体中气泡群的加速运动,得到的虚拟质量力系数应修正为

$$C_v = 0.5(1 + 2.78\alpha_g), \quad (58)$$

但此理论结果未得到实验验证. Zuber<sup>[84]</sup>也认为针对固体颗粒给出的虚拟质量力系数用于气泡群,提示气泡群的虚拟质量力系数比单气泡的大.由于在搅拌槽中气含率较低,多数计算中取  $C_v=0.5$ .

气泡群所受升力的研究相对较少.但单个气泡的升力系数必须经过气含率的修正才能用于计算气泡群的升力.如 Behzadi 等<sup>[85]</sup>提出的升力公式:

$$C_l = 0.000651\alpha_g^{-1.2}, \quad (59)$$

是对 Beyerlein 等<sup>[86]</sup>用垂直管上升气液两相流动中平均气含率表示的升力公式

$$C_l = 0.001651\bar{\alpha}_g^{-0.78}, \quad (60)$$

修正后的结果.以上两式中,在  $\alpha_g$  很小时,则  $C_l$  取值 0.25. Kulkarni 等<sup>[87]</sup>报道了

$$C_l = -0.121\beta^3 + 0.121\beta^2 - 4.646\beta + 4.058, \\ \beta = k\alpha_g/u_g^2. \quad (61)$$

#### 4.4 液滴群

在液液溶剂萃取体系、液液反应器中,液滴的运动对设备操作性能的影响也是非常重要的.在 20 世纪 50~70 年代就液滴运动和相间传质进行了大量的研究,但与固体颗粒和气泡的研究相比,所得的成果仍显逊色.

Kumar 等<sup>[88]</sup>汇集了 29 个体系的 998 个数据( $Re=0.16\sim 3169$ ,  $\alpha_d=0.01\sim 0.76$ ),得到的关联式为

$$C_d = (0.53 + 24/Re) \left[ (1 + 4.56\alpha_d^{0.73}) / (1 - \alpha_d) \right], \quad (62)$$

其预测的液滴终端速度平均误差为 8.8%.

## 5 颗粒运动的数学模型和模拟

用数学模型研究单颗粒的运动可以确认我们是否

充分地认识了运动颗粒受力的规律,因此受到化学工程和多相流体力学学科的重视.对于在流体中的单个质点,其运动方程按牛顿第二定律、以拉格朗日坐标系中的速度矢量<sup>[34]</sup>写为

$$d(m_p \mathbf{u}_p)/dt = \mathbf{F}_d + \mathbf{F}_p + \mathbf{F}_v + \mathbf{F}_g + \mathbf{F}_B + \mathbf{F}_I + \mathbf{F}_E, \quad (63)$$

方程右端分别是曳力、压力梯度力、虚拟质量力、重力、Basset 力、升力和其他外场力.

Odar 等<sup>[89]</sup>研究了本来静止的粘性流体作用在沿直线任意方式运动的加速球形固体颗粒上,除了重力和浮力之外,颗粒所受的相间作用力为

$$\frac{\pi}{6} d_p^3 \rho_p \frac{du_p}{dt} = -\frac{\pi}{12} C_d d_p^2 \rho_c u_{slip}^2 - \frac{\pi}{6} C_v d_p^3 \rho_c \frac{du_{slip}}{dt} - \\ \frac{3}{2} C_B d_p^2 \sqrt{\pi \rho_c \mu_c} \int_0^t \frac{du_{slip}}{d\tau} \frac{d\tau}{\sqrt{t-\tau}}, \quad (64)$$

右端的项依次代表曳力、虚拟质量力和 Basset 力,并且后两项的系数与颗粒瞬时的无因次加速度  $A^* = u_{slip}^2 / [d_p(du_{slip}/dt)]$  有关<sup>[38]</sup>:

$$C_v = 1.05 - 0.066/(A^{*2} + 0.12), \quad C_B = 0.48 + 0.52/(A^* + 1)^3. \quad (65)$$

Odar<sup>[38]</sup>将式(65)与牛顿第二定律结合积分得到颗粒速度与颗粒沉降时间的关系,与实验测定符合,说明式(65)不仅能用于颗粒沿直线简谐振动,也能用于颗粒的重力沉降过程.

Zuber<sup>[84]</sup>也就球形颗粒在层流状态下的运动推导了下列的运动方程:

$$\frac{\pi}{6} d_p^3 \rho_p \frac{du_p}{dt} = 3\pi d_p \mu_c u_{slip} - \frac{\pi}{6} d_p^3 \frac{dp}{dz} - \frac{\pi}{12} d_p^3 \rho_c \left( \frac{1+2\alpha}{1-\alpha} \right) \frac{du_{slip}}{dt} + \\ \frac{3}{2} d_p^2 \sqrt{\pi \rho_c \mu_c} \int_0^t \frac{du_{slip}}{d\tau} \frac{d\tau}{\sqrt{t-\tau}} - \frac{\pi}{6} d_p^3 \rho_p g, \quad (66)$$

右端各项分别为 Stokes 曳力、压力梯度力(实际上即浮力)、虚拟质量力和 Basset 力.显然虚拟质量力项中考虑了颗粒相体积分数的影响.实际的问题仍然是,式(63)中的各种力在不同场合下的具体表达式是什么、是否准确.

