

丁二酸搅拌式结晶釜设计及 CFD 模拟

陈航, 李涛*

(华东理工大学大型工业反应器工程教育部工程研究中心, 上海 200237)

摘要:基于计算流体动力学(CFD)模拟,开发了一种适用于 10 万 t/a 丁二酸装置的搅拌式结晶釜,设计组合式搅拌叶轮,对比不同釜底结构、搅拌叶轮结构和叶轮安装高度对丁二酸溶液结晶效率的影响,并进一步计算了临界悬浮转速。模拟计算结果表明,曲面釜底可有效改善釜底晶体堆积,相较于涡轮平直叶式、框式及螺带式等常见的搅拌叶轮型式,组合式搅拌叶轮具有更高的叶轮循环效率;组合式搅拌叶轮的临界悬浮转速和最佳安装高度分别为 260 r/min 与 80 mm,此时釜底颗粒堆积少,固液分散效果良好,有利于结晶。通过使用组合式叶轮,可有效缩短丁二酸连续结晶的实验周期、降低开发成本,并为结晶釜搅拌叶轮的设计提供了一种全新的新思路。

关键词:丁二酸结晶釜;固液两相流;桨叶结构;CFD 模拟;安装高度

中图分类号:TQ216

文献标志码:A

文章编号:0253-4320(2025)03-0245-04

DOI:10.16606/j.cnki.issn0253-4320.2025.03.043

Design and CFD simulation of stirring crystallization kettle for succinic acid

CHEN Hang, LI Tao*

(Engineering Research Center of Large-Scale Reactor Engineering and Technology of the Minister of Education, East China University of Science and Technology, Shanghai 200237, China)

Abstract: With the aid of computational fluid dynamics (CFD) simulation, a stirring crystallization kettle applicable to a 100 000 t/a succinic acid synthesis process is designed. Additionally, a kind of combined stirring impeller is designed. The influences of kettle bottom structure, stirring impeller structure and the installation height of impeller on the crystallization efficiency are studied. Furthermore, the critical suspension speed of the impeller designed is calculated. Simulation results indicate that a curved bottom is favorable of the reduction of crystal accumulation in the corner. Compared with common impeller types, including straight blade, frame and spiral belt, the combined impeller type designed shows higher cycle efficiency. Under 260 rpm of critical suspension speed and 80 mm of optimal installation height, the designed crystallization kettle presents superior ability to solid-liquid dispersion with fewer particles accumulating at bottom, favorable for the crystallization. With the aid of the combined stirring impeller designed, the experimental period for continuous crystallization of succinic acid gets shortened, which can decrease the development cost and provide a novel idea to design the stirring impeller for crystallization kettle.

Key words: succinic acid crystallization kettle; solid-liquid two-phase flow; impeller structure; CFD simulation; installation height

丁二酸是生物可降解合成纤维的重要原料^[1],随着我国环保意识的进一步提升和“双碳”政策的颁布,丁二酸及其衍生物的市场不断扩张。作为化学合成生产丁二酸工艺的核心输出单元,开发及应用节能型丁二酸结晶装置,可有效提升整套工艺的丁二酸产品收率。工业上常用的结晶器包括流化床结晶器、强制循环结晶器以及搅拌釜式结晶器^[2-3],因具有传热传质效率高、界面面积大,操作简单易检修等优点,本研究以搅拌釜式结晶器为研究对象,设计适用于某工程公司 10 万 t/a 丁二酸装置技术方案的丁二酸结晶釜。

作为结晶器内介质动力的直接来源,搅拌叶轮对结晶介质的充分传热和流动、结晶器空间的充分利用和保证结晶产品的粒度分布有决定性的作用。李少利等^[4]研究了锚式和螺带式搅拌叶轮的搅拌性质,指出螺带式和锚式搅拌叶轮适用于搅拌高黏

度流体,但锚式搅拌叶轮在釜内很难产生上下交换的循环流,而螺带式搅拌叶轮则可以产生上下交换;在盐酸镍结晶过程中,螺带式搅拌叶轮所产生的晶体粒径分布比较均匀,结晶效果较好。Shimizu 等^[5]研究了六轮平直叶、六轮开启涡轮和四轮平直叶对盐酸铝钾结晶过程的影响,结果表明,使用四轮平直叶更容易使盐酸铝钾晶体颗粒悬浮。Antonija 等^[6]则通过研究搅拌桨安装高度对四硼酸钠晶体结晶过程的影响发现,晶体粒径随着叶轮安装高度的增加而增大。

