

# HSX 型规整填料流体力学的 CFD 研究

于丹<sup>1</sup> 石殷<sup>2</sup> 吴子毅<sup>1</sup> 吴胜利<sup>3</sup> 郭鑫宇<sup>1</sup> 李群生<sup>1\*</sup>

(1. 北京化工大学 化学工程学院, 北京 100029; 2. 山东省高青县经管局, 山东 高青 256300;

3. 河北斯卓光伏科技有限责任公司, 石家庄 050000)

**摘要:** 通过多尺度方法, 对 HSX 填料进行计算流体力学 (CFD) 模拟, 得到了局部平均液膜厚度、气液有效润湿面积及全塔压降等数据。其中, 通过建立二维和三维流体体积 (VOF) 两相流模型, 分别计算了不同气液速度对液膜厚度及有效接触面积的影响。最终模拟压降结果与实验结果吻合性较高, 表明 CFD 可以作为设计、改良填料的有效工具。

**关键词:** HSX 型填料; 计算流体力学 (CFD); 多尺度

**中图分类号:** TQ053 **DOI:** 10.13543/j.bhxbzr.2017.04.005

## 引言

规整填料由于具有传质效率高、压降低、操作范围广等优点, 广泛地应用于化工生产中。一般而言, 填料传质性能越好, 填料层压降越高。规整填料由于具有较大的比表面积与较高的空隙率 (低持液量), 在保持低压降的同时可具有较高的传质效率。自从上世纪 60 年代丝网规整填料投入工业应用至今, 许多科研机构与商业公司均研发了新型、高效的规整填料以代替传统的 X、Y 型填料<sup>[1]</sup>, 以满足工业生产中的需求。

经过多年发展, 人们对规整填料塔内的持液量、有效润湿面积、流动分布等进行了充分研究, 归纳总结出了很多的经验、半经验半理论或理论模型, 如 SRP 模型、Delft 模型、扩散模型、单元网格模型、结点网络模型等。然而这些模型的建立一般是基于特定填料大量的实验数据及对填料结构的简化, 应用范围受到很大的限制。近年来, 采用计算流体力学 (CFD) 数值模拟研究填料的流体力学性能和传质性能已成为一个趋势<sup>[2-3]</sup>。利用 CFD 方法既可得到宏观信息, 也可观测到微观现象, 为深入分析填料塔内的流动机理提供了依据。CFD 数值模拟避免了实验设计和实验操作过程, 节省了时间及操作费用。

早期的 CFD 模拟只涉及单相流。van Gulijk<sup>[4]</sup>

建立了“toblerones”三维简化模型, 把多相流简化为单相流进行模拟, 研究装有催化剂的填料内部的流体流动。其后很多研究者以“toblerones”作为几何模型来模拟填料的流体力学性能<sup>[5-6]</sup>。Larachi 等<sup>[7]</sup>把填料层的不同位置分解成 4 个代表单元, 分别模拟 4 种代表单元内的气相流动, 得到每个单元的压力损失系数, 进而计算整个填料层的压降。Li 等<sup>[8]</sup>在文献<sup>[7]</sup>模型的基础上, 将填料层的压降分解为 5 种不同结构单元产生的压降之和, 研究了新型 SiC 规整填料内流体流动。对于更加贴近实际的两相流模拟, Szulczewska 等<sup>[9]</sup>以 250Y 填料几何参数为基础, 建立了板波纹二维两相流模型, 利用 Fluent 软件研究了气液两相逆流流动的过程。随后, Raynal 等<sup>[10]</sup>将填料内气液的流动轨道简化为“Z”字状, 利用 VOF 模型得到液膜厚度, 通过计算得到了填料的持液量。Shojaee 等<sup>[6]</sup>研究了气液流量对填料有效润湿面积的影响, 并将实验结果与已有的关联式进行了对比。