一种模拟单颗粒运动的方法是将颗粒所受的所有作用力,包括稳态运动的阻力、升力、以及非稳态运动有关的虚拟质量力、Basset 力等,分别从颗粒所受合力中剥离出来,以实验数据形成分别的关联式,然后应用于式(65)得到颗粒轨迹.由于流体运动的非线性,这样的剥离往往很难,甚至是不可能的.因此,另一种方法是,实验测定颗粒非稳态运动的合力,将其总结为合力的经验关联式.由于在不同运动状态下颗粒受力的机理

和大小千差万别，这种方法也不易实行，但有可能使单颗粒的运动求解大为简化。如 Zhang 等<sup>[90]</sup>研究了气泡在高粘度液体中的非稳态上浮，其中曳力、虚拟质量力和 Basset 力均存在，将非稳态的总曳力系数  $C_T$  关联为

$$C_T = 2.275(1 + 0.222Ac^{0.246})Re_p^{-1.79}Ar^{0.801}, \quad (67)$$

适用于液体粘度 11.4~775 mPa·s, Archimedes 数( $Ar = d_c^3 \rho_c^2 g / \mu_c^2$ ) 0.06~8349, Reynolds 数( $Re = d_c u_{slip} (\rho_c - \rho_p) / \mu_c$ ) 0.013~100, 加速度数  $Ac = d_c a / u_{slip}^2 = 0 \sim 50$  的情况, 平均相对误差为 6.8%。

### 6 颗粒聚团和分布的不均匀性

到目前为止，大多数关于颗粒群的研究实际上是关于均匀分布的颗粒群的研究。然而，在许多实际场合，颗粒群是不均匀的[图 7(a)]。如果取 1 个典型的颗粒聚团[图 7(b)]，设想从固定在聚团重心上的坐标系来观察，则聚团内的空隙率更低，对连续相流体流动的阻力更大，因此，缝隙速度较低。但颗粒聚团作为一个整体，其当量直径较大，因此其周围的流体速度较大，即表现曳力系数较小。故颗粒聚团不能用均匀颗粒群的曳力系数，更不能单个颗粒的曳力系数。按表现曳力系数的排序为均匀颗粒群>单个颗粒>颗粒聚团。

在气固流化床的研究中，早就注意到了流化状态不均匀性的两种存在方式：“气泡”和颗粒聚团。“气泡”是流化床中固体颗粒浓度远低于平均浓度的区域，它在床中的上升速度远快于流化气相的表现气速。在快速流态化和循环流化床中，宏观的不均匀现象有下部的密相区域和上部的稀相区域的区分，还有径向分布的“环/核”结构。但在更小的尺度上，可观察到固体浓度的随机性波动，即形成动态的不断生成又随时解体的颗粒聚团<sup>[91]</sup>。

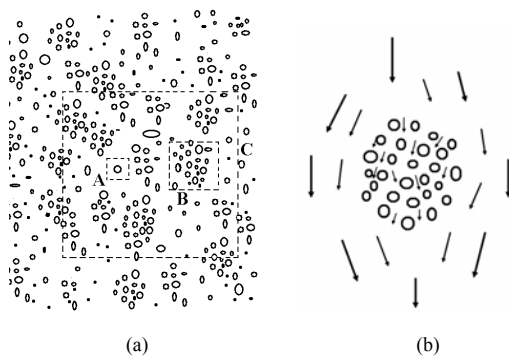


图 7 不均匀颗粒群示意图  
Fig.7 Sketch of heterogeneous distribution of particles

Li 等<sup>[92]</sup>注意到，在表现气速、空隙率等宏观参数

相同的流化状态下、结构分布不同的微元内，由其平均曳力系数  $C_d$  反映的动量传递速率也有很大差别，其中整体和局部均存在非均匀结构的情况[图 8(c)]  $C_d=2.85$ ，比均匀结构[图 8(a)]和局部非均匀结构[图 8(b)]的都小。这种影响应该在多相流的数学模型中得到表述。用 EMMS 方法可以估计出不同气含率情况下的曳力系数，然后用于两流体模型气固两相流的数值模拟，得到与实验更符合的流化状态模拟结果<sup>[93,94]</sup>。

