

颗粒绕流问题中几何形体效应的数值模拟

高继贤 刘 辉* 李成岳 杨立英

(北京化工大学可控化学反应科学与技术基础教育部重点实验室, 北京 100029)

摘 要: 运用计算流体力学(CFD)模拟方法, 针对球体、正六棱柱、正四面体、圆柱体和环轮体等不同几何形体颗粒, 在雷诺数为 10~400 条件下研究了颗粒绕流问题中的几何形体效应。基于模拟结果, 考察了传统非球形颗粒几何表征方法的不足; 据此定义一个新的表征形体效应的参数, 并在大量模拟计算结果的基础上, 关联出以上四种非球形颗粒曳力因数计算公式, 改进后的曳力因数计算精度大大提高。

关键词: CFD 模拟; 颗粒; 曳力因数; 两相流

中图分类号: TQ021.1

颗粒绕流问题是流体力学的传统课题。早期的研究囿于当时计算条件的限制, 往往只能获取近似解析解, 如球体绕流的 Stokes 解及其 Ossen 修正等^[1]。随着计算流体力学工具的广泛应用, 使复杂几何形体绕流问题的数值求解成为可能, 这大大增进了人们对于绕流问题的认识^[2]。另一方面, 颗粒绕流问题也是许多工程应用中的基础课题, 如在化学工程中的吸附床、催化反应器以及流化床中的流固相对运动等。这一问题的重要性在于, 对床层中流动状况的解析, 往往是认识设备内传质、传热和反应性能的基础。

近 10 年来, 在催化反应技术领域, 各种几何形状的颗粒状新型催化剂被不断开发出来。在工程设计中, 作为一种普遍采用的近似或等效方法, 大都采用等体积相当直径和等面积相当直径来处理各种异形(非球形)颗粒填充床内的流动问题^[3~4]。对这类异形颗粒填充床流动以及压降的实验测定和计算表明^[5], 用前述等体积或等面积相当直径近似处理在床层传递参数计算时将导致过大的偏差, 不能满足工程设计的要求。有研究者指出^[4], 需要对表征异形颗粒的近似或等效处理方法加以重新审视。

本文旨在从基础研究的角度, 针对工程中常见

的 5 种不同形体的颗粒, 采用数值模拟方法, 考察单颗粒绕流的影响因素及传统等效方法的精度, 寻求更恰当表征不同形体颗粒几何特性的参数, 提出异形颗粒曳力系数的计算方法。

1 绕流问题的界定和数学模型

1.1 模拟对象

参照相关文献^[5~6], 针对 5 种有代表性的催化剂颗粒形状, 包括球形、圆柱形、正四面体形、正六棱柱和环轮体进行了模拟。

粒径是表征颗粒的重要几何参数。对非球形粒子, 比较常用的有等体积有效直径和等面积有效直径, 统称为相当直径^[3]。前者是将非球形颗粒粒径定义为具有相同体积的球粒子的直径, 设粒子的体积为 V_p , 则体积相当直径 d_v 为

$$d_v = (6 V_p / \pi)^{1/3} \quad (1)$$

若以外表面积 a_p 相同的球形粒子的直径来作为代表, 称作面积相当直径 d_a

$$d_a = \sqrt{a_p / \pi} \quad (2)$$

基于相当直径计算方法, 以球形为标准, 分别计算了本文模拟的与之等体积和等面积的其它四种异形几何体的几何参数, 结果如表 1。

取空气为绕流流体, 温度 $T = 293 \text{ K}$, 流体密度为 $\rho = 1.293 \text{ kg/m}^3$, 黏度为 $\mu = 1.79 \times 10^{-5} \text{ Pa} \cdot \text{s}$ 。

原则上, 研究单颗粒绕流问题的流场为无界流场。计算中为逼近无界流场条件, 消除端效应, 取模拟计算区域(流场)为圆管状, 颗粒位于流场上游 $1/3$ 处。数值实验表明, 当圆管直径 d 大于 $10 d_p = 0.06 \text{ m}$, 管长 $l = 50 d_p = 0.3 \text{ m}$ 时, 可近似忽略计算

