

基于 CFD 模拟的搅拌反应釜 流场分析及优化设计

夏 杰¹, 刘雪江¹, 李明海², 林 军³, 孙露静³

(1.南京凯燕化工有限公司, 江苏 南京 210023)

(2.南京师范大学化学与材料科学学院, 江苏 南京 210023)

(3.南京师范大学常州创新发展研究院, 江苏 常州 213022)

[摘要] 运用计算流体力学(computational fluid dynamics, CFD)软件对搅拌反应釜进行数值模拟,通过联立瞬态三维可压缩流体的质量守恒方程、瞬态三维可压缩流体的动量守恒方程、标准的 $k-\varepsilon$ 方程,在一定的边界条件和简化情况下,分别针对常见的 4 种不同类型搅拌桨,对反应釜内部流场分布进行了分析,通过流场分析探讨反应釜混合效果,为搅拌反应釜的选型提供数值依据,为搅拌反应釜的优化设计提供参考方案。

[关键词] CFD, 搅拌反应釜, 流场分布

[中图分类号] TQ021.8 [文献标志码] A [文章编号] 1672-1292(2018)03-0087-06

Analysis of the Stirred Reactor's Flow Distribution Based on CFD and the Optimization Design of the Stirred Reactor Simulation

Xia Jie¹, Liu Xuejiang¹, Li Minghai², Lin Jun³, Sun Lujing³

(1.Nanjing Kai Yan Chemical Co., Ltd, Nanjing 210023, China)

(2.School of Chemistry and Materials Science, Nanjing Normal University, Nanjing 210023, China)

(3.Changzhou Institute of Innovation and Development, Nanjing Normal University, Changzhou 213022, China)

Abstract: According to simultaneous equations of mass conservation equations of transient three-dimensional compressible fluids, momentum conservation equations for transient three-dimensional compressible fluids and standard $k-\varepsilon$ equation, flow field distribution inside reaction kettles with four common different types of impeller are analyzed under the situation of certain boundary conditions and simplification, based on CFD numerical simulation. The mixing effect of reaction kettle is discussed by flow field analysis and the optimization scheme is proposed for the design selection of stirring reactor.

Key words: CFD, stirred reactor, distribution of flow field

搅拌反应釜是化工生产的主要设备之一。搅拌反应釜结构的不同会有不同的混合效果。搅拌反应釜结构复杂,传统的设计方法过程复杂,耗费时间长,且很难达到设计的最优化。CFD 软件已广泛应用于各种设备的模拟优化过程中,不仅可以节约时间和实验成本,还可得到更直观的结果。本文选用 CFD 模拟的方法^[1],对不同结构搅拌桨的反应釜内流场进行分析^[2],为搅拌反应釜的选型和优化设计提供参考。

1 搅拌反应釜参数

1.1 搅拌反应釜结构参数

图 1 为反应釜的结构简图。

收稿日期:2017-10-30.

基金项目:江苏省科技厅前瞻性联合研究项目(211090B51609)。

通讯联系人:李明海,讲师,研究方向:化学过程模拟。E-mail:ag2159@163.com

图 1 中,搅拌轴直径 $d=0.06\text{ m}$;反应釜高度 $H=1.1\text{ m}$;液面高度 $h=0.8\text{ m}$;反应釜直径 $T=1\text{ m}$;搅拌桨的安装高度 $C=0.35\text{ m}$;搅拌桨直径 $D=0.333\text{ m}$.

1.2 反应釜结构选择

本文从搅拌桨结构变化来分析反应釜内流场的变化.选取较为常见且适用范围广的涡轮式和桨式搅拌桨进行模拟,选择六叶圆盘涡轮桨、六叶开启涡轮、 45° 下推式斜叶桨及 45° 上推式斜叶桨进行模拟计算,其几何模型如图 2 所示.

