

矩形鼓泡塔的双欧拉数值模拟

Eulerian-Eulerian numerical simulation of rectangular bubble column

作者：杨笑恺

学校：吉林大学汽车工程学院

邮箱：yangxk21@mails.jlu.edu.cn

Abstract

Bubble columns, as important and indispensable key equipment in the chemical engineering field, play a crucial role. They find extensive applications in industries such as petrochemicals, chemical engineering, and environmental protection. They are used for substance separation and purification, energy recovery, waste gas treatment, and reaction engineering, among others. The internal fluid mechanics and complexity of two-phase flow within bubble columns are essential areas of research for their industrial applications.

This paper focuses on laboratory-scale bubble columns, and it adopts a Eulerian-Eulerian approach using the multiphaseEulerFOAM solver in the open-source software OpenFOAM. In two-phase flow, the selection of interfacial coupling and turbulence models is crucial for closing the equations, and the adaptability of different sub-models varies under specific conditions. Several numerical examples are employed to explore the models for interfacial coupling forces such as drag and lift, as well as the suitability of turbulence models. The simulations aim to reveal the dynamics and mechanisms of bubbles within the bubble column and validate the findings through experiments.

Key words: bubbly flow OpenFOAM Eulerian-Eulerian approach

摘要

鼓泡塔作为化工领域中一种重要的关键装置，发挥着不可替代的作用。它广泛应用于石油化工、化学工程、环保等工业领域。可用于物质分离与纯化，能源回收，废气处理，反应工程等。其内部流体力学和两相流动复杂性是其工业应用中关键的研究领域。

本文针对实验室级别的鼓泡塔在开源软件 OpenFOAM 内 multiphaseEulerFOAM 求解器采用双欧拉求解策略进行求解。在两相流动中，相间耦合和湍流模型的选择是方程闭合的关键，不同子模型在特定问题下的适应性不尽相同。通过多个算例探究曳力，升力等相间耦合力的模型，以及湍流模型的适应性。通过仿真对鼓泡塔内的气泡动力学和机理进行揭示，并加以实验验证。

关键字：气泡流 OpenFOAM 欧拉欧拉法

1.简介

鼓泡塔内部存在气相和液相两种介质同时存在，这种多相流动会导致相互作用、传质和动量交换的复杂过程。气体进入塔体后，由于内部几何结构和气液交互作用，容易形成湍流现象。湍流的存在使得流体运动变得不规则和难以预测，需要进行深入的流体力学分析。鼓泡塔广泛应用于化学反应和物质分离过程中。塔内的传质现象对于反应效率和分离效果至关重要。传质速率受到液相和气相浓度梯度、液滴和气泡的形态以及内部湍流的影响，导致传质模型相对复杂。

鼓泡塔内气液两相流动过程中，气泡和液滴的形成、上升与破裂是关键的现象。气泡和液滴的大小和形态会影响塔内气液界面积和传质效率。在塔内，气泡和液滴的上升运动与相互之间的碰撞会引起流体的湍动和能量交换。这些复杂的动态现象对于塔内气液流动行为的理解至关重要。

在研究鼓泡塔的内部流体力学和两相流动复杂性时，数值模拟成为一种有效的工具。通过计算流体力学（CFD）模拟，可以对气液两相的流动行为进行详细的分析，揭示液滴和气泡的运动轨迹、尺寸分布以及相互作用过程。这有助于优化鼓泡塔的设计和操作参数，提高其分离效率和反应性能，进而推动工业领域的发展和革新。

在欧拉-欧拉模拟中，两相被视为相互穿透的连续体，每个阶段都由一组质量和动量守恒方程来描述。相之间的动量交换由两组守恒方程之间的耦合项来解释。它们描述了液体施加在气泡上的平均体积力和相应的体积反作用力，两者大小相等，方向相反。除曳力外，通常考虑的气泡力包括(剪切)升力、壁面润滑力和虚质量力，平均流动和湍流波动对曳力的贡献经常分别描述其他力则只采用平均流动来描述。在推导这些力模型时，默认采用球形近似，因此网格无法无限制细化。

关于湍流模型，欧拉-欧拉方法可以与简单的 $k-\epsilon$ 到复杂的雷诺应力模型的 RANS 湍流模型相结合。这些模型最初是为单相流中剪切引起的湍流而开发的，通过在描述气泡引起的湍流的模型方程中加入源项，将其扩展到多相流中。也有人尝试使用 LES 模型，但常见的亚网格尺度模型对网格分辨率的要求往往与气泡球形近似的要求相冲突。

在所有提到的子模型中，气泡大小作为参数出现。将其设置为一个常数值可以得到单分散近似，这在大多数研究中已被采用。此外，以往的研究大多没有考虑群

体效应，这适用于稀薄气泡流。在这些近似中，气泡大小随时间变化的分布可以通过将迄今所描述的方法与人口平衡方程（PBM）耦合来调节^[2]。

Tomiyama 等认为升力在一定气泡大小时改变方向。虽然已经提出了不同的框架来数值求解人口平衡方程。在改变气泡尺寸分布的物理现象中，气泡聚并和破裂是迄今为止最受关注的，但对于最合适的模型尚未达成共识。

