

文章编号:1673-5005(2009)05-0135-05

汽油碱洗过程中混合聚结器的计算流体力学模拟

杨向平, 秦海良

(中国石油大学 化学化工学院, 山东 东营 257061)

摘要:NS 混合聚结器是一种新型高效反应分离设备,对聚结器在汽油碱洗过程中的应用进行流体力学计算,考查各因素对油水两相在聚结器中聚结过程的影响,并对其内部流场进行模拟,以进一步优化聚结器结构。建立一个具有一根纤维丝的三维空间,选用 $k-\varepsilon$ 湍流流动模型、离散相模型、混合物模型以及 VOF 模型对三维空间进行数值模拟,研究表面张力对聚结过程的影响和两相流之间的相互作用。结果表明,对 NS 混合聚结器采用液体或气体分布喷头初步分布,经过一段细分填料的再次分布,达到流通截面均匀分布,可以大大提高分离效率。

关键词:聚结器; Fluent 软件; 混合物模型; 润湿角; 流场分布

中图分类号:TQ 028.42

文献标识码:A

CFD simulation of mixed coalescer on gasoline washing process with alkaline

YANG Xiang-ping, QIN Hai-liang

(College of Chemistry and Chemical Engineering in China University of Petroleum, Dongying 257061, China)

Abstract:The NS mixed coalescer is a new type and high-effective separator used in reaction-separation processes. A CFD about the device was done on the process of gasoline washing with alkaline by the Fluent software. The effects of every factors on the coalescence process of oil and water were studied. And its internal flow field was also simulated in order to optimize and improve the coalescer's design. The three-dimensional model with one fiber consists of $k-\varepsilon$ turbulent model, discrete phase model, mixture model and volume of fluid (VOF) model. The effects of surface tension on coalescence process and interaction of two phase fluid were studied. The results show that using another gas-liquid distribution by a layer of refine packing, the separation efficiency could be increased greatly after a preliminary distribution to liquid or gas using sprinkle-nozzle.

Key words: coalescer; Fluent software; mixture model; wetting angle; flow field distribution

油水混合物的分离是工业生产中的重要单元操作,要求分离的液滴尺寸小于 $100\ \mu\text{m}$ 甚至几微米。聚结分离法作为一种物理化学方法,以其特有的除油机制而日益受到重视^[1-4]。当含油水混合物与聚结材料接触时,由于表面张力的作用,分散相被材料表面所捕获并滞留在表面,随着被捕获的液滴增多,液膜变厚,液滴变形,逐渐合并成大滴的聚结物而脱离材料表面,从而实现两相的分离。润湿聚结效果很大程度上取决于润湿介质的选取,笔者对于该过程进行计算流体力学(CFD)模拟。

1 聚结分离过程分析

按照界面更新渗透传质理论,保持尽可能大的

新鲜有效接触面积和较高的界面更新速率,使某组分在不同物相中的瞬时浓度差最高,是提高传质速率的有效途径。不同参数对分离效率的贡献取决于分离物系的性质和操作参数,包括分散相液滴的尺寸分布、两相的密度差、聚结材料直径、材料的表面性质、液体的流动速度等。

分散的油滴在浮力的作用下到达介质表面时,通过润湿作用,首先在其表面形成油相膜层,后来的油滴在液膜表面发生聚结,其过程如图 1 所示。

液滴到达液膜表面的时候,仍以一定的速度向液膜侵入,在液膜的阻滞下减速并发生震荡运动,此时液滴与液膜表面发生变形;变形的液滴和液膜之间存在着一个液相夹层,夹层受液滴的压力逐渐向

收稿日期:2009-03-20

基金项目:中国石油天然气集团公司科学研究与技术开发项目(W-06-03D-01-01-01-02)

作者简介:杨向平(1960-),男(汉族),山东昌乐人,教授,博士,主要从事化学工程方面的研究。

外排液、减薄,该过程对液滴的聚结过程起着决定性作用;当液相夹层减薄至临界厚度时发生破裂,液滴融合于液膜,聚结过程结束。

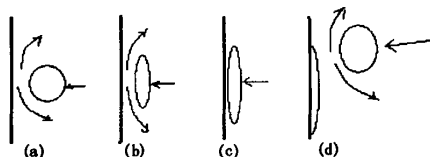


图1 油滴在油层表面聚结示意图

Fig.1 Sketch map of oil drop coalescing on oil layer

2 数值模拟分析

2.1 模型概述

应用 Fluent 软件对所用的聚结器进行模拟,以期优化设备结构提供思路。由于主要关心的是纤维丝表面附近区域的聚结情况,故本文中只对一根纤维丝表面的聚结过程进行研究。这样相比多根丝共存并自由分布的情况,纤维丝本身的拦截作用和纤维之间的相互作用被忽略了,并且由于分散相液滴碰撞到纤维表面的概率减小,外部套管和纤维之间的空间加大而使得模型存在一定误差。但是,本过程中起主要作用的是纤维丝上液体的润湿及聚结,在这点上—根纤维丝已具代表性。

