

二维固定床双组分气体吸附的流动 传热传质的数值模拟

张学伟¹ 刘伟¹ 徐明厚²

(1. 华中科技大学能源与动力工程学院, 湖北 武汉 430074;
2. 华中科技大学煤燃烧国家重点实验室, 湖北 武汉 430074)

摘 要 本文建立固定床吸附过程中流动传热和传质模型, 二氧化碳占 20% 的二氧化碳氮气双组分气体在吸附剂沸石 13X 上吸附过程进行了数值模拟, 并对结果进行了分析。结果表明吸附过程中的温度变化是显著的, 对吸附过程的传质影响巨大。通过改变吸附颗粒的大小和传热性能及改变流动过程, 从而改变传热过程对吸附分离的影响是显著的。

关键词 吸附; 传热; 传质; 二氧化碳

中图分类号: TK124 **文献标识码:** A **文章编号:** 0253-231X(2007)06-1010-03

A STUDY OF HEAT AND MASS TRANSFER IN TWO DIMENSIONAL FIXED-BED ADSORPTION

ZHANG Xue-Wei¹ LIU Wei¹ XU Ming-Hou²

(1. College of Energy and Power Engineering, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China;
2. State Key Laboratory of Coal Combustion, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China)

Abstract The heat and mass transfer model in two dimensional fixed-bed adsorption of mix gas with 20% carbon dioxide and nitrogen were analyzed. Temperature is a crucial parameter in the adsorption process. The performance can be improved by optimizing of size and conductivity of adsorbent grain.

Key words adsorption; heat transfer; mass transfer; carbon dioxide

1 引 言

随着化学燃料使用量的增加和热带雨林等植被的破坏, 空气中的二氧化碳的含量不断增加, 引起全球变暖和气候的变化。二氧化碳的减排研究正成为各国各研究单位的研究热点。变压吸附法作为烟气分离的很有前途的方式备受关注。吸附过程是伴随物理化学变化, 涉及多孔介质的非稳态流动, 传热和传质过程, 是非常复杂的, 对其研究尚不充分。本文建立固定床吸附过程中流动传热和传质模型, 进行了数值模拟, 并对结果进行了分析。

2 固定床气体吸附的流动传热传质的 数学模型

2.1 基本假设

(1) 物质的比热等热物理性质不随温度变化。

(2) 气体符合理想气体定律。

(3) 气体的比热不随成分变化。

(4) 被吸附的吸附质的比热为零。

(5) 气相和固相的温度不同, 吸附过程完全发生在固体内部, 固相颗粒的导热系数比较大, 颗粒内部温度相同。

2.2 数学模型

(1) 连续性方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} = \dot{m}$$

(2) 动量方程

$$\rho_f \left(\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla \vec{V} \right) = -\nabla p + \mu_{\text{eff}} \nabla^2 \vec{V} -$$

$$\frac{\mu_f}{k} \vec{V} - \rho_f \frac{F\phi}{\sqrt{k}} |\vec{V}| \vec{V}$$

收稿日期: 2007-01-17; 修订日期: 2007-10-01

基金项目: 华中科技大学“985 建设”项目。

作者简介: 张学伟 (1978-), 男, 山东临朐人, 博士研究生, 主要从事多孔介质传热传质研究。

$$\text{其中, } k = \frac{\phi^2 d_p^2}{150(1-\phi)^2}; \quad F = \frac{1.75}{\sqrt{150}\phi^{3/2}};$$

$$\mu_{\text{eff}} = (\phi + D_t Re_p Pr_f l) \mu_f$$

(3) 能量方程

气相的控制方程为:

$$\frac{\partial(\phi C_f \rho_f T_f)}{\partial t} + \frac{\partial(\phi C_f \rho_f u_f T_f)}{\partial x} + \frac{\partial(\phi C_f \rho_f v_f T_f)}{\partial y} =$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda_e \frac{\partial T_f}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda_e \frac{\partial T_f}{\partial y} \right) + \alpha_v (T_s - T_f)$$

固相的控制方程为:

$$\frac{\partial[(1-\phi) C_s \rho_s T_s]}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\lambda_s (1-\phi) \frac{\partial T_s}{\partial x} \right] +$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left[\lambda_s (1-\phi) \frac{\partial T_s}{\partial y} \right] - \alpha_v (T_s + T_f) + H_{ad} \frac{\partial q}{\partial t}$$

流体与多孔介质骨架间的体积对流换热系数 α_v 由下面的准则关系式确定^[1],

$$h_v = 6h(1-\phi)/d_p$$

式中, h 由下式确定:

$$Nu = \alpha d_p / \lambda_f = \left[(1.18 Re^{0.58})^4 + 10.23 Re_h^{0.75} \right]^{1/4}$$

其中, $Re = \phi \rho u_p d_p / \mu$; $Re_h = Re / (1-\phi)$.

