

信息技术应用

海水脱硫散堆填料塔的数值模拟及传质计算

高梅杉¹, 王世和¹, 王小明², 郭明春³

(1. 东南大学土木工程学院, 江苏南京 210096; 2. 国电环境保护研究院, 江苏南京 210013; 3. 上海霍林化工设备工程有限公司, 上海 200127)

摘要:采用体积平均法建立了描述散堆填料塔内气、液两相的流动模型;在双膜理论的基础上建立了平均体积传质模型。通过数值计算,获取了在不同液气比下塔内流体速度、孔隙率分布、压力分布及脱硫效率,并就压力损失和脱硫效率与实验值进行了对比,预测值与实验值吻合较好,趋势完全一致。分析填料塔内海水的速度分布矢量图和填料塔中间高度断面上的速度分布图发现,靠近壁面处存在着显著的壁流现象,并在沿流方向上液体有向壁区积聚的趋势,壁流现象变得更严重。由3种填料径向孔隙率分布图可看出,近壁面处的孔隙率明显高于中间区域,表明这是形成壁流的原因所在。

关键词:海水脱硫;散堆填料;数值模拟;传质计算

中图分类号:TQ085.47

文献标识码:A

文章编号:0253-4320(2011)03-0077-05

CFD simulation and calculation of mass transfer of random packing columns within seawater desulfurization

GAO Mei-shan¹, WANG Shi-he¹, WANG Xiao-ming², GUO Ming-chun³

(1. College of Civil Engineering, Southeast University, Nanjing 210096, China; 2. State Power Environmental Protection Research Institute, Nanjing 210013, China; 3. Shanghai Huolin Engineering Plastics Co., Ltd., Shanghai 200127, China)

Abstract: With the volume average method, gas-liquid two-phase flow CFD model is established to describe seawater desulfurization in random packing column. Based on the two-film theory, the average volumetric mass transfer model is established. By numerical calculation, the flow velocity, porosity distribution, pressure distribution and desulfurization efficiency of different liquid/gas ratio are obtained. Pressure loss and desulfurization efficiency are compared with experimental data, the prediction results and experimental results are well consistent, which is exactly the same trend. Combination of seawater velocity vector in packed columns and the velocity profile of the section on the middle high of the paced tower, it is found there is a significant 'wall flow' phenomena, and there is a accumulation trend near the wall along the direction of the liquid flow, and the wall flow becomes much more serious. According to the chart of the three kinds of filler porosity distribution on the radial direction, it can be seen that porosity near the wall is significantly higher than that of the middle region, it is stated that this is the reason for the formation of wall flow.

Key words: seawater desulfurization; random packing columns; CFD simulation; calculation of mass transfer

海水脱硫是以天然海水作为吸收剂脱除烟气中SO₂的湿法脱硫技术,是海水直接利用的一个重要领域。海水烟气脱硫工艺的应用研究已经进行了约30年,20世纪八九十年代有了快速增长。目前,关于海水脱硫的研究主要集中于提高脱硫效率、简化设计、减小设备尺寸、降低设备投资、降低运行费用以及排放海水对脱硫效率影响方面的研究。海水脱硫的核心是烟气与海水的接触吸收传质过程,该过程的气液接触传质是在脱硫塔中进行的。填料塔是以塔内的填料作为气液两相间接接触构件的传质设备,工业上广泛用于精馏、吸收、萃取等诸多领域。海水脱硫通常都是采用散堆填料,目前对海水脱硫

散堆填料的流体及传质计算方面的研究较少。国内外众多学者对散堆填料塔或固定床内的流体流动进行了实验及模型研究,认为只有将正确的速度分布模型嵌入到填料塔或固定床的传热、传质过程设计模拟中,才能得到正确的浓度、温度场。尽管文献上提供了许多描述散堆填料塔内液相流动分布的数学模型^[1-4],但都是纯经验的,不能正确地描述液相分布。本文以国电环境保护研究院在秦皇岛热电厂的中型海水脱硫试验塔为模型,采用3种工业型填料进行了大量的海水脱硫各种变工况实验,以实验中测量的压损数据拟合获得3种填料的干损及湿损公式。在平均体积法的基础上,将Brinkman方程与

