

径向分层对随机堆积固定床内 气体流动特性的影响研究*

张亚新^{1,2}, 海东¹

(1. 新疆大学 化工学院, 新疆 乌鲁木齐 830017; 2. 新疆大学 省部共建碳基能源资源化学与利用国家重点实验室, 新疆 乌鲁木齐 830017)

摘要: 为了更好地探究径向分层对随机堆积固定床内气体流动特性的影响, 采用离散元计算流体力学耦合方法 (DEM-CFD) 对径向双层随机堆积床内的流场进行数值模拟, 分别建立常规床层、径向25%分层、径向50%分层及径向75%分层床层模型, 分析床层径向空隙率、压降和速度场的变化. 模拟结果表明: 在床层中施加径向分层装置, 使得两侧床层内颗粒堆积空间再分配, 颗粒堆积总数减少, 床层整体空隙率增大, 床层流动阻力降低, 压降减小, 径向空隙率在径向分层处回归峰值, 极大改善床层内部流动; 其中径向50%分层床内颗粒堆积数分别较常规床层及25%、75%分层床层减少了5.4%、3.5%、1.5%, 床层整体空隙率分别增大了5.2%、3.3%、2.4%, 床层压降分别降低了14.1%、10%、7.75%, 在筒体壁面处的床层速度分别减少了5.4%、3.5%、1.5%.

关键词: 固定床; 径向分层; 随机堆积; 离散元法; 计算流体力学

DOI: 10.13568/j.cnki.651094.651316.2021.09.28.0002

中图分类号: TQ051.1 **文献标识码:** A **文章编号:** 2096-7675(2022)05-0567-06

引文格式: 张亚新, 海东. 径向分层对随机堆积固定床内气体流动特性的影响研究[J]. 新疆大学学报(自然科学版)(中英文), 2022, 39(5): 567-572.

英文引文格式: ZHANG Yaxin, HAI Dong. Study on the influence of radial stratification on gas flow characteristics in random stacked fixed-bed[J]. Journal of Xinjiang University(Natural Science Edition in Chinese and English), 2022, 39(5): 567-572.

Study on the Influence of Radial Stratification on Gas Flow Characteristics in Random Stacked Fixed-Bed

ZHANG Yaxin^{1,2}, HAI Dong¹

(1. School of Chemical Engineering, Xinjiang University, Urumqi Xinjiang 830017, China; 2. State Key Laboratory of Chemistry and Utilization of Carbon Based Energy Resources, Xinjiang University, Urumqi Xinjiang 830017, China)

Abstract: In order to better explore the influence of radial stratification on the gas flow characteristics in random stacked fixed-bed, the discrete element-computational fluid dynamics coupling method (DEM-CFD) was used to numerically calculate the flow field in the radial double-layer random stacked bed. The regular bed, radial 25% stratified bed, radial 50% stratified bed and radial 75% stratified bed model were established respectively. The radial porosity, pressure drop and velocity field of the bed were analyzed. The simulation results show that the radial layering device is applied to the bed to redistribute the particle accumulation space on both sides of the bed, the total number of particle accumulation is reduced, the void ratio of the bed is increased, the flow resistance of the bed is reduced, and the pressure drop is reduced. The radial porosity returns to the peak at the radial stratification, which greatly improves the internal flow of the bed; The number of particles in the radial 50% layered bed is reduced by 5.4%, 3.5% and 1.5% respectively compared with the conventional bed, 25% and 75% layered bed, the void ratio of the bed increased by 5.2%, 3.3% and 2.4% respectively, the bed pressure drop decreased by 14.1%, 10% and 7.75% respectively, and the bed velocity at the wall of the cylinder is reduced by 5.4%, 3.5% and 1.5% respectively.

Key words: fixed-bed; radial layered; random stacked; discrete element method (DEM); computational fluid dynamics (CFD)

* 收稿日期: 2021-09-28

基金项目: 国家自然科学基金 (21766034).