由于填料结构复杂, 计算所需网格数目庞大, 受计算机计算能力限制, CFD 模拟一般都局限在局部填料, 不可能进行工业尺度的模拟计算。在这种情况下, 填料的多尺度模拟方法提供了一种解决思路, 其核心思想是在微观模拟中得到填料局部流动细节, 随后在这些微观结果的基础上进行宏观模拟计算从而得到整个填料层的压降、持液量等宏观信息。Raynal 等<sup>[11]</sup>最先提出基于 CFD 用多尺度模型来计算大型规整填料塔的压降。Sun 等<sup>[12]</sup>与本课题组<sup>[3]</sup>均提出了不同的多尺度模型, 用来实现在计算机可接受的计算量下, 模拟工业尺度填料的流体力

收稿日期: 2017-01-20

基金项目: 国家“973”计划 (2013CB733600)

第一作者: 女, 1985 年生, 博士生

\* 通讯联系人

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

学性能。

本文采用本课题组之前提出的多尺度方法<sup>[3]</sup>,分别在二维、三维几何模型中对新型 HSX 填料的液膜厚度、有效润湿面积和塔压降等流体力学性能进行模拟研究,并将模拟计算得到的压降与实验压降进行了对比。

## 1 CFD 控制方程

本文在模拟过程中忽略温度场及传质,假设气相为理想气体,液体不可压缩。采用流体体积 (VOF) 两相流模型追踪气液相界面。VOF 模型在整个控制域内只需求解一组动量方程,气液两相使用同一速度场,动量方程为

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}) + \nabla(\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla[\mu(\nabla \mathbf{u} + \mathbf{u}^T)] + \rho \mathbf{g} + \mathbf{F} \quad (1)$$

式中,  $\rho$  为流体密度,  $\text{kg}/\text{m}^3$ ;  $\mathbf{u}$  为流体速度;  $\mu$  为流体黏度,  $\text{Pa}\cdot\text{s}$ ;  $p$  为压力。

对于气液两相,出现在动量方程中的物理参数由每个控制体内的分相决定

$$\rho = \alpha_L \rho_L + (1 - \alpha_L) \rho \quad (2)$$

$$\mu = \alpha_L \mu_L + (1 - \alpha_L) \mu \quad (3)$$

式中,  $\alpha$  为体积分数;下标 L、G 表示液相、气相。在每一控制体积内,体积分数总和为 1

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i = 1 \quad (4)$$

在 VOF 模型中,气、液相界面的追踪是通过求解连续性方程来完成的,连续性方程为

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \rho_i) + \nabla(\alpha_i \rho_i \mathbf{v}_i) = 0 \quad (5)$$

在模拟过程中,方程(1)中源项  $\mathbf{F}$  为表面张力, Fluent 基于 Brackbill 等<sup>[13]</sup>提出的连续表面力 (CSF) 模型来计算表面张力。

多孔介质模型中的阻力通过在动量方程中添加源项来实现。源项由黏性阻力相和惯性损失相构成,即

$$S_i = - \left( \sum_{j=1}^3 D_{ij} \mu v_j + \sum_{j=1}^3 C_{ij} \frac{1}{2} \rho |v| v_j \right) \quad (i = x, y, z) \quad (6)$$

其中,  $\mathbf{D}$ 、 $\mathbf{C}$  分别为黏性阻力及惯性阻力系数矩阵,即

$$S_i = -\frac{\mu}{r} u_i + C_2 \frac{1}{2} \rho |u| u_i \quad (i = x, y, z) \quad (7)$$

其中,  $r$  为渗透率;  $C_2$  为惯性阻力系数。在模型中也可以用幂函数来表示阻力,即

$$S_i = -C_0 |v|^{C_1} = -C_0 |v|^{C_1-1} v_i \quad (i = x, y, z) \quad (8)$$

式中,  $C_0$  和  $C_1$  为经验系数。

选用 RNG- $k-\varepsilon$  模型为湍流计算模型

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \alpha_\varepsilon \mu_{\text{eff}} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) - C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_{3\varepsilon} G_b) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} - R_\varepsilon + S_\varepsilon \quad (9)$$

