

信息技术应用

基于 CFD 对小管径粒径比填料床填料结构的优化

梁爽, 许松林*

(天津大学化工学院, 天津 300350)

摘要:为探究填料方式即内部结构不同对内部压降影响并得到最优填料结构, 利用 CFD Fluent 16.2 对管径粒径比 $D/d = 2.15$ 下不同内部结构的细长填料床进行数值模拟, 3 种模型局部径向空隙率分布均与实验结果吻合良好。模拟结果表明, 细长填料床内局部压力与速度分布存在不均性; 单一 D/d 下, 大空隙率的内部结构或中空通道的存在均可有效降低压降, 且进口速度越大对压降影响越大; 经综合分析, 该 D/d 下存在中空通道的结构性能最佳。根据模拟结果得到低 D/d 下压降计算公式, 与实验值进行比较, 平均误差约为 11.2%。

关键词:细长填料床; 内部结构; 压力降; 计算流体力学

中图分类号: TQ051.1

文献标志码: A

文章编号: 0253-4320(2019)05-0215-05

DOI: 10.16606/j.cnki.issn.0253-4320.2019.05.048

Optimization of filler structure in a packed bed with small diameter ratio of tube to particle based on CFD

LIANG Shuang, XU Song-lin*

(School of Chemical Engineering and Technology, Tianjin University, Tianjin 300350, China)

Abstract: In order to investigate the influence of different internal structures on pressure drop and determine the optimal internal structure, CFD Fluent 16.2 is used to carry out numerical simulation on slender packed bed with different internal structure under the diameter ratio of tube to particle $D/d = 2.15$. The local radial void fraction distribution of three models agrees well with the experimental results. The simulation results show that the local pressure and velocity distribution are inhomogeneity in the slender packed bed. With the same D/d , the internal structure with the large void ratio or the existence of the hollow channel can reduce effectively pressure drop. The higher the inlet velocity, the greater its influences on pressure drop. After comprehensive analysis, the internal structure with hollow channel is the best. The equation for calculating the pressure drop with low D/d is obtained. Compared with the experimental values, the average error is about 11.2%.

Key words: slender packed bed; internal structure; pressure drop; computational fluid dynamics

小直径比 ($1 < D/d < 3$, D 为管道直径, d 为填料颗粒直径) 细长填料床可显著降低压降、保证温度均匀性、加强径向传热^[1], 可用于催化反应器、高热负荷填料床、核反应堆冷却器、色谱柱或作为组合填料床的单元, 如在细长色谱填料床内, 压力的降低可有效改善色谱柱的选择性、组分保留时间等。Calis 等^[2] 和 Romkes 等^[3] 分别采用 CFD 模拟和实验的方法对低 D/d 复合结构填料床进行了流动和传热特性的探究, 结果表明, 细长填料床可明显降低压降, 改善流体流动和传热特性。

填料床直径比、颗粒粒径、颗粒粗糙度、内部床

层结构等因素均会对其特性产生影响。细长填料床因管壁效应的放大及主导作用, 内部床层结构将变得极为重要, 其变化将直接影响填料床性能。目前文献大多对不同 D/d 下填料床进行探究, 对内部床层结构的研究较少。实验法探究内部结构, 无法观察内部颗粒排布, 了解内部流动特性; 采用模拟方法进行前期探究是理想的, 得到某一 D/d 下最适颗粒排布结构不仅可以为实验提供准确的模型与数据, 也可以为低 D/d 固定床的设计提供精确的信息。

选取代表性直径比 $D/d = 2.15$, 利用 CFD 法进

收稿日期: 2019-01-21; 修回日期: 2019-03-27

基金项目: 国家重点研发计划项目(2016YFF0203802)

作者简介: 梁爽(1994-), 女, 硕士生; 许松林(1966-), 男, 博士, 副研究员, 研究方向为流体力学, 通讯联系人, slxu@tju.edu.cn。

行数值模拟。该比值下,粒子在同一平面内恰好呈正三角形稳定排布。建立不同粒子排布模型,探究同一 D/d 下内部结构对流体流动及压降的影响,得到最适填料结构,在考虑内部结构的前提下,得到适用于细长填料床的压降计算方程,并用已有实验数据进行验证。

