

剪切变稀型流体在搅拌槽中流动与混合特性数值模拟

张丽丽, 黄雄斌

(北京化工大学化学工程学院, 北京 100029)

摘要: 使用计算流体力学(CFD)软件 CFX 对剪切变稀型流体混合特性进行了数值模拟。计算了剪切变稀型流体在不同转速下的自由液面高度及表面示踪粒子运动时间, 并与实验进行了比较。搅拌槽直径 $D=480$ mm, 搅拌桨为 45° 两斜叶桨, 无挡板, 以某催化剂胶体为工作物料。自由液面高度计算方法采用 VOF 模型, 层流状态。时间计算方法采用表面示踪粒子运动法, 并比较了牛顿流体与剪切变稀型流体表面示踪粒子运动时间的差异。

关键词: 搅拌槽; 自由液面; 表面示踪粒子运动时间; 数值模拟

中图分类号: O357.5⁺2 文献标识码: A

Mathematical simulation of flow and mixing characteristic of shear thinning liquid in agitating tank

ZHANG Li-li, HUANG Xiong-bin

(College of Chemical Engineering, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China)

Abstract: The commercial software CFD with code CFX was used to simulate the flow and mixing characteristic of shear thinning liquid in a $\Phi 480$ mm agitating tank with two 45° pitch of paddles and without baffles, including the simulation of the height of free-surface and movement time of tracer-particle in free-surface. VOF, Lagrangian particle tracking and laminar flow model were used, and the result was compared to experiment result. The simulation results can give some useful information for the design of industrial agitating tank.

Key words: agitating tank; height of free-surface; movement time of tracer-particle in free-surface; numerical simulation

搅拌设备在化工、冶金、能源及环境等行业中广泛应用, 对于低黏度的流体为了增强搅拌混合效果, 一般要在槽壁处加入挡板。但是对于较高黏度的流体, 加入挡板并不能增强混合效果, 反而会在挡板前后区域容易形成流动死区, 因此对于黏度大、不透明的流体一般采用无挡板设置(对于有这种特点的流体, 自由液面是验证模拟正确性的重要判定标准)。

对于自由液面的模拟研究, 近年来有了很大的进展。OTUTE 等用 VOF 方法对翼形桨搅拌槽(并行竞争反应的)中反应环带进行了数值模拟, 并与实验进行了对比^[1]; TANG 等用 VOF 方法对 2 种不互溶金属液体的分界面进行了数值模拟^[2]; JEAN-PHILIPPE 等用 VOF 方法对搅拌槽(三叶后掠式搅拌桨, 非标准局部带有挡板的)内水/空气在不同转速下的自由液面处涡流形状进行了数值模拟^[3]; 包雨云对搅拌槽内气-液两相自由液面进行了数值模拟^[4](主要侧重于比较气含率的分布)。

前人对搅拌槽中自由液面的模拟多为低黏度牛顿流体, 高黏度剪切变稀型流体模拟国内外报道还较少。混合时间是表征搅拌槽内流体混合状况的一个重要参数。近年来很多学者对混合时间也进行了研究。

张国娟等对单层轴流式三叶 CBY 翼形浆搅拌槽内的混合时间进行了数值模拟^[5], 所得模拟结果与实验值相吻合; 洪厚胜等对不同规模的机械搅拌生物反应器的混合特性进行数值模拟, 模拟结果与实验测定值相比误差随反应器容积增大而逐渐减小^[6]; 周国忠等对单层涡轮浆搅拌槽内的混合时间进行了初步数值研究, 计算得到的浓度响应曲线与文献数据趋势一致^[7]。

前人对混合时间的模拟物系多为单相水, 且易于用激光测试法及浓度法进行实验测量。但对于某些剪切变稀型流体(如 FCC 催化剂胶体)由于实验物系透光度很差, 使得进入搅拌槽的激光全部被耗散, 接受的光信号为零, 因此无法采用激光测试法得到混合时间。又因为本文实验物系颜色较深, 黏度及稠度较大, 给采用浓度法测定混合时间带来了困难。因此笔者将混合时间测定方法改为表面示踪粒子运动轨迹法, 并把模拟结果与实验进行比较。

