

研究论文

双层涡轮桨搅拌反应器内混合时间的大涡模拟

施力田¹, 高正明¹, 闵 健²

(¹ 北京化工大学化学工程学院, 北京 100029; ² 中国大唐集团科技工程有限公司, 北京 100097)

摘要: 采用计算流体力学 (CFD) 方法对直径为 0.476 m 双层涡轮桨搅拌反应器内的流动及混合进行了数值模拟, 并实验测试了混合过程。利用大涡模拟 (LES) 及 Smagorinsky-Lilly 亚格子模型求解湍流流动与示踪剂传递过程, 桨叶区域采用滑移网格技术。研究结果表明, 大涡模拟得到的示踪剂响应曲线和混合时间与实验结果吻合良好, 其预测精度明显优于基于雷诺平均 (Reynolds-averaged Navier-Stokes, RANS) 的标准 $k-\epsilon$ 模型的模拟结果。大涡模拟是研究搅拌反应器内非稳态及周期性湍流流动的有效方法。

关键词: 大涡模拟; 计算流体力学; 搅拌反应器; 混合时间; 双层涡轮桨

中图分类号: TQ 027.1

文献标识码: A

文章编号: 0438-1157 (2010) 07-1747-06

**Large eddy simulation for mixing time in stirred tank
with dual Rushton turbines**

SHI Litian¹, GAO Zhengming¹, MIN Jian²

(¹ College of Chemical Engineering, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China;

² China Datang Technologies & Engineering Co., Ltd., Beijing 100097, China)

Abstract: Large eddy simulations (LES) for mixing process in a stirred tank of 0.476 m diameter with dual Rushton turbines are reported. The computational fluid dynamics (CFD) package FLUENT6.1 was used. The turbulent flow field and mixing time were calculated by using LES with Smagorinsky-Lilly subgrid scale model. The impeller was modeled using the sliding mesh technique. LES results show a better agreement with the mixing experiments than those with standard $k-\epsilon$ model based on Reynolds-averaged Navier-Stokes (RANS) approach. The local curves of tracer response predicted by LES are also in good agreement with the experimental data. The results confirm that LES is a reliable approach for investigations of the unsteady and quasi-periodic behavior of the turbulent flow in stirred tanks.

Key words: large eddy simulations; computational fluid dynamics; stirred tank; mixing time; dual Rushton turbines

引 言

机械搅拌反应器广泛应用于多种工业过程。混合时间 (θ_m) 的定义是指两种完全互溶但其物理或化学性质 (如电导率、颜色、温度、折射率等) 有

差异的流体通过搅拌使之达到规定混合程度所需的时间。国际上通常采用 95% 规则, 即当示踪剂浓度达到与最终稳定浓度的差值为 $\pm 5\%$ 时所需的时间为混合时间 (θ_{95})。混合时间是表征反应器流体混合状况的重要参数, 近 30 年有大量的实验研究

报道^[1]。

计算机和计算流体力学 (CFD) 技术的发展丰富了混合时间的研究手段。Ranade 等^[2]采用数值模拟的方法对下压式斜叶桨全挡板条件的反应器进行了流动及混合的详细研究。Lunden 等^[3]和 Schmalzriedt 等^[4]通过求解单层涡轮桨搅拌反应器三维流动下示踪剂的质量守恒方程,认为预测结果依赖于计算流体力学模型的准确性,特别是湍流模型。Jaworski 等^[5]模拟预测双层涡轮桨搅拌反应器的 θ_{95} 是实验值的 2~3 倍,认为误差产生于数学模型对双层涡轮桨搅拌反应器内 4 个轴流-径流循环区域间的物质传递过低的预测。Eggels^[6]最早将大涡模拟 (LES) 引入搅拌反应器的研究,认为该技术能有效预测非稳态的准周期性湍流流动过程。Revstedt 等认为 LES 能够提供传统雷诺平均方程所不能提供的流动信息^[7],并采用该方法对双层涡轮和双层 Scaba 6SRGT 涡轮进行了研究^[8]。Derksen 等采用 LES 及 Smagorinsky 亚格子模型研究了单层涡轮桨全挡板反应器在 $Re=29000$ 条件下的流动过程,其中模型参数 $C_s=0.12$ ^[9];其在研究斜叶桨反应器的单相流动过程中对比了标准 Smagorinsky 亚格子模型和结构函数亚格子模型的不同^[10]。Yeoh 等^[11]和 Hartmann 等^[12]采用 LES 方法研究了直径为 0.1 m 和 0.147 m 搅拌槽内的混合过程,并计算了混合时间。Jahoda 等^[13]和 Zadghaffari 等^[14]则将该方法用于直径为 0.29 m 和 0.3 m 的多层桨搅拌槽内。