综上所述，欧拉-欧拉方法已广泛应用于气泡流动中的纯流体动力学过程。本文选择前人的实验室级别鼓泡塔的物理模型进行模拟，探究了不同相间作用和湍流模型的影响，并且对未来仿真进一步改进空间进行了阐述。

2.控制方程

OpenFOAM9 中的 multiphaseEulerFOAM 求解器采用双流体模型（TFM）进行求解，并采用其独自研发的 MULES 算法对相分数进行修正，压缩相界面，以保证其有界性和界面的尖锐性。对于不可压缩绝热流体，其控制方程如下^[3]：

连续性方程：

$$\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \vec{U}_k) = 0$$

动量方程：

$$\frac{\partial (\alpha_k \rho_k \vec{U}_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \vec{U}_k \vec{U}_k) = -\nabla \cdot (\alpha_k \tau_k) - \alpha_k \nabla p + \alpha_k \rho_k g + \vec{M}_k + f_\sigma + S_k$$

其中 α 代表相分数，下标 k 代表相编号， ρ 代表密度， U 代表速度， \vec{M}_k 代表相间动量传输， f_σ 代表表面张力， S_k 代表源项。

同时两相的控制方程还需要满足如下限制条件：

$$\sum_k \alpha_k = 1.0$$

$$\rho_m = \sum_k \alpha_k \rho_k$$

$$U_m = \frac{\sum_k \alpha_k \rho_k U_k}{\rho_m}$$

其中相间作用力一般包含如下的作用力：

$$M_l = -M_g = M_D + M_L + M_{VM} + M_{TD}$$

曳力表达式：

$$M_D = \frac{3}{4} \alpha_g \rho_l \frac{C_d}{d_b} |U_l - U_g| (U_l - U_g)$$

升力表达式：

$$M_L = \alpha_g \rho_l C_l (U_l - U_g) \times \nabla \times U_l$$

虚拟质量力表达式：

$$M_{VM} = \alpha_g \rho_l C_{VM} U_l \left(\frac{D_l U_l}{D_t} - \frac{D_g U_g}{D_t} \right)$$

湍流分散力表达式：

$$M_{TD} = \rho_l C_{TD} \kappa \nabla \alpha_g$$

3.模拟实验选取

工业反应器体积巨大，对于实验室不方便进行观测和测量，实验成本高。实验一般采用小规模鼓泡塔进行研究，根据流动相似原理进行反应器缩小，能够探究相关性质和流体力学机理。本模拟选取 Vivek V. Buwa et al.^[1]的实验数据进行模拟。该实验采用 0.2m 宽，1.2m 高，0.05m 厚的矩形鼓泡塔，如图 1 所示。反应器底部的分散器采用六个针孔进气，侧面放置压力传感器测量压力波动，采用高速摄像机拍摄流动状态。本文选取表观气速为 0.14cm/s 的工况进行模拟。

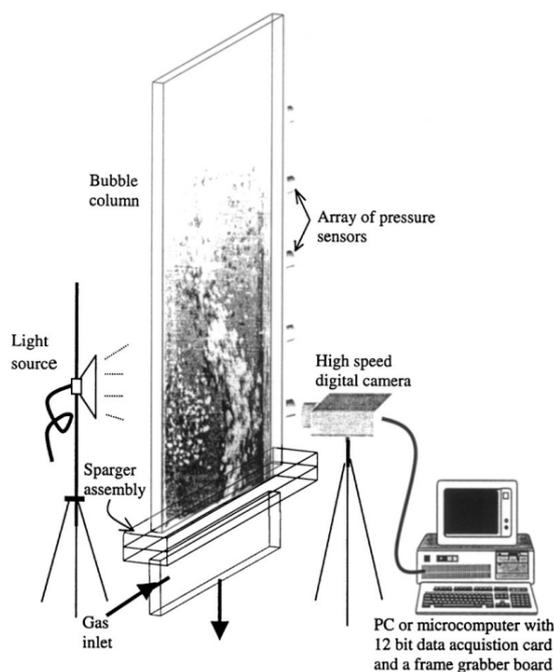


图 1.实验设备

为简化网格，将底部针孔分布的面选作入口，其余壁面为壁面边界，上方敞口处为出口。根据分布器上针孔的分布，入口面积为 18cm*6cm 位于底部中央，液体填充高度为 45cm，如图 2 所示。由于几何体积简单因此方便网格划分，网格划分为均匀的六面体正交网格，网格数量为 187500，网格质量良好，如图 3 所示。