1 实验装置与模拟方法

1.1 计算体系

1.1.1 搅拌槽结构

计算采用的搅拌槽为直径 $D = 480$ mm 的圆柱形椭圆封底槽, 无挡板条件, 搅拌槽高 430 mm, 椭圆封头高 120 mm。搅拌桨采用 45° 两斜叶桨, 桨叶为逆时针旋转(下压)。桨叶直径 $d = 0.73D$, 桨叶叶端宽度为 50 mm, 桨叶根端宽度为 70 mm, 桨叶离槽底距离 $C = 110$ mm, 初始液位高 265 mm, 几何体与网格划分示意图如图 1 所示。

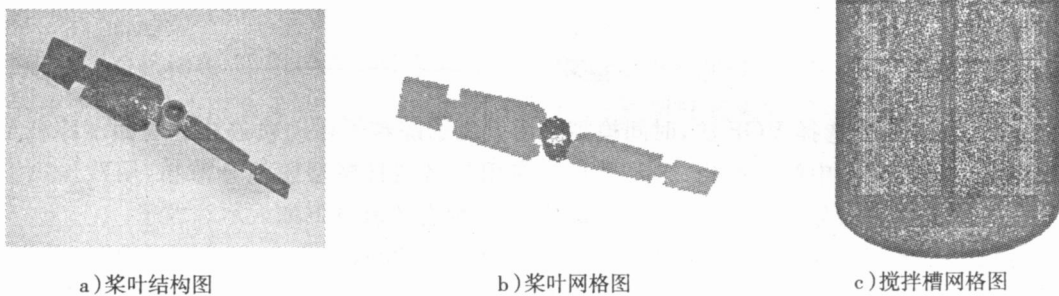


图 1 几何体与网格划分示意图

Fig. 1 Structure and grid sketch map

如图 1 所示, 计算中采用四面体非结构化网格对几何体进行划分。对槽体静止部分、桨叶旋转部分分别划分网格。为了增加计算精度, 对桨叶进行了网格加密处理。网格总数为 1 955 685 个, 网格节点总数为 342 518 个。

1.1.2 计算物系

研究的剪切变稀型流体为工业上应用广泛的某催化剂胶体。这种胶体流变特性比较复杂, 测量结果及数据拟合如图 2 所示, 图中 G_p 为实验剪切率, τ 为应力。

从图 2 中可以看出, 低剪切速率时(小于 0.2 s^{-1}) 流体表现出广义宾汉流体特性。对于宾汉流体, 起始流动必须在外力大于某一值后才开始黏性流动。但是当剪切速率大于 0.2 s^{-1} 时, 应力随着剪切速率的增加而减小, 减小的原因是测量锥板狭缝中的裂口已经变得非常大, 流体出现打滑现象, 测量物料的特性发生了改变, 因此超过临界剪切速率后测得的结果不能真实地代表实际流体。

模拟分 2 部分进行: 第 1 部分不考虑物料突变现象, 即认为整体搅拌槽内流动均符合广义宾汉流体方程。宾汉流体数学模型设置如下:

$$\tau = \tau_0 + K \cdot \dot{\gamma}^n \quad (1)$$

式中: τ_0 为屈服应力, 单位为 Pa; $\dot{\gamma}$ 为模型剪切速率, 单位为 s^{-1} ; K 为稠度系数, 单位 $\text{Pa} \cdot \text{s}^n$, n 为流变指数。采用低剪切实验测量数据进行拟合, 即取图 2 的 $G_p \in [0.01 \sim 0.2] \text{ s}^{-1}$ 范围内数据, 拟合后可得 τ_0 为 0.184 Pa, K 为 555.01 $\text{Pa} \cdot \text{s}^n$, 流变指数 n 为 0.535。采用此数学模型模拟搅拌槽内流体的流动, 并把模拟结果与实验进行比较。

