STAR- CD 在模拟筛孔塔板浓度场中的应用

STAR-CD Used Into Simulating Fluid Concentration Field on Sieve Tray

刘德新，李鑫钢，徐世民
（天津大学化工学院精馏技术国家工程研究中心）

摘　要:本文采用拟单相流模型和 SCALAR TRANSPORT 模块模拟计算了矩形筛孔塔板上液相流场和浓度场，所建模型中考虑了气液两相间的曳力和两相间的传质，应用 CFD 商用软件 STAR－CD 进行求解。模拟结果表明，塔板上存在液体回流区，形成原因在于液体进口上方竖直方向有压力差存在，而且回流区面积随高度增加而增加的；由于回流区的存在塔板上浓度最大值出现在塔板的中心位置，在液体进口上方存在浓度最小值。

关键词: Star-cd　SCALAR　液相流场　浓度场

Abstract: We developed a computational fluid dynamics (CFD) model for describing the liquid phases' hydrodynamics and concentration field of sieve tray. The interphase momentum exchange includes drag force, and the interphase mass exchange was calculated. Simulations were carried out for a rectangle sieve tray, and were carried out by used STAR-CD. The CFD simulations reflect tray hydrodynamics and reveal liquid circulation pattern on tray, and the maximum concentration is at the middle of tray and the minimum concentration is up on the liquid inlet.

Key words: Star-cd, SCALAR, Liquid Phases Fluid Field, Concentration Field

精馏是一种应用广泛的工业分离方法，塔设备是重要的精馏设备，广泛应用于化工、制药、炼油、食品、环保等行业的精馏分离过程。筛孔塔板是目前应用最为成熟的塔板形式之一，筛孔塔板的传质效率是历来学者们研究的重点[1]。近半个世纪国内外的研究工作者对于板式塔进行了大量的研究，然而因为塔内的气液两相流动及传质过程较为复杂，至今尚未得出比较准确的塔板效率估计方法，所以研究塔板上气液两相的流动状况有着重要的意义。

计算流体力学（Computational Fluid Dynamics，简称CFD）是近年来兴起的一种流体力学研究手段，现在以成为预测流场的重要理论工具。许多学者应用CFD对精馏塔板上气液流动情况进行了研究[2][3][4]，所建立的模型包括单相流模型、拟单相流模型和多相流模型。文献[2-3]提出的拟单相流模型虽然只考虑塔板上液相流动及传质情况，忽略了塔板上气相流动及传质过程，但是模型中考虑了气液两相的相间的动量传递及传质，能够较为准确的描述塔板上液体流场和浓度场，在两相流CFD模拟还不足以工程化的今天，拟单相流模型不亏是研究蒸馏塔板的首选手段。本文采用拟单相流模型，对筛孔塔板液相流场以及塔板上的浓度场

进行了数值模拟。

1、数学模型

1.1、拟单相流湍流传质模型

精馏塔板操作时，气液两相均为湍流流动。针对液体的湍流流动，采用 $k-\varepsilon$ 模型封闭加入气相影响的拟单相流模型，用 STAR-CD 进行求解，得到塔板上液相三维流场。模型所用的拟单相流方程，这一方程来自于 Ishii[5]的两相流模型，其特点是不仅在源项上考虑了气相对液相的影响，而且考虑了塔板上气相相含率对液相的影响，这样气相对液相的影响除了在源项中体现外，还在对液相速度分量的影响上体现出来。

连续方程：

$$\frac{\partial(\alpha_L\rho)}{\partial t}+\nabla\cdot(\alpha_L\rho u)=0$$

动量方程：

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_L\rho_L u_L)+\nabla\cdot(\alpha_L\rho_L u_L u_L)=-\alpha_L\nabla p_L+\alpha_L\rho_L g+\nabla\cdot[\alpha_L(\tau_L+\tau_L{}^t)]+M_{LG}+(F_{\text{int}})$$

