

信息技术应用

焦炉煤气脱硫吸收塔两相流场 计算流体力学数值模拟

郝琳¹, 刘睿¹, 党乐平¹, 戴成武², 王英丽², 卫宏远¹

(1. 天津大学化工学院, 天津 300072; 2. 中冶焦耐工程技术有限公司, 辽宁鞍山 114002)

摘要:以商业化软件 FLUENT 为计算平台, 将计算流体力学 (CFD) 与两相流流动结合起来预测复杂吸收塔内的两相流动情况。计算在三维体系中展开, 在满足收敛以及质量守恒条件后, 得到了稳态条件下的单相流场, 并引入欧拉多相模型和多孔介质模型, 对单相流含填料流场和两相流场进行了计算。计算结果表明, 使用标准 $k-\varepsilon$ 湍流模型和欧拉-欧拉多相流模型可以模拟出脱硫吸收塔内的复杂流场, 呈现出极好的对称性并且流场的各项性质定性正确, 可以确定塔结构及操作参数均已达到要求; 多孔介质项对于塔内两相逆流的速度差起到了较好的平衡作用, 与填料塔中的预期结果定性相符, 同时说明该模型可以较好地完成对散装填料的模拟, 在计算中表达出其应有的性质。

关键词: 计算流体力学; 多相流模型; 脱硫吸收塔; 欧拉模型

中图分类号: TQ028.1+5; TQ015.9

文献标识码: A

文章编号: 0253-4320(2011)06-0088-04

Two-phase flow CFD simulations of an absorption tower for coke-oven gas desulfurization

HAO Lin¹, LIU Rui¹, DANG Le-ping¹, DAI Cheng-wu², WANG Ying-li², WEI Hong-yuan¹

(1. School of Chemical Engineering and Technology, Tianjin University, Tianjin 300072, China;

2. ACRE Coking & Refractory Engineering Consulting Corporation, Anshan 114002, China)

Abstract: Using a commercial code FLUENT, the computational fluid dynamics (CFD) combined with the two-phase flow are used to predict the complex flowage condition of two-phase flow. The 3-D geometric model of the desulfurized tower is constructed to simulate the single-phase and two-phase flow. Based on the convergent result of single-phase flow without packing, Euler multi-phase model and porous medium model are added to simulate single-phase flow with packing bed and two-phase flow. The results show that the standard $k-\varepsilon$ turbulent model and Eulerian multi-phase model can apply to simulate the complex flow in desulfurizing absorption tower, which present good symmetry and is qualitatively correct. So it's conformed that the tower structure and operational parameters all meet the design requirement. The porous medium can balance the velocity difference of two phases' countercurrent well, which qualitatively accords with the theoretic predictive results in packed tower. It also shows that this model performs well in simulating random packing.

Key words: computational fluid dynamics; multi-phase model; desulfurizing absorption tower; Euler model

煤的气化在煤化工中占有重要的地位, 脱除煤气中含有的大量酸性气体, 如 H_2S 、 HCN 等尤其重要。填料塔在脱硫系统中应用广泛, 塔内发生的多相流更是一种非常重要的流动现象。对于一些简单的流动情况, 可通过目前的经验或半经验关联式进行预测。但对于结构较为复杂的双段脱硫吸收塔, 这些关系式并不能呈现出整体的流动效果^[1-3]。计算流体力学 (computational fluid dynamics, CFD) 作为流体力学的一个新兴的重要分支, 与实验研究相比较, 具有成本低、速度快、资料完备、可以模拟真实及理想条件等优点, 能够避开高温、高压、易燃、易爆等操作难度较大的实验所带来的问题, 弥补和克服传

统方法的缺陷, 从而指导工程的设计和优化。本文将 CFD 与两相流流动结合起来预测了复杂吸收塔内的两相流动情况。

1 建模

1.1 模型基本假设

为模拟 H_2S 被 K_2CO_3 溶液物理、化学吸收过程, 基于随机堆砌填料吸收塔作如下假定^[4]:

(1) 气相为连续相, 液体相为离散相;

(2) 气体吸收操作过程为稳态, 且液体不可压缩, 即液体密度不随液体温度和浓度的变化而变化 (工业操作中液体温度和浓度的变化不足以导致

收稿日期: 2011-02-21; 修回日期: 2011-04-21

基金项目: 国家重点“863”项目 (2009AA063303)

