

工业湍动流化床反应器内流体力学行为的模型化研究

于光认 陈晓春* 刘辉 刘时伟
(北京化工大学化学工程学院, 北京 100029)

摘要: 在前人关于自由鼓泡流化床中气泡特征计算的基础上, 考虑内构件对流化行为影响, 提出了“等效柱”的概念。结合过程模拟及最优化思路, 修正了前人得到的计算公式, 提出了可用于具有内构件工业湍动流化床的气泡尺寸和床层高度计算公式, 研究表明该模型是适宜的。

关键词: 内构件影响; 等效柱; 工业湍动流化床; 参数判识; 计算公式

中图分类号: TQ018

湍动流化床的研究最早始于 50 年代^[1], 前人对于自由鼓泡流化床的研究较多, 关于气泡尺寸的估算公式也有很多, 但几乎没有一个公式适用于各种工况^[2-3]。在众多的计算公式中, 由秦霖光等提出的公式具有较好的准确度^[3], 可以应用于自由鼓泡流化床中气泡长大以及床高的计算。前人对于湍动流化床性能及气泡特征的研究较少, 至今未见有关具有内构件的工业湍动流化床中气泡计算的报道。

本文拟研究的反应器结构如图 1 所示, 由于内

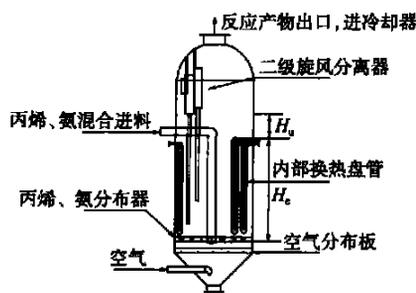


图 1 空气氨氧化合成丙烯腈反应器的结构示意图
Fig. 1 Structure of the reactor used for AN synthesis from propene, ammonia and air

部构件的引入, 影响了流动状态, 同时也影响了气泡的行为。在这种状态下, 计算自由鼓泡流化床中气泡大小的公式已不适用, 也无适宜的公式可以用于此种情况下气泡尺寸的计算^[4]。本文基于对具有内构件流化床的认识和参数调优的思想, 结合丙

烯腈合成工业流化床反应器的实际工况, 对有内构件湍动流化床内的流体力学行为进行模型化研究。

1 自由鼓泡流化床中气泡大小的计算

秦霖光等^[3]从气泡长大的机理出发, 得到了关于初始气泡大小和气泡长大的计算公式, 并利用前人实验研究的结果判识了计算公式中的两个待定参数, 最后得出

$$D_b = 1.28 \frac{(U_0 - U_{mf})^{0.6}}{g^{0.3}} \left[h + \frac{1.5 g^{1/7}}{(U_0 - U_{mf})^{2/7}} \left(\frac{A}{N_0} \right)^{4/7} \right]^{0.7} \quad (1a)$$

令 $B = \frac{1.5 g^{1/7}}{(U_0 - U_{mf})^{2/7}} \left(\frac{A}{N_0} \right)^{4/7}$, 则(1a)式分别变成

$$D_b = 1.28 \frac{(U_0 - U_{mf})^{0.6}}{g^{0.3}} [h + B]^{0.7} \quad (1)$$

$$D_{b0} = 1.7 \left[\frac{(U_0 - U_{mf})}{g^{1/2}} \frac{A}{N_0} \right]^{2/5} \quad (2)$$

秦霖光等采用多组实验结果利用实验数据图表, 把公式(1)与前人提出的计算公式^[2]进行了比较。结果表明: 在这些计算公式中, 其中一些是式(1)在特定条件下的表达形式, 而另一些公式的常数项或者参数的指数项不太准确。经过详细研究, 在应用式(1)的基础上得到了自由鼓泡流化床中床高^[3]及气泡平均直径的计算公式^[5]

$$H_0 = H - 1.92 \frac{(U_0 - U_{mf})^{0.7}}{g^{0.35}} [(H + B)^{0.65} - B^{0.65}] \quad (3)$$

$$\bar{D}_b = 0.752 \frac{(U_0 - U_{mf})^{0.6}}{g^{0.3} H} [(H + B)^{1.7} - B^{1.7}] \quad (4)$$

