

浸没式 PTFE 中空纤维膜组件数值优化设计

黄江益^{1,2}, 刘 富^{2*}

(1. 中国科学院大学, 北京 100043; 2. 中国科学院宁波材料技术与工程研究所, 浙江 宁波 315800)

摘要:在膜组件设计领域使用仿真优化提高运行通量。使用西门子 NX12 的商业化设计、仿真软件, 建立了一个简化的帘式膜数值模型, 优化了膜组件堵头的结构参数, 这些设计结果通过宁波江东水厂的小试装置得到了初步验证。

关键词:有限元; 聚四氟乙烯; 中空纤维膜

中图分类号: TK222

文献标志码: A

文章编号: 0253-4320(2019)07-0211-05

DOI: 10.16606/j.cnki.issn 0253-4320.2019.07.045

A better design of submerged PTFE hollow fiber membrane module based on fluid dynamics simulations

HUANG Jiang-yi^{1,2}, LIU Fu^{2*}

(1. University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100043, China;

2. Ningbo Institute of Materials Technology & Engineering, Chinese Academy of Sciences, Ningbo 315800, China)

Abstract: The submerged polytetrafluorethylene (PTFE) hollow fiber membrane module is optimized by fluid simulation, including the establishment of a simplified fluid model, the determination of model parameters by experimental data and the geometrical optimization of the membrane shell. Finally, the results are verified by the experimental device of Jiangdong Water Works.

Key words: finite element; polytetrafluorethylene; hollow fiber membrane

在膜科学领域, 仿真设计已经广泛应用于膜组件内流动与传质、膜过程的强化^[1]及膜组件性能的提升^[2-3]。PTFE 中空纤维膜组件与其他同类产品类似, 由上千根膜丝组成, 常见的研究是从单根膜丝进行仿真, 但对于规模化组件, 计算量无法承受, 结果也缺少实际参考价值, 因为变量误差严重放大^[4]。

国内目前对浸没式中空纤维膜组件的仿真优化中, 多集中在 MBR 领域, 关注曝气条件优化, 对于整个框架的大型仿真, 考虑到数据量, 只能简化膜过滤过程为一个简单的参数——膜渗透速度^[5], 而且仿真设计对于不同材质的帘式膜更是缺少区分。本研究中提供了一个简化 PTFE 浸没式超滤模型, 考虑到 PTFE 的纤维结构, 使用流堵塞模型分析渗透速度, 堵塞参数选取通过前期实验得到, 在不同工况下参数会有差别, 因而此模型在满足实验假设的不同工况下均可适用。根据此模型, 重新设计了膜壳等相关结构, 并在后期工程对比中得到验证。

有限元的数值优化是基于有限元参数(例如物理和材料属性及网格相关数据)执行设计灵敏度分析和优化。分析人员通常负责选择合适的材料、厚度和其他参数来改进提出的设计。即使是简单的组

件, 其有限元模型也有数百个参数可进行修改。通过手动迭代寻找最佳设计极其困难, 而且不太可能会成功。本研究中多处使用了有限元参数优化, 包括流体模型的关键参数、膜壳堵头的几何尺寸、膜丝长度敏感度分析。本研究中使用 NX12 版本的 Simcenter 3D 相关的数值优化模块。

1 实验

1.1 PTFE 中空纤维浸没式过滤简化模型使用到的堵塞模型

本研究中使用正交各向异性多孔流堵塞模型, 将数千根中空纤维膜丝作为一个长方体整体, 假定垂直于膜面的阻力来自于多孔纤维介质[PTFE 微观结构是多孔纤维, 对应公式(1)], 沿着膜丝轴向阻力来自于达西阻力[支撑层为纤维管, 对应公式(2)], 第三个方向阻力设定为极高, 即阻碍流动。

$$Q/A = (k/\mu) \times (\Delta P/L) \quad (1)$$

式中, Q 为流体的体积流量; A 为多孔介质的横截面面积; k 为渗透度; μ 为流体的动态黏度; ΔP 为压力降; L 为阻塞长度。渗透性 k 是指定的纤维直径 D 和指定空隙率 ε 的函数。空隙率或多孔性是多孔纤