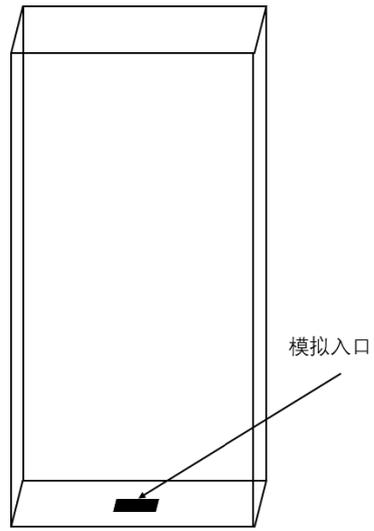


图 2 模拟入口位置

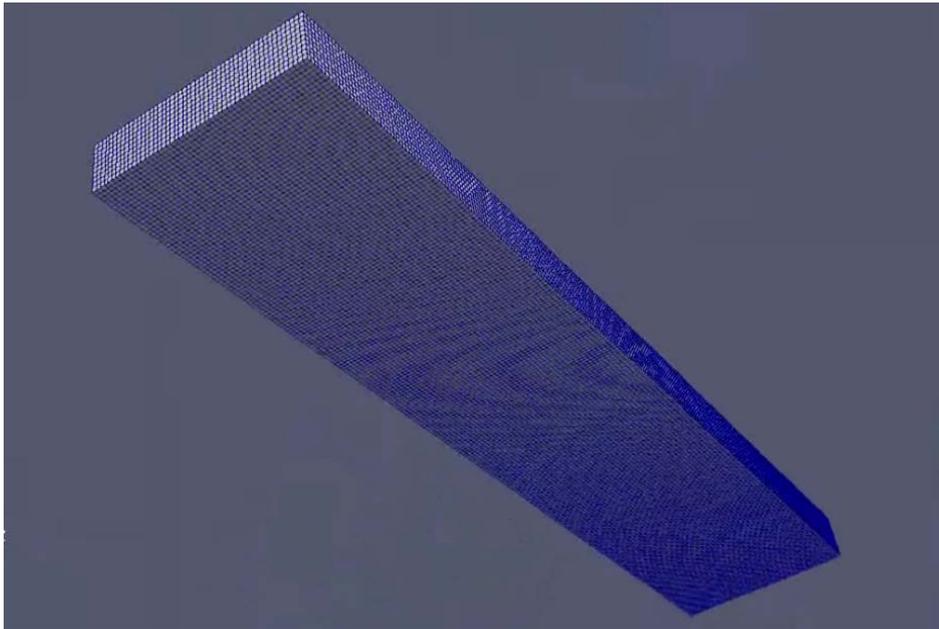


图 3.模拟网格

4.数值计算方案

模拟采用 OpenFOAM9 中的 multiphaseEulerFOAM 求解器进行^[2], 采用 pimple 算法进行压力速度耦合求解, 时间步长采用 0.001s, 模拟共进行 220s 实际工况, 对 20-220s 的参数进行平均分析。

模拟的边界条件设置如表 1 所示:

物理量	入口	出口	壁面
相分数 alpha	fixedValue	inletOutlet	zeroGradient
速度 U	fixedValue	pressureInletOutlet Velocity	noSlip
压力 p	calculated	calculated	noSlip
湍动能 k	fixedValue	inletOutlet	kqRWallFunction
湍流耗散率 epsilon	fixedValue	inletOutlet	epsilonWallFunction
湍流粘性系数 nut	calculated	calculated	nutRoughWallFunction

表 1.边界设置

模拟的离散格式如表 2 所示。

离散项	离散格式
ddtSchemes	Euler
gradSchemes	Gauss linear
divSchemes	Gauss vanLeer & Gauss limitedLinear & Gauss upwind
laplacianSchemes	Gauss linear uncorrected
interpolationSchemes	linear
snGradSchemes	corrected

表 2.模拟离散格式

实验温度下(25℃)模拟主要用到的物理参数如表 3 所示, 另外根据实验数据, 假

定所有气泡的直径为 2mm。

液体	密度 $\rho/\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$	动力黏度 $\mu/\text{mPa}\cdot\text{s}$	表面张力系数 $\sigma/\text{N}\cdot\text{m}^{-1}$
水	997.2	1.003	0.0725

表 3.物理参数

5.测试算例

如前文所诉，两相流相间作用和耦合机制复杂，因此不同的子模型对模拟结果有着不同的适用性和影响，本文采取了大量的测试案例进行，对于液面高度 37cm 处的液相速度使用 `functionObject` 进行采样输出，与实验数据进行对比，如图 4 所示。

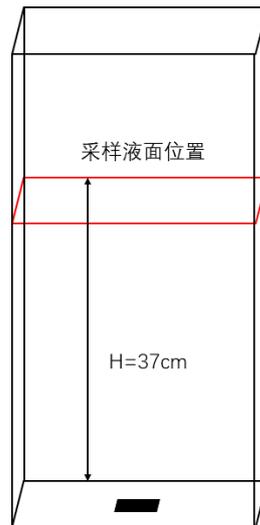


图 4.液相竖直速度采样位置

在众多模拟中，各种相间作用模型的选取和系数都具有很大差异，本文拟选用的相间作用力和简称总结在表 1 中。

子模型	参考名称
Drag force(DM)	DM1: SchillerNaumann
	DM2: TomiyamaCorrelated
Lift force(LM)	LM1: Tomiyama
	LM2: Moraga
	LM3: LegendreMagnaudet
	LM4: $C_l = 0.5$
Turbulent dispersion force(TD)	TD1: Burns
	TD2:Gosman
	TD3: $C_{TD} = 1$:
Virtual mass force(VM)	$C_{VM}=0.5$
Turbulence model(TM)	Laminar:
	Liquid & gas: laminar
	RANS1:
	Liquid: mixtureKEpsilon
	Gas: mixtureKEpsilon
	RANS2:
	Liquid: LaheyKEpsilon
	Gas:continuousGasKEpsilon
	LES1:
	Liquid: SmagorinskyZhang
	Gas: continuousGasKEqn
	LES2:
Liquid: NicenoKEqn	
Gas: continuousGasKEqn	
Liquid-phase wall model	Single-phase wall function