作者简介: 郝琳 (1978-), 女, 博士, 研究方向为化工过程安全、工业结晶及模拟, 022-24700287, haolin@tju.edu.cn; 卫宏远 (1965-), 教授, 博士生导师, 研究方向为流体力学计算、工业医药结晶、煤化工、化工过程安全, 通讯联系人, 022-27400287, David.wei@tju.edu.cn。

液体密度发生明显变化);

(3) 仅仅气相中 H₂S 组分被碳酸钾溶液吸收, 溶剂水不向气相中传递;

(4) 溶解热和反应热产生的同时被液相吸收, 忽略填料对热传导的影响;

(5) 忽略气相与液相间热量传递;

(6) 气体吸收过程是绝热的, 即吸收塔与环境之间没有热量交换。

基于以上假设, 计算中需要考虑的模型有湍流模型和多相流模型(含多相湍流模型)。

1.2 理论方程—湍流方程

由于 Reynolds 时均方程不封闭, 因此在计算的过程中需要采用“湍流模型”方程。 $k-\varepsilon$ 模型作为两方程模型的代表, 较单方程模型和多方程模型而言, 是最简单的完整湍流模型, 它同时考虑了对流和扩散对脉动速度的影响, 因而被广泛地应用于有回流的流动及三维边界层流动。其中, 标准 $k-\varepsilon$ 模型更是具有适用范围广、经济、精度合理等优点, 同时考虑到只有 $k-\varepsilon$ 模型适于后续计算中的多相流模型, 因此选择标准 $k-\varepsilon$ 模型进行湍流计算^[5]。

标准 $k-\varepsilon$ 模型是半经验公式, 由实验现象中总结得出。在稳态中, 对于单相而言, 其 k 方程和 ε 方程分别如下:

$$\rho u_x (\partial k / \partial x) + \rho u_y (\partial k / \partial y) = \partial / \partial y [(\mu + \mu_t / \sigma_k) \partial k / \partial y] +$$

(上接第 87 页)

2 实施效果分析

在对各阶段出水进行研究的基础上, 对采用创新工艺的系统处理效果进行了连续监测, 并对其进行分析, 结果见表 2。

表 2 创新工艺处理效果

监测项目 (平均值)	原水	水力旋流器		沉降罐		精细过滤器		标准
		进水	出水	进水	出水	进水	出水	
油质量 浓度/ mg·L ⁻¹	386.8	386.8	120.7	73.22	3.5	4.12	1.34	5
悬浮固体 量浓度/ mg·L ⁻¹	187.4	187.4	109.2	99.2	10.5	7.59	3.77	5
粒径中值/ μm							1.419	2

创新工艺对聚驱污水处理效果, 出水含油质量浓度平均 1.34 mg/L, 达标率 100%; 出水悬浮物质

$$\mu_t (\partial u_x / \partial y)^2 - \rho \varepsilon - 2\mu (\partial k^{1/2} / \partial y)^2 \quad (1)$$

$$\rho u_x (\partial \varepsilon / \partial x) + \rho u_y (\partial \varepsilon / \partial y) = \partial / \partial y [(\mu + \mu_t / \sigma_\varepsilon) \partial \varepsilon / \partial y] + C_1 (\varepsilon / k) \mu_t (\partial u_x / \partial y)^2 - C_2 \rho \varepsilon^2 / k - (20 \mu \mu_t / \rho) (\partial^2 u_x / \partial y^2)^2 \quad (2)$$

方程中, C_1, C_2 为常量; σ_k 和 σ_ε 是 k 方程和 ε 方程的湍流普兰德数; μ_t 是湍流粘度, 可由 k 和 ε 计算:

$$\mu_t = \rho C_\mu k^2 / \varepsilon \quad (3)$$

式中, C_μ 为常量。模型中的常量 $C_1, C_2, C_\mu, \sigma_k, \sigma_\varepsilon$, 通常可以使用默认值:

$$C_1 = 1.44, C_2 = 1.92, C_\mu = 0.09, \sigma_k = 1.0, \sigma_\varepsilon = 1.3$$

这些默认值是由空气、水的基本湍流剪切流动试验得来的, 包括均匀剪切流和等方性衰减湍流。这些数据已经被证明能很好地处理墙壁束缚和自由剪切流。

1.3 建立物理模型

为了提高收敛性和计算效率, 在上述简化的基础上对吸收塔模型计算做进一步的简化: 忽略塔底进气管与 $x-z$ 平面的交角, 改为平行进入, 以求在不影响全塔流场性能的前提下尽可能地简化模型; 将全塔划分为上下两段, 分别划分网格, 各自做独立计算, 求解其单相及多相流场。由于上下两段塔仅气相连通, 因此分开计算并不会引入误差, 同时还可避免上下两层在计算过程中互相影响, 从而有效提高收敛速度。