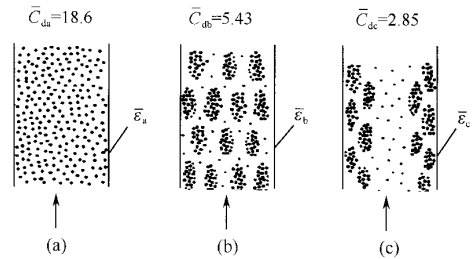


图 8 平均曳力系数对分布的依赖性<sup>[92]</sup>  
Fig.8 Dependence of average drag coefficient on uniformity of particle distribution<sup>[92]</sup>

白丁荣等<sup>[95]</sup>分析了快速流态化的实验数据，发现在此条件下颗粒容易形成动态的聚团，以减少气固两相间的相互作用力，从而使  $C_d/C_{d0} < 1$ ，并提出了关联式：

$$C_d/C_{d0} = 1.68 (1 - \bar{\alpha}_p)^{0.253} (Re/Re_T)^{-1.213} (d_p/D)^{0.105}, \quad (68)$$

$Re$  和  $Re_T$  分别为用颗粒实际速度和终端速度定义的雷诺数， $D$  为流化床直径。因此，准确地模拟多相体系的流动/传递/反应过程，必须对体系内部颗粒分布的均匀状态，或者说时空多尺度结构有所了解。目前，对聚团大小的测量和尺度估计已有许多报道。但气泡和液滴群密度分布的不均匀性则鲜有报道。Lu 等<sup>[3]</sup>把固体颗粒聚团当作与离散颗粒平行的一种物相，用三流体模型来模拟 CFB 中的气固流态化状态。2 个颗粒相各有自己的颗粒“温度”，3 个“相”间的两两相互作用都体现在模型中，而认为聚团在流场是均匀分布的。图 8 和式(56)给出的都是全床曳力系数的平均值。

考虑流体颗粒聚团非均匀分布和动态性的多相流的数值模拟工作几乎没有报道。颗粒聚团是形状和空隙率都不甚确定的一种结构，类似于孔隙内有明显对流或渗流的多孔颗粒，其曳力系数一定与内部渗流量的大小有关，尚难给出定量的计算式。迫切需要加强非均匀分布的颗粒聚团的研究工作，为多尺度模拟提供真实情况下的相间相互作用力的计算依据。

在准确的两相流数值模拟中最终需要处理这样的问题：处于一个离散的网格中的分散相属于哪种状态？

单个颗粒、均匀颗粒群，还是颗粒团？图7中3个大小不同的A、B、C网格中，颗粒所处的表现状态似乎也与网格大小有关。这个状态显然应该在比网格更大的尺度上才能判断清楚，这也是一个涉及宏观和介观尺度间耦合的问题。目前的多相流数值模拟研究中尚未报道这方面的考虑。

在多相流计算中需要确定流场中一点的颗粒浓度是增加还是降低，变动是来自宏观的对流还是因为颗粒聚团形成的自发性。也就是说，在两相流数学模型中，应该包含颗粒团自身发展的规律——颗粒聚团形成和消散的机理。一般说来，气固体系中颗粒团自发形成和流场随机性造成的破坏处于动态平衡。可以类比的是，在滴流床中液流强度的径向分布的探索中，也曾用熵增率推动的自发性不均匀分布和填料堆积及流体流动的随机性间的动态平衡来解释小尺度径向分布不均匀性的形成<sup>[96,97]</sup>。

## 7 结论

不管是用哪一种算法来数值模拟含颗粒相的多相流，分散相和连续相间的相互作用力都必须在模型方程中准确地体现。因此对单颗粒(包括气泡和液滴)、颗粒群、甚至颗粒聚团在连续相流体中受力的实验、数据经验关联式和理论及数值模拟研究都是必不可少的。

颗粒在流体中运动受力包括曳力、虚拟质量力、Basset历史力、Saffman升力和Magnus升力，这些力的物理存在得到公认，但其数值大小及数据关联式却并不能完全满足宏观多相流数值模拟的需要。曳力系数的研究相对比较透彻，虚拟质量力和Basset历史力的系数值和计算公式还有待完善，而升力的研究则相对滞后于数值模拟的需要。固体颗粒的研究比较充分，而液滴的研究最为欠缺。

分散相浓度宏观尺度上的不均匀性在两相流的数学模型和数值模拟中得到了较好的体现，在数值模拟上也取得了较好的成绩。化工过程设备中介观尺度上的不均匀性，或者颗粒团的存在和特性，对于准确模拟两相流的作用不容小视，然而却未在两相流的实验和数值模拟研究中得到足够的重视。

加强对颗粒群运动(以及传质和传热)规律的研究，才能建立颗粒运动和设备尺度上宏观多相流动之间的桥梁，以较小的代价实现过程工业设备的多尺度数值模拟，实现长期以来化学工程师向往的用数学模型实现过程设备的设计、放大、操作诊断和优化的目标。

