

横向气流穿过垂直下落液滴场的二维流动数值计算

薛社生*, 徐明, 束小建

(北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

摘要:对 Cl_2/He 混合气体横向穿过垂直下落的 BHP(按重量 25% 的 KOH , 25% 的 H_2O_2 及 50% 的 H_2O) 液滴场的化学反应流动作了数值计算。模拟的流场是气体/液滴两相流场, 在气相方程中, 考虑了液滴与 Cl_2 反应产生及释放 $\text{O}_2(^1\Delta)$ 的质量源项及表示液滴对气流阻碍作用的动量源项。由于气相动量小, 液滴在下落过程横向偏移小, 下落速度基本不变, 因而假定流场中液滴数密度保持均匀。质量源项通过层流边界层理论而得到一种解析表达, 反映了液滴表面因反应产生的 Cl_2 通量依赖于来流中 Cl_2 浓度、气流密度及来流速度变化的关系。用 SIMPLE 方法对气相模型方程作了数值求解。模拟结果显示, 气相速度场中靠近顶端和液滴区右边界位置出现涡旋, 二维效应较为明显; 混合气体的密度经过液滴区有较大下降; Cl_2 利用率、 $\text{O}_2(^1\Delta)$ 产率随入流速度增大而减小, 随液滴速度增大而增大, 这些结果与相关文献提供的实验测试结果对比较好。

关键词: 气体/液滴两相流动; 化学反应; SIMPLE 方法
中图分类号: O362 **文献标志码:** A

1 引言

Cl_2/He 混合气体横向穿过垂直下落的 BHP(按重量 25% 的 KOH , 25% 的 H_2O_2 及 50% 的 H_2O) 液滴场, 是一带化学反应的两相流动问题。该问题源于化学氧碘激光器(COIL)的重要部件——横向均匀液滴单态氧发生器(TUSOG)的研制^[1]。

图 1 为 TUSOG 原理示意图, 按一定流量配比的 Cl_2/He 混合气流, 从左向右流动, 穿过垂直下落的 BHP 溶液液滴场, Cl_2 被液滴吸收, 经化学反应产生并释放 $\text{O}_2(^1\Delta)$ 进入混合气流中, 成为 COIL(化学氧碘激光器)的工作物质。

这里典型的物理化学过程分为两个方面: 一是氯气向液滴中扩散并发生化学反应, 产生的 $\text{O}_2(^1\Delta)$ 在液体中淬灭或从液体中逸出; 二是液滴场与气流间的动力学相互作用。Thayer^[1] 描述了发生于液滴内的化学反应, 薛社生等^[2] 用差分法对化学反应模型方程作了数值计算, 给出了液滴内的物质分布及液滴表面的物质通量特征。本文从层流边界层理论和两相流体动力学的观点, 建立了液滴表面物

质通量模型及气相运动模型方程, 用 SIMPLE 方法对模型方程作了数值求解, 获得了气流场中 Cl_2 、 $\text{O}_2(^1\Delta)$ 的浓度分布, 并分析了气体入流速度、液滴下落速度变化对 Cl_2 利用率、 $\text{O}_2(^1\Delta)$ 产率及工作效率的影响。

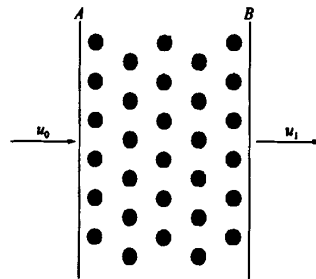


图 1 TUSOG 模型示意图
Fig. 1 The scheme of a TUSOG

2 物理数学模型

Cl_2/He 混合气体与 BHP 液滴间存在着物质、动量及能量的交换。 Cl_2 气被液滴吸收, 在液滴内发生化学反应产生 $\text{O}_2(^1\Delta)$, 大部分 $\text{O}_2(^1\Delta)$ 逸出到气流中^[2]。液滴在受气动力作用的同时, 使气流运动受到阻碍。对此, 需要建立模型描述气相运动和 Cl_2 吸收、 $\text{O}_2(^1\Delta)$ 释放。

2.1 气相运动的流体动力学模型

混合气体的入流速度、密度、液滴的尺寸及液滴占据的体积分数, 是决定两相流场性质的重要参

收稿日期: 2009-05-26; 修改稿收到日期: 2010-03-18.
基金项目: 中国工程物理研究院发展基金(2007B09007)
资助项目.
作者简介: 薛社生*(1965-), 男, 博士, 副研究员
(E-mail: Xue_shesheng@iapcm.ac.cn).