收稿日期: 2004-02-09

第一作者: 男, 1978 年生, 硕士生

*通讯联系人

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

2 气泡大小计算公式的修正思路和改进公式的提出

湍动流化床的流化状态不同于鼓泡流化床,加上湍动床中内构件的影响,使得气泡的长大、合并与破裂行为已经与自由床有很大的不同。具体表现在以下方面: 在湍动流化床内,气泡较均匀,直径较小,气泡长大较慢。流化床内垂直换热管束的存在进一步改善了流化质量,抑制了气泡长大,起到破坏气泡的作用,内部构件使得气泡的聚并频率降低,而且,随着床高的增加,在有内部垂直构件的流化床中,气泡频率降低的趋势比自由床低,因此,气泡的长大速率也低,最终导致气泡大小在整个床层内的分布更加均一,且直径更小^[4,6]。垂直管束的存在,等效柱将大流化床分成了若干个小流化床^[5],由此本文提出了等效柱的概念。即在径向上,假设床层是多个等效柱(自由流化床)的并联,采用当量直径的方法使得气泡在每个等效柱中的行为与在全塔有内构件限制时的行为相同。在前人提出的众多计算公式中,尽管存在参数项、常数项和指数项的差别,但基本上都统一于 $D_b = f\left((U_0 - U_{mf}), h, \frac{A}{N_0}\right)$ 。经过对前人研究结果的总结,秦霁光证明了自己提出的计算公式具有很强的实用价值。所以本文在处理具有内构件的湍动流化床时,在形式上仍然采用秦霁光提出的公式。

Kunni 指出,在安装有适当内部构件的工业流化床中,除去很小的入口区域以外,整个床层的气泡尺寸可以近似的取为常数,内构件的影响存在简单的放大效应。

基于 ~ 的分析,在处理本文涉及的有内构件的湍动流化床时,将内构件对于床体内流动状况的影响,视为将整个流化床区域分成一个个小的自由流化床(等效柱),每个等效柱的行为与整个床体的行为一致,内构件对于气泡大小的影响等价于最简单的线性关系,基于这种分析,在公式(1)的基础上增加一个参数 t_c 来体现内构件的影响规律,之后式(1)变成式(5)

$$D_b = 1.28 t_c \frac{(U_0 - U_{mf})^{0.6}}{g^{0.3}} [h + B]^{0.7} \quad (5)$$

在 $h = 0$ 时,式(5)变成初始气泡的计算公式

$$D_{b0} = 1.7 t_c \left[\frac{(U_0 - U_{mf})}{g^{1/2}} \frac{A}{N_0} \right]^{2/5} \quad (6)$$

沿床高气泡直径的积分平均值为

$$\bar{D}_b = \frac{\int_0^H D_b dh}{\int_0^H dh} \quad (7)$$

把式(5)代入(7)积分计算得

$$\bar{D}_b = 0.7529 t_c \frac{(U_0 - U_{mf})^{0.6}}{g^{0.3} H} [(H + B)^{1.7} - B^{1.7}] \quad (8)$$

在文献[3]中曾经指出

$$H - H_0 = \int_0^H \frac{U_0 - U_{mf}}{U_b} dh \quad (9)$$

$$\text{由于 } U_b = 0.711 \sqrt{g D_b} \quad (10)$$

把式(5)代入式(10),再代入式(9)积分得到

$$H_0 = H - \frac{1.9125}{t_c^{0.5}} \frac{(U_0 - U_{mf})^{0.7}}{g^{0.35}} [(H + B)^{0.65} - B^{0.65}] \quad (11)$$

根据式(6)和(8)可以得到初始气泡直径与平均直径的关系

$$\bar{D}_b = 0.7529 t_c \frac{(U_0 - U_{mf})^{0.6}}{g^{0.3} H} [(H + F)^{1.7} - F^{1.7}] \quad (12)$$

$$\text{式中, } F = \left(\frac{D_{b0}}{1.7 t_c} \right)^{10} \times \frac{1.5 g^{3/7}}{(U_0 - U_{mf})^{6/7}}$$

3 模型参数的判识

3.1 流化床高度的计算

流化床层高度的计算是在以下两点假设下进行的: 床层中气体和颗粒的流动满足晕相流动模型的基本假设^[5]。把整个密相床体分成两部分,换热器以下为多个等效柱的并联,等效柱内气泡的平均直径按式(8)求取;换热器以上为自由膨胀床,其初始气泡直径等于换热器以下气泡的平均直径,气泡存在自由长大过程。计算换热器以上的密相区域的高度和相应的中间参数时,按式(12)求取气泡的平均直径来作为换热器以上密相中气泡的直径。

