

超重力旋转床中气液两相流动与传质过程的数值模拟

许明 张建文 沈志刚 陈建峰* 赵瑾

(北京化工大学教育部超重力工程研究中心,北京 100029)

摘要:文中采用基于颗粒轨道模型的欧拉-拉格朗日法对超重力旋转床中的气液两相流动与传质进行了数值模拟研究。在合理简化丝网填料结构和考虑液滴凝并与分散的基础上,分别利用 SIMPLE 算法和颗粒轨道模型计算了超重力旋转床中的气流场和液滴的运动轨迹,进而计算了液相的传质系数。数值模拟所得的液相传质系数与氮气解吸水中溶解氧实验结果符合良好,表明模型能够用于模拟旋转床中流体力学和分散相内的传质过程。计算分析表明,对超重力旋转床,在一定的转速下,液体和气体流量以及填料内径的变化对体积传质系数有重要影响。

关键词:超重力旋转床;数值模拟;多相流体流动与传质;颗粒轨道模型

中图分类号: TQ021

引言

超重力旋转床是近年发展起来的一种新型、高效的强化混合和传质的反应设备,目前已广泛应用于气-液沉淀反应制备纳米材料、化工反应和分离等方面^[1-2]。在超重力旋转床内的气液两相流其主要特点在于气液两相逆向接触,并在强大的离心力作用下,实现相间和相内的强烈混合与分散,使传质过程得到极大强化。

国内外学者对超重力旋转床进行了大量的实验研究^[3-8]。Burns 和 Ramshaw^[3]利用高速频闪摄影技术研究了旋转床填料中液体的流动形式,大致有“滴状流”、“孔道流”、“膜状流”三种基本形态。郭锴^[4]采用电视摄像的办法观测了旋转床中的液体流动,并测定了液体的停留时间。张军^[5]和竺洁松^[6]分别利用高速频闪摄影技术对旋转床内的液体流动进行了同步和非同步观察,发现在填料空间内大量的液体以液滴的形式存在。郭奋^[7]对旋转床中的液体流动和气相压降及传质特性进行了研究。李振虎^[8]对旋转床中逆流和并流操作两种情

况下的传质过程进行了研究。实验结果表明^[6-8],随着超重力旋转床转子转速的提高,传质和反应过程得到加强。分析超重力旋转床中的反应传质,必须对气液两相流体流动与传质有深入的认识。在前人的流体力学和传质模型中^[8-10],主要存在三个方面的问题:忽略了气相,而气相的存在对液体分散相的运动和凝并及分散有一定的影响;相比于实际的填料丝网的结构,模型中对于丝网的处理过于简化;没有考虑液滴的凝并和破碎。本文合理地简化了丝网的结构,并在考虑液滴凝并和破碎的前提下,采用欧拉-拉格朗日法对超重力旋转床内的气液两相运动进行了研究,在此基础上计算了液相的传质系数,并和实验结果进行比较讨论。

1 超重力旋转床中气液两相流和传质过程的数学模型

1.1 总体物理模型描述与模型假设

超重力旋转床的实验装置示意图如图 1 所示。气相由气体进口管 1 进入超重力旋转床外腔,在气体压力的作用下由转子外缘进入填料区 2,与液体逆流接触并进行传质后,由旋转床内腔经气体出口管 5 排空。液体由液体进口管进入转子内腔,经液体分布器 3 淋洒在填料内缘上。进入填料的液体被高速旋转的填料剧烈地微滴化后,同时分布在旋转丝网填料的表面及填料空间,并在离心力的作用下向外运动,从转子的外缘甩出,由机壳汇集后由液体

收稿日期: 2003-12-30

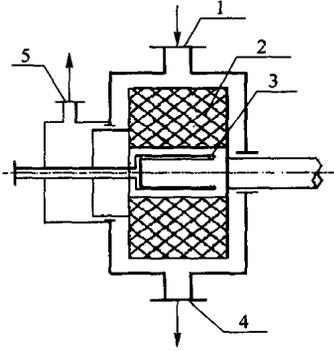
基金项目: 国家自然科学基金重点项目(20236020); 高等学校博士学科点专项科研基金(20010010004)