其中,  $\varepsilon$  为湍流耗散率,  $G_k$  为由平均速度引起的湍动能产生项,  $G_b$  为由浮力引起的湍动能产生项,

$R_\varepsilon = \frac{C_{\mu} \rho \eta^3 (1 - (\eta/\eta_0))}{1 + \beta \eta^3} \frac{\varepsilon^2}{k}$ ,  $\eta = \sqrt{2 S_{ij} S_{ij}} \frac{k}{\varepsilon}$ 。模型中的常数  $C_{1\varepsilon}$ ,  $C_{2\varepsilon}$ ,  $C_{\mu}$ ,  $\eta_0$  和  $\beta$  分别为 1.42, 1.68, 0.085, 4.38 及 0.012。

本文使用 Ansys15.0 软件进行模拟计算。模拟过程中,水与空气作为气液两相。模拟为非稳态,对流动项采用二阶迎风格式,压力项采用 PRESTO! 算法,压力-速度耦合方程的求解采用 PISO 方法。VOF 模型中采用 Geo-Reconstruct 界面重构技术对气液相界面进行追踪。模拟中时间步长均设置为  $1 \times 10^{-5}$  s。计算过程中,设置监视器检测气液相出口流量,当气液两相出口流量围绕某一值变化不大时,可以认为计算达到拟稳态状态。

## 2 几何模型及边界条件

将 HSX 丝网填料的流体力学性能与传质性能的实验结果与 Mellapak125X 型填料进行了对比<sup>[14]</sup>,实验表明 HSX 填料相对于传统填料有更高的传质性能和更低的压降。但是,对于填料内液相的分布情况、流体的流动轨迹等详细信息仍然未知。本文对 HSX125 板波纹填料建立几何模型,利用多尺度方法对其进行 CFD 模拟,并与实验数值进行对比。HSX125 填料的几何结构见图 1,几何参数见表 1。

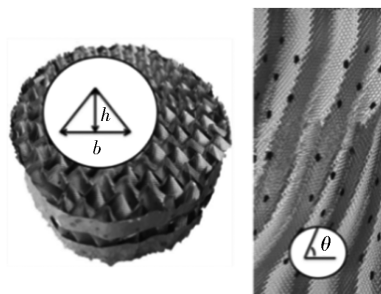


图 1 HSX 填料的几何结构

Fig. 1 Geometric configuration of HSX packings

表 1 HSX 填料的几何结构参数

参数	数值
比表面积 $a_p/\text{m}^2 \cdot \text{m}^{-3}$	125
各层填料高度 $H/\text{m}$	0.130
空隙率 $\varepsilon'/\%$	99.1
$\theta/(\circ)$	0-60-45-0
波纹高 $h/\text{m}$	0.0216
波纹底 $b/\text{m}$	0.0418

建立填料多尺度模拟所需几何结构(图 2)。建

模过程中,结构参数应与实际填料尽量保持一致。在 2D 模型(图 2(a))中利用 VOF 方法追踪气液接触面,得到液膜厚度  $\delta$ ;3D 模型(图 2(b))取相邻的 3 个流道作为计算域,模拟得到填料的有效润湿面积;用膜厚与有效润湿面积来计算填料持液量,利用多孔介质模型(图 2(c))在 Fluent 中得到填料塔的湿塔压降。2D 模型中,液相入口和气相出口宽度分别为 2 mm 和 3 mm。3D 模型中,液相入口是垂直于填料片方向宽 2 mm 沿填料片横向延伸的狭缝,以确保液相是以均匀液膜形式进入模型计算域的。