1 物理模型建立

1.1 模型建立

以单一粒径 $d = 10 \text{ mm}$ 球形颗粒作为填料粒子,建立在 $D/d = 2.15$ 下不同粒子排布方式物理模型,考虑计算时间及计算机负荷,仅对填料床的一段进行模拟,见图 1。模型 A 排布最结构化,每一层均为呈正三角形排布的 3 个粒子且层层相同,中心存在中空通道且三角形与管壁之间形成宽阔旁路;模型 B 与随机填料基本相同,排列最紧凑,每层粒子呈正三角形排布,上层粒子为下层旋转 180° 所得;模型 C 颗粒最少排布最松散,第一层 3 个颗粒正三角形排布,邻层仅 1 个粒子且在第一层三角形中心处,之后依此类推,无中心通路但存在单颗粒子层。为减小进出口处影响,在进口、出口处分别设置长度为 $3d$ 和 $5d$ 的空白段。

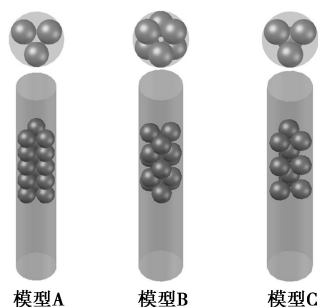


图 1 3 种模型内部结构的俯视图及三维示意图

1.2 网格划分

网格划分是决定后续计算成功与否以及数据好坏的重要一步,经过网格独立性分析并综合考虑计算时间与计算机负荷,采用的计算域网格划分相关参数列于表 1 中,体网格划分采用多面体网格。

表 1 计算域网格划分相关参数

项目	参数
最大网格边缘大小	0.001 m
最小网格边缘大小	0.0002 m
狭缝处网格数量	4
表面增长率	1.1

边界层层数	2
边界层厚度	最小网格边缘大小的 10%
修正接触点处的最小距离	最大网格边缘大小的 12%

1.3 接触点处处理

颗粒间以及颗粒与管壁间接触点处网格的处理是一关键点,该处网格高度扭曲、质量差会导致后续计算收敛性出现问题。很多学者^[4-6]对此进行研究,现选取 Eppinger^[6]方法,将接触点处圆弧面进行“磨平”处理,使接触点处呈现一个小的间隙,有效提高接触点处网格质量且不需要后续参数修正,见图 2。

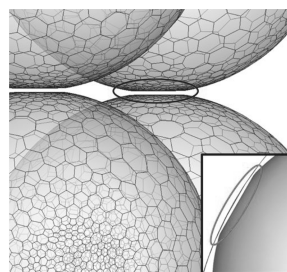


图 2 接触点处处理结果示意图

2 计算条件

本实验是以水(密度 $\rho = 998.2 \text{ kg/m}^3$,黏度 $\mu = 0.001003 \text{ Pa}\cdot\text{s}$)为流体的单相流动,假设其等温不可压缩。操作压力为一个大气压,管壁和颗粒表面设置为“无滑移”壁面(“no-slip” wall);入口边界条件为速度入口(velocity-inlet);出口边界条件为压力出口(pressure-outlet),出口压力 0.1 MPa。湍流模型为 standard k-epsilon 模型,压力速度耦合采用 SIMPLE 算法,求解过程均采用二阶迎风格式离散法(second order upwind),全部控制方程的残差小于 10^{-6} 时认为其收敛。每一种模型均以 6 个不同的进口速度进行模拟。

3 结果与讨论

3.1 全局空隙率和局部径向空隙率

局部空隙率 $\varepsilon(r)$ 可由式(1)计算:

$$\varepsilon(r) = A_{\text{fluid}}(r)/A_{\text{cyl}}(r) = A_{\text{fluid}}(r)/2\pi rL \quad (1)$$