### 符号表:

$a$  加速度 (m/s<sup>2</sup>)                       $C_d$  阻力系数

$d_p$	颗粒的体积等价半径 (m)	$D$	设备直径 (m)
$E\ddot{o}$	Eötvös 数 ( $E\ddot{o}=gd_p^2\Delta\rho/\sigma$ )	$F$	力 (N/m <sup>3</sup> )
$g$	重力加速度 ( $g=9.81\text{ m/s}^2$ )	$m$	颗粒质量 (kg)
$Mo$	Morton 数 ( $Mo=g\mu^4/\rho\sigma^3$ )	$p$	压力 (Pa)
$r$	径向坐标 (m)	$Re$	Reynolds 数 ( $Re=d_p U_p \rho_c/\mu_c$ )
$S$	源项	$u$	速度
$U$	终端速度 (m/s)	$V$	颗粒体积 (m <sup>3</sup> )
$We$	Weber 数 ( $We=u^2 d_p \rho_c/\sigma$ )	$x, y$	物理平面坐标
$\alpha$	相含率	$\varepsilon$	湍流能量耗散 (m <sup>2</sup> /s <sup>3</sup> )
$\kappa$	粘度比 ( $\kappa=\mu_p/\mu_c$ )	$\lambda$	Kolmogorov 湍流尺度 (m)
$\mu$	粘度 (Pa·s)	$\nu$	运动学粘度 (m <sup>2</sup> ·s)
$\rho$	密度 (kg/m <sup>3</sup> )	$\sigma$	表面张力 (N/m)
$\tau$	应力张量		
下标			
$b$	气泡	$B$	Basset 力
$c$	连续相	$d$	曳力, 液滴
$g$	气相	$k$	物相
$L$	液相	$l$	升力
$p$	颗粒, 分散相	slip	滑移
$v$	虚拟质量力	$0$	单颗粒, 初始值
$r$	径向		

### 参考文献:

- [1] Delnoij E, Lammers A J, Kuipers J A M, et al. Dynamic Simulation of Dispersed Gas-Liquid Two-phase Flow Using a Discrete Bubble Model [J]. Chem. Eng. Sci., 1997, 52(9): 1429-1458.
- [2] Sokolichin A, Eigenberger G, Lapin A, et al. Dynamic Numerical Simulation of Gas-Liquid Two-phase Flows Euler/Euler versus Euler/Lagrange [J]. Chem. Eng. Sci., 1997, 52(4): 611-626.
- [3] Lu H L, Wang S Y, He Y R, et al. Numerical Simulation of Flow Behavior of Particles and Clusters in Riser Using Two Granular Temperatures [J]. Powder Technol., 2007, 182(2): 282-293.
- [4] Jeong J J, Ozar B, Dixit A, et al. Interfacial Area Transport of Vertical upward Air-Water Two-phase Flow in an Annulus Channel [J]. Int. J. Heat Fluid Flow, 2008, 29(1): 178-193.
- [5] Jia X Q, Wen J P, Feng W, et al. Local Hydrodynamics Modeling of a Gas-Liquid-Solid Three-phase Airlift Loop Reactor [J]. Ind. Eng. Chem. Res., 2007, 46(15): 5210-5220.
- [6] Wang F, Mao Z S, Wang Y F, et al. Measurement of Phase Holdups in Liquid-Liquid-Solid Three-phase Stirred Tanks and CFD Simulation [J]. Chem. Eng. Sci., 2006, 61(22): 7535-7550.
- [7] Jakobsen H A, Lindborg H, Dorao C A. Modeling of Bubble Column Reactors: Progress and Limitations [J]. Ind. Eng. Chem. Res., 2005, 44(14): 5107-5151.
- [8] 郭烈锦. 两相与多相流体动力学 [M]. 西安: 西安交通大学出版社, 2002. 584-594.
- [9] Kolev N I. Multiphase Flow Dynamics: Vol.1. Fundamentals [M]. Berlin: Springer, 2002.
- [10] Sokolichin A, Eigenberger G, Lapin A. Simulation of Buoyancy Driven Bubbly Flow: Established Simplifications and Open Questions [J]. AIChE J., 2004, 50(1): 24-45.
- [11] Wang T F, Wang J F, Jin Y. Theoretical Prediction of Flow Regime Transition in Bubble Columns by the Population Balance Model [J]. Chem. Eng. Sci., 2005, 60(22): 6199-6209.
- [12] Ouyang J, Li J H. The Simulations of Annulus-Core Structure in CFB [J]. Chin. J. Chem. Eng., 2004, 12(1): 27-32.
- [13] Chu K W, Yu A B. Numerical Simulation of Complex Particle-Fluid Flows [J]. Powder Technol., 2008, 179(3): 104-114.
- [14] Wang W J, Mao Z S, Yang C. Experimental and Numerical Investigation on Gas Holdup and Flooding in an Aerated Stirred Tank with Rushton Impeller [J]. Ind. Eng. Chem. Res., 2006, 45(3):