由于模型形状比较简单,可以直接在 Gambit 软件中对聚结器进行建模,划分网格。为方便,将丝和套管的直径按比例放大,最终得到的模型外部套管直径为 20 mm,长为 100 mm。纤维丝的直径为 2 mm,长度也是 100 mm。采用标准的六面体网格,使用 quad-map 对各面进行划分,然后按 copper 方法进行体的网格划分,共得到 3 990 404 个体积元。网格划分如图 2 所示。

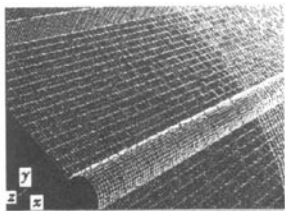


图2 聚结模型的局部网格

Fig.2 Part grid of coalescer model

采用三维模型、分离解算器、标准 $\kappa-\varepsilon$ 模型,在标准大气压下进行模拟,并考虑轴向重力的影响。考虑到各个模型的优缺点和适用范围,在进行润湿角计算时,分别选择离散相模型、混合物模型和流体体积模型(VOF)各计算 1 次。

2.2 表面张力和壁面黏附模型

2.2.1 表面张力模型

表面张力产生于流体中分子之间的引力。在表面上,净力是放射状地向内的,跨过整个球面的径向分力的联合影响是表面收缩,因而增强了表面凹侧的压力。在两种流体分离的地方,表面张力的作用是通过减小界面的面积使自由能最小化^[5]。

Brackbill 等人^[6]提出连续表面张力模型。此模型 VOF 计算中附加的表面张力导致了动量方程中的源项。跨过表面的压强依赖于表面张力系数 σ 和通过两个半径的正交方向量度的表面曲率 R_1 和 R_2 ,即

$$p_2 - p_1 = \sigma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right). \quad (1)$$

式中, p_1 和 p_2 是两种流体界面两侧的压力。

使用连续表面张力(CSF)模型公式时,表面曲率是从垂直于界面表面的局部梯度计算的。 $\mathbf{n}$ 为表面法线,定义 α_q 为第 q 相体积分数的梯度。

$$\mathbf{n} = \nabla \alpha_q, \quad (2)$$

表面曲率 κ 是为了区别单位法向量 $\hat{n}$ 而定义的:

$$\kappa = \nabla \cdot \hat{n}, \quad (3)$$

其中

$$\hat{n} = \frac{\mathbf{n}}{|\mathbf{n}|}. \quad (4)$$

表面张力也可以根据越过表面的压力阶跃写出^[7],使用散度定理可以表示为体积力,这就成了添加给动量方程的源项。它有如下形式:

$$F_{vol} = \sum_{i,j} \sigma_{ij} \frac{\alpha_i \rho_i \kappa_i \nabla \alpha_j + \alpha_j \rho_j \kappa_j \nabla \alpha_i}{\frac{1}{2}(\rho_i + \rho_j)}. \quad (5)$$

式(5)中允许力在多于两相存在的单元附近光滑地叠加。如果一个单元中只有两相,那么式(5)简化为

$$F_{vol} = \sigma_{ij} \frac{\rho \kappa_i \nabla \alpha_i}{\frac{1}{2}(\rho_i + \rho_j)}. \quad (6)$$

式中, ρ 为体积平均密度。三角形和四面体网格上表面张力影响的计算不如四边形和六面体网格的计算精确,所以表面张力影响最重要的地区应当采用四边形和六面体网格。

一般来说,表面张力受 2 个准数影响^[8]: 雷诺数 Re 和毛细数 Ca (capillary number) 或雷诺数 Re 和韦伯数 We (Weber number)。当 $Re \ll 1$ 时:

$$Ca = \mu \frac{U}{\sigma}; \quad (7)$$

当 $Re \gg 1$ 时:

$$We = \frac{\sigma}{\rho LU^2}. \quad (8)$$

式中, U 为自由流速度。如果 $Ca \gg 1$ 或者 $We \ll 1$, 表面张力效应可以忽略。

表面张力模型需要结合一个壁面黏附角^[9]。如果 θ_w 是壁面的接触角, 那么挨着壁面的实际单元的表面法向为

$$\hat{n} = \hat{n}_w \cos \theta_w + \hat{t} \sin \theta_w. \quad (9)$$

式中, $\hat{n}_w$ 和 $\hat{t}_w$ 分别为壁面的单位法向量和切向量。这个接触角结合一个单元正常计算的表面法向就决定了表面的局部曲率, 这个曲率常用于调整表面张力计算中的体积力项。