式中, A_{fluid} 为流体圆柱壳面积; r 为圆柱体半径; h 为填料床高度。

全局空隙率 ε 是反映填料床内部结构重要参数,可通过对径向空隙率 $\varepsilon(r)$ 积分得到,也可由式

(2) 计算:

$$\varepsilon = V_{\text{fluid}} / \pi r^2 L \quad (2)$$

式中, V_{fluid} 为流体体积。

Dixon^[7]在修正全局空隙率 ε 计算公式时发现, D/d 减小, 管壁效应影响增加, 全局空隙率 ε 将会增大。3种排布方式下的全局空隙率 ε 见表2。

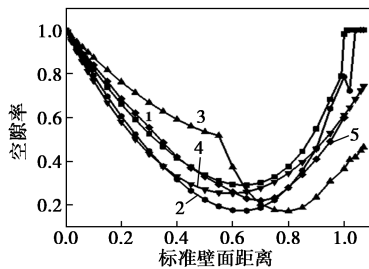
表2 3种模型的全局空隙率 ε

模型	A	B	C
总空隙率 ε	0.5692	0.4991	0.6327

由图3可知, 3个模型局部空隙率变化整体趋势一致, $\varepsilon(r)$ 随着与管壁距离增大而呈现先减小后增大的趋势。在标准壁面距离 $z=0$ 时, $\varepsilon(r)=1$; z 增大, $\varepsilon(r)$ 减小, 在与壁面距离约为颗粒半径处得到 $\varepsilon(r)$ 最小值, 后越接近管中心, $\varepsilon(r)$ 越大。标准壁面距离 z 可由式(3)计算:

$$z = (R - r') / d \quad (3)$$

式中, R 为管道半径; r' 为径向坐标。



1—模型 A; 2—模型 B; 3—模型 C; 4—de Klerk; 5—Mueller

图3 3种模型局部空隙率分布与实验、经验公式计算结果对比图

A 因中心通道的存在, 中心处 $\varepsilon(r)$ 几乎为 1; B 在约为颗粒半径处取得了 3 种排布中 $\varepsilon(r)$ 最小值; C 无中空通道, 中心处 $\varepsilon(r)$ 较低且因中心颗粒的出现而导致 $\varepsilon(r)$ 急剧减小出现转折点。将 3 种模型曲线与 Mueller^[8] 实验结果和 de Klerk^[9] 经验方程比较, 整体趋势吻合良好, 证明本实验模型的合理性及可行性。

3.2 压力及速度分析

由图4可知, 3种模型轴向上压力呈递减趋势, 宽阔旁路及中间通道是流体流动的主要区域, 局部压力分布不均, 颗粒间隙及管壁与颗粒间隙处流动弱, 颗粒尾部因回流与滞流有负压出现。以上下两层为一个单元对 3 种填料床压力分布进行分析, A [图4(a)] 流动路径简单阻力小, 压力损失少且整体分布较均匀, 颗粒前端与流体碰撞处存在压力激

增点。B [图4(b)] 流体在颗粒缝隙中进行绕流, 压力损失大且分布高度不均, 每层三角形中心处流体分布较多, 可观察到压力上升。C [图4(c)] 因存在单颗粒层, 有效减小填料床内阻力, 流体多从此处流过, 压力损失小, 粒子前端存在压力激增点。由分析知, B 内路径曲折不存在宽阔通路, 阻力最大即压降最大, 达其他 2 种模型的 3 倍。A 与 C 局部压力分布不均情况较为改善, 压降相差约为 100 Pa, 但二者压降低的原因不同: A 中间通路有效分担压降且颗粒数没有减少; C 空隙率最大, 单颗粒层的存在使流体流动空间最多, 3 种模型内压降 $B > A > C$ 。