量浓度 3.77 mg/L, 达标率为 100%; 粒径中值 $\leq 2 \mu\text{m}$, 达标率 100%。

3 结语

创新工艺的水力旋流除油器对于浮油去除效果较好, 沉降罐处理效率较高, 工艺简化, 对含聚污水的处理效果能够达到高渗透层水质指标, 并且出水水质稳定, 可替代传统“混凝沉降 + 一级过滤”工艺。创新工艺的整体效果为出水含油质量浓度达标率 100%, 悬浮物质量浓度达标率 100%。

参考文献

[1] 张李锋, 尹先清. 油田水处工艺及设备进展[J]. 辽宁化工, 2007, 36(11): 748-751.
 [2] 镇祥华, 于水利, 庞焕岩, 等. 超滤膜处理油田采出水用于回注的试验研究[J]. 环境污染与防治, 2006, 28(5): 329-333.
 [3] 张雷, 李思强, 苗月. 采用微絮凝-过滤工艺处理油田采出水[J]. 化工环保, 2010, 30(2): 156-158.
 [4] 孙吉鹏, 童熊, 王成行. 国内外新型水力旋流器的发展与应用[J]. 矿山机械, 2009, 37(1): 107-112. ■

吸收塔模型如图 1(a) 所示, 简化后的模型如图 1(b) 所示。上下两段计算模型的俯视简图分别如图 2(a)、(b) 所示。

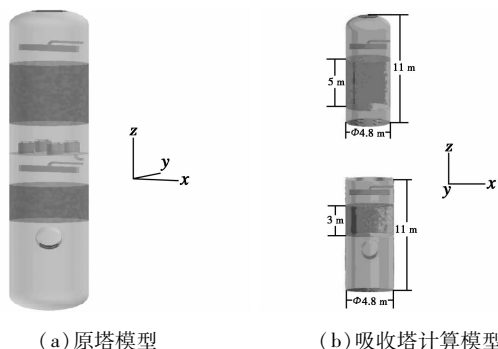


图 1 吸收塔计算模型

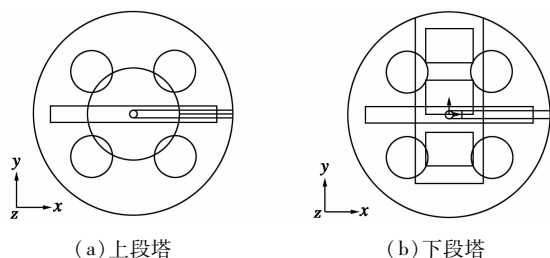


图 2 吸收塔计算模型俯视图

2 计算结果及讨论

2.1 单相流(气相)湍动场

多相流计算中需要先行模拟单相流场, 之后以该结果为初值进行后续多相流计算。

根据填料特性, 已知渗透性因子 $\alpha = 198.845$, 惯性阻力因子 $C_2 = 4.352055$, 由此在单相流场的基础上引入多孔项进行有填料状态的计算。边界条件设定为: 速度进口、压力出口, 计算收敛标准设定相对残差为 10^{-3} 。

本模拟中使用多孔介质项模拟填料段, 理论上填料段的速度会较无填料时下降较多, 而非填料段的速度差别有限, 另外边界层现象仍会出现, 计算结果如图 3 所示。图 4 为上、下段塔 $y = 0, 1, 2$ m 3 个平面上的气速分布图。

从图 3 中可明显看出, 引入多孔项后, 气相在填料部分(如图中阴影部分所示)分布的均匀程度明显提高。填料的作用已经得到实现, 即整体气速有所降低, 减小与逆流相(即液相)的速度差, 同时使气速在水平方向上更为平均, 有利于之后两相更加充分地接触和传质。