第一作者: 男, 1979 年生, 硕士生

*通讯联系人

E-mail: chenjf@mail.buct.edu.cn

出口管 4 排出。



1. 气体进口;2. 填料;3. 液体分布器;4. 液体出口;5. 气体出口
图 1 超重力旋转床装置示意图

Fig. 1 Diagram of rotating packed bed

根据实验观测,对气相,超重力旋转床内的气相流动基本上可视为不可压缩牛顿流体的拟稳态湍流流动,进一步假设气体流动沿旋转床的转动方向(周向)分布均匀,各物理量无梯度分布,从而表现为沿径向和轴向的轴对称流动的形式;对分散液滴相,只考虑气相对液滴相的曳力和离心力的作用,忽略重量、惯性力、虚假质量力、Basset 力、Saffman 力和 Magnus 力等的影响。在此基础上,可列出如下的气相运动方程和液滴相运动方程。

1.2 气相运动方程

在圆柱坐标系下,建立气相运动方程,其中采用标准 $k-\epsilon$ 模型考虑气相的湍流,其变量如表 1 所示。

表 1 控制方程中(2)中的变量和系数及源项的表达式
Table 1 General variables, coefficients and source terms of Equation (2)

通用变量 ϕ	扩散系数	源项 S
u	$\mu + \mu_t$	$-\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial u}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u}{\partial r} \right)$
v	$\mu + \mu_t$	$-\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v}{\partial r} \right) - \frac{2v}{r^2} + \frac{w^2}{r}$
w	$\mu + \mu_t$	$-\frac{w}{r^2} - \frac{vw}{r}$
k	$\mu + \frac{\mu_t}{k}$	$G - \mu + \frac{\mu_t}{k}$
		$-\frac{1}{k} (C_1 G - C_2)$

连续性方程

$$\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_j) = 0 \tag{1}$$

运动控制方程:

$$\frac{\partial(\rho u \phi)}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial(\rho v r \phi)}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \phi}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) + S \tag{2}$$

其中, $\mu_t = c_\mu \frac{k^2}{\epsilon}$ (3)

$$G = \mu_t \left\{ 2 \left[\left(\frac{\partial u}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{v}{r} \right)^2 \right] + \left(\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial w}{\partial r} - \frac{w}{r} \right)^2 \right\} \tag{4}$$

湍流模型中各常数采用 Launder^[11]推荐的值 $C_\mu = 0.09$, $C_1 = 1.44$, $C_2 = 1.92$, $k = 1.0$, $\epsilon = 1.3$ 。

1.3 液相运动方程

基于拉格朗日方法采用颗粒轨道模型计算液滴的运动轨迹。瞬时的单液滴运动方程在三个方向上的表达式分别为

$$\frac{d u_{z,r}}{d t} = \frac{18 \mu}{\rho_p d_p^2} C_D \frac{R e_{p,r}}{24} (u_{g,z} - u_{p,z}) \tag{5}$$

$$\frac{d u_r}{d t} = \frac{18 \mu}{\rho_p d_p^2} C_D \frac{R e_{p,r}}{24} (u_{g,r} - u_{p,r}) + \frac{u_p^2}{r} \tag{6}$$

$$\frac{d u}{d t} = \frac{18 \mu}{\rho_p d_p^2} C_D \frac{R e_{p,r}}{24} (u_{g,r} - u_{p,r}) - \frac{u_p r \omega_p}{r} \tag{7}$$

其中

$$R e_{p,r} = \frac{d_p u_{rel}}{\mu} \tag{8}$$

$$u_{rel} = [(u_{p,z} - u_{g,z})^2 + (u_{p,r} - u_{g,r})^2 + (u_{p,r} - u_{g,r})^2]^{1/2} \tag{9}$$

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{R e_p} (1 + 0.15 R e_p^{0.687}) & 1 < R e_p < 1000 \\ 0.44 & R e_p > 1000 \end{cases} \tag{10}$$

在求解出颗粒运动速度后,根据下式可以求解出颗粒轨道

$$\frac{d \mathbf{x}}{d t} = \mathbf{u} \tag{11}$$

1.4 液滴的凝并和分散

实验结果表明,高速旋转的丝网对液体有强烈的剪切微滴化作用。在此仅考虑丝网对液体的分散作用:即液滴如果撞击到丝网,则变为大小和速度均相同的两个液滴,并获得同丝网相同的周向速度。液滴脱离丝网后,在丝网填料空间内液滴发生类似于喷雾过程的凝并和分散过程,液滴直径的变化采用下面(12)公式^[12]计算

$$d_p = \frac{C_3}{u_{rel}} \left(\frac{\mu}{\rho} \right)^{\frac{1}{2}} + C_4 \left(\frac{\mu}{\sqrt{\rho \cdot p}} \right)^{0.45} \left(\frac{V_p}{V_d} \right)^{C_5} \quad (12)$$