(4) 组分方程

$$\frac{\partial C_{bi}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} (u_b C_{bi}) - D_b \frac{\partial^2 C_{bi}}{\partial z^2} + \frac{1-\phi}{\phi} \frac{\partial q_i}{\partial t} = 0$$

(5) 吸附过程的驱动力模型: 非等温 LDF 模型
吸附速率可以用下式表达:

$$\frac{\partial q_i}{\partial t} = h_i [K_i(T_s, P) c_{b,i}(T_b, p, y_i) - q_i(T_s, p, y_i)]$$

假定吸附过程中吸附质传递的阻力以气膜阻力为主, 不考虑吸附质在吸附颗粒内部的阻力, 气体膜传质系数^[2] $Sh = \frac{D_i h_i}{D_m}$ 可由下式确定:

$$Sh = 2.0 + 0.6 Sc^{1/3} Re^{1/2}$$

$$\text{其中, } Sc = \frac{\mu}{\rho_p D_m}; \quad Re = \frac{\rho_f V \phi d_p}{\mu}.$$

假定二氧化碳的吸附等温线符合耦合的 Langmuir 等温线, 此曲线有确切的准确性验证^[3]

$$q_{m,i} = \frac{q_{\max,i} b_i p_i}{1 + \sum_k b_k p_k}$$

式中, $q_{\max,i} = B_{1,i} \exp(B_{2,i} T)$;

$$b_i = B_{3,i} \exp(B_{4,i} T).$$

3 计算方法与结果

考虑二维轴对称的圆柱形固定床, 采用控制体积法进行有限差分^[4]。混合气体从左侧入口均匀流入, 经过右侧出口流出, 出口处压力设为一个标准大气压。周壁绝热, 不可渗透。网格长度方向为 0.01 m, 宽度方向为 0.0075 m, 时间步长为 0.01 s。

图 1 显示了 2 秒时刻气体的速度场。图 2 为出口速度随时间的变化曲线。从图中可以看到, 吸附过程开始时, 由于混合气体中强吸附组分二氧化碳被吸附剂吸附, 从而引起气体的质量减少, 在压力不变的情况下, 流速减小, 随着吸附过程的推进, 吸附逐渐达到饱和状态, 二氧化碳的吸附量逐渐减少, 所以, 气体的流速又逐渐接近入口流速。

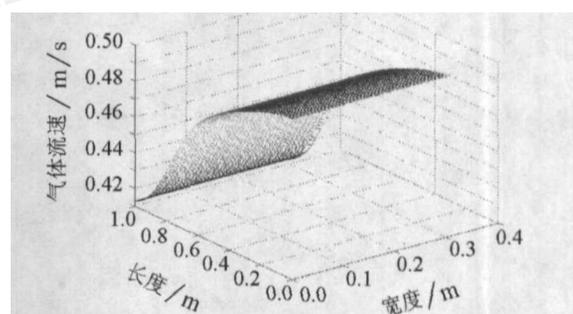


图 1 2 s 时的速度场

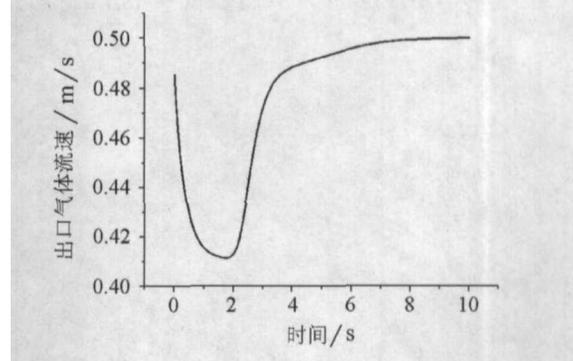


图 2 出口流速随时间的变化

由图 3 可以看出, 在入口处附近, 二氧化碳气体浓度比较大, 与入口浓度接近, 并且变化很小, 这表明在入口附近, 吸附首先趋于平衡, 净吸附速率减小; 而在气体的前端, 二氧化碳的浓度逐步减小, 变化较快, 说明此处吸附速率比较大, 表明吸附过程存在一个吸附速率非常大的吸附峰, 吸附峰从入口开始逐步向出口推进。

