



DOI:10.13364/j.issn.1672-6510.20140128

Oslo 结晶器晶体粒径分布特征的 CFD 模拟

李娜, 沙作良, 杨兴红, 朱亮

(天津市海洋资源与化学重点实验室, 天津市海洋化工与技术工程中心,
天津科技大学海洋科学与工程学院, 天津 300457)

摘要: 采用计算流体力学的研究方法, 通过多分散相模拟技术, 研究同一液体流场内不同粒径晶体在 Oslo 结晶器内的分布规律, 并对结晶器进行了分区域考察. 结果表明: 在适宜的循环液体流速下, 在结晶区域可实现稳定的晶体粒径分布; 循环速率与要求的晶体粒径直接相关; 在变径区域可实现晶体的粒径分级, 控制循环液体中的晶体粒径和晶体悬浮密度. 此研究结果可为进一步了解 Oslo 结晶器内结晶过程的进行和结晶器的设计提供参考.

关键词: CFD; Oslo 结晶器; 晶体粒径分布; 晶体悬浮密度

中图分类号: TQ019 **文献标志码:** A **文章编号:** 1672-6510(2015)04-0045-05

CFD Simulation of Crystal Size Distribution Characteristics in Oslo Crystallizer

LI Na, SHA Zuoliang, YANG Xinghong, ZHU Liang

(Tianjin Key Laboratory of Marine Resources and Chemistry, Tianjin Center of Marine Chemical Engineering and Technology Engineering, College of Marine Science and Engineering, Tianjin University of Science & Technology, Tianjin 300457, China)

Abstract: The rule of different sized crystals' distribution in the same liquid flow field in Oslo crystallizer was studied with the multiple dispersed phase simulation technique and Computational Fluid Dynamics (CFD). The study showed that a stable crystal size distribution in different regions of the crystallizer can be realized at an appropriate flow rate of the circulating liquid in the crystalline regions. The circulation rate is directly related to the required crystal size. Meanwhile, the reducing region can not only help crystal size classification, but also control the crystal size and crystal suspension density in the circulating liquid. This study can provide some reference for further researches on the crystallization process and crystallizer design.

Key words: computational fluid dynamics; Oslo crystallizer; crystal size distribution; crystal suspension density

工业结晶过程通常是在晶体处于悬浮状态下发生的, 结晶器内的液体流动状态、晶体悬浮状态等流体动力学特征与晶体的成核和生长等结晶动力学因素共同决定着最终晶体产品的质量. Sha 等^[1]的研究证明: 固相悬浮状态对结晶过程有很大的影响; 在连续结晶器中, 同一液体流场下, 不同大小的晶体其分布不同, 因此在结晶器的不同位置, 晶体的粒径分布不同; 产品晶体粒径主要取决于排料点的晶体粒径分布. 因此, 研究连续结晶过程结晶器不同位置的晶体

粒径分布, 对结晶过程控制和结晶器设计具有重要的意义.

Oslo 结晶器是在工业结晶过程中最常用的结晶器. 由于 Oslo 结晶器内晶体流动的非线性、结晶分布的不均匀性和流域的多态性^[2], 很难通过实验方法获得悬浮密度分布. 计算流体力学 (computational fluid dynamics, CFD) 是通过流体运动方程的数值解法, 研究流体在不同过程中的流动状态及其对流动过程中所发生的传质、传热等过程的影响. 近年来,

收稿日期: 2014-10-09; 修回日期: 2014-12-24

基金项目: 国际科技合作重点资助项目 (2013DFG52490); 国家自然科学基金资助项目 (21076157)

作者简介: 李娜 (1987—), 女, 河北唐山人, 硕士研究生; 通信作者: 沙作良, 教授, zsha@tust.edu.cn.

CFD 作为一种研究手段被大量用于模拟工业结晶过程^[3-4]. 将 CFD 应用于化学工程的模拟中有很高的理论价值和广泛的应用价值^[5], 可以作为研究结晶过程中液相流场和固相悬浮状态的有力工具^[6].

本文采用 ANSYS14.5 对 Oslo 结晶器内流体动力学状态进行模拟, 通过改变循环速率, 考察不同液体流场下的 Oslo 结晶器中不同粒径固相分布信息; 并根据设定的分区考察结晶器不同区域的晶体粒径分布, 据此分析 Oslo 结晶器产品粒径分布与流动状态之间的关系, 可为研究结晶过程提供理论参考, 为结晶过程实际操作提供理论依据.