文献研究表明了 LES 对工业中湍流流动过程预测的重要性,但研究主要集中在搅拌反应器内三维速度和湍流动能等方面。本文采用 LES 及 Smagorinsky-Lilly 亚格子模型和 RANS 模型对双层涡轮桨搅拌反应器内的流动过程进行了分析,通过和实验数据对比,研究了湍流模型对混合时间的预测状况。

1 实验装置

实验在直径 $T=0.476$ m 的平底圆形有机玻璃容器中进行。内置 4 块挡板,宽度 $W_b=T/10$ 。操作液面 $H=1.4T$ 。搅拌桨采用双层涡轮桨,转速范围选择在 $2\sim4\text{ s}^{-1}$ (对应的 Re 为 $7\times10^4\sim1.4\times10^5$),以保证流动为完全湍流状态。涡轮桨直径 $D=0.39T$,叶片厚度 1 mm,下层涡轮桨离底距离 $C=T/3$,两层涡轮桨层间距为 D 。

2 混合时间实验

实验示踪剂采用 KCl 溶液^[15]。每次实验将 10 ml KCl 稀溶液在固定位置一次性快速加入到自由液面,通过固定在反应器底部的监控探头获取流体电导率的数据。分析多次实验数据最终得到稳定可靠的混合时间。

3 模拟方法

3.1 湍流模型

模拟计算搅拌反应器最大的难点在于如何处理多尺度问题。反应器内是个多尺度空间,如由于桨叶运动所产生的尾涡结构中的小尺度,涡结构破碎到分子级别的微尺度,反应器物理尺寸上的大循环区域中的大尺度等。如何准确模拟计算这些尺度信息很大程度上取决于湍流模型的构造。

理论上,最准确的计算方法是直接数值求解 (direct numerical simulation, DNS),即用非稳态 Navier-Stokes (N-S) 方程对湍流全部尺度进行直接求解。这种方法受限于计算能力,目前仅局限于小型设备上的低 Reynolds 数流动研究。

RANS 则是将非稳态控制对时间作平均的方法对全部尺度进行模拟计算,这种方法极大降低了计算量。如果流动为稳态,控制方程中则没有时间项,方程求解会更快。瞬态求解时,时间步长取决于流动的全局不稳定性,而不是湍动程度。雷诺时均的方法适用于一般的工程计算,常用的模型有 Spalart-Allmaras、 $k-\epsilon$ 、 $k-\omega$ 及 RSM 等,本文选择标准 $k-\epsilon$ 模型和 LES 进行对比。

LES 是介于 DNS 和 RANS 两者之间的方法,其基本思想是把包括脉动运动在内的湍流瞬时脉动通过某种滤波方法分解成大尺度运动和小尺度运动两部分,大尺度量通过数值求解运动微分方程直接求解,小尺度运动及其对大尺度运动的影响通过建立亚格子数学模型替代求解。将 N-S 方程在傅里叶或空间域滤掉时间项则得到 LES 方程,这种过滤处理可以有效地滤掉比滤波宽度或过滤网格尺度小的旋涡,从而得到大旋涡的动量方程。过滤的变量定义为

$$\bar{\phi}(X) = \int_{\Omega} \phi(X') G(X, X') dX' \quad (1)$$

式中 Ω 为流场区域; $G(X, X')$ 为决定过滤尺寸的过滤函数。

有限容积离散化过程本身具有过滤操作，即

$$\bar{\phi}(X) = \frac{1}{V} \int_V \phi(X') dX' \quad (X' \in v) \tag{2}$$

式中 V 为计算单元的体积。

过滤不可压缩 N-S 方程，得到方程如下

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \bar{u}_i) = 0 \tag{3}$$
$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{u}_i \bar{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} (\mu \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j}) - \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_i} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \tag{4}$$

