

颗粒群组方法中关键参数的选取

雷洪¹, 赵岩²

(1. 东北大学 材料电磁过程研究教育部重点实验室, 辽宁 沈阳 110819; 2. 东北大学 冶金学院, 辽宁 沈阳 110819)

摘 要: 为了深入了解颗粒群组方法的特点, 提出了修正最大群组数方法, 研究了颗粒群组方法中的两个关键参数(体积增量和最大群组数)对数量密度和体积分数的影响。结果表明: 传统最大群组数在计算颗粒数量密度时比较准确, 修正最大群组数在计算颗粒体积分数时比较准确。随着颗粒体积增量的增加, 传统最大群组数得到的颗粒数量密度的预测值降低, 而颗粒体积分数的预测值增加。随着颗粒体积增量的增加, 修正最大群组数得到的颗粒数量密度的预测值下降, 而颗粒体积分数的预测值呈振荡趋势。

关 键 词: 颗粒; 碰撞聚合; Smoluchowski 模型; 颗粒群组法; 颗粒体积增量; 最大群组数

中图分类号: TF 701 **文献标志码:** A **文章编号:** 1005-3026(2016)04-0508-05

Key Parameter Selection in Particle-Size-Grouping Method

LEI Hong¹, ZHAO Yan²

(1. Key Laboratory of Electromagnetic Processing of Materials, Ministry of Education, Northeastern University, Shenyang 110819, China; 2. School of Metallurgy, Northeastern University, Shenyang 110819, China. Corresponding author: LEI Hong, E-mail: leihong@epm.neu.edu.cn)

Abstract: In order to have a deep insight into the particle-size-grouping (PSG) method, a modified maximum group number method was developed to study the effects of two key parameters (the particle volume increment and the maximum group number) on the particle number density and volume fraction. The results showed that a more accurate value of the particle number density was obtained by using the PSG method with the traditional maximum group number while a more accurate value of the particle volume fraction was obtained by using the PSG method with the modified maximum group number. With the increase of the particle volume increment, the predicted value of the particle number density decreased, while the predicted value of the particle volume fraction increased when using the PSG method with the traditional maximum group number. With the increase of particle volume increment, the predicted value of the particle number density decreased, while the predicted value of the particle volume fraction showed a trend of oscillation when using the PSG method with the modified maximum group number.

Key words: particle; collision and aggregation; Smoluchowski model; particle-size-grouping method; particle volume increment; maximum group number

1917年,波兰科学家 Smoluchowski 分析了碰撞聚合对颗粒数量的影响,建立了离散型的颗粒碰撞速率公式。在实际工业生产中,颗粒粒径分布范围很广。例如,在钢液中,夹杂物的粒径从几纳米到几十微米,即粒径尺度跨越了4个数量级^[1-3]。这样,就要求解大约 10^{12} 个常微分方程。这样的计算量在目前的计算机硬件条件下是

一个不可能完成的任务。

2001年, Nakaoka 提出了颗粒群组方法^[4]。颗粒群组方法的出现为大粒径跨度颗粒之间的碰撞聚合计算创造了条件,但是此方法在使用过程中,对于最大群组数和颗粒体积增量的选取存在着很大的随意性^[1-4]。因此,本文以这两个参数为切入点,给出了修正最大群组数,为颗粒群组方法

收稿日期: 2015-02-19

基金项目: 国家自然科学基金和上海宝钢集团联合资助项目(U1460108); 辽宁省百千万人才工程培养项目(2013921073); 北京科技大学钢铁冶金新技术国家重点实验室开放课题(KF13-10)。

作者简介: 雷洪(1973-),男,湖北武汉人,东北大学教授,博士生导师。

的正确应用奠定基础。

1 Smoluchowski 方程

Smoluchowski 方程已被广泛应用于描述不同反应器内颗粒之间的碰撞聚合^[5]。

$$\frac{dn_k}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} \beta_{ij} n_i n_j - \sum_{i=1}^{\infty} \beta_{ik} n_i n_k. \quad (1a)$$