- 1141–1151.
- [15] Chen S Y, Doolen G D. Lattice Boltzmann Method for Fluid Flows [J]. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 1998, 30: 329–364.
- [16] Ge W, Li J H. Pseudo-particle Approach to Hydrodynamics of Particle–Fluid Systems [A]. Kwauk M S, Li J H. *Circulating Fluidized Bed Technology V* [C]. Beijing: Science Press, 1996. 260–266.
- [17] Clift R, Grace J R, Weber M E. *Bubbles, Drops, and Particles* [M]. New York: Academic Press, 1978. 30–33, 112, 131.
- [18] 郭慕孙, 李洪钟. 流态化手册 [M]. 北京: 化工出版社, 2008. 106.
- [19] Morsi S A, Alexander A J. An Investigation of Particle Trajectories in Two-phase Flow Systems [J]. *J. Fluid Mech.*, 1972, 55(2): 193–208.
- [20] Haas U, Schmidt-Traub H, Brauer H. Umströmung Kugelförmiger Blasen mit innere Zirkulation [J]. *Chem. Ing. Tech.*, 1972, 44(18): 1060–1068.
- [21] Peebles F N, Garber H J. Studies on the Methods of Gas Bubbles in Liquids [J]. *Chem. Eng. Progr.*, 1953, 49(2): 88–97.
- [22] Hamielec A E, Storey S H, Whitehead J H. Viscous Flow around Fluid Spheres at Intermediate Reynolds Numbers II [J]. *Can. J. Chem. Eng.*, 1963, 41(6): 246–251.
- [23] Kolev N I. *Multiphase Flow Dynamics: Vol.2. Thermal and Mechanical Interactions*, 3rd Ed. [M]. Berlin: Springer, 2007. 33–35.
- [24] Tomiyama A. Struggle with Computational Bubble Dynamics [J]. *Multiphase Sci. Technol.*, 1998, 10: 369–405.
- [25] Hu S, Kintner R C. The Fall of Single Liquid Drops through Water [J]. *AIChE J.*, 1955, 1(1): 42–48.
- [26] Rivikind V Y, Ryskin G M. Flow Structure in Motion of a Spherical Drop in a Fluid Medium at Intermediate Reynolds Numbers [J]. *Fluid Dyn.*, 1976, 11(1): 5–11.
- [27] Brucato A, Grisafi F, Montante G. Particle Drag Coefficients in Turbulent Fluids [J]. *Chem. Eng. Sci.*, 1998, 53(18): 3295–3314.
- [28] Lane G L, Schwarz M P, Evans G M. Modeling of the Interaction between Gas and Liquid in Stirred Vessels [A]. Van Den Akker H E A, Derksen J J. *Proc. 10th Eur. Conf. on Mixing* [C]. Amsterdam: Elsevier, 2000. 197–204.
- [29] Khopkar A R, Rammohan A R, Ranade V V, et al. Gas–Liquid Flow Generated by a Rushton Turbine in Stirred Vessel: CARPT/CT Measurements and CFD Simulations [J]. *Chem. Eng. Sci.*, 2005, 60(8/9): 2215–2229.
- [30] Blumberg P N, Mohr C M. Effect of Orientation on the Settling Characteristics of Cylindrical Particles [J]. *AIChE J.*, 1968, 14(2): 331–334.
- [31] Fan L, Mao Z S, Yang C. Experiment on Sedimentation of Slender Particles with Large Aspect Ratio and Correlation of Drag Coefficient [J]. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2004, 43(23): 7664–7670.
- [32] Anderson T B, Jackson R. A Fluid Mechanical Description of Fluidized Beds [J]. *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, 1967, 6(11): 527–539.
- [33] Homay G M, El-Kaissy M M, Didwania A. Instability Waves and the Origin of Bubbles in Fluidized Beds-II [J]. *Int. J. Multiphase Flow*, 1980, 6: 305–318.
- [34] Jakobsen H A, Sannaes B H, Grevskott S, et al. Modeling of Vertical Bubble-driven Flows [J]. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 1997, 36(10): 4052–4074.
- [35] Kuo J T, Walls G B. Flow of Bubbles through Nozzles [J]. *Int. J. Multiphase Flow*, 1988, 14(5): 547–564.
