

## 高温渗流传热特性及其对煤预热解过程的影响

### 摘要

（燃煤烟气排放给生态环境带来严重破坏，环保问题已成为燃烧用煤所要考虑的主要因素。而其中问题的关键是控制硫、氮气体氧化物的排放，这已成为我们所面临的巨大技术挑战。目前工业上普遍使用的物理脱硫法对有机硫无能为力，而化学法条件要求苛刻且成本过高。于是不影响或基本不影响煤质的高效、经济和温和的热解脱硫技术成为洁净煤技术领域的热门课题之一。）本文在多孔介质传热传质基本理论的基础上，借鉴当前多孔介质内传递规律的研究成果，并且充分分析了煤热解的基本规律，创造性的建立了煤颗粒移动床渗流加热热解模型，采用数值计算的方法对高温气体在颗粒移动床中的渗流传热以及煤颗粒热解、挥发份析出现象进行了探索性研究，取得了值得参考的结论。（此研究结果对课题组后续的实验台的设计和运行具有方向性的指导意义。）

本文（第一章概括的介绍了煤燃烧前脱硫的几种方式，着重对我们研究的高温热解脱硫方式进行了讨论。）（分析了煤高温热解脱硫脱氮的效果，以及各种因素对煤热解脱硫的影响，主要是温度、煤粒径、加热时间、加热速率和压力。）

（第二章较系统地阐述了多孔介质中的传热传质基本理论与经验公式。）（内容主要包括多孔介质中流体的流动机理与基本方程、多孔介质中的热传递现象与描述方程、多孔介质中的传质规律以及多孔填充床中的

传热传质方程及适用条件。

（在第二章的理论的指导下，我们参考了当前多孔介质传热传质研究的最新成果，结合我们的研究课题，建立了惰性多孔介质水平导管和垂直移动床的物理数学模型，并分别对其进行了数值计算。水平导管模型是对工业上普遍应用的给料设备进行的简单模拟，目的是分析高温气体回串给料机的渗透程度。惰性垂直移动床是对工业生产中多种应用的模拟。通过多种工况条件下的数值计算，我们得出了高温气体在多孔介质水平导管中的瞬态渗透规律以及高温气体在惰性垂直移动床中的渗流传热的基本规律。）

（第四章在第三章的基础上，更进一步考虑了煤颗粒中有挥发份析出的情况，研究了煤颗粒移动床的热解及其稳态和瞬态传热传质规律。由于煤热解过程的复杂性，我们的模型对实际情况进行了合理简化，如不考虑热解过程的多种化学反应，而是把挥发份当成单一的气体来考虑，另外忽略煤热解后对颗粒床孔隙结构、颗粒大小以及固体密度的影响。在此基础上建立了描述挥发份传递的数学模型，并对整个系统的动量、能量、质量传递进行了数值计算。）

关键字： 脱硫， 多孔介质， 高温热解， 移动床， 数值计算

# HEAT TRANSFER FEATURES OF HIGH-TEMPERATURE GAS IN POROUS MEDIA AND ITS EFFECT ON COAL PYROLYSIS

## ABSTRACT

The environment has been seriously destroyed by the waste gas of coal combustion, so the most important problem of coal utilization is environmental protection. The key of the problem is emission control of  $\text{NO}_x$  and  $\text{SO}_x$ . At the present time, the generally methods used by industry are physical method and chemical method. But the former is useless to organic sulfur and the later cast too much. Therefore pyrolysis desulfuration technology becomes one of the most popular methods in the field of clean coal. The reason is that pyrolysis desulfuration method is economical, efficiently and being unaffected to coal. Based on the basic theory of heat and mass transfer in porous media, referencing the last research achievements of others, we analysis the basic law of coal pyrolysis and set up the models about heat and mass transfer in coal particle moving bed. We have studied the seepage and heat transfer phenomena of high temperature gas in porous media, which involves coal gasification.

Several methods of desulfuration of coal before combustion were introduced simply in the first chapter. Technology of pyrolysis was

particularly discussed. We had talked about its effect on desulfuration and removing nitrogen. Furthermore, factors influencing the process were discussed, which were temperature of coal, size of the particles, times speed of heating and pressure.

In the second chapter, we systematically discussed the theory of heat and mass transfer in porous media and introduced some experiential formulas. Flow and heat transfer of liquid in porous bed was especially talked about.

In the third chapter we set up the physical and mathematical models about level pipe full of porous media and vertical moving bed of inert particle respectively. The former simulates feeders largely used in factories and the later is simulation of bed equipments used in lots of industry fields. By using computer, we analysis the two models on variational conditions and gain some useful and reasonable results.

Based on the models and results of the third chapter, we moved forward by giving consideration to pyrolysis of coal particle in moving bed. We have studied the stable and unstable cases of coal particle bed in chapter 4. Because its complicity, we simplified the phenomena of the instances and bring forward some rational hypothesis, upon which, the model was numerically computed.

**KEY WORDS** desulfuration, porous media, moving bed, pyrolysis, numerical computation

## 主要符号表

## 拉丁字母符号

$A$	面积 ( $m^2$ ), 系数
$a$	热扩散系数
$a_m^T$	由热量传递所引起的质量扩散系数 [ $m^2/(s \cdot ^\circ C)$ ]
$a_m$	(= $D$ ) 质量扩散系数 ( $m^2/s$ )
$B_i$	(= $\epsilon L/k$ ) Boit 数
$Bu$	( $h_k C_p \Delta p / C \Delta T$ ) Bulygin
$C$	溶剂质量浓度 ( $kg/m^3$ ), 比热容 [ $J/(kg \cdot ^\circ C)$ ]
$C_p$	定压比热 [ $J/(kg \cdot ^\circ C)$ ]
$D$	质量扩散系数 ( $m^2/s$ )
$D_o$	(= $K_{p,c} / \epsilon \omega l^2$ ) Darcy 数
$E$	热解活化能, ( $J/mol$ )
$d$	直径(m)
$Fe$	(= $\Phi Ko Pn$ ) Fedorov 数
$Fo$	(= $a\tau/l^2$ ) Fourier 数
$g$	重力加速度
$H$	焓 (J), 高度
$J$	广义通量
$K$	水力传导系数 ( $m/s$ ), 总传热系数 [ $W/(m^2 \cdot ^\circ C)$ ], Arrhenius 热解速率常数
$K_p$	多孔介质渗透率 ( $m^2$ )
$k$	导热系数 [ $W/(m \cdot ^\circ C)$ ]
$k_e$	有效导热系数 [ $W/(m \cdot ^\circ C)$ ]
$L$	长度 (m)
$Le$	(= $Sc/Pr$ ) Lewis 数

$Lu$	$(= a_m / a)$ Luikov 数
$Nu$	$(= \alpha l / k)$ Nusselt 数
$P$	压力 (Pa)
$\Delta P$	压差 (Pa)
$Q$	热流量 (J/s)
$q$	热流密度 ( $W / m^2$ )
$R$	半径 (m), 气体常数 [ $J / (kg \cdot K)$ ]
$Ra$	$(= \beta \Delta T g K_p l / a \nu)$ Rayleigh 数
$S$	多流扩散方程中的源项
$Re$	$(= w l / \nu)$ Reynolds 数
$Sc$	$(= \nu / D)$ Schmidt 数
$Sh$	$(= \alpha_m l / k_m)$ Sherwood 数
$St$	$(Sh / Re Sc)$ Stanton 数
$T$	温度 ( $^{\circ}C$ )
$U$	速度 ( $m / s$ )
$u$	速度 ( $m / s$ )

## 希腊字母

$\alpha$	对流换热系数 [ $W / (m^2 \cdot ^{\circ}C)$ ], 膨胀系数, ( $1 / K$ )
$\beta$	体积膨胀系数 ( $1 / K$ )
$\varepsilon$	孔隙率
$\mu$	动力粘度 ( $N \cdot s / m^2$ )
$\nu$	运动粘度 ( $m^2 / s$ )
$\rho$	密度 ( $kg / m^3$ )
$\phi$	传递势, 通用参数

## 第一章 绪论

### § 1.1 立论的背景

当前环保问题越来越受到社会各界的重视，特别是我国电力工业中占主要位置的燃煤火电，更是对我国城市大气环境造成极大压力。多年来，世界各地能源环保科研人员对煤燃烧造成的污染治理进行了大量研究，不管从理论上还是实践上都取得很多成果。煤燃烧后生成的主要污染成分是  $\text{SO}_x$  和  $\text{NO}_x$ ，而 S 和 N 以各种形态存在于煤中，综合煤的脱硫脱硝原理与技术主要可分为炉前、炉中和炉后 3 种<sup>[1]</sup>。而当前湿烟气脱硫法和干喷射法正被广泛使用于电厂中。但是，其高昂的投入和运行费用，以及吸收剂的低利用率，使得它们对于应用高硫煤非常昂贵。燃前脱硫是一种很具吸引力的烟气湿法脱硫的替代方法，科学家们已探索出几种从煤以及煤制半焦中脱除无机硫的方法。目前正在研究中的方法有微生物脱硫、卤化、热解脱硫、电化学氧化及辐射。

其中热解脱硫近年来开始深受瞩目。即在煤燃烧前，对煤进行热解预处理，将煤高效转化为低硫的固体燃料。且该技术相对目前广泛使用的脱硫方法而言，其费用非常低廉。国内外都开始着手进行了多方面的研究，并取得了重大进展。

#### 1、热解脱硫、脱氮效果

当前研究的热解脱硫方法有煤的微波脱硫、加氢热解和高温热解过程脱硫。煤的微波脱硫技术是采用微波照射，以诱发贮存在煤中的黄铁矿与周围组分之间进行热脱硫反应，并且能把黄铁矿转换成酸溶液可溶的磁铁矿和陨铁矿。

煤的加氢热解脱硫<sup>[2][3][4]</sup>是指在逐渐升高温度和压力下煤与氢气之间的反应。由于氢气的存在，煤的热解反应大致可归纳为：在热解的早期阶段，焦油的快速析出氢气渗入煤粒中，同时与气相和凝聚相中的自由基发生反应，导致挥发性产品的增加；在煤粒中的焦油气与氢气发生反应，生成小分子量的芳香化合物，最终产物是甲烷；焦油与气体大量产生之后，氢气与残留半焦中的活性组分发生反应，产生甲烷。煤的加氢热解是将煤的热分解和化学处理相结合，能同时脱除煤中的有机硫和无机硫，脱硫率可达 90%。

煤的高温热解脱硫是高硫煤在 400℃ 以上热解温度下的有机硫的脱除，硫铁矿硫的分解及脱除<sup>[5][6][7]</sup>。有一项研究是将煤置于温度为 300~950℃ 的空气中，温度低

于 400℃ 时没有作用,只有当温度升到 600℃ 且持续一段时间(2h 以上)后,无机硫才全部除去,另一项研究工作是将煤置于氩气中加热,温度从 1000℃ 升到 1800℃,到 1800℃ 以后,滞留在残碳中的硫不足 0.1%(wt)。加热过程中,一些硫固定到碳中,这部分硫在随后更高温度下会再度释放出来,且释放温度取决于所结合碳的类型<sup>[8][9]</sup>。

周仕学<sup>[10]</sup>等人就高硫强粘结性煤与生物质在回转炉内共热解,研究了热解温度和煤种对无机硫脱除率、有机硫脱除率、硫和氮含量的影响。结果表明,硫铁矿硫在 400℃ 时明显分解,700℃ 时基本分解完全,主要在 500~600℃ 分解。全硫脱除率受有机硫和硫铁矿脱除率的影响。随着温度的升高,全硫脱除率增大,煤阶越高全硫脱除率越低。在 900℃ 时气煤、气肥煤、肥煤的全硫脱除率在 46.4%~62%,焦煤、贫煤的全硫脱除率仅为 22.6%~30%。1200℃ 左右脱硫和脱氮率明显增大,1600℃ 煤中无机硫脱除率达 93%~98%、有机硫脱除率达 80%~95%,煤和生物质脱氮率达 85%~93%。沈来宏<sup>[7]</sup>等研究了流化床条件下  $N_2O$  形成和分解机理,采用不同程度脱去挥发份的焦炭颗粒,研究脱挥发份的程度对  $N_2O$  形成的影响,脱挥发份的温度越高,即脱挥发份的程度越高,焦炭形成  $N_2O$  的量越少,这表明挥发份氮形成  $N_2O$  量高于相应焦炭氮燃烧产生的  $N_2O$  量。燃料燃烧过程中,NO 形成比较均匀,而  $N_2O$  比较复杂,燃料氮转变为 NO 的转化率随脱挥发份温度升高而增加,而  $N_2O$  的转化率则有一临界脱挥发份温度点。燃料氮转变为  $N_2O$  的转化率随燃烧温度升高而降低,NO 则相反。氧化钙对  $N_2O$  有较强的分解作用,固体物料对  $N_2O$  的分解作用比对 NO 的快。

徐秀峰<sup>[11]</sup>用 XPS 表面分析方法研究了铁催化剂对煤热解过程中氮元素迁移的影响。结果表明:铁元素在低温制备煤焦中的主要物相是  $Fe_2O_3$  和  $Fe_3O_4$ ,而在高温制备的煤焦中,还原态  $\alpha$ -Fe 和铁碳物种(Fe,C)是铁元素的主要存在形态。煤或焦中的氮元素以季胺盐、吡啶和吡咯等三种形态存在。铁能催化季胺盐在较低温度下分解。与吡咯类氮相比较而言,铁能优先催化吡啶类氮脱除。说明铁催化剂对不同形态的氮元素,在煤热解过程中的逸出影响是不同的。煤中掺入铁催化剂,能使其中的氮元素较多地留在低温煤焦中,从而减少了煤的低温热解阶段污染性氮化物气体的逸出量。

中国科学院山西煤炭化学研究所以兖州煤和红庙煤为研究对象,考察了氮气下热解和加氢热解过程中硫在半焦、焦油中的含量以及脱硫率和硫分布的变迁规律。加氢热解与氮气下的热解相比,无论是对兖州烟煤还是红庙褐煤都显著地降低了生成半焦中的硫含量,氢气明显促使了煤中硫化化合物的分解,利于煤中硫的脱除。氢气和氮气热解条件下的脱硫率如表 1.1 所示。从表中的结果可以看出,兖州烟煤和红庙褐煤在加氢热解条件下的脱硫率都显著高于氮气下热解的脱硫率。另外,他们



以兖州煤为研究对象,分别在三种热载体, 焦炉煤气、合成气、氢气下进行热解。在热解压为 3Mpa,流速 1.0L/min, 升温速率 10K/min, 温度为 650℃时, 兖州煤在三种热载体中脱硫率基本相当, 约为 80%, 但脱氮率由高到低依次为: 氢气(约 41%) > 合成气(约 35%) > 焦炉气(约 30%)。与相同氢分压下的加氢热解相比, 5Mpa 焦炉气下煤热解脱硫率提高约 4.5%, 脱氮率降低约 3.5%。表明煤-焦炉气(合成气)共热解在较温和的条件下可得到较高脱硫效果; 与煤加氢热解相比, 用焦炉气、合成气顶替氢气具有更大的脱硫优势, 比较而言, 相同条件下的合成气与焦炉气具有相当的脱硫效果同时还具有较好的脱氮优势。所以, 可将焦炉气和合成气作为廉价氢源顶替纯氢进行加氢热解, 将这一工艺进一步工业化<sup>[12]</sup>。

表 1.1 兖州及红庙煤在不同气氛下脱硫率

煤种	温度	氢气热解脱硫率	氮气热解脱硫率
兖州煤	650℃	68.2%	50.9%
红庙煤	550℃	56.0%	36.3%

英国 Strathclyde 大学<sup>[13]</sup>以空气和氢气为热载体, 以 Mequinemza 煤、Cayirhan 煤和 B-wheeler 煤为对象, 在 520℃, 8bar 大气压时, 固定床上进行实验得出的数据如表 1.2 所示

表 1.2 Mequinemza 煤、Cayirhan 煤和 B-wheeler 煤不同气氛脱硫率

煤种	氢气热解脱硫率	空气热解脱硫率
Mequinemza 煤	68%	62%
Cayirhan 煤	60%	55%
B-Wheeler 煤	50%	39%

此外, 俄罗斯克拉西斯雅尔斯克综合技术研究院在半工业试验台上进行实验, 采用燃料燃烧烟气作为热载体, 对康阿庆斯克矿区贝列佐夫斯克煤进行预热处理, 燃烧后对烟气含量进行测定, 其中氮氧化物的测定结果比没经过处理的煤烟气氮氧化物含量减少一半多。

以上数据表明, 加氢热解比氮气以及空气下热解有更好的脱硫作用, 有利于降低半焦中的硫含量。这种脱硫作用随煤种的不同而不同, 尤其受到煤中矿物质的显著影响。加氢热解不仅有利于易分解脂肪类含硫化合物的脱除, 而且可以促使难分解噻吩芳香类含硫化合物的脱除。但传统加氢热解需要制氢、气体循环与净化等复杂的工艺过程, 阻碍该工艺的推广。

## 2、反应条件对煤脱硫的影响<sup>[14][15][16][17]</sup>

煤热解是个非常复杂的过程，包括大量的化学反应并与煤中晶格结构变化联系在一起。在热解过程中，煤转化为半焦、焦油和气体产物。影响热解产量和挥发份成分的因素有：煤种、煤粒径、温度、加热率、热解气体成分、压力、反应炉的类型。以下为中国科学院山西煤炭化学研究所内蒙古红庙褐煤和兖州烟煤为研究对象，进行加氢热解得到的实验结果分析。

### • 温度对热解脱硫的影响

在氢压 3Mpa,流速 1.0L/min, 升温速率 10K/min 时, 考察两种煤硫的变迁脱除特性。随温度升高, 红庙和兖州两种煤的有机硫化反应迅速加剧, 其硫化氢的逸出浓度在 380°C 和 430°C 分别达到极大值, 随后随温度的进一步升高而降低。其中, 两种煤的硫化氢逸出特点有较大差异。红庙煤有机硫发生氢化反应的温度较低, 在 200°C~450°C 较大范围内, 其硫化氢的逸出浓度始终远高于兖州煤。相比之下, 兖州煤有机硫发生氢化反应的初始温度相对较高, 所产生的硫化氢的逸出也主要移向高温区, 在温度高于 450°C 时, 兖州煤硫化氢的逸出浓度显著高于红庙煤。其研究表明, 在热解温度低于 400°C 时所产生的硫化氢的逸出源于煤中脂肪或芳香族等各种硫化物或单环噻吩硫的热解加氢反应, 而温度高于 400°C 时, 硫化氢的逸出则归因于煤中各种噻吩硫的热解加氢反应。在氢气热解条件下, 兖州煤热解随温度升高, 半焦中硫分布呈减小趋势, 气体中硫分布呈增加趋势, 焦油中硫分布于 500°C 以后仅略增。而红庙煤中, 550°C 以后, 半焦中硫分布随温度升高而减小的趋势相对缓和而气体的升高趋势也同样相对缓和, 焦油中则硫分布随温度升高略微增加。氮气热解条件下, 兖州煤热解, 其半焦在 550°C 后, 硫分布随温度升高而减小; 气体中硫分布随温度升高增加的趋势趋于平缓; 焦油中硫分布随温度升高基本不变。红庙煤热解, 随温度升高, 半焦中硫分布减小的趋势变化平缓, 气体硫分布增加的趋势也变得平缓, 而焦油温度对半焦和焦油中硫仅占很小一部分, 影响不大。在两种气氛下的脱硫率见表 1.1。由美国 Cincinnati 大学<sup>[18][19]</sup>设计炉型做的实验, 以 ohio#8 煤为研究对象。得出的数据见表 1.4, 从这些实验数据看出, 在温和热解中增加反应温度有助脱硫。而日本 Tohoku 大学以 Ermelo 煤为对象, 其实验发现样煤从 573K 到 1173K 温度范围内线性加热, 在加热率为 20K/min, 773K 时, 原煤中硫含量从原来的 0.7% 减少到最小值 0.52%。而在加热率 100 K/min, 973K 的情况下, 总硫含量也出现出了最小值 0.47%。这些最小总硫含量值的出现表明热解脱硫存在最佳去硫温度。

由以上温度对脱硫效果进行的实验表明,在一定温度范围内,升高反应温度,有助于脱硫率的增加,并且最佳脱硫温度的存在,可在实际应用中尽量接近该温度脱硫,以达到最好的脱硫效果。而且温度是影响热解脱硫脱硫的最主要因素,压力、流速以及加热速率等因素对热解的影响是通过热分解产生的挥发份的二次反应产生作用,而这些条件变化产生的影响又是相互联系的。

#### • 煤粒径对脱硫率的影响<sup>[20][21]</sup>

美国 Cincinnati 大学实验数据结果见表 1.3,显示煤粒大小对脱硫程度影响很小。

表 1.3 煤粒径对脱硫率的影响

粒径		4-8mesh			8-16mesh			16-35mesh		
温度 (°C)	停留时间 (min)	硫分布 (wt%)								
		半焦	焦油	气体	半焦	焦油	气体	半焦	焦油	气体
400°C	3	91.1	7.63	1.27	91.9	6.90	1.20	91.7	7.00	1.30
	6	90.0	8.40	1.60	89.4	8.56	1.64	89.8	8.56	1.64
600°C	3	78.1	8.70	13.2	78.4	8.00	13.6	78.0	8.60	13.4
	6	67.0	6.10	29.6	66.8	6.44	26.7	67.1	5.90	27.0

表 1.4 停留时间及温度对脱硫率的影响

停留时间 (分钟)	脱硫率 (wt%)					
	400°C	425°C	450°C	458°C	468°C	475°C
2	4.7	7.1	-	-	-	19.5
3	8.1	9.5	10.8	-	-	21.5
4	8.2	11.9	15.2	-	-	26.8
5	9.7	12.2	22.7	-	-	32.0

#### • 停留时间对脱硫率的影响<sup>[22][23]</sup>

在氢压为 3Mpa,流速 1.0L/min,升温速率 10K/min,温度为 650°C 的实验条件下,随停留时间延长,半焦和焦油中硫含量略微下降,而脱硫率呈上升趋势,停留 20 分钟达 62.6%。硫在气相中的分布逐渐增加,停留 20 分钟后增加 8.6%,而焦中硫分布减少 6.6%。焦油硫分布从 7.3%减少到 5.3%。根据加氢热解反应机理的研究

表明, 加氢热解脱硫在开始阶段是由气膜扩散或化学反应控制, 随着反应进行和灰层的形成, 氢气必须穿过灰层与煤颗粒中的硫接触反应, 然后生成硫化氢又要通过灰层扩散出来, 灰层扩散成了反应的主要阻力, 因此适当延长反应时间, 氢气穿灰层向煤颗粒内部的扩散越充分越有利于加氢热解脱硫反应的进行。但随后氢气与残留半焦的反应相对较慢, 过长的停留时间并不能增加脱硫率, 仅有利于半焦的进一步氢气化。而由美国 Cincinnati 大学以 Ohio#8 煤为对象, 煤粒径 8~16mesh 所做实验得出的数据也得到同样结论, 脱硫率在一定范围随停留时间增加而增加。见表 1.4,

#### • 加热率对脱硫率的影响

在氢压为 3Mpa, 流速 1.0L/min, 温度为 650°C 条件下, 加热速率高于 10°C/min 时, 脱硫率、硫在半焦、焦油中的含量以及气、固相中的分布影响相对较小, 当加热速率由 10°C/min 减小到 5°C/min 时, 影响才比较明显, 焦和焦油中硫含量分别下降 0.19% 和 0.17%, 脱硫率上升 6.8%。硫在气相分布增加 7.1%, 焦中分布减小 6.8%。但焦油中硫分布随加热速率的变化不很显著。

在高加热速率下, 自由基生成速率加快, 由于自由基的氢饱和反应与自由浓度一次方成正比, 而自由基相互结合的反应与自由基浓度二次方关系, 因而在高加热速率下, 供氢速率低于自由基生成速率, 从而提高了自由基的相互结合速率, 是加氢热解条件下生成的含硫自由基之间的再聚合反应增加, 焦中硫含量升高, 硫在气相中分布减少, 脱硫率降低。

#### • 压力对脱硫率的影响<sup>[24][25]</sup>

在两种条件下考察压力对脱硫的影响, 一种是在保持氢气通过煤层的线速度不变, 另一种是保持氢气的质量流速不变。

##### (1) 恒定线速度

氢气以流速 0.5cm/s 穿过煤层, 在加热速率为 10°C/min, 最终反应温度 650°C, 当压力从 2Mpa 增加到 5Mpa 时, 焦中硫含量先增加后再减小。对应于相应条件下的脱硫率也呈先略有减小, 然后又逐渐升高的趋势, 焦油中硫含量先减小后又有所增加。硫在气相中的分布增加。见下表 1.5

表 1.5 恒定线速度下压力对各产物硫含量及脱硫率的影响

压力	硫含量	焦中硫占总硫含量	焦油中硫占总硫含量	气体中硫占总硫含量	脱硫率

3 Mpa	44.2%	7%	48.9%	56.2%
4Mpa	37.2%	7~8%	55.6%	62.2%
5Mpa	34.4%	7.3%	57.8%	65.6%

由脱硫动力学的计算, 氢气压力的增高对加氢热解脱硫有两方面的影响, 一方面压力的升高有利于黄铁矿、难分解有机硫加氢脱硫反应的发生, 从而增加脱硫率。另一方面压力升高也使硫化氢与焦之间的反应增加, 硫被固定在焦中, 从而影响脱硫率。Badi 等人对于惰性氮气下热解脱硫的研究也表明, 压力增加脱硫率显著降低。在 2Mpa 和 3Mpa 时, 由于增加氢气压力使脱硫率增加和降低的这种双重影响相互抵消, 因此脱硫率没有显著变化。当氢气压力高于 3Mpa 时, 第一种因素就成为影响加氢脱硫的主导因素, 黄铁矿和难分解噻吩类有机硫加氢分解的趋势超过热解产生的硫化氢与焦、矿物质反应的趋势, 因此脱硫率随压力的升高而增加。

## (2) 恒定质量流速

保持氢气恒定质量流速 5.4g/h, 加热速率 10°C/min, 终温 650°C 条件下, 考察压力对加氢热解脱硫的影响, 发现随压力增加, 脱硫率也呈增加趋势。数据如表 1.6 所示。

表 1.6 恒定质量流速下压力对各产物硫含量及脱硫率的影响

硫含量 压力	焦中硫占总硫 含量	焦油中硫占总硫 含量	气体中硫占总硫 含量	脱硫率
4Mpa	42.8	7.2%	52%	60.1%
5Mpa	37.2%	10.1%	52.1%	62.2%

对比表 1.5 可以看出, 在压力 5Mpa 和 4Mpa 压力下, 恒定质量流速比恒定线速度下的脱硫率分别小 2.1% 和 3.4%, 焦油中硫含量也略高, 硫在气体中的比例较低, 且这种差别随压力的增加而有所加大, 压力 5Mpa 和 4Mpa 压力下分别差 5.7% 和 3.5%。这是由于在恒定质量流速下, 随压力升高氢气通过煤层的线速度减小, 因此传质阻力增大, 含硫不稳定分子之间的再聚合反应以及与焦, 尤其与红庙煤中的碱性矿物质的二次反应增大, 硫被固定在焦中, 从而部分抵消了由于压力升高而有利与加氢热解脱硫的影响。因此, 传质作用对加氢热解脱硫也有显著影响。所以, 氢气压力升高有利于黄铁矿、难分解噻吩类有机硫热解脱硫反应的进行, 提高脱硫率。

以上不管是加氢热解还是高温热解都不可避免地涉及到高温气体在反应床中的

渗流传热传质问题, 因此对这个问题进行综合研究对各种热解脱硫方式很有应用价值。本文就是在国家自然科学基金资助下对高温渗流传热及其对煤预热解的影响进行了探索性研究。由于时间有限, 本文只是对上述问题进行了计算机数值模拟, 以期对后续的实验设备的设计与运行作出先导性的参考。

## § 1.2 本文内容简述

高温气体在煤颗粒床中的渗流加热在理论上就是多孔介质中的传热传质问题。所以第二章简述了多孔介质中的传热传质基本理论。内容主要是: 1、多孔介质中的流动过程, 主要阐述了多孔介质中层流流动和滑流流动的基本定律和基本方程。2、多孔介质中的传热过程, 包括导热和对流换热, 特别对自然对流进行了分析。3、多孔介质内的传质过程, 分为分子扩散和对流传质。其中分子扩散又分为费克扩散、努森扩散、过渡扩散、表面扩散。另外, 在这一部分, 我们还解释了一些多孔介质传质无因次综合量。4、多孔填充床中的传热传质, 在这一部分, 我们特别阐述了多孔填充床中传热传质的具体规律, 为后续的研究作了理论上的分析。

第三章我们对惰性颗粒床内的传热问题进行了数值模拟。内容主要有: 1、计算过程中用到的数值计算理论。2、水平颗粒导管中的渗流传热的非稳态数值模拟。3、垂直颗粒移动床中的稳态渗流传热数值模拟。

第四章的主要内容是在考虑有挥发物析出的情况下煤颗粒移动床的渗流传热传质问题。在这一章研究了高温气体渗流作用下的煤中挥发物的析出规律, 并且分别就移动床达到稳态的情况以及开始加热时的时间响应进行了数值模拟。

第五章对全文进行了总结。

## 第二章 多孔介质中的传热传质基本原理

顾名思义，多孔介质的传热传质研究是针对各种各样的多孔性介质内部能量和质量的传递现象进行理论分析或实际观察，从而得到具有共性和指导意义的结论，然后进一步改进或创新生产工艺或发明新的产品。多孔介质传热传质研究的应用领域很多，但理论分析上都要涉及多孔介质中流体流动、传热过程、传质过程三个方面<sup>[26]</sup>。

### § 2.1 多孔介质中流体流动过程

流体在多孔介质中的宏观运动，可由机械作用力引起，也可因非机械作用力而产生。所谓机械作用力又可分为外施压力、重力及表面张力等。由压差所引起流体在多孔介质中的流动，称为渗流；主要由表面张力引起的多孔介质中的流动，称为毛细流动；而由重力效应控制的流动称作多孔介质中的一般流动过程。所谓非机械作用力，是指在一定条件下温度梯度、浓度梯度、电势梯度等促成的流体在多孔介质中的宏观流动。另外，当流体中某组分的浓度梯度很大，从而分子扩散率增加到一定程度时，由分子扩散而形成的流体随机迁移，亦能形成多孔介质中的宏观流动。

综上所述，流体在多孔介质中的流动可能受到多种效应的控制，其影响因素不仅有压力、温度，还有流体的组成、物性及相态，固体构架结构及物性，孔隙率的大小及形状，流通通道尺寸及弯曲程度等。所以在研究过程中，需要把握住问题的实质、特点和主要影响因素。

#### § 2.1.1 多孔介质中流体流动的基本定律和基本方程

基本定律如下：

##### • 层流流动

在工程中经常遇到的主要流型是多孔介质中流体的层流流动。在  $Re$  为 1—10 属于层流流动时，流体的容积流量与压力、重力、及粘性力的关系服从 Darcy 定律<sup>[27][28]</sup>：

$$j_f = -K \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (2.1-1)$$

这里雷诺数  $Re = j_f d / \nu$ ，其中  $j_f$  为通过多孔介质单位截面上的不可压缩流体容积

流量（即比流量）单位是  $m^3 / (s \cdot m^2)$ 。  $K = \frac{K_p \rho g}{\mu}$  为水力传导系数。  $\rho$ 、 $\mu$  分别为

液体的密度和动力粘度,  $K_p$  为多孔介质渗透率, 它仅与固体骨架的结构与性质有关。

式 2.1-1 中  $\phi$  为流动势, 一般由下式表述:

$$\phi = (p / \rho g + z) \quad (2.1-2)$$

Darcy 定律考虑了压力、粘性力和重力对多孔介质中流体流动的作用。

#### • 滑流流动

对于压力较低气体较稀薄, 致使多孔空隙通道尺寸接近气体分子自由程, 在多孔固体颗粒壁面上产生滑移现象时, 渗透率和压力存在明显的函数关系, 这种现象称为 Klingenberg 效应。渗透率可表示成

$$K_p = K_{p,\infty} \left( 1 + \frac{b}{p} \right) \quad (2.1-3)$$

式中,  $K_{p,\infty}$  为不可压流体的渗透率,  $b$  是表征气体和多孔介质特性的系数。由上式可知, 当压力  $p$  足够高时, Klingenberg 效应消失, 滑移现象亦可忽略。对于存在滑流流动时, 得到 Darcy 定律修正式:

$$Q_1 p_1 = - \frac{K_{p,\infty} A}{\mu L} \left( 1 + \frac{2b}{p_1 + p_2} \right) \left( \frac{p_1^2 - p_2^2}{2} \right) \quad (2.1-4)$$

#### • Re 较高时的流动<sup>[29][30][31]</sup>

研究表明, 当 Re 增高时, 多孔介质中流体流动发生变化, 但流动由层流向湍流的转变不象光管内流体流动那样突然, 而是相当缓慢地进行。首先, 当  $Re=2-3$  时, 流动从服从 Darcy 经典定律的线性层流区, 到达在多孔介质流体力学里所谓的非线性层流区 (即偏离 Darcy 定律区)。当 Re 进一步增加时, 则由非线性层流区发展到湍流区。无论是在非线性层流区还是在湍流区, Darcy 定律都不再适用。通常采用下列几种方法去获得流动计算式: 一是研究其与 Darcy 经典公式的区别, 以附加项加以修正去得到新关系式; 二是对 Re 准则数与阻力系数  $\lambda$  的关系加以研究, 去寻找新关系式; 三是采用与对流换热分析相类似的方法, 利用相似理论和因次分析, 并对实验数据加以回归, 得到关联式。

应该指出, 对于大多数常见的小孔隙多孔材料, 其中流体主要处于层流状态。而多孔介质中流体的湍流运动, 实际并不常见, 尤其是整个区域内全部为湍流的情形更是少见。对多孔介质中湍流流动的研究还很少。在多孔介质流体力学中, 往往将偶尔出现在局部区域的湍流流动与过渡流一起, 统归于非线性运动区域去处理。

对于不可压缩流体在多孔介质中的三维流动现象, Darcy 定律的一般微分形式



为:

$$\bar{w} = -\frac{K_p}{\mu} (\nabla p + \rho g \bar{l}_1) \quad (2.1-5)$$

式中,  $\bar{l}_1$  为坐标  $x_1$  (与重力平行) 方向的单位向量。若引入流动势

$$\phi = p + \rho g x_1 \quad \text{可得,}$$

$$\bar{w} = -\frac{K_p}{\mu} (\nabla \phi) \quad (2.1-6)$$

其中,  $\bar{w}$  为微元体单位面积上的平均流量 (即平均速度)。

对于可压缩流体的等温流动, 流动势可表示成

$$\phi' = g x_1 + \int_{p_0}^p \frac{dp}{\rho(p)} \quad (2.1-7)$$

于是有

$$\bar{w} = -\frac{K_p}{\mu} \nabla \phi' \quad (2.1-8)$$

基本方程与求解方法:

Darcy 定律表达式及其修正式, 只表明了流体流量与其驱动力的关系, 并没有说明多孔介质内流体流速、驱动力随时间和空间坐标的变化规律。而在求解多孔介质流动问题中, 这又是至关重要的。这就要借助于对质量守恒和动量守恒的进一步分析, 将质量守恒方程和 Darcy 定律微分式结合起来, 构成对速度场和流动势场的描述。

设多孔介质中流体为单相, 并且在流动过程中无化学反应, 空隙率为  $\varepsilon$  我们可得到如下连续性微分方程

$$\frac{\partial(\varepsilon \rho)}{\partial \tau} + \text{div}(\rho \bar{w}) = 0 \quad (2.1-9)$$

若孔隙率  $\varepsilon = \text{const}$ , 则

$$\varepsilon \frac{\partial \rho}{\partial \tau} + \text{div}(\rho \bar{w}) = 0 \quad (2.1-10)$$

• 对于不可压缩单相流体流动

由于  $\rho = \text{const}$  因此

$$\text{div}(\bar{w}) = 0$$

如果是各向同性多孔介质，其流动的基本微分方程式为

$$\frac{\partial}{\partial x_1} \left( \frac{K_p}{\mu} \frac{\partial \phi}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial}{\partial x_2} \left( \frac{K_p}{\mu} \frac{\partial \phi}{\partial x_2} \right) + \frac{\partial}{\partial x_3} \left( \frac{K_p}{\mu} \frac{\partial \phi}{\partial x_3} \right) = 0 \quad (2.1-11)$$

若  $\mu = \text{const}$  且多孔介质为均质时，上式为

$$\nabla^2 \phi = \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_3^2} = 0 \quad (2.1-12)$$

• 对于可压缩单相流体流动

仍设  $\varepsilon = \text{const}$ ，则连续性方程为

$$\varepsilon \frac{\partial \rho}{\partial \tau} + \text{div}(\rho \bar{w}) = 0 \quad (2.1-13)$$

因为可压缩流体重力效应一般来说可以忽略不计，则得到各向同性多孔介质中单相可压缩流体流动的基本微分方程：

$$\frac{\partial(\varepsilon \rho)}{\partial \tau} - \nabla \left[ \left( \frac{K_p \rho g}{\mu} \right) \nabla p \right] = 0 \quad (2.1-14)$$

当气体在多孔介质中流动时，若气体服从理想气体状态方程：

$$\rho = \frac{1}{RT} p \quad (2.1-15)$$

则可得到在等温条件下可压缩气体在各向同性多孔介质中的流动微分方程：

$$\nabla \left[ \left( \frac{K_p \rho g}{\mu} \right) \nabla p \right] = \varepsilon \frac{\partial p}{\partial \tau} \quad (2.1-16)$$

若  $\mu$ ， $K_p$  均为常数，则有

$$\nabla^2 p^2 = \frac{\varepsilon \mu}{K_p p} \frac{\partial p^2}{\partial \tau} \quad (2.1-17)$$

上述各运动微分方程，加上其边值条件，就构成了各种不同的定解问题，去描述不同的多孔介质中流体流动过程。以各种数学形式表达的多孔介质流体流动问题，求解方式有三种：解析解法、数值解法、模拟和试验解法。目前，计算机性能得到巨大提高，所以数值解法得到了普遍应用。

### § 2.1.2 单相均质流体通过多孔介质的稳态与非稳态层流流动

流体内部各处状态参数和物性均匀一致的单相流体，均可称为均质流体。在多孔介质中纯水或纯空气的单独流动均可视为均质流体流动。另外，按流动状态是否随时间而变化，又可分为稳态与非稳态均质流体流动<sup>[32][33][34]</sup>。

## 1、均质流体稳态层流流动

## • 一维水平直线流动:

设有不可压缩均质流体, 沿水平直线在多孔介质中呈一维线性流动。该多孔体为一水平圆柱, 其轴向坐标为  $x$ , 圆柱体横截面为  $A$ , 渗透率  $K_p$  与压力  $P$  是  $x$  的函数, 流体动力粘度  $\mu = const$  于是, 其流动微分方程为

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( K_p(x) \frac{\partial p(x)}{\partial x} \right) = 0 \quad (2.1-18)$$

对可压缩流体的稳态流动, 其流动微分方程为

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{K_p(x)}{\mu} p \frac{\partial p}{\partial x} \right) = 0 \quad (2.1-19)$$

上面两个方程都可以求出其解析解。

## • 二维水平平面流动:

对于二维问题, 不可压缩流体的微分方程为

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x_1^2} + \frac{K_{p,2}}{K_{p,1}} \frac{\partial^2 p}{\partial x_2^2} = 0 \quad (2.1-20)$$

当流体为可压缩气体时, 若可视气体为理想状态, 则有:

$$K_{\infty,1} \frac{\partial}{\partial x_1} \left[ \frac{1}{\mu RT} (p+b) \frac{\partial p}{\partial x_1} \right] + K_{\infty,2} \frac{\partial}{\partial x_2} \left[ \frac{1}{\mu RT} (p+b) \frac{\partial p}{\partial x_2} \right] = 0 \quad (2.1-21)$$