收稿日期: 2018-11-30; 修回日期: 2019-05-07

作者简介: 黄江益(1988-), 男, 硕士生; 刘富(1980-), 男, 博士, 研究员, 博士生导师, 研究方向为高性能水处理膜材料、血液净化膜材料、生物基膜材料, 通讯联系人, fu.liu@nimte.ac.cn。

维介质的空隙体积与总体积之比。

$$F = -(\mu/KV) \tag{2}$$

式中, μ 为流体的动态黏度; k 为指定的穿透性; V 为流体速度幅值。渗透性是材料传送流体的能力的度量, 是多孔材料的属性, 不是流体属性^[6]。

1.2 搜索算法

本研究中使用有限差分梯度近似。数字搜索过程的第一步是确定搜索的方向, 一般来说, 至少需要知道目标函数的梯度以及可能的一些约束函数。在每个设计变量方向上采取小步骤的过程(假设不受这个步骤的边界限制)完全对应于导数的一次正向有限差分近似的数学概念。对于单个独立变量, 首先的差异可由下式给出:

$$d(x)/dx = [f(x + \Delta x) - f(x)]/\Delta x \tag{3}$$

其中量 Δx 为 x 相对方向上截取的小步。对于大多数实际的设计任务, 通常关心的是设计变量的矢量。函数的偏导数或梯度的合成矢量可写成:

$$\nabla F(\vec{x}) = \begin{Bmatrix} \partial F/\partial x_1 \\ \dots \\ \partial F/\partial x_n \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} [F(x + \Delta x_1) - F(\vec{x})]/\Delta x_1 \\ \dots \\ [F(\vec{x} + \Delta x_n) - F(\vec{x})]/\Delta x_n \end{Bmatrix} \tag{4}$$

1.3 模型的建立与简化

真实的 PTFE 中空纤维膜是由外表面非均相 PTFE 过滤层和内部纤维编织管构成, 过滤层为多层 PTFE 双向拉伸纤维构成, 支撑层为一定细度的纤维编织而成。按照上文的多孔流堵塞模型, 以模拟 PTFE 中空纤维管的过滤过程, 使用开口的丝线滤网模型模拟 PTFE 膜过滤的压头损失, 使用 NX12 建立所需几何体, 计算区域为帘式膜装配体, 流道模型如图 1 所示。

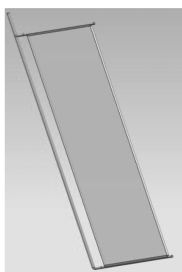


图 1 PTFE 中空纤维膜简化模型

这里需要几个假设, 依照此假设设定的参数如表 1 所示。

(1) 膜丝为刚性, 不考虑膜丝摆动情况, 也不考虑在外压情况下膜丝直径发生变化。

(2) 不考虑温升, 实际运行中可能会有温度变化。

表 1 帘式膜基本参数

项目	数值	备注
膜丝有效长度/m	2	可变, 敏感度
膜丝直径/mm	2.6	
运行通量/(L·m ⁻² ·h ⁻¹)	30	
产水口直径/mm	21	
单位长度出口流速/(mm ² ·s ⁻¹)	0.17	用于出口流速, 敏感度

(3) 忽略膜过滤表面微结构, 以丝线滤网模型简化。

(4) 假定膜外滤饼层的阻力相同, 实际不同工况下滤饼层随着膜丝外表面流速不同又会不同。

1.4 网格选择

网格密度选择在于是否收敛。过高则数值优化过于漫长, 过少则网格质量较差。图 2 显示当网格数量 10 万和 20 万时曲线已经很接近, 最后在部分细节处优化网格, 提高网格质量情况下, 优化至 19.4 万的网格数量, 这是一个精度和计算成本上都可以接受的密度。