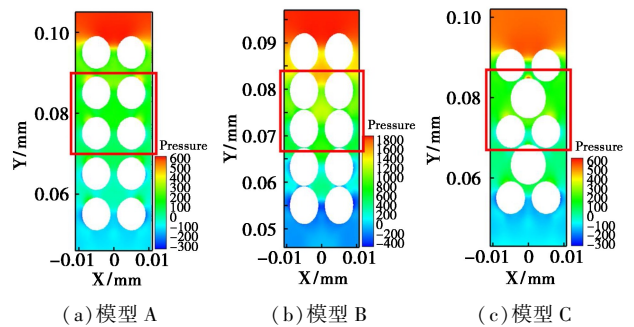
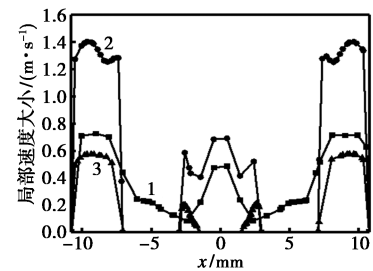
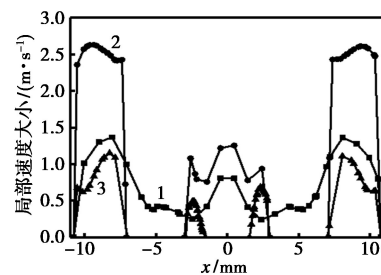


图4 3种模型在 $u=0.3 \text{ m/s}$ 的表现进口速度下, $y=0$ 截面上的压力分布

以不同进口速度为例, 将 3 种填料结构下局部速度大小进行对比, 见图5。填料床内速度分布不对称且速度越大越明显, 证明其内部速度分布的高



(a) 表现进口速度 $u=0.3 \text{ m/s}$



(b) 表现进口速度 $u=0.6 \text{ m/s}$

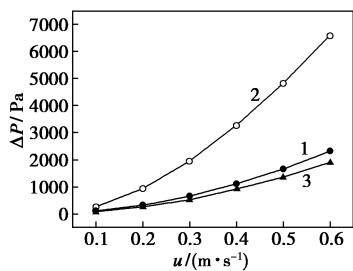
1—模型 A; 2—模型 B; 3—模型 C

图5 3种模型在不同的表现进口速度下, 局部速度分布对比图

度不均性。B 因内部阻力大,局部流体速度取得三者最大值,壁面附近速度可达 1.40 m/s 和 2.61 m/s; A、C 速度变化幅度较小且 A 内部速度分布情况明显优于 C,流体流动稳定平缓,3 种模型局部速度大小为 B>A>C,与压力分布相符。

3.3 3 种模型分析对比及优化

如图 6,随进口表观速度增长,填料床内压降呈指数型上升,进口速度越大,3 种模型压降差异越大。综合分析可知:B 压降变化梯度最大,相同进口速度下,流体流动阻力、压降最大;A 存在明显中空通路,粒子数量与 B 相同,但压降仅为 B 的 1/3,中空通道有效降低了填料床内阻力,该结论与 Guo 等^[10]的实验吻合。C 空隙率最大即流体流动空间最大,压降最小,说明空隙率是影响填料床内部压降的因素。



1—模型 A;2—模型 B;3—模型 C

图 6 3 组模型速度-压降对比图

值得注意的是,若仅考虑空隙率大小对内部压降的影响,A 内压降应明显高于 C,模拟结果并非如此,推断细长填料床内中空通道存在与否与空隙率大小 2 个因素共同决定填料床内压降大小。本实验中,A 压降大小略高于 C,证明 $D/d=2.15$ 时,中空通道虽可减小阻力,但空隙率仍是影响压降大小的主要因素。推断当 $D/d=2.15$ 增大至某一临界值,使 A 内中空通路变宽,内部压降极有可能低于同等条件下 C 内的压降。

针对 $D/d=2.15$ 下 3 种内部结构的细长填料床,拟选择结构型填充 A 模型为最优填料结构。其以不减少催化粒子为前提,因存在中空通道这一特殊结构而有效地降低了压降。对于高热负荷反应器,中空通路内流体可带走多余热量,保证温度的均匀性。在应用中,细长填料床内引入该结构将大大优化其性能。

3.4 摩擦因子对比及公式拟合

大量学者提出公式来预测填料床内压降。标志性强且运用最广泛的压降计算公式是适用于较大 $D/$

d 、低雷诺数的 Ergun^[11]方程,其可由无量纲的摩擦因子 f_v 表示为式(4):