式中,  $K_{\infty,1}, K_{\infty,2}$  分别是对应  $x_1, x_2$  轴的不可压缩流体渗透率。上面两式也都可以采用分离变量法求出解析解。

## 2、单相均质流体的非稳态层流流动

由于非稳态流动中加了时间这一自变量, 因此无论在数学描述还是在求解方法上, 要比稳态流动问题复杂的多。对于可压缩的理想气体, 其二维非稳态层流流动微分方程为:

$$\frac{\partial}{\partial x_1} \left[ p \frac{K_{\infty}}{\mu} \left( 1 + \frac{b}{p} \right) \frac{\partial p}{\partial x_1} \right] + \frac{\partial}{\partial x_2} \left[ p \frac{K_{\infty}}{\mu} \left( 1 + \frac{b}{p} \right) \frac{\partial p}{\partial x_2} \right] = \varepsilon \frac{\partial p}{\partial \tau} \quad (2.1-21)$$

## § 2.2 多孔介质内传热过程

多孔介质传热过程涉及能源领域的方方面面, 虽然人们早已开始对这一过程进行研究、开发、和利用, 并且取得了不少成果, 但同样由于该过程的复杂性和多变

性，因此迄今为止对于多孔介质热量传递的机理、计算式以及试验研究，仍带有初期开发阶段的特征。多孔介质中传热的基本模式主要有以下几种。

- (1) 固体骨架与固体颗粒之间存在或不存在接触热阻时的导热过程；
- (2) 流体（液体、气体或两者均有）的导热和对流换热过程；
- (3) 流体与颗粒之间的对流换热过程；
- (4) 固体颗粒之间、固体颗粒与空隙中气体之间的辐射过程。

一般说来，当多孔介质的温度不太高时，多孔介质中的辐射换热可以忽略不计。但对于高温下的多孔介质，如高温多孔元件冷却、高温烟气的多孔能量回收装置以及高、低温多孔热绝缘层，辐射换热则必须考虑。

多孔介质传热过程的研究方法可分为三种：

(1) 按照所讨论现象的实际情况，提出物理模型或假设，再根据能量守恒与本构定律列出问题的数学模型或基本方程以及边值条件，以组成适定的定解问题，然后用解析法或数值法求解。

(2) 有效当量法 多孔介质中的传热过程往往包括各种不同物质或相态的多种传热模式，若不分主次将其一一分析和计算，困难很大甚至是不可能的。所以在工程应用中经常要根据实际情况，对传热主宰模式加以判断，抓住主要影响因素，忽略次要效应，进行传热过程分析与计算。但将这种方法直接用于复杂多变的多孔介质传热分析与计算却难以凑效。有效当量法有所不同，它是将多孔体颗粒及空隙折算为具有有效导热系数的当量导热问题。也就是说，以修正导热系数的宏观方法，去顾及各种物质不同传热方式的贡献。它适用于各组成组份以导热方式为主的传热过程，即把它用于那些对流、辐射换热分量不大的过程。许多研究结果证明<sup>[35]</sup>，这种方法误差不大。

(3) 经验或半经验方法 这种方法主要用于多孔介质中对流换热过程的分析与计算。

无论采用何种研究和分析方法，均离不开对多孔介质中能量平衡和换热规律的分析，换言之，它们都必然涉及传热过程的基本方程与基本定律。另外，当传热过程和传质过程并存时，必然出现相互影响与干扰，即相互耦合问题。

### § 2.2.1 多孔介质中的导热过程

当多孔材料的固体颗粒相互紧密接触（或联接）且不移动，多孔材料的温度不太高，无相变，且其孔隙率中的流体或处于静止态或流动甚微。并且有

$$\text{Re} = \frac{Gd_p}{\nu \epsilon} \leq 22 \quad (2.2-1)$$

时，则多孔介质内的传热过程是由固体与流体的微观粒子运动而引起的热量传递，

即热传导模式控制。上式中  $\nu$ ,  $\varepsilon$  分别为流体的动力粘度和多孔介质的孔隙率,  $d_c$  为孔隙的当量直径,  $G$  为孔隙中流体的截面流率。即使是多孔介质中的纯导热过程, 与单一均质物体中的导热过程相比也要复杂的多。一般来说, 它包括:

- (1) 固体颗粒的导热过程;
- (2) 多孔孔隙中流体之间及固体颗粒微孔隙层中流体之导热过程;
- (3) 固体颗粒之间存在接触热阻时的导热过程。

研究表明, 由于固体颗粒与流体物性的不同, 固体颗粒与流体对导热的贡献也不相同。一般说来, 固体颗粒对多孔介质的导热性能的影响不占主导地位, 尤其是对那些非金属多孔材料更是如此<sup>[36]</sup>。若多孔介质中流体为气体时, 气体对多孔介质的导热性能起着重要作用, 而固体颗粒之间微孔隙中的气体对导热过程亦有相当的影响。由此可见, 多孔材料的导热过程是极其复杂的, 影响多孔材料导热的因素是众多的。其中既包括多孔材料固体颗粒的物性、孔隙尺寸形状及分布, 又包括流体种类、组分、形态和特性。另外, 压力和温度对多孔材料的导热过程也有影响。将这些因素按其影响大小及变化规律组合起来, 以形成对现象的统一描述和数学表达式并非易事, 因而务必采取恰当的方法, 在分析求解多孔介质导热问题中, 曾采用过两种方法: 简化解析法<sup>[37]</sup>和有效导热系数法。

### § 2.2.2 多孔介质中的对流换热过程

与一般表面上的对流换热过程相类似, 多孔介质中的对流换热过程既包括大团流体运动与混合的对流作用, 也包含流体分子运动导致的热量传导作用。多孔介质中的对流换热亦分为强迫对流换热和自然对流换热。即使多孔介质孔隙中的流体原来是静止的, 如果采取适当的措施(如局部加热), 使其各部分流体的密度差足够大, 那么多孔介质中原来静止的流体将形成自然对流。

多孔介质中的对流换热<sup>[38][39][40]</sup>也有层流、过渡流、及湍流之分, 许多研究结果表明, 多孔介质中的对流换热(主要是层流换热)又有稳定态与波动态之别。为了进一步对多孔介质中的对流换热作定量分析, 先要根据能量守恒定律, 列出其能量微分方程。

对于多孔介质中的液相( $l$ ), 若忽略粘性耗散热及热辐射效应, 并假设无内热源, 则液相能量微分方程为:

$$\frac{\partial}{\partial \tau}(\rho_l h_l) + \nabla(\rho_l h_l \bar{w}_l - k_l \nabla T_l) - \left( \frac{\partial p_l}{\partial \tau} + \bar{w} \nabla p_l \right) = 0 \quad (2.2-2)$$

式中, 第一项至第五项分别记为①、②、③、④、⑤, 其中, ①表示液体比焓随时

间的变化, ②表示由于对流而传递的热量, ③是导热量, ④、⑤均表示压力功。将上式在表征体元 (REV)  $V$  中积分, 并令  $\phi_i = V_i/V$  ( $i = l, g, s$ ) 则可得到

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \tau} (\phi_l \langle \rho_l \rangle' \langle h_l \rangle') + \nabla \cdot (\langle \rho_l \rangle' \langle h_l \rangle' \langle \bar{w}_l \rangle) - \nabla \cdot (\phi_l k_{e,l} \nabla \langle T_l \rangle') - \\ & \left[ \phi_l \frac{\partial}{\partial \tau} \langle p_l \rangle' + \langle \bar{w}_l \rangle \nabla \langle p_l \rangle' \right] + Q_{lg} + Q_{lg}' + Q_{lg}'' = 0 \end{aligned} \quad (2.2-3)$$

式中  $k_{e,l}$  为液体的有效导热系数, 它可以写成

$$k_{e,l} = k_l' + k_l''$$

其中,  $k_l'$  表示分子扩散热传导效应, 称为滞止导热系数, 而  $k_l''$  称为热弥散系数, 它表述机械弥散热传递效应。

采取类似的方法进行分析和推导, 可得到多孔介质中气相与固相的能量微分方程:

气相 (g):

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \tau} (\phi_g \langle \rho_g \rangle^g \langle h_g \rangle^g) + \nabla \cdot (\langle \rho_g \rangle^g \langle h_g \rangle^g \langle \bar{w}_g \rangle) - \nabla \cdot (\phi_g k_{e,g} \nabla \langle T_g \rangle^g) - \\ & \left[ \phi_g \frac{\partial}{\partial \tau} \langle p_g \rangle^g + \langle \bar{w}_g \rangle \nabla \langle p_g \rangle^g \right] + Q_{gl}' + Q_{gl}'' + Q_{gl}''' = 0 \end{aligned} \quad (2.2-4)$$

固相 (s)

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \tau} (\phi_s \langle \rho_s \rangle^s \langle h_s \rangle^s) + \nabla \cdot (\langle \rho_s \rangle^s \langle h_s \rangle^s \langle \bar{w}_s \rangle) - \nabla \cdot (\phi_s k_{e,s} \nabla \langle T_s \rangle^s) - \\ & \left[ \phi_s \frac{\partial}{\partial \tau} \langle p_s \rangle^s + \langle \bar{w}_s \rangle \nabla \langle p_s \rangle^s \right] + Q_{sl}' + Q_{sg}'' = 0 \end{aligned} \quad (2.2-5)$$

式中,  $\phi_g = V_g/V$  为气体体积与总体积之比,  $\phi_s = V_s/V$  为固相体积与总体积之比,

$K_{e,g}$ ,  $K_{e,s}$  分别表示气相与固相的有效导热系数, 它们都是滞止导热系数  $K_i'$  与热弥散系数  $K_i''$  之和。

$$K_{e,i} = k_i' + k_i'' \quad (i = g, s) \quad (2.2-6)$$

上面两式中,

$$Q_{gl}' = -Q_{lg}'$$

$$Q_{gl}'' = -Q_{lg}''$$

$$Q_{sl}' = -Q_{ls}'$$

$$Q_{gs} = -Q_{sg} = \frac{1}{V} \int_{A_{gs}} \bar{q} \bar{n}_s dA = \frac{A_{gs} \alpha_g}{V} (T_s - T_g) \quad (2.2-7)$$

其中,  $\alpha_g$  为气固界面的对流换热系数,  $A_{gs}$  为气固界面面积,  $\bar{n}_s$  为固相界面外法线方向的单位向量。在多孔介质内对流换热过程中, 经常假设各相的压力、温度处于局部平衡状态, 即

$$\langle \bar{p}_g \rangle^g = \langle \bar{p}_l \rangle^l = \langle \bar{p}_s \rangle^s = \langle \bar{p} \rangle \quad (2.2-8)$$

$$\langle \bar{T}_g \rangle^g = \langle \bar{T}_l \rangle^l = \langle \bar{T}_s \rangle^s = \langle \bar{T} \rangle \quad (2.2-9)$$

于是, 总能量方程, 即液、气、固相能量方程之和为:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \tau} (\varepsilon S_l \langle \rho_l \rangle^l \langle h_l \rangle^l) + \varepsilon S_g \langle \rho_g \rangle^g \langle h_g \rangle^g + (1 - \varepsilon) \langle \rho_s \rangle^s \langle h_s \rangle^s \\ & + \nabla \cdot (\langle \rho_l \rangle^l \langle h_l \rangle^l \langle \bar{w}_l \rangle + \langle \rho_g \rangle^g \langle h_g \rangle^g \langle \bar{w}_g \rangle^g + \langle \rho_s \rangle^s \langle h_s \rangle^s \langle \bar{w}_s \rangle^s) \\ & - \nabla \cdot (k_e \nabla \langle \tau \rangle) - \left( \frac{\partial}{\partial \tau} \langle p \rangle + (\langle \bar{w}_l \rangle + \langle \bar{w}_g \rangle + \langle \bar{w}_s \rangle) \cdot \nabla \langle p \rangle \right) = 0 \end{aligned} \quad (2.2-10)$$

式中,  $S_g = V_g / (V_g + V_l)$ ,  $S_l = V_l / (V_g + V_l)$  分别为气相、液相的容积饱和度。  $k_e$  是多孔孔隙为气液两相充满、气液固相处于热力学平衡状态下的多孔介质有效导热系数:

$$k_e = \varepsilon (S_l k_{e,l} + S_g k_{e,g}) + (1 - \varepsilon) k_s \quad (2.2-11)$$

能量微分方程加上边界条件、状态方程以及流动、传质本构方程, 就组成了多孔介质内对流换热定解问题的数学描述。

如果对多孔介质中的对流换热过程作出如下假设, 那么其微分方程可大为简化 [41][42][43],

(1) 在多孔介质中只有单相液体, 即  $S_g = 0, S_l = 1$

(2) 多孔介质固体颗粒或骨架是固定不动且不变形的, 即  $w_s = 0$

(3) 对流流体在各处均可近似认为处于局部平衡状态, 这一假设在流速较低时是适宜的。

(4) 流体的流动服从 Darcy 定律。

(5) 流体的物性参数为常数, 这是粗略的近似, 因为象  $K_p$  及  $k_e$  等通常并非常数, 而是压力、温度、多孔结构的函数。

(6) 只在计算升力和重力时, 假设流体的密度是温度的函数, 而与压力无关, 显然这属于 Boussinesq 近似。

(7)忽略压力功

(8)在多孔介质中无化学变化

符合上述假定条件的多孔介质质量、动量及能量守恒微分方程为：

$$\nabla \cdot \langle \bar{w} \rangle = 0 \quad (2.2-12)$$

$$\langle \bar{w} \rangle = -\frac{K_p}{\mu} [\nabla(p) - \langle \rho \rangle \bar{g}] \quad (2.2-13)$$

$$\sigma \frac{\partial}{\partial \tau} \langle T \rangle + \langle w \rangle \cdot \nabla \langle T \rangle = \alpha \nabla^2 \langle T \rangle \quad (2.2-14)$$

式中

$$\sigma = [\varepsilon(\rho C_p)_l + (1-\varepsilon)(\rho C_p)_s] / (\rho C_p)_l \quad (2.2-15)$$

$$\alpha = k_c / (\rho C_p)_l \quad (2.2-16)$$

其中，液体密度由下式表示：

$$\rho_l = \rho_r [1 - \beta(T - T_r)] \quad (2.2-17)$$

式中， $T_r, \rho_r$  分别为参照温度及在此温度下的参照密度， $\beta$  为体积膨胀系数。

列出边值条件，即可对上述方程求解。如果问题比较简单，可以求其解析解；如问题复杂，则视实际情况采用近似解法或数值解法，甚至模拟解法。

### § 2.2.3 多孔介质中的自然对流过程

按起因，对流可分为由温度分布不均匀引起的自然对流，由外部水头梯度所引起的强迫对流，以及浓度分布不均匀所引起的对流。这里着重讨论多孔介质中的自然对流。

对于多孔介质中对流的研究始于 20 世纪 40 年代，半个多世纪以来，历代学者专家已取得了一系列科研成果。目前，多孔介质中对流研究的主要方面有：

- 非达西流对多孔介质中对流的影响<sup>[44-49]</sup>，包括自然对流与混合对流中的非达西流动。
- 非牛顿流体在多孔介质中的流动<sup>[50-52]</sup>。
- 内部热源问题<sup>[53-55]</sup>。在本论文中就涉及到多孔介质内部热源问题。
- 其他，近年来涉及很多方面，如变孔隙率的介质中的对流<sup>[56-57]</sup>，温度梯度方向是倾斜的情况<sup>[58]</sup>等等。

在这里，我们简述传统的研究成果和方法，而不涉及最新的尚未被大量引用的结论。但在后续章节的计算中，我们会参考当前的相关成果。



## 1、基本方程和无量纲量

基本方程 在研究多孔介质中不可压缩流体的流动时, 近似认为密度与压力  $P$  无关, 而只与温度  $T$  有关,  $\rho = \rho_0[1 - \beta(T - T_0)]$  或  $\rho = \rho(T, t)$ , 其中  $\beta$  是流体的膨胀系数。在温度场和重力场的联合作用下, 多孔介质中的对流由连续方程、动量方程、和能量方程描述, 即:

$$\phi \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho V) = 0 \quad (2.2-18)$$

$$\phi^{-1} \frac{\partial V}{\partial t} + \phi^{-2} (V \cdot \nabla) V = -\frac{\nabla p}{\rho} - \frac{\nu}{K} V + g \quad (2.2-19)$$

$$(\rho c)_m \frac{\partial T}{\partial t} + (\rho c_p)_f (V \cdot \nabla) T = \nabla \cdot (k_m \nabla T) + q_m'' \quad (2.2-20)$$

以上方程中  $\phi$ 、 $K$  分别是多孔介质中的孔隙率和渗透率,  $V$ 、 $\mu$  分别是渗流速度和运动粘度。 $k$ 、 $c$  分别表示热导率和比热容,  $q_m'' [W/m^3]$  是单位体积介质内部产生的 (或由系统以外获得的) 热流。下表  $f$ 、 $m$  分别表示流体的和总的量。再令热容比  $\sigma = (\rho c)_m / (\rho c_p)_f$ , 热扩散系数  $\chi = k_m / (\rho c_p)_f$ , 设  $k_m$  为常数, 则上式变为:

$$\sigma \frac{\partial T}{\partial t} + (V \cdot \nabla) T = \chi \nabla^2 T + \frac{q_m''}{(\rho c_p)_f} \quad (2.2-21)$$

上述 4 各个方程就是研究多孔介质中对流的基本方程组。

无量纲参数: 上述方程中除原有的无量纲量  $\phi$  和  $\sigma$  外, 还含有有量纲参数  $\nu/K$ 、 $\beta g$  和  $\chi$ 。当有生成热时还要加上一个  $q_m'' / (\rho c_p)_f$ , 其中  $\beta g$  由动量方程中的  $g - \nabla p / \rho$  项及  $\rho$  与  $T$  之间的关系演化而来。方程组的解还一定包含特征长度  $H$  和某个距离之间的温差  $\Delta T$ , 由  $\nu/K$ ,  $\beta g$ ,  $\chi$ ,  $H$  和  $\Delta T$  可以构成以下独立的无量纲量:

$$R_o = \frac{g \beta K H \Delta T}{\nu \chi} \quad (2.2-22)$$

它是 Darcy 数  $Da = K/H^2$  与单纯粘性流体对流中瑞利数  $Ra' = \beta g H^3 \Delta T / \nu \chi$  的乘积。

另一个无量纲量是:

$$\Gamma = K \chi / H \nu \quad (2.2-23)$$

它是  $Da$  除以 Prandtl 数

$$Pr = \nu / \chi \quad (2.2-24)$$

当有生成热  $q$  时, 还有一个无量纲量是 Nusselt 数

$$Nu = \frac{H^2 q'''}{\Delta T k_m} = \frac{H^2 q'''}{(\rho c_p)_f \chi \Delta T} \quad (2.2-25)$$

如果是通过某个线段加热, 单位长度热流率为  $q'$ , 则有

$$Nu = q' / k_m \Delta T \quad (2.2-26)$$

当两个流动的上述无量纲量相同, 这两个流动就相似。

### 1、线性化理论

多孔介质中对流的早期研究是基于线性化理论, 有时也称 Horton-Rogers-Lapwood 问题或简称 Lapwood 问题。

**最简单情形** 一种最简单情形是无限大水平多孔介质层的下底  $z=0$  处  $T = T_0 + \Delta T$ , 上顶  $z = H$  处  $T = T_0$ , 而介质中流体不流动, 即单纯导热情形。不难证明这个平衡状态的基本解是

$$V_b = 0 \quad (2.2-27)$$

$$T_b = T_0 + \Delta T \left( 1 - \frac{z}{H} \right) \quad (2.2-28)$$

$$p_b = p_0 - \rho_0 g \left[ z + \frac{1}{2} \beta \Delta T \left( \frac{z^2}{H} - 2z \right) \right] \quad (2.2-29)$$

其中下标“0”表示对应于某个参考值。

**线性稳定性分析、临界 Ra** 通常我们是在 Boussinesq 近似下讨论。这个近似的含义是除了在动量方程中保留含有  $\beta$  的浮力项以外, 固体和流体的特性均保持为常数。这意味着:

$$\nabla \cdot V = 0, \rho = \rho_0 [1 - \beta(T - T_0)] \quad (2.2-30)$$

设平衡态受到一个扰动 (扰动用上标“'”表示) 即

$$V = V_b + V', p = p_b + p', T = T_b + T' \quad (2.2-31)$$

代入基本方程组, 略去二阶小量和  $\partial v' / \partial t$  项, 并引进下列无量纲量

$$x_D = \frac{x}{H}, y_D = \frac{y}{H}, z_D = \frac{z}{H}, \nabla_D^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_D^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_D^2} \quad (2.2-32)$$

$$T_D = \frac{T'}{\Delta T}, w_D = \frac{Hw'}{\chi}, t_D = \frac{\chi t'}{\sigma H^2} \quad (2.2-33)$$

(式中  $w'$  是  $z$  向扰动速度分量), 可得无量纲的线性化方程组

$$\frac{\partial T_D}{\partial t_D} - w_D = \nabla_D^2 T_D \quad (2.2-34)$$

$$\nabla_D^2 w_D = Ra \nabla_D^2 T_D \quad (2.2-35)$$

对上面两个方程联立求解两个变量  $T_D$  和  $w_D$ , 可用分离变量法, 即令

$$w_D(x_D, y_D, z_D, t_D) = W(z_D) \exp(ilx_D + imy_D + st_D) \quad (2.2-36)$$

$$T_D(x_D, y_D, z_D, t_D) = \theta(z_D) \exp(ilx_D + imy_D + st_D) \quad (2.2-37)$$

将上式代入无量纲方程组并令总的水平波数  $\alpha = (l^2 + m^2)^{1/2}$ , 得

$$\frac{d^2 \theta}{dz_D^2} - (\alpha^2 + s)\theta = -W \quad (2.2-38)$$

$$\frac{d^2 W}{dz_D^2} - \alpha^2 W = -\alpha^2 Ra \theta \quad (2.2-39)$$

### § 2.3 多孔介质内传质过程

和 多孔介质中其它传递过程类似, 由于多孔介质空隙尺寸与分布极为复杂, 且空隙中的流体状态与组成具有多变性, 因而形成了多孔介质传质过程的不确定性。在长期实践中, 人们虽然积累了不少可以借鉴的知识和经验, 但是对于多孔介质传质过程规律的认识还远远没有完成。在这个领域内, 历史给人们留下的技术资料是零散的, 远未形成广泛、系统、完整和深入的学科体系。为了便于分析, 可以按传递机理将多孔介质的传质进行适当分类。

与普通传质过程相同, 按传质机理去区分, 多孔介质中的传质过程可以分为分子质量扩散(即由物质微观粒子—例如分子运动所导致的质量扩散)和对流传质(即由流体整体运动所引起的质量迁移)。需要说明的是, 许多文献将多孔介质中的质量传递统统称为质量扩散, 故有人将对流传质亦称为对流质扩散, 但它们的传递机理

是不同的。

### • 分子质量扩散

多孔介质空隙中的流体若处于静止状态，或横向跨越层流迹线时，多孔介质中的质量传递则属于分子扩散形式。但随空隙尺寸大小之不同，这种分子扩散质量传递的特点与规律有所不同，其所遵守的质量传递定律表达式也有所差别。现简要分析如下。

#### (1) Fick 扩散

当

$$K_n = \frac{d_0}{\lambda} > 10 \quad (2.3-1)$$

时，由于空隙定性直径  $d_0$  远大于流体分子自由程  $\lambda$ ，因此质量扩散完全是由不受壁面任何作用的分子无规则运动引起的。我们可以用 Fick 经典定律去描述多孔介质中溶体（主要是气体）的质量扩散。这种扩散又称为 Fick 扩散。

在多孔介质中，物质 A 的扩散面积只是多孔介质中的自由截面积（孔截面积），而不是介质的总表面积。其次，在多孔介质中，物质 A 是在曲折的毛细孔道中沿着大于垂直表面距离进行扩散的，因此，物质在多孔介质内的分子扩散系数，应该采用有效扩散系数

$$D_{ABp} = \frac{D_{AB}\epsilon}{\tau} \quad (2.3-2)$$

式中： $D_{AB}$  是双组份混合物的一般分子扩散系数， $m^2/s$ ； $\epsilon$  是多孔介质孔隙率， $D_{ABp}$  是有效扩散系数， $m^2/s$ ，相当于采用单位固体总表面计算的扩散通量与垂直于表面的单位浓度梯度计算的扩散系数； $\tau$  是曲折因数，用以校正扩散方向所增加的距离。实际的扩散路程曲折多变，不仅与曲折路程长度有关，并且受到固体中小孔的复杂结构的影响，所以曲折因数必须由实验确定。考虑以上因素后，对多孔介质内的分子扩散：

$$N_A = J_A = \frac{\epsilon D_{AB} (c_{A1} - c_{A2})}{\tau (y_2 - y_1)} \quad (2.3-3)$$

#### (2) Knudsen 扩散

当

$$K_n = \frac{d_0}{\lambda} < 0.1 \quad (2.3-4)$$

时，则发生 Knudsen 扩散。因为此时空隙定性直径小于分子自由程，故流体分子同壁面碰撞频率比它们之间的碰撞频率高得多。当流体撞击壁面时，壁面就会对其产

生瞬时吸附，然后又无规则地向各个方向散射出去。壁面对撞击分子的这种吸附，使得流体通量减小了。当孔隙大小与扩散分子的平均自由程处于相同的数量级时，即  $K_n$  的数量级为  $O(10^0)$  时，发生 Knudsen 扩散。还有的研究结果表明，这种扩散也可能发生在气体密度很低（即孔隙中是极稀薄气体时）的情况。Knudsen 扩散不再遵守 Fick 定律，根据分子运动论可导出 Knudsen 扩散的关系式，它表明在 Knudsen 扩散中，质量通量与浓度梯度之间的比例系数与压力成反比。Knudsen 扩散系数可由下式计算：

$$D_{kp} = \frac{2}{3} \bar{r} \bar{v}_A \quad (2.3-5)$$

式中： $D_{kp}$  是 Knudsen 扩散系数， $m^2/s$ ； $\bar{r}$  是平均孔半径， $m$ ； $\bar{v}_A$  是组分 A 分子的平均速度， $\bar{v}_A = \sqrt{\frac{8KT}{\pi M_A}}$ ， $m/s$ ；代入上式有：

$$D_{kp} = 97.0 \bar{r} \left( \frac{T}{M_A} \right)^{1/2} \quad (2.3-6)$$

式中  $D_{kp}$  是单位固体总表面积的扩散通量与垂直于表面的浓度梯度之比。由于只包含分子与壁面的碰撞，而不考虑分子之间的碰撞，所以  $D_{kp}$  与组分 B 无关，与总压强也无关。

### (3) 过渡扩散

当

$$0.1 < K_n (= d_0 / \lambda) < 10 \quad (2.3-7)$$

时，多孔介质中流体的质量扩散，既不遵守 Fick 定律，也不符合 Knudsen 扩散分析结果。我们称之为过渡扩散。它是介乎 Fick 扩散与 Knudsen 扩散之间的一种过渡阶段，其扩散过程受两种扩散机理的控制。当

$$Kn (= d_0 / \lambda) \approx 1 \quad (2.3-8)$$

即流体分子平均自由程接近通道尺寸时，固体颗粒壁面与流体分子之间不能紧密接触，壁面上流体分子将处于滑动状态，称其为滑流现象或 Klinkenberg 效应。此时的有效扩散系数  $D_p$  可近似地用下式计算：

$$D_p = \left( \frac{1}{D_{AB}} + \frac{1}{D_{kp}} \right)^{-1} \quad (2.3-9)$$

式中, 如果  $\frac{1}{D_{kp}}$  项可忽略时, 则扩散将为分子扩散; 如  $\frac{1}{D_{ABp}}$  项可忽略即为 Knudsen 扩散。

#### (4) 表面扩散<sup>[56][57][58][59]</sup>

当扩散的物质被固体表面吸附时, 这种扩散称为表面扩散。平衡的表面浓度随气体的浓度增加而增加, 所以表面层趋向形成表面的浓度梯度, 后者与孔内气体的浓度梯度方向相同。对于某些吸附类型的扩散, 吸附表面层可以流动, 并且沿着固体的表面流动, 因此表面扩散是平行于气流方向的扩散。由此可知, 有吸附物质时的总通量大于没有固体吸附时的扩散通量。表面扩散依赖于吸附层的存在, 若温度接近露点, 毛细孔内的冷凝作用可能使孔内充满液体, 但通常总是假设吸附层是极薄的, 所以气体扩散通过的孔面积的减少是很小的, 从而可以假定表面扩散和固体内气体扩散同时进行, 它们的通量可以相加。如果也假定表面扩散速度正比于表面浓度梯度, 则:

$$J_A = - \left( \frac{1}{D_{ABp}} + \frac{1}{D_{kp}} \right)^{-1} \frac{dc}{dy} - D_{sp} \frac{d(s_g \rho_p c_s)}{dy} \quad (2.3-10)$$

式中:  $D_{sp}$  是表面扩散系数  $m^2/s$ ;  $c_s$  是被吸附的扩散物质的表面浓度  $kmol/m^2$ ;  $s_g$  是多孔介质中 BET 表面积 (即) Brunauer-Emmett-Teller 表面积)。  $\rho_p$  是多孔介质的松密度  $kg/m^3$ ;  $s_g \rho_p c_s$  是吸附介质的浓度, 以单位多孔介质总体积内所吸附的摩尔数表示,  $kmol/m^3$ 。

若再假定, 孔隙内吸附层与气相层达到平衡状态, 且吸附等温线是直线关系 (即  $s_g \rho_p c_s = Kc$ ,  $K$  为常数,  $c$  是流体相中的浓度), 则:

$$J_A = - \left[ \left( \frac{1}{D_{ABp}} + \frac{1}{D_{kp}} \right)^{-1} + KD_{sp} \right] \frac{dc}{dy} \quad (2.3-11)$$

上式即为包含了分子扩散, Knudsen 扩散及表面扩散的简单扩散方程。在工程应用中, 经常遇到的是分子扩散。

#### • 对流传质

对流传质是由于孔隙中流体的宏观运动而引起的质量传递。与普通传质过程分析类似, 按宏观运动形成原因去区分, 多孔介质中的对流传质亦可分为自然对流传质和强迫对流传质。而在文献[60]中, 将毛细力、重力、外加压力等作用力所引起

的多孔介质内对流传质称为渗透传质。按多孔介质空隙中流体的运动状态加以区分,又可分为层流传质和湍流传质。因为多孔介质中的对流传质还与多孔介质的其它传递特性有关,所以多孔介质中的对流传质过程非常复杂,一般说来,传质模式有:

(1)分子扩散 就象流体对流换热中必然包括导热现象一样,对流传质中也含有分子扩散。分子扩散与对流传质相比,其贡献的大小视流动情况而定。

(2)非平行流动的混合对流传质 在多孔空隙中的流体经过空隙的曲折通道时,流线不再平行,它们甚至会相交,因而产生混合对流传质。

(3)反向流动的混合对流传质 当流体流经某些通道时 在驻点处会产生压力变化,因而形成反向流动,这种反向流动必然导致流体的混合。

(4)由于表面吸附产生浓度梯度而引起的传质 在固体颗粒表面上存在吸附现象,若流体为多组分的混合流,壁面对各组分的吸附效应是不同的。这样一来,必将形成流体主流中浓度分布的变化,从而引起质量传递。

(5)毛细对流质量传递 这是因孔隙通道的毛细作用而使流体发生宏观流动,从而形成的一种对流质量渗透传递。

(6)压差引起的强迫对流传质 它是外压力使孔隙中流体产生宏观流动,从而形成的一种对流传质。

(7)自然对流传质 这是因局部加热或其它原因造成孔隙中流体密度差,从而导致流体的自然对流传质。

(8)速度引起的对流传质 它是由于速度梯度导致流体内动量传递对质量传递的耦合,从而引起的对流传质。

以上分析只是揭示多孔介质中质量对流传递的形成机理,但它只是停留在定性阶段。在实际应用中,往往要对过程进行上述定性分析。首先对各种质量传递方式之贡献大小作比较,将次要的质量传递模式加以删除,确定过程主要是由分子扩散控制抑或对流传质控制。若属对流传质控制,则应就作用力(外压力、或重力或毛细力,或者兼而有之)类别、流动传质状态(层流或湍流)、主要影响因素及耦合效应的强弱作出判断,以构成实际对流传质简化原理模型。再根据能量、质量、与动量平衡分析和有关传输定律,列出该对流传质过程的基本微分方程。

对大部分实际多孔介质中传质过程来说,其传质模式是分子质扩散或层流对流传质。一般,将前者称为扩散,后者称为渗透。由于上述两种传质模式的传质机理和影响因素不同,因此其基本微分方程亦有所不同。从微观机理上讲,上述两种传质机理迥然不同,但它们均发生在多孔介质内,因此在宏观特性上却存在一致性。由于多孔孔隙通道的曲折性及孔隙尺寸和形状的随机性,因而在孔隙中流体之运动和对流传质规律与分布,也具有与分子扩散相类似的随机性。从质量浓度分布的随机性这一表观特性出发,多孔介质中的分子质扩散与层流对流传质又具有共性,其

基本方程也属同一类型，即以抛物型微分方程组成。

多孔介质中的分子质扩散和对流传质过程的求解方法，也有解析法（包括精确法、近似法）、数值法、模拟法、实验数据关联法等。

• 多孔介质传质无因次综合变量

多孔介质传质过程异常复杂，影响因素众多且相互制约，因此与对流换热、相变换热分析处理方法相类似，亦需将众多变量组合成综合变量（一般是无因次的），再以一定的函数关系去表述多孔介质传质过程的规律。下面是一些常见的、较通用的准则数。

(1) 传质 Fourier 数  $Fo_m$

$$Fo_m = \frac{a_m \tau}{l^2} \quad (2.3-12)$$

式中， $l$  为多孔介质的定性尺寸， $a_m$  为流体质量扩散系数， $a_m = \frac{k_m}{C_m \rho_s}$ ，其中  $C_m$ ， $k_m$  分别为比质容和质传导率。显然， $Fo_m$  是描述非稳态质量扩散过程的无因次时间。当上式中  $\tau = \tau_{rm}$ （ $\tau_{rm}$  为传质弛豫时间）时，传质弛豫 Fourier 数为

$$Fo_{m,r} = \frac{a_m \tau_{rm}}{l^2} \quad (2.3-13)$$

在非稳态导热过程中，当热量传播速度  $w_q$  并非无限大时，有

$$w_q^2 = \frac{a}{\tau_{rq}} \quad (2.3-14)$$

式中， $a$  为热扩散系数， $\tau_{rq}$  是热传播弛豫时间。一般说来， $w_q = 330 \text{ m/s}$ ，即热传播速度与空气中声速相近<sup>[61]</sup>。与此相对应，对非稳态分子质扩散过程，质量传播速度为

$$w_m^2 = \frac{a_m}{\tau_{rm}} \quad (2.3-15)$$

式中， $\tau_{rm}$  就是质扩散弛豫时间。通常， $w_m \ll w_q$ ，因而， $\tau_{rm} \gg \tau_{rq}$ （ $\tau_{rm} \approx 10^3 - 10^5 \tau_{rq}$ ），即分子质扩散速度比热量传导传播速度低得多。

(2) 传质 Boit 数



$$Bi_m = \frac{\alpha_{m,\theta} l}{k_m} = \frac{\alpha_{m,u} l}{a_m} \quad (2.3-16)$$

式中,  $k_m$  为质量分子扩散传导率, 它是与导热系数  $k$  相对应的, 可由下式确定。

$$j_m = -k_m \nabla \theta \quad (2.3-17)$$

$\alpha_{m,\theta}$  是由  $\Delta\theta$  引起的对流传质系数, 由

$$j_m = \alpha_{m,\theta} \Delta\theta \quad (2.3-18)$$

来确定, 而质量扩散系数  $a_m$  由

$$j_m = \rho_s a_m \nabla u \quad (2.3-19)$$

来确定。

$\alpha_{m,u}$  为由  $\Delta u$  导致的对流传质系数, 可写成

$$j_m = \rho_s a_{m,u} \nabla u \quad (2.3-20)$$

显然,  $Bi_m$  表示处于第三类边界条件下, 物体内部传质阻力与外传质阻力之比。  $Bi_m$  值在  $0 - \infty$  范围内变化。

### (3) Luikov 数

$$Lu = \frac{a_m}{a} \quad (2.3-21)$$

及

$$Lu_p = \frac{a_p}{a} \quad (2.3-22)$$

式中,  $a_p$  是由外部压力引起的质量扩散系数, 可写成

$$a_p = \frac{k_p}{C_p \rho_s} \quad (2.3-23)$$

式中,  $C_p$  是与比热  $C$ 、比质容  $C_m$  相对应的物理量, 若描述对象为含湿多孔体, 则

$C_p$  为湿空气容量系数。  $C_p$  由下式确定:

$$d(u_v + u_d) = C_p dp \quad (2.3-24)$$

式中,  $u_v$ ,  $u_d$  分别是水蒸汽和干空气的相对质量浓度。而  $k_p$  则为渗透传质系数, 它可表示成

$$j_{mp} = -k_p \nabla p \quad (2.3-25)$$

$Lu$  是质扩散系数  $a_m$  与热扩散系数  $a$  之比,  $Lu_p$  是外部压力作用下质量扩散系数  $a_p$  与热扩散系数  $a$  之比。换言之,  $Lu$  是等浓度面传播速度与等温面传播速度之比, 它是描述传质与传热惰性的无因次数。当多孔材料中发生渗流时,  $Lu_p \gg 1$  (通常,  $Lu_p = 10^2 - 10^3$ ), 因此在多孔体中, 压力推动下质浓度场变化要比温度场变化快 2—3 个数量级。传热 Fourier 数  $Fo_q$ 、传质 Fourier 数  $Fo_m$  以及由外压力作用驱动的传质系数  $Fo_p$  之间的关系, 可以通过  $Lu$  表达出来:

$$\begin{aligned} Fo_m &= Fo_q Lu \\ Fo_p &= Fo_q Lu \end{aligned} \quad (2.3-26)$$

(4) Kossovich 数

$$Ko = \frac{h_{fg} C_m \Delta \theta}{C \Delta T} \quad (2.3-27)$$

式中,  $C_m$  为比质容,  $\Delta \theta$  为传质势差,  $C$  为比热,  $h_{fg}$  为汽化潜热。上式表明,  $Ko$  是液体蒸发耗热量与加热多孔体所耗热量之比。

(5) Posnov 数

$$\begin{aligned} Pn &= \frac{a_m^T \rho_s \Delta T}{a_m \rho_s \Delta u} \\ Pn_p &= \frac{k_p \Delta p}{\rho_s a_m \Delta u} \end{aligned} \quad (2.3-28)$$

式中,  $a_m^T$  是由热量传递引起的质扩散量系数,  $a_m^T$  与  $a_m$  之间存在下列关系:

$$a_m^T = \delta a_m \quad (2.3-29)$$

式中,  $k_p$  仍为渗透传质系数,  $\delta$  为系数。  $Pn$  是温差导致的质扩散量与浓度差引起的质扩散量之比,  $Pn_p$  是压力差引起的对流传质量与浓度差导致的质量扩散量之比。

## (6) Fedorov 数

它是  $Kn$  和  $Ko$  的组合, 其定义为

$$Fe = \Phi Ko Pn - \frac{\Phi \delta h_{ig}}{C} \quad (2.3-30)$$

式中,  $\Phi$  是液汽相的相变系数:

$$\Phi = \frac{a_{m,l}}{a_m} \quad (2.3-31)$$

其中,  $a_{m,l}$  为液相质量扩散系数,  $a_m$  为各相总质量扩散系数。  $\delta$  由式  $a_m^T = \delta a_m$  确定。