1 模型

晶体悬浮的模拟属于多相流体流动的基本问题. 模拟是基于欧拉-欧拉法. 为得到不同粒径晶体在同一液体流场下的分布信息, 多相流场的模拟采用 1 个液相和 5 个以不同晶体粒径定义的固相. 模拟中, 液相和各固相均看作连续相, 且各相之间发生相互作用. 根据欧拉-欧拉方程, 多相流场中任意一相质量平衡的连续性方程为

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varphi_a \rho_a) + \nabla \cdot (\varphi_a \rho_a \mathbf{U}_a) = 0 \quad (1)$$

式中: φ_a 为 a 相的体积分数, $\sum_a \varphi_a = 1$; ρ_a 为密度, kg/m^3 ; \mathbf{U}_a 是速度矢量, m/s ; t 为时间, s ; ∇ 为散度符号.

流动速度可通过动量守恒定律来计算, 方程为

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(\varphi_a \rho_a \mathbf{U}_a) + \\ & \nabla \cdot \left[\varphi_a \left(\rho_a \mathbf{U}_a \otimes \mathbf{U}_a - \mu_{\text{eff},a} \left(\nabla \mathbf{U}_a + (\nabla \mathbf{U}_a)^T \right) \right) \right] = \\ & -\varphi_a \nabla p_a + \varphi_a S_a + \sum_{\beta=1}^{N_p} c_{\alpha\beta}^{(d)} (\mathbf{U}_\beta - \mathbf{U}_\alpha) \end{aligned} \quad (2)$$

式中: $\mu_{\text{eff},a} \left(\nabla \mathbf{U}_a + (\nabla \mathbf{U}_a)^T \right)$ 表示流体受到的剪应力; p_a 表示压力, Pa ; S_a 为传递方程的源相, 表示除扩散传递外其他因素引起的参数变化; N_p 为相的个数; d 为晶体直径, m ; $\sum_{\beta=1}^{N_p} c_{\alpha\beta}^{(d)} (\mathbf{U}_\beta - \mathbf{U}_\alpha)$ 为流体所受外力提供的动量, 此外力除循环管内流体提供的能量之外, 主要指连续相 (α 相) 与分散相 (β 相) 间的各种相互作用力, 包括湍流阻力、曳力和形体阻力等. 为了简化模拟, 仅考虑起主要作用的曳力, 相间曳力系数 $c_{\alpha\beta}^{(d)}$ 由式(3)估算.

$$c_{\alpha\beta}^{(d)} = \frac{3}{4} \frac{c_D}{d} \varphi_\alpha \rho_\alpha |\mathbf{U}_\beta - \mathbf{U}_\alpha| \quad (3)$$

系数 c_D 可有多种模型, 本研究中使用 Schiller 等的模型^[7]:

$$c_D = \max \left(\frac{24}{Re} (1 + 0.15 Re^{0.687}), 0.44 \right) \quad (4)$$

式(4)中的雷诺数定义为

$$Re = \frac{\rho_\alpha |\mathbf{U}_\beta - \mathbf{U}_\alpha| d_\beta}{\mu_\alpha} \quad (5)$$

式中: μ_α 为流体黏度, $\text{Pa}\cdot\text{s}$.

工业结晶器内的流动状态一般是在湍流下进行的, 流体的湍流特征可用 κ - ε 、 κ - ω 模型及雷诺剪应力等湍流模型进行描述. 一般认为标准 κ - ε 模型^[8] 可以满足工程流场计算的要求. 根据标准 κ - ε 模型, 式(2)中的涡流黏度项可表示为

$$\mu_{\text{eff},\alpha} = \mu_\alpha + \mu_{T,\alpha} \quad (6)$$

式中: $\mu_{T,\alpha}$ 为湍流黏度, $\text{Pa}\cdot\text{s}$.

$$\mu_{T,\alpha} = C_\mu \rho_\alpha \frac{k_\alpha^2}{\varepsilon_\alpha} \quad (7)$$

式中: C_μ 为常数; k_α 为湍动能, m^2/s^2 ; ε_α 为湍动能耗散, m^2/s^3 .