收稿日期:2010-12-17;修回日期:2011-01-26

基金项目:国家“863”计划(2007AA061801)项目资助

作者简介:高梅杉(1975-),女,博士生,主要从事大气污染控制方面的研究,sandy_gms@163.com。

上述获得的压损方程相结合,并且用孔隙率分布函数替代 Ergun 方程中的平均孔隙率,建立模型,获得海水在填料塔内表观流速的径向分布。同时在双膜理论的基础上建立平均体积传质模型,获得各种工况下填料塔内 SO₂ 浓度分布。对海水脱硫填料塔的流体及传质计算进行研究可以深入了解海水脱硫中气液传质过程,对海水脱硫中各种脱硫效率的影响因素及影响原因有更深入的理解,可以以较低的成本进行变参数、变工况测试,为工程设计提供了具有指导意义的依据。

1 模型的建立

1.1 体积平均计算流体力学模型

模型基本假设:①液相在散堆填料塔内流动为稳态的、轴对称;②流体不可压缩;③气体为活塞流运动。

根据体积平均连续性方程及体积平均动量守恒方程式建立流体力学模型^[5]。模型中的散堆填料床的孔隙率分布函数 γ 采用式(1)的关联式进行计算^[6]:

$$\gamma = \gamma_{\infty} + \frac{(1 - \gamma_{\infty})}{2} Er \left[(1 - 0.3p_d) \cdot \cos\left(\frac{2\pi}{c_r + 1.6Er^2} \frac{R-r}{p_d d_p} + 0.3p_d\right) \right] \quad (1)$$

液相总持液量 h_L 等于液相静持液量 h_s 以及液相动持液量 h_d 之和。在文献上有许多关于散堆填料截内气液两相逆流操作持液量的研究及其预测关联式,这里采用 Engel 的关联式计算静持液量 h_s ,采用 Stichlmair 关联式计算动持液量 h_d ^[7-8]。

$$h_s = 0.033 \exp\left(-0.22 \frac{g p_L}{\sigma_L a_T^2}\right)$$

$$h_d = 0.555 \left(\frac{a_T U^2}{g \gamma^{4.65}}\right)^{1/3} \quad (2)$$

体积平均动量守恒方程中^[5]的 F_{LS} 代表散堆填料施加给液体的阻力, F_{LG} 为气液两相流动时气液两相间的相互作用力。

根据填料表面被液体完全覆盖的假设,可以采用 Ergun 提出的半经验公式计算填料对液体流动造成的阻力 F_{LS} ^[9]。

公式中的 2 个常数分别取为 $A = 150, B = 1.75$ 。

至于气液两相流动时气液两相间的相互作用力 F_{LG} 的计算,现有的计算方法如 Robbins 根据大量实验数据总结出气体通过湿填料塔时总压力 Δp_t 可表示为^[10]:

$$\Delta p_t = \Delta p_d + \Delta p_L \quad (3)$$

Δp_d 为干填料时气体压力降, Δp_L 为存有液体时气液间相互作用导致的压力降。

气液间的相互作用力 F_{LG} 可以表示为:

$$F_{LG} = \frac{\Delta p_L}{|U_{slip}|} U_{slip}, \text{ 其中 } U_{slip} = U_G - U。$$

1.2 体积平均计算传质学模型

1.2.1 海水脱硫填料塔内的传质过程

在填料塔内完成的 SO₂ 传质分离过程中, SO₂ 靠扩散由气相穿过界面传向液相,构成相际间传质过程,达到使 SO₂ 从烟气中分离的目的。SO₂ 由气相穿过界面向液相传递的过程,并非单纯的分子扩散,而是以对流扩散(包括分子扩散和涡流扩散)的方式进行,对流扩散不仅与流体的物理性质有关,又与流体的流动状况、相际间的平衡关系及传质设备的几何特性等因素有关,情况十分复杂^[11]。

