

DTB 结晶器内草酸铈颗粒分散特性的数值模拟^{*}

李 梅, 邱敬慧, 柳召刚, 胡艳宏, 王觅堂

(内蒙古科技大学 材料与冶金学院 稀土现代冶金与应用重点实验室, 内蒙古 包头 014010)

摘 要:为深入了解结晶器内复杂的流动情况及其对混合的影响,采用 CFD(Computational Fluid Dynamics)软件模拟 DTB 结晶器内稳态单相流动过程和不同混合方式的多相流动过程。对不同搅拌桨在结晶器内单相流动作用时采用湍流模型中的标准 $k-\varepsilon$ 双方程模型、MRF;在此基础上模拟 4 种不同混合方式对颗粒性质的影响时引入欧拉多相流模型,并分析其不同混合方式产生的不同剪切作用对颗粒粒度的影响,并分析产生影响的微观作用机理。结果表明,考虑颗粒在结晶器内所受剪切力的状况和悬浮状况有利于制备理想性质的颗粒。

关键词:计算流体力学;草酸铈;结晶器;固液流;稀土

中图分类号:TQ022.8;TQ027

文献标识码:A

文章编号:1004-0277(2012)03-0016-05

结晶器内机械混合是过程工业中最常见的操作之一。结晶器在稀土制备过程中提供反应、晶体生成和生长的环境条件,器内混合效果很大程度上取决于结晶器内的流型和湍流程度,而液体的流型和湍流程度由搅拌桨形状、转速、入口位置、喂料速度等操作条件决定,而这些操作条件是结晶器内颗粒粒度分布的决定因素。颗粒粒度分布决定了悬浮性能、产品性能(如颗粒粒径均一性、表面积等)^[1]。所以可以通过改变结晶器内操作条件改变混合过程流体的流型和湍流状况,从而控制颗粒粒度分布,达到控制产品性能的目的。

CFD 软件可形象地描述混合过程中流场和浓度的分布,这些分布图可直观指导结晶器内搅拌桨的选择和加料位置的选择。利用流体力学基本原理,模拟分析结晶器内选择合理的操作参数,最大程度的发挥结晶器混合作用。

自从 CFD 应用于结晶器搅拌过程的模拟以来,已有很多科学成果在实际生产操作中应用。搅拌槽内使用向上排水搅拌桨会增强上部流动循环,减少短路流,使用多个加料口会增强整体流量,同时可以

降低扭矩的大小波动和搅拌桨分流^[2]。Wei 和 Gar-side^[3]用三维模拟的方法研究了流动特性对硫酸钡产品 CSD(Crystal Size Distribution)的影响。朱振兴^[4]通过分组法对硫酸钡结晶过程的模拟达到了最终预测产品 CSD 的目的。

虽然 DTB 结晶器在化工、食品、制药等领域已经表现出其能生产较大晶粒且生产强度高、能效高的特点,与其相关的模拟却很少见报道。关于结晶进料位置的选择,虽然 CFD 模拟和实验验证都证明在底部进料位置的混合时间较短^[5],但会增加实验以及工业操作难度。此外,对于带有推进式搅拌桨、多进料口 DTB 结晶器内多相流分析研究并未见报道。本文通过 CFD 软件模拟分析了带有推进式搅拌桨的 DTB 结晶器中不同顶部加料位置和搅拌桨排水方向对结晶器的混合性能的影响。

1 结晶器形状尺寸及网格划分

结晶器中,挡板能有效清除打旋现象,能增加液体的对流循环强度。导流筒能提高内部液体的搅拌程度,增强混合效果,导流筒的引入会增加颗粒平均

^{*} 收稿日期:2011-11-04

基金项目:国家杰出青年基金(51045216);教育部春晖计划(Z2009-1-01048);长江学者和创新团队发展计划资助(50725416)