模拟第 2 部分考虑物料突变现象。实际物料在实验过程中超过某一转速桨叶区也会出现打滑现象,这可以从表 1 看出,当搅拌转速 $N = 230 \text{ r/min}$ 时,扭矩值反而减小。因此对于高剪切速率数学模型(大于 0.2 s^{-1}),采用图 2 测量突变后数据进行拟合,此段数据符合幂率流体方程,经拟合后可得 $K = 89.4 \text{ Pa} \cdot \text{s}^n$,流变指数 $n = -0.067$ 。流变指数为负数的原因主要是由于物料出现打滑现象,导致物料特性改变。因此考虑物料突变现象后的数学模型分 2 段进行模拟,低剪切时(小于 0.2 s^{-1})采用广义宾汉流体方程,高剪切时(大于 0.2 s^{-1})采用幂率流体方程(即图 2 所示第 3 条正三角形数据拟合方程),并把模拟结果与实验结果进行比较。

1.2 模拟条件

1.2.1 模拟方法

笔者使用商业 CFD 软件 CFX,所采用的计算方法为多重参考系法。

1.2.2 模型选择

采用直角坐标系,搅拌槽内剪切变稀型流体不同转速下的黏度范围为 $0.3 \sim 2897 \text{ Pa} \cdot \text{s}$,可以计算出 Re 变化范围为 $0.17 \sim 1995$ 。因此物理模型采

用层流模型,自由液面模型选择 VOF 法,时间模拟采用表面示踪粒子运动轨迹法。表面示踪粒子运动轨迹法原理为模拟分散在连续相中的离散相,主要思想为应用拉格朗日模型模拟分散相,用欧拉模型模拟连续相。本文粒子追踪模拟步骤分 2 步,首先计算流场,然后在稳态的流场下加入示踪粒子。

对剪切变稀型流体,共模拟了 3 种不同的转速,分别为 $192, 206, 230 \text{ r/min}$,差分格式使用混合格式,不考虑温度的影响,计算残差取 1×10^{-6} 。

1.2.3 VOF 方法数学模型

模拟流体与空气两相相流的自由表面处理采用 VOF 模型。模型对每一项引入体积分数变量,通过求解每一个控制单元体积分数值确定相同界面。两相容积比率满足如下方程:

$$\alpha_1 + \alpha_2 = 1. \quad (2)$$

式中: α_1 表示空气的容积比率; α_2 表示拟模拟流体的容积比率。

在一个单元中,空气的容积比率会有 3 种情况,分别为 $\alpha = 0, 1$ 或介于 0 和 1 之间,分别表示充满模拟流体、充满空气和流体与空气的混合,在每个单元内流体与空气的容积比率之和为 1。

1.2.4 边界条件

初始液位高度为 265 mm ,VOF 方法初始条件定义如下:高于 265 mm 为空气,即 $\alpha_1 = 1$;低于 265 mm 为拟模拟流体,即 $\alpha = 0$ 。出口边界条件采用 Opening 出口边界条件,工作压力为 101325 Pa 。模型采用层流模型,近壁面采用标准壁面函数方法处理。

2 结果与讨论

2.1 自由液面高度与实验结果的比较

从图 2 实验测量数据中可知,大于临界点(0.2 s^{-1})后,物料特性发生了改变,如果模拟计算采用第 1 部分广义宾汉流体数学模型模拟整体搅拌槽内流体的流动,当转速 $N = 192 \text{ r/min}$ 时,自由液面结果如图 3a) 所示。

从图 3a) 可以看出自由液面几乎没有发生变化,原因在于高剪切速率时采用了低剪切广义宾汉数学模型,没有考虑到物料的打滑现象,使得搅拌槽内表观黏度变大,因此采用这种方法模拟不准确。图 3b) 为采

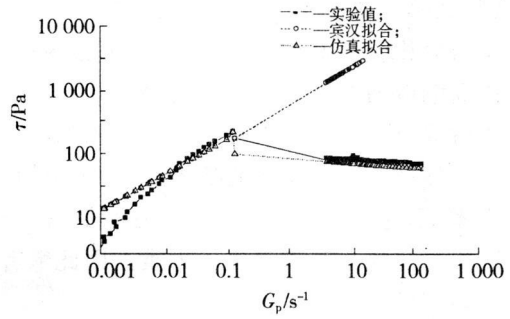


图 2 应力随剪切速率变化图

Fig. 2 Strain data accord to the transformation of shear strain rate

表 1 实验测量扭矩值

Tab. 1 Experiment data of torque

转速/($\text{r} \cdot \text{min}^{-1}$)	实验测量扭矩值/($\text{N} \cdot \text{m}$)
163	2.685 5
177	3.265 0
191	3.722 0
206	4.790 0
230	4.332 5