在填料塔内,由于在填料表面能够形成较为固定的相界面,两相流体的流动速度不高,湍动程度亦不大,所以应用双膜理论来解释填料塔内的传质过程,仍不失为一个较为理想的理论基础。

SO₂ 溶解于水的过程属于化学吸收中典型的被吸收组分与吸收剂相互作用的例子。

1.2.2 体积平均计算传质学模型

SO₂ 体积平均浓度方程^[5]中的 Sc 可采用双膜理论中的单位体积内气体中 SO₂ 被液体吸收的质量, Sc 表示为:

$$Sc = k_L a_{\text{eff}} M_{\text{SO}_2} (X_{i,\text{SO}_2} - X_{\text{SO}_2}) \quad (4)$$

其中 k_L 为液相传质系数, a_{eff} 为单位体积内的有效传质界面面积, M_{SO_2} 为 SO₂ 的摩尔质量, E 为由于化学反应而使传质系数提高的增强因子, X_{i,SO_2} 、 X_{SO_2} 分别为 SO₂ 在气液界面、液相主体的摩尔浓度,认为吸收的 SO₂ 完全参与反应,因而液相主体的 X_{SO_2} 为零。

对于填料塔内单组分的传质系数(k_L 和 k_g) 采用李锡源等^[12-13]修正后的传质系数计算公式。SO₂ 在液界面处的浓度 X_{i,SO_2} 可由 Henry 定律得到:

$$X_{i,\text{SO}_2} = H p_i y_{\text{SO}_2} \quad (5)$$

p_i 为气相总压力(大气压, atm), y_{SO_2} 为气相中的 SO₂ 的体积分数, H 为 SO₂ 在海水溶液中的 Henry 常数 (kmol/m³ · atm), 其以温度 T (K) 为因变量的修正公式见式(6)^[13]:

$$\ln \frac{1}{H \times 10^3} = A/T + B \ln T + CT + D \quad (6)$$

其中 $A = -5578.8, B = -8.76152, C = 0, D = 68.418$ 。

2 模拟过程

2.1 计算区域及边界条件

图1为计算区域示意图,整个区域为轴对称结构,塔顶、塔底分别为海水入口和烟气入口条件,右边界为墙壁条件。

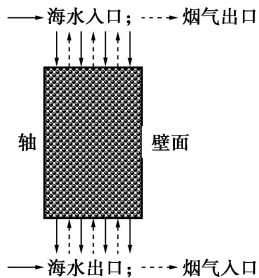


图1 计算区域示意图

塔顶设为海水入口,塔底为海水出口,在塔顶设置海水初始温度,塔底分别设置烟气初始温度及SO₂的初始浓度。由于在软件中不能设置重叠边界(即为海水入口,同时又是烟气出口),需要应用UDS(User Defined Scalar)进行处理。添加3个UDS分别求解SO₂浓度变化、海水温度及烟气温度控制方程。FLUENT中标量方程的通式见式(7):

$$\frac{\partial \phi_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (F_i \phi_k - \Gamma_k \frac{\partial \phi_k}{\partial x_i}) = S_{\phi_k}, k = 1, \dots, N_{\text{scalars}} \quad (7)$$

塔顶处设置为速度进口边界,需定义海水速度及湍流特性参数。海水速度由实验中所测海水流量而得,湍流特性参数由下列经验公式得出。

$$k_{in} = 0.003 U_{in}^2(r) \quad (8)$$

$$\varepsilon_{in} = 0.09 k_{in}^{1.5} / d_H \quad (9)$$

式(9)中散堆填料水力直径 d_H 表示为 $d_H = 4\gamma_{\infty} / [a_T(1 - \gamma_{\infty})]$ 。对于烟气温度与SO₂浓度方程的求解,在此边界上取充分发展条件,设定海水的入口温度。

塔底:对海水流动方程,此边界设为压力出口边界,规定此处的静压值。为求解添加的3个UDS方程,需要在此边界上规定SO₂的初始浓度值、烟气的初始温度,并认为海水温度在充分发展。