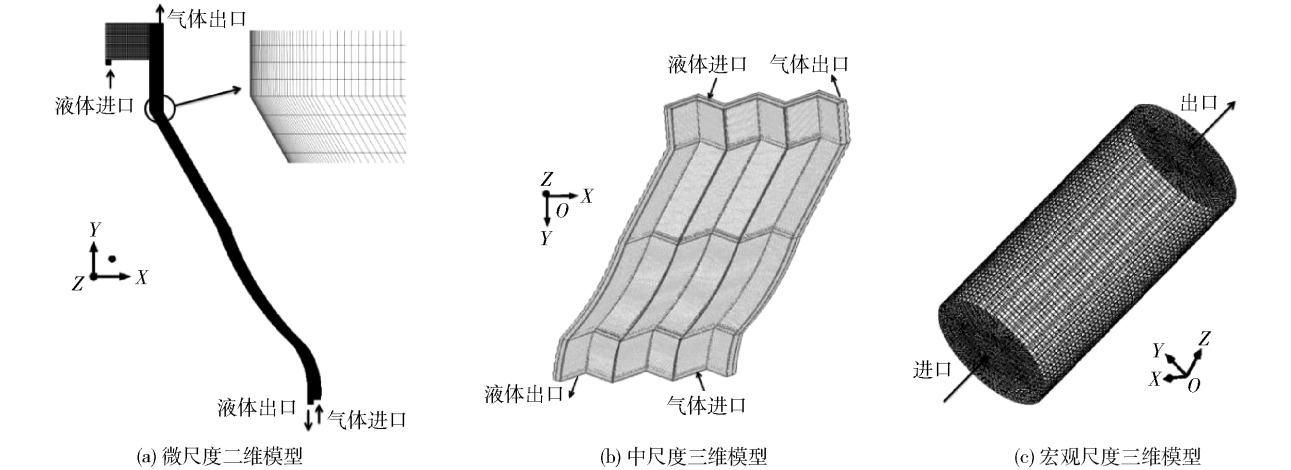


图 2 HSX 填料 CFD 多尺度模型计算区域与网格  
Fig. 2 Computational domain and meshes of the HSX structured packings

采用结构化网格,对近壁层网格进行加密。Raynal 等<sup>[10]</sup>建议液膜内最少有 8~10 层网格,本文中第一层网格的厚度仅为 0.005 mm。随后进行网格独立性验证,为了节省计算时间,最终确定 2D 与 3D 网格数量为 36587 与 503284。

设置气、液出口的边界条件为压力出口(0 Pa),气、液进口均为速度进口边界条件: $u_L = u_{L0}$ 、 $u_G = u_{G0}$ ,无滑移壁面。

3 模拟结果与讨论

3.1 干塔压降

干塔压降是湿塔压降模拟的基础,采用多孔介质模型对全塔进行模拟计算,得到干塔压降。模拟值与实验值如图 3 所示。模拟值与实验值误差平均在 5% 之内,吻合度较好。利用 CFD 方法可以比较准确地得到填料塔干塔压降。

本文多尺度模拟使用虚拟单相流计算湿塔压降,虚拟流的有效速度为

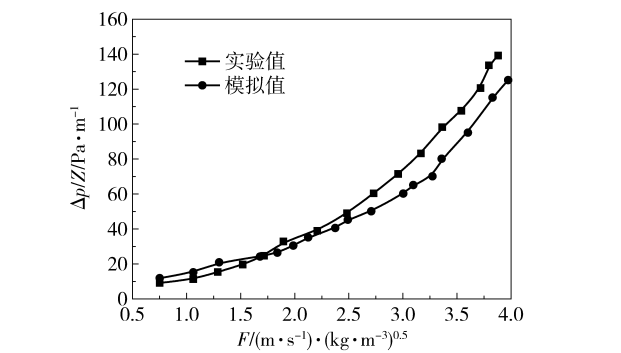


图 3 干塔压降模拟值与实验值对比  
Fig. 3 Comparison of experimental and simulated data for the dry pressure drop