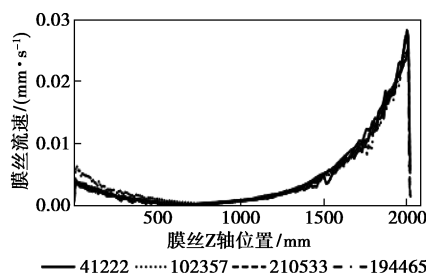


图 2 网格密度对比图

1.5 边界条件

水流从膜外表面进入, 从产水管口出来, 负压抽吸。因此, 边界条件位置如图 3, 参数见表 2。

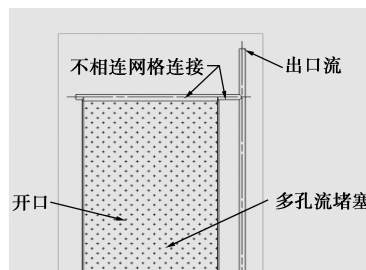


图 3 边界条件位置图

表 2 单独出水边界条件表

类型	选择的值	其他
出口流	0.17×L=340 mm/s	
开口	压头损失系数 586.8	丝线滤网模型
多孔流堵塞	Z 向压头损失 495 mm ⁻¹	X, Y 向压头损失 500000 mm ⁻¹
	各向异性 在阻塞区为层流	

这里需要注意的是,在阻塞区为层流可以大大减少计算时间并易于收敛,且考虑到实际情况,膜片有多根膜丝组成,层流也比较符合实际。这里的 Z 向压头损失系数通过单根 2 m 的 PTFE 膜丝确定,干膜状态下用一定流速测试压力损失的实验得到。开口压头损失系数则为单片膜实验得到,在得到水深、泵头负压、Z 向压头损失和膜组件外形尺寸下,通过 CFD 工程优化倒推可知;如果使用其他流体仿真软件,也可以不断尝试数值,通过比较实验负压值和理论负压值的差异,逼近得到。本实验工况基于浙江净源膜股份有限公司在江东水厂的装置。

1.6 湍流模型选择

在上述前提条件下,比较仅层流、固定湍流黏度、混合长度和 K-Epsilon 4 种湍流模型的结果(均为零方程),网格为上述最简单网格(单元数 41 222),依然是比较侧面 Z 向膜片流速曲线。需要注意的是固定湍流黏度使用串行求解器,其他均为并行。详细结果见图 4。

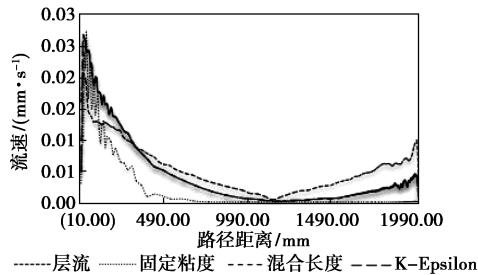


图 4 不同湍流模型比较

路径长度起始点在膜片顶端。通过 XY 散点图注意到混合长度和 K-Epsilon 2 个湍流模型对应曲线重合,排查 Y 轴实际数值,发现两者数值有着微小差异,并不是完全重合。因此可知在本模型中混合长度可以获得比较高的精度,基本媲美广泛使用的 K-Epsilon 模型。因此常规分析可使用 K-Epsilon 模型,而在工程优化中应该使用混合长度较少求解时间。

在上述比较之下,还可以再和高级流湍流模型(两方程)进行对比,需要注意的是 LES-大涡仿真仅支持瞬态,这里取用 20 s 时流速值。比较结果如图 5 所示。

可以发现,SST-剪切应力运输和 LES-大涡仿真结果基本重合,只有细微处有很小区别。K-Omega 湍流与其他 3 种湍流模型相比偏离较大,首尾两处流速较平滑。与此同时 K-Epsilon 虽然与