可以看出,  $Fe$  仅与传质特性参数  $\delta$ ,  $\Phi$  及热物性参数  $h_{ig}, C$  有关。

(7) Rebinder 数  $Rb$ 

$Rb$  是无因次参数  $B$  和  $Ko$  的组合:

$$Rb = \frac{B}{Ko} \quad (2.3-32)$$

式中,  $B$  称为无因次干燥系数, 可表示成

$$B = b \frac{\Delta \bar{u}}{\Delta T} \quad (2.3-33)$$

其中,  $\Delta T$  为物体的温差,  $\bar{u}$  为平均水质量浓度, 而

$$b = \frac{\partial \bar{T}}{\partial \bar{u}} \quad (2.3-34)$$

## (8) Bulygin 数

$$Bu = \frac{h_{ig} C_p \Delta p}{C \Delta T} \quad (2.3-35)$$

将  $Bu$  和  $Ko$  组合起来, 可形成一个新无因次数  $K$

$$K = \frac{Bu}{Ko} \quad (2.3-36)$$

## (9) Schmidt 数

$$Sc = \frac{\nu}{a_m} \quad (2.3-37)$$

它是物质运动粘度与质量扩散系数之比, 也就是传质  $Pr$  数  $Pr = \nu/a_m$

## (10) Lewis 数

它是  $Sc$  及  $Pr$  (或  $Pr_m$  与  $Pr_q$ ) 的组合:

$$Le = \frac{Sc}{Pr} = \frac{a}{a_m} = \frac{1}{Lu} \quad (2.3-38)$$

除上述无因次数外，还有 Sherwood 数  $Sh$ ：

$$Sh = \frac{\alpha_{m,\theta} L}{k_m} \quad (2.3-39)$$

显然， $Sh = Nu_m$ ，即  $Sh$  数就是传质  $Nu_m$  数，又将  $Sh$  与  $Re$  和  $Sc$  组合起来，可组成传质 Stanton 数  $St_m$ ：

$$St_m = \frac{Sh}{Re Sc} \quad (2.3-40)$$

在多孔介质传质过程分析中，还常常用到 Rayleigh 数  $Ra$ 。

应当指出，多孔介质内传质过程分析中涉及的无因次数不只是以上几种。在实际应用中，在需要的情况下，我们可以根据无因次综合变量的组成原则和导出方法创新。

## § 2.4 多孔填充床中的传热传质

所谓填充床，就是指在一定形状（如圆柱筒）容器或限定范围内，以固体颗粒堆积而成的多孔层。固体颗粒呈松散集聚状态，它们在层内相互独立，但又相互接触；流体包括单相气或单相液或气液两相流体，通过填充床进行传热传质<sup>[26]</sup>。多孔填充床按其多孔层的固体颗粒是否随流体一起运动，分为固定床和流化床两类。其中流化床则归结为气液固三相流或气液、气固两相流的传热传质问题。一般说来，流化床传热传质问题不列入多孔介质研究范围。多孔填充床传递现象主要发生在填充床内部，因此本章本章主要讨论以下内容：经过颗粒层的流动；填充床内流体与颗粒层的传质问题；填充床空隙率与渗透率的关系。

### § 2.4.1 流体通过填充床多孔层的压力降

无论在何种应用场合，填充床内均有流体流动，而流体经过多孔颗粒层必然产生压力降，所以压降之大小是反映多孔填充床流体动力特性的重要指标。研究结果表明，压降  $\Delta p$  与多孔层颗粒直径  $d_p$ ，孔隙率  $\varepsilon$ 、颗粒形状和流体物性（密度  $\rho_f$ ，粘度  $\mu_f$ ）以及流体速度有关：

$$\frac{\Delta p}{L} = A \frac{(1-\varepsilon)^2}{\varepsilon^3} \frac{\mu_f w_0}{(\phi d_p)^2} + B \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon^3} \frac{\rho_f w_0^2}{\phi d_p} \quad (2.4-1)$$

式中,  $L$  表示长度, 等式右边两项分别表示层流与湍流区单位长度压降,  $A=150$ ,  $B=1.75$  而

$$\phi = \frac{A_{sh}}{A_p} \quad (2.4-2)$$

其中,  $A_{sh}$  为球形固体颗粒单位体积所占有的表面积,  $A_p$  为实际固体颗粒单位体积所占有的表面积。  $\phi$  又称为形状系数, 它反映了填充床固体颗粒形状的影响。  $w_0$  为由填充床横截面积去折算的流体表观速度:

$$w_0 = \frac{Q}{A_T} \quad (2.4-3)$$

式中,  $Q$  为通过填充床横截面积  $A_T$  上的容积流量。对于煤填充床,  $\phi$  值取为 0.625—0.696。

### § 2.4.2 多孔填充床内的流体传质过程

在多孔颗粒固定填充床的传质模式也可分为对流传质和分子扩散等。但是, 由于多孔颗粒固定填充床中流体速度不是太高 (若流体速度高, 就可能形成流化床, 其情形与固定床大不相同), 故许多著作、文献中均将固定床中颗粒与流体之间的传质称为扩散, 在进行传质分析中均以 Fick 定律的形式去表述。对填充床内传质过程的研究方法有两种: 一是根据假设导出微分方程及边值条件所组成的定解问题, 以解析法、近似法或数值法求解得到浓度场分布, 以确定传质通量和传质速度; 二是根据物理模型及其数学描述, 采取因次分析或相似理论的方法, 得到传热过程无因次综合变量和无因次表达式, 再由实验数据进行回归分析得到无因次表达式中的未知系数和指数。现将这两种方法简述如下:

#### • 填充床内传质过程解析分析

如果假设填充床内颗粒表面被传递组分浓度为常数; 传质的主要阻力在流体侧; 流体以速度  $w$  在多孔填充床中流动; 填充床为圆柱型, 质量扩散主要沿轴向  $x$  进行; 轴向质量扩散系数为  $D_{ax}$ , 那么, 填充床内颗粒与流体间的传质微分方程如下:

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = D_{ax} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - w \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{A_p}{\varepsilon} \alpha_{m,f} (C - C_s) \quad (2.4-4)$$

式中,  $C$  和  $C_s$  分别为流体主流中和颗粒表面传质组分的相对容积浓度,  $A_p$  为填充床单位体积的颗粒表面面积,  $\alpha_{m,f}$  为颗粒与流体间的对流传质系数,  $\varepsilon$  为多孔填充床孔隙率。若传质过程是稳态的, 则上式变成

$$D_{ax} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - w \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{A_p}{\varepsilon} \alpha_{m,f} (C - C_s) = 0 \quad (2.4-5)$$

上列两式加上适当的边值条件, 并经过无因次化处理, 即可用解析法求解。这种解以公式形式表述, 其优点是概括性好、严密、明确, 并包括了各种主要影响因素, 可成为分析问题的依据与指导。为使该解具有一定的普遍意义, 经常将其以无因次形式表示:

$$\frac{C_s - C_{ex}}{C_s - C_m} = f \left( Sh, Sc, Re, A_p, \frac{Lw}{D_{ax}}, \frac{D_{ax} \alpha_{m,f}}{\varepsilon w^2} \right) \quad (2.4-6)$$

式中,  $C_{ex}$  和  $C_m$  分别为填充床出、进口处传质组分相对容积浓度,  $Sh, Sc, Re$  分别为 Sherwood 数、Schmidt 数和 Reynolds 数。

• 填充床内传质无因次关系式

对金属球填充床中氧化氢催化分解传质过程的实验结果进行分析, 可得到如下传质关联式。

$$\frac{\varepsilon D_{ax}}{D} = 20 + 0.5 Sc Re^{0.62} \quad (2.4-7)$$

式中,  $D$  为分子质量扩散系数,  $D_{ax}$  为填充床轴向质量扩散系数, 当填充床内发生蒸发、升华、溶解、快速化学反应以及  $Re > 5$  时,  $D_{ax}$  可按上式计算。

对单个球形颗粒与流体之间的传质过程进行研究, 得到如下传质关联式:

$$Sh = 2 + 0.6 Sc^{1/3} Re^{1/2} \quad (2.4-8)$$

由众多球形颗粒组成的填充床, 由于固体颗粒之间相互影响和孔隙通道的变化, 故其传质 Sherwood 数  $Sh$  高于单球颗粒 (但在  $Re$  值较低时, 两者之间差别减小)。所以, 对颗粒多孔填充床, 其传质关联式可写成如下形式:

$$Sh = 2 + A Sc^{1/2} Re^n \quad (2.4-9)$$

式中, 系数  $A$  与指数  $n$  由试验数据确定。对于气体流过填充床固体颗粒表面时的传质过程, 可写成

$$\frac{Sh}{Re Sc^{1/3}} = \frac{2.06}{\varepsilon} Re^{-0.576} \quad (2.4-10)$$

上式适用于  $90 < Re < 1000$  的范围。对于流体与固体填充床球形固体颗粒之间的传质过程，亦可归纳为下列无因次参数组合形式：

$$\frac{Sh}{Re Sc^{1/3}} = C Re^n \quad (2.4-11)$$

当流体为气态而  $90 < Re < 1000$  时， $C = 2.06/\varepsilon$ ， $n = -0.576$ ，其中  $\varepsilon$  仍为孔隙率。若固体颗粒为非球形时，则上式需乘以修正系数。对高为 10mm 的柱形颗粒，修正系数为 0.79，对于立方体颗粒，则为 0.71。

应当说明的是，上述关于填充床内传质过程的分析中，无论是解析法还是无因次关联式的表述方法中，均没有顾及传热过程对传质过程的影响。传热传质过程的这种耦合效应是不可忽略的，在文章后面的模型中，考虑了填充床中这种效应的作用和影响。

### § 2.4.3 多孔填充床内的传热过程

在多孔填充床内，固体颗粒与流体、填充床多孔层与容器壁之间均存在着热量传递。其热量传递模式既有导热又有对流也有辐射，一般说来，往往是几种传热模式的叠加或耦合。与对一般多孔介质传热问题的分析类似，对填充床内的传热现象，其研究方法亦分为解析法、当量（有效）导热系数法以及换热关联式分析计算法等。现分析如下：

#### • 填充床内传热过程的解析分析

设有一圆柱形填充床处于稳态传热过程，固体颗粒固定不动；轴向（ $x$ ）及径向（ $r$ ）有效导热系数分别为  $(k_e)_{ax}$  与  $(k_e)_r$ ；单位横截面上的流体质量流率  $G$ ，流体比热  $C_f$  均为常数。对该过程进行能量平衡分析后，可得到其传热微分方程为

$$GC_f \frac{\partial T}{\partial x} = (k_e)_r \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + (k_e)_{ax} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (2.4-12)$$

$$(0 < r < R, 0 < x < L)$$

式中， $R$  为圆柱填充床半径。一般说来， $\partial^2 T / \partial x^2$  很小，故上式右端可以忽略，变成

$$GC_f \frac{\partial T}{\partial x} = (k_e)_r \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial T}{\partial r} \right) \quad (0 < r < R, 0 < x < L) \quad (2.4-13)$$

加上如下边界条件：

$$\begin{aligned} T &= T_0 & x &= 0 \\ \frac{\partial T}{\partial r} &= 0 & r &= 0 \end{aligned} \quad (2.4-14)$$

$$(ke)_r \frac{\partial T}{\partial r} = \alpha_w (T_w - T) \quad r = R \quad (2.4-15)$$

式中,  $T_w$  与  $\alpha_w$  分别为壁面温度及床内近壁面对流换热系数。对由上式所组成的定解问题, 以分离变量法求解, 可得到下述无因次温度场分布解:

$$\Theta = \frac{T_w - T}{T_w - T_0} = 2 \sum_{n=1}^{\infty} C_n J_0(a_n r / R) \exp(-a_n^2 X) \quad (2.4-16)$$

式中

$$C_n = \frac{1}{a_n [1 + (a_n / Bi)^2] J_1(a_n)} \quad (2.4-17)$$

$$Bi = \frac{\alpha_w R}{(k_c)_r} \quad (2.4-18)$$

$$X = \frac{(k_c)_r x}{GC_f R^2} \quad (2.4-19)$$

上述各式中的  $a_n$  为方程

$$Bi J_0(a_n) = a_n J_1(a_n) \quad (2.4-20)$$

的第  $n$  个根, 而  $J_0$  与  $J_1$  分别为零阶和一阶第一类 Bessel 函数。由于式中级数收敛很快, 当  $X > 0.2$  时, 可只取其首项, 即

$$\Theta = C_1 2 J_0(a_1 r / R) \exp(-a_1^2 X) \quad (2.4-21)$$

式中

$$C_1 = \frac{1}{a_1 [1 + (a_1 / Bi)^2] J_1(a_1)} \quad (2.4-22)$$

该填充床中心温度  $T_c$  的分布是

$$\Theta_{r=0} = 2C_1 \exp(-a_1^2 X) \quad (2.4-23)$$

当填充床内流体流速较低时, 轴向导热则不可忽略。应当指出, 当床层温度不高时亦可忽略轴向导热贡献, 但当明显存在混合扩散时, 则轴向与径向两个方向的



导热均应加以考虑。对于  $0 < x < \infty$  的半无限长圆柱填充床，根据边界条件，可求出其无因次温度分布为

$$\Theta = \frac{T_w - T}{T_w - T_0} = 2 \sum_{n=1}^{\infty} C_n J_0(a_n r / R) \exp(-a_n^2 X) \quad (2.4-24)$$

式中

$$X = \frac{2X}{1 + 4(E)^2 (k_c)_r (k_c)_{ax}} \quad (2.4-25)$$

$$E = \frac{a_n}{GC_j R} \quad (2.4-26)$$

若填充床温度  $T$  是沿其半径方向变化的，且其轴向导热，则对于  $0 < x < \infty$  的半无限长圆柱填充床，其边界条件仍为

$$\begin{aligned} T &= T_0 & x &= 0 \\ \frac{\partial T}{\partial r} &= 0 & r &= 0 \end{aligned} \quad (2.4-27)$$

$$(ke)_r \frac{\partial T}{\partial r} = \alpha_w (T_w - T) \quad r = R \quad (2.4-28)$$

填充床内温度分布为

$$\Theta' = \frac{T_w - T}{T_w - T_0(0)} = 2 \sum_{n=1}^{\infty} C'_n J_0(a_n r / R) \exp(-a_n^2 Z') \quad (2.4-29)$$

式中

$$C'_n = \frac{1}{[1 + (a_n / Bi)^2] J_1(a_n)} \quad (2.4-30)$$

$$Z' = \frac{X}{E[(k_c)_r (k_c)_{ax}]^{1/2}} \quad (2.4-31)$$

以上各式中， $T_0(0)$  是  $r=0$  处的初始温度， $T_0(r)$  是半径  $r$  任意处的初始温度。 $a_n$  为特征解。另外，当  $X$  足够长时，式中级数只取一项已经相当精确，于是上述两式变为

$$\Theta = \frac{T_w - T}{T_w - T_0} = 2C_1 J_0(a_1 r / R) \exp(-a_1 X) \quad (2.4-32)$$

$$\Theta' = \frac{T_w - T}{T_w - T_0(0)} = 2C'_1 J_0(a_1 r / R) \exp(-a_1 Z') \quad (2.4-33)$$

床内无因次温度分布 $\Theta$ 及 $\Theta'$ 函数中,包含了特征值 $a_w$ 及 $Bi$ ,即隐含着 $(k_c)_r, (k_c)_{ax}$ 及 $a_w$ 。若已知 $\Theta$ (及 $\Theta'$ )函数形式,可通过测量填充床中某几点的温度值并代入上述函数,反计算出 $(k_c)_r, (k_c)_{ax}$ 及 $a_w$ 值。

上述方法在求解填充床传热问题中的应用,早在50年代就有不少学者作过研究,他们均发现其测算误差忽大忽小而又无法作出解释。后来在导热逆问题原理的研究中揭示了其规律,即温度测量误差对 $k_c, a_w$ 值的计算结果误差极其敏感,也就是说温度测量存在一个小误差就可能使 $k_c$ 或 $a_w$ 值的计算结果误差很大,但在一定条件下又可使计算结果误差不大。这里存在着一个测点安排和测算程序的最优化问题,利用导热逆问题原理对热物性参数进行参数和函数估计的研究结果,对上述填充床内传热传质性能分析与研究,提供了启示和参考。

#### • 填充床内传分析中的有效导热系数法

这是一种简便快捷且在一定条件下囊括了固体与流体的导热、对流与辐射等各种贡献的分析与处理方法。该方法适用于填充床内稳态传热及 $\tau/d_p^2 > 1.94 \times 10^7 \text{ s/m}^2$ 的非稳态传热过程<sup>[63]</sup>。

当填充固定床内传热仅沿轴向进行而径向传热可以忽略不计时,其有效导热系数可写成

$$\frac{k_c^\circ}{k_f} = 2C_1 \left( \frac{k_s}{k_s - k_f} \right)^2 \left[ \ln \left( \frac{k_s}{k_f} \right) - \frac{k_s - k_f}{k_f} \right] + C_2 \quad (2.4-35)$$

式中,  $k_c^\circ$ 为填充床内流体处于静止状态下的填充床有效导热系数,  $k_s$ 与 $k_f$ 分别为固体颗粒和流体的真实导热系数。 $C_1$ 与 $C_2$ 为常数,其值按颗粒形状与排列方式而异。当填充床固体颗粒导热系数比填充床内流体导热系数低时,则采用下式去计算填充床的静止态有效导热系数 $k_c^\circ$

$$\frac{k_c^\circ}{k_f} = 1 - \frac{(1-\varepsilon)(K-1)}{1+(1-\varepsilon)^{1/3}(K-1)} \quad (2.4-36)$$

式中

$$K = \frac{k_f}{k_s} \quad (2.4-37)$$

若固定床固体颗粒之间的空隙中的流体是流动的，则对流换热贡献应折算到有效导热系数中去，于是有<sup>[64]</sup>

$$\frac{k_c}{k_f} = \frac{k_c^*}{k_f} + C \text{Pr Re} \quad (2.4-38)$$

式中， $k_c$  为床中流体处于流动状态时的固定填充床有效导热系数。当热流向着与流体流动方向相垂直的径向传递且  $d_p/d_c < 0.04$  时， $C = 0.11$ 。其中， $d_p$  为填充床固体颗粒直径， $d_c$  为填充床直径。当热流方向与流体流动方向一致向轴向传递时，上式变成

$$\frac{k_c}{k_f} = \frac{k_c^*}{k_f} + 0.75 \text{Pr Re} \quad (2.4-39)$$

在文献[65]中还提出，当床内流体呈湍流流动时，可用下式去表示填充床轴向有效导热系数  $(k_c)_{ax}$  即

$$\frac{(k_c)_{ax}}{k_f} = \frac{k_c^*}{k_f} + 0.5 \text{Pr Re} \quad (2.4-40)$$

若填充床床温  $T > 600^\circ\text{C}$  时，热辐射成为传热的重要组成部分，则应将其折算到有效导热系数中去，于是  $k_c$  为

$$k_c = k_c^* + k_{cv} + k_r \quad (2.4-41)$$

其中， $k_{cv}$  与  $k_r$  分别为对流换热与辐射传热贡献所折算的当量导热系数， $k_r$  可由下式计算：

$$k_r = \frac{1 - \varepsilon}{\frac{1}{k_s} + \frac{1}{k_r^*}} + \varepsilon k_r^* \quad (2.4-42)$$

式中

$$k_r^* = 0.229 \varepsilon \varphi d_p \frac{T^3}{10^6} \quad (2.4-43)$$

其中， $\varphi$  为固体颗粒黑度。

#### • 填充床内传热过程的传热关联式

对填充床内传热过程进行分析处理, 亦可得到下列单个球形颗粒与无限大流体间的传热表达式:

$$Q = -k_f 4\pi r^2 \frac{dT}{dr} \quad (2.4-44)$$

式中,  $Q$  为导热热流,  $r$  为球形颗粒半径,  $k_f$  为流体导热系数。将上式从球形颗粒表面  $r_p$  处积分至无穷远流体处, 则有

$$\int_{r_p}^{\infty} \frac{Q}{r^2} dr = -k_f 4\pi \int_{r_p}^{T_{\infty}} dT \quad (2.4-45)$$

于是得到

$$Q = k_f 4\pi r_p (T_p - T_{\infty})$$

其中,  $T_p$  为颗粒外表面  $r = r_p$  处的温度,  $T_{\infty}$  则为边界层外流体温度。再将颗粒表面与流体之间的传热表示成牛顿冷却公式的形式:

$$Q = \alpha 4\pi r_p^2 (T_p - T_{\infty}) \quad (2.4-46)$$

式中,  $\alpha$  为球形颗粒表面与流体之间的对流换热系数。令上面两式相等, 得到

$$\frac{\alpha r_p}{k_f} = 1 \quad (2.4-47)$$

将定性尺寸  $d_p (= 2r_p)$  代入上式, 就有

$$Nu = \frac{\alpha d_p}{k_f} = 2 \quad (2.4-48)$$

成立。此式表明, 当仅考虑导热贡献时,  $Nu$  值为 2。若流体并非处于滞止态而是流过球形颗粒时, 就应考虑对流换热的贡献。在文献[66]中提出了如下关联式:

$$Nu = \frac{\alpha d_p}{k_f} = 2 + 0.6 Pr^{1/3} Re^{1/2} \quad (2.4-49)$$

式中,  $Re$  的定性尺寸为颗粒直径  $d_p$ 。

实际上, 在填充床中是多个颗粒与流体进行热量交换。这与上述单颗粒与流体之间的热交换有所不同。由于多颗粒在一起, 使颗粒表面的流体局部流速  $w_{f,loc}$  大大高于流体的表观速度  $w_{f,0} = \frac{Q}{A}$  (其中,  $Q$  为流体流量,  $A$  为填充床横截面积)。当球

形颗粒按棱形排列时, 有

$$w_{f,loc} = \frac{1}{1 - \frac{\pi}{2}\sqrt{3}} = 10.73w_{f,0} \quad (2.4-50)$$

用  $w_{f,loc}$  计算  $Re$ , 则得到填充床内换热关联式:

$$Nu = \frac{\alpha d_p}{k_f} = 2 + 2.0Pr^{1/3} Re^{1/2} \quad (2.4-51)$$

当球形颗粒按随机排列 ( $\varepsilon = 0.4$ ) 而形成填充床时, 有

$$w_{f,loc} \approx 9w_{f,0} \quad (2.4-52)$$

将上述流体局部速度取代流体表观速度, 得到

$$Nu = \frac{\alpha d_p}{k_f} = 2 + 1.8Pr^{1/3} Re^{1/2} \quad (2.4-53)$$

上式适用于  $Re > 50$  的范围。当  $Re < 50$  时, 可用

$$Nu = CPr^n Re^m \quad (2.4-54)$$

来表示其传热过程。式中, 系数  $C$ 、指数  $n$  和  $m$  由试验数据回归确定。

#### • 容器壁面与填充床多孔层之间的传热过程

填充床容器壁面与床内多孔颗粒层之间的传热, 既包含导热、对流, 在高温下还要包括热辐射的贡献。这里, 虽然可用折算的方法, 但由于近壁面的多孔层存在滞止点以及流体横向混合的减弱, 致使近壁面处传热阻力增加。所以, 对近壁面传热问题的处理方法与远离壁面处传热问题折算法应有所不同。对壁面与多孔层之间的换热, 一般是折算成壁面与多孔层固体颗粒和流体之间的对流换热问题, 即求算其当量或有效壁面换热系数  $\alpha_w$  的问题。

研究表明, 当量壁面换热系数  $\alpha_w$  与多孔层固体颗粒形状、材料、排列方式、流体种类以及填充床当量直径  $d_c$  有关。当壁面与多孔层之间传热主要是对流换热模式时, 其换热关联式为

$$(Nu_f)_w = \frac{\alpha_w d_p}{k_f} = CRe^n \quad (2.4-55)$$

对球形颗粒—空气多孔层, 在  $20 \leq Re \leq 7600, 0.05 < d_p/d_c < 0.3$  时,  $C = 0.17, n = 0.75$ <sup>[67]</sup>。对圆柱体颗粒—空气填充床, 在

$20 \leq Re \leq 800, 0.03 < d_p/d_c < 0.2$  (其中,  $d_p = V_p/S_p$ ,  $V_p$  与  $S_p$  分别为颗粒所占体积与表面面积) 时,  $C = 0.16, n = 0.93$ 。文献[68]提出了下列换热关联式:

$$(Nu_f)_w = \frac{\alpha_w d_p}{k_f} = \frac{\alpha_w^* d_p}{k_f} + 0.054 Pr Re \quad (2.4-56)$$

上式适用于  $Re < 2000$  的范围。式中,  $\alpha_w^*$  相当于流体处于滞止点时的壁面换热系数, 由下式确定:

$$\frac{1}{\alpha_w^* d_p} = \frac{1}{k_w^*} - \frac{1}{2k_c^*} \quad (2.4-57)$$

式中,  $k_w^*$  为填充床内流体处于滞止态时近壁面多孔层的导热系数,  $k_c^*$  则为流体处于滞止态时的多孔层有效导热系数。 $k_w^*$  可写成

$$\frac{k_w^*}{k_f} = 2\varepsilon_w + \frac{1 - \varepsilon_w}{\delta_w - k_f/3k_s} \quad (2.4-58)$$

式中, 近壁面多孔层的孔隙率  $\varepsilon_w \approx 0.7$ , 而  $\delta_w$  由下式确定:

$$\delta_w = \frac{1}{4} \frac{B^2}{\ln A - B} - \frac{1}{3A} \quad (2.4-59)$$

其中

$$A = \frac{k_s}{k_f} \quad (2.4-60)$$

$$B = 1 - A \quad (2.4-61)$$

当  $Re$  数较高 (即  $Re > 2000$ ) 时, 壁面与多孔层之间的对流换热为<sup>[69]</sup>

$$(Nu_f)_w = \frac{\alpha_w d_p}{k_f} = \frac{\alpha_w^* d_p}{k_f} + \frac{1}{1/(Nu_f^*)_w + 1/(0.054 Pr Re)} \quad (2.4-62)$$

式中

$$(Nu_f^*)_w = \frac{\alpha_w^* d_p}{k_f} \quad (2.4-63)$$

其中,  $\varepsilon_w^*$  为流体膜系数, 以此表示湍流对层流边界层的影响:

$$\frac{\alpha_w d_p}{k_f} = 2.6 \text{Pr}^{1/3} \text{Re}^{1/2} \quad (2.4-64)$$

有人<sup>[70]</sup>提出壁面与多孔层之间的热量传递归纳为宏观传热问题，由下式表示：

$$GC_f \frac{dT_{av}}{dx} = \frac{2K}{R} (T_w - T_{av}) \quad (2.4-65)$$

式中， $C_f$  为填充床多孔层内流体比热， $R$  为圆柱型填充床半径， $T_{av}$  为多孔层内流体平均温度， $G$  为填充床单位横截面上流体质量流率， $K$  为总传热系数。 $T_{av}$  为

$$T_{av} = \frac{2}{R^2} \int_0^R T(r) r dr \quad (2.4-66)$$

式中， $T(r)$  是床内沿径向的温度分布。总传热系数  $K$  通过下式求出：

$$\frac{Kd_{cl}}{k_f} = A \text{Re}^n \exp\left(-\frac{6d_p}{d_{cl}}\right) \quad (2.4-67)$$

式中， $d_{cl}$  为床直径， $d_p$  为固体颗粒直径，系数  $A$  和指数  $n$  值由流体—颗粒种类与匹配、 $\text{Re}$  值、 $d_p/d_{cl}$  值不同而异。对于球形颗粒—空气组成的填充床，当  $20 \leq \text{Re} < 7600$ ， $0.05 \leq d_p/d_{cl} \leq 0.3$  时， $A = 2.03, n = 0.8$ ，对于圆柱形颗粒—空气组成的填充床，当  $20 \leq \text{Re} \leq 800, 0.03 \leq d_p/d_{cl} \leq 0.2$  时， $A = 1.26, n = 0.95$ 。

### 第三章 惰性颗粒床的渗流传热数值模拟

在化学工艺和热能工程中,移动床由于具有结构简单、运行方便以及相对较高的热效率而被广泛采用。例如在高温气体除尘和热煤气脱硫等环保领域,移动颗粒床技术被认为是一种最具有发展前途的除尘脱硫技术之一<sup>[71~72]</sup>。在这些工艺装置中,热气体在多孔介质中的流动和传热特性决定着化工过程的速度和效率。因此,研究高温气体在颗粒移动床中的渗流传热过程具有重要的实用价值和理论意义。

迄今为止,对多孔介质的传热传质现象已进行了大量的研究,并取得了许多重要结论。王补宣对多孔介质中渗流传热模式进行了详尽分析<sup>[73]</sup>,姜培学<sup>[74][75]</sup>等人对单相流体在装有金属小颗粒的平行通道中的流动与换热现象进行了数值模拟,研究了局部热平衡假设对多孔介质中对流换热的影响。卞卫等人<sup>[76][77]</sup>研究了竖直通道内多孔介质中的混合对流现象。Buikis 和 Nlanova<sup>[78]</sup>对管道内填充石英颗粒的热渗透现象进行了数值分析。但到目前为止,对于多孔介质中的渗流换热大多都是针对多孔骨架固定不动的情况,对于移动颗粒料层中渗流换热现象却少有报道。而一般地移动床内的热物理现象研究却很少同时考虑渗流与传热的作用。我们针对水平导管和垂直移动颗粒床中热物理过程,充分考虑颗粒料层中渗流与传热的相互耦合作用,采用局部非平衡假设建立多孔介质渗流传热物理数学模型并进行数值计算。研究不同情况下移动床内颗粒物料层中的渗流速度、气固温度和压力分布,以得到颗粒移动床内高温气体渗流传热的基本认识,期望能够对颗粒移动床的设计和运行起一定的参考作用。

#### § 3.1 数值计算的基本原理与方法

描写多孔介质中对流扩散的微分方程是一组复杂的非线性偏微分方程,通常很难获得这些偏微分方程的精确解,对许多有实际意义的问题,必须采用实验研究或近似解法。随着计算机的发展,数值解法很快成为解决实际问题的一种重要工具。

数值解法<sup>[79]</sup>是一种离散近似的计算方法。它所能获得的不象分析解那样是被研究区域中未知量的连续函数,而是某些代表性的地点(称为节点)上的近似值。为了解出节点上的未知量的近似值,首先需要从给定的未知微分方程;或从基本物理定义出发,建立起关于这些节点上未知量近似值之间的代数方程称为离散方程,然后对其进行求解。数值计算所应用的方法很多,但其基本思想大都可以归结为:把原来在空间坐标中连续的物理量的场(如速度场、浓度场等)用有限个离散点上的值的集合来代替,按一定方式建立起关于这些值的代数方程求解,以获得物理量场



的近似解。大致求解步骤如图 3-1 所示。

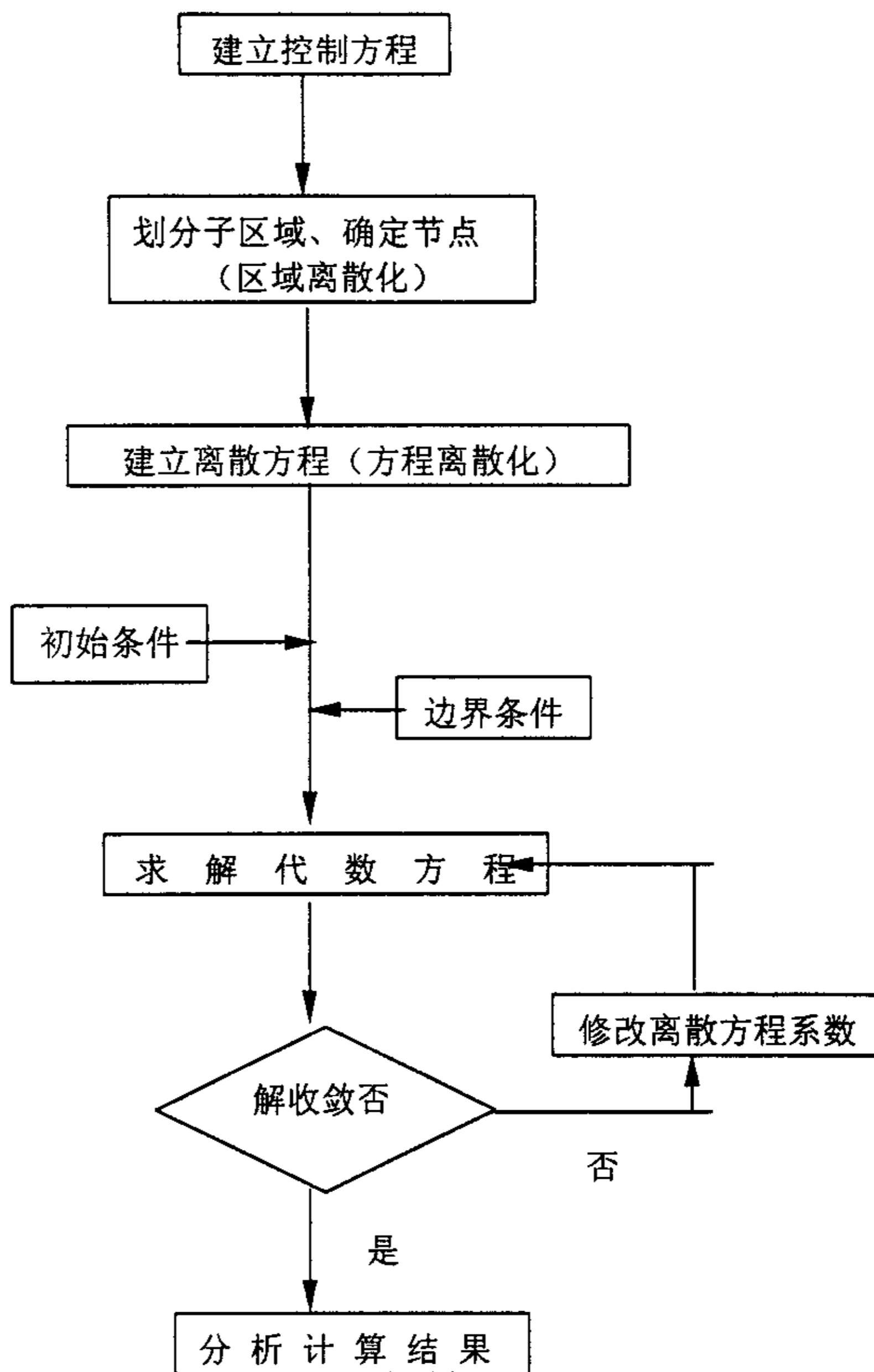


图 3-1 物理问题数值解的基本步骤

Figure 3-1 the basic numerical solve process of a physical problem

同一物理问题的不同数值解法之间的主要区别，在于子区域的划分与节点的确定、离散方程的建立及其求解这几步。主要的是有限差分法、有限元法、边界元法及有限分析法。在本文的计算中，用到的是有限容积法，是将控制方程对有限大小的容积作积分以导出离散方程的方法，属于有限差分法的一种。

### § 3.1.1 空间区域的离散化

对具体问题计算，首先要把所计算的区域划分为许多互不重叠的子区域，确定节点在子区域的位置及其所代表的容积（即控制容积），这一过程称为区域的离散化。区域离散化过程结束后，可以得到以下四种几何要素：

(1) 节点 需要求解的未知物理量的几何位置；(2) 控制容积 应用控制方程或守恒方程的最小几何单位；(3) 界面 规定了与各节点相对应的控制容积的分界面位置；(4) 网格线 沿坐标轴方向联接相邻两节点而形成的曲线簇。

节点可以看成是控制容积的代表。控制容积和子区域并不是重合的。在区域离散化的开始，由一系列与坐标轴相应的直线或曲线簇所划分出来的小区域称为子区域。视节点在子区域中是位置的不同，可以把子区域划分成两类：外节点法和内节点法。

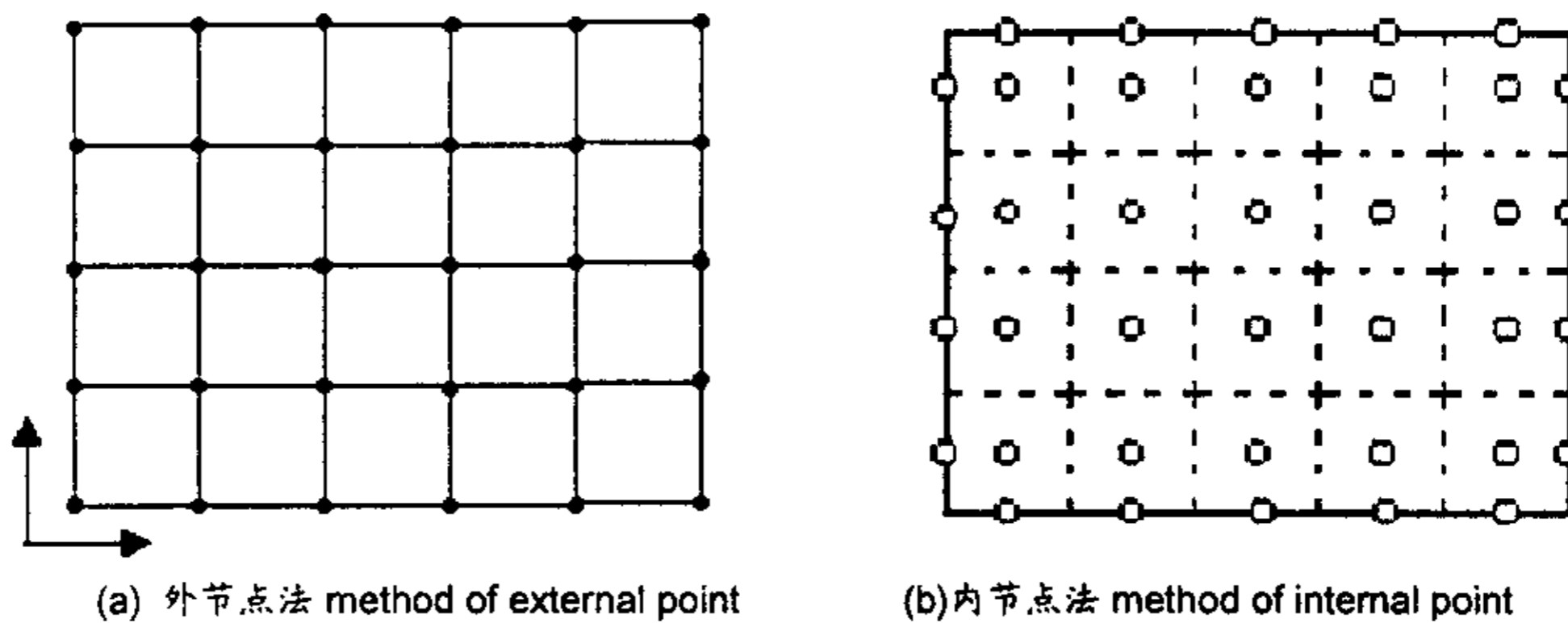


图 3-2 直角坐标系中的两种区域离散方法

Figure 3-2 two-domain discretization methods in orthogonal coordinates

外节点法：节点位于子区域的角顶上，划分子区域的曲线簇就是网格线，但子区域不是控制容积。为了确定各节点的控制容积，需要在相邻两节点的中间位置上作界面线，由这些界面线构成各节点的控制容积。是先确定节点的坐标后计算相应的界面，因而又称为先节点后界面法。

内节点法：节点位于子区域的中心，这时子区域就是控制容积，划分子区域的曲线簇就是控制体的界面线。是先规定界面位置而后确定节点，又称为先界面后节点法。在网格的图示中实线表示网格线，虚线表示界面线，黑点表示节点。而二维的直角坐标中上述两种离散方法的表示为图 3-2。为建立节点的离散方程并进行特性分析，还需对节点及有关的几何要素的命名方法作出规定。为便于讨论，采用两种命名方法。当要对离散方程进行特性分析时，采用  $i-j-n$  表示法，即所研究的二维问题的节点位置记为  $(i, j)$ ，与该节点相邻的界面则分别为  $i+1/2, i-1/2, j+1/2$  及  $j-1/2$ ，

n 表示非稳态问题的时层。在其他情形下采用 P、N、E、W 表示所研究的节点及相邻的四个节点，用 n、e、w、s 表示相应的界面，而用上标 0 表示非稳态问题上一时层之值。相邻两节点间的距离，以 x 方向为例，以  $\delta x$  表示，而  $\Delta x$  则表示相邻两界面间的距离。在均分的网格系统中或不强调  $\delta x$  与  $\Delta x$  间的区别时，节点间的距离也可用  $\Delta x$  表示。在本文的计算中，用到的是内节点法，原因是所求解的区域中，有物性发生阶跃性的变化，此时可以发生阶跃变化的面作为界面，从而避免发生在同一控制容积内的物性发生突变的情形。