其中  $u_{e,G} = \frac{u_G}{\varepsilon(1-h_L)\sin\theta}$ ,  $u_{e,L} = \frac{u_L}{\varepsilon h_L \sin\theta}$  分别代表气相与液相的有效速度,  $\theta$  是填料变化角度的算术平均值,  $h_L$  是填料的持液量,其值由液膜厚度  $\delta$  及有效润湿面积  $a_e$  求得

$$h_L = a_e \delta$$

(11)

$$u_e = u_{e,G} + u_{e,L}$$

(10)

### 3.2 平均液膜厚度的影响因素

#### 3.2.1 液相速度

首先研究液相速度对平均液膜厚度的影响,设定气速为 0。图 4 显示了不同时间液膜在填料表面的流动状况。

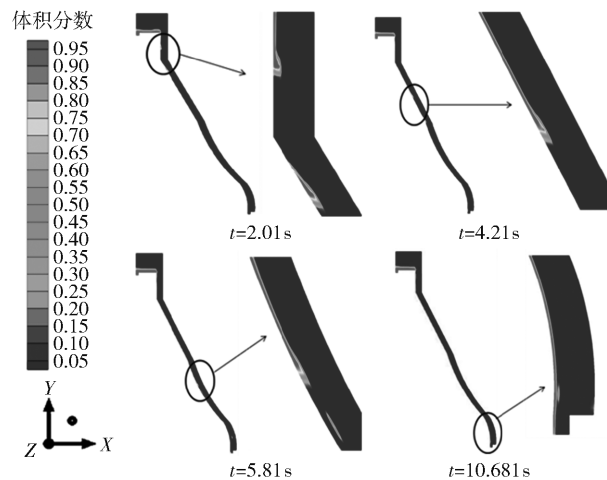


图 4 HSX 填料表面液膜流动过程示意图( $u_L = 0.005 \text{ m/s}$ )

Fig. 4 Contours of liquid volume fraction for 2D modeling of HSX packings ( $u_L = 0.005 \text{ m/s}$ )

图 4 的模拟结果显示,液膜的厚度在整个模拟域内具有不均一性。模拟过程中发现入口处液膜较厚,在液相向下流动的过程中,液膜厚度逐渐减小;在填料折线处,液体有部分累积。进一步利用 Tecplot360 软件对流场相分率图进行处理,得到气液两相的相界面。图 5 给出了不同液相雷诺数下的气液相界面的位置,从而可得到液膜厚度。

由图 5 可以看出,随着流速的增大,液膜厚度逐渐增大。利用得到的液膜厚度与液相雷诺数作图(图 6),可以看出在不考虑气相作用时,平均液膜厚度呈线性增长。

#### 3.2.2 气相速度

固定液相速度为  $0.01 \text{ m/s}$ ,模拟不同气相速度下液膜厚度的变化如图 7 所示。

从图 7 中可以看出,液膜厚度随着气速的增大逐渐增大,在气速较小时增加平缓,接近液泛区域( $F > 2.5 (\text{m/s}) \cdot (\text{kg/m}^3)^{0.5}$ )时,液膜厚度急剧增加。这是由于气速较小时,气体对液体影响很小,液膜的流速较大,膜厚较小;随着气速增大,气体对液体向下流动产生了较大的阻碍作用,从而导致液体累积,液膜增厚。