对称轴:在对称轴边界上,所有变量的径向能量变化率为0,即 $\partial \phi / \partial r = 0$ 。

墙壁条件:墙壁处认为无滑移边界,即速度、湍动能及湍动能耗散率都等于0。采用标准壁面函数计算近壁区的速度及湍流变量的分布。

2.2 FLUENT 软件及求解方法

FLUENT是目前国际上比较流行的商用CFD软件包。FLUENT软件采用控制体积法离散控制偏

微分方程,离散化格式有一阶上风(First Order Upwind)、二阶上风(Second Order Upwind)、POWER定律和QUICK格式。在本文的计算中都采用了一阶上风格式,本文的计算也采用SIMPLE算法。

3 实验及模拟结果

本文采用了3种填料作为研究对象,分别为空心球填料、雪花环填料和蜂窝环填料。它们的特性参数如表1所示。由于本文所研究的几种填料为新型填料,不能应用已有的经验公式来获得总压损。在实验中测量了应用3种不同散堆填料时,一定的气体流量下不同液气比的气体压力损失,根据这些数据可以得出气体通过这几种类型填料时的压力损失特性。把气体总压力损失分为干损与湿损2部分,干损即为气体流过干填料床时的压力损失,湿损为气体流过被海水浸湿的填料床时的压力损失。对于这3种不同填料,认为干损相等,而湿损随着填料的变化会发生相应的改变。

表1 填料特性参数

填料名称	尺寸规格/mm	比表面积/ $m^2 \cdot m^{-3}$	孔隙率	堆密度/ $kg \cdot m^{-3}$	堆积个数/ m^{-3}
多面球	$\Phi 50 \times 50 \times 1.5$	237	0.90	82.8	11500
雪花环	$\Phi 90 \times 34 \times 1.5$	138	0.97	49.0	4900
蜂窝环	$\Phi 88 \times 22 \times 1.25$	142	0.92	67.0	5500

在直径为1.2 m、床高0.6 m的雪花环填料塔上,分别测量了不同烟气流速时,气体流过干床的压力损失,表2为不同烟气流速下烟气流经填料塔的单位长度压力损失测量值,对此表的数据按照Ergun公式进行拟合,图2为此组数据的拟合图。此干压损公式同时适应于其他2种填料。向填料塔内通入海水之后,由于海水流过填料塔内孔隙会造成烟气压力损失的大幅提高,因此还需计算出填料塔在不同液气比操作条件下的烟气流动的压力损失。图3为根据实验数据拟合出的填料塔湿床烟气压损随液气比升高的变化图,其中雪花单位湿压损(Pa/m)的计算公式为: $y = 139.84 \cdot \exp(x/5.465) - 166.2$,此公式同样适用于蜂窝环填料。而多面球单位湿压损的计算公式为: $Y = 357.2 \cdot \exp(X/7.737) - 213.54$,X为液气比,Y为单位长度上压力损失(Pa/m)。在测试散堆填料塔海水脱硫效率的实验中,详细地测量了烟气通过填料塔的压力损失和

表 2 雪花环填料干床压力损失测量值

烟气流速/ $m \cdot s^{-1}$	1.46	2.16	2.36	2.75	3.50
单位长度压损/ $Pa \cdot m^{-1}$	24.3	31.2	70.7	173.8	188.9