其中， τ_{ij} 为亚网格张力，其定义为

$$\tau_{ij} \equiv \rho \overline{u_i u_j} - \rho \bar{u}_i \bar{u}_j \tag{5}$$

这几个方程和 RANS 的方程类似，其不同之处在于所依赖的变量为过滤后的量，而不是平均量，同时张力表达式不同。

利用滤波函数对 N-S 方程进行空间滤波，在计算中直接求解大尺度旋涡，而被滤掉的比网格小的旋涡通过亚格子模型求解。传统的亚格子模型为 Smagorinsky-Lilly 模型

$$\mu_t = \rho L_s^2 |\bar{S}| \tag{6}$$

其中， L_s 为亚网格混合长度，计算公式为

$$L_s = \min(\kappa d, C_s V^{1/3}) \tag{7}$$

式中 κ 为 von Kármán 常数； d 为到最近的壁面的距离； C_s 为 Smagorinsky 常数，计算中该值取 0.1^[16]； V 为计算单元的体积。

$|\bar{S}|$ 的计算公式为

$$|\bar{S}| \equiv \sqrt{2 \bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij}} \tag{8}$$

式中 $\bar{S}_{ij}$ 为平均张量旋率（mean rate-of-strain tensor）， s^{-1} 。

3.2 混合网格技术

由于示踪剂加入后搅拌反应器内的浓度不对称，所以选取整个反应器作为计算域。网格创建采

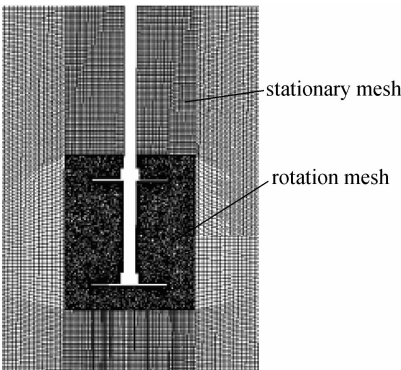


图 1 网格示意
Fig.1 Plane view of mesh

用结构化和非结构化相结合的技术（图 1），内部包含旋转涡轮的区域（rotation）采用四面体的非结构化网格，并对该处的网格进行了加密，网格尺寸为 2 mm（桨叶厚度^[6]和 Taylor 微观尺度^[7,8,17-20]的要求）；反应器内其他相对静止的区域（stationary）则采用合理的分区方法建立六面体的结构化网格，网格尺寸为 4 mm，以有效减少计算量。

3.3 模拟过程

第一步采用标准 $k-\epsilon$ 模型计算控制方程，使流场达到一定程度的稳定，该结果作为 LES 的初始值，来减少计算时间和有效控制计算发散。LES 计算中对时间采用二阶迎风离散方法，对空间采用中心离散方法。通过监控涡轮的搅拌扭矩是否达到稳定来判断计算的进程。

第二步通过求解示踪剂的非稳态质量方程来获得混合时间。假定示踪剂的添加对整体流动没有影响，动量方程和示踪剂质量方程则可分开计算，能有效缩短计算时间。模拟选择与实验中一样的示踪剂添加位置一次性加入，该处示踪剂浓度定义为 1，其他区域为 0。图 2 中给出了模拟中选择的加入点（F）及监控点（P），所有的点位于两片挡板中间位置，其中监控点 P_5 位置和实验一样，用于对比。其他点的结果则可得反应器内部更详细的信息。