换热器以下催化剂藏量 W_{1cat} 的计算^[5]

$$W_{1cat} = H_c A_l \frac{A_{El}}{A_l} \times (1 - E_{mf})_p + H_c A_l \frac{A_{Cl} V_{Cl} - V_{Bl}}{V_{Cl}} \times (1 - E_{mf})_p$$

$$\text{其中, } \frac{A_{El}}{A_l} = \frac{U_{Cl} - U_{Ol}}{U_{Cl}}, \frac{A_{Cl}}{A_l} = \frac{U_{Ol}}{U_{Cl}}, \frac{V_{Cl} - V_{Bl}}{V_{Cl}} =$$

$$\frac{1.17}{1 + 0.17}$$

所以, $W_{1cat} = H_e A_l$

$$\left[\frac{U_{Cl} - U_{0l}}{U_{Cl}} + \frac{U_{0l}}{U_{Cl}} \times \frac{1.17}{1 + 0.17} \right] \times (1 - E_{mf})_p \quad (13)$$

换热器以上密相段催化剂藏量 W_{2cat} 和高度 H_u 的计算

由于换热器以上床层的有效截面积与换热器以下不同, 气泡存在自由长大过程, 所以与气泡直径和有效截面积有关的所有参数都发生变化, 相关的变量以下标 u 标示。

$$W_{2cat} = W_{cat} - W_{1cat} \quad (14)$$

根据式(13)有

$$H_u = W_{2cat} / A_u$$

$$\left[\frac{U_{Cu} - U_{0u}}{U_{Cu}} + \frac{U_{0u}}{U_{Cu}} \times \frac{1.17}{1 + 0.17} \right] \times (1 - E_{mf})_p \quad (15)$$

床层总高度等于换热器上下两段密相床的高度之和, 即, $H = H_e + H_u$ (16)

相应参数的计算

(1) 多组分的黏度、密度和扩散系数的计算采用文献[7]中报道的方法。

(2) 气体的表观速度 U_0 的计算 $U_0 = \frac{V_0}{A}$ (17)

(3) 起始流化速度 U_{mf} 的计算^[8]

$$U_{mf} = \frac{\left\{ \left[(33.7)^2 + 0.0408 \times \frac{d_p^3 \rho_p (1 - \rho_p) g}{\mu_g^2} \right]^{0.5} - 33.7 \right\} \mu_g}{d_p \rho_p} \quad (18)$$

(4) 固定高度 H_0

$$H_0 = \frac{W_{cat}}{A \times \rho_0} \quad (19)$$

(5) 气泡速度 U_b 、特性数 N_0 、表观气泡云速度 U_c 的计算^[5], $U_b = 0.711 (g \bar{D}_b)^{1/2}$ (20)

$$= E_{mf} U_b / U_{mf} \quad (21)$$

$$U_c = U_b \left(\frac{-1 + 1.17 E_{mf}}{+0.17} \right) \quad (22)$$

3.2 参数辨识

床高 H 的计算过程见图 2, 可以根据给定的 t_c 计算出床高 H_{jm} 即 $H_{jm} = f(t_c)$ 。为了辨识 t_c 大小, 随机采用 50 组工业数据参与 t_c 的计算, 并将目标函数选为 $J(t_c) = \sum_{m=1}^{50} \left(\frac{H_{jm} - H_{am}}{H_{am}} \right)^2$

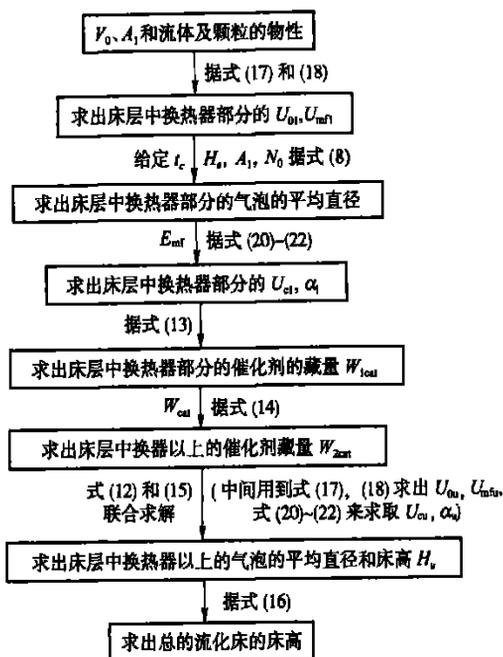


图 2 调整参数计算流化床高度的框图

Fig. 2 Calculating scheme for fluidized bed height H from adjustable parameter t_c