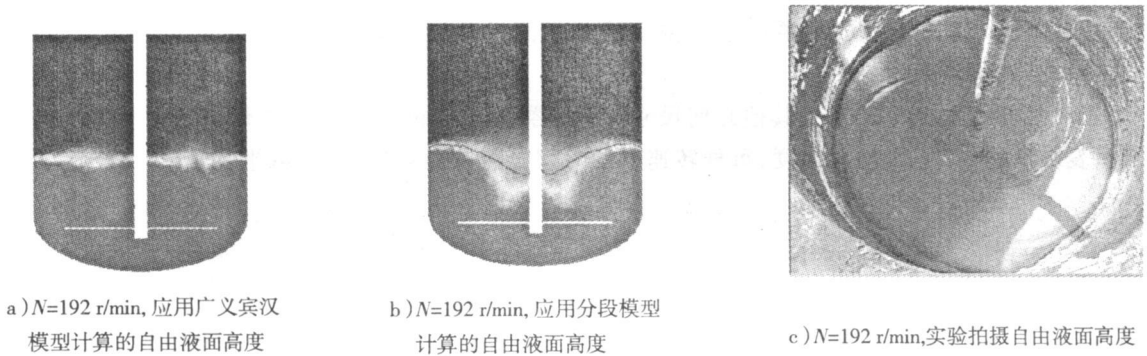


图 3 $N = 192\text{ r/min}$, 自由液面模拟高度
Fig. 3 $N = 192\text{ r/min}$, height of free surface

用第 2 部分数学模型, 即低剪切采用广义宾汉流体模型, 高剪切采用幂率流体模型模拟 $N = 192\text{ r/min}$ 自由液面高度。可以看出液面发生了变化, 与实际较接近(如图 3c) 拍摄图)。因此笔者模拟采用第 2 部分分段模型进行模拟。

从图 3c) 实验拍摄图可以看出自由液面弯曲曲率比较清晰, 但是对于图 3b) 模拟计算的自由液面弯曲曲率则较模糊, 主要原因是 VOF 物理模型带来的误差。具体液位高度所在的位置, 根据模拟软件的情况, 取液面处流体与空气混合因子为 0.5 时的高度为自由液面高度, 如图 3b) 曲线所示, 曲线的形状即代表自由液面的位置。

为了便于和实验相比较, 采用无因次数据图分析自由液面高度, 并比较了 3 种不同转速下的高度, 结果如图 4 所示, 图中变量代表的含义见文末符号说明。由于 45° 两斜叶桨桨叶成轴对称分布, 因此分析区域选取槽体的 1/2。

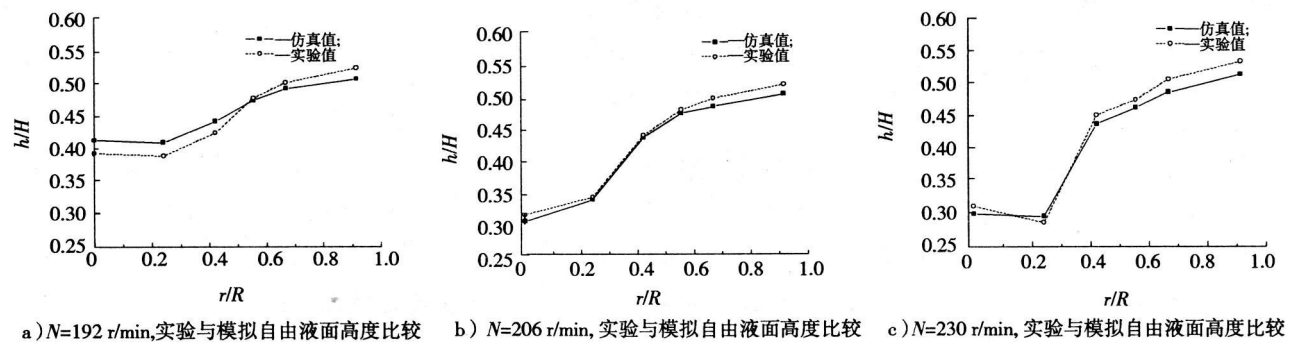


图 4 不同转速下模拟与实验自由液面高度比较图

Fig. 4 Comparison of the height of free surface between simulation and experiment in different rotate speed