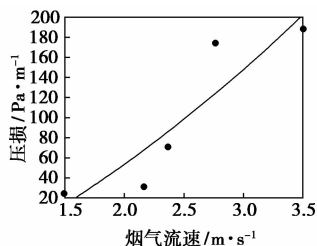


图 2 雪花环填料干床压力损失随速度分布图

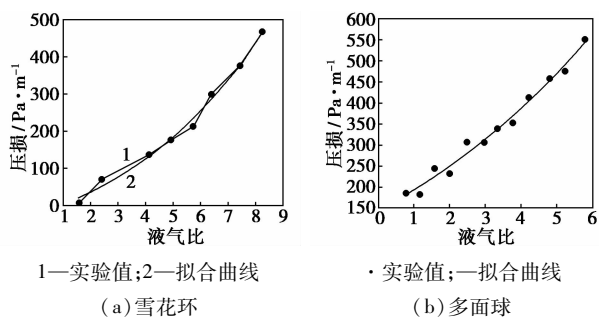


图 3 单位湿压损与液气比的关系

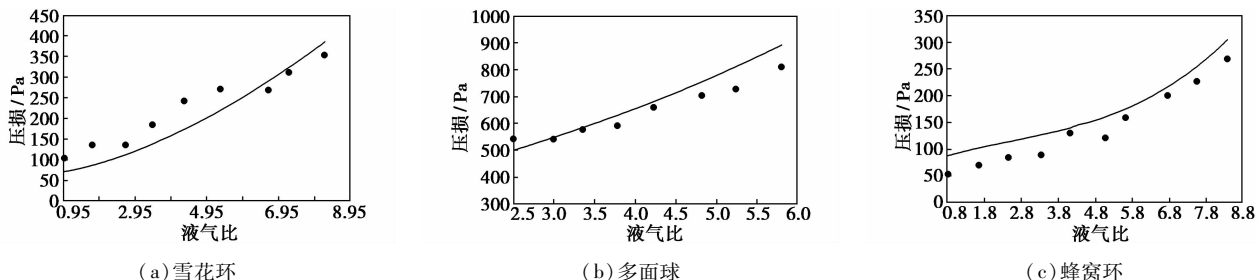


图 4 压力损失的预测值与实验值对比图

3.2 脱硫效率

图 5 为在不同液气比下脱硫效率的预测值与实验值的对比图(数据点为实验值,曲线为预测值曲线)。图 5(a)为雪花环填料高度为 0.6 m、当烟气流量 11 000 m^3/h 时,在不同液气比下脱硫效率的对比图;图 5(b)为多面球填料高度为 1.2 m,当烟气流量 12 000 m^3/h 时,不同液气比下脱硫效率的

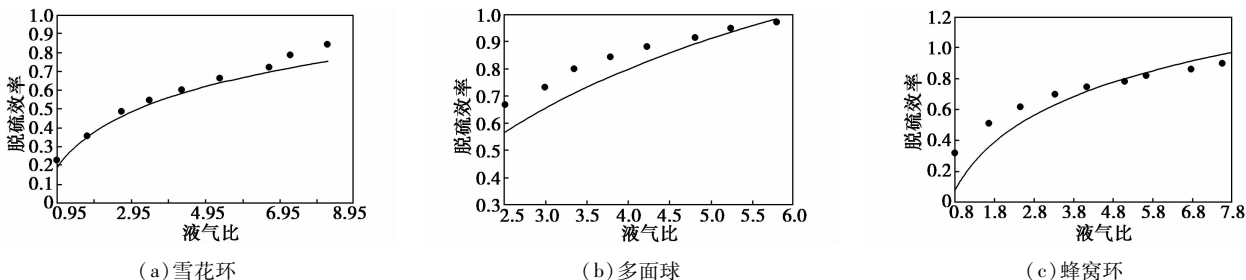


图 5 脱硫效率的预测值与实验值对比图

烟气进、出口处的 SO_2 气体含量,因此以烟气压力损失和脱硫效率 2 个指标,作为检测所建立数值模型准确程度的依据。

3.1 压损

图 4 为在不同液气比下,压力损失的预测值与实验值对比图(数据点为实验值,曲线为预测值曲线)。图 4(a)为雪花环填料高度为 0.6 m、当烟气流量为 11 000 m^3/h 时,在不同液气比下烟气压力损失的对比图;图 4(b)为多面球填料高度为 1.2 m,当烟气流量 12 000 m^3/h 时,不同液气比下烟气压力损失的对比图;图 4(c)为蜂窝环填料高度为 1.2 m,当烟气流量为 12 000 m^3/h 时,不同液气比下烟气压力损失的对比图。从图 4 中可看出,压损数值计算结果与测试结果吻合性较好,预测值与实验测量值略有偏差,这是由于实验测量的压损值是取进出口的中心处的压强计算,而预测值是取的进出口的平面平均值计算的。从图 4 可看出,预测结果与测试值的趋势完全一致,从而说明以实验数据进行拟合获得压损公式进行数值模拟计算的方法是可行的。