两相 k、ε 输运方程：

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_L\rho_L k_L)+\nabla\cdot(\alpha_L\rho_L u_L k_L)=\nabla\cdot(\frac{\alpha_L(u_{Lc}+u^t{}_L)}{\sigma_L}\nabla k_L)+\alpha_L(G-\rho_L\varepsilon_L)+S_{k2}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_L\rho_L\varepsilon_L)+\nabla\cdot(\alpha_L\rho_L u_L\varepsilon_L)=\nabla\cdot(\frac{\alpha_L(u_L+u^t{}_L)}{\sigma_L}\nabla\varepsilon_L)+\frac{\alpha_L}{k_L}\varepsilon_L(C_1G-C_2\rho_L\varepsilon_L)+S_{\varepsilon 2}$$

$$G=\mu_c(\nabla u_c+(\nabla u_c)^T):\nabla u_c$$

其中，α_L 为液相含率，由 Bennet 公式[6]计算而得。

$$\alpha_L=EXP(-12.55(U_S(\frac{\rho_V}{\rho_L-\rho_V})^{0.5})^{0.91})$$

由于本文模拟计算时忽略了气相内部的作用力，所以动量方程中 $F_{int}=0$。在动量输运方程中，M_L 是动量源项，它反映的是气液间的相互作用，它对速度场的模拟起着至关重要的作用。本文考虑了气泡所受的曳力 F_D，忽略了虚拟质量力 F_{VM} 和升力 F_L，选用 Krishna *et al*[7] 提出的适合于计算气泡群的所受曳力计算方法，即：

$$M_{GL}=F_D=\alpha_G(\rho_L-\rho_G)g\frac{(\alpha_G^{average})^2}{U_s{}^2}|V_G-V_L|(V_G-V_L)$$

本文选用 STAR-CD 中提供的 SCALAR TRANSPORT 模块来模拟筛孔塔板上轻组分（甲基环己烷）的浓度场分布。在 SCALAR 传递方程中，同样考虑了相含率的影响。方程具体形式如下。

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_L \rho_L x_A) + \nabla[\alpha_L(\rho_L u_L x_A - \rho_L D_{AL}(\nabla x_A))] = S_{LG}$$

上式中 D_{AL} 是轻组分在液相中的扩散系数，采用 Wilke-Chang 推算法[8]计算扩散系数。

$$D = 7.4\times10^{-8}\times\frac{(\phi M_B)^{1/2}T}{\mu_B V^{0.6}{}_A}$$

S_{LG} 表示轻组分在气液相间传质，采用以双模理论为基础的以浓度差为推动力的的传质速率方程进行计算。

$$S_{LG} = K_{OL} a_e MA(x_A^* - x_A)$$

其中：$K_{OL} = 1/(1/mk_G + 1/k_L)$，$K_{OL}$ 为液相总传质系数，k_L 和 k_G 分别为液膜和气膜传质系数，a_e 为相间传质面积，模型中按照 Higbie 提出的表面更新理论[9]来计算传质系数和传质面积。

$$k_L = 2\sqrt{\frac{D_{AL}}{\pi\theta_L}}, k_G = 2\sqrt{\frac{D_{AG}}{\pi\theta_G}}, \quad a_e = \frac{6(1-\alpha_L)}{d_G}$$

上式中，θ_L 和 θ_G 分别为液相和气相停留时间。以上动量源相和 SCALAR 传质源相通过编写 UDF 程序 sormom、posdat 和 sorsca 实现。

1.2、网格划分

网格的划分是整个CFD模拟计算的基础，它所建立的物理模型的准确性直接关系到CFD模拟计算结果的正确性和稳定性。划分比较合理的网格，就会大幅度的节省机时和内存，并且加快收敛的速度。所模拟的塔板参数如下：塔板大小1m×0.4m，出口堰长0.4m，堰高0.05m，降液管底隙高度0.04m。本文采用PRO-STAR塔板进行网格划分，网格的划分区域为1000mm×400mm×h，h为塔板上液层厚度，按照Benett *et al*提出方法进行计算。

$$h = h_w + C(\frac{Q_L}{\phi_e})^{2/3}$$

网格划分图如图1所示。

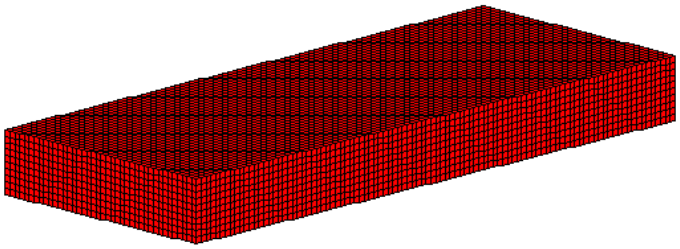


图 1 塔板网格划分图

1.3、边界条件

模型边界条件包括塔板上液相进口和出口，液体入口边界条件（inlet）和液体出口边界条件（outlet），边界条件示意图如图 2。图中红色为液体进口，绿色为液体出口。