数。考虑到 TUSOG 装置中气相动量较小,液滴下落速度变化较小,且横向偏移较小的特点,在模型中作如下假定:

(1) 液滴以均匀速度沿垂直向下落,忽略横向偏移。

(2) 液滴场始终保持均匀的空间分布。

于是,分别以 α, ρ, u, v 和 p 表示液相占据的体积分数、气流密度、 X 向和 Y 向速度分量及压力,从而气相运动方程写成:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} = \dot{\rho} \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u u}{\partial x} + \frac{\partial \rho u v}{\partial y} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x} + \bar{\mu} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) - \frac{1}{1-\alpha} F_x \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} + \frac{\partial \rho u v}{\partial x} + \frac{\partial \rho v v}{\partial y} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial y} + \bar{\mu} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) - \frac{1}{1-\alpha} F_y \quad (3)$$

式中 $\bar{p} = \frac{1}{1-\alpha} p$, $\bar{\mu} = \frac{1}{1-\alpha} \mu$

$$\dot{\rho} = \bar{n} (f_{cl_2} + f_{o_21} + f_{o_23}) \quad (4)$$

表示气相质量源项; f_{cl_2} , f_{o_21} 和 f_{o_23} 分别表示单位时间通过单个液滴表面放出的 Cl_2 , $O_2(^1\Delta)$ 及 $O_2(^3\Sigma)$ 的质量, \bar{n} 为单位体积中液滴数目, F_x 和 F_y 分别表示单位体积内液滴的气相阻力分量:

$$F_x = \bar{n} \cdot \frac{1}{2} A_d C_D \rho (u_s - u_x) |u_s - u_x| \quad (5)$$

$$F_y = \bar{n} \cdot \frac{1}{2} A_d C_D \rho (v_s - v_y) |v_s - v_y| \quad (6)$$

式中 $A_d = \pi \cdot d^2$, d 为液滴直径, C_D 为阻力系数^[3], ρ 为气相物质密度, u_s 和 v_s 分别表示液滴速度分量。由下述方程描述气相物质浓度变化:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + u \frac{\partial c_i}{\partial x} + v \frac{\partial c_i}{\partial y} = D_i \left(\frac{\partial^2 c_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_i}{\partial y^2} \right) + \bar{n} \cdot F_i \quad (7)$$

式中下标 $i = 1, 2, 3$ 分别对应 Cl_2 , $O_2(^1\Delta)$, $O_2(^3\Sigma)$ 三种气体组分, c_i 和 D_i 分别表示第 i 种物质的摩尔浓度和扩散系数, F_i 表示单个液滴单位时间放出的第 i 种物质的摩尔数。方程(1~3)和(7)构成描述气相流场及物质分布的模型方程。

2.2 物质通量模型

要求解上述模型方程,需要确定其中的物质源项,即方程(4)中右端的表达。其中最重要的是

BHP 液滴对混合气体中氯气的吸收率。当 Cl_2/He 混合气体流过 BHP 球形液滴表面, Cl_2 气因与液体反应而在界面产生物质扩散流。在液滴表面除有动力学边界层外,还形成一扩散边界层^[4],在该层内,分子扩散作用是显著的。可认为反应表面的曲率半径较扩散边界层的厚度大得多(扩散层的厚度很小),从而忽略表面弯曲的影响;另外,略去气体流过液滴表面时,因吸收 Cl_2 放出 $O_2(^1\Delta)$, $O_2(^3\Sigma)$ 产生的气体密度变化。于是,液滴表面气流边界层方程可写成^[5]:

$$u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} = U \frac{dU}{dx} + \nu \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \quad (8)$$