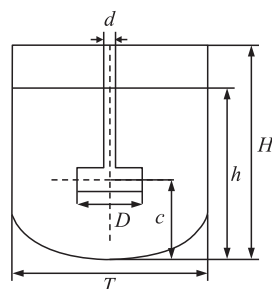
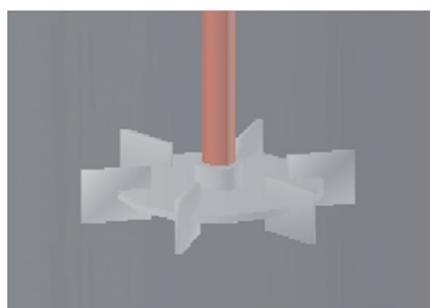


图 1 反应釜结构示意图

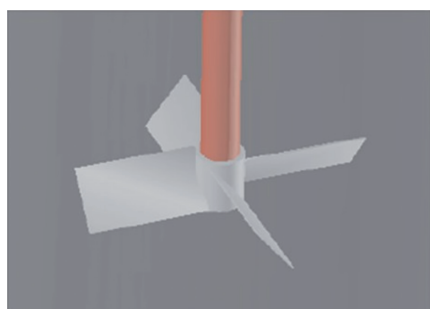
Fig. 1 The diagram of mixing reaction tank



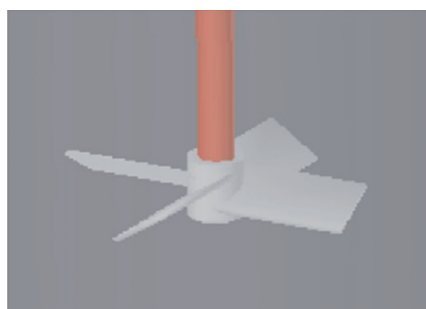
(a) 六叶圆盘涡轮桨



(b) 六叶开启涡轮



(c) 45° 下推式斜叶桨



(d) 45° 上推式斜叶桨

图 2 搅拌桨几何模型

Fig. 2 The geometric model of four impellers

2 CFD 模拟计算

2.1 边界条件设置

搅拌反应器的流体区域分为动区域与静区域^[3].边界条件的定义主要包括搅拌轴、搅拌桨、液面、动区域、静区域及交界面,具体设置如下:

- (1) 搅拌轴设置为动壁面(moving wall),转速为绝对速度;
- (2) 搅拌桨叶设置为动壁面(moving wall),转速相对于桨叶流体区域为 0;
- (3) 液面设置为对称(symmetric)边界条件;
- (4) 搅拌桨所在的流体区域为动区域,釜中除动区域外的流体区域均为静区域,其中动区域设置采用多重参考系的方法^[4];
- (5) 动静两区域的交界面设置为滑移面类型(interface slip),搅拌釜器壁设置为无滑移壁面(wall)^[5].

2.2 计算方法

多数情况下,搅拌反应器内液体流动既要满足对流循环的要求,又必须处于湍流状态.本文选用标准 $k-\epsilon$ 湍流模型来模拟湍流状态下搅拌反应器中的湍流特性^[6].文中所有模拟均不考虑温度的变化,采用冷模处理,因此只涉及质量守恒方程与动量守恒方程.采用非结构化四面体网格对搅拌反应釜计算区域进行离散,计算方法采用有限体积法离散守恒方程,差分格式采用二阶迎风格式,压力和速度间的耦合采用 SIMPLE

算法^[7].

瞬态三维可压流体的质量守恒方程为:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0,$$

式中, ρ 为密度; t 为时间; u 、 v 和 w 为速度在 x 、 y 和 z 方向的分量.