其中, C_3, C_4, C_5 为模型参数, 由实验数据拟合得到。

1.5 简化的丝网填料结构

为便于后文的分析, 这里将丝网填料的几何结构简化为周向丝、沿轴向的横丝和沿径向的竖丝, 每层丝网由周向丝和横丝构成, 层与层之间由竖丝来连接。奇数层与奇数层(或偶数层与偶数层)具有相同的丝网结构, 而相邻的奇数层与偶数层的周向丝和横丝交错分布; 连接相邻两层丝网的竖丝与连接下面相邻两层的竖丝交错分布, 而连接奇数层 - 偶数层(或偶数层 - 奇数层)的层间竖丝具有相同的结构(见图 2)。

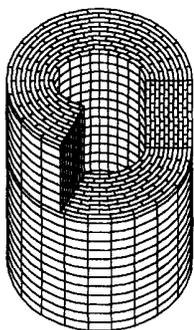


图 2 简化的丝网填料结构

Fig.2 Simplified diagram of net packing

1.6 旋转床中液滴的传质模型

忽略液滴的内部运动, 并假设液滴初始内部浓度均匀一致, 由此可以建立简化的液滴内部浓度随半径和时间变化的传质方程及相应的边界和初始条件

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{D_{AB}}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial c}{\partial r} \right) \quad \begin{cases} c = c_e & (r = r_p) \\ \frac{\partial c}{\partial r} = 0 & (r = 0) \\ c = c_0 & (t = 0) \end{cases} \quad (13)$$

无因次化后求解, 可以获得无量纲的浓度分布

$$c = c_0 - 2(-1)^k e^{-(k)^2 t} \sin(k r) / (k r) \quad (14)$$

其中 $c = \frac{c - c_e}{c_0 - c_e}; r = \frac{r}{r_p}; t = \frac{D_{AB} \cdot t}{r_p^2}$

进而得到液相传质的 Sherwood 数

$$Sh = \frac{K d_p}{2 D_{AB}} = \frac{1}{c} \frac{\partial c}{\partial r} \Big|_{r=1} = \frac{2}{3} \sum_{k=1} e^{-(k)^2 t} / k$$

$$(e^{-(k)^2 t} / k^2) \quad (15)$$

只要知道了液滴的直径和飞行时间就可以得到丝网空间内液相的传质系数 K 。根据液滴相运动方程可以获得液滴在丝网空间的停留时间, 进一步获得丝网空间内液相的平均体积传质系数。停留时间内液相的平均体积传质系数为

$$\frac{1}{KA/V} = \frac{\int_0^{t_{res}} KA/V dt}{t_{res}} \quad (16)$$

1.7 数值计算方法

气相控制方程采用控制容积法离散, 求解过程采用 SIMPLE 方法^[13], 扩散-对流项的处理采用幂函数方案。计算采用交错网格, 计算采用的网格数为 102 × 252(轴向 × 径向), 收敛条件为离散化守恒方程的残差小于 1×10^{-11} 。数值计算的边界条件为:

- 入口速度根据实验流量、入口处流通截面积确定;
- 出口截面各参数 $\frac{\partial \phi}{\partial x} = 0$, 压力给定;
- 轴线处, 径向速度 $v = 0$, 周向速度 $w = 0$, 其他变量 $\frac{\partial \phi}{\partial x} = 0$;
- 壁面为非滑移条件;
- 在靠近固体壁面的区域内, 层流底层的粘性作用增强而湍流扩散相对减弱, 采用壁面函数法处理。

液相运动方程采用 Runge-Kutta 法求解: 首先得到液滴在任意时刻的各速度分量, 在计算时间步长内积分即可以确定该时刻液滴的位置, 根据液滴的位置判断液滴是否与丝网碰撞, 然后计算液滴的瞬时传质系数。接着进行下一轮计算, 直至液滴撞击到旋转床外腔壁面, 计算结束。

