

基于 CFD 的离子交换柱流阻特性分析与流体分布模拟

Flow characteristics analysis and fluid distribution simulation for ion exchange column using CFD method

林海波¹ 潘万贵¹ 王伟平² 丁力² 杨健²

LIN Hai-bo¹ PAN Wan-gui¹ WANG Wei-ping² DING Li² YANG Jian²

(1. 台州职业技术学院机电研究所, 浙江 台州 318000; 2. 浙江大学化工机械研究所, 浙江 杭州 310027)

(1. Institute of Mechanical & Electrical Technology, Taizhou Vocational & Technical College, Taizhou, Zhejiang 318000, China; 2. Institute of Process Equipment, Zhejiang University, Hangzhou, Zhejiang 310027, China)

摘要: 基于计算流体动力学数值模拟方法,以阴离子交换树脂(717)为内层析介质,对某一离子交换柱内的流体分布和流阻特性分别进行研究。为便于模拟,以流量 $3 \text{ m}^3/\text{h}$,在交换柱内呈层流状态的水作为交换柱内的料液。在假设流体均布前提下,采用二维多孔介质模型对离子交换柱内树脂填料的流阻特性进行模拟,分析不同工况及结构对交换柱内流体压降的影响。以离子交换柱上封头分布器为研究对象,对层析柱内的流体分布情况进行模拟。针对模拟结果,改进分布器结构,一定程度上实现流体的均匀分配,为下一步系统搭建与仿真提供数据支持,为设计新型离子交换柱提供结构优化及工程放大提供理论依据和模型支持。

关键词: 离子交换柱;流阻特性;流体分布;数值模拟

Abstract: Based on the numerical simulation method on computational fluid dynamics (Computational fluid dynamics, CFD), and using anion exchange resin (717) as internal chromatography media, the fluid distribution and flow resistance characteristics in ion exchange column were studied respectively. For the convenience of simulation, water was selected as feed liquid, at the flow rate of $3 \text{ m}^3/\text{h}$, appeared laminar flow state in the exchange column. On the assumption that the fluid uniform premise, the flow resistance characteristics for the column ion exchange resin filler was simulated by the two-dimensional porous media model, and the effects of the exchange column of fluid pressure drop on different working conditions and structure. Taking the ion exchange column head distributor as the research object, the fluid distribution of the chromatography column was simulated. According to the simulation results, distributor con-

figuration was improved to achieve a uniform distribution of fluid to some extent, which could offer system supporter for the next system building and simulation, and further provide theoretical foundation and model support for structure optimization and engineering enlargement for the design of new ion exchange column.

Keywords: ion exchange column; flow resistance characteristics; flow distribution; numerical simulation

近年来随着计算机技术的迅猛发展和计算方法的不断进步,基于传统的试验方法和流程尺度模拟计算很难取得内部流动的详细信息。正因为如此,计算流体动力学(computational fluid dynamics, CFD)成为研究流体流动的一种新方法^[1-3]。CFD 模拟不仅可以对流场进行数值计算,显示设备内部的流场分布,对流动特性进行直观显示分析仿真,而且具有效率高,成本低等优点,目前逐渐成为工程装置设计的重要手段,也是研究流体力学中各种物理现象的一种重要手段^[4-6]。离子交换柱中流体的流动特性对于整个交换系统的影响越来越大,在实现连续化操作过程中,交换柱内料液的均布问题对后续料液层析过程产生较大影响,将会影响反应的转化率、选择性、产品的产量,甚至影响反应的正常进行。因此合理设计离子交换柱上封头分布器对料液的均布,分析不同条件(如介质、流速、交换柱尺寸)对离子交换柱及其配管系统内流体分布与流阻的影响,给出改善流体分布的结构优化方案,寻找最佳工作点十分重要。文章将流体力学方法应用于离子交换柱流体分布和流阻特性研究,借助流体力学模拟软件,对交换柱内料液的流阻特性、分布情况、结构优化等问题进行研究,旨在实现交换柱的优化设计和改造。

基金项目: 浙江省自然科学基金资助项目(编号:LY14E050001);浙江省教育厅科研资助项目(编号:Y201329306);2013 年度台州市科技计划项目(编号:131KY05)