式中 x 和 y 分别表示沿液滴表面和垂直于液滴表面方向的坐标, u 和 v 分别是 x 和 y 方向的速度分量, U 为来流速度,对均匀来流右端第一项不计。连续性方程和紧贴液体表面的扩散层内的物质浓度方程分别写为

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} = D \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \quad (9,10)$$

因为化学反应速度比扩散速度大得多,故边界条件取为 $y \rightarrow \infty, c = c_0$ (来流中 Cl_2 浓度); $y = 0, c = 0$ 。于是边界层方程(8)在液体表面 $y = 0$ 附近有解^[4]:

$$u \approx \frac{1.33U}{4} \sqrt{\frac{Uy^2}{\nu x}}, v \approx \frac{1.33}{16} \frac{U^{3/2} y^2}{\nu^{1/2} x^{3/2}} \quad (11)$$

对方程(10),取函数 $\Psi = \sqrt{\nu U x} f(\eta), \eta = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{U}{\nu x}} y$, 作变量置换 $(x, y) \rightarrow (x, \Psi)$, 得^[4]

$$x^{1/4} \frac{\partial c}{\partial x} = g \frac{\partial}{\partial \Psi} \left(\sqrt{\Psi} \frac{\partial c}{\partial \Psi} \right) \quad (12)$$

式中 $g = D \left(\frac{1.33}{2} \right)^{1/2} U^{3/4} \nu^{-1/4}$ 。按边界条件:当 $\Psi \rightarrow \infty (y \rightarrow \infty)$ 时, $c = c_0$; 当 $\Psi \rightarrow 0$ (在物体表面上), $c = 0$ 。求解方程(12),得

$$c(x, y) = \frac{c_0 \int_0^\sigma \exp\{-0.22Pr \cdot z^3\} dz}{\int_0^\infty \exp\{-0.22Pr \cdot z^3\} dz} \quad (13)$$

式中 $\sigma = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{Uy^2}{\nu x}}$, $Pr = \frac{\nu}{D}$, 对气体 $Pr \approx 0.7$, 借助于式(13),可求得流至表面的扩散流:

$$j = D \left(\frac{\partial c}{\partial y} \right)_{y=0} = \frac{Dc_0 (0.22Pr)^{1/3}}{1.78} \sqrt{\frac{U}{\nu x}} \approx 0.29 \frac{Dc_0 \sqrt{U}}{\sqrt{\nu x}} \quad (14)$$

对圆球而言,表面物质通量由下式给出得

$$I = \int_0^\pi 2\pi a \sin \theta \cdot a \cdot j \cdot d\theta = \beta \int_0^\pi \frac{\sin \theta}{\sqrt{\theta}} d\theta \approx 72.53 Dc_0 a^{3/2} \sqrt{\rho U} \quad (15)$$

式中 $\beta = 0.58\pi Dc_0 a^{3/2} \sqrt{U/\nu}$, 说明表面物质通量与来流速度及密度的平方根成正比, 与来流中物质浓度成正比。

3 数值求解

3.1 方法简介

对模型方程(1~3)和(7), 采用 SIMPLE 方法求解^[6]。该方法全称 Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations, 即解压力耦合方程的半隐式法。该方法采用交错网格, 其物理量定义在网格中心, 速度分量分别定义在左右边界及上下边界上, 所求解的方程写为通用形式:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) + \text{div}(\rho u\phi) = \text{div}(\Gamma_\phi \text{grad}\phi) + S_\phi \quad (16)$$