本文中流体不可压, 密度 ρ 为常数, 故所使用的质量守恒方程为:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0.$$

瞬态三维可压流体在 x 、 y 和 z 3 个方向的动量守恒方程为:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \text{div}(\rho u u) &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + F_x, \\ \frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \text{div}(\rho v u) &= -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + F_y, \\ \frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \text{div}(\rho w u) &= -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} + F_z, \end{aligned}$$

式中, p 为流体微元体上的压力; τ_{xx} 、 τ_{xy} 和 τ_{xz} 是因分子黏性作用而产生的作用在微元体表面上的黏性应力 τ 的分量; F_x 、 F_y 和 F_z 是微元体上的体力.

本文中流体为牛顿流体, 黏性应力 τ 与流体的变形率成比例, 第二黏度取 $\lambda = -2/3$, 由此动量守恒方程变为:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \text{div}(\rho u u) &= \text{div}(\mu \text{ grad } u) - \frac{\partial p}{\partial x} + S_u, \\ \frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \text{div}(\rho v u) &= \text{div}(\mu \text{ grad } v) - \frac{\partial p}{\partial y} + S_v, \\ \frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \text{div}(\rho w u) &= \text{div}(\mu \text{ grad } w) - \frac{\partial p}{\partial z} + S_w, \end{aligned}$$

式中, S_u 、 S_v 和 S_w 为动量守恒方程的广义源项.

标准 k - ε 模型是由 Lander 和 Spalding 于 1972 年提出的. 在标准 k - ε 模型中, k 和 ε 是两个基本未知量, 与之相对应的输运方程为:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho k u_i)}{\partial x_i} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M + S_k, \\ \frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \varepsilon u_j)}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + G_{3\varepsilon} G_b) - G_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} + S_\varepsilon, \end{aligned}$$

式中, G_k 为由平均速度梯度引起的湍动能 k 的产生项; G_b 为由浮力引起的湍动能 k 的产生项; Y_M 为可压湍流中脉动扩张的贡献; $C_{1\varepsilon}$ 、 $C_{2\varepsilon}$ 和 $C_{3\varepsilon}$ 为经验常数; σ_k 和 σ_ε 分别为与湍动能 k 和耗散率 ε 对应的 Prandtl 数; S_k 和 S_ε 为用户定义的源.

本文使用上述关系简化后的 k - ε 模型, 即:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho k u_i)}{\partial x_i} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k - \rho \varepsilon, \\ \frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \varepsilon u_j)}{\partial x_j} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + \frac{C_{1\varepsilon} \varepsilon}{k} G_k - G_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k}. \end{aligned}$$

通常釜式反应器内流体流动状态用雷诺数 Re 来判断:

$$Re = \frac{d^2 n \rho}{\mu},$$

式中, d 为搅拌器直径; n 为搅拌转速; ρ 为液体密度; μ 为液体动力黏度. 当 $Re \geq 1\,000$ 时, 流体在釜内做湍流流动^[8]. 本文模拟以水为搅拌介质, 搅拌反应釜的转速为 25 rad/min. 经计算该速度下反应釜内流体处

于湍流状态,在此条件下,对不同结构搅拌桨的反应釜内流场进行分析.

3 结果与讨论

3.1 搅拌反应釜中流场的宏观规律

图 3 为 4 种不同的搅拌装置下搅拌反应釜 $y=0$ 截面的内部流场速度矢量图,可以直观地表达物料在反应釜内部的总体运动趋势,得到反应釜内流场的宏观规律.