作者简介: 林海波(1977—),男,台州职业技术学院副教授,硕士。

E-mail:linhaibo_tzvtc@163.com

收稿日期: 2015-01-09

1 模型的建立

针对离子交换柱内交换树脂的流阻特性,采用二维多孔介质模型进行模拟,且假设流入交换柱内流体呈均匀分布状态,简化模型见图1。

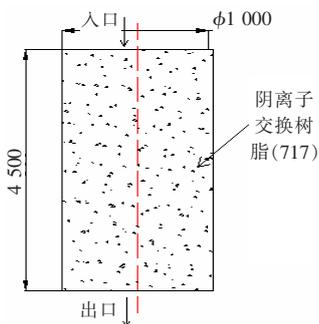


图1 离子交换柱二维多孔介质模型简图

Figure 1 Diagram of two-dimensional porous medium model for Ion exchange column

经查文献[7]得,阴离子交换树脂(717)的粒径范围为0.30~1.25 mm。本研究取平均粒径 $D_p = 0.8$ mm;空隙率范围为42%~46%,本研究取平均孔隙率 $\epsilon = 45\%$ 。由于离子交换柱内交换树脂的堆积类似于填料床结构,结合多孔介质模型的相关假设,阴离子交换树脂渗透率 α (permeability)

可通过式(1)计算:

$$\alpha = \frac{D_p^2}{150} \frac{\epsilon^3}{(1-\epsilon)^2} = 1.2853 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \quad (1)$$

其粘性阻力系数 C_1 (viscous resistance factor)为:

$$C_1 = \frac{1}{\alpha} = 7.7803 \times 10^8 \text{ m}^{-2} \quad (2)$$

其惯性阻力系数 C_2 (inertial resistance factor)为:

$$C_2 = \frac{3.5(1-\epsilon)}{D_p} \frac{\epsilon^3}{\epsilon^3} = 2.6406 \times 10^4 \text{ m}^{-1} \quad (3)$$

2 离子交换柱模型试验

结合色谱建模的相关理论^[8-12],根据离子交换柱二维多孔介质模型,综合分析交换柱各个运行参数对整个色谱分离过程的影响情况,并结合试验测试确定了分离过程中的层析介质、流速、交换柱高度和直径、交换树脂平均空隙率和平均粒径等参数对交换柱内流体压降的影响规律,为下一步系统搭建与仿真提供数据支持。

2.1 层析介质对压降的影响

表1给出了同种工况下,离子交换柱内层析介质有无对压降的影响。由表1可知,层析介质对流阻影响较大。在 1.061×10^{-3} m/s 流速下,当交换柱内堆积满交换树脂时,由其产生的压降为3279.3105 Pa;未堆积时,由沿程阻力引起的压降仅为 5.4573×10^{-4} Pa。

表1 层析介质有无对压降的影响

Table 1 Chromatography medium has or not effect on the pressure drop

有无层析介质	高度/mm	直径/mm	流量/($\text{m}^3 \cdot \text{h}^{-1}$)	流速/($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$)	压降/Pa
有	4500	1000	3	1.061×10^{-3}	3279.3105
无	4500	1000	3	1.061×10^{-3}	5.4573×10^{-4}

2.2 流速对压降的影响

表2给出了交换柱内料液流速对压降的影响。由表2可知,压降的增加与流速的增加呈正比关系(近似线性)。

表2 流速对压降的影响

Table 2 Influence of flow rate on the pressure

高度/mm	直径/mm	流量/($\text{m}^3 \cdot \text{h}^{-1}$)	流速/($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$)	压降/Pa
4500	1000	2.6	9.20×10^{-4}	3279.3105
4500	1000	2.7	9.55×10^{-4}	3407.4421
4500	1000	2.8	9.90×10^{-4}	3535.7190
4500	1000	2.9	1.03×10^{-3}	3664.1467
4500	1000	3.0	1.06×10^{-3}	3792.7229

2.3 交换柱高度对压降的影响

表3给出了同等流速和流量下,离子交换柱高度对压降的影响。同样,由表3可知,交换柱内的压降随着交换柱高度的增加而增加,且近似呈线性关系。

表3 交换柱高度对压降的影响

Table 3 Influence of height of the column on the pressure

流量/($\text{m}^3 \cdot \text{h}^{-1}$)	流速/($\text{m} \cdot \text{h}^{-1}$)	直径/mm	高度/mm	压降/Pa
3	1.061×10^{-3}	1000	4500	3792.723
3	1.061×10^{-3}	1000	4000	3371.312
3	1.061×10^{-3}	1000	3500	2949.888
3	1.061×10^{-3}	1000	3000	2528.484
3	1.061×10^{-3}	1000	2500	2106.291