作者简介: 张亚新 (1964-), 男, 教授, 从事设备数值模拟与化工过程强化的研究, E-mail: 13619903328@163.com.

0 引言

随机堆积固定床内部错综复杂的通道结构致使难以通过现有实验手段对整个床层进行流动和传热特性分析. 使用数值模拟方法对反应器床层内流动进行研究逐渐被研究者广泛应用^[1-5]. 床层中颗粒堆积使得流场变得更复杂: 迫使流体以强劲的动力流过曲折的流道, 不断地混合和分散, 流体的扰动性进一步增强. 但在表现出优越的流动和传热特性的同时会导致显著的压降损失.

在床层介尺度优化方面, Guo等^[6]研究了分层结构两侧不同直径颗粒对床层压降和传热的影响. Li等^[7]构建了均匀混合堆积结构床和分层堆积结构床, 结合流动实验, 对比分析了不同堆积结构颗粒床内的流动阻力特性. Yang等^[8]研究了单分散和多分散球体填料中固定床几何性质(如颗粒尺寸和壁距)对流动和温度分布的影响. Zobel等^[9]采用实验和数值模拟耦合的方法讨论了不同壁面结构对球形颗粒床空隙率分布的影响. 胡映学等^[10]采用DEM-CFD方法对比讨论了光滑壁面和波节壁面两种通道壁面构建的球形颗粒床中空隙率变化、多物理场分布和换热性能.

本文考虑径向分层隔段后壁效应作用. 使用基于DEM-CFD数值模拟分析方法, 分别建立常规床层、径向25%分层、径向50%分层及径向75%分层床层模型, 使用颗粒体积收缩法对其进行网格划分, 以空气为流动介质, 设置边界条件加载计算, 求解后处理时提取常规床层模型的径向空隙率分布及不同入口流速下床层压降, 并与实验经验关联式做模型可行性验证. 再对比分析4种床层径向空隙率分布、不同入口流速下床层压降变化、床层径向速度场分布情况, 研究布置不同径向分层比的分层装置对整体床层流动的影响. 结论可为随机堆积床层介尺度优化提供参考.

1 数值计算方法

1.1 数学模型

连续性方程:

$$\nabla(\rho v) = 0 \quad (1)$$

式中: ρ 为介质密度, $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$; v 为介质速度, $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$.

动量方程:

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v \otimes v) = \nabla \cdot \sigma + f_b \quad (2)$$

式中: σ 为应力张量; f_b 为作用于连续体的单位体积的各种体积力(例如重力和离心力)的合力, N.

能量方程:

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \nabla(\rho E v) = f_b \cdot v + \nabla \cdot (v \cdot \sigma) - \nabla \cdot q + S_E \quad (3)$$

式中: E 为单位质量的总能量, $\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}$; q 为热通量, $\text{W}\cdot\text{m}^{-2}$; S_E 为单位体积的能量源, $\text{J}\cdot\text{m}^{-3}$.

1.2 颗粒随机堆积过程

在工厂实际操作过程中, 对于催化剂的装填多选择倾倒入料. 本文采用离散元方法, 实现了床层内颗粒样本随机生成. 颗粒随机下落过程如图1所示. 为模拟真实颗粒填充过程, 将预先定义粒径为10 mm的球形颗粒从给定高度自然下落到筒体中. 颗粒下落过程中受堆积空间域限制, 颗粒与颗粒、颗粒与壁面之间发生接触碰撞, 设置颗粒材料属性为glass, 壁面材料属性设置为steel, 计算停止标准为颗粒停留时间 $t > 20$ s, 最后将颗粒床层几何模型加载至CFD软件.