2 数值计算结果及讨论分析

2.1 气体流场的模拟结果及讨论

模拟计算条件为: 液体流量, $4 \text{ m}^3/\text{h}$; 气体流量, $36 \text{ m}^3/\text{h}$; 填料内径, 400 mm ; 旋转床转速, $800 \text{ r}/\text{min}$ 。计算结果如图 3 ~ 6 所示。由数值计算得到的结果可以看出: (1) 在气体入口端处左右都存在卷吸导致的回流区域, 在此区域内气体对液滴有一定的推动作用, 使液滴甩向离开入口区的旋转床外壁面; (2) 在填料区, 由于填料旋转作用, 气体被加速具有较大的切向速度。在该区域液相主要受到气体切向摩擦

的作用;(3)轴线附近的区域径向速度和切向速度较小,气相的轴向速度成为主导。此时气体对液滴相产生夹带作用,对传质过程不利。

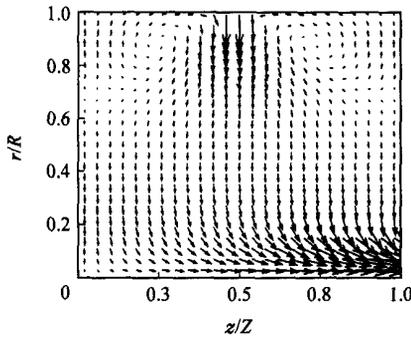


图 3 $r-z$ 平面上的速度矢量图

Fig. 3 Vector plot of u and v in $r-z$ plane

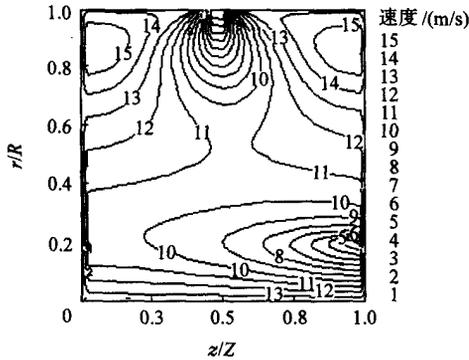


图 4 $r-z$ 平面上的径向速度的等值线图

Fig. 4 Contour plot of v in $r-z$ plane

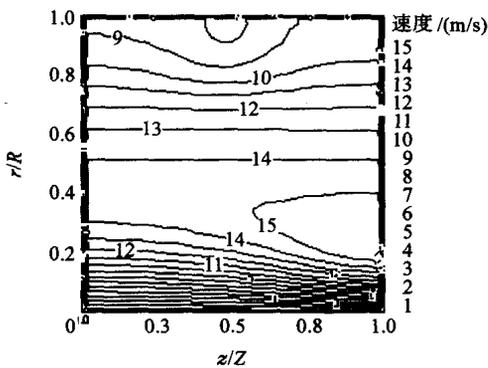


图 5 $r-z$ 平面上的周向速度的等值线图

Fig. 5 Contour plot of w in $r-z$ plane

2.2 液滴运动的模拟结果及讨论

液相传质过程主要在填料内进行,填料空间内液滴运动的轨迹的模拟结果如图 7 所示。数值计算结果与实验中观察到的现象一致,液体被丝网捕获后,获得与丝网一致的周向速度,被丝网甩出后,周向速度小于更大半径处的丝网的速度,所以液滴运

动相对于丝网存在滞后。在周向上与初始入射角度相比,运动轨迹沿旋转方向的反方向有一定角度的偏移。计算得到液滴经过 3~4 层丝网即被捕获更新,液滴直径的变化规律基本与实验结果一致:液滴直径随液体体积流量的增大而增大,随转子转速的增大而减小。

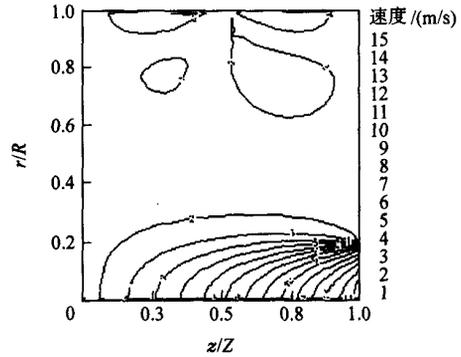


图 6 $r-z$ 平面上的轴向速度的等值线图

Fig. 6 Contour plot of u in $r-z$ plane

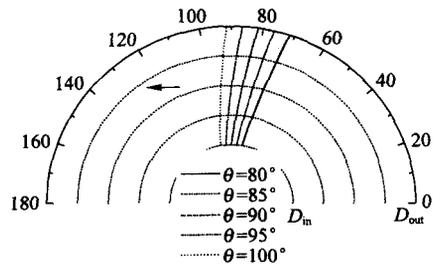


图 7 不同入射角度的液滴轨迹图

Fig. 7 Trajectory of droplet motion along $r-z$ plane at different incident angles