2.4 交换柱直径对压降的影响

表4给出了同等流速情况下,离子交换柱直径与压降的关系。由表4可知,当流速相等时,交换柱直径的增大对柱内压降不产生任何影响。

2.5 交换树脂平均空隙率和平均粒径对压降的影响

表5、6分别给出了平均空隙率和平均粒径的交换树脂

对交换柱内压降的影响,其中离子交换柱高度为 4 500 mm,直径为 1 000 mm,流量为 3 m³/h。由表 5、6 可知,压降随着空隙率的增加和粒径的增大而减少,且呈非线性状态。

表 4 交换柱直径对压降的影响

Table 4 Influence of column diameter on the pressure drop of the exchange

流量/ (m ³ ·h ⁻¹)	流速/ (m·s ⁻¹)	直径/ mm	高度/ mm	压降/ Pa
3.00	1.061×10 ⁻³	1 000	4 500	3 792.723
3.80	1.061×10 ⁻³	1 125	4 500	3 792.723
6.75	1.061×10 ⁻³	1 500	4 500	3 792.723
12.00	1.061×10 ⁻³	2 000	4 500	3 792.723
18.75	1.061×10 ⁻³	2 500	4 500	3 792.723

表 5 交换树脂平均空隙率对压降的影响

Table 5 The influence on the pressure of the average voidage for the exchange resin

粒径/mm	空隙率/%	渗透率/m ²	粘性阻力系数/m ⁻²	惯性阻力系数/m ⁻¹	压降/Pa
0.8	42	9.396 8×10 ⁻¹⁰	1 064 190 5570.00	34 249.811	5 182.967
0.8	43	1.044 1×10 ⁻⁹	957 757 650.30	31 365.163	4 665.972
0.8	44	1.158 9×10 ⁻⁹	862 838 091.70	28 761.270	4 204.820
0.8	45	1.285 3×10 ⁻⁹	778 034 979.40	26 406.036	3 792.723
0.8	46	1.424 2×10 ⁻⁹	702 142 578.30	24 271.595	3 423.905
0.8	52	2.603 9×10 ⁻⁹	384 046 426.90	14 935.139	1 876.946
0.8	58	4.719 3×10 ⁻⁹	211 897 525.50	9 417.668	1 038.580
0.8	64	8.630 3×10 ⁻⁹	115 871 429.40	6 008.148	570.094
0.8	70	1.626 1×10 ⁻⁸	61 497 813.41	3 826.531	304.185
0.8	76	3.251 7×10 ⁻⁸	30 753 389.71	2 391.930	153.324

表 6 交换树脂平均孔径对压降的影响

Table 6 The influence on the pressure of the exchange average pore resin

粒径/mm	空隙率/%	渗透率/m ²	粘性阻力系数/m ⁻²	惯性阻力系数/m ⁻¹	压降/Pa
0.3	45	1.807 4×10 ⁻¹⁰	5 532 693 187.0	70 416.095	26 673.93
0.4	45	3.213 2×10 ⁻¹⁰	3 112 139 918.0	52 812.071	15 037.47
0.5	45	5.020 7×10 ⁻¹⁰	1 991 769 547.0	42 249.657	9 645.35
0.6	45	7.229 8×10 ⁻¹⁰	1 383 173 297.0	35 208.048	6 712.99
0.7	45	9.840 5×10 ⁻¹⁰	1 016 208 953.0	30 178.326	4 942.89
0.8	45	1.285 3×10 ⁻⁹	778 034 979.4	26 406.036	3 792.72
0.9	45	1.626 7×10 ⁻⁹	614 743 687.4	23 472.032	3 003.33
1.0	45	2.008 3×10 ⁻⁹	497 942 386.8	21 124.829	2 438.04
1.1	45	2.430 0×10 ⁻⁹	411 522 633.7	19 204.386	2 019.32
1.2	45	2.891 9×10 ⁻⁹	345 793 324.2	17 604.024	1 700.50