对比图;图 5(c)为蜂窝环填料高度为 1.2 m,当烟气流量为 12 000 m^3/h 时,不同液气比下脱硫效率的对比图。图 4 中,脱硫效率的预测值与实验测试计算结果吻合性较好,预测结果与测试值的趋势完全一致,预测值略低于实验计算值,这是由于模型中未详细考虑海水脱硫的化学反应机理,仅作为溶解和化学吸收来处理,未考虑海水本身存在催化作用的原因。

3.3 海水分布

图6为塔内海水的速度分布矢量图,图7为填料塔中间高度断面上的速度分布图,结合2图可发现,靠近壁面处存在着显著的壁流现象,并且沿着液体的流动方向上,液体有向塔壁区附近积聚的趋势,壁流现象

变得更严重。图8为雪花环填料径向方向上的孔隙率分布图,从图8可看出,在靠近塔壁处的孔隙率明显高于中间区域,这是形成壁流的原因所在。从图8可看出,在横截面上的速度在近壁面处最大,径向方向上呈周期性下降,而在塔的中心部位速度值基本相同。

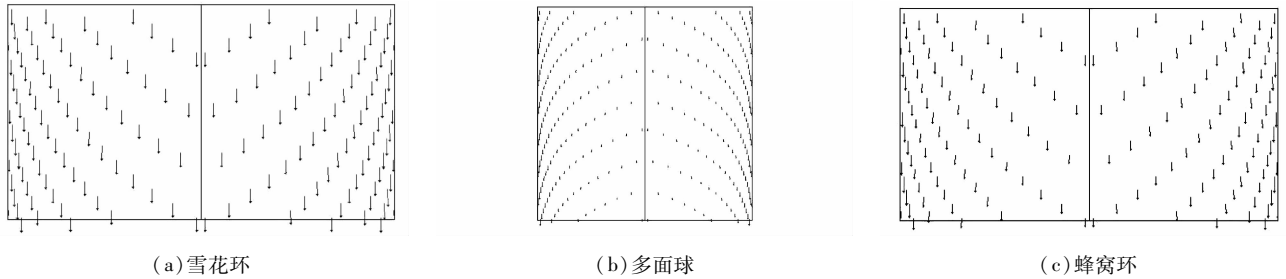


图6 海水速度矢量分布图

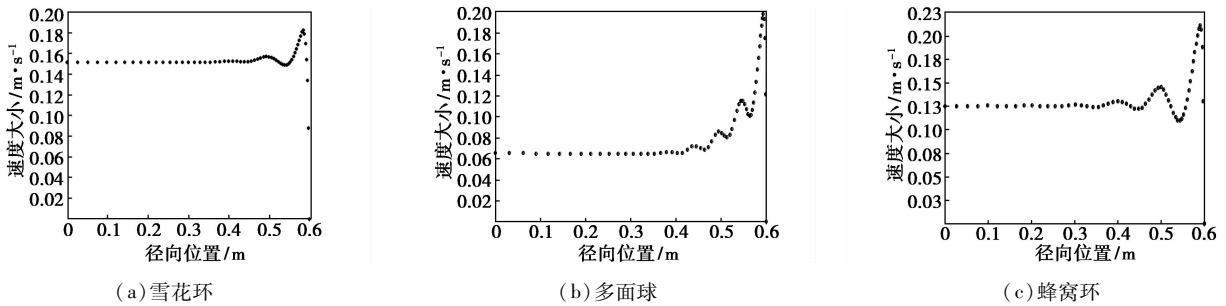


图7 填料塔中间高度断面海水速度分布图

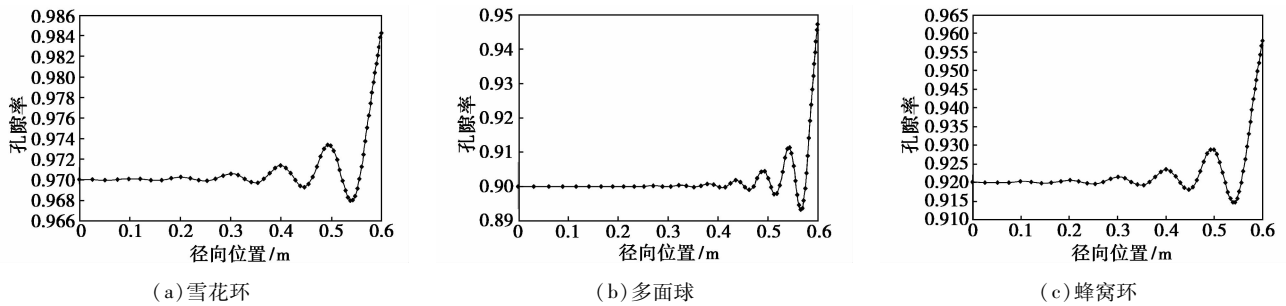


图8 径向孔隙率分布图

从图8可看出,孔隙率从壁面处开始呈周期性下降,在塔中心部位孔隙率保持在为技术参数的数值。

4 结论

(1) 本文采用体积平均法,建立了描述散堆填料塔内气、液两相的流动模型。模型中忽略了对烟气流动的数值求解,假设气体在塔内为活塞流运动,且海水不可压缩。在双膜理论的基础上建立了平均体积传质模型。通过数值计算,获得了在不同液气比下塔内流体速度、孔隙率分布、压力分布及脱硫效率,并就压力损失和脱硫效率与实验数据对比。预