2 模拟方法

Oslo 结晶器的透视图见图 1.

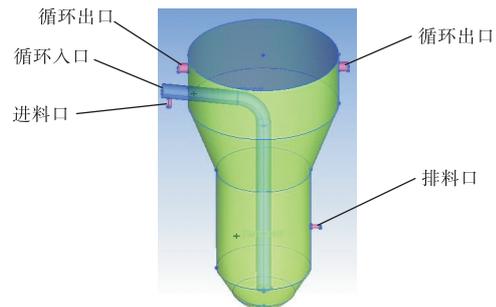


图 1 Oslo 结晶器透视图

Fig. 1 Structure chart of Oslo crystallizer

结晶器各部分结构的尺寸参数为: 结晶器高度 385 mm、结晶器直径 200 mm、进料口直径 5 mm、排料口直径 5 mm、循环入口直径 20 mm、循环出口直径 12.5 mm、结晶器体积 6.7 L. 流体流动的基本动力来源于结晶器循环液入口. 为保证液体流动均匀、与实际使用的结晶器相似, 循环液设 2 个出口. 为避免复杂的结晶过程模拟, 对比结晶过程所产生的晶体粒

径分布,设1个进料口,在此进料口处连续进入一定粒径分布的晶体.为维持连续结晶过程的模拟,设立1个排料口.

为研究结晶器内不同区域中晶体粒径的分布情况,在充分考虑区域大小、区域位置等因素对结果呈现的影响,参考结晶器晶体分布的基础上,将结晶器分为大小不等的9个区域.区域的划分方法是用距轴心42 mm的曲面将结晶器纵向分为2个区,之后用横向距结晶器底部分别为118.65、208.65、238.65、308 mm的4个水平面将结晶器分为5段,横纵向面将结晶器分为9个区域,如图2所示.

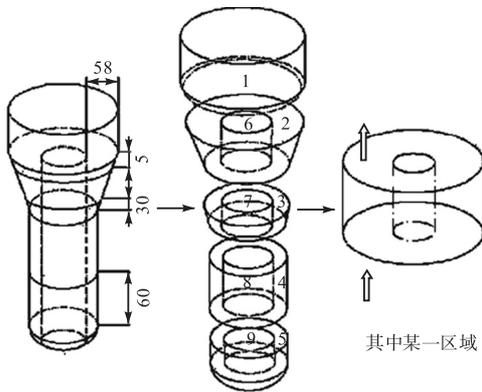


图2 结晶器分区示意图

Fig. 2 Schema of crystallizer zoning

基于欧拉-欧拉模型,在模拟过程中,将晶体设为分散相,将液相设为连续相^[8-9].晶体密度为 1984 kg/m^3 ,黏度取为无限小,近似等于零;液相为 20°C 饱和KCl溶液,密度为 1174 kg/m^3 ,流体黏度为 $0.001 \text{ Pa}\cdot\text{s}$.为模拟不同粒径晶体悬浮状态和晶体粒径分布的信息,分散相设为5项,各项以不同粒径为基本特征.5个分散相的晶体粒径分别为0.3、0.5、0.7、0.9、1.0 mm.为模拟连续操作状态,循环液进口为清液进料,主要提供结晶器内的流体流动.不同流场的改变,通过改变进口液体流速实现,连续操作的晶体喂料是通过在进料口处设定一定的晶体体积分数,从而提供出料口晶体排出的体积分数.以此种方法近似模拟冷却结晶过程固体形成与排出过程.在一般结晶过程中,不同粒径的晶体在结晶器中呈近似的正态分布^[9],因此对于目标粒径为0.7 mm的冷却连续结晶过程,依据正态分布,设定进料口总的晶体体积分数为11%,对应各粒径晶体的体积分数分别为1.2%、2.2%、4.2%、2.2%、1.2%.