式中:下标 i, j 和 k 均是颗粒的粒径级别; n_i, n_j 和 n_k 分别是第 i 级, 第 j 级和第 k 级粒径颗粒的数量密度; β_{ij} 是粒径为 r_i 和 r_j 的颗粒发生碰撞时的碰撞速率。

在炼钢过程中, 连铸中间包、结晶器和钢包精炼等装置内钢液流动为湍流流动, 夹杂物之间的碰撞以湍流碰撞为主^[6-10]。那么, 基于湍流碰撞的 Smoluchowski 公式的无量纲形式^[4]可表示为

$$\frac{dn_k^*}{dt^*} = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} (i^{1/3} + j^{1/3})^3 n_i^* n_j^* - \sum_{i=1}^{N_m} (i^{1/3} + j^{1/3})^3 n_i^* n_j^*. \quad (1b)$$

式中: $n_i^* = n_i/N_0$ 是无量纲颗粒数量密度; $t^* =$

$$\frac{dn_q^*}{dt^*} = \sum_{i=1}^{q-1} \xi_{i,q-1} \beta_{i,q-1} (R_i^* + R_{q-1}^*)^3 n_i^* n_{q-1}^* + \sum_{i=1}^{i_{c,q-1}} \xi_{i,q} \beta_{i,q} (R_i^* + R_q^*)^3 n_i^* n_q^* - \sum_{i=i_{c,q}}^{q_m-1} (1 + \delta_{i,q}) (R_i^* + R_q^*)^3 n_i^* n_q^*. \quad (4)$$

式中: $R_i^* = R_i/R_1$ 是无量纲半径; $i_{c,q}$ 和 $i_{c,q-1}$ 是临界群组数, 它们之间满足

$$i_{c,q-1} = i_{c,q} - 1, \quad (5a)$$

$$i_{c,q} = \begin{cases} q, & 2.089 < R_v < 3.510; \\ q-1, & 1.732 < R_v < 2.089; \\ q-2, & 1.564 < R_v < 1.732; \\ q-3, & 1.464 < R_v < 1.564; \\ q-4, & 1.397 < R_v < 1.464; \\ \vdots & \end{cases} \quad (5b)$$

方程(4)具有3个右端项, 其基本物理意义如下:

1) 第 $q-1$ 组的特征尺寸颗粒与一个较小的特征尺寸颗粒(第 $i_{c,q-1}$ 组到第 $q-1$ 组)发生了碰撞, 生成了一个第 q 组的颗粒。此情形会涉及不同群组之间的跃迁, 即不仅增加了第 q 组颗粒总体积, 还增加了第 q 组颗粒总数量, 如图2中的机制[1]。

2) 第 q 组的特征尺寸颗粒与一个较小特征尺寸颗粒(第1组到第 $i_{c,q-1}$ 组)发生了碰撞, 生成了一个仍属于第 q 组但体积更大的颗粒。此情形不会涉及群组之间的跃迁, 即仅增加了第 q 组颗

1. $3\alpha(\pi\varepsilon/\nu)^{1/2} r_1^3 N_0 t$ 是无量纲时间, α 是颗粒聚合系数; ν 是流体运动黏度; ε 是湍动能耗散率; r 是颗粒半径; N_0 是初始颗粒数量; N_m 是最大颗粒中单体的数量。

2 颗粒群组方法

2.1 控制方程

颗粒群组法^[3-4]的基本思想是将所研究的颗粒分为 M 组, 其中, 第 q 组颗粒尺寸范围为 $(R_q^c, R_{q+1}^c]$, 颗粒的特征半径为 R_q , 对应的特征体积为 V_q , 如图1所示。 R_q^c 是第 q 组颗粒的左临界半径, 同时也是第 $q-1$ 组的右临界半径。这样, 第 q 组内颗粒的数量密度可表示为