表 4.相间作用模型和湍流模型的选择及简称

本文的测试 case 和各个算例选取的不同的子模型总结于表 5, 虚拟质量力等选取一致的子模型将不再列出。

算例	DM	LM	TD	TM
Run1	DM1	No	No	Laminar
Run2	DM1	LM1	No	Laminar
Run3	DM1	LM2	No	Laminar
Run4	DM1	No	No	RANS1
Run5	DM1	No	TD1	RANS1
Run6	DM1	LM3	TD2	RANS1
Run7	DM1	LM4	No	Laminar
Run8	DM2	LM2	TD3	Laminar
Run9	DM1	No	No	RANS2
Run10	DM1	No	No	LES1
Run11	DM1	No	No	LES2

表 5.不同算例的子模型差异

各算例的计算在搭载了双路 CPU: AMDEPYC7763 和 512G 内存的服务器上进行, 采用 128 核并行计算。计算过程中, 内存占用不超过 10G, 计算时长不同算例从 2h 到 8h 不等, 即约 256~1024 核时, 10~40 CPU days。

6.计算结果

如前文所述，每个算例进行了 220s 计算，考虑到仿真初期计算收敛性不好，对 20-220s 的 37cm 处的竖直液体速度进行了采样并且平均处理，得到统计意义上的表观液体速度。图 5 为瞬态气含率。图 6, 7 为瞬态的气相和液相速度，图 7, 8 为平均的气液速度。