### 3.3 有效润湿面积的影响因素

利用 CFD 模拟可以较为精确地得到填料的有效润湿面积,从而降低了在以往研究过程中把气液

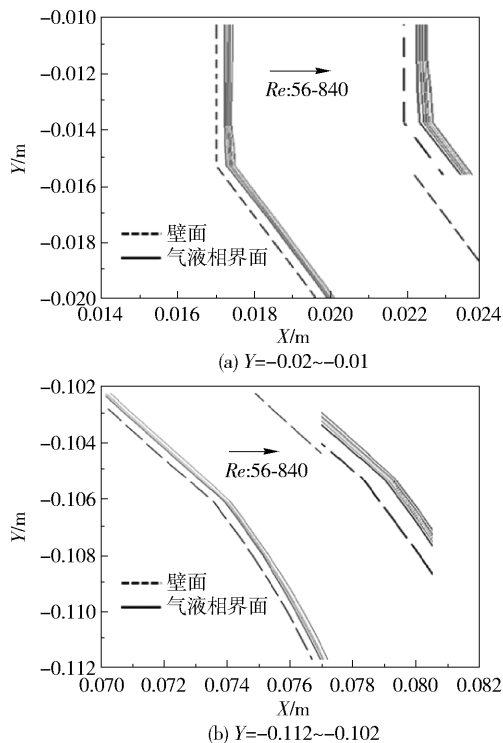


图 5 不同液相雷诺数下的液膜厚度

Fig. 5 Liquid film thickness at different  $Re_L$

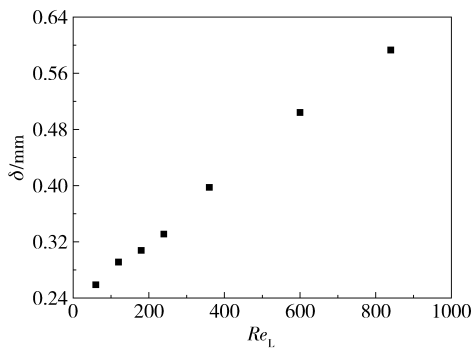


图 6 不同雷诺数下的液膜厚度

Fig. 6 Liquid film thickness at different  $Re_L$

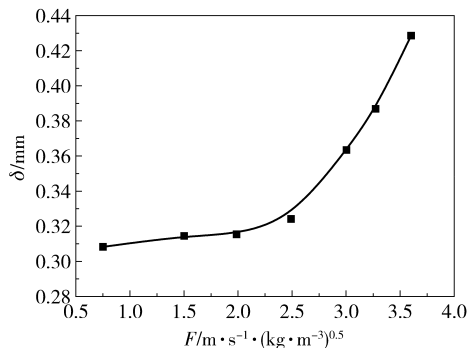


图 7 气速对液膜厚度的影响

Fig. 7 Influence of gas loading on the average liquid film thickness



两相有效润湿面积与实际填料表面积之比( $a_e/a_p$ )当作1而产生的较大误差。

### 3.3.1 液相速度

设定气速为0,研究液相速度对有效润湿面积的影响。

由图8可以看出,液体以膜状流动进入填料层,在重力与表面张力的作用下沿填料表面向下流动。当喷淋密度较小时,液体以溪流状态沿填料的流道底部流动, $a_e/a_p$ 远小于1。随着喷淋密度的增加,填料表面被液体覆盖区域逐渐增大,虽然还是以溪流为主,但已经有膜状流动区域存在,并且液体有向相邻流道流动的趋势;喷淋密度继续增加,整个填料表面逐渐被覆盖, $a_e/a_p$ 接近1。图9给出了 $a_e/a_p$ 的值随液相雷诺数的变化趋势。