### § 3.1.2 对流扩散通用方程的离散

任何一种对流扩散现象，无论是质交换、动量交换、还是热交换，都可以表示成以下通用形式（在圆柱坐标下）：

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left( \rho u \phi - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( \rho v \phi - r \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) = S \quad (3.1-1)$$

这里  $\phi$  是通用变量， $\Gamma$  与  $S$  是广义扩散系数及广义源项，其中  $S$  包含压力梯度项。

设： $J_x = \rho u \phi - \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial x}$ ， $J_r = \rho v \phi - r \Gamma \frac{\partial \phi}{\partial r}$

将上式对如图所示的控制容积作时间与空间的积分，并作以下假设：

1. 以  $\frac{(\rho\phi)_p - (\rho\phi)_p^0}{\Delta t}$  近似代替  $\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t}$
2. 在 x 与 r 方向上的总通量  $J_x$ 、 $J_r$  在各自的界面 e、w、及 n、s 上是均匀的，于是有：

$$\int_w^e \int_s^n \frac{\partial J_x}{\partial x} r dx dr = J_e - J_w$$

$J_e$ 、 $J_w$  代表截面积  $rdr$  上的转移量。

3.  $S = S_c + S_p \phi_p$  ( $S_p \leq 0$ ) 则有：

$$\frac{(\rho\phi)_p - (\rho\phi)_p^0}{\Delta t} \frac{(r_n + r_s)}{2} \Delta r \Delta x + (J_e - J_w) + (J_n - J_s) = (S_c + S_p \phi_p) \frac{(r_n + r_s)}{2} \Delta r \Delta x \quad (3.1-2)$$

对界面上的总通量 J 建立起其节点值的表达式，采用指数差分格式，可以得到：

$$J_e = (a_e + F_e) \phi_p - a_e \phi_e \quad J_n = (a_n + F_n) \phi_p - a_n \phi_n \quad (3.1-3)$$

$$J_w = a_w \phi_w - (a_w - F_w) \phi_p \quad J_s = a_s \phi_s - (a_s - F_s) \phi_p \quad (3.1-4)$$

将上述表达式代入式(3-2)，得：

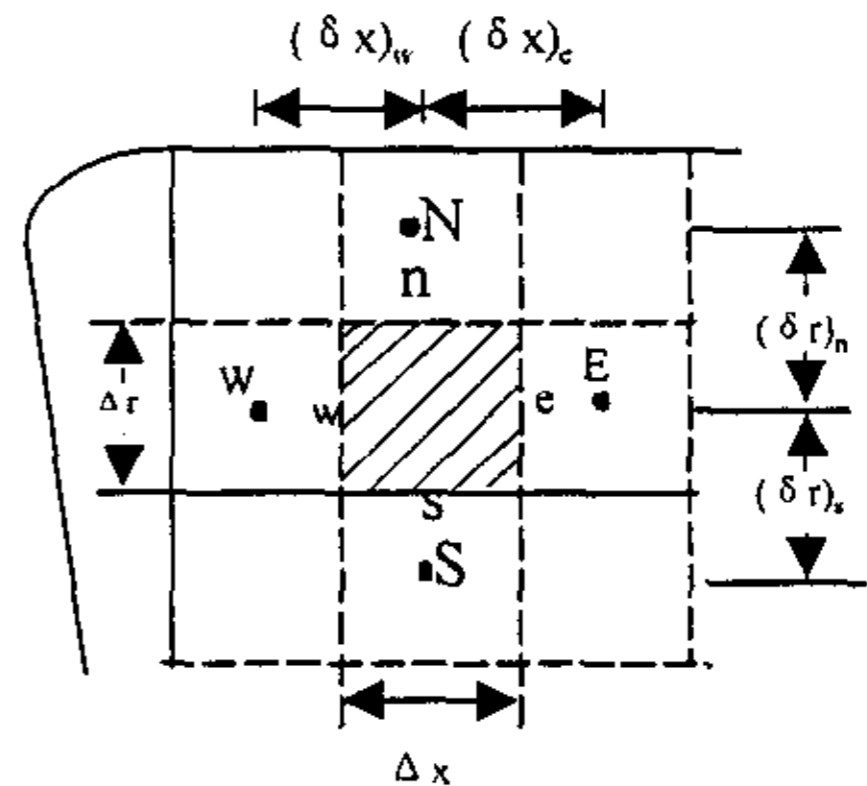


图 3-3 圆柱轴对称坐标的网格系统

figure 3-3 the gridding system of cylindrical

$$a_p \phi_p = a_E \phi_E + a_W \phi_W + a_N \phi_N + a_S \phi_S + a_p^0 \phi_p^0 + b \quad (3.1-5)$$

$$\text{其中: } a_E = D_e A(|P_{\Delta e}|) + [-F_e, 0] \quad a_W = D_w A(|P_{\Delta w}|) + [F_w, 0]$$

$$a_N = D_n A(|P_{\Delta n}|) + [-F_n, 0] \quad a_S = D_s A(|P_{\Delta s}|) + [F_s, 0]$$

$$b = S_c \frac{(r_n + r_s)}{2} \Delta r \Delta x \quad a_p = a_E + a_W + a_N + a_S + a_p^0 - S_p \frac{(r_n + r_s)}{2} \Delta r \Delta x$$

$$a_p^0 = \frac{\rho_p (r_n + r_s) \Delta r \Delta x}{2 \Delta t} \quad A(|P_{\Delta}|) = |P_{\Delta}| / (\exp(|P_{\Delta}|) - 1) \quad P_{\Delta} = \frac{\rho u \delta x}{\Gamma}$$

这里  $\delta x$  为特性尺度,  $u$  为特性速度

$$F_e = (\rho u)_e r \Delta r, \quad F_w = (\rho u)_w r \Delta r, \quad F_n = (\rho v)_n r \Delta x, \quad F_s = (\rho v)_s r \Delta x$$

$$D_e = \frac{\Gamma_e r \Delta r}{(\delta x)_e}, \quad D_w = \frac{\Gamma_w r \Delta r}{(\delta x)_w}, \quad D_n = \frac{\Gamma_n r \Delta x}{(\delta r)_n}, \quad D_s = \frac{\Gamma_s r \Delta x}{(\delta r)_s}$$

### § 3.1.3 数值求解方法

求解传质问题的关键是确定流场。因此重点是 Navier-Stokes 方程的求解。在求解流场时, 有两种: 以速度、压力 (或密度) 作为基本变量, 称为原始变量法, 或取涡量、流函数作为变量, 称为涡量流函数法。在原始变量中又可分为以密度为基本变量 (即以  $u, v, \rho$  为变量) 以及以压力为基本变量 ( $u, v, p$ ) 两大类。以密度为基本变量时, 连续方程是求解密度的控制方程, 解出密度后再用状态方程确定压力。这种方法的缺点是不能推广到  $Ma$  数很低的情形。因此在计算中采用以压力为基本变量的求解方法。这类解法在连续方程中引入所谓的“人工压缩项”, 最初就是为不可压缩流体的流场的求解建立起来的。考虑到多孔介质中渗流流场中的速度值很小, 可以认为是不可压缩气体的流动, 因此选用以压力为基本变量 ( $u, v, p$ ) 的方法。

数值求解法的困难主要存在于—阶微分项的处理, 在原始变量法中, 连续方程所含的速度—阶项及动量方程所含的压力—阶项在常规建立起来的网格中无法进行计算, 因为会引起一个问题: 如果在流场迭代求解过程中的某一个层次上, 在压力场的当前值中加入一个锯齿状的压力波, 则动量方程的离散形式无法把这一不合理的分量检测出来, 它会一直保留至迭代过程收敛, 而且被作为正确的压力场输出。因此, 在动量方程的求解中需要建立正确的网格系统, 以检测出不合理的压力场。

流场求解中还有一个与代数方程的求解方法有关的问题。控制方程组离散后得到的是关于  $u, v, p$  的代数方程组。可以采用代数方程组的直接解法, 在给定的代数方程系数下同时解出  $u, v$  及  $p$  之值。这种同时求解的方法需要较多的计算机内存,

计算时间也较常。虽然近年来有些学者开展了直接求解方法的研究，但目前大多数对流换热数值求解中，代数方程组仍采用分离式求解法（或顺序求解法）。所谓分离式求解法，就是  $u, v, p$  各类变量独立地，有序地进行求解的方法。即在一组给定的代数方程的系数下，先用迭代法求解一类变量而保持其他变量为常数，如此逐一依次求解各类变量。采用分离式求解法时，我们遇到的一个问题是：压力本身没有控制方程，它是以源项的形式出现在动量方程中的。压力与速度的关系隐含在连续方程中，如果压力场是正确的，则据此压力场而解得的速度场一定满足连续方程。如何构造求解压力场的方程，或者说在假定初始压力分布后如何构造计算压力改进值的方程，就成了分离式求解方法中的一个关键问题，文献中称速度与压力的耦合问题。同时，注意到  $u, v, p$  本来是互相耦合的，在采用分离求解法时，各类变量的代数方程必须反复求解几次才能照顾到相互间的耦合关系。因而采用分离求解法时，设计合适的算法，使各类变量能同步地加以改进，对于提高迭代收敛速度有重要意义。

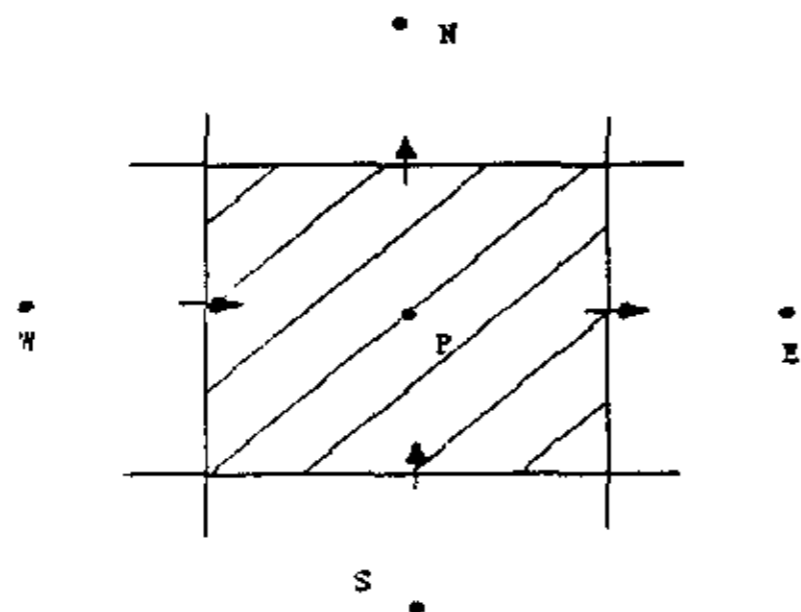


图 3-4 (a) 主控制容积交错网格

Figure3-4(a) the staggered grids of the main control volume

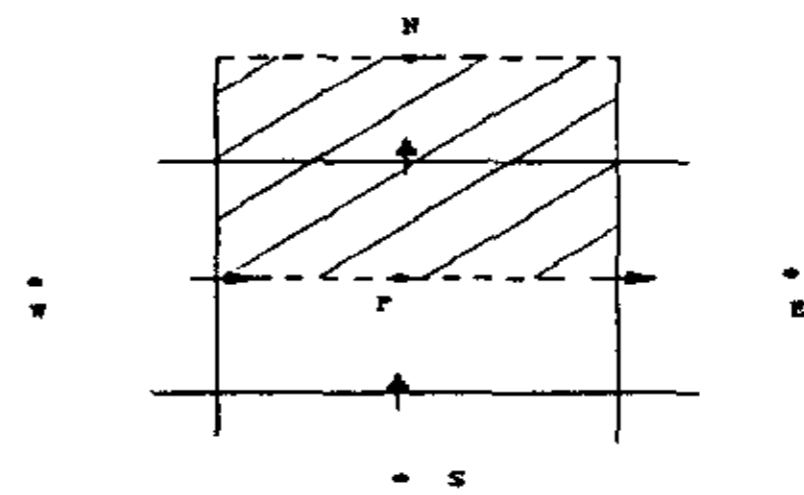


图 3-4(b) v 控制容积交错网格

Figure3-4(b) the staggered grids of the V control volume

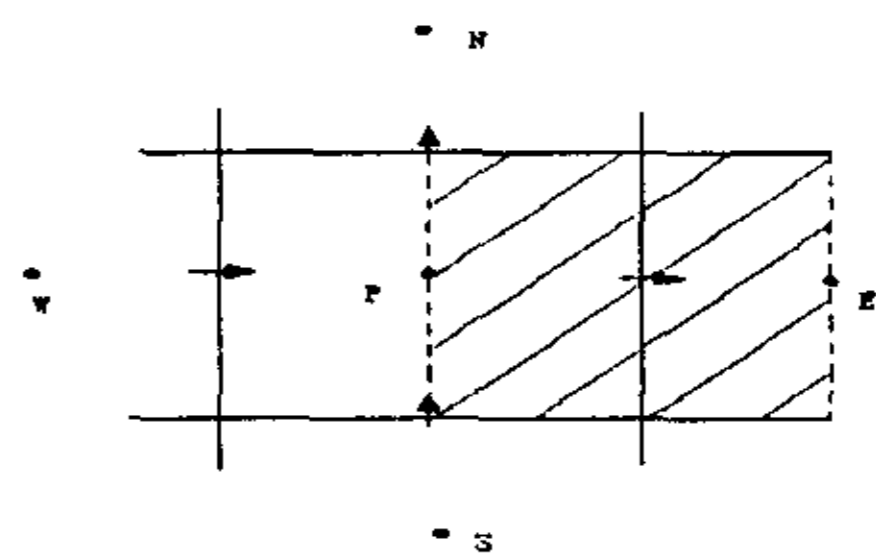


图 3-4(c) u 控制容积交错网格

Figure3-4(b) the staggered grids of the U control volume

上述问题，采用交错网格求解压力耦合方程的半隐式压力校正法，是由 Pantankar 与 Spalding 于 1972 年提出的，称为 SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure Linked Equations)。所谓半隐是指在计算中略去了一些项 ( $\sum a_{nb} u'_{nb}$ 、 $\sum a_{nb} v'_{nb}$ ) 的处理方法。在计算中， $(p'_p - p'_E) A_c$  代表了压力修正对  $u'_c$  的直接影响，而  $\sum a_{nb} u'_{nb}$  则反映了压力修正对  $u'_c$  的

间接的或隐含的影响。去掉了这一项就称为“半隐”，而保留这一部分时， $u_c$  方程就是一个“全隐”的代数方程，即网格各点上的  $u_c$  必须同时计算出来，不像 SIMPLE 中那样可以进行逐点计算。解决流场计算的第一个问题，即不合理的压力场的检测，可以采用交错网格。所谓交错网格就是指把速度  $U$ 、 $V$  及压力  $P$ （包括其它所有标量场和物性参数）分别存于三套不同网格上的网格系统。其中速度  $U$  存于压力控制容积的东、西界面上，速度  $V$  存于压力控制容积的南、北界面上， $U$ 、 $V$  各自的控制容积则是以速度所在的位为中心的，如图 3-4 所示。由图可见， $U$  控制容积与主控制容积（即压力的控制容积）之间在  $X$  方向有半个网格步长的错位，而  $V$  的控制容积与主控制容积之间在  $Y$  方向上有半个步长的错位。交错网格的名称由此而来。

在交错网格系统中，关于  $u$ 、 $v$  的离散方程可通过对  $u$ 、 $v$  各自的控制容积作积分而得出。这时压力梯度的离散形式对  $u_c$ ， $v_n$  分别为

$$(p_E - p_P)/(\delta x)_c, (p_N - p_P)/(\delta y)_n \quad (3.1-6)$$

亦即相邻两点间的压力差构成了  $\partial p/\partial x$ 、 $\partial p/\partial y$ ，这就从根本上解决了采用一般网格系统时所遇到的困难。采用交错网格也要付出一定的代价。首先增加了计算工作量，所有存储于主节点上的物性值在求解  $u$ 、 $v$  方程时必须通过插值，才能得出  $u$ 、 $v$  位置上的数据。同时由于  $u$ 、 $v$  及一般  $\phi$  变量不在同一网络上，在求解各自的离散方程时都需作一些插值。其次，程序编制的工作量也有所增加，三套网格中节点的编号必须仔细处理方可协调一致。但由于交错网格能成功地解决压力梯度离散时所遇到的问题，在近一、二十年中得到广泛的应用。

在交错网格中，一般  $\phi$  变量的离散过程及结果与第 2 节所述的一样。但对动量方程而言，则带来一些新的特点，主要表现在以下三方面。

1. 积分用的控制容积不是主控制容积而是  $u$ 、 $v$  各自的控制容积
2. 压力梯度项从源项中分离出来，对  $u_c$  的控制容积，该项积分为：

$$\int_P^E \left( -\frac{\partial p}{\partial x} \right) dx dy = -\int_P^E (p|_P^E) dy \cong (p_P - p_E) \Delta y \quad (3.1-7)$$

这里假设在  $u_c$  的控制容积的东、西界面上压力是各自均匀的，分别为  $p_P$  及  $p_E$ 。于是关于  $u_c$  的离散方程便具有以下形式：

$$a_c u_c = \sum a_{mb} u_{mb} + b + (p_P - p_E) A_c \quad (3.1-8)$$

其中： $u_{nb}$  是  $u_e$  的邻点速度  $b$  为不包括压力在内的源项中的常数部分，对非稳态问题为  $b = S_c \Delta v + a_e^0 u_e^0$ ； $A_e = \Delta y$  是压力差的作用面积；系数  $v_n$  的计算公式取决于所采用的格式。类似的，对  $v_n$  的控制容积作积分可得：

$$a_n v_n = \sum a_{nb} v_{nb} + b + (p_p - p_N) A_n \quad (3.1-9)$$

3. 各控制容积界面上的流量、物性参数常需要用插值方法确定。以  $u_e$  的离散方程获得。

(1) 界面上的流量 例如  $u_e$  控制容积的西界面上的流量  $F_p$  可以按  $u_e$ 、 $u_w$  位置上的流量  $F_e$ 、 $F_w$  插值而得。

$$F_p = F_e \frac{(\delta x)_w}{\Delta x_p} + F_w \frac{(\delta x)_e}{\Delta x_p} = (\rho u)_e \Delta y \frac{(\delta x)_w}{\Delta x_p} + (\rho u)_w \frac{(\delta x)_e}{\Delta x_p} \quad (3.1-10)$$

而  $u_e$  的北界面上的流量则可以分别由  $v_n$  及  $v_{ne}$  在各自的流动截面内的流量迭加而成：

$$F_{n-e} = (\rho v)_n (\delta x)_e + (\rho v)_{ne} (\delta x)_e \quad (3.1-11)$$

(2) 界面上的密度 采用线性插值法确定：

$$\rho_e = \rho_E \frac{(\delta x)_e}{(\delta x)_e} + \rho_P \frac{(\delta x)_e}{(\delta x)_e} \quad (3.1-12)$$

(3) 界面上的扩散系数（或扩导）利用传热中热阻串，并联的概念可方便地得出界面上扩导的计算式。

在获得动量方程的离散形式后，采用  $u$ 、 $v$ 、 $p$  同时求解的方法，需要将连续性方程在控制体上离散（采用交错网格时速度均在主控制体的界面上，不必插值），然后用直接解法计算在给定的一组系数下各节点上的  $u$ 、 $v$ 、 $p$  之值。根据计算所得的新值，改进代数方程的系数，再用直接法解出与新的系数相应的  $u$ 、 $v$ 、 $p$  值。如此反复，直到收敛。这种  $u$ 、 $v$ 、 $p$  同时求解的方法由于占用的内存及耗费的机时较大而较少采用。因此在实际计算中用分离式求解方法。

采用 SIMPLE 算法实施关于  $u$ 、 $v$ 、 $p$  代数方程的分离式求解时，计算步骤如下：

1. 假定一个速度分布，记为  $u^0$ 、 $v^0$ ，以此计算动量离散方程中的系数及常数项；

2. 假定一个压力场  $p^*$ ;
3. 依次求解两个动量方程, 得  $u^*$ 、 $v^*$ ;
4. 求解压力修正值方程, 得  $p'$ ;
5. 据  $p'$  改进速度值;
6. 利用改进后的速度场求解那些通过源项物性等与速度场耦合的  $\phi$  变量。如果  $\phi$  并不影响流场, 则应在速度场收敛后再求解;
7. 利用改进后的速度场重新计算动量离散方程的系数, 并用改进后压力场作为下一层迭代计算的初值。重复上述步骤, 直到获得收敛的解。

线性代数方程的迭代解法很多, 在计算中常用的有点迭代、块迭代法、交替法、交替方向迭代法及强隐迭代法等。采用 N、E、W、S 下标制, 二维问题表示为:

$$a_p T_p = a_E T_E + a_W T_W + a_N T_N + a_S T_S + b \quad (3.1-13)$$

在计算中, 选用点迭代法。点迭代法又有三种实施方式: Jacobi (雅可比) 迭代、Gauss-Seide (高斯-赛德) 迭代、SOR/SUR (逐次超松弛/逐次亚松弛) 迭代。

第  $n$  轮迭代中节点  $k$  的值表示为:

$$T_k^{(n)} = T_k^{(n-1)} + [T_k^{(n)} - T_k^{(n-1)}] \quad (3.1-14)$$

写成更一般的形式为:

$$T_k^{(n)} = T_k^{(n-1)} + \alpha (\tilde{T}_k^{(n)} - T_k^{(n-1)}), \quad 0 \leq \alpha \leq 2 \quad (3.1-15)$$

$\tilde{T}_k^{(n)}$  是第  $n$  轮迭代中用 Jacobi (雅可比) 迭代或 Gauss-Seide (高斯-赛德) 迭代所得值。

$\alpha$  称为松弛因子。 $\alpha = 1$  时的  $T_k^{(n)}$  就是 Jacobi (雅可比) 迭代或 Gauss-Seide (高斯-赛德) 迭代的解。当  $\alpha > 1$  时为逐次超松弛迭代 (SOR), 而  $\alpha < 1$  为逐次亚松弛迭代 (SUR), 我们在计算中用的就是这种迭代方法。

离散化过程中的源项是一个广义量, 代表了不能包括到控制方程的非稳态项, 对流项与扩散项中的其他各项之和。如果源项为常数, 则在离散过程中不带来任何困难。当源项是未知量的函数时, 源项的数值处理很重要, 一般是将源项局部线性化, 即假定在未知量微小的变动范围内, 源项  $S$  可以表示成为未知量的线性函数。于是在控制容积  $P$  内, 可以表示为:

$$S = S_c + S_p T_p \quad (3.1-16)$$

其中  $S_c$  是常数部分,  $S_p$  是  $S$  随  $T$  而变化的曲线在点  $P$  的斜率关于这一线性化的处理



作以下说明:

1. 当源项为未知量的函数时, 线性化的处理比假定源项为常数更为合理。因为如果  $S = f(\Phi)$ , 则把各控制方程中的  $S$  作为常数处理就是以上一次迭代计算所得的  $\Phi^*$  来计算  $S$ , 这样源项相对于  $\Phi$  永远有一个滞后; 而按式  $S = S_c + S_p T_p$  线性化之后, 式中的  $T_p$  是迭代计算的当前值, 这样  $S$  能跟上  $T_p$  的变化。
2. 线性化处理又是建立线性代数方程所必须的。如果采用二阶或高阶的多项式, 则所形成的离散方程不是线性代数方程。
3. 为了保证代数方程迭代求解的收敛, 要求  $S_p \leq 0$ 。线性迭代方程迭代求解收敛的一个充分条件是对角占优, 即  $a_p \geq \sum a_{nb}$ , 这就要求  $S_p \leq 0$ 。
4. 由代数方程迭代求解的公式:

$$T_p = \frac{\sum a_{nb} T_{nb} + b}{\sum a_{nb} - S_p \Delta V} \quad (3.1-17)$$

$S_p$  绝对值的大小影响到迭代过程中变量的变化速度,  $S_p$  的绝对值越大 ( $S_p < 0$ ), 系统的惯性越大, 相邻两次迭代之间  $T_p$  的变化越小, 因而收敛速度下降, 但有利于克服迭代过程的发散。

## § 3.2 水平导管颗粒层瞬态渗流传热数值模拟

### 1、物理数学模型

水平导管内颗粒物料输运是一个复杂过程, 高温气体在颗粒物料中渗流的影响因素较多, 本节就实际的复杂过程将情况简化, 抽象成理想模型。如图 3-5 所示, 水平圆柱导管长度为  $L$ , 半径为  $R$ , 颗粒固体自进料端口进入导管内, 逆  $x$  轴方向移动, 并在气体渗入口排出物料, 颗粒轴向移动速度为  $U_s$ 。热气体以入口速度  $U_{f,m}$ , 这里是指多孔介质孔隙中的速度, 而不是空床速度  $U_m$ , 二者关系是:  $U_m = U_{f,m} \cdot \varepsilon$ ,  $\varepsilon$  为多孔介质孔隙率。高温气体以温度  $T_m$  渗入导管内填充颗粒物料中。导管外壁处于环境温度  $T_0$  下, 壁面均匀散热。

模型假设: 管内颗粒物料是各向同性的多孔介质, 颗粒物料中的流体流动被认为是气体在多孔介质孔隙中的渗流过程。气体是理想气体, 由于气体渗流速度很低, 可按不可压缩流体处理。流动是单相、二维、稳态非达西流。由于渗流速度较低,

因而可以忽略气体的惯性作用。假设流体和固体颗粒之间不存在局部热平衡状态，即气体与颗粒固体之间存在局部温差。颗粒物料为惰性物体，在加热过程中不发生

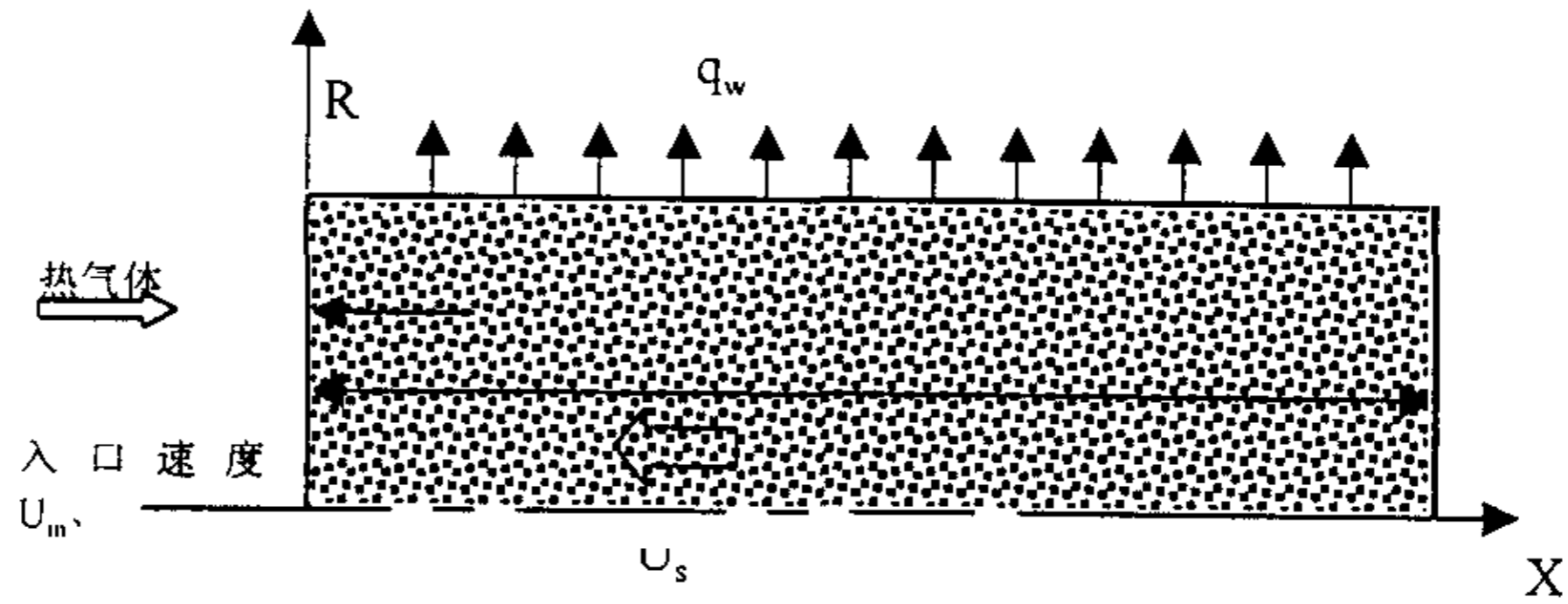


图 3-5 水平导管物理模型

figure 3-5 The physical model of horizontal particle bed

化学反应。则基于 Darcy-Brinkman-Forchheimer 模型的控制方程为：

1、连续方程：

$$\frac{\partial(\epsilon\rho_f)}{\partial t} + \frac{\partial(\epsilon\rho_f u_f)}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial(\epsilon r \rho_f v_f)}{\partial r} = 0 \quad (3.2-1)$$

2、轴向动量方程：

$$\frac{\partial(\epsilon\rho_f u_f)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_f \epsilon u_f^2)}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r\rho_f \epsilon u_f v_f)}{\partial r} = -\frac{\partial(\epsilon p')}{\partial x} - \frac{\mu\epsilon^2(u_f + u_s)}{k} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r\mu \frac{\partial u_f}{\partial r} \right) \quad (3.2-2)$$

3、径向动量方程：

$$\frac{\partial(\epsilon\rho_f v_f)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_f \epsilon u_f v_f)}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r\rho_f \epsilon v_f^2)}{\partial r} = -\frac{\partial(\epsilon p')}{\partial r} - \frac{\mu\epsilon^2}{k} v_f + \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial v_f}{\partial x} \right) \quad (3.2-3)$$

4、孔隙中渗流气体的能量方程为：

$$\frac{\partial(\epsilon c_{pf} \rho_f T_f)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_f \epsilon c_{pf} u_f T_f)}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r\rho_f c_{pf} \epsilon v_f T_f)}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ (\lambda_d + \lambda_f) \epsilon \frac{\partial T_f}{\partial x} \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r(\lambda_d + \lambda_f) \epsilon \frac{\partial T_f}{\partial r} \right] + \alpha_v(T_s - T_f) \quad (3.2-4)$$

5、颗粒料层的能量方程为：

$$\frac{\partial((1-\epsilon)c_{ps}\rho_s T_s)}{\partial t} = u_s \rho_s c_{ps} (1-\epsilon) \frac{\partial T_s}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \lambda_s (1-\epsilon) \frac{\partial T_s}{\partial x} \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r\lambda_s (1-\epsilon) \frac{\partial T_s}{\partial r} \right] + \alpha_v(T_s - T_f) \quad (3.2-5)$$

相应的初边条件为：

$$x=0, \quad u_f = u_{f,m}, \quad v_f = 0, \quad \frac{\partial T_s}{\partial x} = 0, \quad T_f = T_m$$

$$x=L, \quad \frac{\partial u_f}{\partial x} = \frac{\partial T_s}{\partial x} = \frac{\partial T_f}{\partial x} = \frac{\partial v_f}{\partial x} = 0$$

$$r = 0, \quad \frac{\partial u_f}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial T_s}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial T_f}{\partial r} = 0, \quad v_f = 0$$

$$r = R, \quad u_f = 0, \quad -\lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial r} = \alpha_w (T_s - T_0); \quad -\lambda_s \frac{\partial T_f}{\partial r} = \alpha_w (T_f - T_0)$$

设  $t=0$  秒之前，管内物料一直处于稳定移动状态。 $t=0$  秒开始，物料停止移动。因此，有以下初值条件：

$$t = 0, \quad \phi = f_\phi(x, r)$$

其中  $\phi$  代表各物理量， $f_\phi$  表示各物理量的空间分布，其值为正常给料时稳态运行情况下的分布值。

公式中各物理量的含义如下： $u_{f,m}$ ：孔隙内气体入口速度； $u_f$ ：隙中气体轴向速度； $v_f$ ：孔隙中气体径向速度； $u_s$ ：导管内颗粒移动速度； $T_f$ ：气体温度； $T_s$ ：颗粒固体温度； $T_0$ ：环境温度； $\varepsilon$  是导管内颗粒层孔隙率； $K$ ：达西渗透系数； $\mu$ ：气体运动粘性系数； $\rho_f$ ：气体密度； $c_{pf}$ ：气体定压比热容； $c_{ps}$ ：固体比热； $\lambda_f$  和  $\lambda_s$  分别为气体的平均导热系数和当量导热系数，

$\lambda_s = \lambda_d + \lambda_f$ ； $\lambda_s$ ：固体颗粒的平均导热系数； $\alpha_w$ ：气体通过导管与环境之间的对流换热系数； $\alpha_v$ ：导管内气体与颗粒固体间的对流换热系数； $p'$ ：多孔介质中的气体压力  $p$  与床外大气压力  $p_\infty$  的压力差，

$p' = p - p_\infty$  其中部分参数的计算公式如下<sup>[80][74]</sup>：

$$\rho_f = p / (RT_f); \quad k = d_p^2 \varepsilon^3 / (150(1-\varepsilon)^2)$$

$$\lambda_d = 0.023(\rho c_p)_f d_p |u_f| (1-\varepsilon); \quad \alpha_v = 6\alpha(1-\varepsilon) / d_p$$

其中  $d_p$  是颗粒平均直径， $\alpha$  用 Achenbach 公式计算：

$$Nu = \alpha d_p / \lambda_f = \left[ (1.18 Re^{0.58})^4 + 10.23 Re_h^{0.75} \right]^{1/4} \tag{3.2-6}$$

$$Re = \varepsilon \rho u_p d_p / \mu; \quad Re_h = Re / (1-\varepsilon)$$

以上各物理量参数均为国际单位。

## 2、数值计算方法

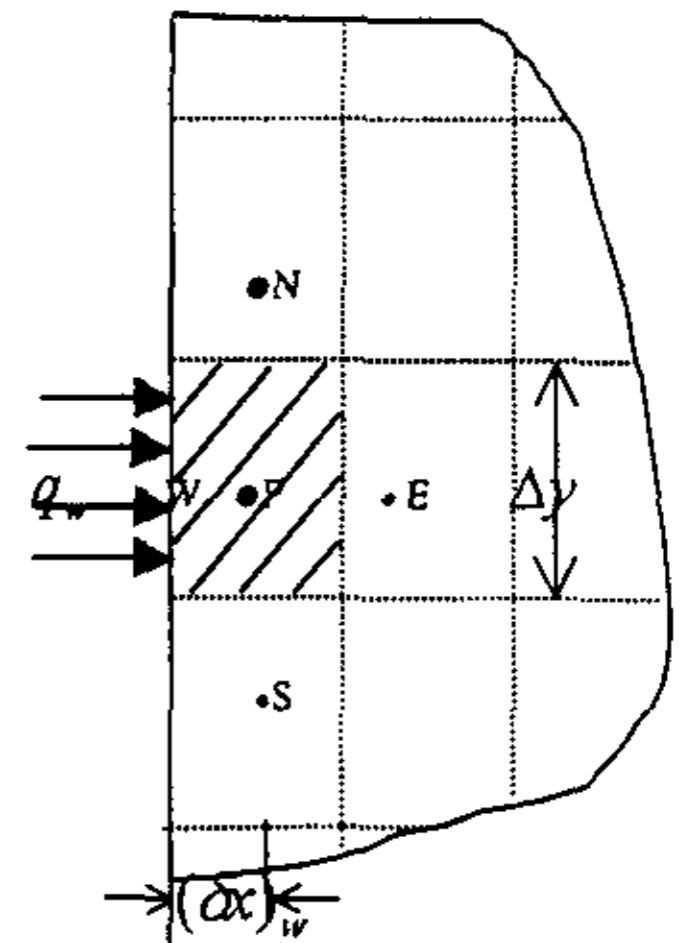


图 3-6 附加源项图示  
figure 3-6 sketch map about additional source item

根据 § 3.1 所述方法对以上方程(3.2-1)~(3.2-5)进行离散。值得一提的是, 颗粒层能量方程中没有对流项, 是纯扩散过程。但是由于颗粒层以速度  $u_x$  沿  $x$  负方向平移, 所以它既有别于纯导热方程又不同于普通的对流扩散方程, 在离散时需特别处理。首先用颗粒密度  $\rho_p$  代替流体密度  $\rho_f$ , 然后用  $-u_x$  代替流体速度  $u_f$ , 这样就可以应用通用程序。将研究对象划分为  $100 \times 21$  的交错网格。壁面处设为第三类边界条件, 采用附加源项法处理温度边界。所谓附加源项法是指把由第二类或第三类边界条件所规定的进入或导出计算区域的热量作为与边界相邻的控制容积的当量源项。从整体观点看, 无论这一份热量是从边界上导入还是从与边界相邻的控制容积发出的, 热平衡不会受到破坏。而作了这一处理后, 如果与边界相邻的控制容积中的节点是内节点, 则对此控制容积建立起来的离散方程就可以不包含边界上的未知温度。具体处理方法如下。

如图 3-6 所示。与边界相邻的控制容积中的节点为 P。对此控制容积可写出

$$a_p T_p = a_E T_E + a_W T_W + a_N T_N + a_S T_S + b$$

对非稳态问题, 有关  $T_p^0$  的项已包括与  $b$  中。又有  $a_w = \frac{k_B \Delta y}{(\delta x)_w}$ ,  $k_B$  其中为边界点的导热系数。为了在  $T_p$  的代数方程中不出现未知的边界温度, 就需要利用已知的边界条件把  $T_w$  消去, 为此作如下变换:

$$(a_p - a_w) T_p = a_E T_E + a_N T_N + a_S T_S + a_w (T_w - T_p) + b \quad (a)$$

注意到

$$a_w (T_w - T_p) = \frac{k_B \Delta y (T_w - T_p)}{(\delta x)_w} q_B \Delta y$$

其中  $q_B$  为进入该控制容积的热流密度, 以进入为正。于是关于 P 点的方程便化为:

$$a'_p T_p = a_E T_E + a_N T_N + a_S T_S + q_B \Delta y + b \quad (b)$$

对第二类边界条件,  $q_B$  为已知, 故可把它与  $b$  组成一个新项:

$$q_B \Delta y + b = \left( S_C + \frac{q_B \Delta y}{\Delta x \Delta y} \right) \Delta x \Delta y = (S_C + S_{C,ad}) \Delta x \Delta y$$

同时,  $a'_p = a_p - a_w = a_E + 0 + a_N + a_S - S_p \Delta x \Delta y$ 。这就是说, 对第二类边界条件, 如

果把  $q_B \Delta y / \Delta x \Delta y$  作为与边界相邻的控制容积的附加常数源项, 记为  $S_{C,ad}$  同时令  $a_w = 0$ , 则所得之离散方程既能符合能量守恒关系, 又可以把未知的边界温度排除在外。

当边界条件为第三类时,  $q_B$  可以表示为:

$$q_B = \alpha(T_f - T_w)$$

另外由 Fourier 定律得

$$q_B = \frac{k_B(T_w - T_p)}{(\delta x)_w}$$

于是有:

$$q_B = \frac{T_f - T_w}{1/\alpha} = \frac{T_w - T_p}{(\delta x)_w / k_B} = \frac{T_f - T_p}{1/\alpha + (\delta x)_w / k_B} \quad (c)$$

将上式代入(b)式可得到:

$$\left[ a'_p + \frac{A}{1/\alpha + (\delta x)_w / k_B} \right] T_p = a_E T_E + a_N T_N + a_S T_S + \left\{ S_C + \frac{A T_f}{\Delta V [1/\alpha + (\delta x)_w / k_B]} \right\} \Delta V \quad (d)$$