式中 Γ_ϕ 是扩散系数, S_ϕ 是源项。对于特定意义的 ϕ , 具有特定的量 Γ_ϕ 和 S_ϕ 。对于质量、动量方程而言, ϕ 分别取 1, u 和 v ; 对质量方程, $\Gamma_\phi = 0, S_\phi = \dot{\rho}$; 对动量方程分别取

$$S_u = -\bar{n} \cdot \frac{1}{2} A_d C_D \rho (u - u_d) |u - u_d|$$

$$S_v = -\bar{n} \cdot \frac{1}{2} A_d C_D \rho (v - v_d) |v - v_d|$$

为保证迭代收敛, 对源项作合理的线性化, 即 $S_\phi = S_c + S_\phi \phi$, 其中 $S_\phi \leq 0$ 。

离散化后的方程写成:

$$a_P \phi_P = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + b \quad (17)$$

式中

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S - S_\phi \Delta x \Delta y$$

$$b = S_c \Delta x \Delta y + a_P^0 \phi_P^0$$

式中 ϕ_P^0 与 ρ_P^0 对应于时刻 t 的已知值, 其他都是时刻 $t + \Delta t$ 的未知值。用逐行扫描法作迭代, 求解离散化的代数方程。

3.2 计算网格与边界条件

计算区域为高 52 cm, 长 100 cm 的矩形。其中, 在 [0, 30] 区域有液滴垂直降落。气流从左至右流入。出流边界应选取离液滴区边缘足够远, 边界速度的 x 分量应按紧临边界网格点的速度分量值乘

以一个因子, 该因子取作入流总流量除以紧临网格点的流量的商。

4 结果与分析

4.1 模拟条件

文献[7]给出了 TUSOG 的实验测试。其装置的液滴反应区长 30 cm, 宽 9.9 cm, 高 52.5 cm, 液滴自顶板下落, 产生液滴的振荡频率为 4000 Hz。按文中所提的氯气流量、压力及混合比, 可求得顶板喷孔密度约 30 个/cm², 孔间距约 0.20 cm, 气流密度、液滴数密度及体积分数列入表 1 和表 2。表 1 的条件考虑了液滴的速度变化; 表 2 的条件考虑了液滴数密度不变时气流速度的变化。

表 1 气流参数表

Tab. 1 The gaseous parameters

气体压力/torr	39.75	氯气密度/g/cm ³	9.5708×10 ⁻⁶
气体温度/K	315	氯气密度/g/cm ³	7.5512×10 ⁻⁶
气流速度/m/s	10.0	数密度 \bar{n}	200~80
液滴速度/m/s	6~15	体积分数 α	0.0048~0.012

表 2 气流参数表

Tab. 2 The gaseous parameters

气体压力/torr	90	氯气密度/g/cm ³	6.2446×10 ⁻⁵
气体温度/K	315	氯气密度/g/cm ³	1.4761×10 ⁻⁵
气流速度/m/s	8~14	数密度 \bar{n}	60
液滴速度/m/s	20	体积分数 α	0.004

4.2 模拟结果

4.2.1 速度场特征

图 2 为表 2 的计算结果, 其中图 2(a, b) 分别对应气流入流速度 8 m/s 和 14 m/s。从矢量图可见:

(1) 在液滴区域的右边缘靠近顶板位置, 形成气流涡旋。气流入流速度越大, 涡旋的中心位置越靠近顶部, 这里, 液滴区边界出流速度 X 向分量为负。

(2) 靠近底部, 气流垂直向速度分量较小, 速度接近于水平向。

另外, 从垂直向半高位置 $y = 26$ cm 处的速度分布知, 水平向速度分量沿 X 方向增大, 在液滴区边界附近出现最大值。

4.2.2 Cl₂ 与 O₂(¹Δ) 的浓度分布

混合气体中的 Cl₂ 不断被液滴吸收, 经反应放出的 O₂(¹Δ) 与 Cl₂ 分子量差较大, 从而使混合气

流的密度沿 X 向减小。 Cl_2 浓度分布如图 3 所示。可以看出,在入口附近存在大的浓度梯度,在液滴区的边界附近,二维特征较为明显,靠近底部浓度较小。半高位置 $y = 26$ cm 的浓度沿 X 向分布如图 4 所示。可以看出, Cl_2 一经进入液滴区,由于被吸收而在入口附近产生陡的浓度降落。在液滴区内,浓度沿 X 向下降,且梯度减小。反映了气体中 Cl_2 浓度越大,液滴吸收率越大的特点。