从如上 3 个模拟与实验自由液面高度比较图中可以看出, 随着转速的增加, 自由液面弯曲曲率加大。3 种转速下的模拟与实验最大误差分别为 5.3%, 2.7%, 3.9%。当转速比较低时, 模拟与实验误差较大。原因是当转速低时, 整体搅拌槽内剪切速率变化范围相对较小。从图 2 可知低剪切速率时, 测量数据波动较大, 实验数据与拟合数据不能完全吻合, 即数学模型不能非常真实地表示实际物料在每一点的流变特性。随着转速的增加, 数学模型比较接近实际物料, 表现在自由液面高度上, 两者的误差较小。

2.2 表面示踪粒子运动时间模拟与实验结果比较

2.2.1 浓度法与示踪粒子法关系

前人模拟混合时间多采用浓度法(浓度法混合时间定义为当示踪剂浓度达到最终稳定浓度值的 $\pm 5\%$ 时, 该时刻即为混合时间)。

由于本实验物系为不透明的胶体, 黏度及稠度均比较大, 使得采用浓度法判断混合时间存在一定困难。因此本实验判定物料混合状态采用表面示踪粒子运动轨迹法。具体步骤为在自由液面靠近壁面处加入密度

较小的固体颗粒,测量出固体颗粒沿着自由液面从壁面处到达搅拌轴轴心的运动时间。可采用表面示踪粒子运动轨迹法判定物料混合状态的原因在于浓度法与表面示踪粒子运动轨迹法之间存在着定量的倍数关系。以甘油为例进行验证。

实验甘油黏度为 $0.251 \text{ Pa} \cdot \text{s}$,其他几何尺寸及桨叶类型与拟模拟胶体物系相同,测量了3种不同的转速,结果如表2所示,为了增加准确度,每种转速下的时间分别测量3次,然后取平均值。

表2 浓度法与示踪粒子法倍数关系表

Tab.2 Multiple relation between concentration and particle tracking time

转速/ ($r \cdot \text{min}^{-1}$)	混合时间/s				2种方法 倍数关系	2种方法 平均倍数关系
	浓度法	浓度法平均时间	表面示踪粒子运动法	表面示踪粒子运动 轨迹法平均时间		
150	6.41, 7.18, 7.84	7.143	1.37, 1.68, 1.82	1.623	4.40	
164	5.37, 5.19, 5.26	5.273	1.28, 1.03, 1.03	1.113	4.74	4.25
178	3.62, 3.37, 3.40	3.463	0.94, 0.97, 0.97	0.96	3.61	

从表2中可以看出,2种方法平均倍数关系为4.25。即采用表面示踪粒子运动轨迹时间乘以4.25倍即得到浓度法混合时间的大小。因此物料的混合时间可以采用这种表面示踪粒子运动轨迹法间接得到。

由于甘油与拟模拟胶体几何尺寸、桨叶类型及液面高度完全相同,这种平均倍数关系也可应用到胶体中。笔者模拟采用这种表面示踪粒子运动轨迹法,并把模拟结果与实验进行比较。

2.2.2 表面示踪粒子运动轨迹时间模拟结果

1) 糖浆牛顿流体表面示踪粒子运动轨迹时间模拟结果

为了对比模拟结果,首先以黏度为 $42 \text{ Pa} \cdot \text{s}$ 的糖浆牛顿流体作为参考。为了准确地模拟出表面示踪粒子运动时间,示踪粒子从2种不同位置处加入,这两处位置高度相同,水平角度相差 90° ,得到的结果取平均值作为运动时间。糖浆牛顿流体自由液面示踪粒子运动轨迹如图5所示,其中转速 $N = 206 \text{ r/min}$ 。

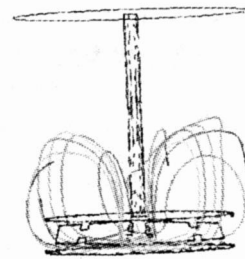


图5 糖浆牛顿流体示踪粒子运动轨迹图
Fig.5 Contrail of the tracer particle in syrup liquid

从图5可以看出糖浆牛顿流体的流型比较规则,原因在于糖浆牛顿流体的黏度不随剪切速率的变化而变化,搅拌槽内的流场也比较单一。计算示踪粒子运动时间时,由于粒子模型自身存在的问题,颗粒的加入方法与实验不同。实验粒子从靠近壁面处的表面加入,而模拟计算时必须从壁面处流体内部加入,因此模拟计算运动时间