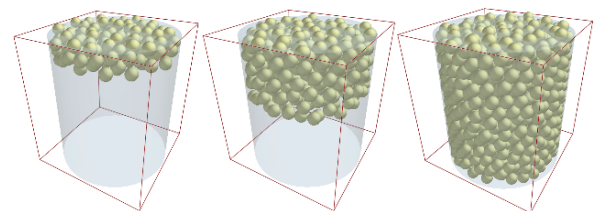


图1 颗粒堆积模拟过程

1.3 几何模型

建立管径比 $D/d_p=16.8$ 的随机堆积固定床模型如图2所示. 空气自床层底部进入, 经颗粒堆积段扰流, 最后由床层顶部流出. 床层直径为168 mm, 颗粒堆积段高为120 mm, 分别设置高度为50 mm的上、下游段, 以消除气体进出口效应的影响.

1.4 网格划分及边界条件

图3为床层截面网格分布图. 床层中颗粒随机堆积, 致使床层流道结构复杂, 故采用多面体网格进行划分. 为克服划分网格时因颗粒间或颗粒与筒壁间相互接触而造成的曲面相交问题, 提前对颗粒直径进行收缩处理^[11], 颗粒直径减小了原颗粒直径的1%. 诸多研究表明颗粒直径收缩法对模拟结果影响较小^[12-13], 本文中模型床层空隙率仅变化了3.7%. 使用STAR-CCM+软件计算操作, 设定为瞬态计算100 s, 时间步长为0.1 s, 调用具有更优湍流能量耗散率方程的realizable k-ε模型. 定义颗粒表面和筒内壁面为“无滑动”边界, 结合两层全y+壁面处理. 入口设定为均匀速度, 流体温度为293.15 K, 出口设定为带大气的“压力出口”. 流动介质选用空气, 其主要特性由软件内置材料库直接调用.

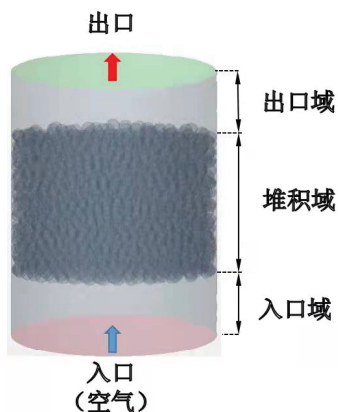


图 2 床层段示意图

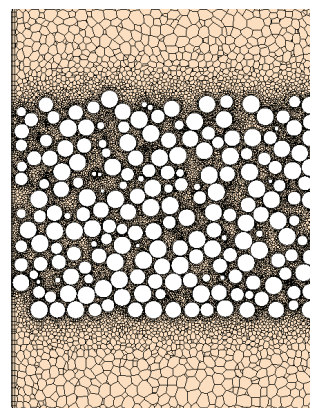


图 3 床层截面网格分布图

1.5 网格无关性验证

本文以常规床层压降变化为依据进行网格无关性验证. 图4为不同网格数量所对应的床层压降变化. 对比发现单元网格为5 231 237时, 床层压降已无明显变化, 继续细化网格对结果影响不大. 因此, 基于此网格数进行后续计算.

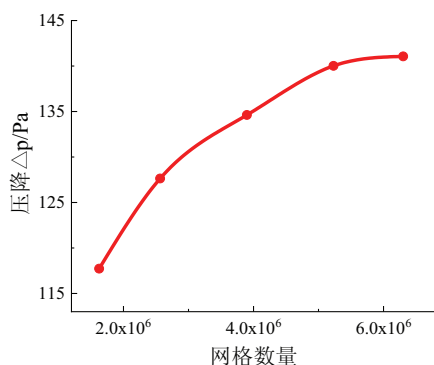


图 4 网格数量对床层压降的影响

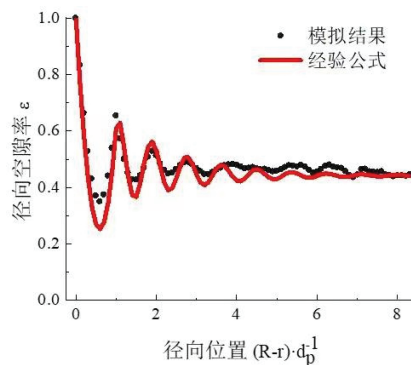


图 5 径向空隙率分布与经验公式对比

1.6 模型准确性验证

结合实验拟合经验关联式与本文中常规床层径向空隙率验证对比. 该经验公式能够准确描述床层中沿径向空隙率变化情况, 被业界诸多学者广泛应用^[14]. 图5为模拟结果与床层径向空隙率经验关联式对比结果. 通过比较分析, 模拟计算值与经验关联式间平均误差为7.35%, 故认为本文基于DEM法生成的随机堆积床层模型符合真实堆积.