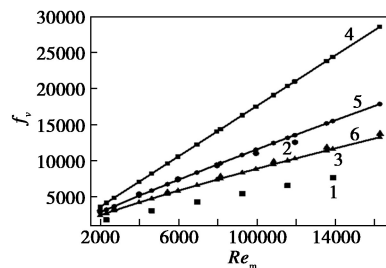
$$-(\Delta P/L) = f_v \mu [(1 - \varepsilon)^2 / \varepsilon^3] (u/d^2) \quad (4)$$

$$f_v = a + b Re_m \quad a = 150, b = 1.75 \quad (5)$$

$$Re_m = \rho du / [\mu(1 - \varepsilon)] \quad (6)$$

式中, ΔP 为压降; L 为床层高度; a 为黏性阻力系数; b 为惯性阻力系数; Re_m 为修正雷诺数。

由图 7 可知, Ergun 方程预测值过高, Carman^[12] 及 Tallmadge^[13] 方程均忽略内部结构变化对压降影响而无法进行准确预测。在细长填料床、高雷诺数的条件下, Ergun 方程已完全不适用,其第二项即惯性项造成计算出的摩擦因子过高。



1—模型 A;2—模型 B;3—模型 C;4—Ergun;
5—Carman;6—Tallmadge

图 7 3 种模型与现有公式的 Re_m-f_v 对比图

本实验在高雷诺数下进行模拟,考虑内部结构将空隙率引入参数 b ,对惯性阻力系数 b 进行修正。假设:

$$b = a\varepsilon^2 + b\varepsilon + c \quad (7)$$

经多元回归分析,得到压降计算方程(8):

$$f_v = 150 + (612.65\varepsilon^2 - 701.72\varepsilon + 204.52) Re_m^{0.8} \quad (8)$$

将式(8)计算结果与 Guo 等^[14]实验值进行对比,整体吻合良好,平均误差在 11.2% 左右,见图 8。

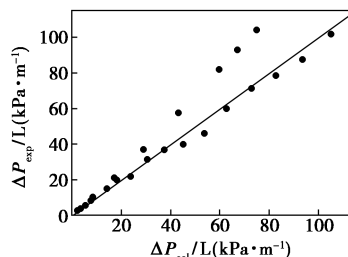


图 8 实验结果与公式计算结果对比图

4 结论

基于细长填料床 ($1 < D/d < 3$) 的应用前景,采用 CFD 方法研究细长填料床内部结构的变化对压降产生的影响,探究可以有效减小内部压降的最适填

料结构,得到的结论如下。

(1)细长填料床内部结构的变化会对管内压降造成明显影响,单一 D/d 下,大空隙率内部结构或中空通道的存在均可有效降低压降,且进口速度越大对压降影响越大。本文中拟选择模型 A 为最适合的填料结构。

(2)本实验模型 A、B 均存在中空通路,减小压降的能力与其宽度有关。结果表明,在实验 D/d 下,空隙率对压降的影响作用大于中空通路,推断在细长填料床中存在 D/d 的临界值,超过这一数值中空通路结构将起主要作用,在今后的工作中将针对该问题进行进一步探究。

(3)现有公式不能用来预测细长填料床内压降大小,在考虑内部结构的前提下,拟合得到压降计算公式,并用实验值进行验证,平均误差约为 11.2%。

(4)最优结构下的细长填料床可显著降低压降,可将其用于微型填料反应器、色谱柱、高热负荷填料床、复合结构填料床单元等,解决局部温度高、压降大、对流传热效率低等问题。