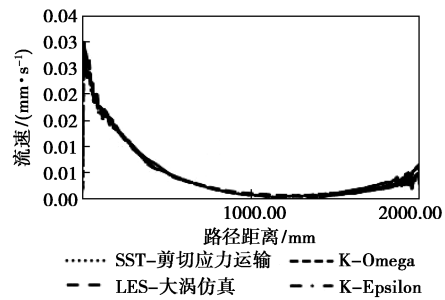


图 5 K-Epsilon 与两方程、大涡湍流对比图

SST-剪切应力运输和 LES-大涡结果很接近,但在首尾处曲线同样比较平滑。造成这一结果的原因如下。

SST-剪切应力运输在求解壁面处时的结果较为精确,本例中查询曲线为图 1 膜右侧外表面直线,因此能获得更多细节。K-Omega 对网格质量要求较高,本课题比较中使用了较低网格密度,因此得出的结果偏离其他曲线较大。K-Epsilon、K-Omega 及其他常见湍流模型,其本质是对 N-S 方程进行平均化处理(RANS),一般是时均。平均后所有尺度的脉动通通抹平,计算出来的是流动的平均量。而 LES-大涡仿真可以把大尺度的流动都解析出来,而网格内部的小尺度流动滤掉,对惯性区及以下大小尺度的涡提出简化模型。因此在曲线中看到 LES-大涡仿真可以获得更多的流速波动。

1.7 工程优化因素

使用 CFD 的几何优化,由于涉及到几何体变化网格重新划分、边界条件改变,其解算过程有可能会极其漫长并且不收敛,因此需要一些优化设计,具体几何详细参数见表 3。

表 3 几何优化参数表

项目	选择
网格单元最大尺寸	15 mm
相对收敛	5%
优化目标	膜片几何体最小流速幅值的最大值
优化变量	见图 5,管道截断水平高度
定义约束	无
湍流模型	混合长度

本优化目标有其现实意义。经过长期的实践发现,常见的中空纤维帘式膜在浸没式运行时,污泥由于各种原因多聚集在膜丝两端,重力因素下端更为密集。而在 PTFE 中空纤维膜中,这种因素更加明显。

由于 PTFE 中空纤维膜纯水通量高达 9 000 L/(m²·h) 以上, 而工程运行中稳定同样在 20~30 L/(m²·h)。这就导致 PTFE 中空纤维膜中部面积无法有效利用, 长期无水通量, 如果不改变亲水改性的膜丝, 则在长期曝气下膜内水分被气体取代, 有可能变得不再“浸润”。因此取得膜片中最小流速的最大值是优化膜利用率的有效途径, 对于现实工程有重要指导意义。

这里使用的优化变量也是有现实性的考虑。使用的帘式膜壳是注塑件, 修改相对困难。但是在出口处进行增料截断依然是可行的, 考虑到实际模具是一模两件, 在其中一件增加隔断, 相对的修模费用很低, 得到的 2 个膜壳分为上下 2 件进行装配, 成本影响很小。优化见图 6 所示。

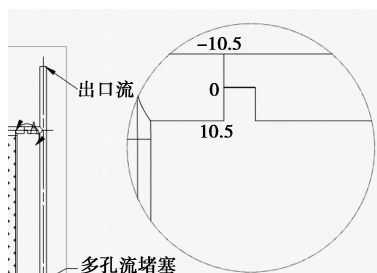


图 6 几何优化控制变量

2 结果与讨论

2.1 提高通量分布的均匀性

使用 NX12 几何优化模块处理堵头的尺寸, 使用上文所述限差分梯度近似。设计目标是膜片最小流速的最大值, 设计变量则是堵头的尺寸。因为只是简单的单变量单目标任务, 经过 4 次迭代就获得收敛, 收敛结果见表 4。

表 4 几何优化结果

设计目标函数结果	0	1	2	3	4
最大值结果测量/(mm·s ⁻¹)					
收敛	3.2× 10 ⁻⁵	1.65× 10 ⁻⁵	2.75× 10 ⁻⁵	3.74× 10 ⁻⁵	1.49× 10 ⁻⁵
设计变量结果					
"FTMJ" : : p65=0	0	4	-10	-4.27155	-4.27545