测值与实验值吻合较好,趋势完全一致。说明在模型中采用的计算烟气通过填料塔压损的方法是可行的,用双膜理论建立脱硫过程中的传质模型是可行的。

(2) 根据应用3种填料塔内海水的速度分布矢量图和填料塔中间高度断面上的速度分布图,发现近壁面处存在着显著的壁流现象,并且沿液流方向上,液体有向塔壁区附近积聚的趋势,壁流现象变得更严重。

(3) 根据3种填料径向方向上的孔隙率分布图,从图上可看出在靠近壁面处的孔隙率明显高于中间区域,说明这是形成壁流的原因所在。

(下转第83页)

依照化学品存在场所和生命周期的不同,分别由相应化学品主管当局对化学品生产、化学品加工处理、化学品运输、工业化学品销售和使用、日用消费品销售和使用、化学品废物处置,以及化学品环境污染实施严格管理与控制(见图1)。

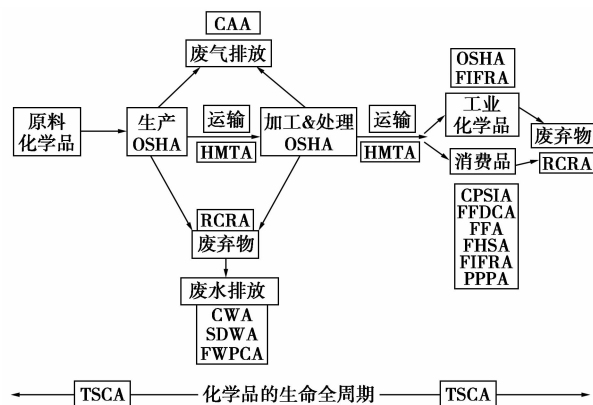


图1 美国化学品安全管理法规体系图

2 美国《有毒物质控制法》及改革必要性分析

2.1 TSCA 介绍

美国环保署1976年颁布的《有毒物质控制法》实施至今已有30余年。TSCA对化学品生命周期中的各个阶段(生产、加工、销售、使用、处置)进行监督与管理。

对于新化学物质(未列入《TSCA 现有化学物质名录》的化学物质),TSCA 实行“事前制造告知(PMN)制度”,规定化学品在生产或进口之前,生产商或进口商有义务向美国环保署通报化学品的标签数据、生产工艺、产量、预期用途,以及已知的人类健康和环境影响数据。一旦发现某一化学品对人类健康和环境构成过高风险,环保署有权禁止或限制该化学品的生产和使用。