收稿日期: 2003-05-13

基金项目: 国家自然科学基金重点项目(20136010); 中国石油化工股份有限公司科学技术研究开发项目资助(X502019)

第一作者: 男, 1978 年生, 硕士生

*通讯联系人

E-mail: gaojixian2002.student@sina.com

表 1 颗粒的几何参数

Table 1 Geometrical parameters of particles

$\times 10^{-3} / \text{m}$

几何体	d_p	d_a	a_v	a_a	d_v	h_v	d_a	h_a	b_v	H_v	b_a	H_a	r_v	R_v	r_a	R_d
球	6	6														
正四面体		9.863 7	8.080 6													
圆柱				4.160 2	8.320 4	3.794 7	7.589 4									
正六棱柱								4.160 2	8.320 4	3.794 7	7.589 4					
环轮体													1.046 4	5.232	0.756 9	3.784 7

区域大小对计算结果的影响。

1.2 数学模型

由于流道为圆管,满足轴对称条件,所以控制方程可写为如下形式。

连续性方程

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rv_r) + \frac{\partial}{\partial z} (v_z) = 0 \quad (3)$$

动量方程

$$\left[v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} + v_z \frac{\partial v_r}{\partial z} \right] + \frac{\partial p}{\partial r} - \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r\mu_{\text{eff}} \left(2 \frac{\partial v_r}{\partial r} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{v}) \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu_{\text{eff}} \left(\frac{\partial v_z}{\partial r} + \frac{\partial v_r}{\partial z} \right) \right] \right\} = 0 \quad (4)$$

$$\left[v_r \frac{\partial v_z}{\partial r} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right] + \frac{\partial p}{\partial z} - \left\{ \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu_{\text{eff}} \left(2 \frac{\partial v_z}{\partial z} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{v}) \right) \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r\mu_{\text{eff}} \left(\frac{\partial v_z}{\partial r} + \frac{\partial v_r}{\partial z} \right) \right] \right\} = 0 \quad (5)$$

对应式(5)的边界条件为

进口条件 $u = \frac{\mu Re}{d_p}$;

出口条件 $p = 101\,325 \text{ Pa}$;

固体壁面 无滑移边界;

计算域周界上 $\mu = \frac{d\mu}{dr} = 0$;

湍流模型采用标准 $k-\varepsilon$ 两方程模型^[7];

对壁面附近区域,采用壁面函数法处理^[7]。

1.3 数值求解方法

采用商用软件 CFX4.3 求解模型微分方程组。采用贴体坐标、局部加密网格、“有限体积法”离散微分方程,采用全隐式多方程耦合求解线性方程组。

2 模拟结果和讨论

2.1 计算方法的验证

对球形颗粒绕流问题,在小 Re 下的曳力因数已有解析解,在较高 Re 下也有公认的表达式。将由此得到的球形粒子曳力因数 (C_D) 对 Reynolds 数

作图构成“标准曳力因数曲线”^[8],可用以检验本文计算方法的有效性和精度。图 1 是利用本文模型对球形颗粒曳力因数数值模拟值和标准曳力因数曲线的比较。从图 1 可以看出,数值计算所得到的球形曳力因数与标准值的吻合程度与雷诺数的大小有关。 $Re \leq 50$ 时,两者数值相差较大; $Re > 50$ 时两者已经吻合。这表明本文的处理方法可以模拟实际的绕流问题。

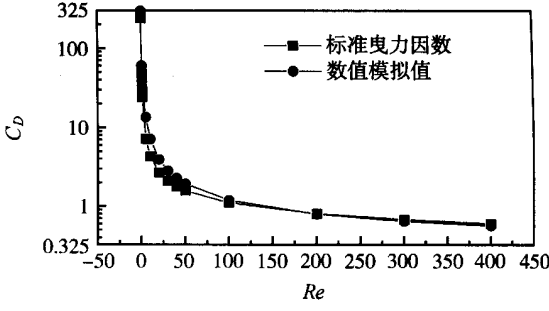


图 1 球形颗粒曳力因数标准值与数值模拟结果的比较

Fig. 1 Comparison between standard drag coefficient values and numerical simulation results for a spherical particle