$$n_q = \sum n(R), R \in (R_q^c, R_{q+1}^c]. \quad (2)$$

而相邻组(第 q 组和第 $q-1$ 组)特征颗粒之间的体积增量 R_v 可表示为

$$R_v = \frac{V_q}{V_{q-1}}. \quad (3)$$

因此, 颗粒群组法的控制方程为

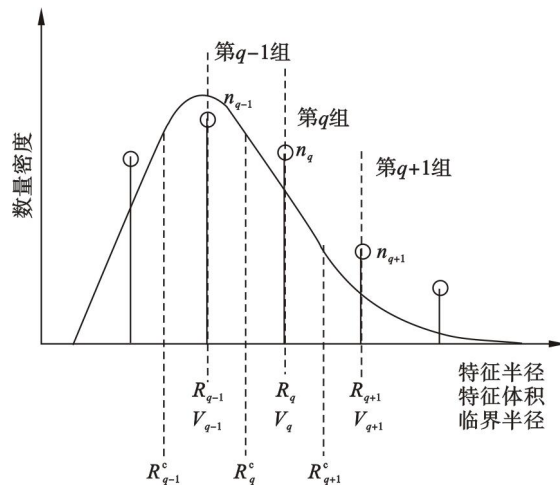


图1 颗粒群组法中颗粒特征参数

Fig. 1 Particle characteristic parameters in particle-size-grouping method

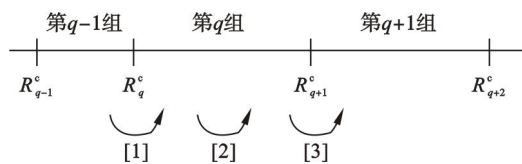


图2 颗粒聚合造成的群组变迁

Fig. 2 Change of group index due to aggregation among particles

粒总体积,但第 q 组颗粒总数量保持不变,如图 2 中的机制[2].

3) 第 q 组的特征尺寸颗粒与一个较大特征尺寸颗粒(第 $i_{c,q}$ 组到第 $q_m - 1$ 组)发生了碰撞,生成了一个比第 q 组中最大尺寸颗粒更大的颗粒(不再属于第 q 组). 此情形会涉及不同群组之间的跃迁,即不仅减小了第 q 组颗粒总体积,还减小了第 q 组颗粒总数量,如图 2 中的机制[3].

为了满足体积守恒,式(4)还引入了 2 个体积修正因子:

$$\xi_{i,q-1} = (V_i + V_{q-1})/V_q, \tag{6a}$$

$$\zeta_{i,q} = (V_i + V_q)/V_q. \tag{6b}$$

2.2 各组颗粒界限的确定

对于第 q 组内颗粒尺寸的上下界限的确定,通常采用半径算术平均方法. 其表达式为

$$R_{c,q} = \frac{R_q + R_{q-1}}{2}, \tag{7a}$$

$$R_{c,q+1} = \frac{R_{q+1} + R_q}{2}. \tag{7b}$$

2.3 最大群组数的确定

在计算中,最大聚合体 N_m 必须位于最大群组中,颗粒的传统最大群组数 q_m 是体积增量 R_v 的函数^[3],即

$$q_m = \text{int}(\log_{R_v} N_m) + 1. \tag{8}$$

式中 int 是取整函数.

应该注意的是,随着群组数量的增加,第 q 群组的上限 $\text{up}(q)$ 和下限 $\text{down}(q)$ 之间的数值差距也越来越大. 因此,有必要将第 q_m 群组均分为两部分,并将修正的颗粒最大群组数 q_m^M 与此群组 q_m 的中点 $\text{mid}(q_m)$ 相关联.

$$\text{mid}(q_m) = \frac{\text{up}(q_m) + \text{down}(q_m)}{2}. \tag{9}$$

$$q_m^M = \begin{cases} q_m, & \text{down}(q_m) < I_m \leq \text{mid}(q_m); \\ q_m + 1, & \text{mid}(q_m) < I_m \leq \text{up}(q_m). \end{cases} \tag{10}$$

根据式(8)和式(9),可以得到 $N_m = 10\,000$ 所对应的不同颗粒体积增量下组群数量,如表 1 所示.