模拟计算在 Dell 机群上进行，配置分别为 Xeon 双 CPU（Pentium IV，2 GHz），1 Gb 内存，Linux 操作系统，运行更稳定。一个旋转转速条件需要在 6 个 CPU 并行运行 4 周达到稳定流动状态，再用 3 周获得最终的混合时间。

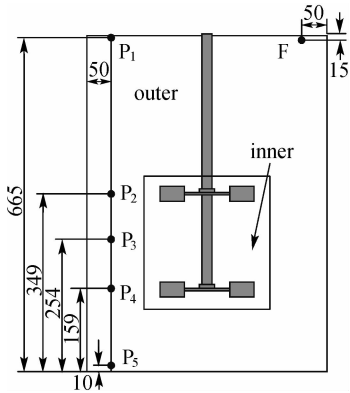


图 2 监视和加料点位置
Fig.2 Positions of monitoring and feeding

4 结果及讨论

4.1 速度场和示踪剂浓度场

搅拌反应器内的混合过程主要取决于内部流体流动状态^[21]。标准 $k-\epsilon$ 模型时均速度场和 LES 的瞬态速度场如图 3 所示。可以看出, 内部 4 个轴流-径流循环区域, 上下两层涡轮桨各有两个子循环, 呈现为标准的平行流, 上下循环的交错很少, 表明两区域的物质交换较少。 $k-\epsilon$ 模型对涡轮桨搅拌区的有效扩散率预测偏低, 导致对该区域的湍流混合的预测偏低^[5]。

标准 $k-\epsilon$ 模型和 LES 模拟的浓度变化分别如图 4 和图 5 所示。搅拌反应器内存在大尺度的涡旋, 具有宏观不稳定性, 这些涡旋加速了涡边界之间物料的质量传递过程, 标准 $k-\epsilon$ 模型却无法准确预测

这个过程。LES 模拟中采取的网格大小决定了所能准确捕捉到的涡的大小, 它可小到 Taylor 或 Kolmogorov 尺度^[22]。这表明 LES 比标准 $k-\epsilon$ 模型能准确预测瞬态流动过程。通过对比图 4 和图 5, 在 LES 模拟中不存在明显的轴流-径流循环区域, 且边界不规则, 整个反应器内充斥大大小小的涡旋, 能较好地预测两个桨叶之间区域的物质交换, 甚至可达到整个反应器区域, 进而获得准确的混合时间。

4.2 示踪剂响应曲线

LES、标准 $k-\epsilon$ 模型和实验的示踪剂响应曲线如图 6 所示, 可以看出, LES 和实验数值吻合很好, 而标准 $k-\epsilon$ 模型则无法给出满意的预测。

示踪剂的监控点位置对混合时间的影响很大。模拟中 5 个监控点的示踪剂响应曲线如图 7 所示。

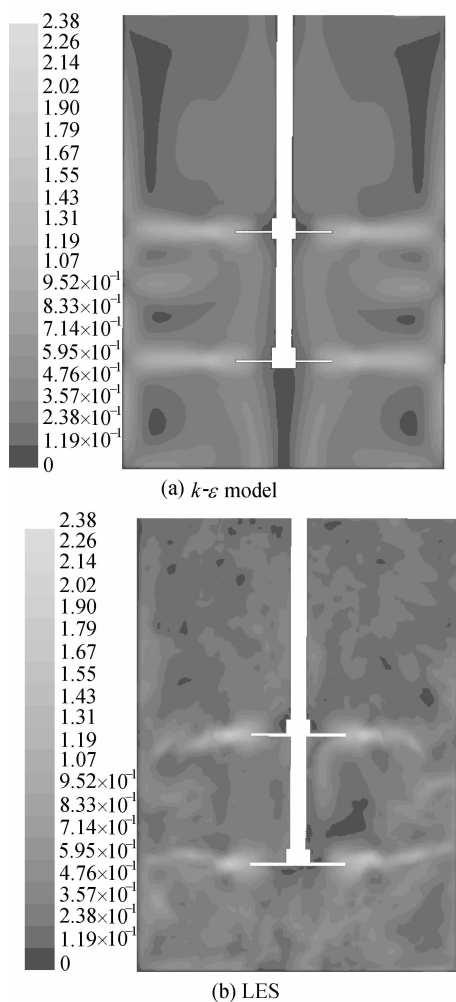


图 3 两挡板中间平面的速度分布云图

Fig. 3 Velocity magnitude plane midway between two baffles ($N=4 \text{ s}^{-1}$)