其中 A 是所研究控制容积在边界上的传热面积,  $\Delta V$  为控制容积的体积。上式表明, 对第三类边界条件, 如果在边界控制容积中加入以下附加源项:

$$S_{C,ad} = \frac{A}{\Delta V} \frac{T_f}{1/\alpha + (\delta x)_w / k_B} \quad (3.2-7)$$

$$S_{p,ad} = -\frac{A}{\Delta V} \frac{1}{1/\alpha + (\delta x)_w / k_B} \quad (3.2-8)$$

同时令  $a_w = 0$  就可以实现使未知的边界温度不进入离散方程的目的。

能量方程就是按上述方法来处理壁面边界条件的。对于内部节点, 按如下方式设置源项。

• 轴向动量方程的源项:

$$S = S_C + S_p \Phi_p = -\frac{\mu \varepsilon}{k} (u_f + u_s) \quad (3.2-9)$$

设

$$S_C = \frac{\mu \varepsilon}{k} (u_f^* - u_s), S_p = -2 \frac{\mu \varepsilon}{k} \quad (3.2-10)$$

其中  $u_f^*$  表示上一层迭代结果;

• 径向动量方程的源项为:

$$S = -\frac{\mu\varepsilon}{k}v_f; \quad S_C = 0, \quad S_P = -\frac{\mu\varepsilon}{k} \quad (3.2-11)$$

• 气体能量方程的源项为:

$$S = \frac{\alpha_v}{\varepsilon c_{pf}}(T_s - T_f) \quad S_C = \frac{\alpha_v}{\varepsilon c_{pf}}T_s \quad S_P = -\frac{\alpha_v}{\varepsilon c_{pf}} \quad (3.2-12)$$

• 颗粒层能量方程的源项为:

$$S = \frac{\alpha_v}{(1-\varepsilon)c_{ps}}(T_f - T_s), \quad S_C = \frac{\alpha_v}{(1-\varepsilon)c_{ps}}T_f, \quad S_P = -\frac{\alpha_v}{(1-\varepsilon)c_{ps}} \quad (3.2-13)$$

计算过程中各常量的取值如下:

$$d_p = 2\text{mm}, \quad \mu = 37.9 \times 10^{-6} \text{kg}/(\text{m}\cdot\text{s}), \quad c_{pf} = 1.214 \text{kJ}/(\text{kg}\cdot\text{C}), \quad c_{ps} = 1.08 \text{kJ}/(\text{kg}\cdot\text{C}),$$

$$\rho_s = 1000 \text{kg}/\text{m}^3, \quad \lambda_f = 0.0742 \text{w}/(\text{m}\cdot\text{C}), \quad \lambda_s = 0.18667 \text{w}/(\text{m}\cdot\text{C}), \text{导管内径 } R = 0.1\text{m}, \text{环境}$$

温度  $T_0 = 30^\circ\text{C}$ , 时间步长取为 1 秒。在每一时间层上的收敛条件是:

$$\frac{|\sum T_s^0 - \sum T_s|}{\sum T_s} < 10^{-3}, \quad \frac{|\sum T_f^0 - \sum T_f|}{\sum T_f} < 10^{-3}, \quad \frac{|\sum u_f^0 - \sum u_f|}{\sum u_f} < 10^{-3} \quad (3.2-14)$$

如果上三个条件不能同时成立, 则迭代 100 次后进入下一时层。在实际程序编写过程中没有对所有节点值都进行求和, 而是取具有代表性 100 个节点。

### 3、结果与分析

为了研究各种因素对渗流传热的影响, 通过改变孔隙率以及入口渗流速度来考察高温气体对导管内颗粒物料中的气固温度分布、渗流速度分布以及热渗透作用深度。

图 3-7 表示颗粒固体温度沿导管轴向的分布规律。由图可见:  $T=0$  秒之前, 导管内颗粒固体温度基本处于常温, 这是因为此时导管内的颗粒物料处于稳定移动状态, 高温气体在导管的渗流入口加热物料, 而物料的移动将大量的热颗粒从卸料口带走, 因此管外高温气体对管内颗粒物料基本无热量渗透。而当导管内物料停止排料时, 管外的高温气体将源源不断地渗入管内并对颗粒物料进行加热。由于停止排卸料, 因此导管内颗粒固体的温度将不断上升。对于计算工况, 在停止卸料 15 分钟以后, 沿导管轴向  $x=100\text{mm}$  处, 颗粒固体的计算温度将逐渐上升到  $400^\circ\text{C}$ 。由图还可见气固温度在渗流入口区域分布较高, 然后温度沿轴向快速下降。颗粒固体温度从渗流入口处的  $1000^\circ\text{C}$  到  $200\text{mm}$  处很快下降到常温, 可见高温气体对导管内颗粒料层的热渗透作用主要是在渗流入口端区域。

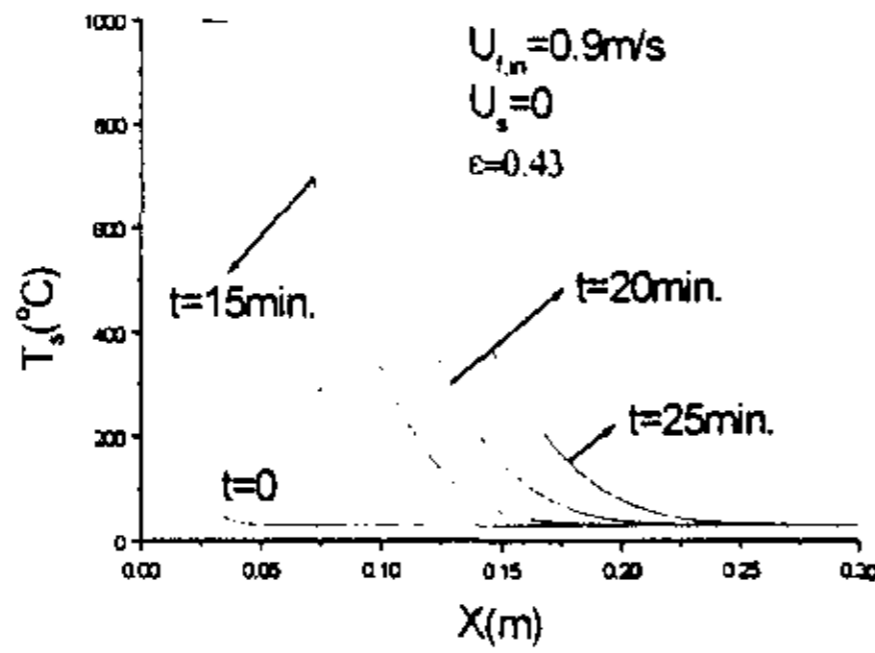


图 3-7 不同时间固体颗粒温度沿轴向分布  
figure 3-7 temperature graph of particle at deferent time

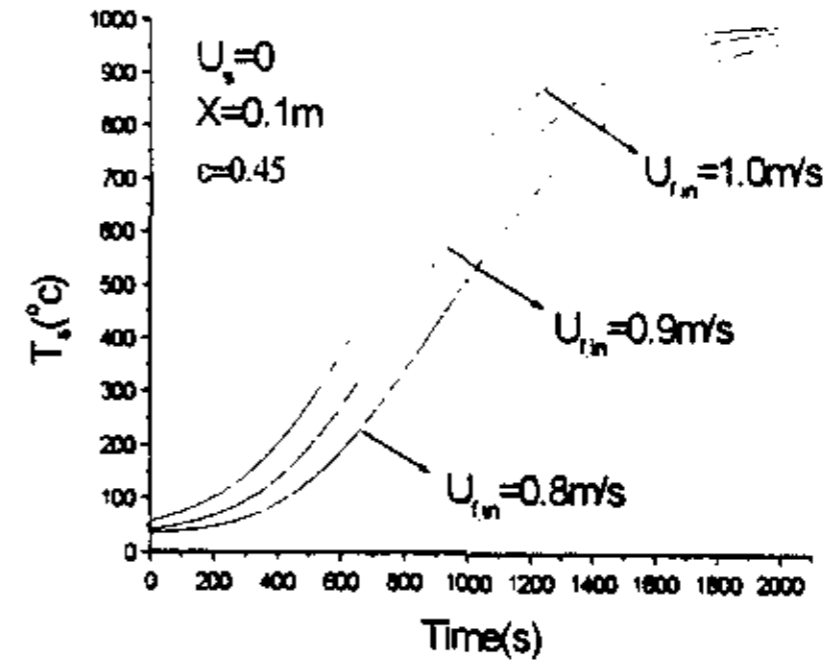


图 3-8 X=0.1 米处颗粒温度的时间响应  
figure 3-8 the time response of particle

图 3-8、3-9 分别是入口渗流速度对导管内物料层中的气固温度瞬态分布的影响。可见 3 分钟后在导管轴向  $x=100\text{mm}$  处颗粒温度才开始逐渐上升。入口渗流速度越大，管内某处温度随时间上升越快。这是因为在热量渗透区域，渗流速度越大，气体所带入的热量越多，气固热交换速率越大，因此温度随时间上升越快。大约 20 分钟以后，热量渗透过程由于导管的散热作用将达到稳定状态，气固温度分布将不在随时间变化，此时热渗透深度达到最大值。

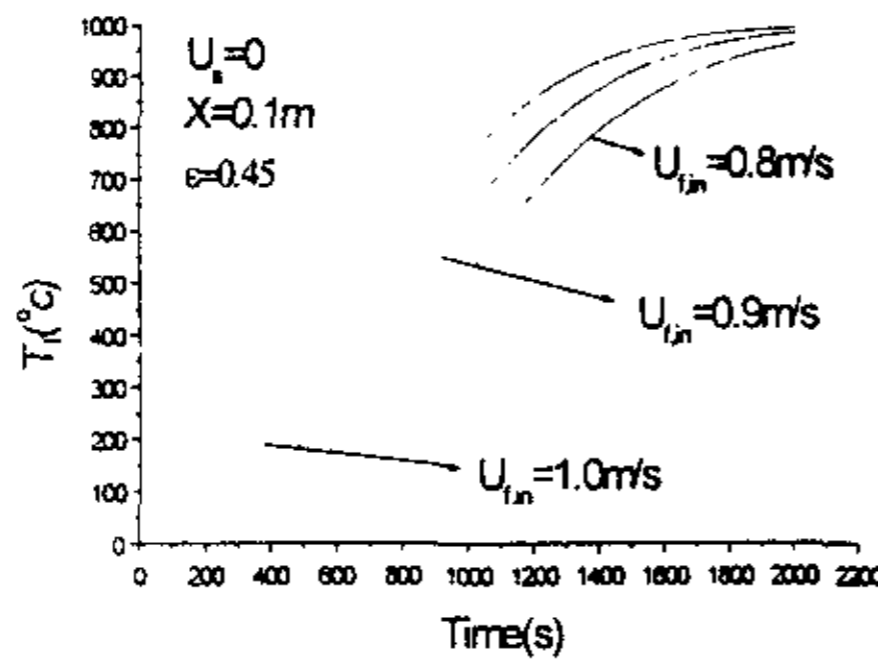


图 3-9 X=0.1 米处气体温度的时间响应  
figure 3-9 the time response of gas temperature

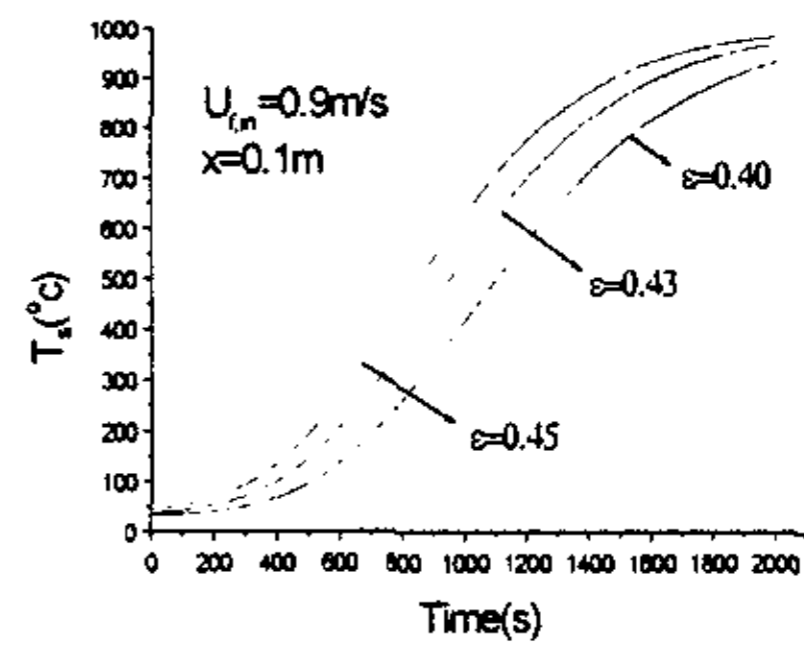


图 3-10 孔隙率对固体颗粒温度的影响  
figure 3-10 the particle temperature-time graph of deferent hole-rate

图 3-10 表示孔隙率对固体颗粒温度瞬态分布规律的影响，由图可见孔隙率对温度分布的影响很大。孔隙率越小，固体颗粒温度沿轴向随时间上升越慢；孔隙率越大，热渗透作用区域扩大。这是因为增大孔隙率导致气体渗透量增多，因而渗透热量增多，使得热渗透深度及其温度水平增加。

图 3-11 表示孔隙率对渗流气体的轴向速度变化规律的影响。可见在一定距离以后轴向渗流速度不再下降。孔隙率越小，渗流速度沿导管下降越快。图 3-12 是导管

内气体渗流速度的瞬态变化规律。可见沿导管方向气体渗流速度随时间逐渐增大，在一定时间后将达到稳定值。这是由于受到温度分布场的影响的缘故。在热渗透区，温度随时间逐渐上升最终将达到稳定分布。可见热效应对速度场及其渗透作用有着重要影响。

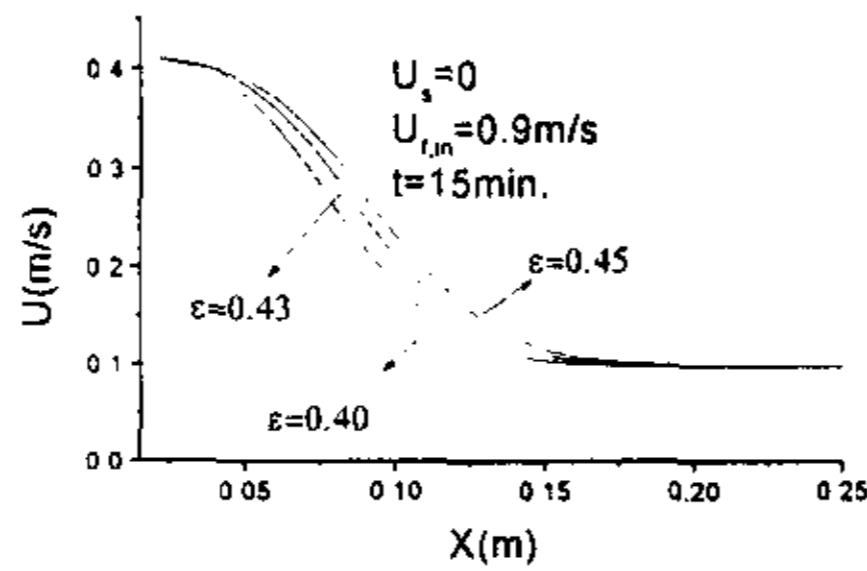


图 3-11 孔隙率对速度渗透程度的影响  
figure 3-11 the liquid velocity-time graph of  
deferent hole rate

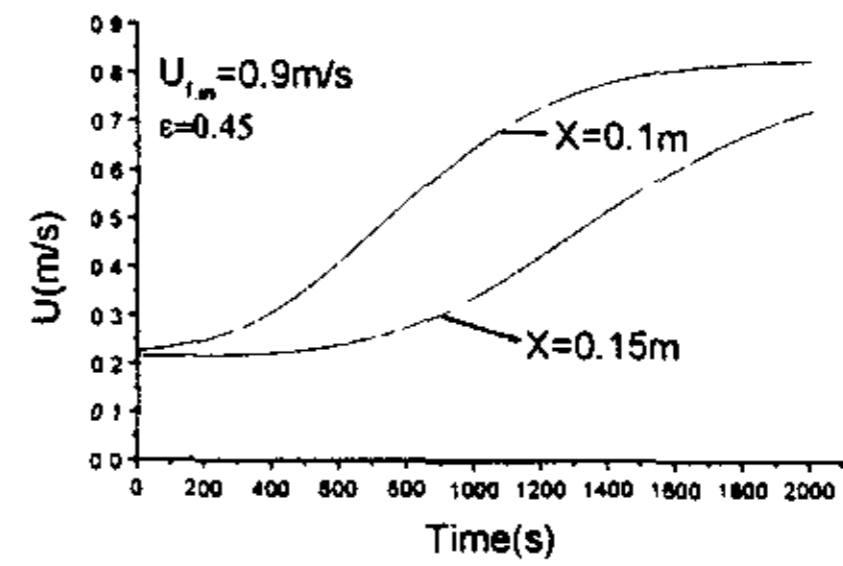


图 3-12 不同截面上流体速度时间响应  
figure 3-12 the time response of gas velocity at  
deferent cross

### § 3.3 垂直移动颗粒床中的渗流传热

上一节我们研究了高温气体在水平导管中的瞬态传热现象，接下来我们针对工程上应用较多的垂直移动颗粒床的气体渗流传递进行数值模拟。

#### 1、物理数学模型

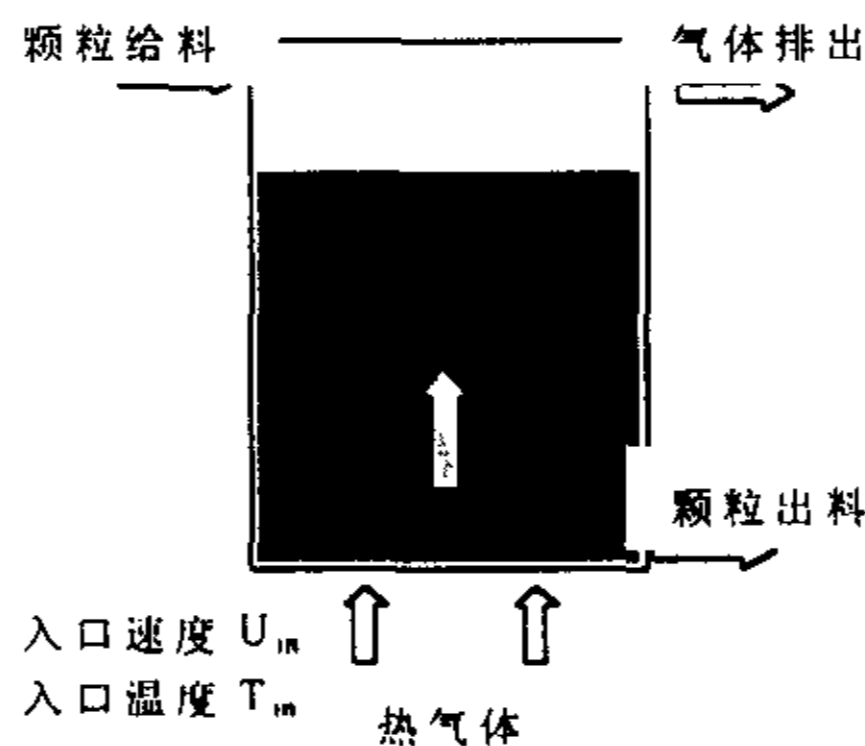


图 3-13 颗粒移动床工艺流程图  
figure 3-13 flow graph of particle locomotive bed

如图 3-13 所示，设立式移动床高度为  $H$ ，床层横切面为圆柱型，半径为  $R$ ，颗粒固体自移动床上端入口以给料速率  $B$  ( $\text{kg}/\text{H}$ ) 进入床内，逆床高  $x$  轴方向移动，



并在移动床下部排出物料，颗粒移动床处于稳定操作运行状态。颗粒物料在床内的下移速度为  $U_s$ 。热气体以看空床入口速度  $U_m$ 、入口温度  $T_m$  渗入床内填充颗粒物料中，并从移动床上端出口排出。

多孔介质模型假设与 § 3.2 节水平导管中多孔介质相同，则基于 Darcy-Brinkman-Forchheimer 模型的稳态控制方程为：

1、连续方程：

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho_f u_f)}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial(\varepsilon\rho_f v_f)}{\partial r} = 0 \quad (3.3-1)$$

2、轴向动量方程：

$$\frac{\partial(\rho_f \varepsilon u_f^2)}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r\rho_f \varepsilon u_f v_f)}{\partial r} = -\frac{\partial(\varepsilon p')}{\partial x} - \frac{\mu \varepsilon^2}{k} (u_f + u_s) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r\mu \frac{\partial u_f}{\partial r} \right) + \varepsilon g \rho_f \beta (T_f - T_0) \quad (3.3-2)$$

3、径向动量方程：

$$\frac{\partial(\rho_f \varepsilon u_f v_f)}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r\rho_f \varepsilon v_f^2)}{\partial r} = -\frac{\partial(\varepsilon p')}{\partial r} - \frac{\mu \varepsilon^2}{k} v_f + \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial v_f}{\partial x} \right) \quad (3.3-3)$$

4、气体能量方程：

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho_f \varepsilon c_{pf} u_f T_f)}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r\rho_f \varepsilon c_{pf} v_f T_f)}{\partial r} &= \frac{\partial}{\partial x} \left( \varepsilon (\lambda_d + \lambda_f) \frac{\partial T_f}{\partial x} \right) + \\ &\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r (\lambda_d + \lambda_f) \varepsilon \frac{\partial T_f}{\partial r} \right) + \alpha_v (T_s - T_f) \end{aligned} \quad (3.3-4)$$

5、固体颗粒能量方程：

$$\frac{\partial(-u_s \rho_s c_{ps} (1-\varepsilon) T_s)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \lambda_s (1-\varepsilon) \frac{\partial T_s}{\partial x} \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \lambda_s (1-\varepsilon) \frac{\partial T_s}{\partial r} \right] + \alpha_v (T_f - T_s) \quad (3.3-5)$$

方程(3-8)~(3-12)中个参数意义以及边界条件同 § 3.2 节，另外在轴向动量方程中增加了自然对流项： $\varepsilon g \rho_f \beta (T_f - T_0)$ ，其中为  $\beta$  气体膨胀系数，对理想气体有， $\beta = 1/T_0$ 。方程的边界条件与 § 3.2 节水平导管模型相同。

## 2、数值计算方法

物理模型为轴对称形，可以只研究左半部分。设垂直方向为 X 轴，从中心线起沿半径方向为 R 轴，将研究对象划分为  $100 \times 40$  的网格。壁面处为第三类边界条件，仍用附加源项法处理。则在轴向动量方程中有源项：

$$S = S_c + S_p \Phi_p = -\frac{\mu \varepsilon}{k} (u_f + u_s) + \rho_f g \varepsilon \left( 1 - \frac{T_0}{T_f} \right) \quad (3.3-6)$$

$$S_c = \frac{\mu \varepsilon}{k} (u_j^* - u_j) + \rho_f g \varepsilon \left( 1 - \frac{T_0}{T_f} \right), S_p = -2 \frac{\mu \varepsilon}{k} \quad (3.3-6)$$

其它方程的源项处理同 § 3.2 节水平导管的数学模型。

方程的收敛条件为以下三个条件同时成立：

$$\frac{|\sum T_s^0 - \sum T_s|}{\sum T_s} < 10^{-3}, \frac{|\sum T_f^0 - \sum T_f|}{\sum T_f} < 10^{-3}, \frac{|\sum u_j^0 - \sum u_j|}{\sum u_j} < 10^{-3} \quad (3.3-7)$$

其中上标 0 表示上一次迭代值。在实际程序编写过程中没有对所有节点值都进行求和，而是取具有代表性 200 个节点。另外，为防止程序发散，在离散方程加入了拟非稳态项。因为稳态问题的迭代求解方法与非稳态问题的步进法十分相似。对于非线性稳态问题，从代数方程的一组系数进入到另一组系数也好像非稳态问题进了一个时层。由非稳态问题的物理特性知道，如果系统的热惯性越大，则温度变化越慢。类似的为减少稳态非线性问题两个层次间变量的变化，可在离散方程中加入拟非稳态项，即把  $\phi_p$  的迭代公式写成为：

$$\phi_p^{(n)} = \frac{\sum a_{nb} \phi_{nb} + b + a_p^0 \phi_p^{(n-1)}}{\sum a_{nb} - S_p \Delta V + a_p^0} \quad (3.3-8)$$

这里在分子分母中加入的拟非稳态项  $a_p^0 T_p^{(n-1)}$  及  $a_p^0$  起到了增加系统热惯性的作用，其中  $a_p^0 = \rho \Delta V / \Delta t$ ，在实际计算中，我们取拟时间步长  $\Delta t = 5$ 。

设置最大迭代次数 10000 次，当迭代 10000 次方计算仍不收敛，则终止程序。在计算过程中可以看到，在迭代 3000~3500 次后方程就可以达到收敛条件。

### 3、结果与分析

我们研究了各种因素对渗流传热的影响，通过改变孔隙率、颗粒移动速度、以及入口渗流速度来考察高温热气对移动床内颗粒物料中的气固温度分布、渗流速度分布、气压损失大小以及热渗透作用深度。

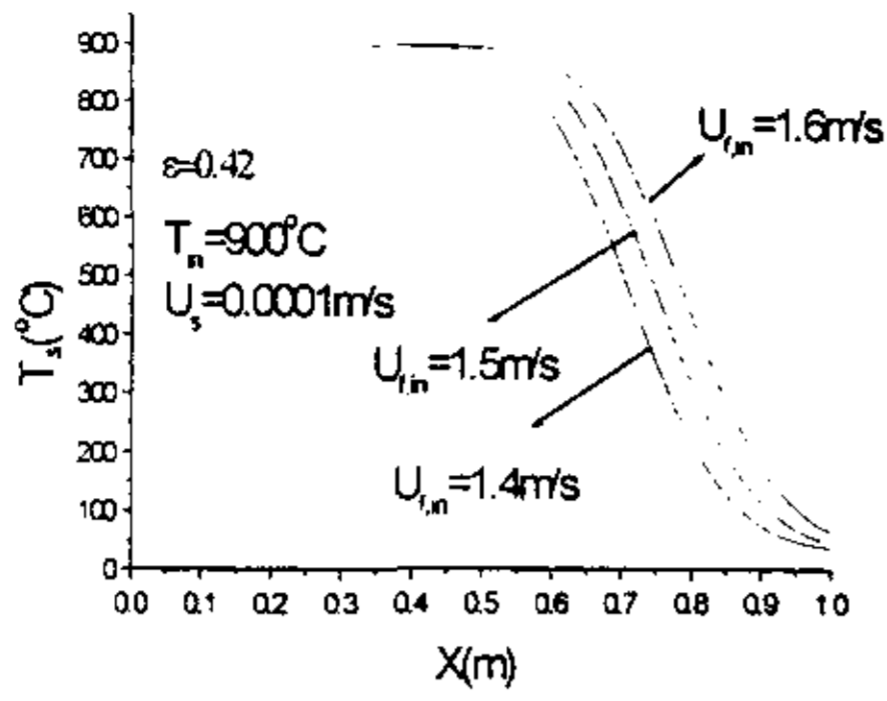


图 3-14 (a) 固体颗粒温度沿轴向分布  
figure 3-14 (a) Temperature-X graph of particle at different gas velocity

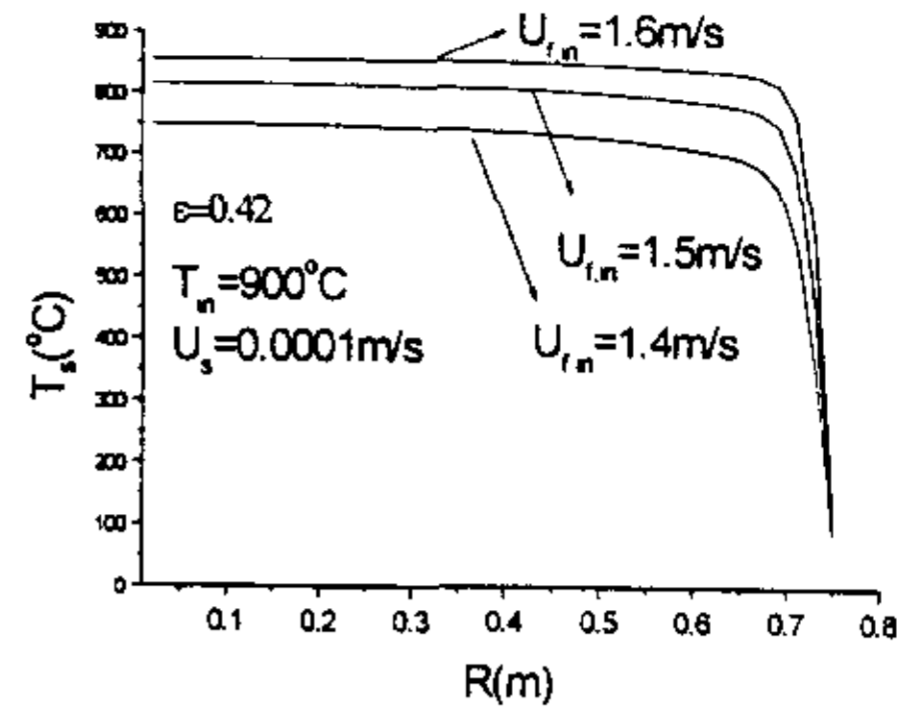


图 3-14 (b) 固体颗粒温度沿径向分布  
figure. 3-14 (b) Temperature-R graph of particle at X=0.6 cross of different gas velocity

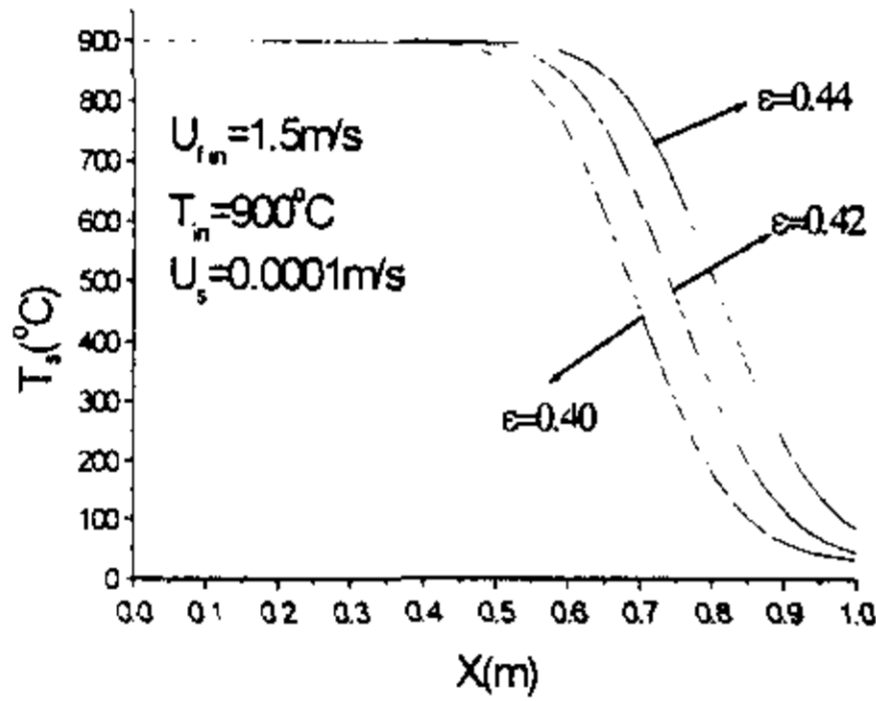


图 3-15 (a) 孔隙率不同时的固体颗粒温度  
figure 3-15 (a) Temperature-X graph of particle at different hole rate

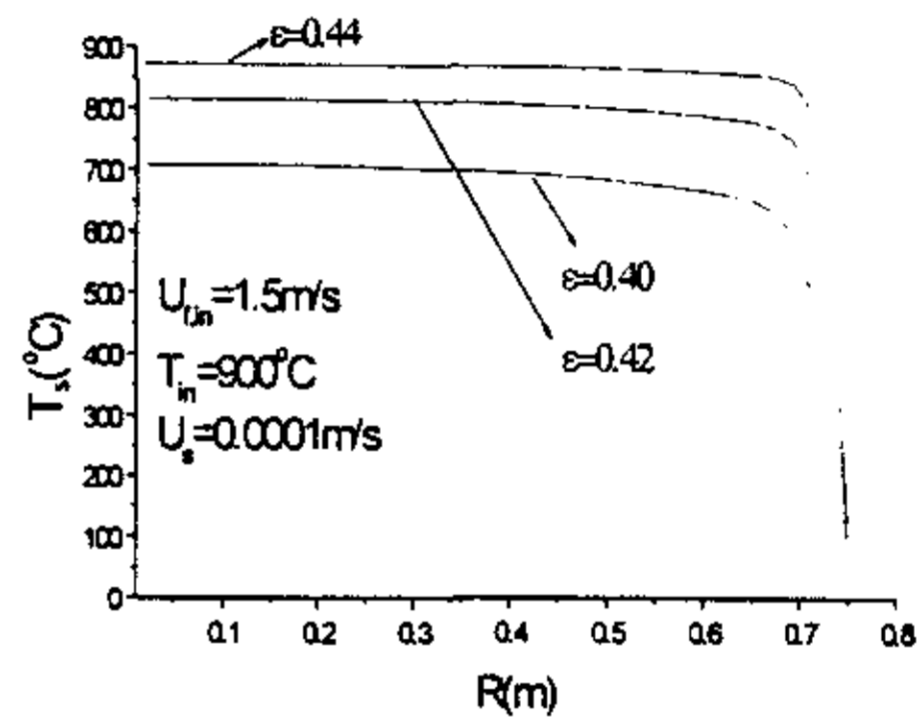


图 3-15 (b) 不同孔隙率时 X=0.6 米截面固体颗粒温度  
figure 3-15 (b) Temperature-R graph of particle at X=0.6m cross at different hole rate

图 3-14 表示不同的气体进口速度对固体颗粒温度沿轴向及径向分布的影响。由图可见：高温气体进口速度对温度渗透深度的影响是很大的。固体温度在渗流入口端既床层下部有一小段较高稳定分布区域，然后温度沿床高缓慢下降到常温。对于计算工况，从床层底部气体渗流入口处到床高约 200~400mm 处区域，颗粒固体温度维持较高温度水平，可见高温气体对床内移动颗粒料层的热渗透作用主要是在渗流入口端区域。入口渗流速度越小，温度沿床高下降越快，热渗透深度越短。另外，在整个横截面上，固体颗粒温度基本不变，只是在靠近壁面处由于移动床外壁散热以及壁面处流体边界层速度下降而导致温度急剧下降。

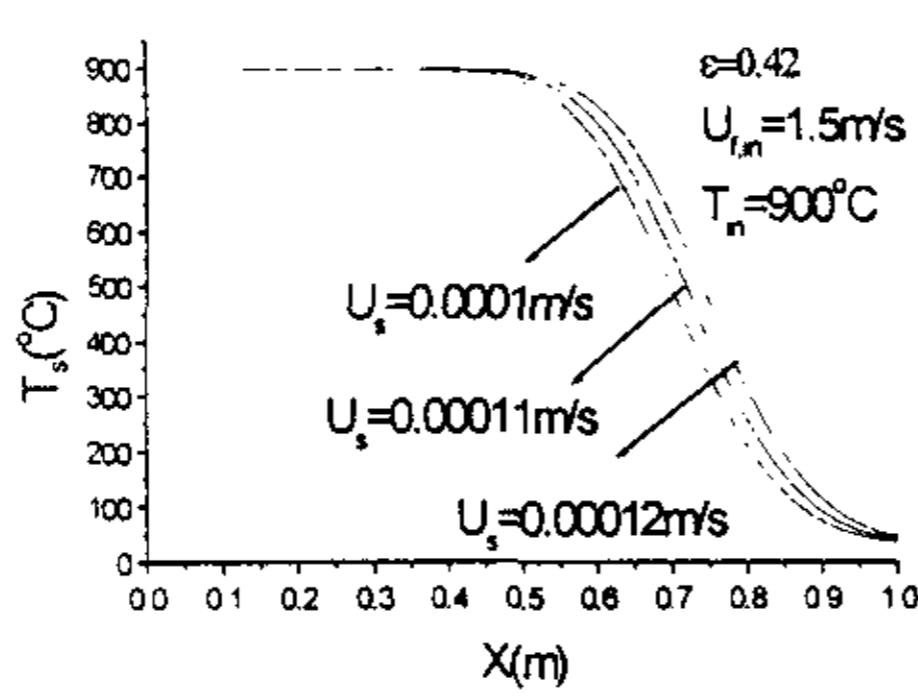


图 3-16 (a) 移动速度不同时的颗粒温度轴向分布  
figure 3-16 (a) Temperature-X graph of particle at different hole rate

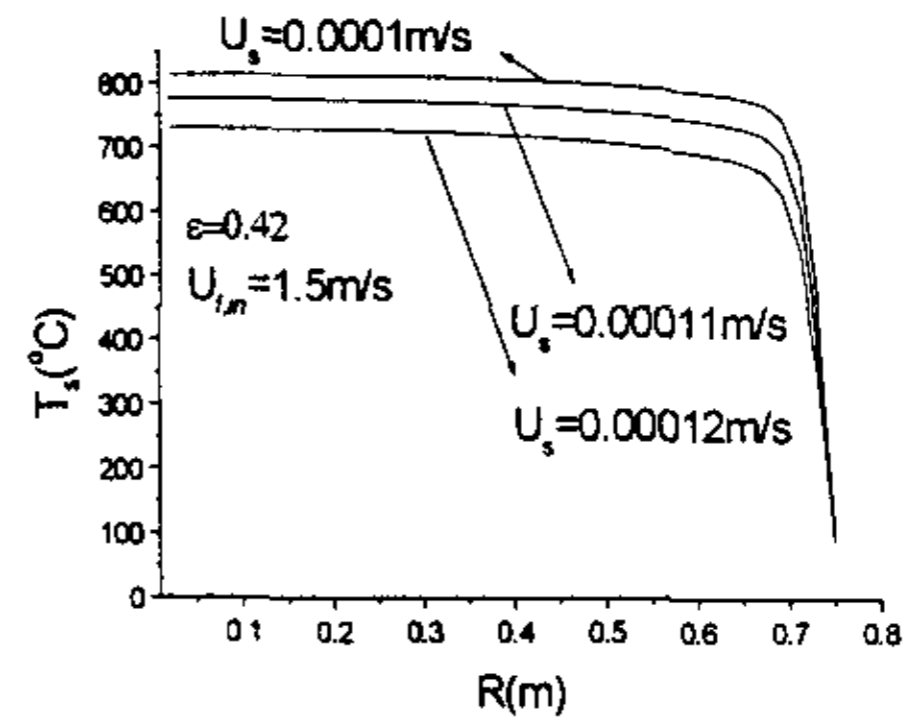


图 3-16 (b) 移动速度不同同时颗粒温度径向分布  
figure 3-16(b) Temperature-R graph of particle in X=0.6m cross at different speed

图 3-15 表示孔隙率对温度渗透程度的影响，由图可见孔隙率对温度分布的影响很大。孔隙率越小，固体颗粒温度沿轴向下下降越快；孔隙率越大，热渗透作用区域扩大。这是因为增大孔隙率导致气体渗透量增多，因而渗透热量增多，使得热渗透深度及其温度水平增加。可见在实际应用中，对于床内颗粒填充紧密的物料，要维持相应的热量渗透区域，必须增大热气渗流速度。