3 结果与讨论

3.1 Smoluchowski 方程的精确解

为了评估颗粒群组方法的准确性,首先要得到 Smoluchowski 方程的精确解. 在计算过程中,方程(1b)的初始条件为

$$n_k^* = \begin{cases} 1, & k = 1; \\ 0, & k > 1. \end{cases} \tag{11}$$

给定最大颗粒的单体数量 $N_m = 10\,000$,且最大颗粒一旦形成,就被去除. 无量纲时间步长取 $\Delta t^* = 0.001$ ^[4,11],采用定步长的 Runge – Kutta 方法直接求解方程(1b). 计算环境为 PR1760 型宝德服务器(两颗四核 2.83 GHz 的 CPU 和 16 GB 的 DDR2FB667 内存),当 $t^* = 10$ 时,无量纲颗粒数量密度为 2.502×10^{-3} ,无量纲颗粒体积分数为 5.332×10^{-2} ,串行计算耗时 51.2 h^[11].

3.2 颗粒群组法给出的近似解

当颗粒群组法应用于 $N_m = 10\,000$ 的工况时,对于不同的体积增量 R_v ,颗粒群组法的群组数量是不同的,如表 1 所示. 当 $R_v = 2.5$ 时,采用传统颗粒最大群组数和修正颗粒最大群组数计算得到的最大群组数量相等. 这是因为第 11 群组的下限为 6 245,中点为 10 929, $N_m = 10\,000$ 位于第 11 群组的下限和中点之间. 在其他情况下,采用等式(10)计算得到的传统最大群组数量比等式(8)计算得到的修正最大群组数量多 1 组.

表 1 $N_m = 10\,000$ 时不同体积增量下组群数量
Table 1 Group number in the case of different volume increments for $N_m = 10\,000$

R_v	q_m	q_m^M
3.5	8	9
3.0	9	10
2.5	11	11
2.0	14	15
1.6	20	21
1.5	23	24
1.4	28	29

在应用颗粒群组法的过程中,求解算法和时间步长与 Smoluchowski 方程的直接解法一致,即取无量纲时间步长 $\Delta t^* = 0.001$,并采用定步长的 Runge – Kutta 方法进行求解颗粒群组方程(4),串行计算耗时可控制在 10 s 以内.

表 2 是不同颗粒体积增量下的无量纲颗粒数量密度. 随着时间的推移,颗粒之间不断碰撞聚合,体系中小颗粒数量下降速度远大于大颗粒数量的增长速度,同时被去除的最大尺寸颗粒数目也持续增加,因此体系中颗粒总数目不断减少,颗粒数量密度也随之减小. 无论采用传统最大群组法,还是采用修正最大群组法,随着颗粒体积增量 R_v 的减小,颗粒群组法的近似解与精确解的差异呈增大趋势. 当 $R_v = 3.5$ 时,传统最大群组数得到

的近似解大于精确解,误差为 5.02%;其余的近似解均小于精确解.总体而言,传统最大群组数得到的近似解略大于修正最大群组数得到的近似解;且相对于修正最大群组数法而言,传统最大群组数得到的无量纲颗粒数量密度近似解更接近于精确解.

表 2 当 $t^*=10, N_m=10\,000$ 时无量纲颗粒数量密度
Table 2 Dimensionless particle number density in the case of $t^*=10$ and $N_m=10\,000$

R_v	颗粒数量密度 $\times 10^3$	修正后颗粒数量密度 $\times 10^3$
3.5	2.628	2.290
3.0	2.382	2.089
2.5	1.958	1.958
2.0	2.143	1.962
1.6	1.846	1.723
1.5	1.860	1.753
1.4	1.658	1.572

表 3 是不同颗粒体积增量下的无量纲颗粒体积分数的近似解.虽然最大群组数的确定方法不同,但这两种方法得到颗粒体积分数的近似解均小于精确解.随着颗粒体积增量 R_v 的减小,当采用传统最大群组数时,利用颗粒群组法得到的近似解与精确解的差异呈减小趋势;当采用修正最大群组数时,利用颗粒群组法得到的近似解与精确解的差异呈振荡趋势.总体而言,利用修正最大群组数得到的近似解略大于传统最大群组数得到的近似解,从而更接近于精确解,最大计算误差小于 5%.