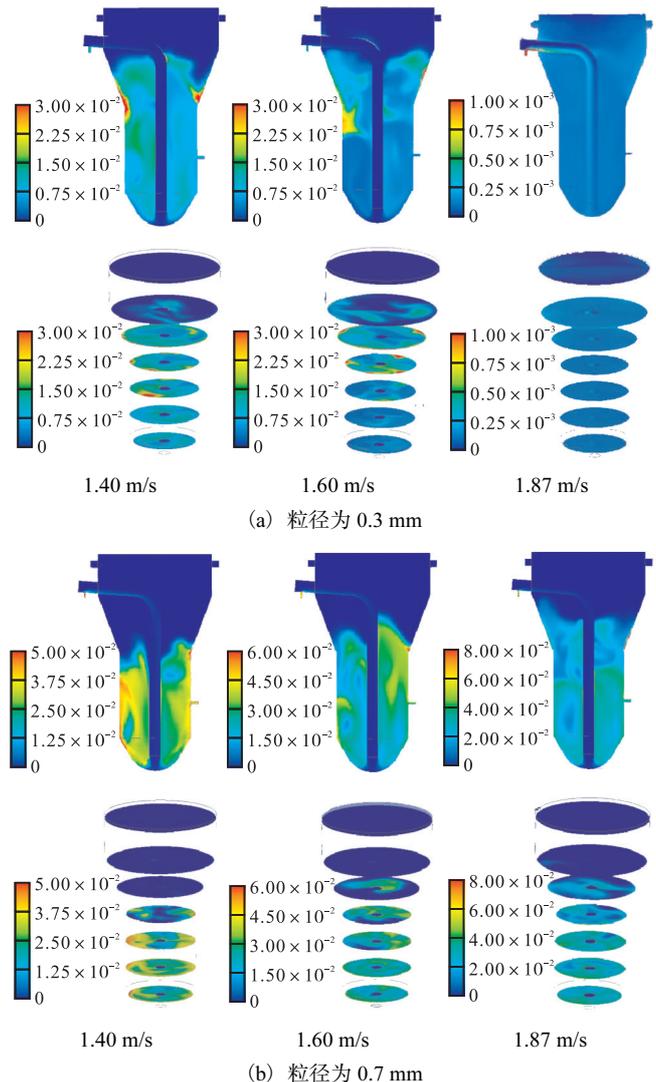
模拟的基本参数设定如下:进料口的流速为 0.3 m/s ;进料口晶体的体积分数为11%;进口液相的

体积分数为89%;出料口为恒定质量流率,按进料质量速率和出口直径确定,以保证进料质量与出料质量恒定.循环液进口流速是提供结晶器内流场的动力输入,改变液体流速,相当于改变流体流动的能量,为考察不同液体流场对结晶器内晶体分布的影响,模拟中分别使用的进液流速为1.40、1.60、1.87 m/s.

3 结果与讨论

3.1 不同液体流场对晶体分布的影响

对Oslo结晶器而言,结晶器内部没有任何搅拌装置,其液体流场是由不同的循环流量确定的,模拟中使用不同循环液进口流速,相当于在结晶器内提供不同的液体流场.模拟研究了不同循环液进口流速下不同粒径晶体在结晶器中的分布.为简单起见,图3中只给出了不同循环液进口流速下,较小(0.3 mm)、中间(0.7 mm)和最大(1.0 mm)粒径晶体的分布情况.