由图 4 可看出, 在 $y = 0, 1, 2$ m 的各个截面上, 填料区分布均已较为均匀, 需要指出的是, 上段塔

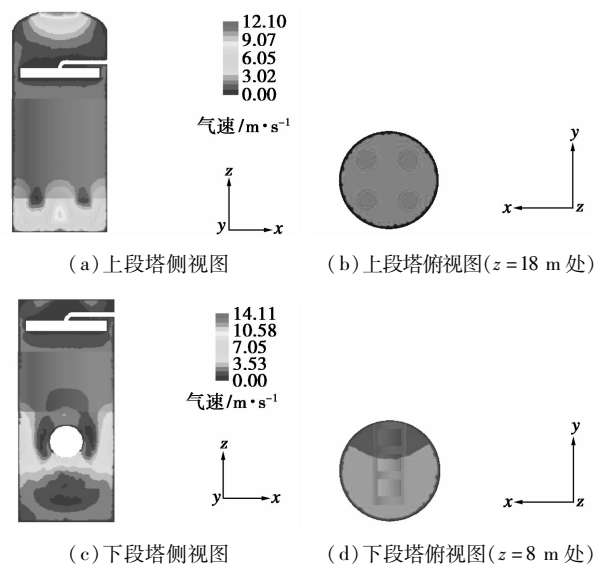


图 3 含填料状态下气相速度分布

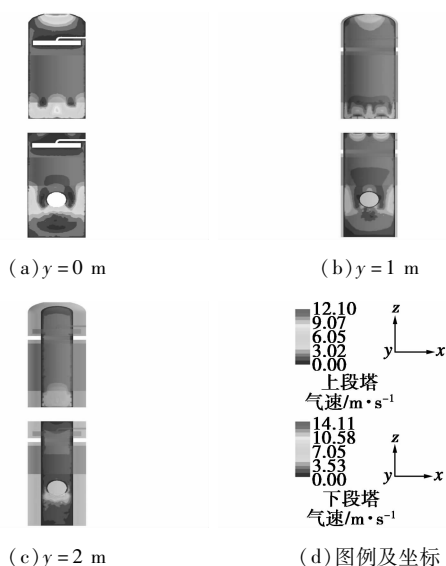


图 4 含填料状态下气相速度分布侧视图

由于气体进口位于塔底, 而下段塔位于塔的中下部, 因而上段塔几乎不存在下半段塔中出现的死角问题。

由 $y = 2$ m 的侧视图可看出, 上段塔的整体气速分布均匀度高于下段塔, 这也是由于进气管的结构所造成的。

观察下段塔图 5 ~ 图 7 可看出, 气体进入填料后经过较长的阻力拖曳后才达到速度均一化, 需要进一步观察液相引入后的结果才能预测其混合及传质效果。

以上各计算相对残差均已降到 10^{-3} 以下, 并且在若干步迭代中各项值保持稳定, 由此判定计算结果已收敛。由上述气速分析结果来看, 网格的划分及边界条件的设定都已符合后续计算的要求, 可以在此基础上加入液相进行多相流模型的计算。

2.2 多相流湍动场

在上节的计算结果上加入多相流模型进行计算。湍流模型选择标准 $k-\varepsilon$ 模型,多相流模型为欧拉-欧拉模型,边界条件设定为液相速度进口、速度出口,气相速度进口、压力出口,操作条件同前,加入重力加速度项。计算结果如图 5 所示。由图 5 中可明显看出,各段的两相分布已非常均匀,下段的气相等速面略有不平滑,这可能是由于液相加入后,液体与气体间产生摩擦,而液体会在重力作用下在塔的下段有一定的累积,其速度往往较大,气相受到密集液滴较强的曳力作用,从而引起下段塔底部液体产生不规则的涡流,影响气体速度分布。

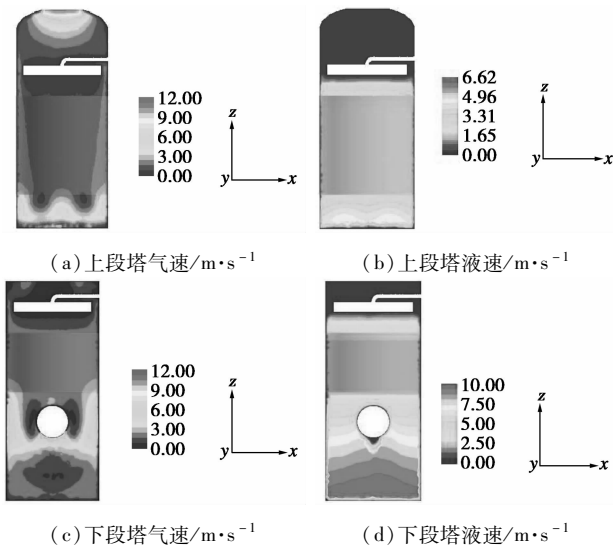


图 5 含填料状态下两相流动场速度分布

由图 5(a)和(c)可看出,经过多孔介质项的阻力作用后,液速达到了气速的一半左右,并且其分布情况较气速更为均匀,在距壁面较近处气速下降较快,而液速变化不明显。

各相的体积分数分布如图 6、图 7 所示。

由图 7 可看出,上段塔内气相分布较好,气-液相接触和缓而充分。填料上部气体浓度有所减少,这是由于液体由液体进口喷淋出后,经过一段重力作用累积,开始进入填料段,当其在填料内扩散时