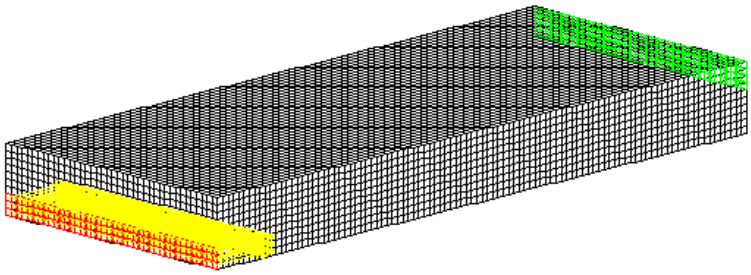
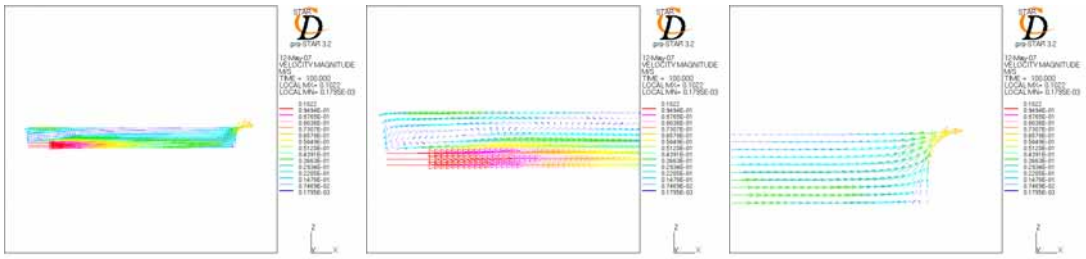


图 2 边界条件示意图

这样，连续性方程、考虑了气体对液体影响的动量方程和 SCALAR 传递方程、湍流输运方程，以及相应的边界条件构成了描述塔板上液相流场和浓度场的非稳态 CFD 拟单相流模型。