对于法规颁布之前已经投入美国市场的现有化学物质,TSCA 规定环保署有权审查和控制化学品的重要新用途,并根据 TSCA 机构测试委员会(ITC)建议的优先名单,要求生产商补充实施毒性测试;对有过高风险性的化学品,环保署可要求企业提供标识,限制或完全禁止该化学品的使用或生产。目前,环保署已依据 TSCA 要求,对多氯联苯、石棉、氢氟酸、涂料中的铅、六价铬等对人体健康或环境构成严重危害的化学品实施了重点管理与控制。

2.2 TSCA 改革必要性分析

美国 TSCA 实施至今已有 30 余年,在这期间,美国环保署未曾对法规的核心内容实施修订。目前美国生产和商业使用的化学品已增至约 8 万种,并且这一数字还正在以平均每年新增 1 000 种新化学品的速率增长,而 TSCA 中管理的化学品仅有 6.2 万种。因此,无疑众多在美国市场已经广泛生产和使用的化学品存在着严重数据缺口,具有重要安全

(上接第 81 页)

参考文献

- [1] Mantle M D, Sederman A J, Gladden L F. Single- and two-phase flow in fixed-bed reactors; MRI flow visualization and lattice-Boltzmann simulations [J]. *Chemical Engineering Science*, 2001, 56 (2): 523 - 529.
- [2] Sederman A J, Johns M L, Bramley A S, *et al.* Magnetic resonance imaging of liquid flow and pore structure within packed beds [J]. *Chemical Engineering Science*, 1997, 52 (14): 2239 - 2250.
- [3] Jaekeun Park S J G. Mapping flow and dispersion in a packed column by MRI [J]. *AIChE Journal*, 1999, 45 (3): 655 - 660.
- [4] 张泽廷, 王树楹, 余国琮. 填料塔传质模型的研究: 二维混合池随机模型 [J]. *化工学报*, 1989, 40 (1): 53 - 59.
- [5] 刘国标. 计算传递学及其在填料床传质与反应过程中的应用 [D]. 天津: 天津大学, 2006.
- [6] Liu S J. A continuum model for gas-liquid flow in packed towers [J]. *Chemical Engineering Science*, 2001, 56: 5945 - 5953.
- [7] Engel V, Stichmair J, Geipel W. A new model to predict liquid holdup in packed columns-using data based on capacitance measurement techniques [J]. *Inst Chem Eng Symp Ser*, 1997: 939 - 947.
- [8] Stichmair J, Bravo J L, Fair J R. General model for prediction of pressure drop and capacity of countercurrent gas/liquid packed columns [J]. *Gas Separation and Purification*, 1989, 3 (3): 19 - 28.
- [9] Ergun S. Fluid flow through packed columns [J]. *Chemical Engineering Progress*, 1952, 48: 89 - 94.
- [10] Robbins L A. Improve pressure-drop prediction with a new correlation [J]. *Chemical Engineering Progress*, 1991, 87 (5): 87 - 90.
- [11] 张受谦. 化工手册 [M]. 济南: 山东科学技术出版社, 1986.
- [12] 李锡源, 谈迺, 李阿娜. 三种开孔环形填料传质性能的研究 [J]. *化工学报*, 1984, 3 (4): 375 - 385.
- [13] 麦本熙. 几种开孔填料的性能研究 (四): 传质系数关联式 [J]. *化学工程*, 1986, 4 (4): 1 - 6.
- [14] Xia J, Rumpf B, Maurer G. Solubility of sulfur dioxide in aqueous solutions of acetic acid, sodium acetate, and ammonium acetate in the temperature range from 313 to 393 K at pressures up to 3.5 MPa; Experimental results and comparison with correlations/predictions [J]. *Industrial Engineering Chemistry Research*, 1999, 38 (3): 1149 - 1158. ■