- [36] Sankaranarayanan K, Shan X, Kevrekidis I G, et al. Analysis of Drag and Virtual Mass Forces in Bubbly Suspensions Using an Implicit Formulation of the Lattice Boltzmann Method [J]. *J. Fluid Mech.*, 2002, 452: 61–96.
- [37] Kendoush A A, Sulaymon A H, Mohammed S A M. Experimental Evaluation of the Virtual Mass of Two Solid Spheres Accelerating in Fluids [J]. *Exp. Therm. Fluid Sci.*, 2007, 31(7): 813–823.
- [38] Odar F. Verification of the Proposed Equation for Calculation of the Forces on a Sphere Accelerating in a Viscous Fluid [J]. *J. Fluid Mech.*, 1966, 25(3): 591–592.
- [39] Ranade V V, Van Den Akker H E A. A Computational Snapshot of Gas–Liquid Flow in Baffled Stirred Reactors [J]. *Chem. Eng. Sci.*, 1994, 49(24B): 5175–5192.
- [40] Gosman A D, Lekakou C, Politis S, et al. Multidimensional Modeling of Turbulent Two-phase Flows in Stirred Vessels [J]. *AIChE J.*, 1992, 38(12): 1946–1956.
- [41] Zapryanov Z, Tabakova S. *Dynamics of Bubbles, Drops and Rigid Particles* [M]. Dordrecht: Kluwer Academic, 1999. 338, 343.
- [42] Reeks M W, McKee S. The Dispersive Effects of Basset History Forces on Particle Motion in a Turbulent Flow [J]. *Phys. Fluids*, 1984, 27(7): 1573–1582.
- [43] Mei R, Adrian R J. Flow Past a Sphere with an Oscillation in the Free-stream Velocity and Unsteady Drag at Finite Reynolds Numbers [J]. *J. Fluid Mech.*, 1992, 237: 323–341.
- [44] Mei R, Lawrence C J, Adrian R J. Unsteady Drag on a Sphere at Finite Reynolds Number with Small Fluctuations in the Free-stream Velocity [J]. *J. Fluid Mech.*, 1991, 233: 613–631.
- [45] 由长福, 祁海鹰, 徐旭常. Basset力研究进展与应用分析 [J]. *应用力学学报*, 2002, 19(2): 31–33.
- [46] Drew D A, Lahey R T Jr. The Virtual Mass and Lift Force on a Sphere in Rotating and Straining Flow [J]. *Int. J. Multiphase Flow*, 1987, 13(1): 113–121.
- [47] Auton T R. The Lift Force on a Spherical Body in a Rotational Flow [J]. *J. Fluid Mech.*, 1987, 183: 199–218.
- [48] Moraga F J, Bonetto F J, Lahey R T. Lateral Forces on Spheres in Turbulent Uniform Shear Flow [J]. *Int. J. Multiphase Flow*, 1999, 25(6/7): 1321–1372.
- [49] Tomiyama A, Sou A, Zun I, et al. Effects of Eötvös Number and Dimensionless Liquid Volumetric Flux on Lateral Motion of a Bubble in a Laminar Duct Flow [A]. Serizawa A, Fukano T, Bataille J. *Proceedings of the 2<sup>nd</sup> International Conference on Multiphase Flow (Kyoto, Japan)* [C]. Amsterdam: Elsevier, 1995. 3–15.
- [50] Tomiyama A, Tamai H, Zun I, et al. Transverse Migration of Single Bubbles in Simple Shear Flows [J]. *Chem. Eng. Sci.*, 2002, 57(11): 1849–1858.
- [51] Happel J. Viscous Flow in Multi-particle Systems: Slow Motion of Fluids Relative to Beds of Spherical Particles [J]. *AIChE J.*, 1958, 4(2): 197–201.
- [52] Li J, Kuipers J A M. Gas–Particle Interactions in Dense Gas-fluidized Beds [J]. *Chem. Eng. Sci.*, 2003, 58(3/6): 711–718.
- [53] Zinchenko A Z, Davis R H. An Efficient Algorithm for Hydrodynamical Interaction of Many Deformable Drops [J]. *J. Comput. Phys.*, 2000, 157(2): 539–587.
- [54] Brunner B, Tryggvason G. Direct Numerical Simulations of Three Dimensional Bubbly Flows [J]. *Phys. Fluids*, 1999, 11(8): 1967–1969.
- [55] LeClair B P, Hamielec A E. Viscous Flow through Particle Assemblages at Intermediate Reynolds Numbers—A Cell Model for Transport in Bubbles Swarms [J]. *Can. J. Chem. Eng.*, 1971, 49(6):