接触角 θ_w 壁面和壁面上界面切线的夹角如图3所示。

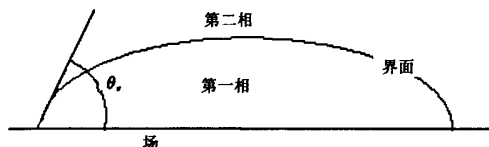


图3 接触角示意图

Fig.3 Sketch map of contact angle

2.2.2 液滴碰撞模型

非稳态液滴碰撞计算的困难在于, 对于 N 个颗粒, 与每个颗粒可能发生碰撞的颗粒数是 $N-1$ 。这样, 可能发生的颗粒碰撞次数就是 $\frac{1}{2}N^2$ 。对于每个时间步, 都要计算 $\frac{1}{2}N^2$ 次可能发生的碰撞, 而每次射流形成的雾化颗粒是数百万, 这种计算方法是不可行的, 所以采用颗粒组 (代表了一群颗粒) 的概念。O'Rourke 提出过一种方法可以有效减少颗粒碰撞的计算量^[10], 用随机的方法来估计碰撞频率, 同时假定只有颗粒组同存于一个流体网格内, 碰撞才可能发生。假设只有当流体网格与喷雾尺寸相比较小时才有效, 这种情况下在估计碰撞的发生频率上具有二阶精度。只有将颗粒组的概念与 O'Rourke 的计算方法结合才能完成碰撞计算。一旦2个颗粒组发生碰撞, 计算格式需要确定碰撞类型。只考虑颗粒合并与反弹, 每次碰撞的概率结果由韦伯数及实验数据的拟合得到。发生碰撞的一对颗粒组的性质由碰撞计算结果再加以修正。

碰撞模型假定碰撞发生的频率远小于颗粒计算的时间步长。如果时间步长太大, 计算结果将依赖于此时间步长, 用户必须相应地调整颗粒的长度标

尺 (特征尺度)。此外, 此模型比较适合于低韦伯数碰撞, 在这种情况下碰撞的结果是合并或反弹, 而当韦伯数大于100时, 碰撞将引起液滴的破碎。

小液滴在碰撞体内被发现的概率为

$$P_1 = \frac{\pi(r_1 + r_2)^2 v_{rel} \Delta t}{V}. \quad (10)$$

式中, r_1, r_2 为发生碰撞的大、小液滴的轨迹半径, m ; v_{rel} 为一个时间步长的运动距离, m ; V 为网格体积, m^3 。

相应地在集合液滴和小液滴组中分别存在 n_1, n_2 个液滴。集合液滴中碰撞发生率的数学期望为

$$\bar{n} = \frac{n_2 \pi(r_1 + r_2) v_{rel} \Delta t}{V}. \quad (11)$$

在集合液滴内发生的实际碰撞次数并不是此数学期望值。根据 O'Rourke 的理论, 碰撞次数的概率分布服从泊松分布。

一旦两个液滴发生碰撞, 就需要确定碰撞的结果。一般说来, 如果是正碰的情况, 结果倾向于液滴的合并; 如果是侧碰, 则倾向于反弹。

2.2.3 数值解法及边界条件

数值解法采用欧拉-拉格朗日方法。流体相被处理为连续相, 直接求解时均纳维-斯托克斯方程, 而离散相是通过计算流场中大量的液滴运动得到的。离散相和流体相之间可以有动量、质量和能量的交换。该模型的一个基本假设是, 作为离散的第二相的体积比率应很低, 即使如此, 较大的质量加载率仍能满足。粒子或液滴运行轨迹的计算是独立的, 它们被安排在流体相计算的指定间隙完成。