这是单变量函数的最优化问题, 采用黄金分割法^[9]。选取迭代过程收敛的精度为: 函数值相对误差, $\left| \frac{J(t_{c1}^{(k)}) - J(t_{c2}^{(k)})}{J(t_{c1}^{(k)})} \right| = 1 \quad 0.00001$, 参数 t_c 的相对误差, $\left| \frac{t_{c1}^{(k)} - t_{c2}^{(k)}}{t_{c1}^{(k)}} \right| = 2 \quad 0.00001$ 。通过随机选取某一操作负荷下的一组数据, 得到 t_c 的初始值为 0.3201, 所以为了满足黄金分割法的要求, 设定 t_c 的取值范围为 $[0.01, 1.0]$, 即: $a_0 = 0.01, b_0 = 1.0$ 。用 50 组不同工况下的工业数据辨识了 t_c 的大小, 最后求得 $t_c = 0.3721$ 。

把 t_c 值代入式(5), (6)和(11), 最终得到

$$D_b = 0.4763 \frac{(U_0 - U_{mf})^{0.6}}{g^{0.3}} [h + B]^{0.7} \quad (23)$$

$$D_{b0} = 0.6326 \left[\frac{(U_0 - U_{mf})}{g^{1/2}} \frac{A}{N_0} \right]^{2/5} \quad (24)$$

$$H_0 = H - 3.1352 \frac{(U_0 - U_{mf})^{0.7}}{g^{0.35}} [(H + B)0.65 - b^{0.65}] \quad (25)$$

4 模型计算结果与工业数据的比较

取齐鲁石化丙烯腈厂不同生产负荷下的一组数据, 用以检验气泡计算公式的预测能力, 结果见表 1。

表 1 床层高度的计算值与实验值的比较

Table 1 Contrast of the bed heights for the simulated results and the industrial data

投料负荷/ %	丙烯流量/ ($\text{nm}^3 \cdot \text{h}^{-1}$)	氨流量/ ($\text{nm}^3 \cdot \text{h}^{-1}$)	空气流量/ ($\text{nm}^3 \cdot \text{h}^{-1}$)	反应压力/ MPa	操作线速/ ($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$)	催化剂载量/ kg	床层高度/ m	计算高度/ m	相对误差/ %
80	2 360	2 714	22 421	0.055	0.629	55 000	5.9	5.698	3.42
85	2 508	2 884	23 822	0.055	0.668	59 000	6.2	6.224	0.387
90	2 655	3 053	25 224	0.06	0.686	62 000	6.6	6.601	0.015
100	2 950	3 393	28 026	0.065	0.739	69 000	7.3	7.398	1.342
105	3 098	3 562	29 428	0.07	0.754	73 000	7.7	7.635	0.844

从表 1 中的数据可见,通过计算气泡大小计算湍动流化床床层高度,其相对误差最大 3.42%,结果表明,本文经过修正得到的气泡尺寸计算公式和床层高度的计算公式是适宜的,能够用于计算带内构件的工业湍动流化床中气泡尺寸和床高计算。

5 结论

从内构件对于工业湍动流化床中气固流动和气泡行为的影响出发,提出了等效柱的概念,在此基础上,假定内构件对气泡尺寸的影响存在简单的线性关系,引入参数 t_c 来表征内构件对气泡尺寸的影响,得到了适用于有内构件存在的工业湍动流化床中气泡尺寸和床层高度的计算公式,经过用 50 组工业数据进行参数判识,最终得到 $t_c = 0.3721$ 。经过与工业湍动流化床生产数据的比较可以得出,本文提出的模型(23)~(25)对于工业湍动流化床的描述是准确的。尽管本文提出的模型能够比较准确地描述工业湍动流化床的流体力学行为,但这种处理方法仍然是比较粗糙的,关于内构件对流体力学行为的影响机理及其更加精细化的研究有待进一步开展。

符号说明

A ——反应器有效截面积, m^2
 A_E ——乳相所占的有效床层截面积, m^2
 A_C ——晕相所占的有效床层截面积, m^2
 d_p ——催化剂颗粒的直径, m
 E_{mf} ——起始流化床的空隙率
 g ——重力加速度 $9.8, \text{m}/\text{s}^2$
 N_0 ——分布器的开孔数, 无因次
 V_0 ——反应器内气体的体积流量, m^3/s
 V_C ——气泡晕的体积, m^3
 V_B ——气泡的体积, m^3