3 流体分布数值模拟

由于目前实际生产过程中,离子交换柱内料液的层析过程为一间歇操作过程,料液一般会充满至上封头,在同样液位差下,从上封头分布器各出口流入交换柱内的料液量相等,因此,不存在流量分布不均的问题。但若要实现连续化操作,由于料液流动为一动态过程,料液势必存在分布不均的情况,对后续料液层析过程产生较大影响。因此,采用离子交换柱上封头分布器进行模拟,模型如图 2 所示,包括入口管、封头以及分布支管等结构。其中入口管直径 40 mm,封头直径 1 000 mm,出口均布 152 个支管,其直径为 20 mm,具体结构参数见图 2。结合流体动力学相关理论,运用 FLUENT 软件对传统分配器的出口布置进行模拟研究,并做相关改进。为便于表述流量分配情况,本研究定义流量偏差因子如式(4):

$$\delta(i) = \frac{Q(i) - Q_{avg}}{Q_{avg}} \quad (4)$$

$$STD = \sqrt{\left\{ \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n [\delta(i)]^2 \right\}} \quad (5)$$

式中:

$\delta(i)$ ——第 i 个出口的流量偏差因子;

$Q(i)$ ——第 i 个出口的流量, kg/s;

Q_{avg} ——出口平均流量值, kg/s;

STD ——出口的整体流量标准偏差;

n ——出口数目。

图3给出了一定进口流量(3 m³/h)下出口支管的流量分布情况。由于料液从管径很小的进口管流入封头,封头内与进口管对应的区域压力较大,导致与进口管对应的出口管流量较大,其他区域由于压差变化很小,流量分布较为均匀,其出口的整体流量标准偏差 STD 为 108.332 1。