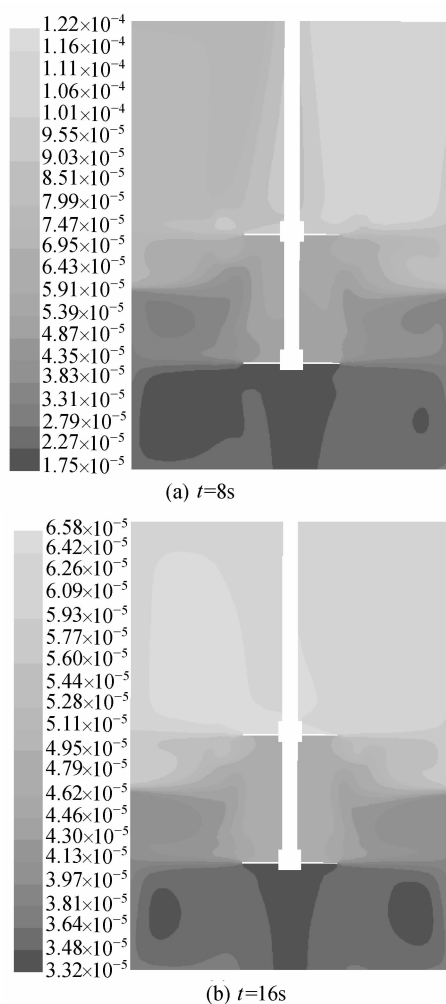


图 4 两挡板中间平面的浓度分布云图 ($k-\epsilon$ 模型)

Fig. 4 Concentration of tracer of plane midway between two baffles ($N=4 \text{ s}^{-1}$, $k-\epsilon$ model)

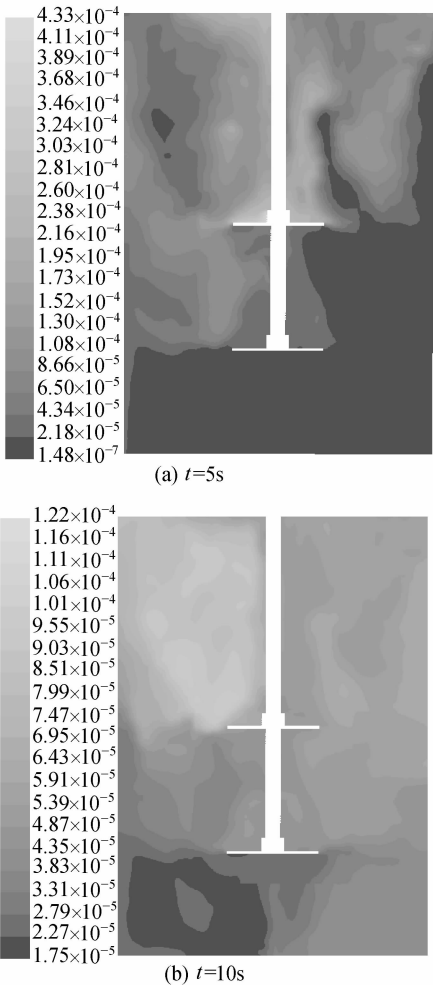


图 5 两挡板中间平面的浓度分布云图 (LES)
Fig. 5 Concentration of tracer of plane midway between two baffles ($N=4\text{ s}^{-1}$, LES)