必须减去粒子从流体内部运动到表面所经过的时间。实验及模拟示踪粒子运动时间如表3所示。

表3 糖浆牛顿流体实验与模拟表面示踪粒子运动时间比较

Tab.3 Comparison of experiment and simulation movement time of tracer-particle in syrup liquid

糖浆(黏度为 $42 \text{ Pa} \cdot \text{s}$), 转速为 $206 \text{ r} \cdot \text{min}^{-1}$	实验值/s	模拟值/s	误差/%
	5.25	4.87	7.8

产生误差的原因:一是实验测量带来的误差,因为示踪粒子运动时间计时采用的是秒表计时法,这种方法不是非常精确;二是模拟采用的物理模型本身带来的误差。

2) 剪切变稀型流体表面示踪粒子运动轨迹时间模拟结果

共模拟了2种不同的转速(分别为 $206, 230 \text{ r} \cdot \text{min}^{-1}$)的示踪粒子运动时间,运动轨迹如图6所示。

从图6中可以看出,与糖浆牛顿流体运动轨迹(见图5)相比较,剪切变稀型流体的流型不规则。原因在于搅拌槽内不同位置处的表观黏度差别很大,流型变化比较复杂,搅拌槽内的流场不均匀。实验及模拟示踪粒子运动时间数据比较如表4所示。



a) $N=206 \text{ r/min}$, 剪切变稀型流体自由液面示踪粒子运动轨迹

b) $N=230 \text{ r/min}$, 剪切变稀型流体自由液面示踪粒子运动轨迹

图 6 剪切变稀型流体不同转速下示踪粒子运动轨迹图

Fig.6 Contrail of the tracer particle in shear-thinning liquid

表 4 剪切变稀型流体实验与模拟表面示踪粒子运动时间比较

Tab.4 Comparison of experiment and simulation movement time of tracer-particle in shear-thinning liquid

剪切变稀型流体	实验值/s	模拟值/s	误差/%
转速为 $206 \text{ r} \cdot \text{min}^{-1}$	1.00	1.49	49
转速为 $230 \text{ r} \cdot \text{min}^{-1}$	0.72	0.94	31

与糖浆牛顿流体相比较, 剪切变稀型流体示踪粒子运动时间误差较大。产生误差的原因除了实验测量与物理模型产生的误差外, 采用的数学模型只是实际物料的近似, 不能准确地代表流体本身也是误差产生的原因。以后的研究可以对数学模型进行改进。

3 结 论

1) 用数值模拟计算了不同转速下的自由液面高度, 与实验值相比趋势相同, 当转速较小时, 液面弯曲曲面较平缓, 随着转速的增加, 自由液面弯曲程度加剧, 轴心处漩涡比较大。

2) 在高剪切速率 (大于 0.2 s^{-1}) 情况下, 考虑打滑现象比不考虑打滑现象模拟结果更接近实际流体。

3) 对于表面示踪粒子运动轨迹时间模拟结果, 牛顿流体比剪切变稀型流体准确, 原因在于流体物性的差异。牛顿流体流场变化比较单一, 剪切变稀型流体流场变化比较复杂, 且数学模型只能近似地代表实际流体, 难于准确得到运动时间。

符号说明:

C	— 桨叶离槽底距离 (m)	N	— 搅拌转速 (r/min)
d	— 桨叶直径 (m)	τ_0	— 屈服应力 (Pa)
D	— 搅拌槽直径 (m)	G_p	— 实验剪切速率 (s^{-1})
r	— 水平方向点到轴心距离 (m)	γ	— 模型剪切速率 (s^{-1})
R	— 搅拌槽半径 (m)	K	— 稠度系数 ($\text{Pa} \cdot \text{s}^n$)
h	— 自由液面离底距离 (mm)	n	— 流变指数
H	— 搅拌槽高度 (mm)		

参考文献:

[1] OTUTE A, PIERO M. A computational and experimental study of mixing and chemical reaction in a stirred tank reactor equipped with a down-pumping hydrofoil impeller using a micro-mixing-based CFD model[A]. The 10th European Conference on Mixing[C]. The Netherlands: Elsevier, 2000.