鉴于上述分布器的出口流量分布情况,对原有模型进行了改进,即在封头内增设了挡板结构,挡板均匀布置了152

个孔口(见图4),其直径为 20 mm。

经模拟可知,改造后的上封头分布器,其出口支管流量呈均匀分布状态(见图5),其出口整体流量标准偏差 STD 降至 14.326 9,得到了较大改善。

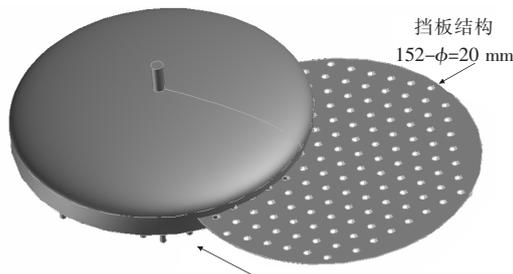


图4 经改造的上封头分布器模型示意图

Figure 4 Diagram of the upper head distributor model after transformation

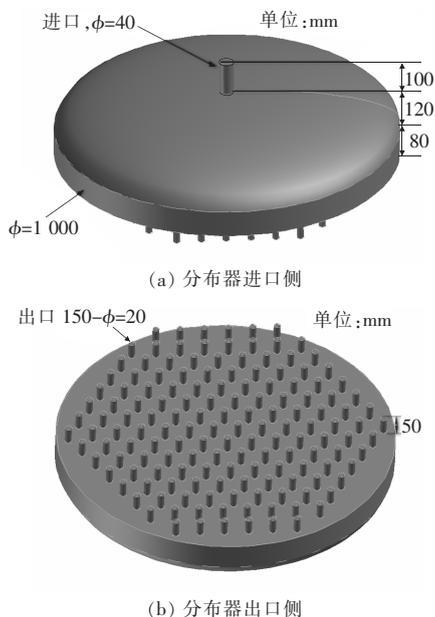


图2 上封头分布器示意图

Figure 2 Schematic diagram of the upper head distributor

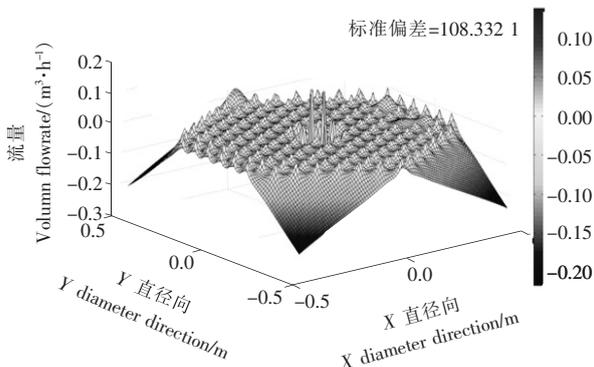


图3 上封头分布器出口流量分布情况

Figure 3 The outlet flow distribution of the upper head distributor

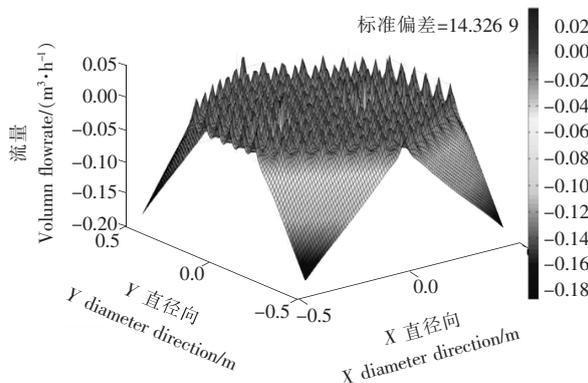


图5 经改造的上封头分布器出口流量分布情况

Figure 5 The outlet flow distribution of the upper head distributor after transformation

针对离子交换柱内上封头分布器,模拟了交换柱内料液的分布情况,并提出了结构改进意见。经模拟研究发现,分布器中心出口流量较大,周边流量较少且分布较均匀。在料液分布器结构剖析基础上,增设一挡板结构,分布器出口流体分布得到了极大提高,其出口整体流量标准偏差 STD 由原来的 108.332 1 降至 14.326 9。

4 结论

本研究针对某一离子交换柱内的流阻特性和流体分布进行了数值模拟。由交换柱内流阻特性和数值模拟分析与试验,得到以下结论:以二维多孔介质模型对离子交换柱内树脂填料的流阻特性进行分析,测定了层析介质、流速、交换柱高度和直径、交换树脂平均空隙率和平均粒径等参数对交换柱内流体压降的影响数据,利用统计分析理论对试验结果进行了分析,获得了在同一离子交换柱内压降与料液流速、柱高呈正比(近似线性)关系,而在同等流速情况下,离子交换柱直径对压降不产生任何影响。对于同一离子交换柱,树

(下转第 193 页)

野桂花蜜多酚的平均得率为 68.27 mg/10 g,达到了理论值的 99%,说明采用响应面法优化提取工艺得到的条件参数可靠。

2.2.4 超声波辅助提取法与传统浸提法的比较 由表 4 可知,传统浸提法得到的野桂花蜜多酚的平均得率仅为 52.48 mg/10 g。而超声波辅助提取法提取野桂花蜜多酚的得率比传统浸提法得率高出 23%,而且大大节省了提取时间。

表 4 提取方法对野桂花蜜得率的影响

Table 4 The effects different extraction methods on the yield of wild osmanthus-scented honey ($n=3$)

方法	溶剂浓度/% ($m : V$)	料液比	提取时间/min	提取温度/ $^{\circ}C$	得率/ $(10^{-1}mg \cdot g^{-1})$
超声波提取	62	1 : 10	21	54	68.27
传统浸提法	62	1 : 10	120	54	52.48

3 结论

通过 Design Expert V8.0.6 软件,以溶剂浓度、料液比、超声波时间、超声波温度为自变量,野桂花蜜多酚的得率为响应值,运用响应面分析法对试验结果进行分析,得到的回归模型拟合度好,误差小,能够用回归模型对试验结果进行分析,有一定的应用价值。优化验证后得到的野桂花蜜多酚提取工艺条件为:溶剂浓度 62%,料液比 1 : 10($m : V$),超声波时间 21 min,超声波温度 54 $^{\circ}C$ 。野桂花蜜多酚的得率为 68.27 mg/10 g。超声波辅助提取法比传统浸提法的多酚得率高出 23%。野桂花蜜中的多酚化合物的得率,可能会受蜜源地环境影响,如气候和蜜源植物本身状况等,因此有待进行深入研究。

(上接第 77 页)

脂平均空隙率和平均粒径与压降呈非线性反比关系。根据流体分布与流阻的模拟分析与计算,提出了改进离子交换柱内上封头分布器结构及增设一挡板结构的进料系统流体均配优化方案,使系统内流体分布趋于均匀。结构改进后,系统实现出口整体流量标准偏差 STD 由原来的 108.332 1 降至 14.326 9,能够较好地满足生产需求。