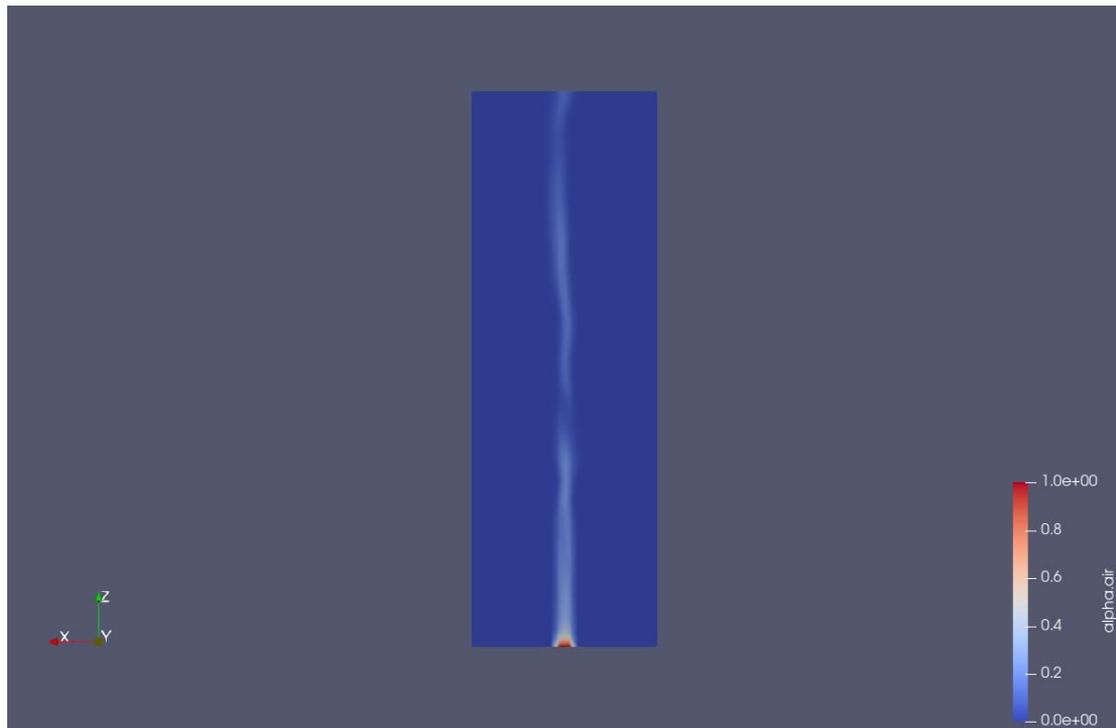


图 5.模拟瞬态气含率

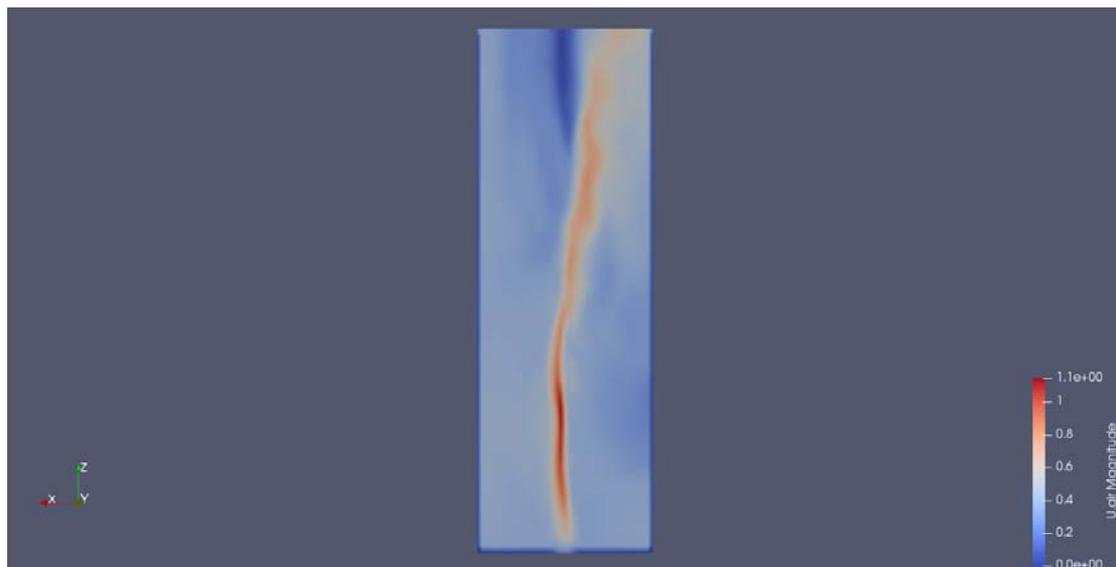


图 6.瞬态气相速度

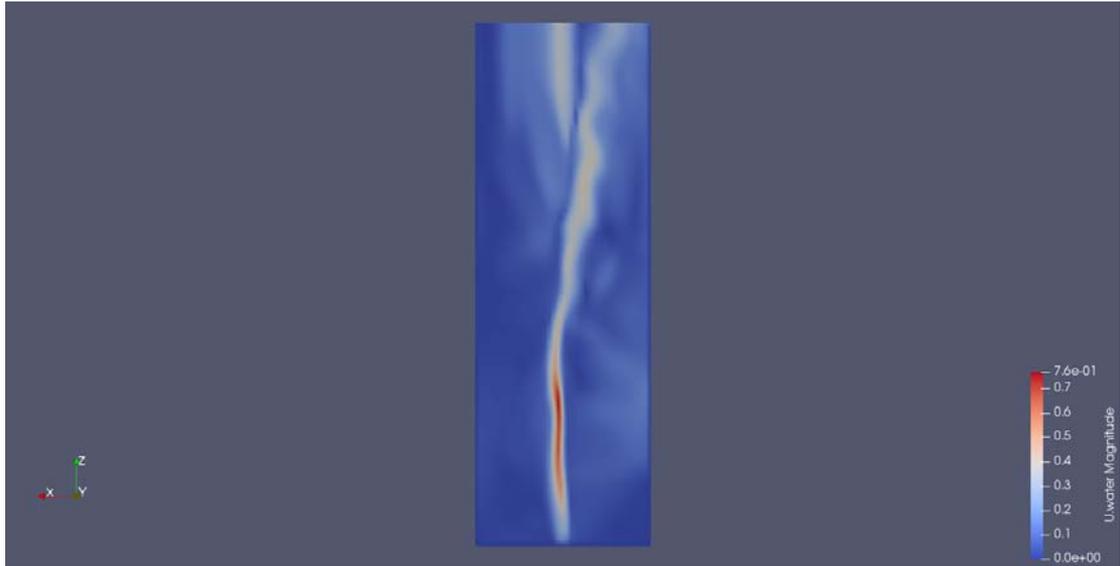


图 7.瞬态液相速度

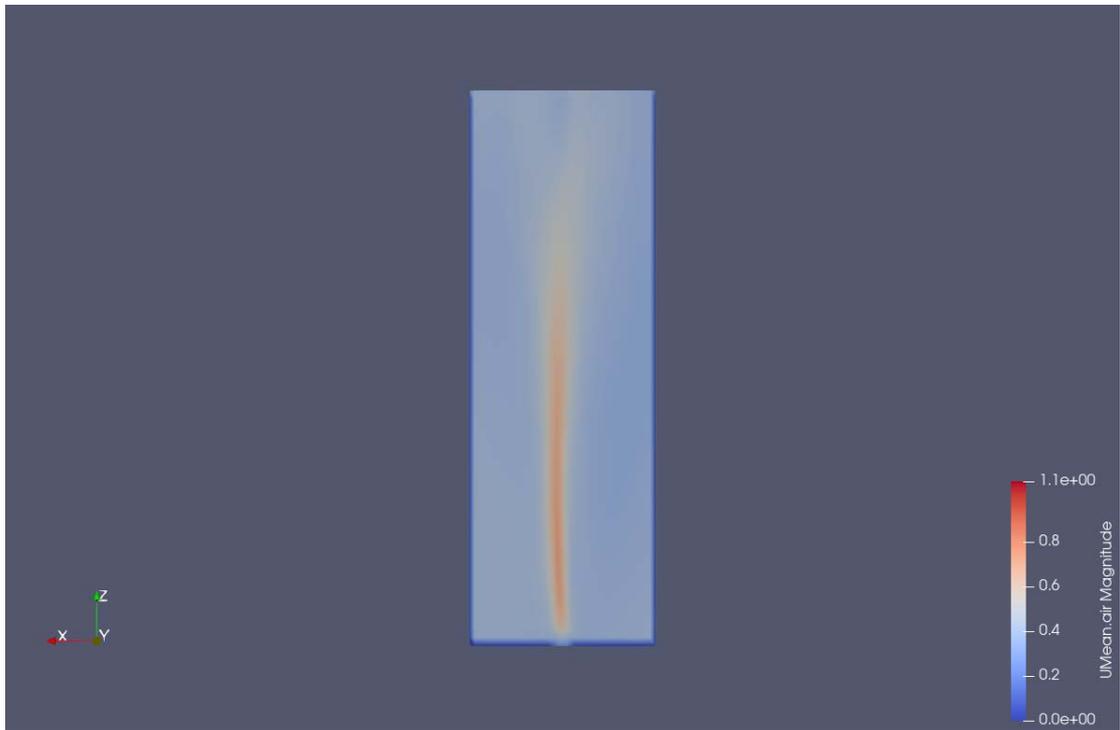