床层径向空隙率经验关联式:

$$\varepsilon(z) = \begin{cases} 2.14z^2 - 2.53z + 1, & z \leq 0.637 \\ \varepsilon_b + 0.29 \exp(-0.6z) \cdot [\cos(2.3\pi(z - 0.16))] + 0.15 \exp(-0.9z), & z > 0.637 \end{cases} \quad (4)$$

式中: $\varepsilon_b=0.442$, $z = (R-r) \cdot d_p^{-1}$.

2 径向分层对气体流场的影响

2.1 径向分层对床层整体空隙率的影响

为预测出最优径向分层结构,以筒体内径的25%、50%、75%作为径向分层装置内径取值依据,分别求得内径值为42 mm、84 mm、126 mm. 径向分层装置模型尺寸根据丝径为1 mm、孔径为4 mm的5目滤网绘制. 4种床层模型如图6所示. 表1为4种床层颗粒堆积参数,不同径向分层比下固定床堆积颗粒为中心床层与环隙床层颗粒数总和. 径向50%分层床内颗粒堆积数分别较常规床层及25%、75%分层床层减少了5.4%、3.5%、1.5%.

表 1 颗粒堆积参数

径向分层比	滤网内径/mm	中心床层颗粒数	环隙床层颗粒数	颗粒总数
/	/	/	/	2 835
25%	42	167	2 609	2 776
50%	84	688	1 994	2 682
75%	126	1 591	1 133	2 724

整体空隙率是反映固定床内部结构的重要参数. 流体域内部通道复杂,体积值难以积分求和. 通过获取固定床内部颗粒域与筒体体积值,从而求得床层整体空隙率. 径向分层对床层整体空隙率的影响如图7所示,其中径向50%分层床的整体空隙率最大,达到0.465. 对比常规床层及25%、75%分层床层,整体空隙率分别增大了5.2%、3.3%、2.4%.

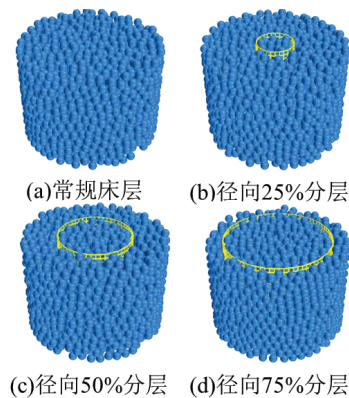


图 6 4种床层堆积模型

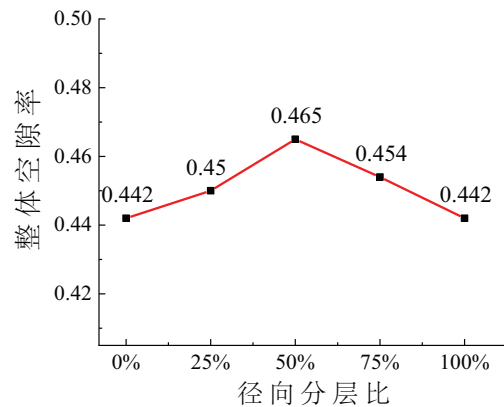


图 7 径向分层对床层整体空隙率的影响

床层整体空隙率计算式:

$$\varepsilon = \frac{V_{\text{流体域}}}{V_{\text{筒体}}} = \frac{V_{\text{筒体}} - V_{\text{颗粒域}}}{V_{\text{筒体}}} \quad (5)$$