2、模拟结果和讨论



A B C

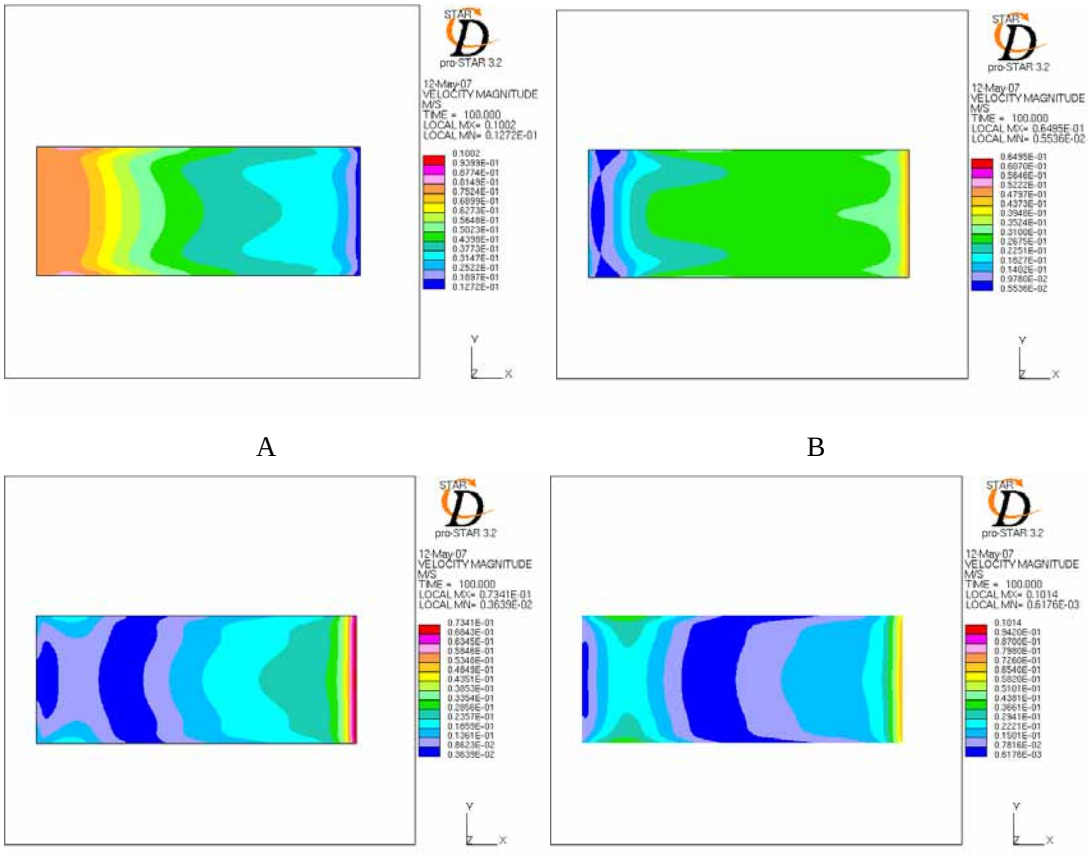
图 3 计算塔板液相速度矢量图

图 3 是塔板上液相流场示意图，其中 A 为整板液相的速度适量图。从图中可以看出，矩形塔板上液体的流动情况整体上近似于活塞流，流动速度的方向比较一致，速度变化梯度不大。但是在靠近降液管底隙，即液体进口处有一竖直方向的回流区的存在，图 3B 既为回流区速度适量放大图。究其原因，在此处较高的位置存在一相对于液体进口的低压区，造成竖直方向上有压力差存在，所以才会有液体回流的形成。图 3C 为塔板出口液体速度适量放大图。从图中可以看出，液体并非都是横向流出塔板的，下层液体由于塔板出口处堰的阻碍

作用，是斜向上的方向流出塔板的，越靠近塔板的液体，流出时倾斜的角度越大。而上层的液体由于没有受到外界的干扰，水平流出塔板。

由于塔板上液体整体流动近似于活塞流，所以塔板上绝大部分组分的浓度是分布均匀的，但是在回流区和靠近出口的区域，由于液体流动不畅，必将导致此处组分浓度分布不均匀，存在低效率传质区。这一点将在传质计算中得到证实。

图 4 为不同高度液体速度分布云图。从图中可以看出，当所取截面低于堰高时，塔板上液体流动近似于活塞流，液体速度是从进口到堰的方向不断下降的。当所取截面等于堰高时，液体出现回流，回流区面积如图中靠近液体进口处的蓝色区域所示。随着高度的不断增加，回流区的范围是不断增加的，从塔板液体进口处不断的蔓延至塔板的中部，并且在液面处达到最大。塔板液体出口的速度在堰以下位置为零，超过堰高以后，它随高度的增加先增加，后减小，在出口的中部达到最大值。原因在于堰对底层的液体的约束作用，不但使液体的流向发生了变化，还是液体流速得到了增强。



A　　B

C　　D

图 4 计算塔板液相速度云图（A 为 *h*/4 高度截面速度云图，B 为 *h*/2 高度截面速度云图，C 为 3*h*/4 高度截面速度云图，A 为 *h* 高度截面速度云图）