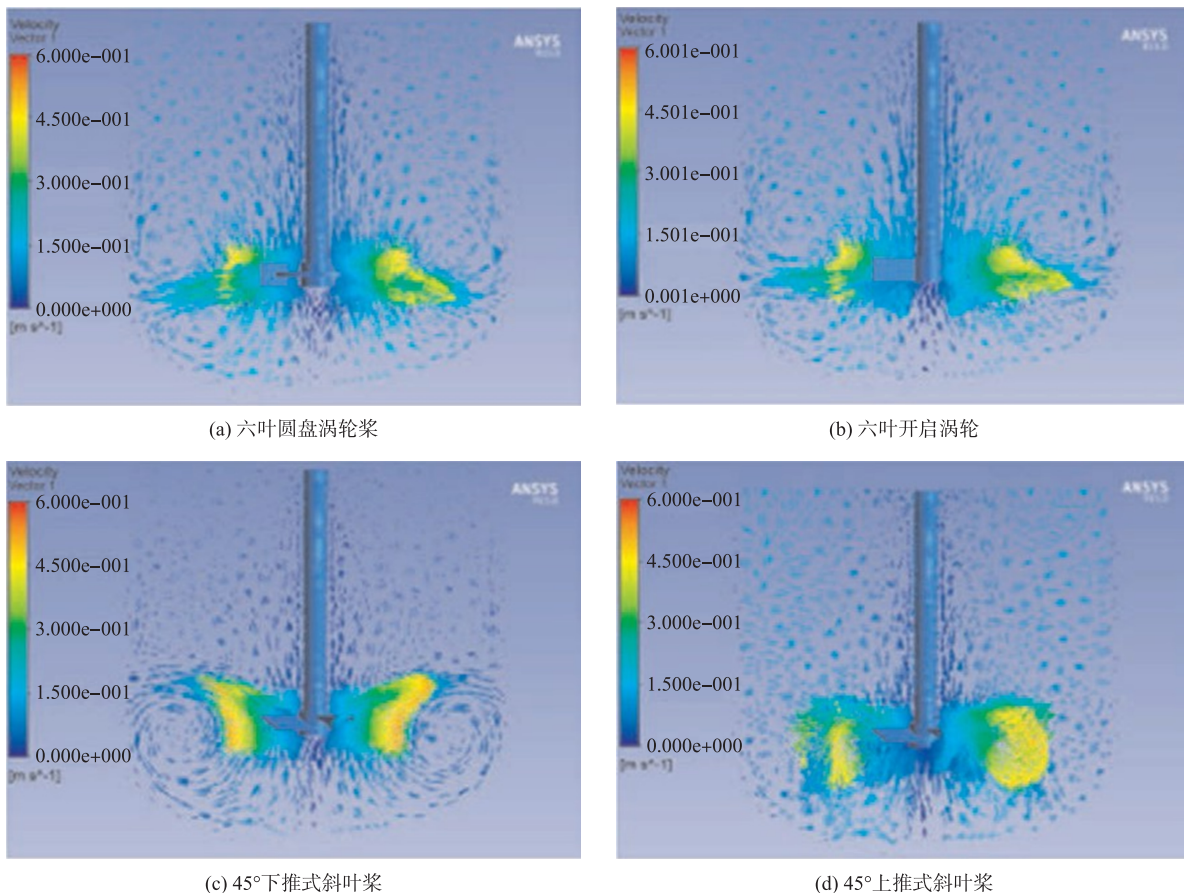


图 3 $y=0$ 截面速度矢量图

Fig. 3 The velocity vectors in the plane of $y=0$

图 3 中(a)、(b)、(c)、(d)分别为六叶圆盘涡轮桨、六叶开启涡轮、45°下推式斜叶桨与 45°上推式斜叶桨在 $y=0$ 截面上的速度矢量图,图中不同的颜色代表不同的速度大小,颜色由蓝色到红色表示速度逐渐增大.从图 3 中可以看出,搅拌轴附近和搅拌桨正下方流体速度较小,存在一定的死区.其中,六叶圆盘涡轮桨与六叶开启涡轮桨在釜中形成上下两个“双循环”流动,可以对釜中流体起到很好的剪切作用,但由于圆盘阻挡了上下流体的流动,导致六叶圆盘涡轮桨上流体的循环减弱. 45°下推式斜叶桨也有“双循环”流动现象出现,但相对较弱. 45°上推式斜叶桨在釜内流动较紊乱,较下推式斜桨相对速度有所提高.

3.2 搅拌反应釜内流场的湍动性能

为便于观察,本文取 4 种桨型在 $y=0$ 截面的湍流强度等值线图来进行对比分析,如图 4 所示.