希腊字母

ρ ——催化剂真密度, kg/m^3

ρ_0 ——催化剂松装密度, kg/m^3

ρ_g ——气体密度, kg/m^3

μ_g ——气体粘度, $\text{Pa} \cdot \text{s}$

下标

a ——实际值

j ——计算值

u ——换热器顶部以上的密相段

l ——换热器以下的密相段

m ——第 m 组数据

参 考 文 献

- [1] Morse R D, Ballou C O. The uniformity of fluidization—its measurement and use [J]. Chemical Engineering Progress, 1951, 47(4): 199 - 204
- [2] Bi H T, Ellis N, Abba I A, et al. A State-of-the-art review of gas-solid turbulent fluidization [J]. Chemical Engineering Science, 2000, 55: 4789 - 4825
- [3] 秦霖光. 流化床中气泡的汇合长大和床层膨胀 [J]. 化工学报, 1980, 31(1): 83 - 94
- [4] 陈甘棠, 王樟茂. 多相流反应工程 [M]. 杭州: 浙江大学出版社, 1996
- [5] 秦霖光, 王光洁. 鼓泡流化床反应器的数学模型——晕相流动模型 [J]. 中国科学, 1983(4): 300 - 308
- [6] 王樟茂, 张英年. 垂直管束对流化床内传递特性的影响 [J]. 化工机械, 1983(2): 17
- [7] 时均, 汪家鼎, 余国琮, 等. 化学工程手册 [M]. 第二版. 北京: 化学工业出版社, 1996
- [8] Wen C Y, Yu Y H. A generalized method for predicting the minimum fluidization velocity [J]. AIChEJ, 1966, 12(3): 610 - 612
- [9] 邓正龙. 化工中的优化方法 [M]. 北京: 化学工业出版社, 1992

Fluid dynamic simulation of a turbulent fluidized bed reactor

Yu Guang-ren Chen Xiao-chun Liu Hui Liu Shi-wei

(College of Chemical Engineering, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China)

Abstract: Based on the equation for estimation of bubble sizes in a freedom bubbling fluidized bed studied by former researchers, the influence of vertical inner structures of the bed on the bubble sizes was taken into account and a concept of "equivalent column" was proposed. Using the method of process simulation and optimization, the equation was modified and then a set of new equations was given to describe the performance of the turbulent fluidized bed used in industry. The results show that these equations are suitable.

Key words: influence of inner structures; equivalent column; industrial turbulent fluidized bed; parameter identification; calculating equations

(责任编辑 云志学)

(上接第 27 页)

- [4] 周国忠,王英琛,施力田. 用 CFD 研究搅拌槽内的混合过程[J]. 化工学报, 2003, 54:886 - 890
- [5] 牛国瑞. 搅拌槽内的流体流动与混合特性及对苯二甲酸在水中的溶解度[D]. [学位论文]. 北京:北京化工大学,2003
- [6] Ranade V V, Perrard M, Sauze N L, *et al.* Trailing vortices of rushton turbine: PIV measurements and CFD simulations with snapshot approach[J]. Trans IChemE, 2001, 79A: 3 - 12
- [7] Oshinowo L, Jaworski Z, Dyster K N, *et al.* Predicting the tangential velocity field in stirred tanks using the multiple reference frames (MRF) model with validation by LDA measurements[C]. Proceedings of 10th Europe Conference on Mixing. Delft: ELSEVIER Amsterdam, 2000, 281 - 288
- [8] Sommerfeld M, Decker S. State of the art and future trends in CFD simulation of stirred vessels[C]. Proceedings of 11th Europe Conference on Mixing. Bamberg: VDF GVC, 2003, 1 - 20

Numerical simulation of mixing process in a stirred tank with rushton turbine

Zhang Guo-juan Min Jian Gao Zheng-ming Niu Guo-rui Shi Li-tian

(College of Chemical Engineering, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China)

Abstract: Mechanically agitated reactors are widely used in many industrial processes and the mixing time is one of the key parameters to the reactor design. The mixing process in a stirred tank of 0.476 m diameter with six-blade Rushton turbine (DT-6) was numerically simulated by using computational fluid dynamics (CFD) package FLUENT 6.0. The multi-reference frame (MRF) and standard k -turbulent model were used in the simulation. The mixing time predicted by CFD is in good agreement with the experimental data. The effects of tracer feeding and detecting positions on mixing time were investigated. The mixing process is dominated by the flow field in the stirred tank. The results are of importance to the optimum of industry stirred reactors.

Key words: mixing time; computational fluid dynamics (CFD); numerical simulation; stirred tank; rushton turbine

(责任编辑 云志学)