图 8.平均气相速度

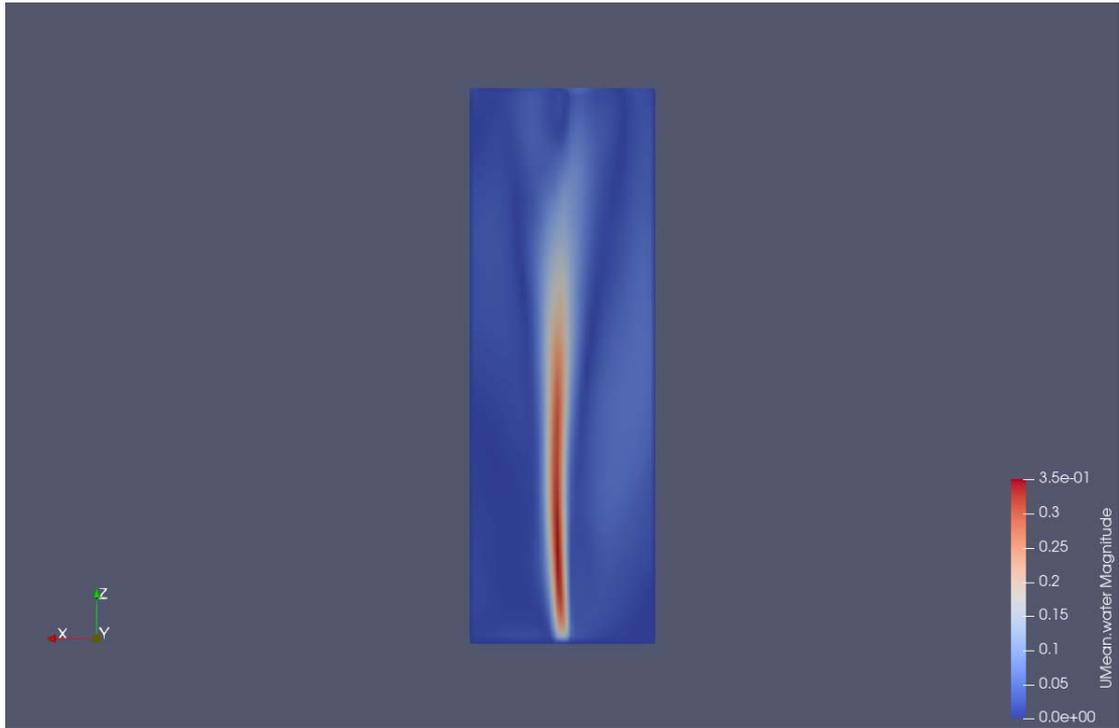


图 9.平均液相速度

6.1 湍流模型的影响

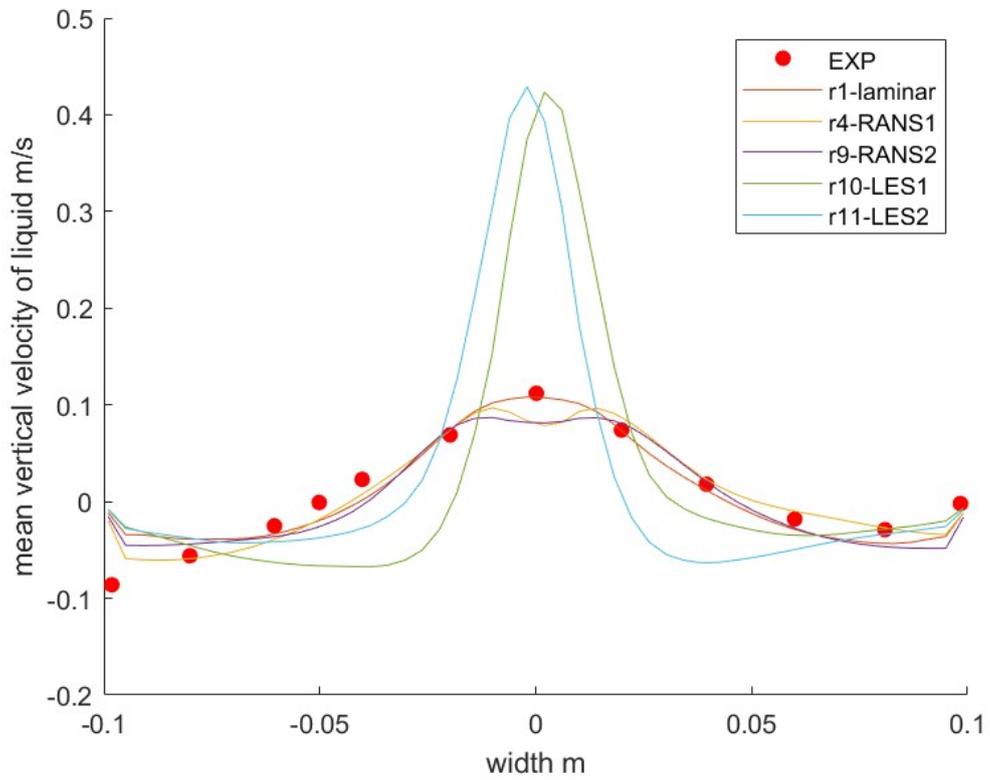


图 10.湍流模型的影响

由图 10 看，显然所有 LES 模拟均的气相速度过大，这是由于 LES 模拟网格尺度

与气泡大小限制的网格数相矛盾造成的。