2.2 对传统方法的考察

2.2.1 体积相当直径法 图 2 是按照本文数值模拟方法对球形颗粒的曳力因数和与之具有相等体积的非球形颗粒曳力因数模拟结果的比较,为了对照,同时还标明了标准曳力因数曲线。由图 2 可以看出,正四面体、圆柱体、正六棱柱和圆环体四种几何形体颗粒的曳力因数曲线与标准曳力因数曲线、球形颗粒模拟曳力因数曲线均有较大的偏离,相对偏差如表 2 所示。由表可见,对绝大多数情形,按体积相当直径法所得模拟值与计及形状特征的模拟值的相对偏差在 100 % 以上。这说明传统的相当直径方法即使对单颗粒绕流情形也存在很大偏差。这个结论或许可对下述问题的解决提供线索:近年来,多数研究者仍采用体积相当直径法处理填充床的流动问

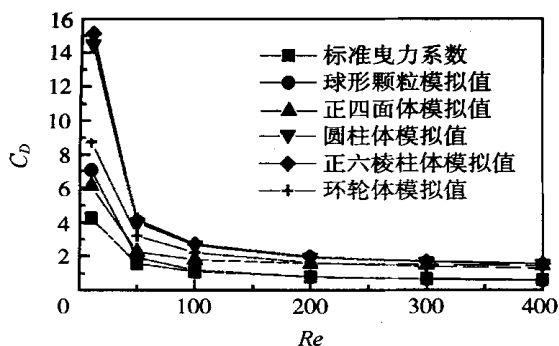


图2 不同几何形状颗粒的曳力因数与等体积球曳力因数的比较

Fig.2 Comparison of simulated drag coefficient values between non-spherical particles and their equivalent volume spheres

表2 非球形颗粒曳力因数模拟值与体积相当球形颗粒模拟值的相对偏差

Table 2 Relative differences of simulated drag coefficient values between non-spherical particles and their equivalent volume spheres

Re	相对偏差/ %			
	正四面体	圆柱体	正六棱柱	环轮体
10	44.35	240.45	255.68	105.81
50	43.90	154.94	165.03	104.07
100	63.16	139.47	147.33	101.49
200	95.02	139.56	145.51	101.69
300	119.85	146.61	151.68	106.36
400	140.34	154.55	158.82	112.19

题,如在 Ergun 方程中使用体积相当直径^[4,9],但发现压降预测的误差很大。从上述模拟结果可以推断,相当直径选取不当可能会是一个原因。本文将在后面的讨论中对非球形颗粒定义新的特征几何参数,以试图降低体积相当直径法的误差。

2.2.2 面积相当直径法 图3是各种不同几何形状颗粒曳力因数的模拟值与等面积球曳力因数模拟值的比较。由图3可以看出,异形颗粒的曳力因数与球形颗粒的曳力因数和标准曳力系数均有较大的偏差。相对偏差在100%~300%之间,比采用等体积球模拟值的偏差大得多,这或许是多数研究者采用体积相当直径而不是面积相当直径处理填充床流动问题的原因。

2.3 考虑几何形状的曳力因数计算公式

综上所述可以看出,用传统的相当直径方法求得的曳力因数与实际值间误差较大。在颗粒尺度上尚

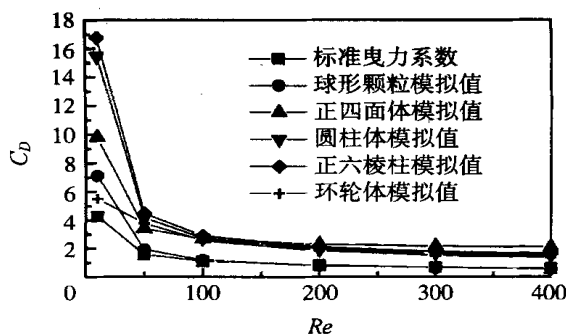


图3 不同几何形状颗粒曳力因数与等面积球曳力因数模拟值的比较

Fig.3 Comparison of simulated drag coefficient values between non-spherical particles and their equivalent area spheres