图 4 中的(a)、(b)、(c)、(d)图分别为六叶圆盘涡轮桨、六叶开启涡轮桨、45°下推式斜叶桨与 45°上推式斜叶桨在 $y=0$ 截面的湍流强度等值线图,图中不同颜色代表不同的湍流强度,颜色由蓝色到红色表示湍流强度逐渐增大.从图 4 可以看出,搅拌桨叶附近区域的流体湍流强度较高,说明这些区域的混合效果较好. 45°下推式斜叶桨仅在反应釜的下方产生湍动,上方几乎不存在湍动. 45°上推式斜叶桨在反应釜上方产生很好的湍动,但湍动的强度不及六叶圆盘涡轮桨和六叶开启涡轮桨.总体而言,六叶开启涡轮的湍流强度在釜内的分布及大小都优于其余 3 种桨.

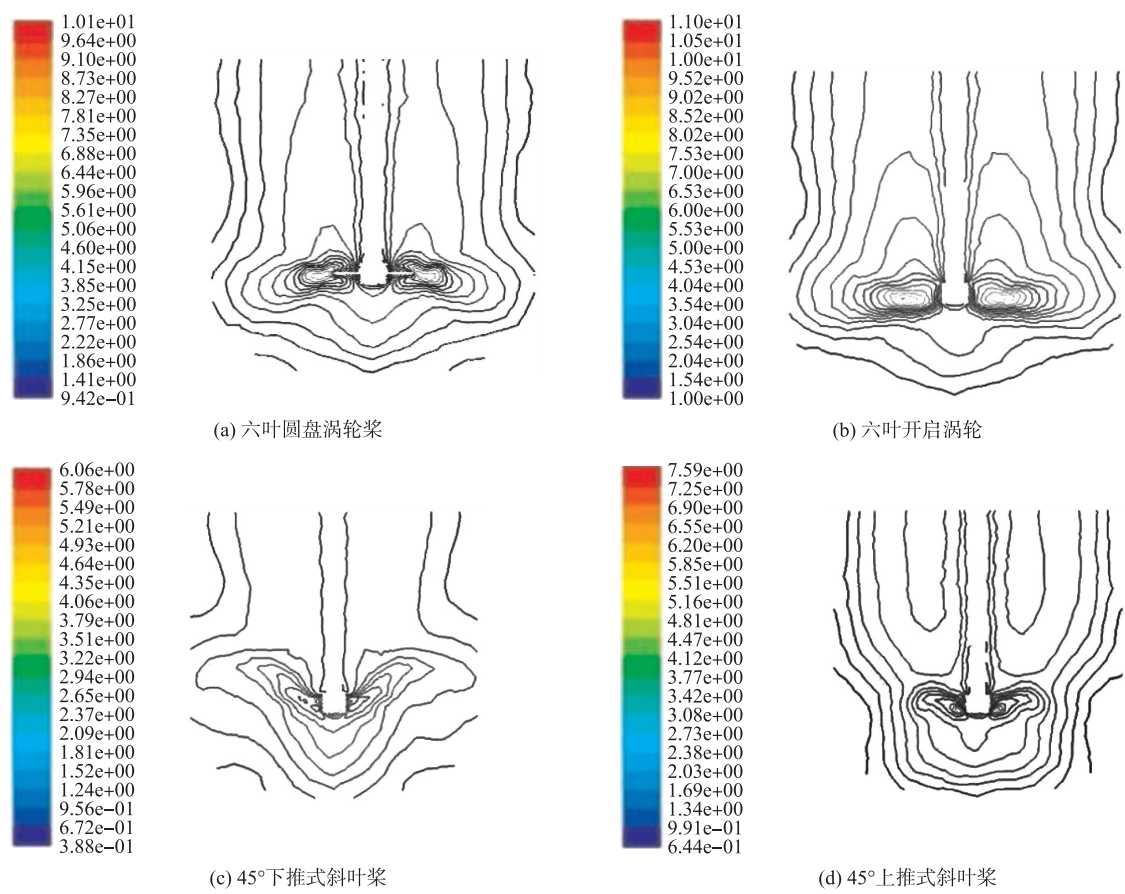


图 4 $y=0$ 截面湍流强度等值线图
Fig. 4 The contour map of turbulent intensity in the plane of $y=0$