在中心处，RANS 模型均预测出了双峰结构，层流模拟则预测了单峰结构，但是在近壁面处，RANS 的表现更好，对于沿着壁面向下的速度预测比层流表现更好。

6.2 曳力的影响

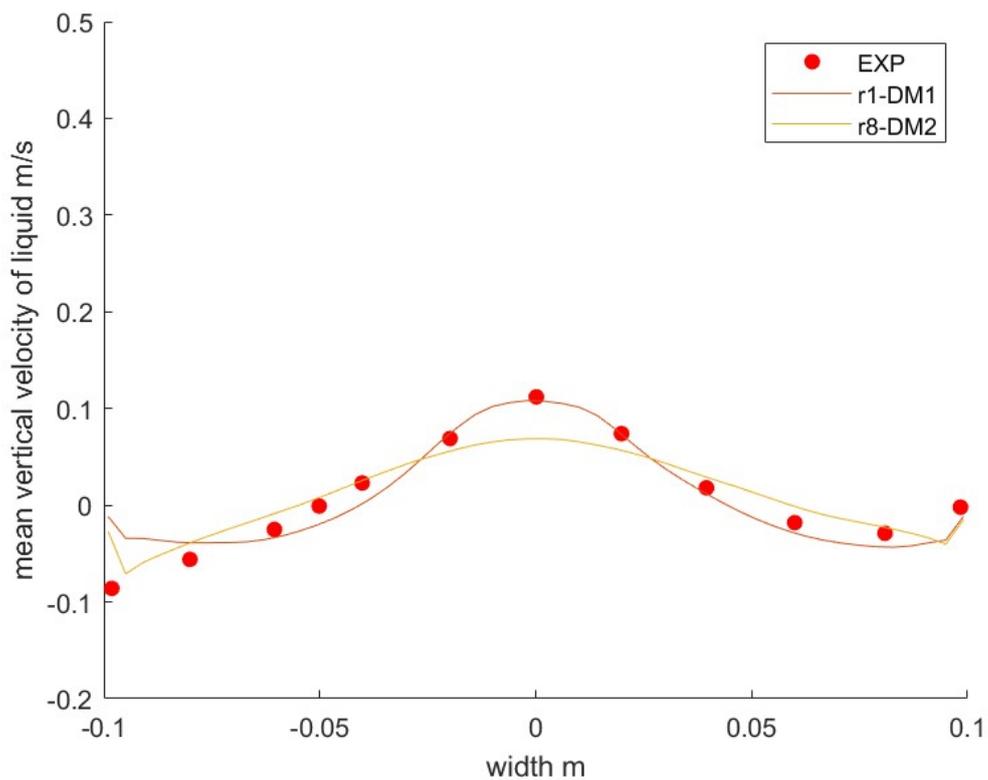


图 11.曳力的影响

在图 11 中，两种曳力模型均在近壁面处表现出来良好的预测，但是 DM2 由于对气泡群行为进行修正，表现更好。在中心区，气泡群较少，大体积的单气泡聚集与此，因此 DM1 预测更好。