2.3 液相传质系数的模拟结果及讨论

利用本模型模拟了氮气解吸水中溶解氧的传质过程,数值模拟结果和实验结果的对比如图 8 和 9 所示。由模拟结果可以得到如下结论:(1)平均体积传质系数随气体流量的增大而增大,并随着液体流量的增大,气体流量的影响更为明显。这是由于随着液体流量增大,液滴的凝并频率增加,而气体流量的增大有利于液滴的分散。(2)平均体积传质系数随液体流量的增大而增大,丝网对液体的剪切破碎更加剧烈,相界面增大,强化了传质过程。(3)随着填料内径和液体流量的增大,填料内径对于提高平均体积传质系数的作用更加突出。这是因为随着填料内径的增大,填料内径处液体和丝网填料的相对速度增大,碰撞更加剧烈,剪切分散效果更好,传质面积增加,表面更新速率加快。随着液体流量的增

加,较大的填料内径对于填料剪切破碎液体的作用更为明显,对提高体积传质系数的影响增强。

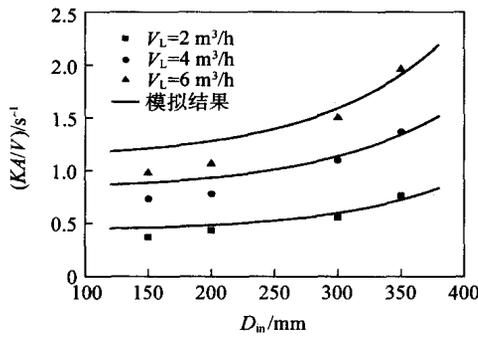


图 8 不同的填料内径下的体积传质系数
Fig. 8 Volumetric coefficient of mass transfer versus inner diameter

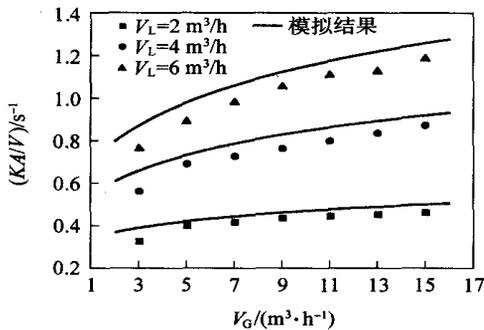


图 9 不同的气体流量下的体积传质系数
Fig. 9 Volumetric coefficient of mass transfer versus flow rate of gas

3 结论

(1) 本文提出了超重力旋转床中气-液两相流动和传质过程的数学模型,计算了气流场和液滴运动的轨迹,进而计算了平均体积传质系数,模拟结果和实验结果吻合较好。

(2) 模拟结果表明在超重力旋转床中,气相流动对液体有影响。由于液滴和填料的速度差,液滴的运动轨迹和入射时相比在周向上存在逆旋转方向的偏移。

(3) 在一定旋转床转速下,气体和液体流量以及填料内径的变化都对平均体积传质系数有着显著的影响。气体流量的增大有利于液滴的分散,增大相界面积,从而有利于提高平均体积传质系数;液体流量增加,丝网填料的破碎分散作用得到更好的体现,相界面积和传质推动力增大,平均体积传质系数增大;而填料内径的增大,使得液滴和丝网填料的相对

速度增大,碰撞概率和强度增大,分散效果增强,从而平均体积传质系数增大。

符号说明

- A —— 传质面积, m^2
- c —— 液滴内瞬时浓度, mol/m^3
- c_0 —— 液滴离开丝网表面时的浓度, mol/m^3
- c_e —— 液滴与周围气相平衡浓度, mol/m^3
- C_D —— 曳力因数
- D_{AB} —— 液体扩散系数, m^2/s
- d_p —— 液滴直径, m
- G —— 湍流动能产生率, Pa/s
- k —— 湍流动能, m^2/s^2
- K —— 传质系数, m/s
- p —— 压力, Pa
- r —— 径向坐标, m
- r_p —— 液滴半径, m
- R —— 径向长度, m
- Re —— 雷诺数
- S —— 方程的源项
- t —— 时间, s
- t_{res} —— 液体的停留时间, s
- u —— 轴向速度, m/s
- u_j —— j 方向的速度分量, m/s
- u_{rel} —— 相对速度, m/s
- v —— 径向速度, m/s
- V —— 填料体积, m^3
- V_G —— 气体体积流量, m^3/h
- V_L —— 液体体积流量, m^3/h
- w —— 周向速度, m/s
- x_j —— 坐标方向, m
- z —— 轴向坐标, m
- Z —— 轴向长度, m
- 希腊字母
- 湍流耗散率, m^2/s^3
- ρ —— 液体的密度, kg/m^3
- 气体的密度, kg/m^3
- μ —— 分子黏度, $Pa \cdot s$
- μ_t —— 湍流黏度, $Pa \cdot s$
- 表面张力, N/m
- 通用变量
- 扩散系数, $Pa \cdot s$
- 下角标:
- g —— 气相
- p —— 液滴相
- 周向