且如此,当放大到床层尺度时,将导致床层压降的计算值与实际值之间更大的偏差。为了提高计算精度,这里考虑关联新的曳力因数计算公式。曳力因数(C_D)的定义式如下^[8]

$$C_D = \frac{2 F_D}{u_0^2 A} \quad (6)$$

式中: F_D 为流体对物体所施加的总曳力,N; A 是与流向垂直方向上的投影面积, m^2 ; u_0 为远场流速, m/s 。分析可知,在绕流问题中,摩擦曳力与流固接触面积成正比,而不同几何形体的构形(如棱角)对形体曳力的影响最大。为计及这种形体效应,这里定义一个新的几何参数

$$= \frac{A(\text{投,非球形})}{A(\text{投,球形})} \quad (7)$$

式中: $A_{\text{投}}$ 为颗粒迎流的投影面积, m^2 ;下标球形意指传统的等体积球形颗粒。对于上面提到的四种异型颗粒(正四面体、圆柱体、正六棱柱和环轮体),根据大量模拟计算结果进行回归和关联可得到一个统一的计算公式

$$C(D, \text{非球形}) = C(D, \text{球形}) / f(\quad) \quad (8a)$$

$$C(D, \text{球形}) = \frac{24}{Re} \left(1 + \frac{1}{6} Re^{\frac{3}{2}} \right) \quad (8b)$$

式中: Re 对于非球形颗粒用体积相当直径计算,通过数据处理,经验函数 $f(\quad)$ 可以表示为

$$f(\quad) = n \quad (9)$$

式中: n 取值

$$\begin{cases} > 1, n = -1 \\ < 1, n = 1.2 \end{cases}$$

表3是用公式(8)修正后的体积相当直径法曳力系数计算值与计及形状特征的模拟值的偏差。由

表 3 修正后曳力因数计算值与模拟值的相对偏差
Table 3 Relative differences between modified values of drag coefficient and the simulated values Re

Re	相对偏差/ %			
	正四面体	圆柱体	正六棱柱体	环轮体
10	3. 17	41. 39	36. 97	15. 42
50	5. 44	5. 88	2. 06	16. 13
100	9. 45	0. 54	4. 76	17. 19
200	30. 82	0. 51	5. 46	17. 11
300	47. 48	2. 42	3. 08	15. 19
400	61. 22	3. 45	0. 33	12. 79

表 3 可见,平均偏差减小到 10 %以下。与表 2 中修正前的偏差相比,修正前平均偏差值为 130. 74 %,因此,用公式(8)修正后的偏差明显减小,可满足工程计算的需要。

3 结 论

(1) 传统的用体积相当直径球、面积相当直径球处理非球形颗粒流体力学问题的方法,在计算曳力系数时与真实值相比偏离较大。

(2) 定义了一个新的表征异形颗粒几何特性的参数,并根据数值模拟的结果关联了一个用于异形颗粒曳力系数计算的新公式,使计算精度大为提高,可满足工程计算的需要。

符 号 说 明

A (投) ——颗粒迎流的投影面积, m^2
 b_v ——体积相当直径正六棱柱的底面边长, m
 b_a ——面积相当直径正六棱柱的底面边长, m
 a_v ——体积相当直径正四面体的边长, m
 a_a ——面积相当直径正四面体的边长, m
 d_v ——体积相当直径圆柱的底面直径, m
 d_a ——面积相当直径圆柱的底面直径, m
 d ——计算域管径, m
 d_p ——球形颗粒直径, m
 h_v ——体积相当直径圆柱的高, m
 h_a ——面积相当直径圆柱的高, m
 H_v ——体积相当直径正六棱柱的高, m
 H_a ——面积相当直径正六棱柱的高, m
 l ——计算域管长
 p ——流场压强, Pa

$Re = \frac{d_p u}{\mu}$ ——雷诺数, 无因次
 R_v ——体积相当直径环体外圆心到环体圆心距离, m
 R_a ——面积相当直径环体外圆心到环体圆心距离, m
 r ——管径向, m
 r_v ——体积相当直径环体半径, m
 r_a ——面积相当直径环体半径, m
 v_r ——流场径向速度, m/s
 v_z ——流场轴向速度, m/s
 u ——入口处流体轴向速度, m/s
 z ——管轴向, m
 $= \frac{A(\text{投, 非球形})}{A(\text{投, 球形})}$ ——几何参数, 无因次
 μ ——流体的分子黏度, $Pa \cdot s$
 μ_{eff} ——有效黏性系数, $Pa \cdot s$
——流体密度, kg/m^3