可以看出，响应的早迟和监控点位置密切相关。在上层涡轮桨稍微上部一点的 P_2 最早监测到示踪剂，而液面处的 P_1 则最迟。而各个监控点的混合时间的开始和结束顺序基本类似，其中 P_2 、 P_3 和 P_4 的 θ_{95} 数值相同，不同的是监控点 P_2 的示踪剂质量纲 1 浓度偏差为 +5%，而 P_3 和 P_4 的为 -5%。液面处的监控点 P_1 由于离涡轮桨最远，其混合时间最长。

4.3 混合时间

实验采用 95% 规则获得不同转速条件下的混合时间 θ_{95} 。LES 和标准 $k-\epsilon$ 模型模拟预测的混合时间及实验值见表 1。可以看出，LES 预测值明显优于标准 $k-\epsilon$ 模型，能更好地与实验值吻合。LES 预测的相对误差为 12.76%，而标准 $k-\epsilon$ 模型的该值高达 95.04%。

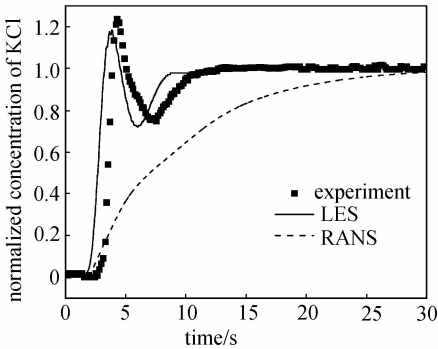


图 6 量纲 1 化的示踪剂响应曲线比较
Fig. 6 Comparison of response curves of tracer between simulation and experiment (normalized, $N=4\text{ s}^{-1}$)

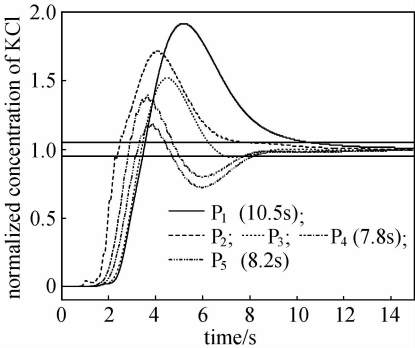


图 7 不同监视点处量纲 1 化的示踪剂响应曲线
Fig. 7 Response curves of tracer at different monitoring positions (normalized, $N=4\text{ s}^{-1}$, LES)

表 1 混合时间的实验和数值模拟结果比较
Table 1 Comparison of mixing time between experimental result and LES or RANS prediction

Agitator speed/ s^{-1}	Experiment /s	LES		RANS	
		Prediction /s	Relative error/%	Prediction /s	Relative error/%
2	24.1	25.2	4.56	46.1	91.29
2.5	19.3	20.6	6.74	37.4	93.78
3	16.0	15.3	4.38	31.3	95.62
3.5	13.7	11.2	18.2	27.0	97.08
4	11.7	8.2	29.9	23.1	97.44
average relative error/%			12.76		95.04

5 结 论

采用大涡模拟方法预测了直径为 0.476 m 双层涡轮桨搅拌反应器内的混合过程，结果表明，LES 能够较为准确地预测双层涡轮桨搅拌反应器内两个分区之间由大尺度的涡所产生的质量传递，混合时间的模拟结果与实验值吻合较好，相对误差仅为 12.76%，示踪剂响应曲线的模拟结果与实验

值吻合良好;而基于雷诺平均(RANS)方法的标准 $k-\epsilon$ 模型由于不能有效地预测大尺度的涡所产生的质量传递,因此所得的混合时间及示踪剂响应曲线与实验值有很大差距,混合时间的模拟结果与实验值相对误差达 95.04%。