2.2 径向分层对床层径向空隙率的影响

通过在流体域模型插入多个不同直径的环面,与对应直径实体颗粒域环面进行减运算,积分得到带孔环面面积. 将带孔环面面积与同直径实体环面的面积进行比值,得到该径向位置处空隙率值. 图8为4种床层模型径向空隙率分布. 由图8可知,因颗粒与筒体壁面为点接触,遂壁面处空隙率达到最大值1. 距离壁面大约1个颗粒半径处,空隙率达到最小值,分析认为多数紧贴壁面颗粒的质心在这一环面上. 对于(a)常规床层,随着距离壁面径向位置逐渐增大,空隙率的变化幅度逐渐减小,空隙率趋于定值. 而(b)径向25%分层、(c)径向50%分层、(d)径向75%分层3种床层中有分层装置,空隙率在分层装置处回归峰值. 将分层装置两侧分为中心床层、环隙床层,(b)、(c)、(d)3种模型的分层装置所处位置虽有差别,但其环隙床层径向空隙率变化均呈对称之势. 这一现象改变了床层径向空隙率的衰减趋势,颗粒堆积更具随机性. 值得注意的是:(b)模型的中心床层径向空隙率变化在轴线处仍呈上升趋势,此时中心床层为小管径比,而有研究说明径向空隙率峰值出现在小管径比填充床轴线^[15]; (c)、(d)2种模型中心床层的径向空隙率变化从分层装置内壁处的最大值1开始,在大约粒子半径的距离处下降到最小值后,空隙率随着距离内壁径向位置的渐远,其变化幅值减小.

2.3 径向分层对床层压降的影响

分别计算入口气速为0.4、0.6、0.8、1.0 m·s⁻¹时, 气体流经4种床层后的压降值. 图9为不同入口气速下4种床层压降变化情况. 由图9可知, 4种床层的压降均随入口气速的增加而增加. 对比入口气速为1.0 m·s⁻¹时4种径向比下床层压降变化, 50%径向分层床层压降值分别较常规床层及25%、75%分层床层的压降值降低了14.1%、10%、7.75%. 表明在床层中布置50%径向分层装置, 使两侧床层内颗粒堆积空间重新分配, 减少了两侧床层内颗粒堆积总数, 增大了床层整体空隙率, 减少了气体流经床层的阻力, 降低了床层压降.