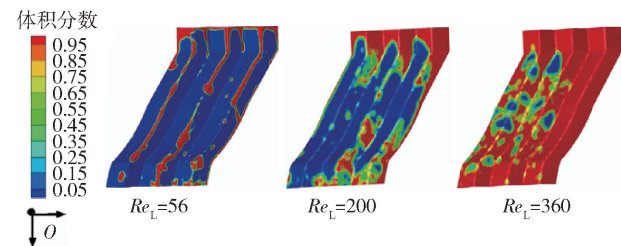


图8 不同喷淋密度下液相流动形态

Fig. 8 Liquid flow behavior at different liquid loadings

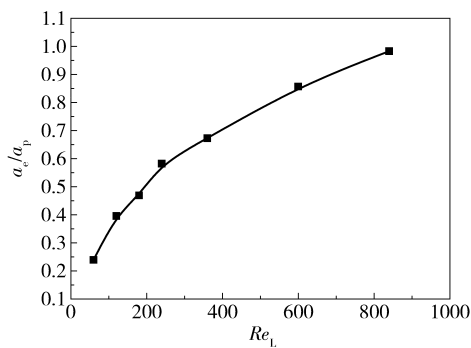


图9 不同雷诺数下的有效接触面积

Fig. 9 Effective area at different  $Re_L$

### 3.3.2 气相速度

固定液相速度为0.01 m/s,模拟不同气相速度下有效润湿面积的变化,如图10所示。

有效润湿面积与平均液膜厚度受气速影响变化趋势一致,在低气速区域增长缓慢,在液泛区域( $F > 2.5 (\text{m/s}) \cdot (\text{kg/m}^3)^{0.5}$ )增加明显。其原因也是由于随着气速的增加,气液交互作用逐渐增强,从而增加了有效润湿面积。

### 3.4 湿塔压降模拟结果

将3.2节与3.3节模拟计算得到的平均液膜厚

度、有效润湿面积代入式(10)、(11)中,计算求得虚拟单相流的有效速度。在全塔几何模型中,采用多孔介质模型对全塔湿塔压降进行模拟计算。图11描述了喷淋密度 $L = 39.34 \text{ m}^3/(\text{m}^2 \cdot \text{h})$ 时模拟结果与实验结果对比情况。

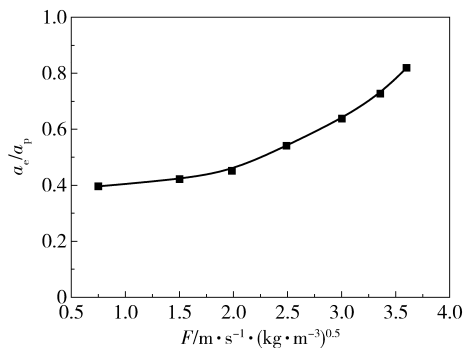


图10 不同F因子下有效面积的变化

Fig. 10 Effective area at different  $F$ -factors

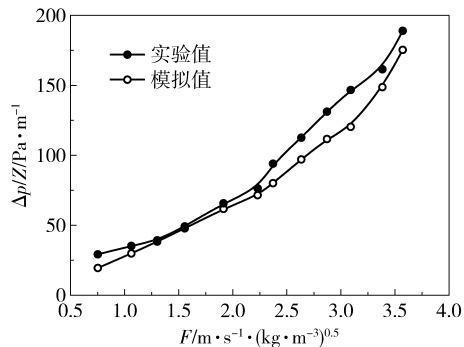


图11 实验值与模拟值对比

Fig. 11 Comparison of the experimental and simulated results

由图11可以看出,在整个测量范围内,模拟值与实验值趋势相同,模拟结果与实验结果平均误差在15%左右,表明此多尺度模型可用来对填料的压降进行预测。分析造成误差的原因,可能包括如湍流模型不适用于低速流动状态、VOF模型对于湍动较大的流场有较大误差等。

## 4 结论

(1)当气相速度为0时,液膜厚度随液相速度呈线性递增变化。低气速对液膜厚度影响较小,当气速增加时,接近液泛区域,液膜厚度随着气速的增加明显增大。

(2)有效润湿面积随着气速与液速的增大均增大。当不考虑气相影响时,低喷淋密度下气液两相有效润湿面积与实际填料表面积之比( $a_e/a_p$ )仅有0.3左右,远小于1。固定喷淋密度研究气相对有效润湿面积影响,结果表明,气相对其影响与对液膜厚