在进口设定速度入口边界, 出口为压力出口边界 (常压), 固体表面设定粗糙度, 湍流程度出口设为2%~10%。

使用的软件为 Fluent 6.1。

2.3 模拟计算结果

2.3.1 速度

湍流流体中任一位置上的质点, 除了有主流方向上的速度以外, 还有附加的各方向上的速度, 并随时间而变。连续相通过聚结材料的速度高, 因惯性碰撞而引起的聚结分离的液滴增加, 而沉积、扩散等的分离效应降低。计算结果表明, 连续相的流速在0.1~5 m/s时, 对尺寸为46~106 μm 的液滴, 流速对聚结分离效率的影响不大, 而尺寸为2~12 μm 的液滴则随流速的增加聚结分离效率明显下降。由此可见, 连续相的流速对聚结分离性能的影响程度与液滴尺寸有关。但总体来讲, 分离效率会随着表

面速度的增加而降低。

由于重力的影响,速度在聚结器的下部有少量的增加。同时由于压力的增加,聚结器下部的速度矢量分布有复杂的表现。碱液聚集和油水分层现象的发生,使得聚结器下部两相的速度出现较大的差别。同时还存在着少量的液滴在碱液相表面的聚结过程,使得聚结器下部的速度分布呈现如图 4 所示的状况。

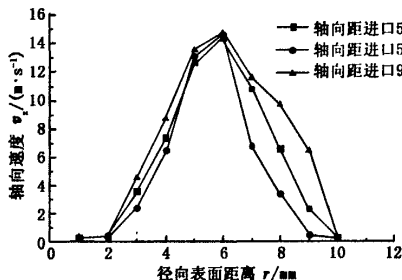


图 4 速度分布

Fig.4 Velocity distribution

2.3.2 湍流

图 5 是不同进口速度条件下的湍动能计算结果。湍流动能从纤维丝表面到聚结器的边界越来越小。总的来说,湍流动能的分布除在进口处有少量波动外,其他区域的湍流情况稳定。整个聚结器内部的湍流强度在 23.6% ~ 78.1%。其中大部分区域处于 40% 内。在这种强度的湍流下,油水混合物中的水相可以加大碰撞聚结几率,同时与纤维丝表面的碰撞过程也得到加强。

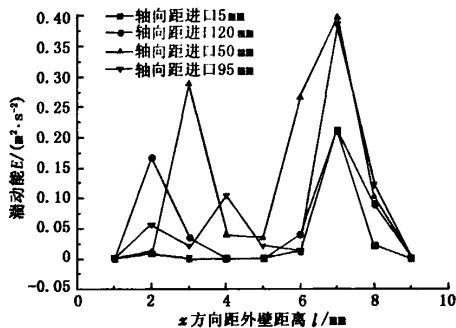


图 5 湍动能分布

Fig.5 Distribution of turbulent kinetic energy

图 6 是不同进口速度下的湍流强度图。由图 6 可以看到,不同速度下的湍流强度稍有变化,沿纤维丝进口段,在纤维丝和聚结器外壁之间的部分区域形成低湍流区域,但很快逐渐消失,形成比较稳定的湍流。但在这部分区域仍然存在轻微的低湍流区

域。这种情况的出现是由于本模型只模拟了一根纤维丝的聚结状况,相对于纤维丝而言,内部区域相对较大,不可避免存在着不均匀状况。如果是足够多的纤维丝共同作用,足可以消除这种情况。

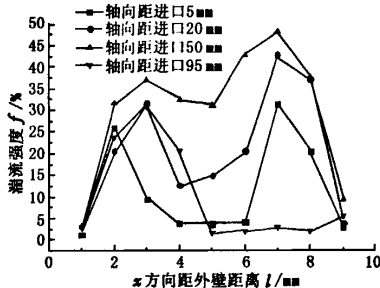


图 6 湍流强度分布

Fig.6 Turbulence intensity distribution

图 7 为混合物的湍流黏性比(μ_t/μ)在不同进口速度下的计算结果。湍流黏性比和雷诺数成正比。在进口处较小,到聚结器中间部位时达到最大值,然后又缓慢减小。在纤维丝表面附近和外壁内侧附近区域的湍流黏性比相对于其他部位来说较小。到出口处由于水相和油相的分离,影响了湍流的发展,同时由于压力增大、湍动横截面减小等原因,使得出口处的湍流黏性比反而稍有减小。