与 Cl_2 浓度分布趋势相反的是 $O_2(^1\Delta)$ 的浓度

分布。图 5 所示在 $y = 26$ cm 处沿 X 向 $O_2(^1\Delta)$ 的浓度分布, $O_2(^1\Delta)$ 浓度在气流入口处有一陡的增长。图 4 和图 5 的四条曲线对应于气流入流速度 8 m/s, 10.5 m/s, 12 m/s 和 14 m/s 四种条件。气流入流速度越大, Cl_2 浓度越高,而 $O_2(^1\Delta)$ 浓度越低。原因是气流入流速度大,则经过液滴区的时间短,于是 Cl_2 的吸收量与入流速度成反比;而新的通量模型反映, Cl_2 吸收率与入流速度的平方根成正比,从而,上述结果是二者的综合效应。

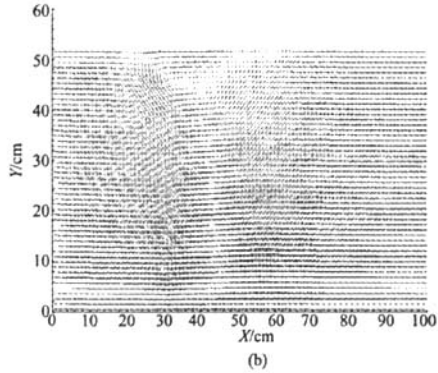
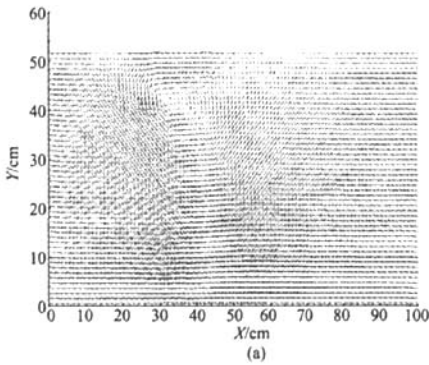