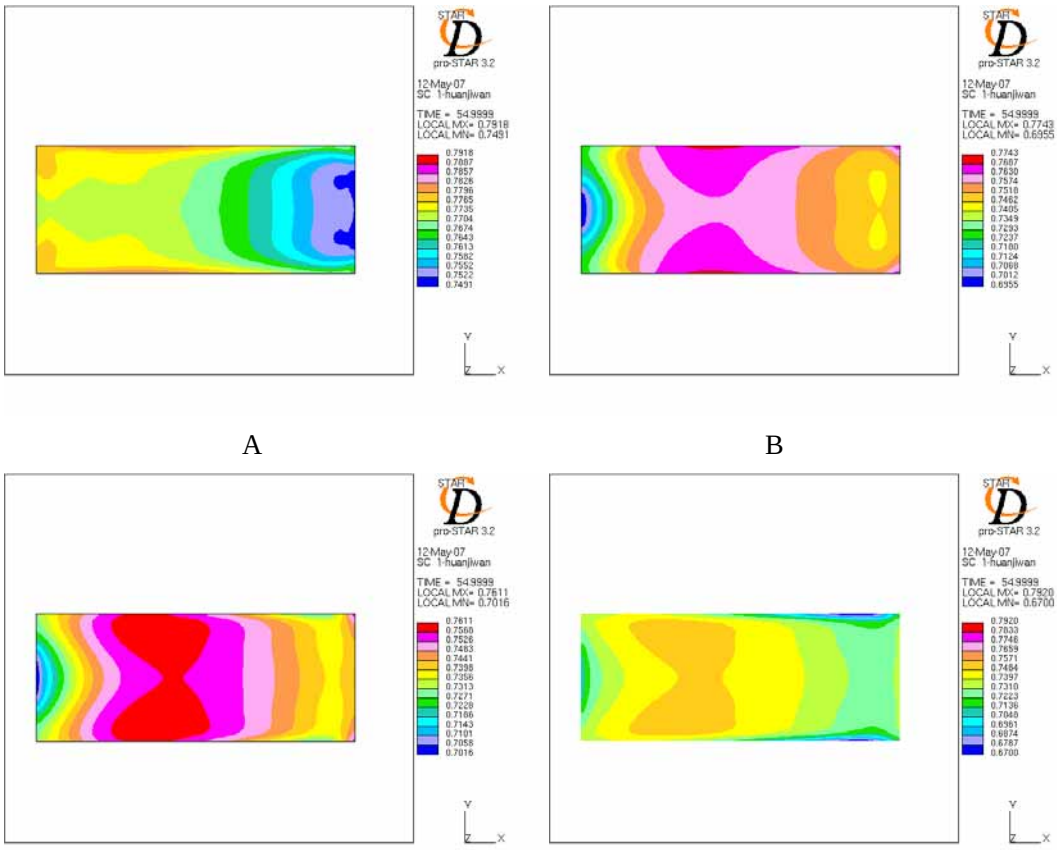


图 5 计算塔板液相浓度场云图（A 为 *h*/4 高度截面浓度云图，B 为 *h*/2 高度截面浓度云图，C 为 3*h*/4 高度截面浓度云图，A 为 *h* 高度截面浓度云图）

图 5 为 CFD 计算得到的塔板液相浓度场分布云图。从图中可以看出，在低于堰高时，浓度从液体进口到液体出口方向递减的，在靠近堰处达到最小值。当高于堰高时，由于回流区的存在，各截面浓度最小值出现在靠近降液管处，最大值出现在塔板的中心处，所以塔板浓度从降液管到堰的方向是先增加后减小的。当截面位于 3*h*/4 高度时，在回流区的中部出现了塔板上浓度的最高值。随着高度的增加，特别是到达液面以后，液体的浓度不断减小，而且变化趋势在减小。

3、结论

本文采用拟单相流模型和 SCALAR 传输方程模拟计算了矩形筛孔塔板上液体的速度和浓度场分布，应用 CFD 商用软件 STAR－CD 进行求解。模拟结果表明，塔板上存在液体回流区，形成原因在于液体进口上方竖直方向有压力差存在，而且回流区面积随高度增加而增加的；塔板出口液体并非都是横向流出塔板的，而是斜向上流出塔板的。通过对考虑了相间传质 SCALAR 传输方程的求解，本文得到了塔板上液体浓度场分布，发现由于回流区的存在塔板上浓度最大值出现在塔板的中心位置，在液体进口上方存在浓度最小值，也就是说在此处存在传质的低效率区。

本文对精馏塔板上两相流场进行了简单的模拟计算，实际上塔板上气液两相流动是一个十分复杂的气液两相传递动量、热量和质量过程，还需要进一步的理论研究。

4 参考文献

[1] 余国琮, 蒸镏过程和设备的现状与展望 .[J].化学工程, 1992, 20(2):20-25.

[2] 刘春江，蒸馏塔板上液相流场理论及实验研究，[D]天津：天津大学博士论文，1998

[3] 李瑞，蒸馏塔板上流体力学及传质的研究，[D]天津：天津大学博士论文，2002

[4] 汪小玲，精馏塔板上流体三维流场及传质的模拟，[D]天津：天津大学博士论文，2002

[5] Ishii, M., Thermo-Fluid Dynamics Theory of Two-phase Flow: Eyrolles, 1975.

[6] Bennett, D.L., Rakesh, A., Cook, P.J., New Pressure Drop Correlation for Sieve Tray Distillation Columns, AIChE Journal, 1983, 29(3): 434-442.

[7] R. Krishna, J.M. Van Baten, J. Ellenberger, A.P. Higler, R. Taylor, CFD simulations of sieve tray hydrodynamics, Chem. Eng. Res. Design, Trans. I. Chem. E. 77 (1999) 639–646.

[8] Wilke, C.R., Chang, P. AICHE J, 1995,1:264

[9] R. Higbie, Trans. AIChE 1935, 31, 365.