z ——轴向
 r ——径向

参 考 文 献

- [1] Chen J F, Wang Y H, Guo F, *et al.* Synthesis of nanoparticles with novel technology: High gravity reactive precipitation[J]. *Ind Eng Chem Res*, 2000, 39(4): 948 - 954
- [2] Chen J F, Shao L, Guo F, *et al.* Synthesis of nano-fibers of aluminum hydroxide in novel rotating packed bed reactor[J]. *Chem Eng Sci*, 2003, 58(3): 569 - 575
- [3] Burns J R, Ramshaw C. Process intensification: Visual study of liquid maldistribution in rotating packed beds [J]. *Chem Eng Sci*, 1996, 51(8): 1347 - 1352
- [4] Guo K, Guo F, Feng Y D, *et al.* Synchronous visual and RTD study on liquid flow in rotating packed bed contactor[J]. *Chem Eng Sci*, 2000, 55(9): 1699 - 1706
- [5] 张 军, 郭 锴, 郭 奋, 等. 旋转床内液体流动的实验研究[J]. *高校化学工程学报*, 2000, 14(4): 378 - 381
- [6] 竺洁松. 旋转床内液体微粒化对气液传质强化的作用[D]. [博士学位论文]. 北京: 北京化工大学, 1997
- [7] Guo F, Zheng C, Guo K, *et al.* Hydrodynamics and mass transfer in crossflow in rotating packed bed [J]. *Chem Eng Sci*, 1997, 52(21): 3853 - 3859
- [8] 李振虎. 旋转填充床的传质模型[D]. [博士学位论文]. 北京: 北京化工大学, 2000
- [9] 张 政, 张 军, 郑 冲. 旋转床填料空间液体的液相传质分析[J]. *工程热物理学报*, 1998, 1(19): 86 - 89
- [10] 竺洁松, 郭 锴, 冯元鼎, 等. 旋转床填料中的传质及其模型化[J]. *高校化学工程学报*, 1998, 3(12): 219 - 225
- [11] Launder B E, Spalding D B. The numerical computation of turbulent flows[J]. *Comput Meth Appl Mech Engng*, 1974, 3: 269 - 289
- [12] Long G E. Spraying theory and practice[J]. *Chemical Engineering*, 1978, 85(6): 73 - 77
- [13] 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, 1984

Numerical simulation of gas-liquid two-phase flow and mass transfer in a rotating packed bed

Xu Ming Zhang Jian-wen Shen Zhi-gang Chen Jian-feng Zhao Jin

(Research Center of the Ministry of Education for High Gravity Engineering and Technology,
 Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China)

Abstract: As a novel multiphase reactor, rotating packed bed (RPB) can greatly intensify the process of multiphase mass transfer. In this paper, a particle trajectory model attached in an Eulerian-Lagrangian method is used to numerically simulate gas-liquid two-phase flow in RPB. Based on appropriately simplifying construction of net packing and considering coalescence and breakage of liquid droplets, the flow field of the gas phase and the trajectory the liquid droplets in the rotating packed bed are simulated by the SIMPLE algorithm and the particle trajectory model respectively, upon which the mass transfer coefficient of the liquid phase is calculated. The simulated results are in fair agreement with the experimental data of desorption of O_2 dissolved in water with N_2 , which verifies the applicability of the present model in predicting the fluid flow and the mass transfer in the discrete phase. It is illustrated by the numerical simulation that the flow rates of liquid and gas as well as the inner diameter of the packing greatly influence the volumetric mass transfer coefficient at a specific rotational speed.

Key words: rotating packed bed; numerical simulation; fluid flow and mass transfer; particle trajectory model

(责任编辑 云志学)