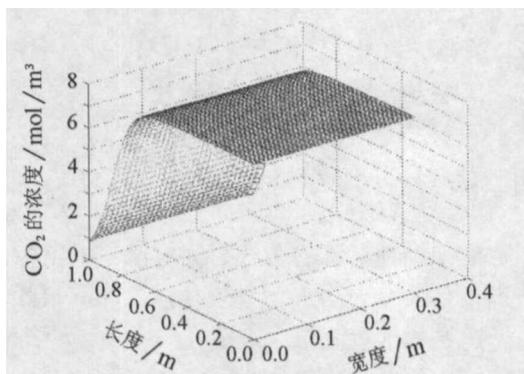


图3 2秒时二氧化碳的浓度场

图4则显示了出口二氧化碳和氮气浓度随时间的变化曲线。当吸附峰到达出口时,出口气体的二氧化碳浓度不断增大,当出口的浓度与入口气体的浓度相同时,整个吸附桶均达到吸附平衡。

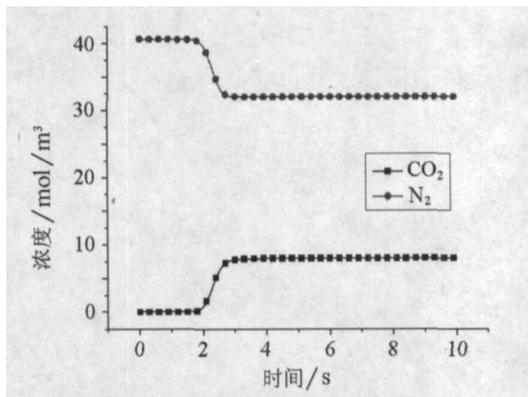


图4 出口气体浓度随时间的变化

由图5可见吸附过程伴随着吸附热的产生,吸附热传递给气相和固相,从而导致气相和固相的温

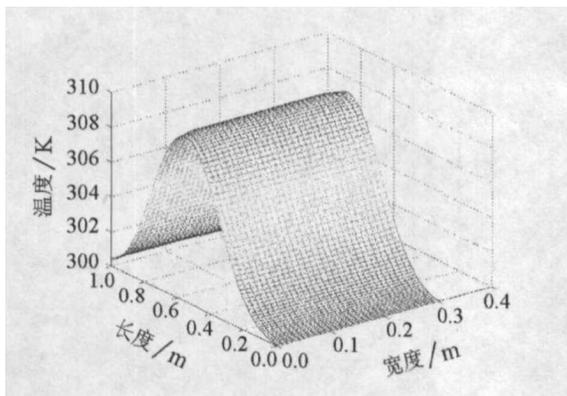


图5 2s时气相温度场

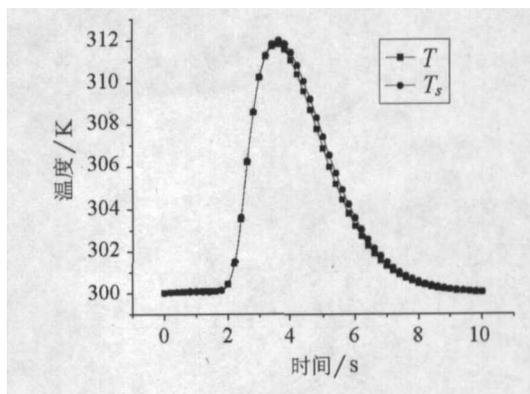


图6 出口处气相与固相温度随时间的变化

度有显著的升高,对吸附过程产生巨大的影响。图6显示气相和固相的温度一定的差别,但是这种差别不是太大。初始时刻温度的变化缓慢是因为吸附仅发生在入口附近,对出口的影响还很小,温度明显升高的过程是吸附发生的过程,过了波峰,吸附已基本结束,整个过程成为气体对固相的冷却过程。

4 结 论

本文从传热传质角度分析固定床吸附过程,借助控制体积有限差分法进行了数值计算,结果能够与实验数据较好的符合,对数值结果的探讨为系统的设计和优化提供必要的支持,并且为数学模型的完善提供了必要的途径。吸附过程中温度变化是显著的,对吸附过程的传质影响巨大。通过改变吸附颗粒的大小和传热性能,从而改变传热过程对吸附分离的影响是显著的。探讨更加准确的吸附过程传热和传质过程的相互耦合模型,对模拟完善是必要的。

参 考 文 献

- [1] W.M. 罗森诺, 等, 主编. 李荫亭, 等, 译. 传热学手册(下册). 北京: 科学出版社, 1987
- [2] E.L. 柯斯乐, 著. 王宇新, 姜忠义, 译. 扩散-流体系统中的传质. 北京: 化学工业出版社, 2002
- [3] Ye Kye Soon Hwang. Fixed-Bed Adsorption For Bulk Component System-Non-Equilibrium Non-Isothermal and Non-Adiabatic Model. *Chemical Engineering Science*, 1995, 50(5): 1037-1046
- [4] 陶文铨. 数值传热学. 西安: 西安交通大学出版社, 1988