- 713–720.
- [56] Sankaranarayanan K, Sundaresan S. Lift Force in Bubbly Suspensions [J]. *Chem. Eng. Sci.*, 2002, 57(17): 3521–3542.
- [57] Mao Z S. Numerical Simulation of Viscous Flow through Spherical Particle Assemblage with the Modified Cell Model [J]. *Chin. J. Chem. Eng.*, 2002, 10(2): 149–162.
- [58] Mao Z S, Yang C. The Cell Model Approach to Solid Particle Assemblages: Further Justifications [A]. Simos T, Maroulis G, Koninklijke Brill N V. *International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering 2006 (ICCMSE 2006)*, Chania, Greece. Also in *Lecture Series on Computer and Computational Sciences*, Vol.7A, Progress in Computational Sciences and Engineering [C]. Leiden, The Netherlands, 2006. 352–257.
- [59] Mao Z S, Wang Y F. Numerical Simulation of Mass Transfer in a Spherical Particle Assemblage with the Cell Model [J]. *Powder Technol.*, 2003, 134(1/2): 145–155.
- [60] Mao Z S, Chen J Y. Numerical Approach to the Motion and External Mass Transfer of a Drop Swarm by the Cell Model [A]. Sole K C, Cole P M, Preston J S, et al. *International Solvent Extraction Conference (ISEC'2002)* [C]. South Africa, 2002. 227–232.
- [61] Mao Z S, Chen J Y. An Attempt to Improve the Cell Model for Motion and External Mass Transfer of a Drop in Swarms at Intermediate Reynolds Numbers [A]. Fei W Y, Liu H Z, Yan C H. *International Solvent Extraction Conference (ISEC'2005)* [C]. Oral Presentation, Beijing, 2005. A417.
- [62] 毛在砂. 用单元胞模型数值模拟气泡群中气泡的运动 [J]. *化工学报*, 2007, 58(5): 1155–1162.
- [63] Chhabra R P. *Bubbles, Drops, and Particles in Non-Newtonian Fluids*, 2<sup>nd</sup> Ed. [M]. Taylor Francis, 2007. 300–303.
- [64] Wen C Y, Yu Y H. *Mechanics of Fluidization* [C]. *Chem. Eng. Prog. Symp. Ser.*, 1966, 62: 100–111.
- [65] Koch D L, Hill R J. Inertial Effects in Suspension and Porous-media Flows [J]. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 2001, 33: 619–647.
- [66] Lamb H. *Hydrodynamics*, 6th Ed. [M]. New York: Dover Publications, 1945. 124–125.
- [67] Mokeyev Y G. Effect of Particle Concentration on Their Drag and Induced Mass [J]. *Fluid Mech. Sov. Res.*, 1977, 6(1): 161–168.
- [68] 王铁峰. 气液(浆)反应器流体力学行为的实验研究和数值模拟 [D]. 北京: 清华大学, 2004. 30.
- [69] Kendoush A A, Mohammed T J, Abid B A, et al. Experimental Investigation of the Hydrodynamic Interaction in Bubbly Two-phase Flow [J]. *Chem. Eng. Process.*, 2004, 43(1): 23–33.
- [70] Marrucci G. Rising Velocity of a Swarm of Spherical Bubbles [J]. *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, 1965, 4(2): 224–225.
- [71] Kendoush A A. Hydrodynamic Model for Bubbles in a Swarm [J]. *Chem. Eng. Sci.*, 2001, 56(1): 235–238.
- [72] Manjunath M, Tripathi A, Chhabra R P, et al. Numerical Simulation of the Drag on a Swarm of Bubbles [J]. *Int. J. Eng. Sci.*, 1994, 32(6): 927–933.
- [73] Azbel D. *Two-phase Flows in Chemical Engineering* [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1981.
- [74] Rampure M R, Kulkarni A A, Ranade V V. Hydrodynamics of Bubble Column Reactors at High Gas Velocity: Experiments and Computational Fluid Dynamics (CFD) Simulations [J]. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2007, 46(25): 8431–8447.
- [75] Oey R S, Mudde R F, Van Den Akker H E A. Sensitivity Study on Interfacial Closure Laws in Two-fluid Bubbly Flow Simulations [J]. *AIChE J.*, 2003, 49(7): 1621–1636.
- [76] Mudde R F, Simonin O. Two- and Three-dimensional Simulations of a Bubble Plume Using a Two-fluid Model [J]. *Chem. Eng. Sci.*, 1999, 54(21): 5061–5069.
- [77] Harper J F. On Bubbles Rising in Line at Large Reynolds Numbers [J]. *J. Fluid Mech.*, 1970, 41(4): 751–758.
- [78] Hills J H, Darton R C. The Rising Velocity of a Large Bubble in a Bubble Swarm [J]. *Trans. Inst. Chem. Eng.*, 1976, 54(4): 258–264.
- [79] Pan Y, Dudukovic M P, Chang M. Numerical Investigation of Gas-driven Flow in 2-D Bubble Columns [J]. *AIChE J.*, 2000, 46(3): 434–449.