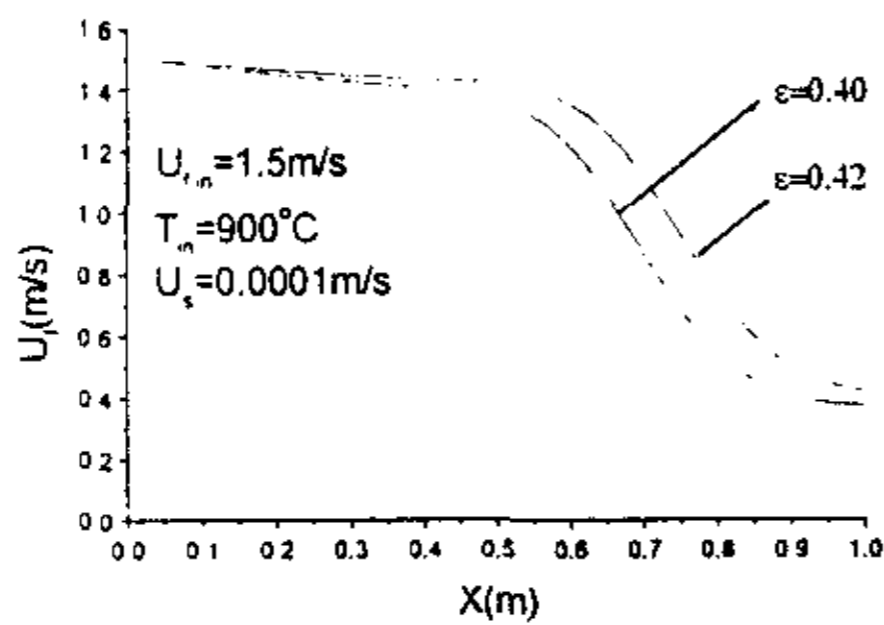


图 3-17 不同孔隙率对速度影响  
figure 3-17  $U_f$ -X graph at different porous rate

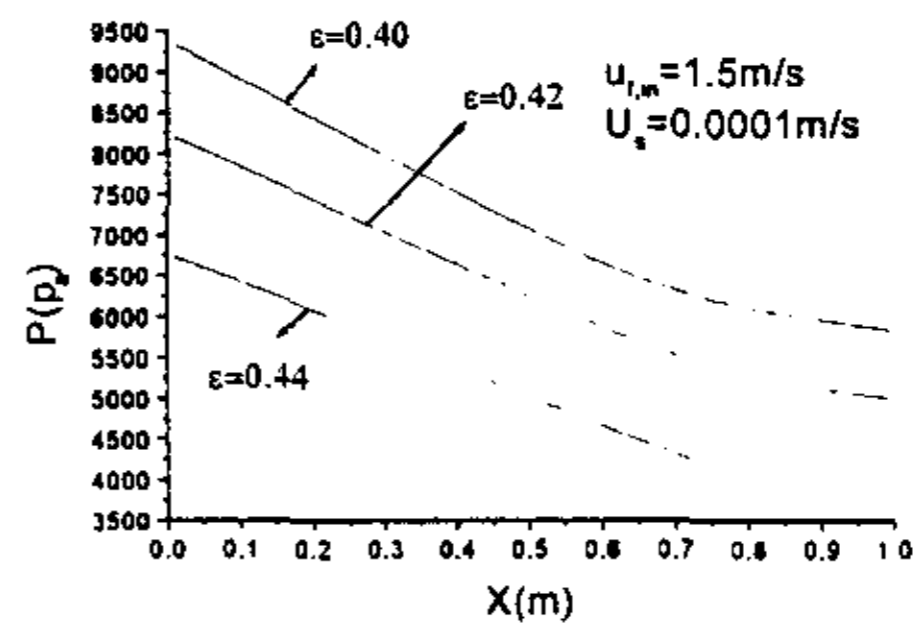


图 3-18 不同孔隙率时的压力降  
figure 3-18 P-X graph at different porous rate

在稳定工况下，移动床给料速率越大，床层物料下移速度则越大。图 3-16 是移动床给料速率即床层物料下移速度对床内颗粒固体温度分布的影响，可见热渗透深度以及热渗透区域内的温度水平对于物料移动速度十分敏感。这是因为颗粒下移速度越大，物料从出料口所带走的热量越多，高温渗流气体用于提升颗粒温度的热量将减少，使得热渗透深度及其区域内物料温度大大减小。而对于低速给料工况，高温气体对移动床内颗粒物料的热渗透深度将大大增加，进入热渗透区域内的颗粒物料将获得较高温。因此，在移动床设计和实际工业运行中，可以通过床层几何尺

度, 以及调整给料量和高温热气渗流速度等有效措施, 使床内物料充分有效地维持在高温热作用区域, 以达到工业工艺过程的高效率。

图 3-17 表示中心轴线上气体渗流速度沿床高快速下降, 在床层一定高度范围以后渗流速度不再下降, 气体将以匀速渗流。孔隙率越小, 中心轴线上渗流速度沿床高下降越快。图 3-18 是气体沿床高的压力损失变化规律, 气体压力损失基本上以直线下降。孔隙率对气压损失的影响非常大, 孔隙率越小, 气压沿床高损失越快; 孔隙率越大, 气压损失曲线越平缓。因此, 为了减少床压阻力损失, 在移动床设计上, 可以采用大切面的床层设计结构, 在运行中可以维持较低的床内物料静止高度, 使其充分保持与热量渗透层相适应, 这样既可以获得较大的移动床物料加工容量, 又可以达到经济运行目标。

## 第四章 煤颗粒床中渗流传热传质数值模拟

上一章我们研究了惰性移动床中渗流传递现象，而工业生产中的多数移动床都存在化学反应以及质量传递。本章我们针对煤颗粒移动床进行数值模拟，目的是为煤炭燃烧前预处理探求一种工程上可行的方法。从第一章可以知道，煤的高温热解可以在很大程度上减少烟气中的  $\text{NO}_x$  和  $\text{SO}_x$  含量。所以我们考虑利用高温气体来对移动床中的煤层进行加热处理，从而达到减少燃烧后污染物的目的。首先我们需要研究煤的热解规律。

### § 4.1 煤的热解

煤受热升温将发生热解反应，其热解产物由焦油和气体挥发物以及半焦组成。通常把煤粒在加热条件下脱除的过程称为热解过程。煤的热解过程是煤的焦化、气化和燃烧等工艺中的基本步骤，它对于煤加工工艺操作、煤的燃烧与气化反应器的设计，对于锅炉改进和煤反应过程的数学模拟，特别是对很有发展前途的燃煤联合循环技术都是十分重要的，深入了解这一过程将有助于增进对煤的各种利用形式的理解，有助于发展更完善、更先进的煤燃烧技术及气化工艺。

如第一章所述，煤的热解析出过程受到许多因素的影响，它与煤的性质、颗粒尺寸、热解温度和压力等因素密切相关。因此，在实际的工业应用中，对于不同煤种和不同的反应器在不同的操作条件下，煤的热解反应所表现出的行为极为不同。许多试验表明，煤的升温热解的同时还将发生煤粒的膨胀、变形、爆裂以及粘结等现象。

#### § 4.1.1 煤的热解过程及机理分析

煤是一种非均质的有机燃料，从化学结构的角度上讲，煤是一种巨型分子构成的碳氢化合物，同时含有氧、少量的硫和氮，此外，还有其它微量元素。为阐明煤的结构人们曾作过很大努力，但由于煤种的多样性和煤本身的不均匀性以及单个煤组分的复杂性，这个工作异常困难。

煤在热解过程中，有机质随着温度的升高而发生一系列变化，形成气态（煤气）、液态（焦油）、固态（半焦或焦炭）产物。从宏观上讲，煤的热解过程根据加热温度不同而大致经历了以下 6 个阶段：

(1)  $20^\circ\text{C}$  以前放出外在水分和内在水分称为煤的干燥阶段；

(2)  $20-200^\circ\text{C}$  放出吸附在小孔中的气体，如  $\text{CO}_2$ 、 $\text{CO}$ 、 $\text{CH}_4$  等，称为脱吸阶

段:

(3) 200—300°C 放出热解水开始形成气态产物, 如  $\text{CO}_2$ 、 $\text{CO}$ 、 $\text{CH}_4$  等, 并且有微量焦油析出, 称为热解开始阶段;

(4) 300—500°C 大量析出焦油和气体, 几乎全部焦油均在此温度范围内析出。这一阶段放出的气体主要为甲烷及其同系物。此外, 还有不饱和烃  $\text{C}_n\text{H}_m$ 、 $\text{H}_2$  及  $\text{CO}_2$ 、 $\text{CO}$  等为热解的一次气体。粘结型的烟煤在这一阶段则经胶质状态转变成半焦 (煤经胶质状态转变成半焦的性质称为粘结性), 称为胶质体的固化阶段;

(5) 500—750°C 半焦热解, 析出大量含氢气体, 基本上不产生焦油, 析出的气体称为二次热解气体。并且半焦收缩产生裂纹, 称为半焦收缩阶段;

(6) 750—1000°C 左右, 半焦进一步分解, 继续形成少量的气体 (主要是  $\text{H}_2$ ), 半焦变成高温焦炭, 称为半焦转变成焦炭阶段。

由上可见, 煤的热分解过程是一个连续的分阶段过程, 每一个后续阶段必须经历前面的所有阶段。

对热解反应的微观解释众说纷纭, 有许多的解释模型直到现在为止, 还没有统一的定论。但其中不乏有较严密、完整的模型。Solomon 等人<sup>[81]</sup>提出了一个较为严密、完整的模型。他们认为从微观上说, 煤的热解是一个非常复杂的反应过程, 包括裂解和缩聚两大类反应。煤是由一些官能团结合形成紧紧相连的芳香环族, 芳香环又由较弱的脂肪族及醚键相联。煤热解时, 由于弱键的断裂, 通过解聚作用是煤分子释放出大碎片分子 (焦油), 而焦油分子含有一系列原官能团中有代表性的官能团, 焦油的组成与原煤的元素及其相似。在半焦析出的同时, 小分子量的气体产物也由于各官能团的热解而释放出来。轻的碳氢化合物及其它轻组分和焦油争夺共用氢 (芳香族氢和脂肪族氢), 以使自由基稳定化。当共用氢消耗完毕, 焦油和轻的碳氢化合物也就停止释放。Solomon 通过大量的试验提出可热解挥发的官能团在不同的母煤体内具有相同的析出特性, 但各种煤的官能团组成是因煤种而异的。

伴随热解过程析出的一些气体组分显然与相应的煤分子中的各官能团有很大关系。在焦油分子释出的同时, 各裂解相联的官能团、环链竞相分裂, 形成小分子量的气体产物。某给定的组分, 如甲基官能团, 在本身键不断裂的情况下, 可作为焦油的一部分释放出来。或者本身键断裂, 加氢后生成甲烷。甲烷释放的一个重要机理是替代反应, 其中一个自由基 (如焦油分子) 替代了甲基官能团, 作为一个自由基释放出来。另外其他煤气成分与释放出的小分子气体之间有如下关系: 在低温度下, 芳香环重组的可能性很小, 但是替代官能团及脂肪族氢 (或芳香族氢) 结构的

分解导致了从羧基中释放出  $\text{CO}_2$ ，羟基中释放出  $\text{H}_2\text{O}$ ，脂肪族中释放出碳氢化合物，硫醇中释放出  $\text{H}_2\text{S}$ ，从弱连接的醚官能团中释放出  $\text{CO}$ 。在较高的温度下，有芳香环的断裂和重组，在这一过程中，芳香族氢中释放出  $\text{H}_2$ ，苯酚中释放出  $\text{CS}_2$ ，环氮中释放出  $\text{HCN}$ ，还能从紧连接的醚官能团中释放出  $\text{CO}$ 。这一过程进一步继续下去，焦炭则更加石墨化。

Solomon 总结了他的热解模型，将之分成九大步骤：

- 1、 氢键的断裂；
- 2、 以共价键联结的分子相的蒸发与逃逸；
- 3、 低温交联；
- 4、 煤大分子结构体裂解成碎片分子；
- 5、 共用氢的使用以稳定自由基；
- 6、 轻的碎片分子的蒸发和气体析出；
- 7、 中温交联固化大分子结构体；
- 8、 官能团分解产生小分子量的气体产物；
- 9、 由于共用氢耗尽大分子结构体发生高温缩聚。

无论从宏观还是微观上来说，热解的最终产物中有如  $\text{CO}_2$ ， $\text{H}_2\text{O}$ ， $\text{C}_2\text{H}_6$ 、 $\text{CH}_4$ 、 $\text{C}_2\text{H}_2$ 、 $\text{C}_6\text{H}_6$  及含有 S、N 的气体，还有半焦及焦油，所有的这些热解产物都是由热解过程及热解条件决定的，如于煤的性质、颗粒尺寸、热解温度、压力、热解加热过程等密切相关。因而这些产物的成分不是可以用确定的数值加以概括的，但它们的变化符合一定的规律。

#### § 4.1.2 煤热解挥发份析出模型的研究进展

研究煤热解挥发物析出的模型主要分为两大类，一类是化学反应动力学模型，另一类是着重考虑热质传递的热解模型。

##### 一、化学反应动力学模型

第一类化学动力学热解模型不考虑热解的传递过程，基本上为纯动力学模型，该类模型中最简单的就是单方程模型，认为挥发份析出是独立的一级反应过程，反应速率与煤中剩下的挥发份的量成正比：

$$\frac{dV}{dt} = k(V_\infty - V) \quad (4.1-1)$$

其中  $k$  为热解速率常数，通常以 Arrhenius 形式表达，

$$k = k_0 \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (4.1-2)$$

单一反应模型过于简单，不适用于非等温热解过程。1962 年 Pitt<sup>[82]</sup> 认识到单方程



模型的缺点而提出了平行而独立的多反应热解模型。即认为煤热解是由许多虚构的成分组成，它们各自以独立的一级反应进行热解，每个反应具有相同的频率因子和不同的活化能。1975年 Anthony<sup>[83]</sup>等人对该模型进行了改进，认为活化能分布遵从高斯分布形式，其结果为：

$$\frac{V_{\infty} - V}{V_{\infty}} = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_0^t \exp\left(-\int_0^t k dt\right) f(E) dE \quad (4.1-3)$$

其中：

$$f(E) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(E - E_0)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (4.1-4)$$

该模型需要对特定煤种确定  $V_{\infty}$ 、 $k$ 、 $E_0$  和  $\sigma$  等参数，因而其应用受到限制。

与此同时，Kobayashi 等人<sup>[84]</sup>提出了双竞争反应模型，就煤的热解挥发份以两个互相竞争的平行反应来控制，一个在低温下起主导作用，而另一个在高温下起主导作用，因而可用于非等温过程。该模型与 Pitt 和 Anthony 的模型问题相同，即动力学参数对煤中来讲不同用。为了使热解动力学模型具有通用性，Solomon 及其合作者发展了官能团热解模型，即认为产生的挥发份所对应的各官能团，其热解反应速度常数仅依赖于官能团本身而与煤中无关。但 Solomon 的官能团模型需要确定许多模型参数，同时该模型也并未能解决热解模型的通用性问题。基于此，国内学者傅维标等人提出了实用的煤粒热解通用模型<sup>[85]</sup>，其主要思想是挥发份析出的反应动力学参数  $E$  和  $K$  不随煤种变化，仅是煤粒终温  $T_{\infty}$  及加热速率的函数，而煤粒的最终产量  $V_{\infty}$  与煤种、颗粒尺寸和加热条件有关，并拟合出  $E$ （或  $K$ ）与  $T_{\infty}$  之间的通用关系。傅维标采用将物理因素和化学反应因素对热解过程的影响分开处理的做法无疑使模型简化实用，但难以确切地描述实际的热解过程。

研究热解析出规律的第二类热解模型则考虑了热解传热传质过程对热解挥发物析出的影响，因而模型更为真实，适合于大颗粒热解。

## 二、热质传递因素控制的热力学模型

煤的热解过程与煤的热塑性直接相关。热塑性就是当煤在一定温度范围内加热或加热到软化点以上并保持一定时间后发生软化、变形、最后固化成半焦。塑性煤（也称粘结煤），在塑性状态下，颗粒为粘稠状液体物质，可聚结、固化后形成块状物，而另一类煤则不具有上述特点，因而称为非塑性煤。

塑性煤热解时挥发物在颗粒内部的传递模式与非塑性煤存在明显的差异。目前研究热质传递因素控制的热解模型分为两大方向：一类是以塑性煤为对象的热解模型，

另一类是非塑性煤的热解模型。

### 1、塑性煤的传递热解模型

塑性煤热解时所发生的最明显的宏观变化是在液状物中气泡的形式和流动，因而气泡的成长和逸出构成塑性煤挥发物传递的一个重要模式在塑性化过程中形成的不能穿透的孔结构使流体扩散流动受阻，颗粒内部将形成高压气体区，在克服粘液和其它历时膨胀而产生气泡，最后以细小射流形式冲出颗粒表面。

Lewellen<sup>[86]</sup>对塑性煤挥发物的析出提出了气泡传递的半经验统计模型。该模型描述了在粘滞力、压力及表面张力作用下，充满挥发物的气泡经历成核、生长、聚结和逸出过程，由于挥发物的形成以及伴随在气泡表面二次反应产生的物质聚集、使物质加入气泡和从气泡消失。此模型的一个重要特点是假设分解物的粘度是与其中所含塑性物的浓度成反比，塑性物由热解产生并进入挥发相（气泡）中其速率是传质控制的。

Oh 等人<sup>[87][88][89]</sup>对塑性煤热解传质模型的主要贡献是研究了挥发物气体与焦油的不同传质方式，同时考虑了内部与膜传质阻力，该模型仅用于小颗粒热解。Oh<sup>[90]</sup>等人后来对模型进行了改进，使得模型包括了颗粒内部化学反应和挥发物传质以及煤热解期间发生的塑性化和膨胀等结构变化。改进后的模型可以同时预测压力、颗粒直径和温度对焦油产率以及煤失重的影响、模型还研究了压力对颗粒膨胀率以及加热速率对塑性化的影响，以下对 Oh 模型进行简单介绍。

#### • 模型假设

颗粒煤为等温球形，颗粒内部空间气泡均匀分布。煤初次分解产生挥发物气体，半焦以及中间塑性物中间塑性物进一步分解和解聚形成更稳定的芳香族的产物以及轻气体。

颗粒内部挥发物传质假设是通过煤质体扩散和气泡的膨胀进行的，膨胀的气泡表面一旦接触到颗粒表面，气泡则破裂并释放出挥发物，气泡由于颗粒内部各种力的作用不产生运动，但气泡在颗粒边界的破裂形成一种净传质。

#### • 化学反应动力学

煤初次热解形成的气体（1）和中间塑性物遵从一级反应方程：

$$\frac{dV_1}{dt} = k_1(V_1^* - V_1) \quad (4.1-5)$$

中间塑性物二次裂解形成气体（2），其生成速率为：

$$\frac{dV_{s,2}}{dt} = f_{s,2} k_{2,m} C_m \quad (4.1-6)$$

气泡中焦油裂解产生气体 (3), 其生成速率为:

$$\frac{dV_g}{dt} = f_{g,3} k_{3,m} B_m \quad (4.1-7)$$

其中  $C_m$ ,  $B_m$  分别为媒质体内塑形物浓度以及气泡中焦油浓度。

#### • 气泡的增长、汇聚、及其平衡方程

气泡通过以下机理增长:

- (1) 气体分子在液状煤质体中的扩散;
- (2) 气泡内及其边界上包括二次反应在内的化学反应;
- (3) 内外压形成的机械力;
- (4) 与相邻气泡表面接触而汇聚。

描述气泡增长、汇聚的平衡方程如下:

$$\frac{dn_j}{dt} = k_{j-1} n_{j-1} n_j - k_j n_j n_j + \frac{1}{2} \sum_{i=2}^{j-2} P_{i,j-1} n_i n_{j-1} - \sum_{i=2}^N P_{i,j} n_i n_j - E_{bj} n_j \quad (4.1-8)$$

Oh 将气泡进行分类, 气泡中含质  $j$  摩尔数的归为一类, 其数量为  $n_j$ 。上述方程中前两项是由于物质扩散引起气泡的增长和收缩因而使气泡数量  $n_j$  发生变化; 第 3、4 项表示由于气泡汇聚而发生的气泡数量的变化; 最后一项是气泡在颗粒表面破裂使气泡数量减少。其中挥发物通过煤质体扩散进入气泡或逸出气泡的量为:

$$k_j n_j = \rho_0 4\pi a_j D_{v,l} Sh(n_j - n_{eq}) \quad (4.1-9)$$

$k_j$  为  $j$  类气泡的增长率,  $a_j$  为  $j$  类气泡的半径,  $D_{v,l}$  为挥发物在塑性体内的扩散系数,  $\rho_0$  为煤的质量密度。

气泡的膨胀速率为:

$$\frac{da}{dt} = \frac{a}{4\mu} \left( p_b - p - \frac{2\sigma}{a} \right) \quad (4.1-10)$$

其中  $a$  为气泡的半径,  $p_b$  为气泡的内压力,  $p$  为环境压力,  $\sigma$  为表面张力,  $\mu$  为粘性系数。

气泡间相互汇聚的速率  $p_{i,j}$  为:

$$p_{i,j} = \rho_0 4\pi (a_i + a_j)^2 \left( \bar{a}_i + \bar{a}_j \right) \quad (4.1-11)$$

气泡在颗粒表面破裂的速率为:

$$\rho_0 4\pi(r_p - a)^2 a_j n_j \quad (4.1-12)$$

其中  $r_p$  为颗粒半径。则单位质量原煤中  $j$  类气泡的逃逸速率系数  $E_{bj}$  为:

$$E_{bj} = \frac{4\pi(r_p - a) da}{\frac{4\pi}{3} r_p^3} \quad (4.1-13)$$

#### • 挥发物的析出量计算

挥发物气体至  $t$  时刻累积产量为:

$$\int_0^t (E_g C_g + \sum_{j=2}^N B_{gj} E_{bj} n_j) dt \quad (4.1-14)$$

焦油至  $t$  时刻累积产量为:

$$\int_0^t (\sum_{i=1}^{N_{tar}} E_{mj} C_{mj} + \sum_{j=2}^N \sum_{i=1}^{N_{tar}} B_{mj} E_{bj} n_{bj}) dt \quad (4.1-15)$$

其中  $E_g$  为通过扩散方式挥发物气体传质至颗粒表面的速率系数, Oh 通过拟稳态假设曾获得了确定  $E_g$  的公式。  $B_{gj}$  为气泡中的气体质量,  $E_{bj} (B_{gj} n_j)$  表示气泡在颗粒表面破裂而逸出的质量份额。

煤质体中挥发物气体及中间塑性物的浓度  $C_g$ 、 $C_{mj}$  分别通过质量平衡方程来求得。挥发物气体的质量平衡方程为:

$$\frac{dC_g}{dt} = k_{1,g} (V_{g,l}^* - V_{g,l}) + f_{g,2} k_{2,m} \sum_{i=1}^{N_{tar}} C_{mj} - \sum_{j=2}^N k_{j,g} n_{1,g} n_j - E_g C_g \quad (4.1-16)$$

中间塑性物的质量平衡方程:

$$\frac{dC_{m,i}}{dt} = k_{1,m} (V_{m,l}^* - V_{m,l}) - k_{1,g} (V_{g,l}^* - V_{g,l}) - k_{2,m} C_{m,j} - \sum_{j=2}^N k_{j,m} n_{1,m} n_j - E_{m,i} C_{m,i} \quad (4.1-17)$$

Oh 等人将模型计算与实验结果进行了对比, 预测的结果一般地与实验结果符合得很好, 但从 Oh 的, 模型假设中不难看出该模型还存在一些问题。

## 2、非塑性煤的热解传质模型

非塑性煤的最重要的特征就是热解期间孔洞结构相对平衡, 热解在颗粒内部将形成高压气体区, 但由于煤非塑性不能流动, 因而不会使最初形成的气孔膨胀。孔

洞结构是由属于宏观孔的孔洞大小分布来描述的。可以料想颗粒内压力将上升直至流体的流动速度与挥发份产生的速度相匹配，或颗粒爆裂时为止。非塑性煤热解产生的颗粒爆裂现象同样是可以观察到的，特别是有的褐煤被加热时会爆裂。

对于非粘性煤的热解模型，一旦建立了空洞大小分布一般是用通量表达式来描述各种组份扩散和对流，对于任一组份  $I$ ，总通量  $N_i$  表示如下：

$$N_i = N_i^{(v)} + N_i^{(D)} + N_i^0 \quad (4.1-18)$$

$N_i^{(v)}$  和  $N_i^{(D)}$  分别表示粘性和扩散通量， $N_i^{(D)}$  是由于热扩散引起的，一般来说相对较小因而不计。

粘性通量  $N_i^{(v)}$  由下式求得：

$$\sum_{i=1}^n M_i^{1,2} N_i^{(v)} = -\frac{B_0 p}{\mu RT} \sum_{i=1}^n M_i^{1,2} x_i \frac{dp}{dt} \quad (4.1-19)$$

$B_0$  为达西常数， $M_i$  为  $I$  组份的分子量， $\mu$  是粘度。扩散通量满足广义的 Stefan-Maxwell 方程：

$$-p \frac{dx_i}{dt} = \sum_{j=1}^n \frac{x_i N_j - x_j N_i}{D_{e,ji}} + \frac{N_i^{(D)}}{D_{e,ji}} - \frac{x_i}{R_T} \left[ 1 - \frac{1}{\sum_{i=1}^n x_i \left( \frac{M_j}{M_i} \right)^{1/2}} \right] \frac{dp}{dr} \quad (4.1-20)$$

Fend 和 Stewart<sup>[91]</sup> 做了一个假设：所有的组分都具有相同的摩尔重量，因而上述方程简化如下：

$$N_i^{(v)} = -\frac{B_0 p x_i}{\mu RT} \frac{dp}{dr} = -C \frac{B_0}{i \mu} \frac{dp}{dr} \quad (4.1-21)$$

$$-\frac{p}{RT} \frac{dx_i}{dr} = \sum_{j=1}^n \frac{x_i N_j^{(D)} - x_j N_i^{(D)}}{D_{e,ji}} + \frac{N_i^{(D)}}{D_{e,ki}} \quad (4.1-22)$$

在确定了通量方程后，颗粒内部热解传质过程就可以用以下方程来描述：

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{p x_i}{RT} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 N_i) = R_i \quad (4.1-23)$$

Gavalas 和 Wilks<sup>[92]</sup> 在上述的基础上将模型扩展到三组份，即研究气体、焦油和惰性物的传质过程，结合一个简单的孔隙结构模型就可求解气体和焦油在颗粒内的浓度分布。模型的等温假设意味着挥发份的产生在颗粒内是均匀的传质的特征时间大大小于热解时间，因而模型只涉及到稳态传热。

Russel<sup>[93]</sup>等人则研究过四组分系统即：活性与非活性挥发物，以及焦油和惰性气体，模型同样做了等温假设，而且进一步假定整体流动大于扩散传质，因而获得了方程的分析解。上述方程对于大颗粒情形则非常复杂，因为上述的简化假设不适用于温度梯度十分大的大颗粒。Lnanze<sup>[94]</sup>和 Devnathan<sup>[95]</sup>等人通过一个有效传质系数来简化大颗粒传质方程求解的困难：

$$\frac{\partial}{\partial T} \frac{px_i}{RT} + \frac{D_e A}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial px_i}{\partial r} \right) = R_i \quad (4.1-24)$$

但是通常对于上式的“集总”有效传质系数的精确估计难以做到。

Blick<sup>[96]</sup>则研究了双组分即挥发物气体和焦油的热解传质模型，在上述传质方程的基础上引入了一个传热方程，因而模型可以用来预测颗粒大小、压力、以及加热速率对挥发物析出量的影响，严建华则在前人的基础上对流化床中的大颗粒传质情形进行了研究。

因此，至今为止，研究大颗粒的非塑性煤传质模型至少由以下问题仍没得到很好的解决：

- (1) 缺少真实地描述颗粒孔隙结构及其伴随着热解过程进行的孔隙结构变化的方程。目前研究者一般都采用均匀孔隙率即热解期间颗粒内存在着均匀分布的孔隙，这与大颗粒内部结构结构上存在着高度的温度差和浓度差是自相矛盾的。实际情况是孔隙率不但随热解时间变化而且随颗粒半径位置变化，即  $\phi = f(r, t)$ 。
- (2) 由于热解期间孔洞结构的变化，因而挥发物在颗粒结构上的扩散系数必将随之变化，而目前所有的模型使用的都是静态扩散系数，采用“集总”的有效系数则意味着颗粒内部各点的扩散系数相等。

## § 4.2 渗流加热对移动床中煤热解的影响

现在我们利用高温气体（烟气或空气）来加热以颗粒床中的煤层，研究煤在渗流加热情况下的挥发份析出过程。由于煤的热解反应非常复杂，很难用准确的模型进行模拟，所以我们作如下简化：不计煤的热解对颗粒大小以及孔隙率的影响；把析出的挥发份视作整体，不考虑其中的具体组分；并且假设烟气中的原有组分与其不同，它们之间没有交换现象，另外，用简单的第一类反应动力学模型描述挥发份析出过程。

### 一、物理数学模型

如图 3-11 所示，取立式移动床高度为  $H = 1.0m$ ，床层横切面为圆柱型，半径

$R = 0.75m$ , 颗粒固体自移动床上端入口以给料速率  $B$  (kg/H) 进入床内, 逆床高  $x$  轴方向移动, 并在移动床下部排出物料, 颗粒移动床处于稳定操作运行状态。颗粒物料在床内的下移速度为  $U_s$ 。高温气体以空床入口速度  $U_m$ 、入口温度  $T_m$  渗入床内填充颗粒物料中, 并从移动床上端出口排出。床内颗粒以及气体模型假设与 § 3.2 相同, 所以有如下数学模型。

1、连续方程:

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho_f u_f)}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial(\varepsilon r \rho_f v_f)}{\partial r} = 0 \quad (4.2-1)$$

2、轴向动量方程:

$$\frac{\partial(\rho_f \varepsilon u_f^2)}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r \rho_f \varepsilon u_f v_f)}{\partial r} = -\frac{\partial(\varepsilon p')}{\partial x} - \frac{\mu \varepsilon^2}{k} (u_f + u_s) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \mu \frac{\partial u_f}{\partial r} \right) + \varepsilon g \rho_f \beta (T_f - T_0) \quad (4.2-2)$$

3、径向动量方程:

$$\frac{\partial(\rho_f \varepsilon u_f v_f)}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r \rho_f \varepsilon v_f^2)}{\partial r} = -\frac{\partial(\varepsilon p')}{\partial r} - \frac{\mu \varepsilon^2}{k} v_f + \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial v_f}{\partial x} \right) \quad (4.2-3)$$

4、气体能量方程:

$$\frac{\partial(\rho_f \varepsilon c_{pf} u_f T_f)}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r \rho_f \varepsilon c_{pf} v_f T_f)}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \varepsilon (\lambda_d + \lambda_f) \frac{\partial T_f}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r (\lambda_d + \lambda_f) \varepsilon \frac{\partial T_f}{\partial r} \right) + \alpha_v (T_s - T_f) \quad (4.2-4)$$

5、固体颗粒能量方程:

$$\frac{\partial(-u_s \rho_s c_{ps} (1-\varepsilon) T_s)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \lambda_s (1-\varepsilon) \frac{\partial T_s}{\partial x} \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r \lambda_s (1-\varepsilon) \frac{\partial T_s}{\partial r} \right] + \alpha_v (T_f - T_s) - (1-\varepsilon) \rho_s \Delta H \frac{dV_s}{dt} \quad (4.2-5)$$

6、传质方程:

$$\frac{\partial(uC)}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial(rvC)}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r D_r \frac{\partial C}{\partial r} \right) + \frac{A_p}{\varepsilon} \alpha_{m,f} (C_{coal} - C) \quad (4.2-6)$$

传质方程的边界条件为:

$$\begin{aligned} x=0, & \quad C=0; & x=L, & \quad \frac{\partial C}{\partial x}=0 \\ r=0, & \quad \frac{\partial C}{\partial r}=0; & r=R, & \quad \frac{\partial C}{\partial r}=0 \end{aligned}$$

可以看出, 描述此模型的方程组比惰性移动床数学模型多出了传质方程, 并且在颗粒能量方程中需要考虑挥发份的析出时的吸热项:

$$-(1-\varepsilon)\rho_s\Delta H\frac{dV_s}{dt} \quad (4.2-7)$$

其它方程都与惰性移动床数学模型相同。\$\Delta H\$ 表示热解吸热量, 单位是 \$J/kg\$, 由文献[97], \$\Delta H = 1.0 \times 10^5 J/kg\$。传质方程中, \$C\$ 表示在填充床孔隙中的密度, 单位是 \$kg/m^3\$; \$D\_s\$ 是填充床轴向质量扩散系数, 单位是 \$m^2/s\$, 可按下式进行计算

$$\frac{\varepsilon D_s}{D} = 20 + 0.5 Sc Re \quad (4.2-8)$$

其中 \$D\$ 为分子质量扩散系数, 在这里取为 \$1.0 \times 10^{-4} m^2/s\$ [98], 假设煤层为各向同性介质, \$D\_s\$ 也按上式计算; \$\alpha\_{m,f}\$ 表示颗粒与流体间的对流传质系数, 由下式确定

$$Sh = \frac{\alpha_{m,f} \cdot l}{D} \quad (4.2-9)$$

其中 \$l\$ 是特征尺寸, 在这里取颗粒直径 \$d\_p\$, 根据 § 3.1 节, \$Sh\$ 由下式确定

$$\frac{Sh}{Re Sc^{1/3}} = \frac{2.06}{\varepsilon} Re^{-0.576} \quad (4.2-10)$$

\$A\_p\$ 为填充床单位体积的颗粒表面面积, 由文献[99], 用式 \$A\_p = 3(1-\varepsilon)/R\$ 计算, 其中

\$R\$ 为颗粒直径。\$C\_{coal}\$ 为煤颗粒表面上的浓度, 我们定义 \$C\_{coal}\$ 如下

$$C_s = \rho_{coal} \int_0^{d_p/u_f} \frac{\partial V_s}{\partial t} dt \quad (4.2-11)$$

此定义的意义是指, 在时间 \$\Delta t = d\_p/u\_f\$ 内煤颗粒析出的积聚在颗粒表面而形成密度

\$C\_s\$。式中, \$d\_p\$ 是颗粒直径, \$u\_f\$ 是流体速度, \$\frac{\partial V\_s}{\partial t}\$ 是煤颗粒中挥发份析出速率, 由 4.1

节我们可以知道:

$$\frac{\partial V_s}{\partial t} = (V_{max} - V_s) k_0 \exp\left(-\frac{E_0}{RT_s}\right) \quad (4.2-12)$$

参考文献[85]并加以修正, \$k\_0\$、\$E\_0\$ 取值为 \$k\_0 = 10000\$ \$E\_0 = 80000\$。求解上面的微分方程可得:



$$V_s = V_{\max} \left( 1 - \exp \left( -k_0 \exp \left( -\frac{E_0}{RT_s} \right) t \right) \right)$$

## 二、数值计算方法

与上一章的惰性移动床相比，固体颗粒床层的能量方程的源项应作如下修改：

$$S = \alpha_v T_f - (1 - \varepsilon) \rho_s \Delta H \frac{dV_s}{dt} - \alpha_v T_s \quad (4.2-13)$$

所以有：

$$S_c = \alpha_v T_f - (1 - \varepsilon) \rho_s \Delta H \frac{dV_s}{dt} \quad S_p = -\alpha_v \quad (4.2-14)$$

传质方程中的物理量  $G$  并非主流气体的参数，所以方程的离散跟其他对流扩散方程有不同之处。我们采用中心差分格式。如图 3-3 所示的控制容积上对传质方程作积分可得到如下结果：

① 轴向由对流和扩散产生的增量：

• 对流带入的增量：

$$(u_w C_w - u_e C_e) r \Delta r = (u_w \frac{C_P + C_W}{2} - u_e \frac{C_E + C_P}{2}) r_p \Delta r \quad (4.2-15)$$

• 扩散产生的增量：

$$(D_w \frac{C_W - C_P}{\delta x} - D_e \frac{C_P - C_E}{\delta x}) r_p \Delta r \quad (4.2-16)$$

② 同理，径向  $G$  的增量为：

$$D_s \frac{C_S - C_P}{\delta r} r_s \Delta x - D_n \frac{C_P - C_N}{\delta r} r_n \Delta x + v_s \frac{C_S - C_P}{\delta r} r_s \Delta x - v_n \frac{C_P - C_N}{\delta r} r_n \Delta x \quad (4.2-17)$$

③ 源项：

$$S = S_c + S_p C_p = \frac{A_p}{\varepsilon} \alpha_{m,f} (C_{coal} - C_p) r_p \Delta r \Delta x \quad (4.2-18)$$

$$S_c = \frac{A_p}{\varepsilon} \alpha_{m,f} C_{coal} r_p \Delta r \Delta x \quad (4.2-19)$$

$$S_p = -\frac{A_p}{\varepsilon} \alpha_{m,f} r_p \Delta r \Delta x \quad (4.2-20)$$

由质量守恒可得：①+②+③=0，整理可得：

$$a_p C_p = a_E C_E + a_w C_w + a_s C_s + a_N C_N + b \quad (4.2-21)$$

其中各系数如下:

$$a_E = \frac{r_p \Delta r D_e}{\delta x} - \frac{r_p \Delta r u_e}{2} \quad (4.2-22)$$

$$a_w = \frac{r_p \Delta r D_w}{\delta x} + \frac{r_p \Delta r u_w}{2} \quad (4.2-23)$$

$$a_s = \frac{r_s \Delta x D_s}{\delta r} + \frac{r_s \Delta x v_s}{2} \quad (4.2-24)$$

$$a_N = \frac{r_n \Delta x D_n}{\delta r} + \frac{r_n \Delta x v_n}{2} \quad (4.2-25)$$

$$b = S_C \quad (4.2-27)$$

$$a_p = a_E + a_w + a_s + a_N - S_p + (u_e - u_w) r_p \Delta r + (r_n v_n - r_s v_s) \Delta x \quad (4.2-28)$$

### 三、结果分析

我们通过改变移动床的移动速度、高温气体进口速度和温度以及孔隙率来研究在不同工况下温度的渗透深度以及煤的热解区域，从而寻求不同因素对煤预热解的影

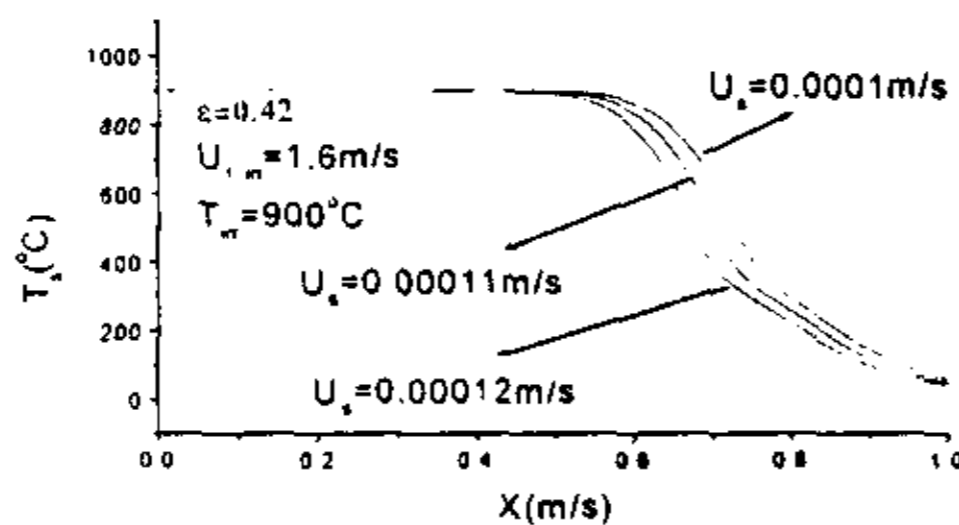


图 4-1 颗粒下移速度对颗粒温度轴向分布的影响

figure 4-1 Temperature-X graph of particle at different speed

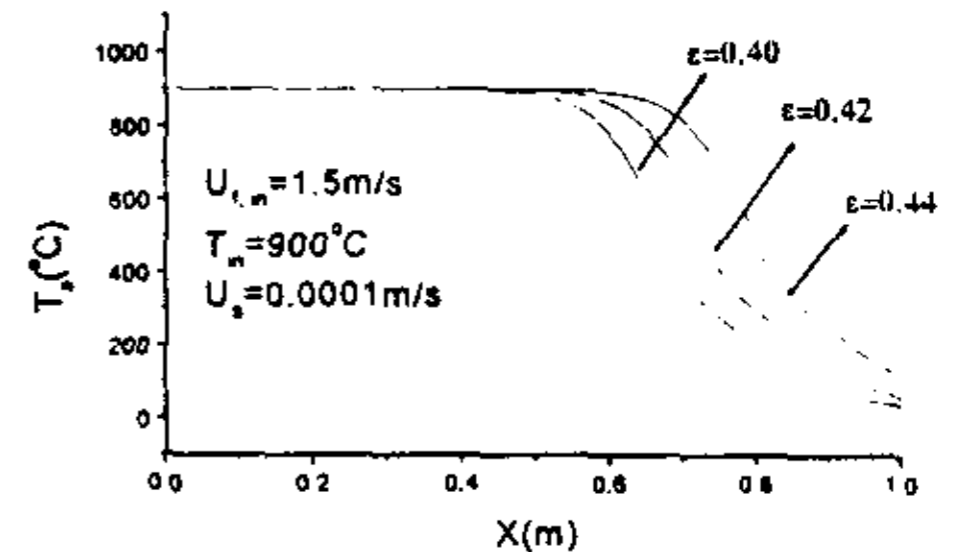


图 4-2 孔隙率对颗粒温度轴向分布的影响

figure 4-2 Temperature-X graph of particle at different hole rate

响规律，具体分析如下。

图 4-1, 4-2, 4-3 分别表示给料速率、孔隙率以及高温气体进口速度对床层内温度分布的影响规律。在稳定工况下，移动床给料速率越大，床层物料下移速度则越大。由图可见，热渗透作用深度以及热作用区域内的温度水平对于物料移动速度、