References

- [1] Mezaki R, Mochizuki M, Ogawa K. Engineering Data on Mixing. Amsterdam: Elsevier Science, 2000
- [2] Ranade V V, Bourne J R, Joshi J B. Fluid mechanics and blending in agitated tanks. *Chem. Eng. Sci.*, 1991, **46**: 1883-1893
- [3] Lunden M, Stenberg O, Andersson B. Evaluation of a method for measuring mixing time using numerical simulation and experimental data. *Chem. Eng. Commun.*, 1995, **139**: 115-136
- [4] Schmalzriedt S, Reuss M. Application of computational fluid dynamics to simulations of mixing and biotechnical conversion processes in stirred tank bioreactors//Proc. of 9th Eur. Conf. on Mixing. Paris, 1997: 171-178
- [5] Jaworski Z, Bujalski W, Otiomo N. CFD study of homogenization with dual Rushton turbines — comparison with experimental results. *Trans. IChemE*, 2000, **78A**: 327-333
- [6] Eggels J G M. Direct and large-eddy simulation of turbulent fluid flow using the lattice-Boltzmann scheme. *Int. J. Heat and Fluid Flow*, 1996, **17** (3): 307-323
- [7] Revstedt J, Fuchs L, Tragardh C. Large eddy simulation of the turbulent flow in a stirred reactor. *Chemical Engineering Science*, 1998, **53** (24): 4041-4053
- [8] Revstedt J, Fuchs L. Influence of impeller type on the flow structure in a stirred reactor. *AIChE Journal*, 2000, **46** (12): 2373-2382
- [9] Derksen J, van den Akker HEA. Large eddy simulations on the flow driven by a Rushton turbine. *AIChE Journal*, 1999, **45** (2): 209-221
- [10] Derksen J. Assessment of large eddy simulations for agitated flows. *Trans. IChemE*, 2001, **79** (Part A): 824-830
- [11] Yeoh S L, Papadakis G, Yianneskis M. Determination of mixing time and degree of homogeneity in stirred vessels with large eddy simulation. *Chemical Engineering Science*, 2005, **60**: 2293-2302
- [12] Hartmann H, Derksen J J, van den Akker H E A. Mixing times in a turbulent stirred tank by means of LES. *AIChE Journal*, 2006, **52** (11): 3696-3706
- [13] Jahoda M, Mostek M, Kukukova A, Machon V. CFD modeling of liquid homogenization in stirred tanks with one and two impellers using large eddy simulation. *Chem. Eng. Res. Des.*, 2007, **85** (A5): 616-625
- [14] Zadghaffari R, Moghaddas J S, Revstedt J. A mixing study in a double-Rushton stirred tank. *Computers and Chemical Engineering*, 2009, **33**: 1240-1246
- [15] Gao Z, Niu G R, Shi L T, Smith J M. Mixing in stirred tanks with multiple hydrofoil impellers//Proceedings of the 11th European Conference on Mixing. Bamberg, 2003: 14-17
- [16] Yeoh S L, Papadakis G, Lee K C. Large eddy simulation of turbulent flow in Rushton impellers stirred reactor with a sliding-deforming mesh methodology//Proceedings of the 11th European Conference on Mixing. Bamberg, 2003: 39-46
- [17] Naude I, Xuereb C, Bertrand J. Direct prediction of the flows induced by a propeller in an agitated vessel using an unstructured mesh. *Canadian J. Chem. Eng.*, 1998, **76**: 631-640
- [18] Lu Z, Liao Y, Qian D, McLaughlin J B, Derksen J J, Kontomaris K K. Large eddy simulations of a stirred tank using the lattice Boltzmann method on a nonuniform grid. *Journal of Computational Physics*, 2002, **181**: 675-704
- [19] Bakker A, Oshinowo L M, Marshall E M. The use of large eddy simulation to study stirred vessel hydrodynamics//Proceedings of the 10th European Conference on Mixing. Elsevier Science B V, 2000: 247-254
- [20] Costes J, Couderc J P. Study by laser Doppler anemometry of the turbulent flow: influence of the size of the units (II): Spectral analysis and scales of turbulence. *Chem. Eng. Sci.*, 1988, **43**: 2765-2722
- [21] Patwardhan A W, Joshi J B. Relation between flow pattern and blending in stirred tanks. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 1999, **38**: 3131-3143
- [22] Hartmann H, Derksen J J, Montavoh C. Assessment of large eddy and RANS stirred tank simulations by means of LDA. *Chem. Eng. Sci.*, 2004, **59**: 2419-2432