- [80] Ishii M, Zuber N. Drag Coefficient and Relative Velocity in Bubbly, Droplet or Particulate Flows [J]. *AIChE J.*, 1979, 25(5): 843–855.
- [81] Ishii M, Mishima K. Two-fluid Model and Hydrodynamic Constitutive Relations [J]. *Nucl. Eng. Design*, 1984, 82(2/3): 107–126.
- [82] Sokolichin A, Eigenberger G. Gas–Liquid Flow Bubble Columns and Loop Reactors: Part I. Detailed Modelling and Numerical Simulation [J]. *Chem. Eng. Sci.*, 1994, 49(24B): 5735–5746.
- [83] Van Winjgaarden L. Hydrodynamic Interaction between Gas Bubbles in Liquid [J]. *J. Fluid Mech.*, 1976, 77(1): 27–44.
- [84] Zuber N. On the Dispersed Two-phase Flow in the Laminar Flow Regime [J]. *Chem. Eng. Sci.*, 1964, 19(11): 897–917.
- [85] Behzadi A, Issa R I, Rusche H. Modelling of Dispersed Bubble and Droplet Flow at High Fractions [J]. *Chem. Eng. Sci.*, 2004, 59(4): 759–770.
- [86] Beyerlein S W, Cossmann R K, Richter H J. Prediction of Bubble Concentration Profiles in Vertical Turbulent Two-phase Flow [J]. *Int. J. Multiphase Flow*, 1985, 11(5): 629–641.
- [87] Kulkarni A A, Joshi J B. The Lift Forces on Bubbles in a Swarm: Experimental Analysis Using LDA [A]. *Third Int. Symp. on Two Phase Flow Modelling and Experimentation* [C]. Italy: Pisa, 2004.
- [88] Kumar A, Hartland S. Gravity Settling in Liquid/Liquid Dispersions [J]. *Can. J. Chem. Eng.*, 1985, 63(3): 368–376.
- [89] Odar F, Hamilton W S. Forces on a Sphere Accelerating in a Viscous Fluid [J]. *J. Fluid Mech.*, 1964, 18(2): 302–314.
- [90] Zhang L, Yang C, Mao Z S. Unsteady Motion of a Single Bubble in Highly Viscous Liquid and Empirical Correlation of Drag Coefficient [J]. *Chem. Eng. Sci.*, 2008, 63(8): 2099–2106.
- [91] Sharma A K, Tuzla K, Matsen J, et al. Parametric Effects of Particle Size and Gas Velocity on Cluster Characteristics in Fast Fluidized Beds [J]. *Powder Technol.*, 2000, 111(1/2): 114–122.
- [92] Li J H, Kwauk M S. Exploring Complex Systems in Chemical Engineering—The Multi-scale Methodology [J]. *Chem. Eng. Sci.*, 2003, 58(2): 521–535.
- [93] Yang N, Wang W, Ge W, et al. Analysis of Flow Structure and Calculation of Drag Coefficient for Concurrent-up Gas–Solid Flow [J]. *Chin. J. Chem. Eng.*, 2003, 11(1): 79–84.
- [94] 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]. *Chem. Eng. J.*, 2003, 96(1/3): 71–80.
- [95] 白丁荣, 金涌, 俞芷青. 快速流态化气固两相间的动量交换 [J]. *化工学报*, 1991, 42(5): 548–553.
- [96] Mao Z S, Wang Y F, Wang R, et al. Interpretation of Flow Nonuniformity and Hysteresis with a Capillary Array Model [J]. *Chin. J. Chem. Eng.*, 1996, 4(1): 28–38.

[97] 王跃发. 滴流床中流动分布的研究 [D]. 北京: 中国科学院化工冶金研究所, 1996. 33–44.

## Knowledge on Particle Swarm: The Important Basis for Multi-scale Numerical Simulation of Multiphase Flows

MAO Zai-sha

*(Key Lab. Green Process & Eng., Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)*

**Abstract:** Numerical simulation of multiphase flows in processing equipment in process industry with two-fluid model and Eulerian–Lagrangian approach requires the constitutive equations describing the interactions between the dispersed phase of high concentration and the continuous phase. The status of research on the forces on solid and fluid particles and the topics remaining to be tackled are reviewed. As compared with the knowledge on drag of single solid particles, study on particle swarms and on other forces is not sufficient to meet the needs of numerical simulation of multiphase flows. Thus, thorough study on the particle swarms and clusters becomes the key to accurate multi-scale simulation of multiphase flows. Besides, the development of efficient algorithm dealing with the simultaneous non-uniformity on equipment and mesoscopic scales is recognized as an important issue to be resolved.

**Key words:** particle; drop; bubble; particle swarm; interphase force; multiphase flow; numerical simulation; cluster