度影响一致,高气速(泛点附近)下由于气液交互作用增强,有效润湿面积增加显著。

(3)湿塔压降模拟结果表明,模拟计算值与实验值吻合度较高,整体平均误差基本在 15% 以内。

### 参考文献:

- [1] Olujic Ž, Jödecke M, Shilkin A, et al. Equipment improvement trends in distillation[J]. Chemical Engineering and Processing: Process Intensification, 2009, 48: 1089–1104.
- [2] Huang J C, Li M, Sun Z H, et al. Hydrodynamics of layered wire gauze packing[J]. Ind Eng Chem Res, 2015, 54(17): 4871–4878.
- [3] Li Q S, Wang T, Dai C N, et al. Hydrodynamics of novel structured packings: an experimental and multi-scale CFD study[J]. Chem Eng Sci, 2016, 143: 23–35.
- [4] van Gulijk C. Using computational fluid dynamics to calculate transversal dispersion in a structured packed bed[J]. Comput Chem Eng, 1998, 22(Suppl): S767–S770.
- [5] Higler A P, Krishna R, Ellenberger J, et al. Counter-current operation of a structured catalytically packed-bed reactor: liquid phase mixing and mass transfer[J]. Chem Eng Sci, 1999, 54: 5145–5152.
- [6] Shojaei S, Hosseini S H, Rafati A, et al. Prediction of the effective area in structured packings by computational fluid dynamics[J]. Ind Eng Chem Res, 2011, 50(18): 10833–10842.
- [7] Larachi F, Petre C F, Iliuta I, et al. Tailoring the pressure drop of structured packings through CFD simulations[J]. Chem Eng Process, 2003, 42: 535–541.
- [8] Li X G, Gao G H, Zhang L H, et al. Multiscale simulation and experimental study of novel SiC structured packings[J]. Ind Eng Chem Res, 2012, 51(2): 915–924.
- [9] Szulczewska B, Zbicinski I, Górak A. Liquid flow on structured packing: CFD simulation and experimental study[J]. Chem Eng Technol, 2003, 26(5): 580–584.
- [10] Raynal L, Boyer C, Ballaguet J P. Liquid holdup and pressure drop determination in structured packing with CFD simulations[J]. Can J Chem Eng, 2004, 82(5): 871–879.
- [11] Raynal L, Royon-Lebeaud A. A multi-scale approach for CFD calculations of gas-liquid flow within large size column equipped with structured packing[J]. Chem Eng Sci, 2007, 62(24): 7196–7204.
- [12] Sun B, He L, Liu B T, et al. A new multi-scale model based on CFD and macroscopic calculation for corrugated structured packing column[J]. AIChE Journal, 2013, 59(8): 3119–3130.
- [13] Brackbill J U, Kothe D B, Zemach C. A continuum method for modeling surface tension[J]. Journal of Computational Physics, 1992, 100(2): 335–354.
- [14] 李群生, 李展展, 于丹, 等. HSX 型规整填料的流体力学和传质性能研究[J]. 北京化工大学学报: 自然科学版, 2017, 44(1): 1–6.

Li Q S, Li Z Z, Yu D, et al. The hydrodynamic and mass transfer performance of HSX type structured packing[J]. Journal of Beijing University of Chemical Technology: Natural Science, 2017, 44(1): 1–6. (in Chinese)

## CFD study of the hydrodynamic performance of HSX structure packings

YU Dan<sup>1</sup> SHI Yin<sup>2</sup> WU ZiYi<sup>1</sup> WU ShengLi<sup>3</sup> GUO XinYu<sup>1</sup> LI QunSheng<sup>1\*</sup>

(1. College of Chemical Engineering, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029;

2. Bureau of Economic and Information, Gaoqing, Shandong 256300;

3. Hebei Sizhuo Photovoltaic Technology Co. Ltd., Shijiazhuang 050000, China)

**Abstract:** A multi-scale computational fluid dynamic (CFD) model has been employed to characterize the hydrodynamic performance of HSX packings. The 2D volume of fluid (VOF) model was used to trace the gas-liquid interface and to calculate the liquid film thickness for two-phase flow; the 3D VOF model was used to calculate the effective wetting area. Finally, a 3D porous media model was proposed to calculate the pressure drop at the column scale. The simulated results were in agreement with the experimental data. The multi-scale CFD model can be used effectively to design and optimize complex structured packings.

**Key words:** HSX packings; computational fluid dynamic (CFD); multi-scale

(责任编辑:吴万玲)