表 3 $t^*=10, N_m=10\,000$ 时无量纲颗粒体积分数
Table 3 Dimensionless particle volume fraction under $t^*=10$ and $N_m=10\,000$

R_v	颗粒体积分数 $\times 10^2$	修正后颗粒体积分数 $\times 10^2$
3.5	4.470	5.057
3.0	4.708	5.209
2.5	5.057	5.057
2.0	5.021	5.318
1.6	5.088	5.264
1.5	5.113	5.263
1.4	5.136	5.249

图 3 给出了无量纲颗粒数量密度随时间的变化率.从图中可以看出,传统最大群组数和修正最大群组数给出的颗粒群组法近似解基本重合,均小于 Smoluchowski 模型的精确解.需要注意的是,这两种确定最大群组数方法仅在无量纲时间 $t^*=1$ 后出现了少许偏离,其中传统最大群组数给出的无量纲颗粒数量密度更接近于精确解.

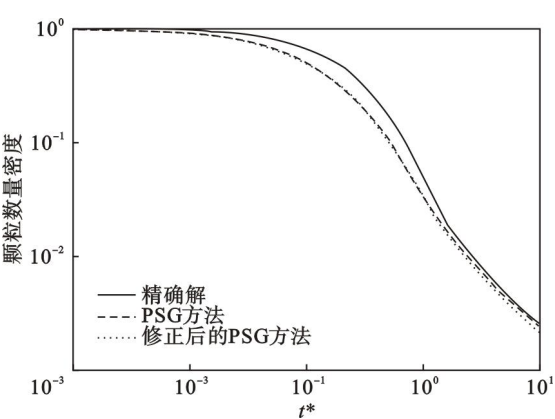


图 3 当 $R_v=3$ 时 PSG 方法给出的无量纲颗粒数量密度与精确解的比较
Fig. 3 Comparison of dimensionless particle number density calculated by PSG method and exact solution in the case of $R_v=3$

图 4 给出了无量纲颗粒体积分率随时间的变化率.从图中可以看出,传统最大群组数和修正最大群组数给出的颗粒群组法近似解基本重合,均小于 Smoluchowski 模型的精确解.需要注意的是,两种确定最大群组数方法仅在无量纲时间 $t^*=1$ 后出现了少许偏离,其中修正最大群组数给出的无量纲颗粒体积分率更接近于精确解.

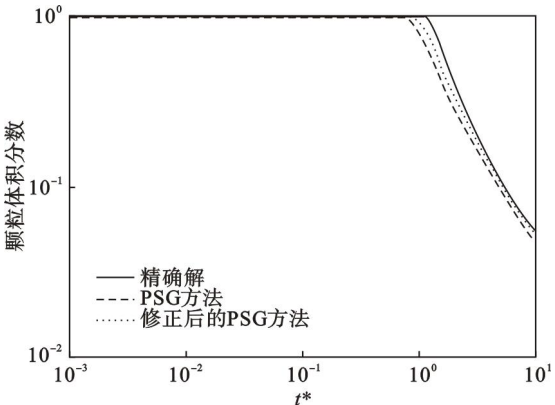


图 4 当 $R_v=3$ 时 PSG 方法给出的无量纲颗粒体积分率与精确解的比较
Fig. 4 Comparison of dimensionless particle volume fraction calculated by PSG method and exact solution in the case of $R_v=3$

4 结 论

- 1) 当最大颗粒的单体数量为 10 000 时,相对于直接求解 Smoluchowski 公式而言,颗粒群组方法的计算耗时可忽略不计.
- 2) 当最大颗粒的单体数量为 10 000 时,基于传统最大群组数和修正最大群组数得到的颗粒数量密度和颗粒体积分率在无量纲时间为 1 之前基本重合.

(下转第 516 页)