参考文献

- [1] Langsch R, Zalucky J, Haase S, *et al.* Investigation of a packed bed in a mini channel with a low channel-to-particle diameter ratio: Flow regimes and mass transfer in gas liquid operation [J]. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 2014, 75: 8-18.
- [2] Calis H P A, Nijenhuis J, Paikert B C, *et al.* CFD modelling and experimental validation of pressure drop and flow profile in a novel structured catalytic reactor packing [J]. *Chemical Engineering Science*, 2001, 56(4): 1713-1720.
- [3] Romkes S J P, Dautzenberg F M, van den Bleek C M, *et al.* CFD modelling and experimental validation of particle-to-fluid mass and heat transfer in a packed bed at very low channel to particle diameter ratio [J]. *Chemical Engineering Journal*, 2003, 96(1/2/3): 3-13.
- [4] Kuroki M, Ookawara S, Ogawa K. A High-fidelity CFD model of methane steam reforming in a packed bed reactor [J]. *Journal of Chemical Engineering of JAPAN*, 2009, 42(S1): 73-78.
- [5] Bai H, Theuerkauf J, Gillis P A, *et al.* A coupled DEM and CFD simulation of flow field and pressure drop in fixed bed reactor with randomly packed catalyst particles [J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2009, 48(8): 4060-4074.
- [6] Eppinger T, Seidler K, Kraume M. DEM-CFD simulations of fixed bed reactors with small tube to particle diameter ratios [J]. *Chemical Engineering Journal*, 2011, 166(1): 324-331.
- [7] Dixon A G. Correlations for wall and particle shape effects on fixed bed bulk voidage [J]. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 1988, 66(5): 705-708.
- [8] Mueller G E. Radial void fraction distributions in randomly packed tied beds of uniformly sized spheres in cylindrical containers [J]. *Powder Technology*, 1992, 72: 269-275.
- [9] De Klerk A. Voidage variation in packed beds at small column to particle diameter ratio [J]. *AIChE Journal*, 2003, 49(8): 2022-2029.
- [10] Guo Z, Sun Z, Zhang N, *et al.* Pressure drop in slender packed beds with novel packing arrangement [J]. *Powder Technology*, 2017, 321: 286-292.
- [11] Ergun S. Fluid flow through packed column [J]. *Chemical Engineering Progress*, 1952, 48(2): 89-94.
- [12] Carman P C. Fluid flow through granular beds [J]. *Chemical Engineering Research and Design*, 1997, 75: S32-S48.
- [13] Tallmadge J A. Packed bed pressure drop-an extension to higher Reynolds numbers [J]. *AIChE Journal*, 1970, 16(6): 1092-1093.
- [14] Guo Z, Sun Z, Zhang N, *et al.* Experimental characterization of pressure drop in slender packed bed ($1 < D/d < 3$) [J]. *Chemical Engineering Science*, 2017, 173: 578-587. ■

诺力昂庆祝其表面活性剂生产基地在华投产 25 周年

2019年3月14日,诺力昂(前阿克苏诺贝尔专用化学品)庆祝其首批在华化学品生产基地之一博兴基地投产25周年。该基地经过多年投资和发展,特别是在2017年底完成480万欧元扩建项目后,现已成为诺力昂表面活性剂生产网络中的重要一环。

诺力昂博兴基地现有员工230余人,为个人护理、沥青、建筑和清洁等行业的客户提供高质量的产品和服务。

诺力昂表面化学品业务董事总经理 AB Ghosh 表示:“博兴基地在使公司保持市场领先地位方面发挥着重要作用。我要感谢我们的员工、客户和合作伙伴,以及山东省相关部门、滨州市和博兴县政府一直以来对我们的信任和支持。”

诺力昂表面化学亚太区总经理裘璐薇在博兴基地25周年庆典暨客户答谢会上提到:“我们在中国取得的成功很

大程度上源于对更加可持续的表面活性剂的大力引进和推广。我们认为,中国市场仍具有巨大的发展前景,我们将继续为在华运营提供必要的资源支持,以满足客户需求,并与他们共同成长。”

诺力昂首席执行官 Charlie Shaver 对此补充道:“我们对中国生产基地进行了大量投资,且今后在华投资仍将继续。我们希望通过产能的提升实现我们全球增长的宏伟目标。”

诺力昂自20世纪90年代初起在中国投资生产,目前已在9个城市设有生产基地、研发及办公室,拥有近1400名员工。除扩建表面活性剂生产外,公司还投资提升了聚合物产品的产能,其中包括近期在天津投资9000万欧元建设的有机过氧化物生产基地,以及大幅提升宁波过氧化二异丙苯工厂产能。(陈晓丹)