3.3 湍流动能曲线图分析

为考察反应釜中不同位置流场的变化趋势,在反应釜的轴向和径向的不同位置各取 4 条直线来进行分析. 在 $y=0$ 截面上分别取轴向直线 line1($x=0.4$)、line2($x=0.3$)、line3($x=0.2$)、line4($x=0.1$) 4 条直线,取径向直线 line5($z=0.8$)、line6($z=0.6$)、line7($z=0.4$)、line8($z=0.2$) 4 条直线. 选取最能体现湍流动能变化的 line3、line7 来分析反应釜内轴向和径向湍动情况.

图 6 与图 7 分别是 4 种搅拌桨在 line3 与 line7 上的湍动能分布曲线图. 可以看出,搅拌桨叶处的湍动能最大;六叶开启圆盘的湍动能明显高于其他几种搅拌桨;斜叶桨的湍动能都比较低;反应釜中流体的湍动能分布呈径向对称分布.

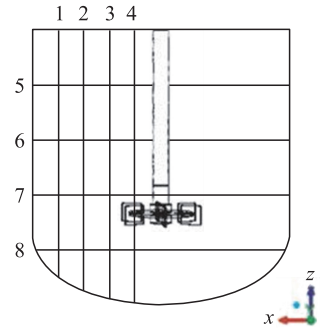


图 5 直线位置示意图
Fig. 5 The diagram of linear position

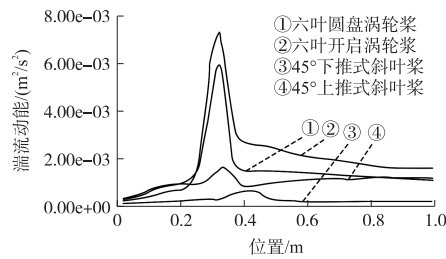


图 6 line3 湍流动能曲线图
Fig. 6 The curve diagram of turbulence kinetic energy in line3

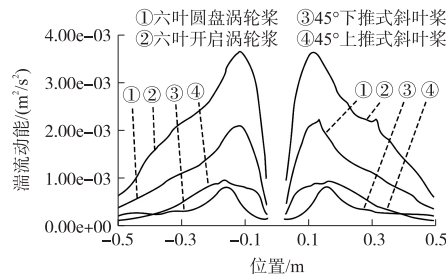


图 7 line7 湍流动能曲线图
Fig. 7 The curve diagram of turbulence kinetic energy in line7

3.4 搅拌器剪切性能比较

桨叶的转动对流体产生剪切作用,进而产生搅拌效果.釜中不同位置受到的剪切作用不同,不同工艺过程往往需要不同程度的剪切作用,因此剪切性能的分析对搅拌器的选择有重要的作用.

图 8 与图 9 分别是 4 种搅拌桨在 line3 与 line7 上的剪切率分布曲线.可以看出,两种直叶桨的剪切率比斜叶桨大很多,4 种搅拌桨的剪切力都集中在桨叶周围区域,离桨叶较远区域剪切力很弱,几乎为零.