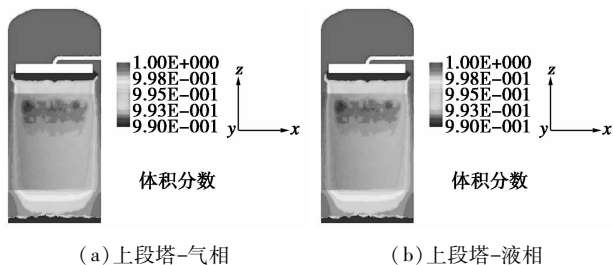


图 6 上段塔 $x-z$ 平面 ($y=0$ m) 各段两相浓度 (体积分数) 分布

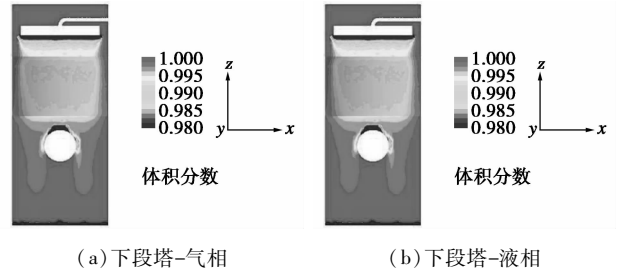


图 7 下段塔 $x-z$ 平面 ($y=0$ m) 两相浓度 (体积分数) 分布

开始受到阻力项的作用,液速骤减。与此同时气体经过填料层连续的“刹车”作用后,到此处速度降至填料内最低,因此该处表现为液相聚积,而气相浓度低于填料段的其他位置。

下段塔中各相在填料内的分布也较为理想,在本段塔内液体经过重力加速与刚刚鼓入塔内的气体接触,能够产生较充分的湍流,从而得到理想的接触混合。下段塔进料管上方的气体累积,则是由于液体自填料出口处流出时对气体产生一定液封作用的影响。

由于两相体积分数具有归一性,所以从其中任取一相浓度分析即可,此处取离散相。对上下两段空塔做水平与纵向的液相浓度分析,结果见图 8、图 9。

图 8、图 9 分别表示上、下段塔的填料处水平液相浓度分布,其中,图 8 所示为 $z=18$ m 处,图 9 所示为 $z=8$ m 处,均处于各段填料的中上位置。图中清楚示出,水平方向上,填料段内的液相浓度分布均匀, $z=8$ m 处和 $z=18$ m 处体积分数分别分布于 0.6% 和 0.8% 左右,即在接触混合的主要位置填料段,多孔介质项对填料的模拟结果令人满意。

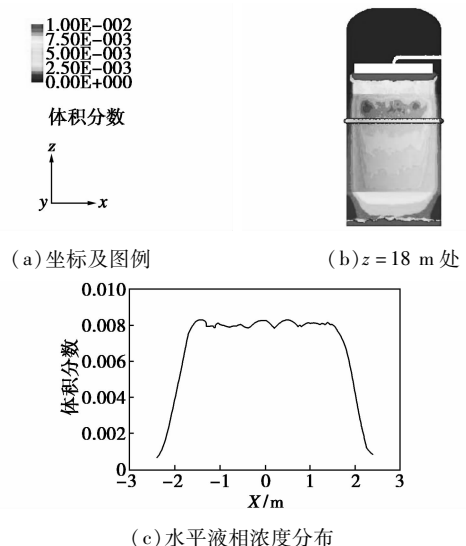


图 8 上段塔离散相水平浓度分布

(下转第 93 页)

trum 100、Clarus 600/Clarus 600 T气相色谱/质谱联用仪(均购于美国 PE 公司);烟叶为玉溪红塔卷烟厂储存1年的红花大金元橘色烟叶,从不同部位取样编号为KB₂F(上部)、KC₂F(中部)、KX₂F(下部)。