孔隙率和气体入口速度十分敏感。这是因为颗粒下移速度越大，物料热解吸热量以及从出料口所带走的热量越多，热渗流气体用于提升颗粒温度的热量将减少，使得热作用区域内物料温度大大减小。而对于低速给料工况，热作用区域内的颗粒物料将获得较高温。在其它条件相同的情况下，孔隙率越小温度渗透深度越大，而越大的高温气体入口速度则能得到越大的渗透深度，这与惰性床的规律是相同的。因此，在移动床设计和实际工业运行中，可以通过床层几何尺度，以及调整给料量和高温热气进口速度等有效措施，使床内物料充分有效地维持在高温热作用区域，以达到热解工艺过程的高效率

图 4-4 表示移动床内颗粒固体温度沿床高的分布规律。由图可见，颗粒温度在床层下部有一小段较高稳定分布区域，然后温度沿床高缓慢下降。根据移动床内填充颗粒参与热反应与否，图中比较了惰性颗粒与煤粒两种情况下料层温度沿床高的分布。在移动床中，煤粒料层缓慢下移，进入床层某一高度，颗粒温度达到一定值时，煤粒开始热解反应并析出气体挥发物。由于煤的热解吸热反应，使得煤颗粒床

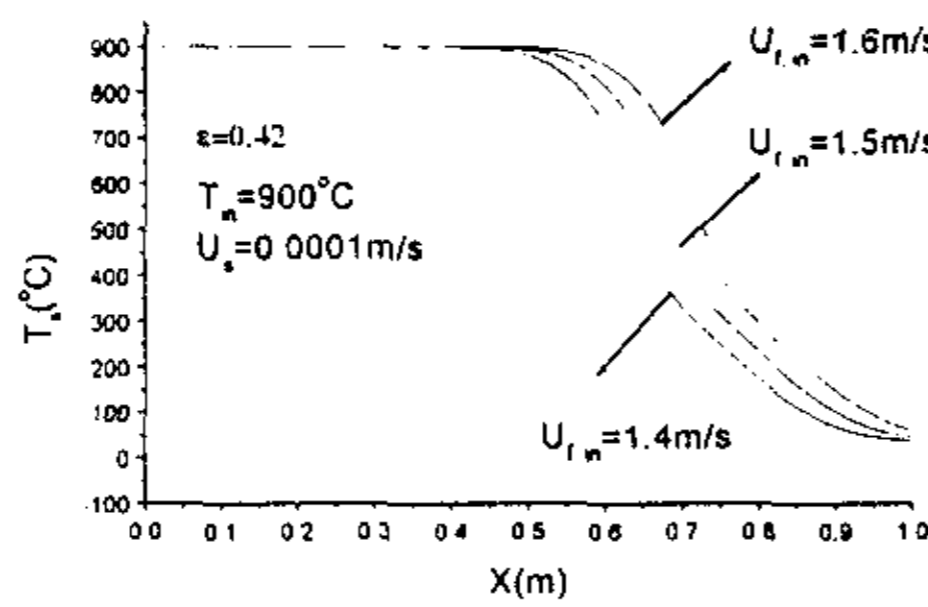


图 4-3 气体速度对固体温度的影响

figure 4-3 Temperature-X graph of particle at different velocity of liquid

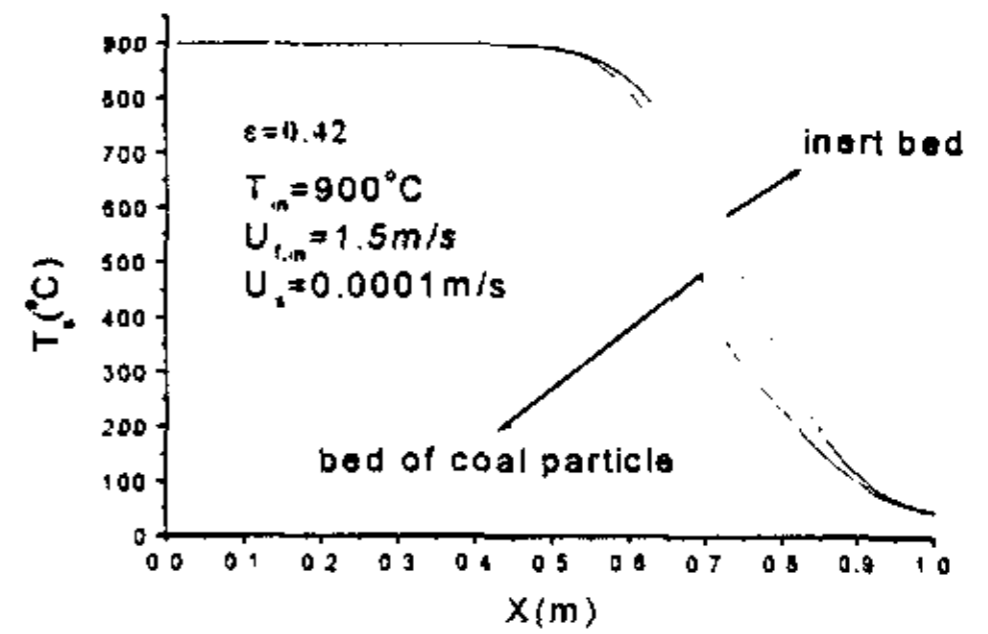


图 4-4 惰性床和热解床的温度差别

figure 4-4 Particle temperature different between inert bed and coal reaction bed

比惰性颗粒床的料层温度有所下降（温差为  $\Delta T$ ），煤粒温度变化曲线在热解区段呈现出明显的阶段性。由于开始进入热解区段时煤粒温度不高，热解吸热平缓，所以此阶段惰性颗粒床与煤料床的温差不大。煤粒进一步下移，温度不断上升，热解反应加剧，吸热量增多。当煤粒处于某一床高位置，煤粒温度上升到一定值，此时热解反应速度最大，热解吸热量最多，温差  $\Delta T$  达到极值。此后，热解进入后期阶段，反应速度下降，温差  $\Delta T$  减小。达到一定床高位置，热解反应结束，两种床料的温差消失。

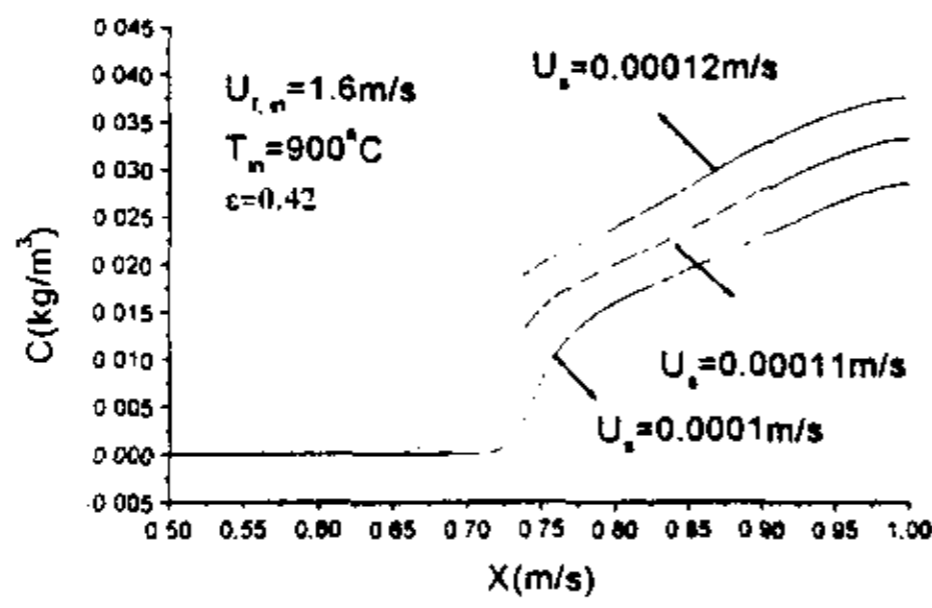


图 4-5 颗粒不同下移速度对密度的影响  
figure 4-5 C-X graph at different particle speed

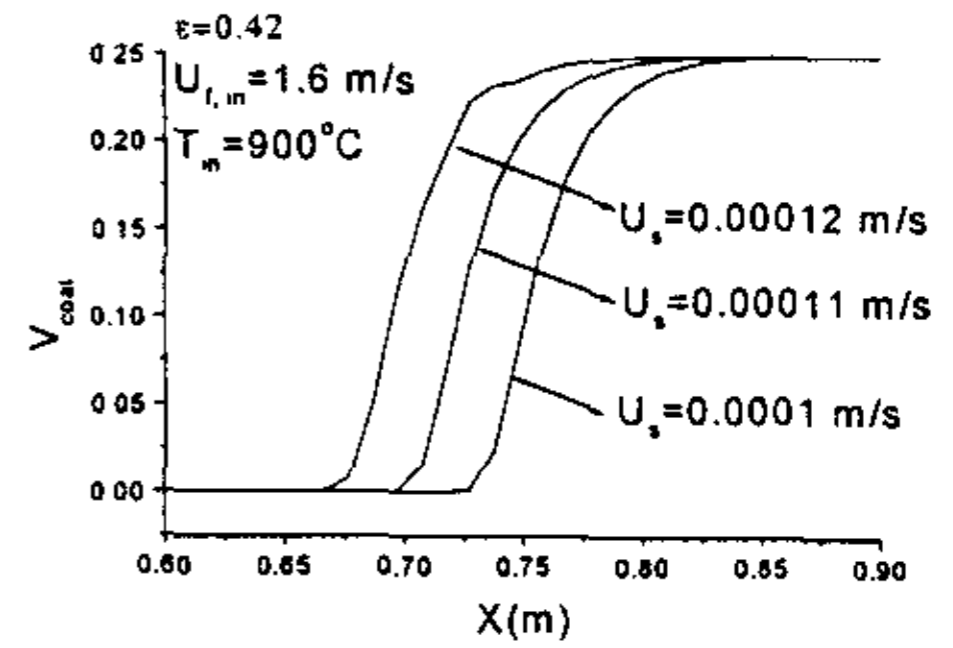


图 4-6 不同颗粒下移速度下的煤颗粒中剩余挥发份  
figure 4-6  $V_{coal}$ -X graph at different particle speed

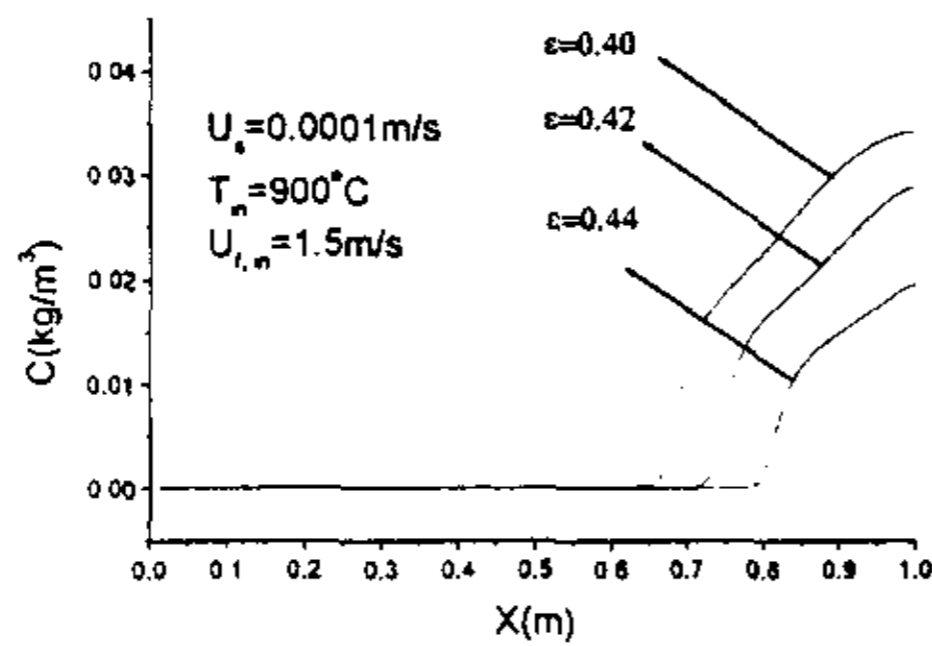


图 4-7 孔隙率对密度的影响  
figure 4-7 C-X graph at different hole rate

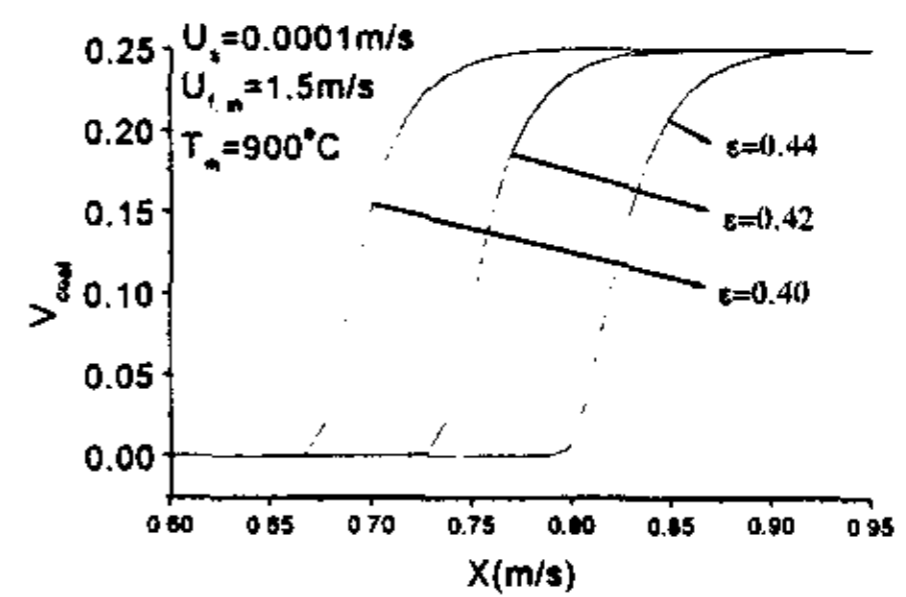


图 4-8 孔隙率对颗粒热解深度的影响  
figure 4-8  $V_{coal}$ -X graph at different hole rate

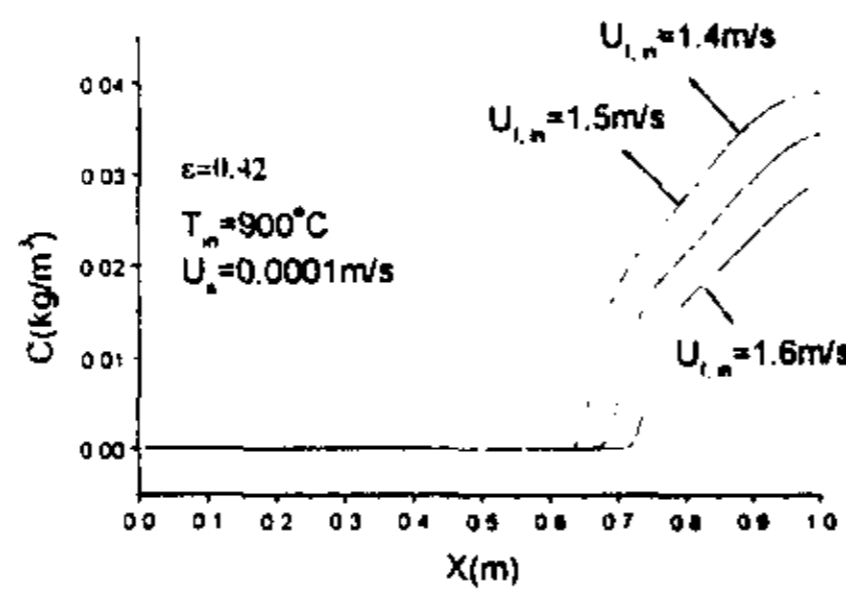


图 4-9 气体进口速度对密度的影响  
figure 4-9 C-X graph at different velocity of liquid

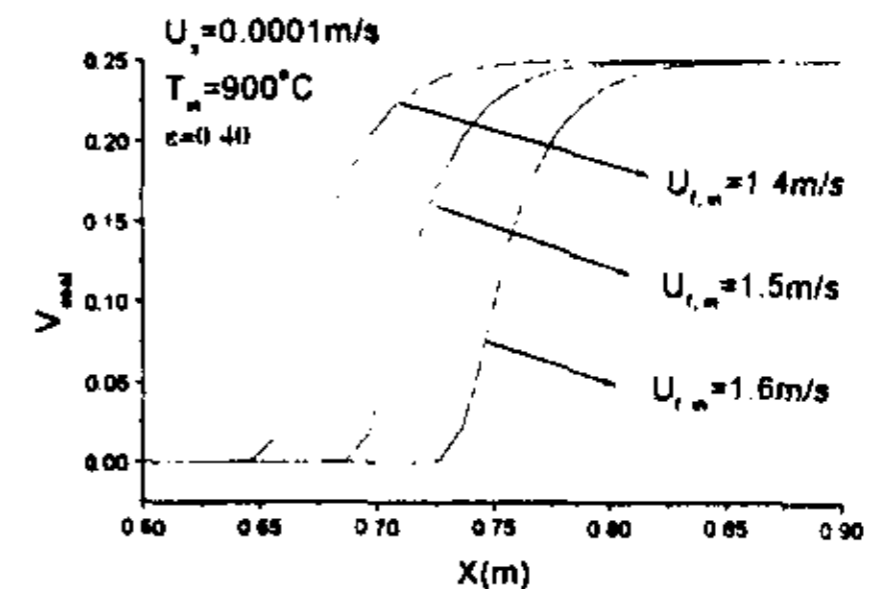


图 4-10 气体进口速度对颗粒热解深度的影响  
figure 4-10  $V_{coal}$ -X graph at different liquid velocity

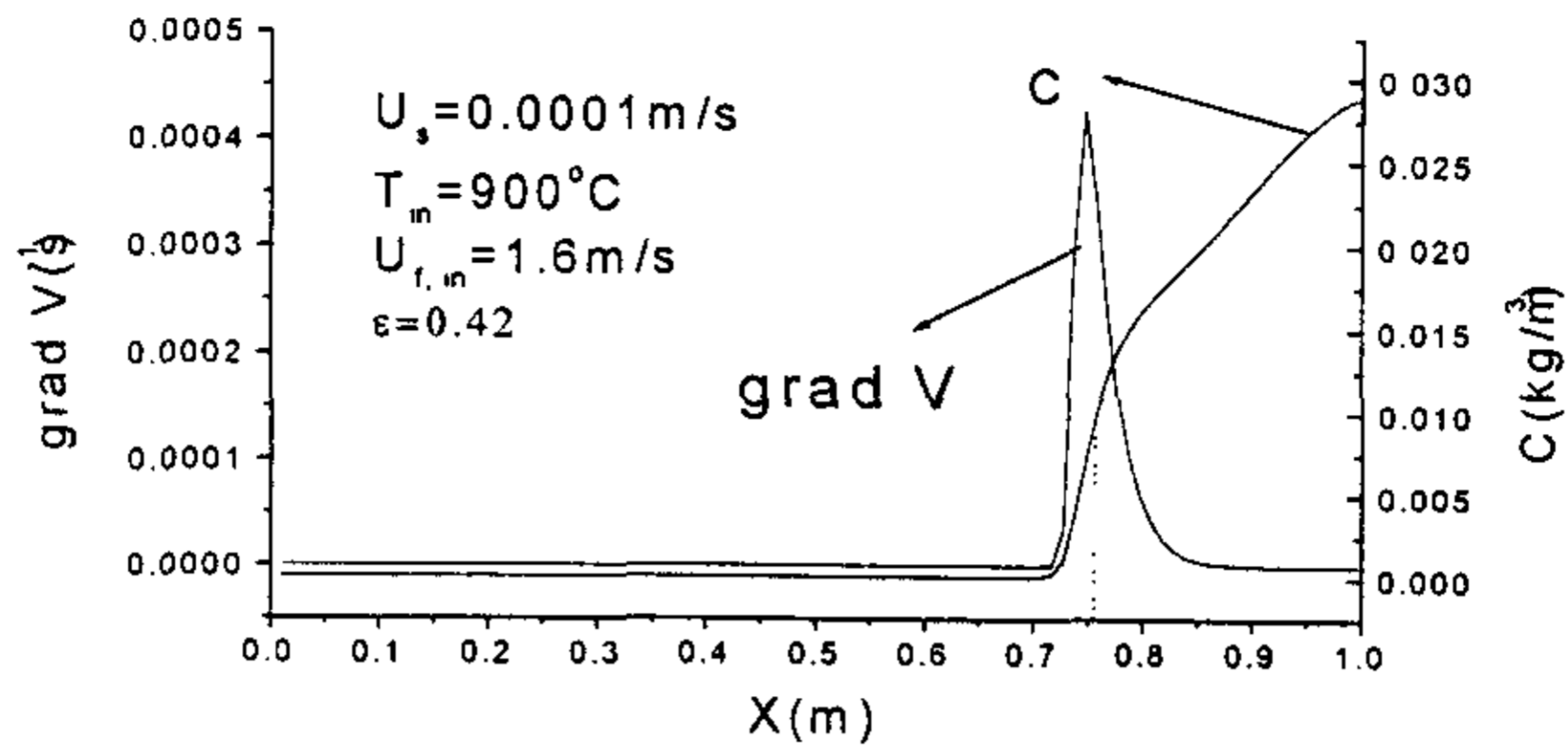


图 4-11 颗粒热解速度与密度的关系

figure 4-11 the graph of volatile density and volatilization rate

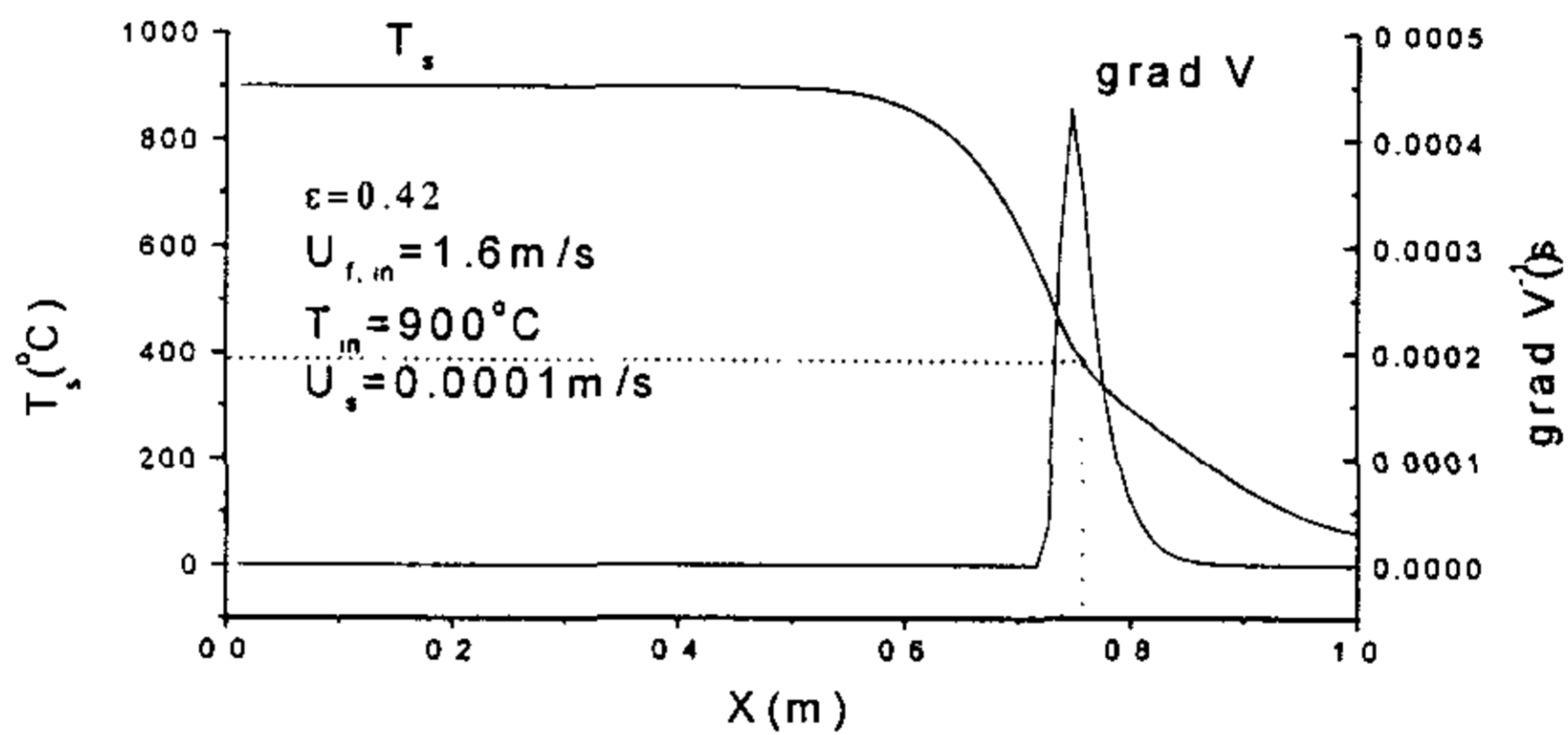


图 4-12 温度与煤颗粒热解的关系图

figure 4-12 the graph of temperature volatilization rate

图 4-5、4-6 分别表示在不同给料速度下，颗粒床空隙中挥发份浓度沿轴向的分布规律和不同高度上煤颗粒中剩余未析出的比例。我们可以很明显地看到在图中工况下，移动床的底部 0.65 米以下没有存在，而且煤颗粒中的剩余挥发份为零，我们称之为析出完成区；而在高于完成区的约 0.15 米的床层中，热解反应正在快速进行，挥发份浓度急剧上升，称之为反应区；在往上，由于热解反应强度减弱并逐渐消失，称之为静态区。床层的移动速度不同，反应区的起始位置也就不同，但是反应区长

度基本不变。

图 4-7、4-8 分别表示孔隙率对移动床热解的影响。图中曲线表示, 在其它工况相同的条件下, 孔隙率越小的颗粒床, 其孔隙中挥发份浓度越大。这是因为, 孔隙率越小的颗粒床, 气体渗流阻力越大, 所以有更多的滞留在孔隙中。

图 4-9、4-10 分别表示在高温气体入口速度不同时, 颗粒反应床热解规律的变化。很明显, 当高温气体进口速度越快, 则单位时间内由其提供的热量越大, 这就使得有更多的煤颗粒被热解, 移动床完成区也就越长, 热解开始的床层位置也就越高。

图 4-11、4-12 表示移动床颗粒温度、析出速率以及孔隙中挥发份密度三者之间的关系。图 4-11 表明, 在 0.7 米高度处, 析出速率急剧提高, 应的孔隙中密度曲线也变陡, 说明在这个区域, 密度的增加主要是煤颗粒热解的贡献, 而上面的区域密度的增加明显变缓, 这是因为到了静态区, 已没有了挥发份的析出, 密度的增加主要来自于上游挥发份的积累。图 4-12 则表明了颗粒温度与析出速率的关系。通过公式 4.1-1、4.1-2 我们知道, 析出速率与煤颗粒温度以及煤炭中存留的尚未析出的百分比有关, 另外由本章第一节可知, 热解动力学参数  $k_0$ 、 $E_0$  与煤颗粒温度上升的

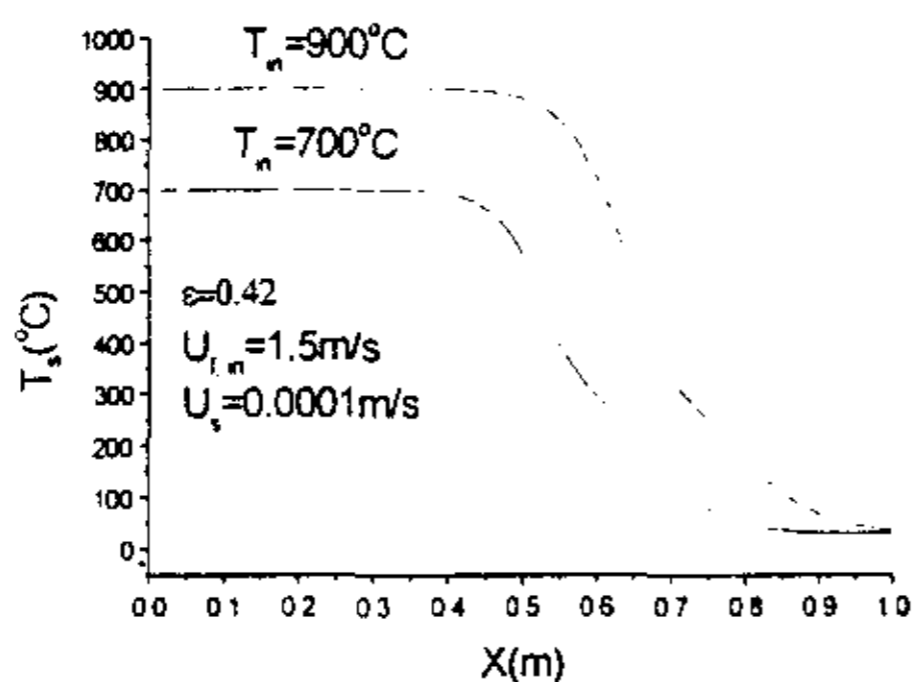


图 4-13 不同气体入口温度的渗透深度

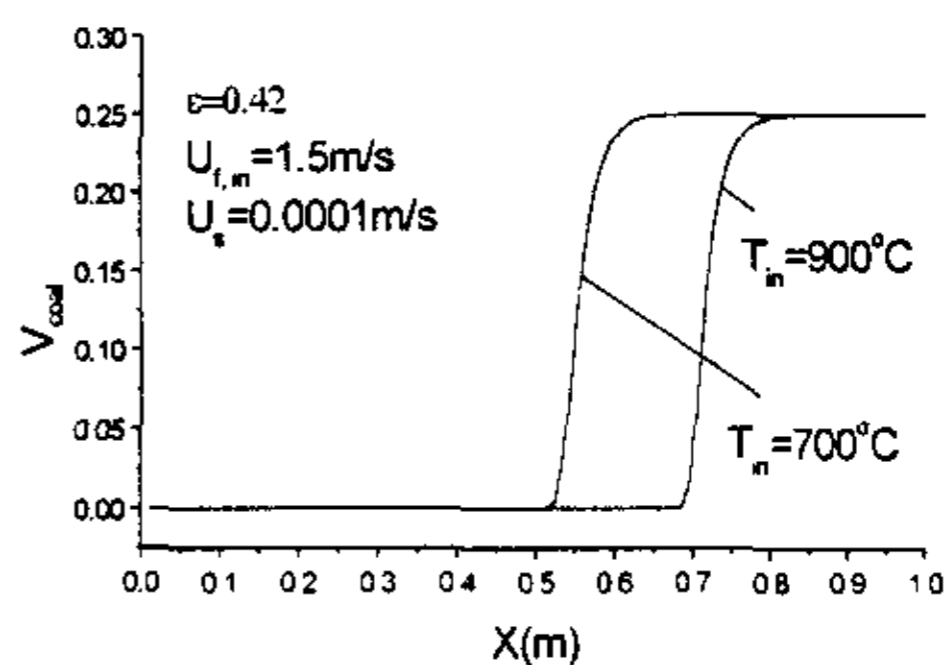


图 4-14 进口气体速度对煤热解程度的影响

figure 4-13  $T_s$ - $X$  graph in different gas temperature figure 4-14  $V_{coal}$ - $X$  graph in different gas temperature

速率有关, 这里我们忽略温度上升速率对析出速率的影响。我们的计算结果表明, 在床层高 0.8 处, 温度约  $400^{\circ}\text{C}$  时, 挥发份析出速率最快, 这与理论上的预测结果是相同的。

图 4-13、4-14 分别表示高温气体入口速度不同的情况下, 颗粒床中沿竖直方向温度分布曲线以及煤热解深度。由图 4-14 可知, 当气体入口速度为  $700^{\circ}\text{C}$  时, 热解完成区明显缩短, 反应区下移, 但仍能保证有 0.5 米的区域处于  $400^{\circ}\text{C}$  以上。

由此我们认为,对于移动床连续给料的情况下,用来加热颗粒煤的热载体高温烟气不需要非常高的温度。由第一章我们知道,对于不同的煤种和热解工艺,反应床所需的温度不同,所以我们可以根据不同的情况采用不同的烟气进口温度。

### § 4.3 煤热解预处理的瞬态过程数值模拟

在上一节,我们模拟了移动床预处理炉在达到稳态时的传热传质现象。下面,我们将模拟移动床在初始加热时的传热与热解现象。在初始加热时,颗粒床层保持静止,直到颗粒床内达到工作温度时才开始移动。

#### 一、物理数学模型

物理模型及其假设同上一节,数学模型只是增加了时间项,描述方程组如下。

1、连续方程:

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho_f)}{\partial t} + \frac{\partial(\varepsilon\rho_f u_f)}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r\varepsilon\rho_f v_f)}{\partial r} = 0 \quad (4.3-1)$$

2、轴向动量方程:

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho_f u_f)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_f \varepsilon u_f^2)}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r\rho_f \varepsilon u_f v_f)}{\partial r} = -\frac{\partial(\varepsilon p')}{\partial x} - \frac{\mu\varepsilon^2}{k} (u_f + u_s) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r\mu \frac{\partial u_f}{\partial r} \right) + \varepsilon g \rho_f \beta (T_f - T_0) \quad (4.3-2)$$

3、径向动量方程:

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho_f v_f)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_f \varepsilon u_f v_f)}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r\rho_f \varepsilon v_f^2)}{\partial r} = -\frac{\partial(\varepsilon p')}{\partial r} - \frac{\mu\varepsilon^2}{k} v_f + \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial v_f}{\partial x} \right) \quad (4.3-3)$$

4、气体能量方程:

$$\frac{\partial(\varepsilon\rho_f c_{pf} T_f)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_f \varepsilon c_{pf} u_f T_f)}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial(r\rho_f c_{pf} \varepsilon v_f T_f)}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ (\lambda_d + \lambda_f) \varepsilon \frac{\partial T_f}{\partial x} \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r(\lambda_d + \lambda_f) \varepsilon \frac{\partial T_f}{\partial r} \right] + \alpha_v (T_s - T_f) \quad (4.3-4)$$

5、固体颗粒能量方程:

$$\frac{\partial((1-\varepsilon)c_{ps}\rho_s T_s)}{\partial t} + \frac{\partial(-u_s \rho_s c_{ps} (1-\varepsilon) T_s)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \lambda_s (1-\varepsilon) \frac{\partial T_s}{\partial x} \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ r\lambda_s (1-\varepsilon) \frac{\partial T_s}{\partial r} \right] + \alpha_v (T_f - T_s) - (1-\varepsilon)\rho_s \Delta H \frac{dV_s}{dt} \quad (4.3-5)$$

6、传质方程:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial(uC)}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial(rvC)}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r D_r \frac{\partial C}{\partial r} \right) + \frac{A_p}{\varepsilon} \alpha_{m,f} (C_{coal} - C) \quad (4.3-6)$$

方程的边界条件同惰性移动床，初始条件如下：

$t = 0$  时，

$$u_f = 0, \quad v_f = 0, \quad T_f = T_s = 30^\circ C, \quad C = 0$$

## 二、计算方法

除了增加了时间项外，方程的离散与稳态时相同，传质离散方程变成：

$$a_p C_p = a_E C_E + a_W C_W + a_S C_S + a_N C_N + a_p^0 C_p^0 + b \quad (4.3-7)$$

其中  $C_p^0$  表示上一时层的值， $a_p^0 = \frac{r_p \Delta x \Delta r}{\Delta t}$

$$a_p = a_E + a_W + a_S + a_N + a_p^0 - S_p + (u_e - u_w) r_p \Delta r + (r_n v_n - r_s v_s) \Delta x \quad (4.3-8)$$

我们取时间步长为  $\Delta t = 0.1$  秒。规定在每一时层上迭代次数最大为 500 次，或者满足下列收敛条件：

$$\left. \frac{|\sum T_s - \sum T_{s,0}|}{\sum T_s} \right|_{x=0.1m} < 10^{-4}, \quad \left. \frac{|\sum C - \sum C_0|}{\sum C} \right|_{x=0.1m} < 10^{-4}, \quad \left. \frac{|\sum u_f - \sum u_{f,0}|}{\sum u_f} \right|_{x=0.1m} < 10^{-4}$$

$$\left. \frac{|\sum T_s - \sum T_{s,0}|}{\sum T_s} \right|_{x=0.3m} < 10^{-4}, \quad \left. \frac{|\sum C - \sum C_0|}{\sum C} \right|_{x=0.3m} < 10^{-4}, \quad \left. \frac{|\sum u_f - \sum u_{f,0}|}{\sum u_f} \right|_{x=0.3m} < 10^{-4}$$

这里下标 0 表示上一次迭代的值而不是上一时层的值。也是分别对  $x = 0.1m$  和  $x = 0.3m$  的截面上的物理量值进行收敛验证，满足所有条件后就进入下一时层，也就是用本时层最后一次迭代的值作为下一时层的初值，而在迭代过程中，初值不变。这也是非稳态与稳态问题的拟非稳态方法的不同之处。

## 三、结果分析

图 4-15、4-16 表示的是温度的推进速度，可以从图中估算出温度的推进速度为 50 秒/毫米。另外，不同高度上的升温速度并不相同，而是沿着床高递减的，床层越高，达到一定温度越需要更长的时间。从图 4-16 能更清晰的看出这种规律。图中显示，从 20 分钟到 40 分钟，和从 40 分钟到 60 分钟温度的渗透距离是不同的，温度的渗透速度越来越慢，这是因为越往上，气体中所带的能量越少。