目标在上产水管截断面高度-4.28 时, 获得最大的结果测量值。对应的分析图和流速对比见图 7 和图 8。图 7 中可以注意到经过优化以后蓝色区域(流速小于 0.003 5 mm/s)减少了约 63%, 单头产水

的帘式膜片下端面积得到有效利用。对于 PTFE 中空纤维膜而言, 在浸没式过滤时, 如果流速长期过小, 则会导致气体占据膜丝孔隙处, 减少可用膜面积, 所以最小流速区域对于 PTFE 膜组件设计而言是重要的。

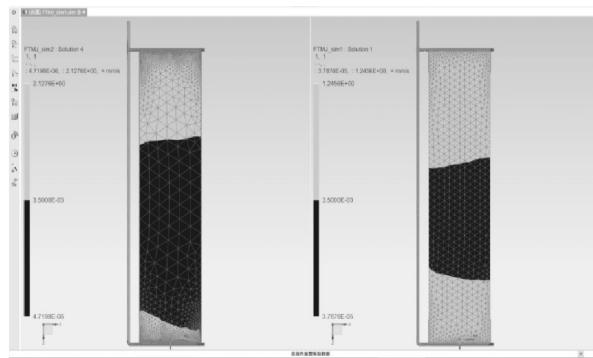
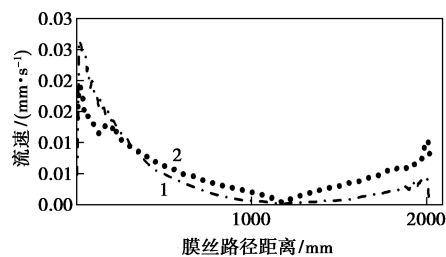


图 7 流速分布图



1—几何优化前;2—几何优化后

图 8 流速对比图

图 7 中流速小于 0.003 5 mm/s 的为深色区域, 左为优化前, 右为优化后。路径长度起始点在膜片顶端。根据图 7, 可以明显看到优化以后膜片沿着 Z 轴重力方向的流速分布更加缓和, 而增加的膜壳堵塞设计可以直接做进注塑设计中, 成本上可以接受。

2.2 膜丝长度敏感性分析

膜丝的有效长度实际上由甲方水池和其他工况决定, 大部分规格在 1.0~2.5 m。膜丝的长度不同, 对于膜的有效利用率也会发生差异, 为了探究这一变化, 这里使用灵敏度分析求解。设计变量的不同之处在于设计变量的变化会影响优化目标。一个变量与另一个变量对所需设计解决方案的贡献之间的差异称为灵敏度。这里使用的是几何优化前的模型。由之前分析可知, 膜丝有效利用率和右侧膜片最小流速正相关, 是比较简单的单变量计算, 考察膜丝利用率的话设计目标依然不变, 具体分析参数见表 5。

表 5 敏感度分析参数表

项目	选择
网格单元最大尺寸	15 mm
相对收敛	2.5%
优化目标	膜片几何体最小流速幅值的最大值
优化变量	膜丝有效长度, 部件间传递 L
出口体积流速	$0.17 \times L \text{ mm}^3/\text{s}$
定义约束	无
湍流模型	混合长度
迭代次数	20

按照以上数据得到的敏感度分析结果如图 9 所示。从图中可以看到,膜丝有效长度对于通量有比较大的影响。在 1 200~1 315 mm 之间时,膜丝最小通量得到最大,也就是说膜丝利用率得到最高。当然随着膜丝有效长度减少,单位面积装填密度会减少,单位膜面积其他分摊成本会增加,因此具体使用何种规格在甲方约束下依然是一个需要综合考虑的问题。尽管如此,此图依然是一个重要的工程参考依据,在工况约束下设计膜丝长度时可以尽可能规避其中的几个极小值。