图 2 速度场图

Fig. 2 The contour of gases-velocity

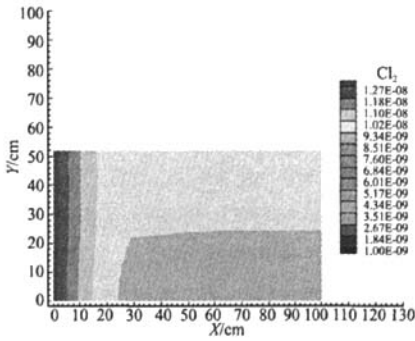


图 3 Cl_2 浓度分布

Fig. 3 The concentration of gaseous chlorine

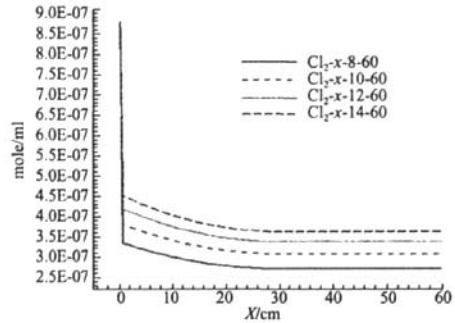


图 4 Cl_2 浓度分布

Fig. 4 The concentration of gaseous chlorine

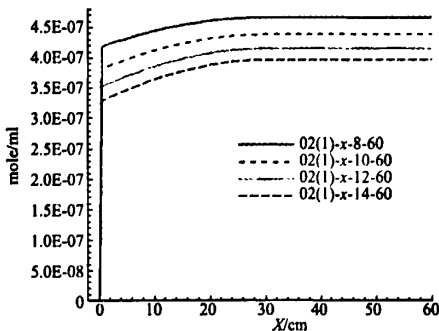


图 5 $O_2(^1\Delta)$ 浓度分布

Fig. 5 The concentration of singlet oxygen

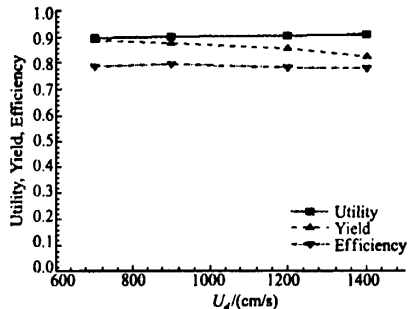


图 6 计算结果

Fig. 6 The computational results

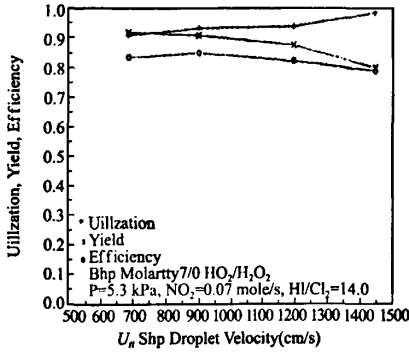


图 7 实测结果
Fig. 7 The tests results

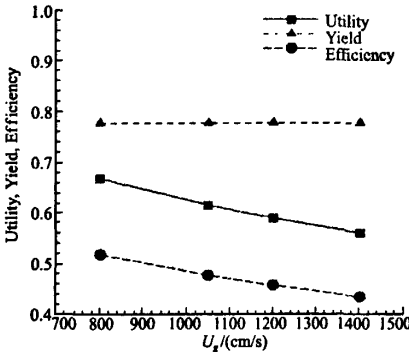


图 9 二维计算结果
Fig. 9 The 2D computational results

4.2.3 Cl₂ 利用率、O₂(¹Δ) 产率及效率

衡量 TUSOG 性能的主要因素包括 Cl₂ 利用率 Uti、O₂(¹Δ) 产率 Yield 及效率 η。其中, Uti = 1 - [Cl₂]_{out} / [Cl₂]_{in}, Yield = [O₂(¹Δ)]_{out} / ([O₂(¹Δ)]_{out} + [O₂(³Σ)]_{out}), η = Uti · Yield, [Cl₂]_{in}, [Cl₂]_{out} 分别表示入流与出流处 Cl₂ 的浓度, [O₂(¹Δ)]_{out} 和 [O₂(³Σ)]_{out} 分别表示出流处 O₂(¹Δ) 和 O₂(³Σ) 的浓度。表 1 结果如图 6 和图 7 所示, 其中图 6 为计算结果, 图 7 为实测结果, 可以看出, (1) 液滴速度在 7 m/s ~ 12 m/s 之间, 利用率的实测值与计算值很接近; 液滴速度为 14 m/s, 利用率的实测值约 0.98, 稍高于计算值。

(2) 产率的实测值与计算值较为接近, 效率的实测值在 0.8 ~ 0.82 之间, 计算值略低。

表 2 的结果如图 8 和图 9 所示, 二者分别为一维和二维计算结果, 图 8 中三个孤立点表示入流速度 10.5 m/s 条件下的实测结果。可以看出:

(1) 利用率、效率随气流速度增大而减小, 产率变化较小。

(2) 二维模型结果中的利用率、效率随气流速

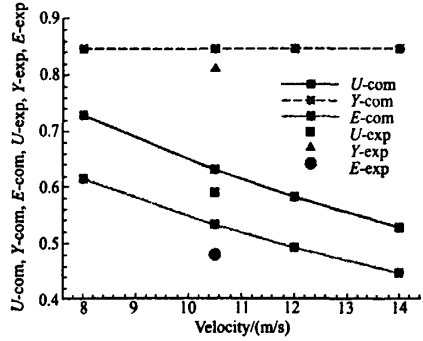


图 8 一维计算结果
Fig. 8 The 1D computational results

度的增大而减小的幅度, 较一维模型的小, 主要原因在于考虑了液滴表面氯气通量与气流速率的平方根成正比的因素。

(3) 在入流速度 10.5 m/s 的条件下, 二维计算结果与实测结果较为接近。

5 结论

从两相流体动力学的观点建立了氯气/BHP 液滴两相混合流动模型及气相运动方程, 用对流扩散方程组描述了混合气体内物质组分的浓度变化, 在层流边界层理论上建立了液滴表面物质通量模型。用 SIMPLE 方法对二维气相运动方程作了数值求解。所得结论如下。