6.3 升力的影响

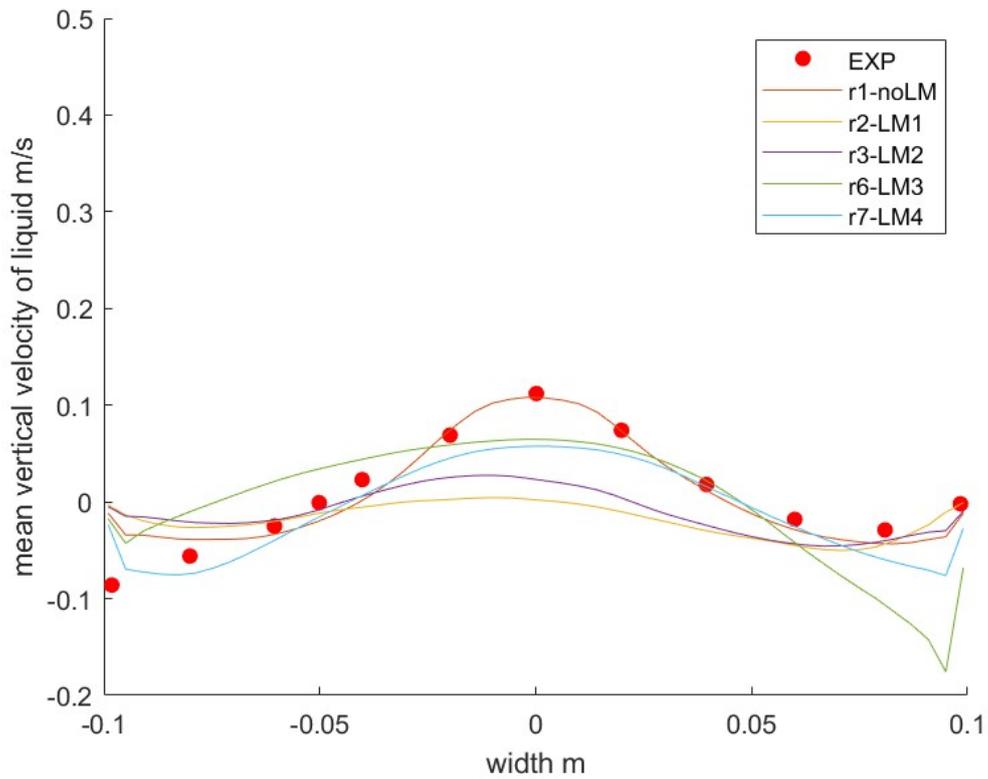


图 12 升力的影响

显然引入升力模型能够正确预测近壁面的小气泡行为，大气泡在中心上升，近壁区小气泡下降，导致速度场出现向下的趋势。在几种升力模型中 LM4 表现最好，LM1 和 LM2 在中心区表现不佳，对于速度预测过低；LM3 则对于壁面求解过于激进。

6.4 湍流耗散力的影响

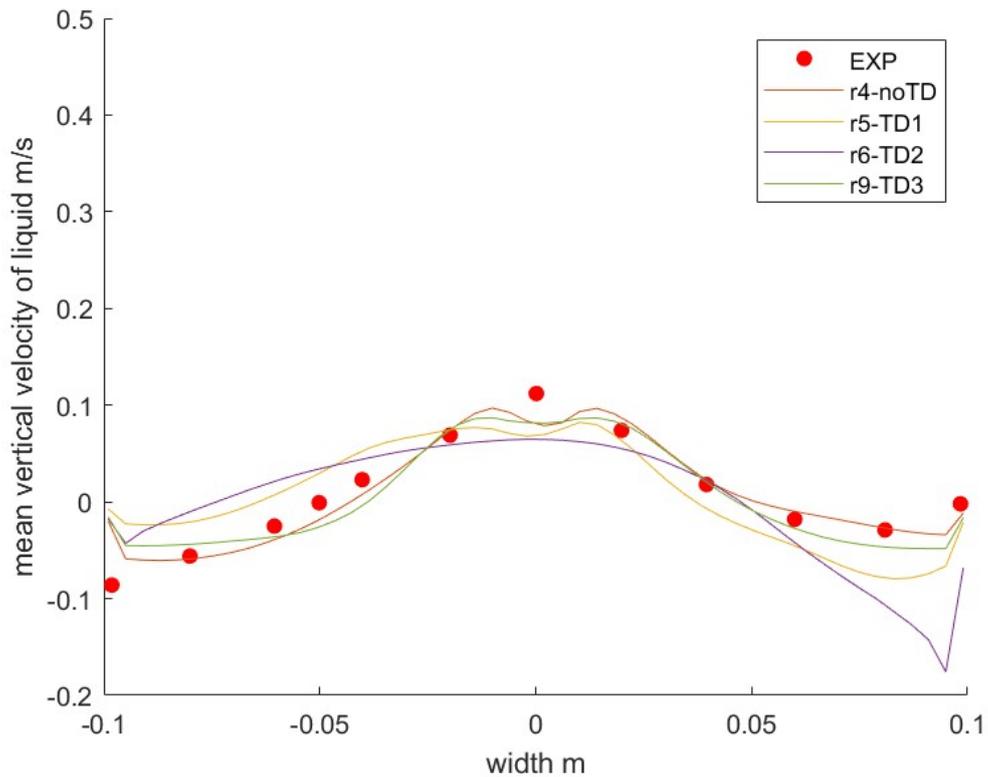


图 13.湍流耗散力的影响

湍流耗散力作为分散流中的湍流扩散，对气泡体积分数的径向分布起重要作用。负责将将气泡从高浓度区域分散到低浓度区域并平滑局部空隙率。在升力系数为负的情况下，湍流弥散力负责将气泡从壁面附近转移到流道中心。湍流耗散力的加入，使得速度分布更为平滑，中心区预测呈现单峰状态，TD1 和 TD3 表现均令人满意，TD2 则平滑过度。

7.结论

本文模拟了实验室级别的矩形鼓泡塔内的气泡流。仿真结果表面，RANS 模拟时间耗费低且得到了不错的效果，LES 模拟很难平衡网格大小。升力的引入有助于解析壁面处的小气泡下降引起的流场，湍流分散力光滑流场，使得速度分布更为平滑。未来将考虑引入群体平衡模型，对气泡分布进行求解，并通过索特平均直径修正曳力系数，提高仿真的准确性。

参考文献

- [1] Buwa, V. V., & Ranade, V. V. (2002). Dynamics of gas–liquid flow in a rectangular bubble column: experiments and single/multi-group CFD simulations. *Chemical Engineering Science*, 57(22-23), 4715-4736.
- [2] Aiyer, A. K., Yang, D., Chamecki, M., & Meneveau, C. (2019). A population balance model for large eddy simulation of polydisperse droplet evolution. *Journal of Fluid Mechanics*, 878, 700-739.
- [3]<https://openfoam.org/>