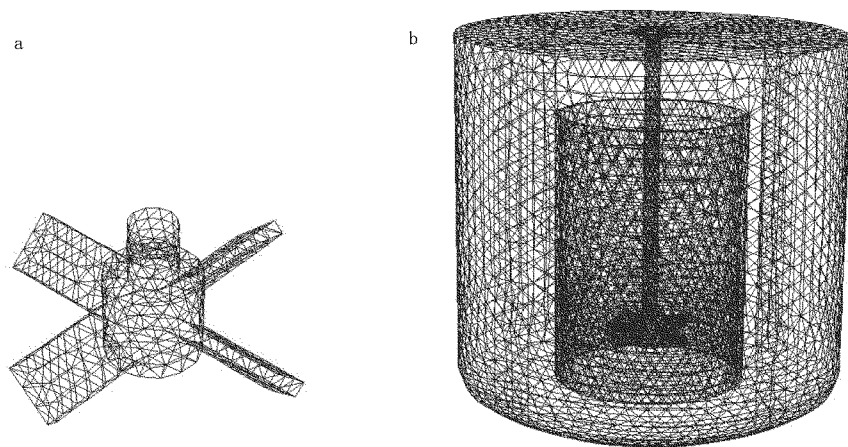
作者简介:李 梅(1965-),女,内蒙古包头人,博士,教授,博士生导师,主要从事稀土应用方面研究。

粒度^[4]。故本模拟实验选择 DTB (Draft Tube Baffled) 结晶器内部的混合效果做为研究对象。

本实验采用内径 D 为 0.15m、高为 0.15m 的圆柱体自制有机玻璃搅拌结晶器,内设 4 个宽为 $1/10D$ 的块挡板。实验模拟计算比较推进式搅拌桨、桨式搅拌桨所形成不同流场。桨叶直径与结晶器直径比为 0.27,桨叶距离底部 0.0375m。

由于桨叶部分结构不规则而且比较复杂,对其

划分网格时采用非结构化网格,而对搅拌槽其它部分网格的划分在合理的分区后采用结构化网格和非结构化网格相结合的办法。在划分网格基本原则——保证计算满足一定精度的前提下,尽量减少网格数量的基础上考虑到 PC 的硬件和模型的复杂程度,对模型进行合理的网格划分^[5]。网格总数为 247417,总节点数为 44143,搅拌桨的网格划分图 1(a) 所示,结晶器网格节点分布如图 1(b) 所示。



a: 搅拌桨的网格划分; b 结晶器网格划分

图1 模型网格的划分

Fig. 1 Meshed volume of the impeller and crystallizer

2 模拟条件和方法

为了在 PC 上节省计算时间并且保证一定计算精度,模拟过程中直接加入粒径为 $1 \times 10^{-5} \text{m}$ 的颗粒研究搅拌桨和加料位置对结晶过程的影响,加料速度沿重力方向为 0.02m/s,入料口处草酸铈体积分数为 2%,出料口设为出流(outflow),顶部加入颗粒的同时,搅拌桨以速度为 200r/min 顺时针/逆时针开始转动搅拌。并假设:(1) 流体为不可压缩流体;(2) 忽略化学反应对过程的影响;(3) 忽略热量传递。(4) 忽略细小晶核和过大颗粒对结晶过程的影响。

结晶器过程边界条件定义要符合实际操作情况。顶部入口进料速度为沿重力方向 0.02m/s,草酸铈体积分数为 2%;侧面出口垂直于侧壁面压力出口;导流筒设置为壁面;结晶器内壁和底面定义为静止壁面边界;将轴和桨定义为动边界。

参考压力设为大气压,无浮力,设定重力加速度 g ;不涉及传热,应用多重参考系(MRF)方法进行模拟,桨叶及其附近流体区定义为运动区域,该区域采

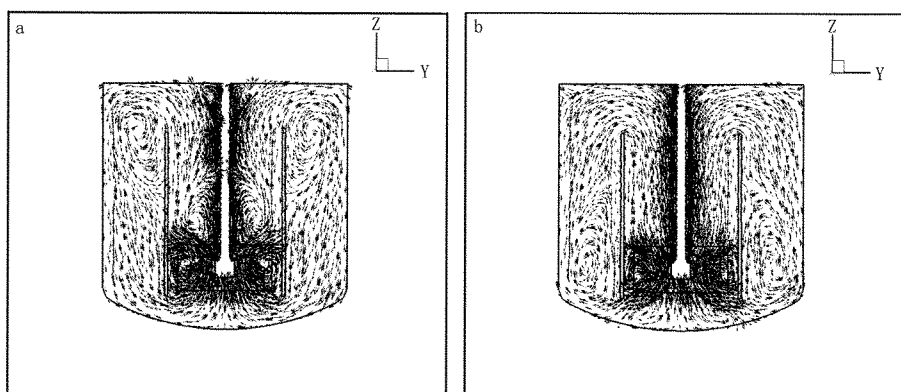
用旋转坐标系,其他区域定义为静止区域,采用静止坐标系;湍流方程采用标准 $k-\varepsilon$ 双方程模型,采用欧拉多相流模型模拟两相流,加入料密度为 2370kg/m^3 ,粘度 $0.00412 \text{mPa} \cdot \text{s}$ 。收敛标准为 0.001,采用非稳态定常模拟。