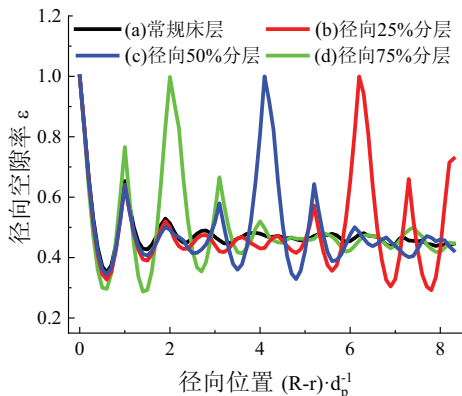


图 8 床层径向空隙率分布

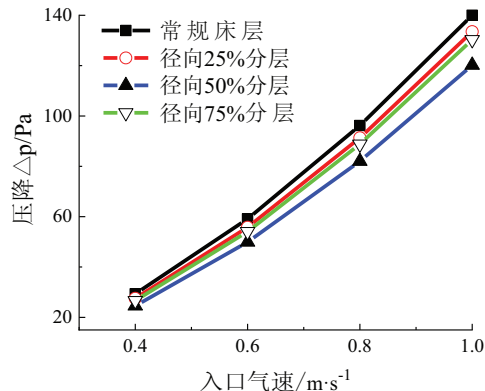


图 9 不同入口气速下4种床层压降变化

2.4 径向分层对床层速度的影响

图10为入口气速1.0 m·s⁻¹时轴向高度60 mm截面的床层速度沿径向变化. 气体进入床层后, 由于壁效应作用, 壁面区域流速相对中心区域更高. 常规床层中, 床层速度由两侧壁面至中心沿径向逐渐减小, 因为床层中心处颗粒堆积密集, 床层阻力较大, 使得床层中心处速度较低. 通过在床层中施加径向分层装置, 中心床层和环隙床层空间再分配, 两侧床层内颗粒堆积总数减少, 床层整体空隙率增大且分层装置处壁效应作用, 径向双层堆积床中速度沿径向呈周期性变化, 极大改善了床层径向流动, 有利于传递和反应过程. 对比4种床层的速度径向变化发现, 在筒体壁面处, 径向50%分层的床层速度分别较常规床层及25%、75%分层床层减少了5.4%、3.5%、1.5%.

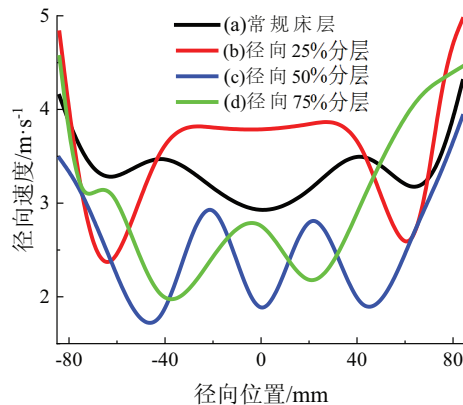


图 10 轴向高度60 mm截面床层速度沿径向的变化

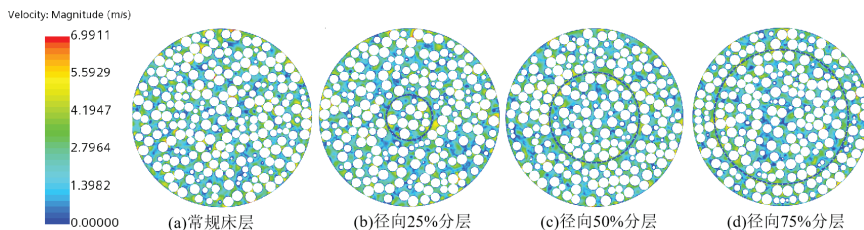


图 11 4种床层径向速度场分布

图11为入口气速1.0 m·s⁻¹时4种床层垂直于轴向剖面的径向速度分布云图. (a) 常规床层中, 床层中心附近散落着不同大小的流动死区, 分析原因是颗粒密集堆积而造成流动阻力大, 流速偏小. 在床层中施加径向分层装置, 整体床层分为中心床层和环隙床层, 分层装置连通两侧床层, 两侧床层间仍可进行径向流动. 在分层装置两侧及近壁面处, 颗粒呈现环形排列. (b) 径向25%分层后, 中心床层直径较小, 颗粒堆积空间有限, 同时受分层装置内壁限制, 颗粒堆积稀疏, 床层速度分布均匀, 环隙床层中, 在近壁面和分层装置外面附近, 有高流速现象, 环隙中部出现较多流动死区. (c) 径向50%分层后, 由于壁效应作用, 在筒体近壁面及分层装置内外两侧, 颗粒呈环形排列. 同时, 床层中出现多处高流速区域, 低流速区域零星分布. (d) 径向75%分层后, 在

环隙床层能清楚观察到环状交错排列着两圈颗粒,环隙中流速均匀分布,而中心床层中,在分层装置内壁处仍能观察到高流速区域,但越靠近轴线,低流速区域逐渐增多。

3 结论

采用DEM-CFD耦合方法对径向双层随机堆积床层流动进行模拟和分析,获得了床层空隙率、压降及径向速度场分布规律,主要结论如下:

(1) 提出一种新的固定床分层方式,将整体床层沿径向分成两部分,使得两侧床层内颗粒堆积空间再分配,颗粒堆积总数减少,床层整体空隙率增大且两侧床层可径向渗透流通,极大改善了床层内部复杂流动通道,降低流动阻力。