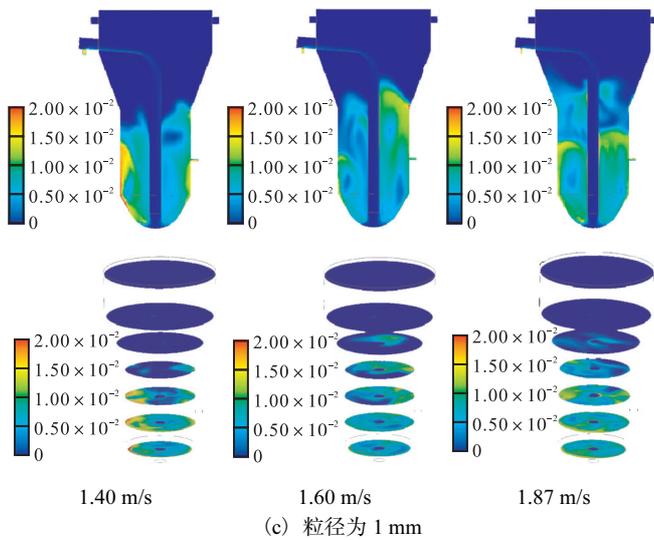


图3 不同循环液进口流速下的晶体悬浮密度分布

Fig.3 Crystal volume fraction distribution at different circulation rate

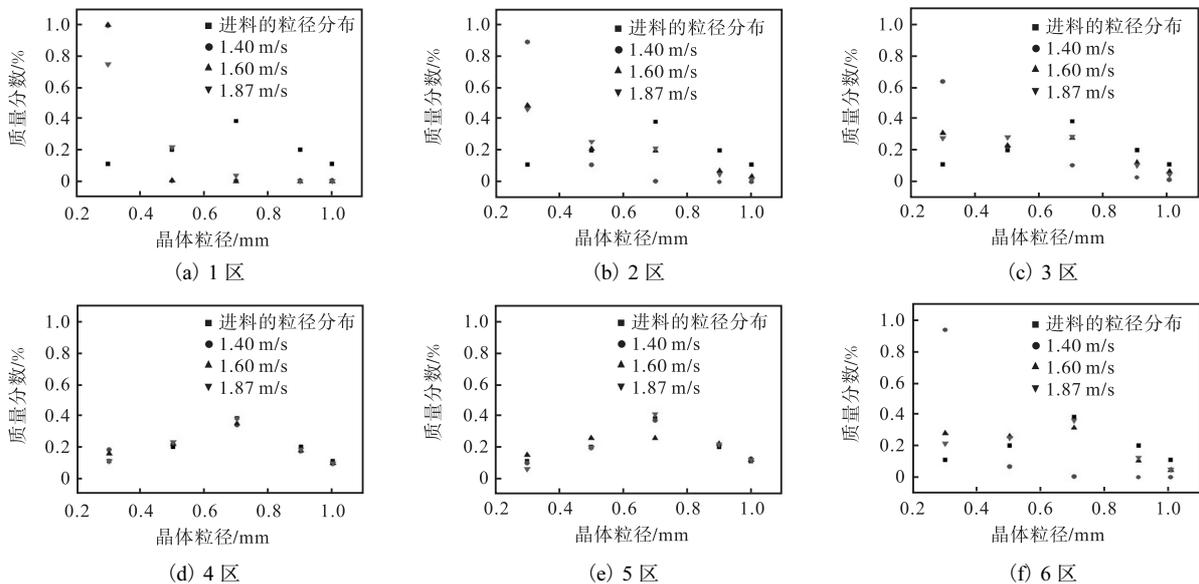
由图3可以看出:对于较小的晶体,在较小的循环液进口流速下,已经达到完全悬浮状态;而在较大的循环液进口流速下,大部分晶体已经成为液体带出状态,在结晶器内的小晶体已经非常少,大部分从循环液出口流出。这表明,在较大的循环液进口流速下,小粒径晶体参与整体循环,在结晶器内的晶体体积分数与循环液中接近。对于较大粒径晶体,在较小的循环液进口流速下,没有达到全部悬浮,因而在结晶器上部几乎见不到较大粒径的晶体,随着循环液进口流速的提高,使得较大粒径晶体在结晶区内达到较好的悬浮,但是在循环液出口处几乎没有此粒径的晶体,这种粒径的晶体不能参与晶体循环。当循环流速为1.87 m/s时,0.3 mm的晶体参与整体循环,大于此

粒径的晶体不参与整体循环。寻找适宜的循环流速,使得要求的粒径晶体参与循环和大于此粒径的晶体不参与循环,是结晶器设计中重要的参数。此结果证明,利用本文的研究方法,可帮助完成此设计需求。

3.2 不同循环液进口流速下结晶器内各区域的晶体粒径分布

在Oslo结晶器的设计中,结晶器的不同区域有不同的功能:结晶器的直管区域的主要功能是提供晶体的成长,并使晶体达到一定的分级,保证产品的粒径分布;上部区域的主要功能是对循环液中的晶体粒径进行控制,确保循环液中仅有较小的晶体,减少循环液中的固液比,降低循环泵对晶体的破碎;中部径变区的主要功能是建立结晶区与循环粒径分级区的粒径变化,保证结晶区产品的粒径分布和循环液中仅有较小晶体,以减小大粒径晶体的破碎。为考察各区域的功能与操作条件的关系,利用以上的模拟结果,将结晶器内各分区的晶体粒径分布与进料的粒径分布进行比较,结果见图4。