参考文献

- 王峰,闫清东,马越,等. 基于 CFD 技术的液力减速器性能预测研究[J]. 系统仿真学报, 2007, 19(3): 1 390~1 396.
- 王福军. 计算流体动力学分析—CFD 软件原理与应用[M]. 北京:清华大学出版社, 2004.
- 高富东,姜乐华,潘存云. 基于计算流体动力学的两栖车辆水动力特性数值计算[J]. 机械工程学报, 2009, 45(5): 134~139.
- 张少坤,尹侠. 双层桨搅拌槽内流场的数值模拟[J]. 食品与机械, 2011, 27(1):71~73.
- 蔡子金,李军庆,张庆文,等. CFD 在搅拌罐性能研究和生化过程

参考文献

- 聂乾忠,夏延斌,曾晓楠. 三种天然抗氧化剂对冷鲜肉保鲜效果研究[J]. 食品与机械, 2012, 28(5):155~158.
- 凌关庭. 抗氧化食品与健康[M]. 北京:化学工业出版社, 2004: 5~12.
- 李爱军,欧仕益,刘红. 一种天然抗氧化剂复合物抗氧化作用的研究[J]. 食品与机械, 2001(4):28~30.
- Hao Rui-xia, Zhou Shuai, Yang Yan, et al. Flavone content and bioactivity of aqueous-ethanolic extracts of phellinus fruit bodies [J]. Acta Edulis Fungi, 2008, 15(2): 27~30.
- Aqula S, Giner R M, Recio M C, et al. Anti-inflammatory activity of flavonoids from cayaponia tayuya roots[J]. Journal of Ethnopharmacology, 2008, 121(1): 333~337.
- 赖红芳,黄秀香,陆俊宇,等. 超声波辅助提取山豆根中的黄酮和多糖工艺优化[J]. 食品与机械, 2014, 30(1): 196~198, 223.
- 杜寅,李奇,丁辉煌. 多频超声波辅助提取石榴皮中原花青素的研究[J]. 粮食与食品工业, 2007, 14(4): 22~24, 29.
- 曹增梅,黄和. 超声波辅助提取番石榴中多酚类物质的研究[J]. 食品与机械, 2012, 28(5):123~126.
- 郭方宁. 超声提取技术在现代中药中的应用[J]. 中草药, 2007, 38(2): 315.
- 王静,韩涛,李丽萍. 超声波的生物效应以及在食品中的应用 [J]. 北京农学院学报, 2006, 21(1):67~72.
- Krystyna Pyrzynska, Magalalena Biesaga. Analysis of phenolic acids and flavonoids in honey[J]. Trends in Analytical Chemistry, 2009, 28(7): 900~901.
- 金莹,孙爱东. 植物多酚的结构及生物学活性的研究[J]. 中国食物与营养, 2005(9):27~29.
- Box G E P, Hunter W G. Statistics for experiments; an introduction to design, data analysis and model building[M]. New York: John Wiley & Sons, 1978.

放大中的应用[J]. 食品与机械, 2013, 29(6):108~112.

- 陈文礼,李惠. 基于 RANS 的圆柱风致涡激振动的 CFD 数值模拟[J]. 西安建筑科技大学学报(自然科学版), 2006, 38(4): 509~513.
- 周宛平. 化学分离法[M]. 北京:北京大学出版社, 2008:127.
- 林炳昌. 模拟移动床色谱技术[M]. 北京:化学工业出版社, 2008:37~44.
- 吴献东,金晓明,徐志成,等. 微粒群算法在模拟移动床色谱分离过程优化中的应用[J]. 化工自动化及仪表, 2006, 33(4): 5~8.
- 吴献东,金晓明,苏宏业. 基于 NSGA-II 的模拟移动床色谱分离过程多目标操作优化[J]. 化工学报, 2007, 58(8): 2 038~2 044.
- Kurup A S, Hidajat K, Ray A K. Optimal operation of an industrial-scale Parex process for the recovery of p-xylene from a mixture of C_8 aromatics[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2005, 44 (15): 5 703~5 714.
- Subramani H J, Hidajat K, Ray A K. Optimization of simulated moving bed and varicol process for glucose-fructose separation[J]. Chemical Engineering Research and Design, 2003, 81 (5): 549~567.