参 考 文 献

[1] 巴切勒 G K. 流体动力学引论[M]. 北京:科学出版社,1997
[2] Peter D, Noymer, Leon R Gicksman, Anand Deverdran. Drag on a permeable cylinder in steady flow at moderate Reynolds numbers[J]. Chemical Engineering Science, 1998, 53(16):2859 - 2869
[3] 陈甘棠. 化学反应工程[M]. 北京:化学工业出版社, 1981, 211
[4] Benkrid K, Rode S, Midoux N. Prediction of pressure drop and liquid saturation in trickle-bed reactors operated in high interaction regimes[J]. Chemical Engineering Science, 1997, 52(21/22):4021 - 4032
[5] 赵庆国, 廖 晖, 李绍芬. 气体的温度和压力以及颗粒形状对固定床压降的影响[J]. 化学反应工程与工艺, 2000, 16(1):1 - 6
[6] Smirnov W I, Muzykantov A V, Kuzmin V A, et al. Radial heat transfer in cylindrical beds packed by shaped particles[C]. 17th International Chemical Reaction Engineering Symposium. Hong Kong: The Hong Kong Polytechnic University, 2002. 25 - 28
[7] 陶文铨. 数值传热学[M]. 西安:西安交通大学出版社,1988, 431 - 439
[8] 刘大有. 两相流体动力学[M]. 北京:科学出版社, 1993
[9] MacDonald I F, El-Sayed M S, Mow K, Dullien F A L. Flow through porous media: the Ergun equation revisited[J]. Ind Eng Chem Res, 1979, 18: 199 - 208

(下转第 29 页)

- [4] Nicola, T Whilton, Paula J Vickers, Stephen Mann. Bioinorganic clays: synthsis and characterization of amino- and polyamino acid ingercalated layered double hydroxides[J]. J Mater Chem, 1997, 7(8): 1623 - 1629
- [5] 蒋传葵. 工具酶的活力测定[M]. 上海: 上海科学技术出版社, 1982

Preparation of immobilized papain on LDHs

Ji Hong Wang Yan-hui Ma Run-yu

(The Key Laboratory of Science and Technology of Controllable Chemical Reactions, Ministry of Education, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China)

Abstract: Immobilization of papain using a covalent method on the anion layer material-layered double hydroxides (LDHs) was studied. LDHs were activated by glutaraldehyde before being used as the carrier of the immobilization enzymes. The effects of the electrical density of the layered sheet on the immobilized enzymes activities were discussed, and the factors related with the activity of the immobilized papain on LDHs, such as time, temperature and pH of the immobilization reaction, concentration of glutaraldehyde and amount of papain used were studied. It is found that the optimum conditions for immobilization are as follows: the ratio of enzyme to carrier is 160 mg/g, activating with 0.5 % glutaraldehyde and immobilizing for 12 ~ 24 h at 15 °C and pH 7.0, with the activity recovery rate 55 %.

Key words: LDHs; papain; immobilization

(责任编辑 云志学)

(上接第 25 页)

Simulation of geometric effects of particles on flows and drag around abnormal shape particles

Gao Ji-xian Liu Hui Li Cheng-yue Yang Li-ying

(The Key Laboratory of Science and Technology of Controllable Chemical Reactions, Ministry of Education, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China)

Abstract: CFD modeling and simulation of flows and experienced drag over abnormal-shaped particles, such as sphere, hexahedron, trihedron, cylinder and wheel shapes, were investigated over a range of Reynolds number from 10 to 400. Based on simulation results, the conventional method characterizing an abnormal-shaped particle by using the grain volume or surface area-mean diameters was re-evaluated and was found to be improper in terms of their use in particle drag prediction. Accordingly, a new parameter was defined to take account of the geometrical effects involved and put forward a new correlation of drag coefficients for the above four non-spherical particles. The prediction of drag coefficients was greatly improved.

Key words: CFD simulation; particle; drag coefficient; two phase flow

(责任编辑 云志学)