3 计算结果分析

结晶过程不加料时,DTB 结晶器内使用涡轮搅拌桨搅拌形成较稳定的循环流动。单相流模拟结晶器内水流状况了解结晶器内部流动的过程,单相流所模拟的速度方向如图 2 所示。

在此基础上,选择从顶部加料的方式,两种加料方式配合不同的原流型,按照不同的流型分,分为四种基本混合方式如图 3 所示。

从图 3 可以看出引入加料位置对原有流场的不同影响。ad 两种混合方式对原有流场有轴向的加强作用,而 bc 两种混合方式对原有流场起到了减弱的作用,不利于颗粒在结晶器内运动,导致能量浪费。混合方式 b 的轴向速度削弱最为明显。



a: 搅拌桨向下排水; b: 搅拌桨向上排水

图 2 单相流模拟结晶器内速度方向分布

Fig. 2 Vertical centre view of velocity vector direction in the crystallizer with impellers of different pumping directions

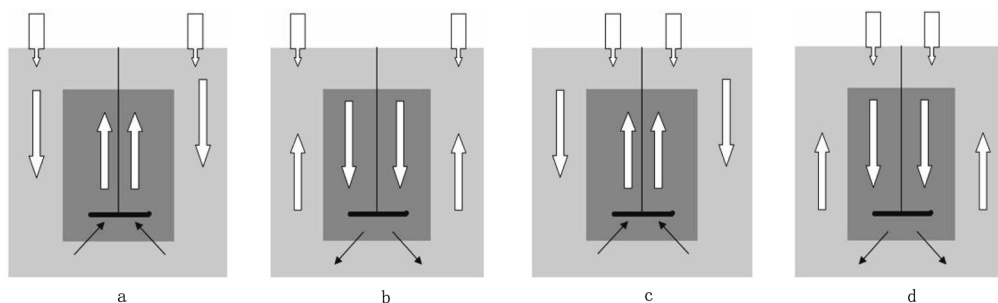
a: 搅拌桨向上排水, $r < a < R$; b: 搅拌桨向下排水, $r < a < R$; c: 搅拌桨向上排水, $a < r$; d: 搅拌桨向下排水, $a < r$ 图 3 根据流场得到的四种顶部加料混合方式 (R 为结晶器内径, r 为导流筒外径, a 为顶部加料口径向位置)

Fig. 3 Four different kind of mixing type with top feeding

综合上述多相流动和单项流动对比发现,结晶器内径向颗粒对流场的影响并不大,但是对轴向速度都有所影响。这是由于溶剂和颗粒在受到竖直向下重力和原有流场的作用而各不相同,而且两相间的摩擦力也会导致速度有所不同。

3.1 不同相分布对结晶过程影响

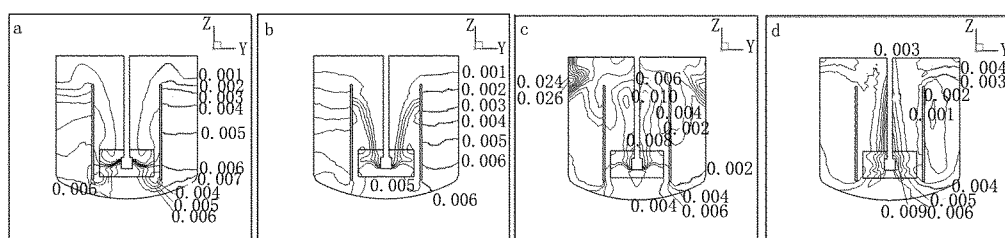
当搅拌进行到 90s 时,结晶器内颗粒达到比较稳定状态,四种不同混合方式草酸铈颗粒体积分数如图 4 所示。当按照 a 混合方式对颗粒进行搅拌时,颗粒从导流筒外部上方进入结晶器,颗粒在重力场和原有流场的拉动作用下很快地从结晶器下部进入导流筒并在导流筒内形较稳定分布。当按照 b 混合方式对颗粒进行搅拌时,颗粒在原有流场的阻碍作用下在导流筒外部悬浮,并在结晶器底部开始堆积。当按照 c 混合方式对颗粒极性混合时,颗粒从导流筒上方进入导流筒,受搅拌棒和搅拌桨的剪切