由图4可以看出,在模拟的3个循环液进口流速下,结晶器内各区域晶体分布有较大差别:结晶器下部(4、5、8、9区)的结晶区的粒径分布与进料基本相同,说明在模拟的状态下,各种粒径的晶体达到了悬浮的要求;在结晶器上部,除在较大循环液进口流速下,有部分粒径大于0.3 mm的晶体以外,循环液中几乎仅有粒径为0.3 mm的晶体,说明在此结晶器内,循环液流速小于1.6 m/s情况下,可以较好地控制循环液中的晶体粒径,使其仅有小晶体;在结晶器变径区,具有大粒径晶体的分布,可以看出达到了大小晶体的分级效果。



(a) 1区

(b) 2区

(c) 3区

(d) 4区

(e) 5区

(f) 6区

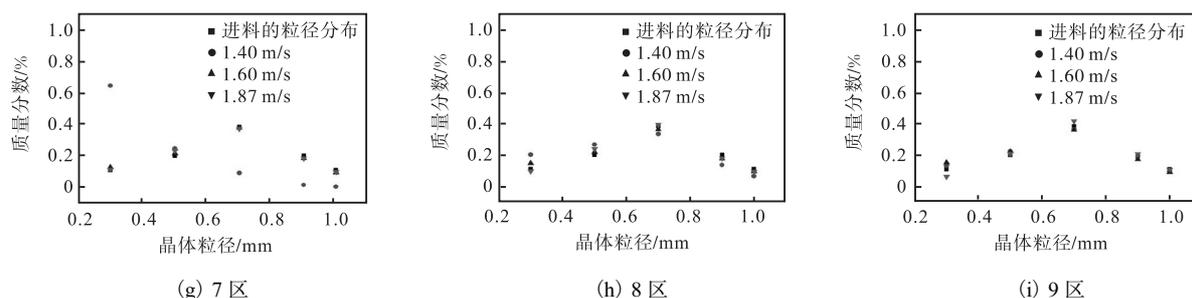


图4 不同循环速率的各区域晶体粒径分布

Fig. 4 Crystal size distribution at different circulation rate

4 结 语

采用计算流体力学的研究方法,通过多分散相模拟技术,研究了同一液体流场内不同粒径晶体在Oslo 结晶器内的分布规律.通过对结晶器不同区域的粒径分布研究,证实了在适宜的循环液进口流速下,在结晶区域可实现稳定的晶体粒径分布.循环速率与要求晶体粒径直接相关.同时,变径区域可实现晶体的粒径分级,控制循环液体中的晶体粒径和晶体悬浮密度.此研究结果为进一步了解 Oslo 结晶器内结晶过程的进行和结晶器的设计提供了理论基础.应用本文方法,可为特殊用途的 Oslo 结晶器设计提供基础数据.

参考文献:

- [1] Sha Z L, Palosaari S. Modeling and simulation of crystal size distribution in imperfectly mixed suspension crystallization[J]. Journal of Chemical Engineering of Japan, 2002, 35(11): 1188-1195.
- [2] Kwauk M, Li J. Fluidization regimes[J]. Power Technology, 1996, 87(3): 193-202.
- [3] Wei H, Garside J. Application of CFD modeling to precipitation systems[J]. Chemical Engineering Research and Design, 1997, 75(2): 219-227.
- [4] Pinho F T, Piqueiro F M, Proenca M F, et al. Power and mean flow characteristics in mixing vessels agitated by-hyperboloid stirrers[J]. The Canadian Journal of Chemical Engineering, 1997, 75(5): 832-842.
- [5] 黄永春,唐军,谢清若,等. 计算流体力学在化学工程中的应用[J]. 现代化工, 2007, 27(5): 65-68, 74.
- [6] 武首香,沙作良. 计算流体力学在工业结晶中的应用进展[J]. 盐业与化工, 2013, 42(3): 13-16, 23.
- [7] Schiller L, Naumann A. Fundamental calculations in gravitational processing[J]. Zeitschrift des Vereines Deutscher Ingenieure, 1933, 77: 318-320.
- [8] 李静海. 颗粒流体复杂系统的多尺度模拟[M]. 北京: 科学出版社, 2005: 37-40.
- [9] 王维,李佑楚. 颗粒流体两相流模型研究进展[J]. 化学进展, 2000, 12(2): 208-217.

责任编辑: 常涛