1.2 试验条件

热重条件:温度自50℃以20℃/min升至900℃,热解氛围为氮气,流量为49.8 mL/min。热重分析仪与红外光谱传输线温度均为270℃。

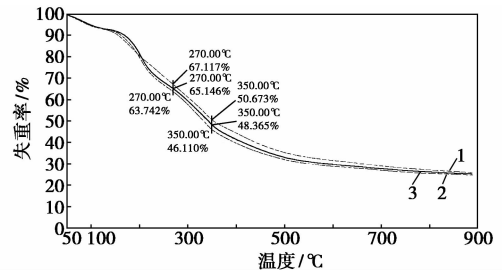
GC/MS 条件:进样口温度250℃;色谱柱为Elite-5 MS 毛细管柱(30 m × 0.25 mm × 0.25 μm);检测器温度230℃;升温程序:80℃(1 min) $\xrightarrow{5^\circ\text{C}/\text{min}}$ 250℃(10 min);传输线温度230℃;载气为高纯He;分流比:9:1;载气流量:10 mL/min;恒流模式;电离方式:EI;电子能量:70 eV;质量扫描范围:50 ~ 300 u;溶剂延迟2 min。

1.3 样品处理

将烟样KB₂F、KC₂F、KX₂F切成烟丝状,分别放入热重分析仪的试样杯中,在50℃下称重,各约14 mg左右,待热解分析。热解产物图中各峰经各化合物保留时间、EI谱图分析、NIST2008和WILEY7标准质谱数据库检索。

2 结果与讨论

烟样KB₂F、KC₂F、KX₂F变化过程的热重图,如图1所示。



1—KB₂F;2—KC₂F;3—KX₂F

图1 不同部位烟叶的热重曲线图

通过图1可以看出3种不同部位烟叶都有2个明显的失重点分别在270℃和350℃。270~350℃失重区间,中部烟叶失重17.632%,上部烟叶失重16.444%,下部烟叶失重16.781%,可知中部烟叶失重率大于其他2个部位的烟叶。本实验分别对270℃和350℃作为切点,使其切入到GC-MS进样,对失重点的裂解产物进行了气质捕集,所能检测到的物质如表1所示。

(上接第91页)

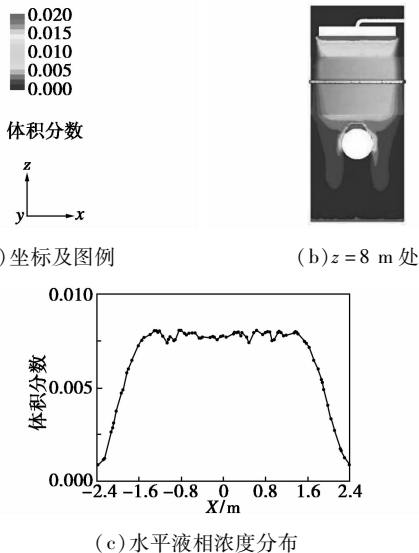


图9 下段塔离散相水平浓度分布

3 结论

本算例中,多相流模型采用欧拉-欧拉模型。其最主要的优点是可同时模拟多个相互渗透的相(汽、液、固),求解每一相的连续性、动量、能量方程

以及离散相的体积分数运算方程。本算例结果的收敛性良好并且定性正确,表明选择欧拉模型是正确的。为同时保证计算精度与计算效率,在对吸收塔内流场进行计算前,先对网格划分进行了多次试算,并根据流场的若干性质进行了网格独立性的判断,由此得到的计算结果具有较高的可靠性。由计算结果可看出,多孔介质项可以很好地模拟填料的作用,而填料项的加入可以有效均衡气液两相的速度分布,使气-液相接触效果更为理想。

参考文献

[1] 李玉林,胡瑞生,白雅琴. 煤化工基础[M]. 北京:化学工业出版社,2006:1-234.
 [2] 肖瑞华. 炼焦化学产品生产技术问答[M]. 北京:冶金工业出版社,2007:1-400.
 [3] 杨猛. 计算流体力学两相流流动的模拟及两相流模型的研究[D]. 天津:天津大学,2005.
 [4] Liu G B, Yu K T, Yuan X G. Simulations of Chemical Absorption in Pilot-scale and Industrial-scale Packed Columns by Computational Mass Transfer[J]. Chemical Engineering Science, 2006, 61(19): 6511-6529.
 [5] 曾芳,陈力,李晓芸. 湿式脱硫塔流场数值计算[J]. 华北电力大学学报, 2002, 29(2): 106-110. ■