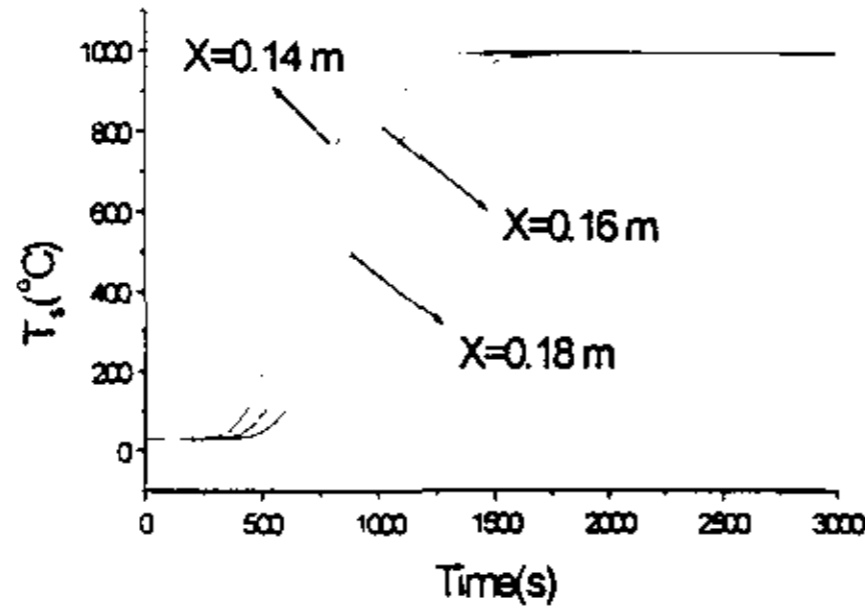


图 4-15 颗粒温度的时间响应

figure 4-15 Temperature-time graph of particle

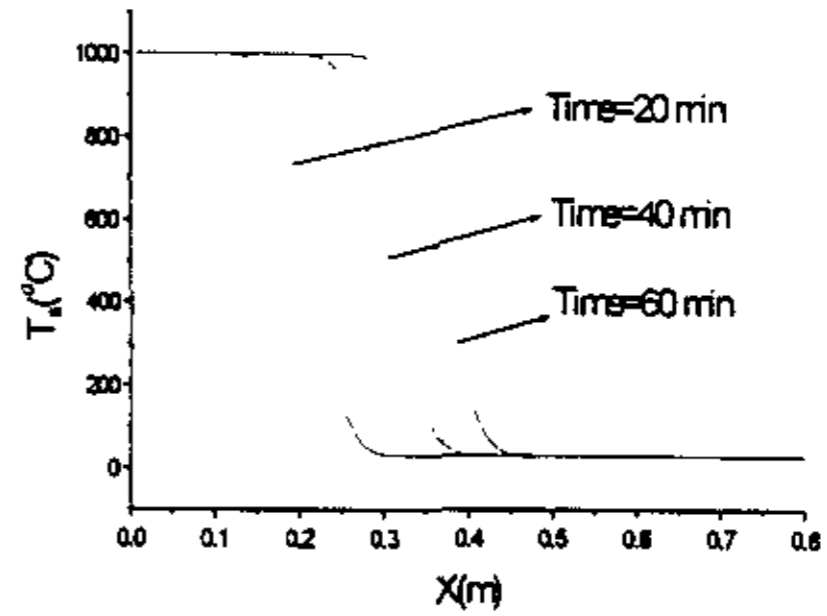


图 4-16 不同时刻的温度分布

figure 4-16 particle temperature at different time

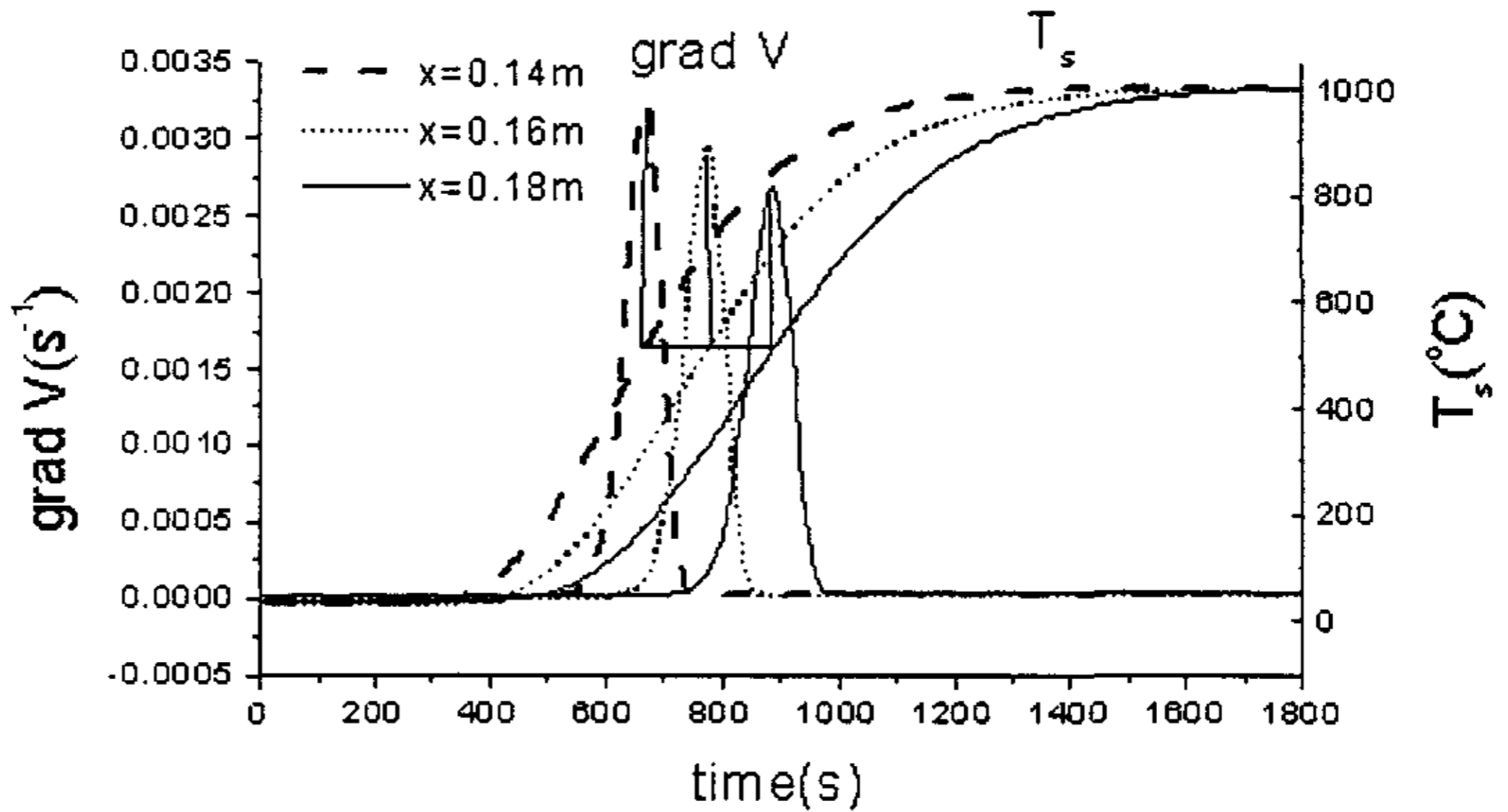


图 4-17 颗粒温度与煤热解速率的关系

figure 4-17 the graph of particle temperature and volatilization rate of particle

图 4-17、4-18 分别表示不同床高位置上床层温度、煤颗粒中、析出速率三者之间随时间变化相互关系。从图 4-17 可以看出，尽管不同位置上达到热解温度的时间是不同的，但是热解达到最高速率时的温度是相同的。然而，不同位置上热解速率的最大值并不相同，而是沿床高递减。我们可以从图 4-18 找到答案。图中显示，热解速率最大时，不同位置上颗粒煤中剩余挥发份是不同的，这就导致了尽管有相同的热解速度，但却有不同的热解速率。这就是式 4.1-1 和式 4.1-2 所表达的规律。

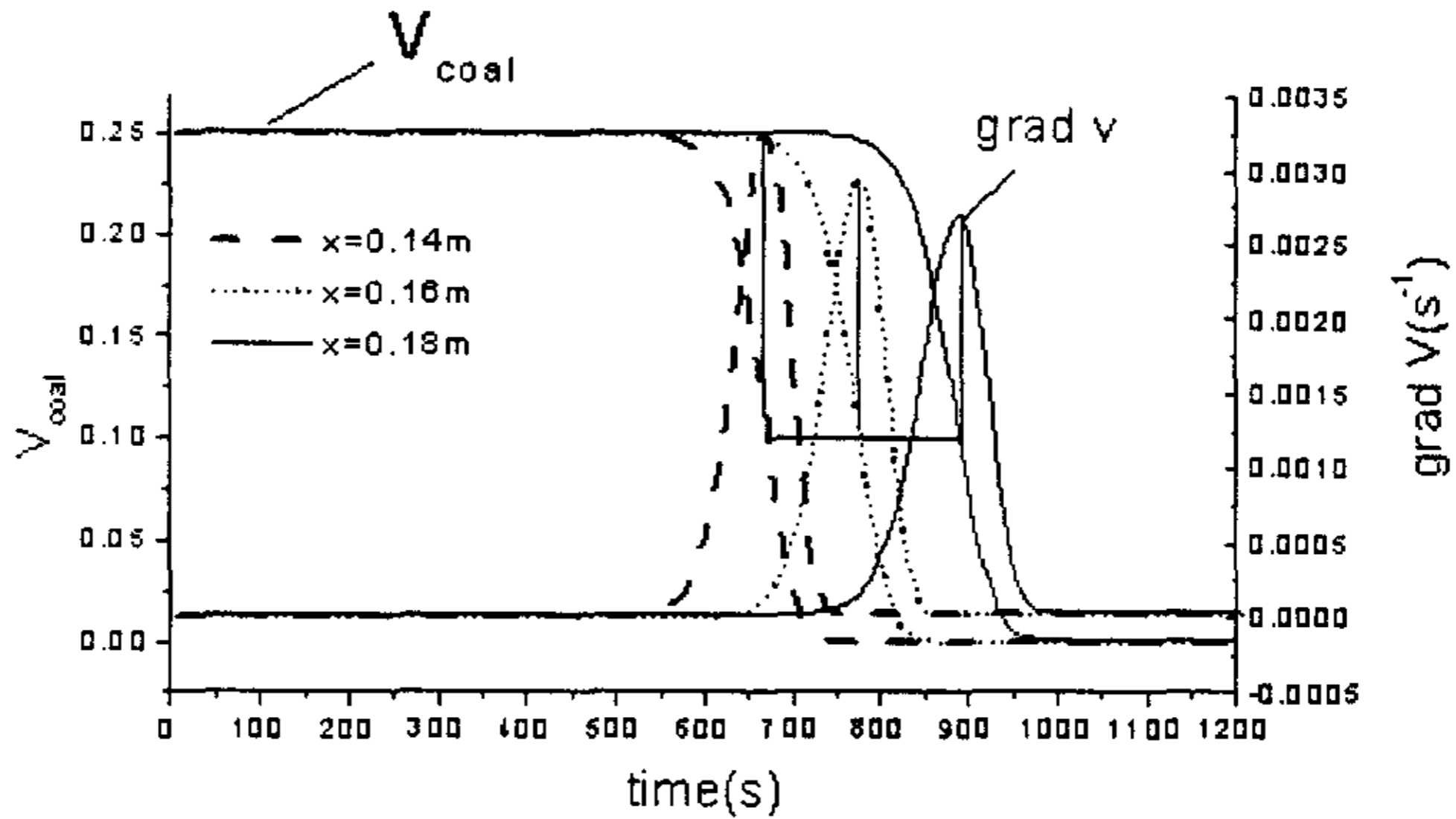


图 4-18 煤中剩余挥发份及其析出速率  
figure 4-18 volatile in particle and its volatilization rate

图 4-19、4-20 表示不同的高温气体入口温度对热解的影响。图 4-19 所显示的规律同 § 4.2 节稳态时类似。而图 4-20 则说明，在某个床高位置上，当气体入口温度低时，要想挥发出煤颗粒中的则需要更多的时间。这是因为，较低温度的气体带入的热量要小得多，所以需要较长时间流进更多的烟气来加热固体颗粒。这是遵循能量守恒定律的。

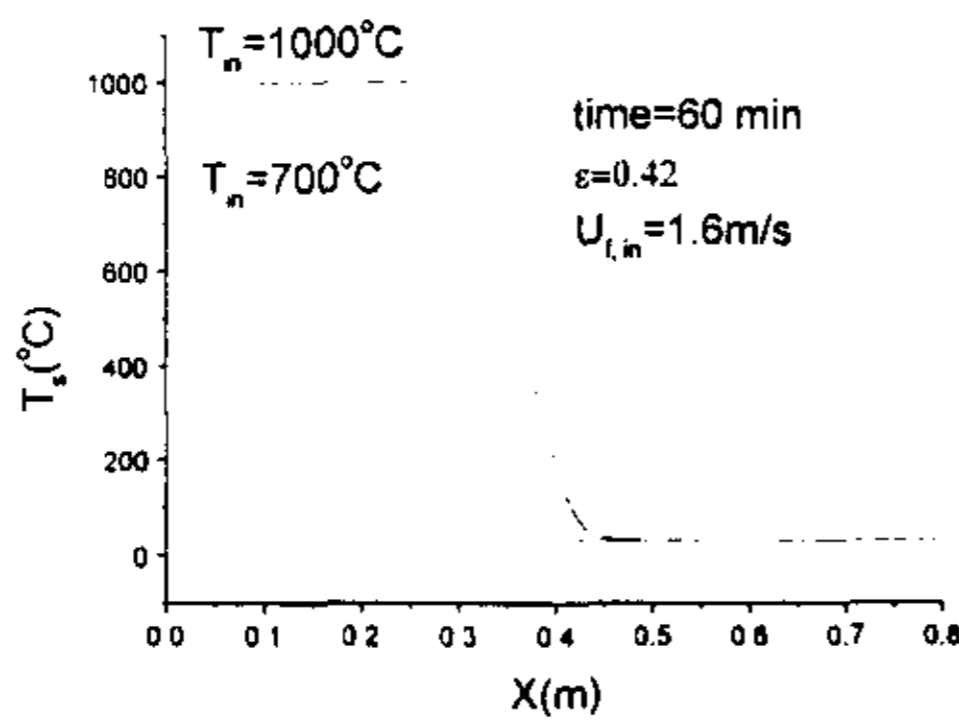


图 4-19 某一时刻气体入口温度不同时的温度渗透  
figure 4-19  $T_s$ - $X$  graph at sometime of different gas temperature

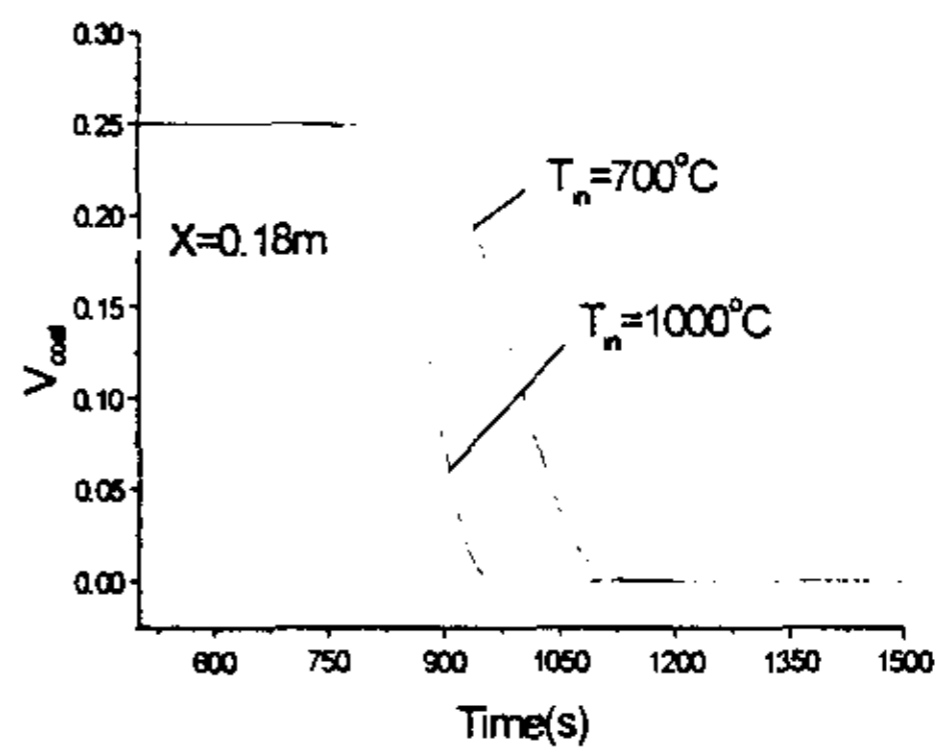


图 4-20 气体入口温度不同时的热解时间响应  
figure 4-20 reaction time response of different gas temperature

图 4-21 和图 4-22 表示的是一定时刻移动床空隙中密度沿轴向的分布。图 4-22 显示, 在 60 分钟时的密度曲线低于 40 分钟时。这是因为, 床层上端的主要来自下层析出的积累。随之时间的增加, 下层可供析出的越来越少, 所以整个床层空间中的密度就相应减小。图 4-19 表示在 60 分钟时, 入口温度为  $700^{\circ}\text{C}$  高温气体与入口

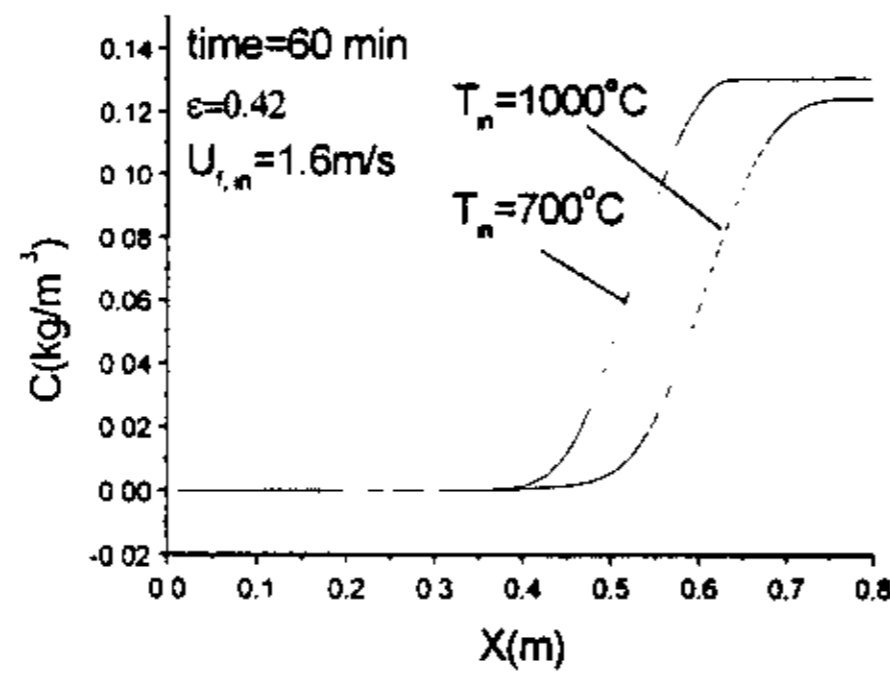


图 4-21 气体入口温度不同时孔隙中挥发份密度  
figure 4-21 C-X graph in different temperature of  
gas

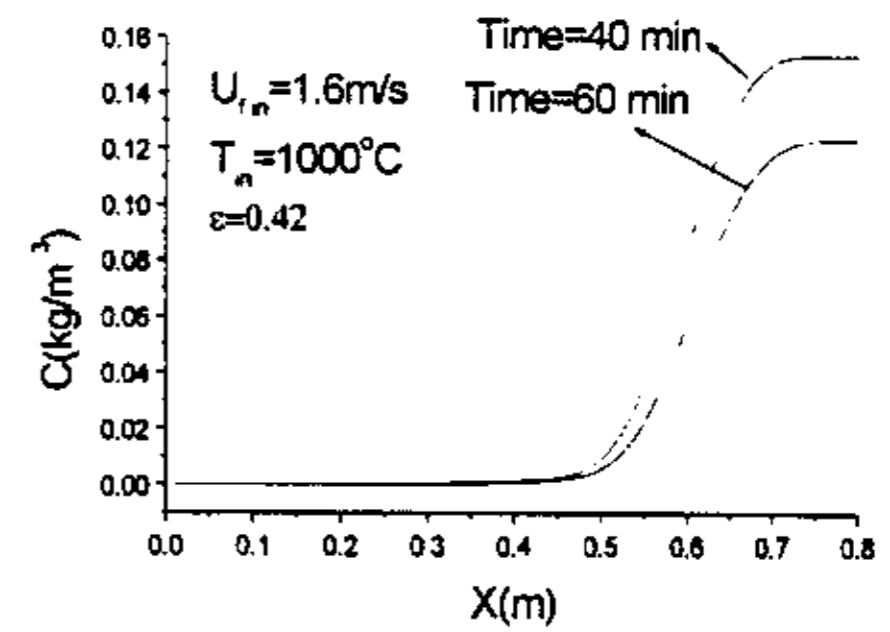


图 4-22 孔隙中不同时刻的挥发份密度  
figure 4-22 volatile density at different time

温度为  $1000^{\circ}\text{C}$  的高温气体对热解的影响。可以看到, 同一时刻, 较低的气体入口温度能导致较高的孔隙密度, 这是因为, 到 60 分钟时, 较高气体温度的颗粒床中挥发份的析出更彻底, 而此时较低气体温度的颗粒层有更多的析出, 所以导致孔隙中挥发份密度较高。

## 第五章 总结与展望

随着工业发展,用煤量急剧增加,从而由煤燃烧引起的空气污染问题越来越为人们所关注。环保问题已成为燃烧用煤所要考虑的主要因素。而其中问题的关键是控制硫、氮气体氧化物的排放。目前这已成为我们所面临的巨大技术挑战。为了满足工业大量用煤及环保的需要,近年来研究和开发了各种技术,主要着眼于从煤中或者烟气中脱硫。这些技术分为三种:燃烧前,燃烧中或燃烧后脱硫。而当前湿烟气脱硫法和干喷射法正被广泛使用于电厂中。但是,其高昂的投入和运行费用,以及吸收剂的低利用率,使得他们对于应用高硫煤非常昂贵。于是,一项新兴的,可选择的煤脱硫技术——热解脱硫,近年来开始深受瞩目。即在煤燃烧前,对煤进行热解预处理,将煤高效转化为低硫的固体燃料。且该技术相对目前广泛使用的脱硫方法而言,其费用非常低廉。本文针对热解脱硫工艺中共同的高温气体在煤颗粒床中的渗流传热传质问题进行了数值模拟,目的是为后续的实验台的设计和运行给出指导性的参考数据。

本文第一章讨论了课题的意义与背景。并且较概括的分析了煤燃烧前脱硫的几种方式,特别是对目前高温热解脱硫的研究成果进行了综述。

第二章较系统地阐述了多孔介质中的传热传质基本理论与经验公式,内容主要包括多孔介质中流体的流动机理与基本方程、多孔介质中的热传递现象与描述方程、多孔介质中的传质规律以及多孔填充床中的传热传质方程及适用条件。

在第三章建立了水平导管内多孔介质对流传递的物理数学模型和垂直移动床的物理数学模型,并对其进行了数值模拟。得出了高温气体在水平多孔介质导管中的传递时间响应以及高温气体在惰性垂直移动床中的渗透规律。

第四章是在第三章的基础上,在考虑了煤颗粒中有挥发份析出的情况下移动床的稳态和瞬态传热传质规律。由于煤热解过程的复杂性,我们的模型对实际情况进行了简化,如不考虑热解过程的多种化学反应,而是把挥发份当成单一的气体来考虑,另外忽略煤热解后对颗粒床孔隙结构、颗粒大小以及固体密度的影响。在此基础上建立了描述挥发份传递的数学模型,并对整个系统的动量、能量、质量传递进行了数值模拟,得出了具有参考价值的结论。

在本文研究的基础上,课题组已开始进行试验台的设计工作。试验台的功能是利用高温空气来对煤颗粒床进行高温热解预处理,然后检测经处理后煤的含硫率。如果以其惰性气体或氢气代替空气,则可进行更多功能的试验研究。

## 参考文献

- (1) 陈理, 脱除烟气中  $\text{SO}_2$  和  $\text{NO}_2$  的新技术, 化工环保, 1997.Vol.17 P.336
- (2) 陈皓侃, 高硫煤加氢热解脱硫的研究, 燃料化学学报, 1997, (5), P.404
- (3) 孙成功等, 煤非催化加氢热解过程中脱硫脱氮效应及硫变迁特性. 燃料化学学报, 1997, (25), P.353
- (4) 廖洪强, 富氢气氛下煤热解脱硫脱氮的研究, 燃料化学学报, 1999, (3), P.27
- (5) 朱学栋、朱子彬等, 煤的热解研究, 华东理工大学学报 1998, (2) P.37
- (6) 蒋芬, 煤中无机硫燃前脱除技术的进展, 煤化工, 1997, (2), P.56
- (7) 沈米宏、铃木善三, 流化床内燃料燃烧时  $\text{N}_2\text{O}$  形成和分解的 试验研究, 中国电机工程学报, 1999, (1) P.47
- (8) 徐万仁、杜鹤桂, 煤粉热分解特性及添加助燃剂的影响, 钢铁, 1999, (6) P.8
- (9) 华峰、胡伟等, 低  $\text{NO}_2$  燃烧技术在山东电网中的应用, 山东电力技术, 2000, (4), P.33
- (10) 周仕学、刘振学等, 高硫强粘结性煤高温热解脱硫的研究, 煤炭转化, 2000, (1), P.44
- (11) 徐秀峰, 顾永达等, 铁催化剂对煤热解过程中氮元素迁移的影响, 燃料化学学报, 1998, (2) P.18
- (12) 陈皓侃、李保庆等, 反应条件对煤加氢热解产物分布的影响, 燃料化学学报, 1997, (2), P.47
- (13) Roberto Garcia、Sabino R.Moinelo, Pyrolytic Desulfurization of Some High-Sulfur Coal, Energy and Fuels 1991,5,P.582
- (14) Cypres R,Furfari S,Ghodsi M. Erdol and Kohle Erdgas Petrochemic Vereinight mit Brennstoff Chemic,1993,36(10),P.471
- (15) Sugawara T,Sugawara K,Ohahsi L H.Fuel,1989,68(8),P1005
- (16) Badi M Fscaroni A W,Jenkins R G. Prepr Pap-Am Chem Soc,Div Fuel Chem,1988,33(1)P.265
- (17) Saha C,Tollefson E L.Can J Chem Eng,1995,73(2),P211
- (18) Braekman-Danheux C, Cypres R,Fontana A,laurent Ph,van Hegaerden M.Fuel,1992,71,P.251
- (19) Braekman-Danheux C, Cypres R,Fontana A,laurent Ph,van Hegaerden M.Fuel,1995,74,P.17
- (20) Braekman-Danheux C,Fontana Alani A,Laurent Ph.Fuel,1996,75,P.124
- (21) Chang J.Im.Ted Durney and Michael L.Matuszak, Halogen Treatment of chart for the removal of sulfur and mineral matter,Fuel Processing Technology,1993,33,P.49-60
- (22) T.L. Yeh.T.C.Keener.S.J.Khang.R.G.Jenkins,Denitrification of coal by mild pyrolysis in a novel coal feeder,Fuel Process.Technol.1993,33,P.33-48
- (23) A.Merdes.T.C.Keener,S.J.Khang.R.g.Jenkins,Investingation of the fate of mercury in biturmiuous coals during mild pyrolysis,Fuel 77(15)(1998)P1783-1792
- (24) H.Feibus.the challenge for advanced coal processing and utilization research and development in the 1990s.Processing and Utilization of High-Sulfur Coal,1990.P.3
- (25) T.C.keener.S.Keene.Current status of flue gas desulfurization in the United States.Environmental Engineering:Proceeding of the 1986 Specialty Conference.
- (26) 林瑞泰, 多孔介质传热传质导论, 1995
- (27) P.Cheng,Heat Transfer in Geothermal Systems,in"Advances in Heat Transfer"(eds.T.F.Irvine Jr.and

- J.P.Hartnett), Vol. 14, ppp. 1-10, Academic Press, New York, 1988.
- (28) S. Whitaker, *Sinutaneous Heat, Mass and Momentum Tansfer in Porous Media, A Theory of Drying*, in "Advances in Heat Transfer", Vol. 13, PP. 119-204, Academic Press, New York, 1977.
- (29) G. Chauveteau and Cl. Thirriot, *L Houille Blanche*, 22pp. 1-8, 1967
- (30) J. Bear, *Dynmics of Fluids in Porous Media*, Amerecan Elsevier Publishing Comp. INC, 1972
- (31) P.H. Forchheimer, *Z. Ver. Dtsch. Ing.*, 45pp. 1782-1788, 1981
- (32) R.E. Collins *Flow of Fluids Through Porous Materials*, Reinhold, New York, 1991.
- (33) J. Thibault and B.P.A. Grandjean, *Int. J. Het Mass Transfer*, 34, P. 2063, 1991
- (34) P.L. Webb, *Heat Transfer Engineering*, 4, pp. 79-82, 1983.
- (35) J.R. Leith and A. Haji-Sheikh, *Atransient Technique for Pinding Effective Thermal Conductivity of Fluid-Saturated Porous Media*, in "Heat Trasfer in Porous Media" (eds. J. V. Bech and L.S. Yao), pp. 93-101 ASME, New York, 1982.
- (36) A. V. Luikov, A. G. Shashkov, L. L. Vashiller and Y. B. Fraiman, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 11, pp. 117-140, 1988.
- (37) W.M. Rohsenow, et al., *Handbook of Heat Transfer Fundamentals*, McGraw-Hill, 1985
- (38) M.A. Combarous, B. Le Fur and C.R. Hebd, *Seances Acad Sci. Ser. B*, pp. 1009-1012, 1996
- (39) J.W. Elder, *J. Fluid Mech.*, 27, pp. 29-48, 1967.
- (40) J.P. Caltagirone, *J. Fluid Mech.*, 72, pp. 269-287, 1975.
- (41) Y. Katto and T. Masuoka, *Int. J. Het Mass Transfer*, 10, pp. 297-307, 1997
- (42) K. Walker and G.M. Homsy, *J. Heat Transfer*, 99, pp. 338-339 1977.
- (43) G.H. Evans and O.A. Plumb, Presented at AIAA/ASME Thermophys. & Heat Transfer Conf., second, paper, No. 78-HT-55, 1978.
- (44) Chen C K, Chen C H. *Int. J. Heat Fluid Flow*, 11, 1990, p. 65-71
- (45) Choi C Ykulaki F A. *Heat Transfer*, Hemisphere, Washington D C 5, 1990, p. 271-276
- (46) Hunt M L Tien C L. *Chem. Engng. Sci.* 45 1990, p. 56-63
- (47) Kladias N, Pransad V. *ASME J. Heat Transfer*, 112, 1990 p. 675-684
- (48) Kumari M, Nath G. *ASME J. Heat Transfer*, 112, 1990, p. 518-523
- (49) Mamele D M, Lage J L. *Int. J Heat Fluid Flow*, 14, 1993, p. 279
- (50) Chen H T. Chen C K. *ASME J. Heat Transfer*, 110, 1988 p. 257-259
- (51) Hossnin M, Nakayama A. *Int. J. Heat Fluid Flow*, 14, 1993, p. 385
- (52) Bian W. et al. *Int. J. Heat Fluid Flow*. 15, 1994, p. 384
- (53) Ganapathy Rpurushothaman R. *Int. J. Engng. Sci.*, 28, 1990, p. 907-918
- (54) Du Z G, Bilgen E. *Numer. Heat Transfer*, A 18, 1990, p. 371-382
- (55) Nakayma A. *Int. J. Heat fluid Flow*, 14, 1993, p. 279
- (56) Cox B I. Pruess K. *Transport in Porous Media*, 5, 1990, p. 299-323
- (57) David E, et. al. *ASME J. Heat Transfer*, 113, 1991, p. 206
- (58) Nidld D A. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 34, 1991, p. 87-92
- (59) J.R. Welty, C.E. Wicks and R.E. Wilson, *Fundamentals of Momentum, Heat and Mass Transfer* John Wiley & Sons 1976
- (60) A. V. Luikov, *Heat and Mass Transfer*, Mir Publishers Moscow, 1980
- (61) B. Mikic, *Int. J. Heat Mass Transfe*, 10pp. 1899-1904, 1967
- (62) C.N. Satterfield and H. Resnick, *Chem, Eng. Prog.* 50, P. 504, 1952
- (63) J.D. Gaber, *Chem Eng. Prog. Symp. Ser.*, 66, pp. 76-85, 1970

- (64) R.E.Haring and R.A.Greenkorn, *AIChE J.*, 16p.3, 1970
- (65) N.Wakao and S.Kaguei, *Heat and Mass Transfer in packed Beds*, Gordon and Breach, Science PUBLISHERS, Inc, 1982
- (66) W.E.Ranz and W.R.Marshall, *Chem.Eng.Prog.*, 48, P.173, 1982.
- (67) C.H.Li and B.A.Finlayson, *Chem,eng.Sci.* 32, p.1055, 1997.
- (68) S.Yagi and D.Kunii, *AIChE j.*, 6, pp.97-104, 1990
- (69) C.Stark and J.Fricke, *Int.J.Heat Mass Transfer*, 36, pp.617-625, 1993.
- (70) N.Wakao and S.Kaguei, *Heat and Mass Transfer in packed Beds*, Gordon and Breach Science Pulishers Inc., 1982
- (71) 许世森, 移动颗粒层过滤高温除尘过程结构和参数优化实验研究, 中国机电工程学报, Vol.19, NO.5, P13, 1999
- (72) 朱海, 张立平, 颗粒移动床技术及其应用, 现代化工, NO.1, P40, 1994
- (73) 王补宣, 多孔介质中单相对流换热分析的流体渗流模式, 上海交通大学学报 Vol.33 No.8 p966, 1999
- (74) 姜培学, 王补宣等, 局部热平衡假设对多孔介质中对流换热的影响, 工程热物理研究会论文集, 武汉, P198, 1996
- (75) 姜培学, 王补宣等, 颗粒直径对多孔介质中对流换热的影响分析, 工程热物理研究会论文集, 武汉, P194, 1996
- (76) 卞卫, 程尚模, 王崇琦, 竖平板多孔通道的混合对流, 华中理工大学学报, Vol.19.No.3, P1, 1991
- (77) 卞卫, 王补宣, 含内热源多孔介质中的混合对流, 工程热物理学报, Vol.13. No.4, P394, 1992
- (78) Buikis A. and Ulanova N., Modeling of non-isothermal gas flow through a heterogeneous medium. *Int. J. Heat transfer.* Vol.39, No.8, P1743, 1996
- (79) 陶文铨, 数值传热学, 1988, 西安交通大学出版社
- (80) 雷树业, 王利群, 贾兰庆等, 颗粒床孔隙率与渗透率的关系, 清华大学学报(自然科学版), Vol.38, NO.5, P20, 1998
- (81) Solomon, P.R., Serio M.A. and Suubery, E.M., Coal pyrolysis: experiments, kinetics rates and mechamisms, *Prog. Energy Combust.Sci.*, 18, p.133, 1992
- (82) Pitt, G.J., The kinetics of the evolution of volatile products from coal, *Fuel* 41, P267, 1962
- (83) Anthony, D.B., Howard, J.B., Hottell, H.C. and Meissner, H.P., Rapid devolatilization of pulverized coal, *Int. Symp. on Combust.*, Combustion Institute, Pittsburgh, P1303, 1975
- (84) Kobayashi, H., Howard J.B. and Sarofim, A.F., Coal devolatilization at high temperature, *Int.Symp.on Combust.*, combustion Institute, Pittsburgh, p411, 1977
- (85) 傅维标, 张燕屏等, 煤粒热解通用模型(FU-Zhang模型), 中国科学, A辑 12, 1283, 1988
- (86) Lewellen.p.c, Product Decomposition Effects in Coal Pyrolysis, Ms Thesis, Dept. of Chem, Eng., M.I.T., Cambridge, 1975
- (87) Oh, M.S., Peters, W.A. and Howard, J.B., Modeling mass transport and plasticity in Bituminous coal pyrolysis, *Int. Conf. Coal Sci. Proc.*, Pittsburgh, PA, 483 (Aug.15-19, 1983)
- (88) Oh, M.S., Peters, W.A. and Howard, J.B., Modeling volatiles transport in softening coal pyrolysis, *A.I.Ch.E.mtg.*, San Francisco (Nov.25-30, 1984)
- (89) Oh, M.S., Softening Coal Pyrolysis, ScDthesis, Dept. Chem. Eng., M.I.T., Cambridge, MA (1985)
- (90) Oh, M.S., Peters, W.A. and Howard, J.B., An experimental and modeling study of Softeing Coal

- Pyrolysis A.I.Ch.E.J., 35(5), p775, 1989
- (91) Fend, C. and Steward, W.E., Practical models for isothermal diffusion and flow of gases in porous solids, Ind. Engng. Chem. Fund. m 12, p.143, 1973
- (92) Gavalas, G.R. and Wilks, K.A., Intraparticle mass transfer in coal pyrolysis, A.I.Ch.E.J., 26, p.201, 1980
- (93) Russel, W.B., Saville, D.A. and Green, M.F., A model for short residence time hydrolysis of single coal particles, A.I.Ch.E.J., 25, p.65, 1979
- (94) LaNauze, R.D., Coal devolatilization in fluidized bed combustors, Fuel, 61, p.771, 1982
- (95) Devanathan, N. and Saxena, S.C., A transport model for devolatilization of large nonplastic coal particles, Proc. Second A. Coal Conf., Pittsburgh, p.605, 1985
- (96) Blikk, A., Van Poelje, W.M.O., Van Swaaij, W.P.M. and Van Beckum, F.P.H.J., A.I.Ch.E.J., 30(10), p.1666, 1985
- (97) Babafemi, Mathematical modeling of devolatilization of large coal particles in a convective environment, Fuel, No.6, p.896-902, 1995
- (98) 胡国新 移动床中煤焦热解气化过程的试验及理论研究, 浙江大学论文集, 1997, p.119
- (99) 沈静珠译, 填充床传热与传质过程, 科学出版社, 北京, 1986



## 附录

作者在上海交通大学攻读硕士学位期间发表和录用的论文

- 1 水平导管内颗粒料层中的热渗透现象研究, 许伟、胡国新、刘雅琴, 高校化工学报 (录用)
- 2 移动颗粒床中高温渗流传热数值计算, 胡国新、许伟、程惠尔, 化工学报 (录用)
- 3 Modeling of heat gas flow through a moving packed bed, 胡国新、许伟, Proc. 2nd Int'l Conf. on Fluid Machinery & Fluid Engineering.
- 4 多孔介质中高温气体非稳态渗流传热数值计算, 胡国新、许伟, 燃烧科学与技术 (录用)
- 5 移动床颗粒料层中的渗流传热数值计算, 胡国新、许伟, 2000 年全国工程热物理学会传热传质会议
- 6 大颗粒煤在移动床种的热解模型, 田伟学、胡国新、许伟, 上海交大学报

## 致 谢

本文的全部工作是在导师程惠尔教授、胡国新副教授的亲切关怀和悉心指导下完成的。两年多来，作者取得的点滴进步都离不开两位恩师的心血和汗水，特别是胡国新老师具体负责了论文的指导工作。胡老师是此项国家自然科学基金的负责人，在工作中体现了一个高级知识分子严谨的治学态度和献身科学的崇高精神。两位恩师传授的不仅是专业知识，更重要的是他们身上所体现出的与人为善、合作、敬业的崇高品质深深影响了我，使我受益终生。在此谨向两位导师致以深深的敬意和感谢。

感谢上海交通大学工程热物理研究所的童均耕教授、马杰教授、卢万成副教授、邬小波副教授、吴慧英副教授、李艳红副教授等老师的教导，感谢师兄张志军博士后、牛录博士、杨卫华博士（生）在学术上的指点、感谢徐均岭、陆景放、陈嘉斌、汤宇浩、田树波、程国华、田伟学、陈杰、刘雅琴、田芩蔚、王明磊等同学的支持和帮助。

在作者多年艰辛的求学生涯中，我的亲人、朋友以及曾经在一起工作过的同事们给予了无私的关怀和帮助，他们在精神和物质上的支持我将终生永记。

许 伟

2001年2月于交大