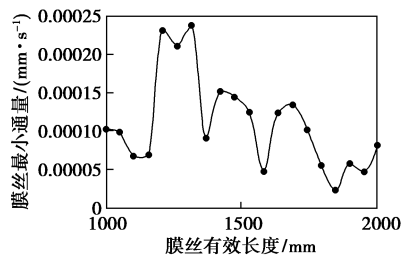
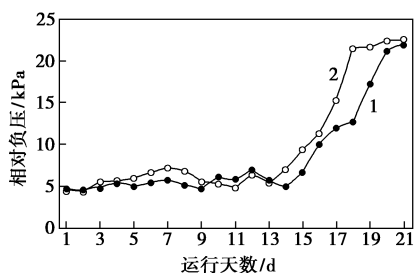


图 9 膜丝有效长度灵敏性分析

2.3 实验工况验证

在实际使用过程中,数值仿真得到的结果必须得到实际工况的确认。这里按照 $50 \text{ L}/(\text{m}^2 \cdot \text{h})$ 定流速运行,1 号膜池中增加了 14 mm 高度的堵头,比较优化前后两者抽吸的负压值,其中 4 号水池为优化前,1 号水池为优化后。

实际工况中,稳定负压值在 22~25 kPa,由图 10 中可以知道,优化前组件运行 18 d 达到稳定负压



1—1 号平均负压;2—4 号平均负压

图 10 实际工况对比图

值,优化后的组件在运行 20 d 才达到同样数值。当然实际工况相当复杂,图 9 无法反映优化后膜通量定量的提升,但是增加膜片下端利用率的设计确实明显地延缓了负压值的上升趋势。

3 结论

(1) 流体模拟分析了中空纤维帘式膜过滤的稳态结果,需要注意的是除非是为了解运行中反洗、曝气等最佳持续时间,不然瞬态求解意义在此不大。这里使用了丝线滤网模型简化膜过滤介质,用多孔流堵塞各向异性模拟内部纤维阻力,通过几次不同参数求解,初步探究膜丝过滤的流速、压差分布。提供了一个简单而又可行的浸没式 PTFE 中空纤维膜组件工业化实施模型,为以后其他相关的设计优化提供了理论依据。可以通过一系列简单的实验数据,迭代反推出模型的关键参数,在适用性上得到一定的保证。本研究忽略了膜丝摆动以及污泥大量附着所带来的阻力变化,因此仅适用于水质比较干净的浸没式过滤。在这个研究条件中,比较了 7 种湍流模型结果,零方程模型中混合长度算力要求较低,获得了媲美 K-Epsilon 的结果。在使用双方程模型情况下,SST-剪切应力运输模型和 LES-大涡仿真模型显示了更多的细节,K-Omega 由于网格密度等原因,误差较大。

(2) 研究的优化结果增加了一个堵头,安装在膜片上模壳的产水口处,并在江东水厂进行了 21 d 的负压恒流量测试,肯定这项改进确实有部分作用,延缓了负压上升趋势。

参考文献

- [1] Fimbres-Weihs G A, Wiley D E. Review of 3D CFD modeling of flow and mass transfer in narrow spacer-filled channels in membrane modules[J]. Chemical Engineering and Processing: Process Intensification, 2010, 49(7): 759-781.
- [2] Ghidossi R, Veyret D, Moulin P. Computational fluid dynamics applied to membranes: State of the art and opportunities [J]. Chemical Engineering and Processing: Process Intensification, 2006, 45(6): 437-454.
- [3] Keir G, Jegatheesan V. A review of computational fluid dynamics applications in pressure-driven membrane filtration [J]. Reviews in Environmental Science and Bio/Technology, 2014, 13(2): 183-201.
- [4] 庄黎伟. 中空纤维膜组件中流动均布模型与模拟[D]. 上海: 华东理工大学, 2016: 42.
- [5] 柳蒙蒙, 陈梅雪, 魏源送, 等. 基于 CFD 的大型膜生物反应器的设计及运行优化[J]. 环境工程学报, 2018, (2): 552-558.
- [6] 李琪, 戴传山, 王帅. 达西与非达西流下管径及粒径对多孔介质流动阻力影响试验研究[C]. 中国工程热物理学会论文, 2012. ■