(下转第 207 页)

表 4 优化方案 3
Tab. 4 Optimization scheme 3

阶数	固有频率/Hz			结果分析
	原结构	改进后	提高	
1	40.571	56.613	40.0%	改进后虽然 2, 3 阶模态频率提高不如前两个方案, 但是 1, 4 阶模态频率提高明显, 符合设计意图, 结果比较理想
2	71.030	69.259	- 2.5%	
3	95.890	109.02	13.7%	
4	153.72	167.80	9.2%	

4 结 语

1) 用大型有限元分析软件 ANSYS 既可以节省人力和物力, 又有比较高的模拟精度, 在动态设计中是非常重要的手段。

2) 通过对 XH715 立式加工中心的静、动态分析, 机床立柱的动态摆动和扭转变形是影响机床动态性能的主要因素。它将对机床的加工质量造成很大的影响。

3) 机床的立柱和底座是影响机床动态性能的薄弱环节。通过对立柱和底座结构参数的改进, 可以有效地提高机床的动态性能。

4) 本文在有限元建模时, 结合面特性没有充分考虑, 只是采用了结合面耦合的方式, 进一步分析时可以在结合面处采用其他处理手段, 使模型更接近于实际。

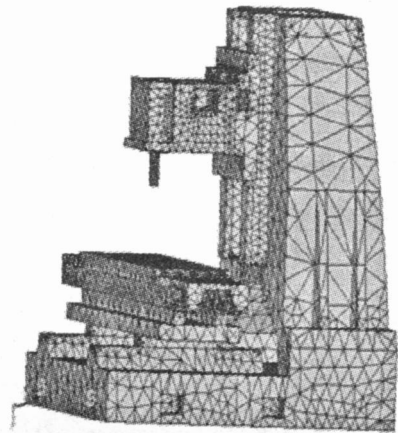


图 3 采用交叉斜筋板立柱的 XH715 立式加工中心
Fig. 3 Column of XH715 with reinforcing plate

参考文献:

- [1] 倪 栋. 有限元分析 ANSYS 7.0 实例精解[M]. 北京: 电子工业出版社, 2003.
- [2] 王伟伟, 翁泽宇, 巫少龙. 大型高效数控铣床有限元模态分析[J]. 机床与液压, 2005, (6): 102-103.
- [3] 卢 熹, 孙庆鸿, 张建润, 等. CK1416 型数控车床床身结构动态优化[J]. 机床与液压, 2003, (2): 124-125.
- [4] 王美娥. 有限元分析在结构设计中的应用[J]. 航天控制, 2004, (2): 85-89.

(上接第 199 页)

- [2] TANG H, WROBEL L C, FAN Z, et al. Numerical analysis of the hydrodynamic behaviour of immiscible metallic alloys in twin-screw rheomixing process[J]. Materials & Design, 2006, 27(10): 1065-1075.
- [3] JEAN-PHILIPPE T, DAVID F F, LASUYE T, et al. An experimental and computational study of the vortex shape in a partially baffled agitated vessel[J]. Chemical Engineering Science, 2006, 62(7): 1915-1926.
- [4] 包雨云. 常温及热态气-液-固三相搅拌反应器流体力学性能研究[D]. 北京: 北京化工大学, 2005.
- [5] 张国娟, 闵 健, 高正明, 等. 翼形桨搅拌槽内混合过程的数值模拟[J]. 高校化学工程学报, 2005, 19(2): 169-174.
- [6] 洪厚胜, 张庆文, 万红贵, 等. 搅拌生物反应器混合特性的数值模拟与实验研究[J]. 过程工程学报, 2005, 5(2): 131-134.
- [7] 周国忠. 用 CFD 研究搅拌槽内的混合过程[J]. 化工学报, 2003, 54(7): 886-890.
- [8] 梁建术, 刘廷召. 不变流形法对动力系统的混沌控制[J]. 河北科技大学学报, 2003, 24(2): 13-18.