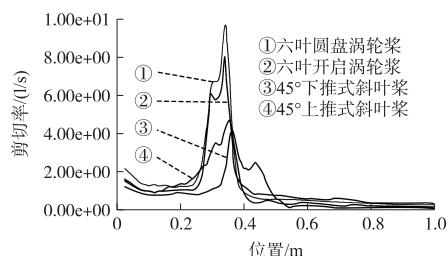


图 8 line3 剪切率曲线图

Fig. 8 The curve diagram of strain rate in line3

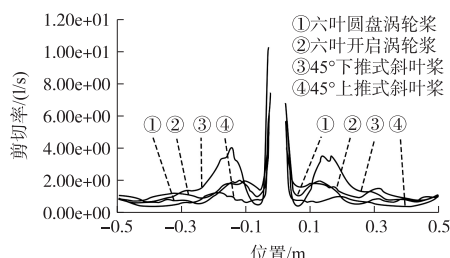


图 9 line7 剪切率曲线图

Fig. 9 The curve diagram of strain rate in line7

4 结论

本文通过分析不同条件下反应釜内部流场规律,得出以下几点结论:

(1) 两种涡轮搅拌桨在旋转时可以形成明显的“双环流”,造成高度湍动的径向流动,可以促进反应釜内物料的混合,适用于气体及不互溶液体的分散和液液相反应过程.

(2) 两种斜叶桨湍动能力较低,剪切能力也相对较弱,适用于对于剪切力要求较低的生物反应器.由于桨叶倾斜方向的不同,下斜桨适用于固体的溶解,上斜桨适用于固体的悬浮.

[参考文献] (References)

- [1] 周国忠,施力田,王英琛. 搅拌反应器内计算流体力学模拟技术进展[J]. 化学工程, 2004, 32(3): 28-32.
ZHOU G Z, SHI L T, WANG Y C. Computational fluid dynamics progress in stirred tank reactors[J]. Chemical engineering, 2004, 32(3): 28-32. (in Chinese)
- [2] 方德明,陈涛,杨象岳,等. 基于 CFD 流场分析的反应釜搅拌器结构改进[J]. 轻工机械, 2014, 32(2): 95-98.
FANG D M, CHEN T, YANG X Y, et al. Improvement of reaction kettle agitator based on CFD analysis[J]. Light industry machinery, 2014, 32(2): 95-98. (in Chinese)
- [3] 朱自强. 应用计算流体力学[M]. 北京:北京航空航天大学出版社, 1998.
ZHU Z Q. Applied computational fluid dynamics[M]. Beijing: Beihang University Press, 1998.
- [4] 王小纯,占细峰. 基于 CFD 的搅拌反应罐内部流场的数值模拟[J]. 轻工机械, 2013, 31(1): 9-14.
WANG X C, ZHAN X F. Numerical simulation of the internal flow field of stirring reaction tank based on the CFD[J]. Light industry machinery, 2013, 31(1): 9-14. (in Chinese)
- [5] 徐胜利,张博伦,程昉. 基于 CFD 流场模拟的反应釜结构设计[J]. 化工进展, 2016, 35(增刊 2): 401-406.
XU S L, ZHANG B L, CHENG F. Structural design of stirred reactors based on CFD fluid field simulation[J]. Chemical industry and engineering progress, 2016, 35(Suppl. 2): 401-406. (in Chinese)
- [6] ZHANG Q, YONG Y, MAO Z S, et al. Experimental determination and numerical simulation of mixing time in a gas-liquid stirred tank[J]. Chemical engineering science, 2009, 64(12): 2926-2933.
- [7] 王炉钢,汤利亚,赵建明. 液相催化加氢釜搅拌改造设计的 CFD 研究[J]. 化工与医药工程, 2015, 36(3): 46-49.
WANG L G, TONG L Y, ZHAO J M. CFD study of reconstruction of agitating system for liquid phase catalytic hydrogenation vessel[J]. Chemical and pharmaceutical engineering, 2015, 36(3): 46-49. (in Chinese)
- [8] 陈乙崇. 搅拌设备设计[M]. 上海:上海科学技术出版社, 1989.
CHEN Y C. Design of mixing equipment[M]. Shanghai: Shanghai Scientific and Technical Publishers, 1989.

[责任编辑:严海琳]