(1) 新的液滴表面物质通量模型, 反映了通量随来流速度、气流密度及浓度等的变化关系, 其解析表达式便于与模型方程相联系, 改善了原有模型。

(2) 气流出口处 Cl₂ 气利用率接近于随气体入流速度的平方根而变化。

(3) 二维模型显示, 在靠近底部区域用平均流一维速度求物质分布是有效的。

(4) 在发生器气流出口处, 计算所得的氯气利用率、单态氧产率及效率与实测结果较为接近, 证实了所建模型及求解过程的有效性。

参考文献 (References):

[1] Thayer W J III, Cousins A K, Romea R D. Modeling of uniform droplet singlet oxygen generators [J]. SPIE Vol. 2117: 71-100.
[2] 薛社生, 刘全, 李守先, 等. 氯气/BHP 液滴一维化学流反应流动数值模拟 [J]. 计算物理, 2009, 26(2). (XUE She-sheng, LIU Quan, Li Shou-xian, et al. Numerical simulation of one dimensional flows with

- Cl₂/BHP drops chemistry-reaction[J]. *Chinese Journal of Computational Physics*, 2009, 26(2). (in Chinese)
- [3] Pai Shih-I. 二相流动[M]. 施宁光,等,译,北京:国防工业出版社,1985. (Pai Shih-I. *Two-phase Flows* [M]. Shi Ning-guang et al, Translated. Beijing, National Defense Press, 1985. (in Chinese))
- [4] деВИЧ ВГ. 物理化学流体力学[M]. 戴干策,等,译,上海:上海科学技术出版社,1965. (деВИЧ ВГ. *Physical-chemical Fluid Dynamics* [M]. Dai gan-ce, et al, Translated. Shanghai; Shanghai Science and Technology Press, 1965. (in Chinese))
- [5] 吴望一. 流体力学[M]. 北京:北京大学出版社,1983. (WU Wang-yi. *Fluid Dynamics* [M]. Beijing; Peking University Press, 1983. (in Chinese))
- [6] Patankar S V. 传热与流体流动的数值计算[M]. 张政,译,北京:科学出版社,1980. (Patankar S V. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow* [M]. Zhang zheng, Translated. Beijing; Science Press, 1980. (in Chinese))
- [7] Thayer W J III, Fisher C H. Comparison of predicted and measured output from a transverse flow uniform droplet singlet oxygen generator[J]. *AIAA*, 94-2454.

2D numerical computation of transverse gaseous flow into a falling drop-field

XUE She-sheng*, XU Ming, SHU Xiao-jian

(Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China)

Abstract: Numerical computation of Cl₂/He gases flow transverse traveling into falling BHP (basic hydrogen peroxide) drops field with chemical reaction was carried out. Modeled flow was a gas/drop two-phase flow, and gas-phase equation was established in which both of the mass source term, describing drops/chlorine reaction and the generation and release of singlet oxygen, and the momentum source term, describing the drag on gas flow from liquid drops, was considered. Because the gaseous momentum was small, the transverse offset of a falling liquid drop was less and its velocity was basically invariable, therefore an assumption could be made that the number density of droplets in the fluid field was uniform. An analysis formula of gaseous mass source term was obtained based on laminar boundary layer theory. This formula indicated the relation between the chlorine flux cross the surface of a liquid drop and the concentration of chlorine in hybrid gases, and the velocity of inflow gases. To solve the gaseous model equations, the SIMPLE scheme was used. Modeled results showed that, a vortex generated on the site near the top and the right boundary of the drop-filled region. The density of hybrid gases decreased in drop-filled region, and the chlorine utility, the singlet oxygen decreased with increasment of inflow velocity. These results agreed well with the experimental tests provided in relevant reference.

Key words: gas/drop two-phase flows; chemical reaction; SIMPLE scheme