(2) 验证对比了常规床层径向空隙率分布,符合真实堆积. 并通过对4种床层径向空隙率分析发现近壁区空隙率变化较大,随着距离壁面径向位置逐渐增大,径向空隙率的变化幅度逐渐减小. 而在施加径向分层装置的床层中,径向空隙率在分层装置处回归峰值。

(3) 通过对比4种床层压降与径向速度变化,可知当入口气速为 $1.0 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 时,径向50%分层床层压降值分别较常规床层及25%、75%分层床层的压降值降低了14.1%、10%、7.75%。在筒体壁面处,径向50%分层的床层速度分别较常规床层及25%、75%分层床层减少了5.4%、3.5%、1.5%。

(4) 综合对比来看,径向50%分层床层是最佳分层位置. 径向50%分层床中颗粒堆积数更少,床层空隙率更大,气体流经阻力更低,床层压降更小,气体通过更流畅。

参考文献:

- [1] DIXON A G, PARTOPOUR B. Computational fluid dynamics for fixed bed reactor design[J]. Annual Review of Chemical and Biomolecular Engineering, 2020, 11: 109-130.
- [2] GUO X Y, DAI R. Numerical simulation of flow and heat transfer in a random packed bed[J]. Particology, 2010, 8(3): 293-299.
- [3] 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.
- [4] 沈文豪, 张亚新. 异形催化剂床层中Sabatier反应的微-介尺度模拟[J]. 化工进展, 2020, 39(9): 3692-3700.
- [5] 马涛, 张亚新. 煤制天然气甲烷化固定床反应器内反应特征参数场分布的数值模拟研究[J]. 新疆大学学报(自然科学版), 2015, 32(2): 140-145.
- [6] GUO Z H, SUN Z N, ZHANG N, et al. CFD analysis of fluid flow and particle-to-fluid heat transfer in packed bed with radial layered configuration[J]. Chemical Engineering Science, 2019, 197: 357-370.
- [7] LI L X, WANG H S, ZOU X M, et al. Flow resistances characteristics in a particulate bed with the configurations of uniform mixture and stratification[J]. Annals of Nuclear Energy, 2018, 112: 62-70.
- [8] YANG J, WU J Q, ZHOU L, et al. Computational study of fluid flow and heat transfer in composite packed beds of spheres with low tube to particle diameter ratio[J]. Nuclear Engineering and Design, 2016, 300: 85-96.
- [9] ZOBEL N, EPPOMGER T, BEHRENDT F, et al. Influence of the wall structure on the void fraction distribution in packed beds[J]. Chemical Engineering Science, 2012, 71(3): 212-219.
- [10] 胡映学, 周浪, 杨剑, 等. 小管径-粒径比颗粒无序堆积通道内壁面效应数值研究[J]. 化工学报, 2017, 68(S1): 54-59.
- [11] ATMAKIDIS T, KENIG E Y. CFD-based analysis of the wall effect on the pressure drop in packed beds with moderate tube/particle diameter ratios in the laminar flow regime[J]. Chemical Engineering Journal, 2009, 155(1): 404-410.
- [12] NIJEMEISLAND M, DIXON A G. Comparison of CFD simulations to experiment for convective heat transfer in a gas-solid fixed bed[J]. Chemical Engineering Journal, 2001, 82(1/2/3): 231-246.
- [13] REDDY R K, JOSHI J B. CFD modeling of pressure drop and drag coefficient in fixed and expanded beds[J]. Chemical Engineering Research and Design, 2008, 86(5): 444-453.
- [14] KLERK A D. Voidage variation in packed beds at small column to particle diameter ratio[J]. AIChE Journal, 2003, 49(8): 2022-2029.
- [15] GUO Z H, SUN Z N, ZHANG N, et al. Radial porosity peak at the centerline of packed beds with small tube to particle diameter ratios[J]. Powder Technology, 2017, 319: 445-451.