作用很大,在原有流场作用下颗粒在导流筒中悬浮。当按照 d 混合方式对颗粒进行混合时,颗粒在原有流型和重力作用下很快在导流筒内分布并均匀分布在导流筒外部。

可以看出,ab 混合方式不利于颗粒的悬浮,cd 混合方式有利于颗粒悬浮。而且 d 混合方式颗粒所受作用较均一,有利于颗粒粒度均一。并且在此 d 环境相似混合状态条件下的晶体生长速度也是最快的^[8]。

3.2 不同剪切率对结晶过程影响

晶体粒子在溶液中的扩散程度是和粒子间的相互碰撞频率有关的,而与剪切率有关的悬浮液粘度决定粒子间碰撞频率,剪切率是衡量结晶器内颗粒碰撞几率的主要参数,因此为了更好的考察对于结晶二次过程的影响,必须了解结晶器内剪切率的分布情况,图 5 为结晶器内剪切率分布。



a: $r < a < R$, 向上排水; b: $r < a < R$, 向下排水; c: $a < r$, 向上排水; d: $a < r$, 向下排水

图4 不同混合方式下颗粒分布纵切面的草酸铈颗粒体积分数

Fig. 4 Vertical volume fraction distribution of cerium oxalate particle at 90s under different mixing type

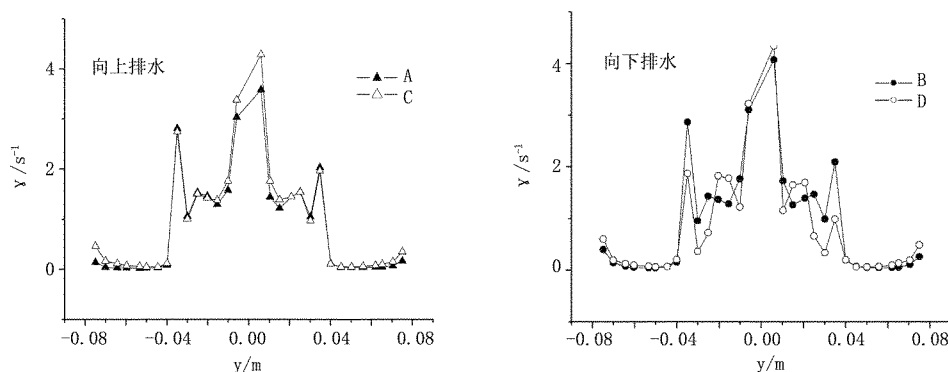


图5 不同混合方式距底面 0.0375m 剪切率分布

Fig. 5 Shear rate distribution of the plane 0.0375m above the bottom under different mixing type

在距离底面 0.0375m 截面上,abc 三组加料位置的剪切率分布基本一致,在搅拌桨边缘处,由于搅拌桨的推动作用和虹吸作用,在速度最大处剪切率较大在 ± 0.03 出现极值;而在导流筒内壁附近,由于颗粒、水之间的拽力和导流筒内壁对转动的阻力,形成较大的剪切率;而在搅拌棒附近,由于搅拌轴转速很大距离搅拌轴处两层液体之间液体速度差较大,所以产生的剪切率在搅拌棒附近出现最大值。而 d 加料位置所在该界面上形成的剪切率图与 abc 略有不同,在导流筒内壁形成的剪切率较 abc 小,而搅拌桨引起的大剪切率极值也偏向搅拌棒方向,在 ± 0.017 左右;而且在该极值两侧的 0 剪切率下降幅度要比 abc 大。这是由于 d 在颗粒流向搅拌桨时,先由于搅拌桨和搅拌轴的虹吸作用使得颗粒靠近搅拌轴而集中在这个部位,由于富集颗粒的液体粘度 ν 较大,而且有主要集中在搅拌桨靠搅拌棒近的一方,这表明悬浮液抵抗剪切的阻力较大,故剪切率会在此出现峰值,而且在数学公式上 $\varepsilon/\nu < 1$,所以形成的剪切率 $\gamma = (\varepsilon/\nu)^{1/2}$ 极值会靠近搅拌棒($y=0$ 方向),而在其他出由于颗粒分布较少,故剪切