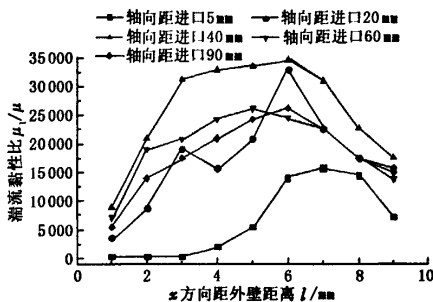


图 7 混合物的湍流黏性比分布

Fig.7 Distribution of turbulent viscosity ratio of mixtures

一般来说,聚结材料的直径越小,对于液滴的聚结越有利。因为在恒定的填料空隙率下,随着聚结材料直径的减小,单位面积的聚结材料的数量在增加,小液滴撞击聚结材料或已附着于材料上的概率增大。有研究表明,聚结材料的直径与被分离液滴的尺寸具有相同的数量级,聚结材料的直径决定了有效分离的液滴尺寸。对油水重力分离设备来讲,往往希望连续相沿设备轴向的流动均匀稳定,以便提供较好的流场条件。传统的分离设备内部流场中一般存在着较严重的一次涡流,流场分布相当紊乱,对油水重力分离极为不利。对于 NS 混合聚结器而

言,这种情况有了很大的改变。在进口段分散相颗粒强烈翻滚、旋转和剪切,这虽有使大液滴分散为小液滴的倾向,但也增加了小液滴之间相互碰撞聚结的几率。小液滴的聚结分离是制约油水分离效果的关键因素,所以该区的存在总体上对分离过程有利。进口段之后的聚结器部分是设备的主分离区,从强化油水重力分离效果的角度考虑,该区段内的流场分布越均匀、越稳定越好。

2.3.3 压力

聚结器内的压力分布见图8。从聚结器上部进口开始,压力逐渐增大,由325 Pa增大到9880 Pa,这在只有一根纤维丝的情况下已属于较大,如果考虑实际情况,有相当多的纤维丝成束存在的情况下,压力的增加会更大,这就要求聚结器不宜制作得太长,内部纤维丝也不能太细,外部套管直径也不能太小。

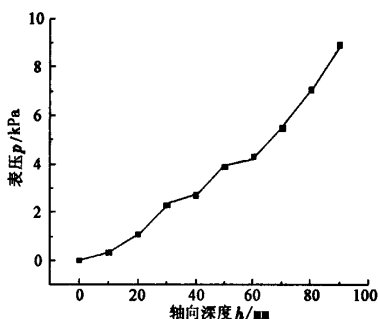


图8 混合物的静压分布

Fig. 8 Distribution of static pressure of mixtures

3 结论

(1) 现有的聚结器结构存在有壁流和沟流现象,可以考虑在聚结器内部放置不同规格的再分布器,增强内部湍流,进一步加强油水分离的过程。对NS混合聚结器采用液体或气体分布喷头初步分布,经过一段细分填料的再次分布,达到流通截面均匀分布,可以大大提高分离效率。

(2) 虽然只对一根纤维丝的聚结进行了模拟,聚结器内部的场分布与实际情况还有一定的差别,但纤维表面的聚结情况与现场观测现象基本吻合。

参考文献:

- [1] 陈雷,祁佩时,王鹤立. 聚结除油性能及机理的探讨[J]. 中国环境科学, 2002, 22(1):16-19.
CHEN Lei, QI Pei-shi, WANG He-li. Research on oil removal performance and mechanism of coalescence[J]. China Environmental Science, 2002, 22(1):16-19.
- [2] ABDEL M S, DAVIES G A. Simulation of nonwoven fiber mats and the application to coalescences[J]. Chemical Engineering Science, 1985, 40(1):117-129.
- [3] OTHMAN F M, FAHIN M A. Prediction of predication mechanisms in the separation of secondary dispersions in a fibrous bed[J]. Dispersion Science and Technology, 1988, 9(2):91-113.
- [4] SPETH H, FENNIG A P. Coalescence of secondary dispersions in fiber beds[J]. Separation and Purification Technology, 2004, 29(2):113-119.
- [5] 傅德薰. 流体力学数值模拟[M]. 北京:国防工业出版社, 1993.
- [6] 杨景芳. 流体力学基础[M]. 大连:大连理工大学出版社, 1994.
- [7] JOHNSON D A, KING L S. A mathematically simple turbulence closure method for attached and separated turbulent boundary layers[J]. AIAA Journal, 1985, 23(11):1684-1692.
- [8] HUMPHREY J A, WHITE LA W J H. Turbulent flow in a square duct with strong curvature[J]. Fluid Mech, 1981, 103(4):443-463.
- [9] 吴望一. 流体力学[M]. 北京:北京大学出版社, 2000.
- [10] KORONAKI E D, LIAKOS H H, FOUNTI M A, et al. Numerical study of turbulent diesel flow in a pipe with sudden expansion[J]. Applied Mathematical Modelling, 2001, 25(3):319-333.

(编辑 刘为清)