率较低。

4 结论

利用 CFD 软件模拟结晶器内不同混合方式产生的流场及流场对颗粒的作用,比较了不同加料方式颗粒在结晶器内的混合状况及搅拌桨处颗粒剪切率的状况,模拟计算结果表明,d 混合方式下的颗粒悬浮较强,能均匀分散在结晶器内,而且颗粒所受剪切作用较均一,这样的混合特性都有利于生产粒度均一的小颗粒。所以,在制备理想性质的颗粒时,要结合所制备颗粒的性质考虑颗粒在结晶器内所受剪切力的状况和悬浮状况选择混合方式。

在结晶器的操作条件选择过程中,虽可通过实验测定相关参数,但都只是耗时的宏观结果,而采用 CFD 软件模拟该过程可以得到动态、直观的效果。CFD 以其经济直观的特性,已在结晶器优化设计、结晶过程领域得到广泛应用,但结晶器优化设计和结晶过程中还有较多未解决的问题,CFD 还可以在这些方面发挥很大的作用。

参考文献:

- [1] Jerzy Baldyga, Wojciech Orciuch. Some hydrodynamic aspects of precipitation [J]. Powder Technology, 2001, 121: 9-19.
- [2] Aubin J, Kresta S M, Bertrand J, et al. Alternate operating methods for improving the performance of continuous stirred tank reactors [J]. Chemical Engineering Research and Design, 2006, 84(A7): 569-582.
- [3] Wei H Y, Zhou W, Garside J. Computational fluid dynamics modeling of the precipitation process in a semibatch crystallizer [J]. Ind Eng Chem Res, 2001, 40: 5255-5261.
- [4] 朱振兴. 硫酸铵结晶过程的研究及其固-液多相流的计算流体力学研究 [D]. 天津大学, 2008, 2.
- [5] 陈慧, 楼鹏, 梁宝臣, 等. 结晶器不同进料位置混合过程的 CFD 模拟 [J]. 计算机与应用化学, 2009, 26(11): 1439-1402.
- [6] WANG Zheng, MAO Zaisha, YANG Chao. Computational Fluid Dynamics Approach to the Effect of Mixing and Draft Tube on the Precipitation of Barium Sulfate in a Continuous Stirred Tank [J]. Chinese J Chem Eng, 14(6): 713-722.
- [7] 陶文铨. 数值传热学(第二版) [M]. 西安: 西安交通大学出版社, 2001. 50-53.
- [8] 王冕堂, 李梅, 柳召刚, 等. 微混效应对草酸铈结晶动力学的影响 [J]. 稀土, 2011, 32: 32-36.
- [9] 朱振兴. 硫酸铵结晶过程的研究及其固-液多相流的

Numerical Simulation of Cerium Oxalate Particle Dispersion in a Draft Tube Baffled Crystallizer

LI Mei, DI Jing-hui, LIU Zhao-gang, HU Yan-hong, WANG Mi-tang

(Key Laboratory of New Technologies of Modern Metallurgy and Application of Rare Earth, School of Material and Metallurgy, Inner Mongolia University of Science and Technology, Baotou 014010, China)

Abstract: In this work, a CFD(Computational Fluid Dynamics) software was used to understand how the complicated flow affect the mixing process and crystallization in a DTB(Draft Tube Baffled) crystallizer agitated by a pitched blade impeller. A single phase flow simulation was initially carried out to demonstrate the original flow pattern without feeding by solving the governing equations and standard two equation $k-\varepsilon$ turbulence model in MRF(moving reference frame). According to the flow field obtained, four mixing types which vary in feeding position and impeller pumping direction were designed and the liquid-solid flow of different mixing type was simulated by using Eulerian multiphase equation along with the governing equation and standard two equation $k-\varepsilon$ turbulence model. Visualization of the particle distributions of different mixing type and the shear rate distribution of the plane across the impeller help to assess the particle dispersion and movement during crystallization to gain better understanding of the mechanism. It showed that the particle having expected property can be made if optimization operation was found and carried out.

Key words: CFD; cerium oxalate; crystallizer; liquid-solid flow; rare earth