目前对搅拌结晶器的研究虽然较为成熟,但对于丁二酸体系的结晶器研究则相对较少。近年来,CFD 的发展为搅拌釜式结晶器的研究提供了全新的思路,借助 CFD 探究搅拌釜式结晶器内的流动和混合特性,可以节省大量的时间以及人力物力,显示出卓越的优势。

收稿日期:2024-05-16;修回日期:2024-12-22

作者简介:陈航(1999-),男,硕士生;李涛(1968-),男,博士,教授,研究方向为 C1 化工、催化反应工程,通讯联系人,tl@ecust.edu.cn。

结晶器的选型直接决定了结晶工艺的产品质量,某工程公司现拟进行丁二酸结晶中试试验,小试实验所使用平底结晶器的搅拌叶轮为涡轮平直叶式,结果显示在釜底和角落处出现大量晶体堆积,产品晶体粒径分散、结晶质量差,因此需对结晶器的结构进行优化。传统搅拌釜式结晶器的中试放大准则存在一定的局限性,因此有必要借助 CFD 设计出一种适用于丁二酸体系的搅拌釜式结晶器,通过模拟计算探究结晶釜结构对丁二酸结晶质量的影响,提出最优结构参数,为中试实验提供理论指导。

1 模型建立

1.1 几何模型

通过对框式和螺带式叶轮的观察,结合这 2 种叶轮设计了一种新式组合式叶轮。对六叶涡轮平直叶、框式、螺带式 and 组合式叶轮进行建模。结晶釜的主要参数为:釜高 1 500 mm、直径 1 000 mm、进出口直径 70 mm,釜底为曲面。结晶釜几何结构如图 1 所示。

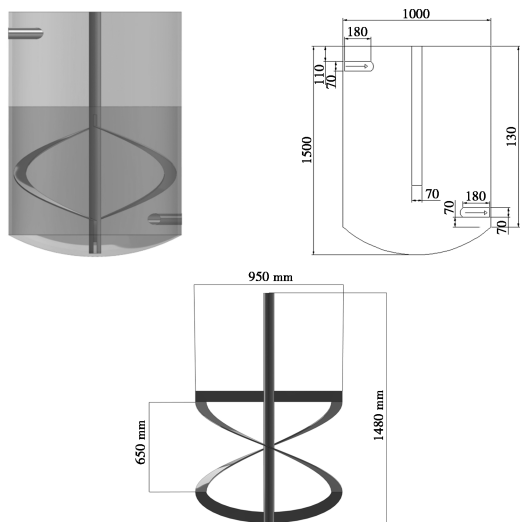
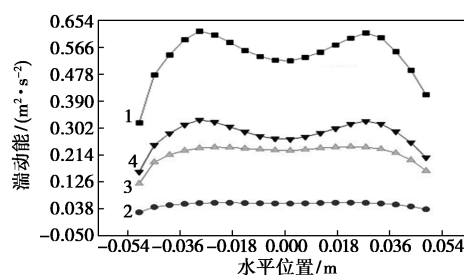


图 1 结晶釜几何结构

为保证网格数量对模拟结果没有干扰,对模型进行网格无关性验证。对涡轮平直叶式划分了 4 套网格数量,为 41 万、70 万、98 万和 132 万,网格的最小正交质量大于 0.45,网格质量合格。模拟了结晶器内湍动能分布,结果如图 2 所示。可以看到,随着网格数量的变化,湍动能出现较大变化,当网格数增大到 98 万后,湍动能不再随网格数量增大而明显变化,这证明网格数量增大到 98 万后,网格数量变化不会影响实验结果。为确保实验精度以及合适计算量,采用 98 万数量的网格模型进行下一步模拟。



1—410 000;2—700 000;3—980 000;4—1320 000

图 2 网格无关性验证

1.2 数学模型

为探究结晶釜内固液分布情况,采用欧拉多相流模型,对固液两相的连续性方程和动量方程都进行了求解,从而同时获得了液相和固相的独立流场解^[7]。各相的连续性方程和动量方程可表述如下。

连续性方程:

$$(\partial/\partial t)(\alpha_q \rho_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) = 0 \quad (1)$$

式中, α_q 是 q 相的浓度; ρ_q 为 q 相密度; \vec{v}_q 为 q 相速度。

动量方程:

$$(\partial/\partial t)(\alpha_{1,s} \rho_{1,s} \vec{v}_{1,s}) + \nabla \cdot (\alpha_{1,s} \rho_{1,s} \vec{v}_{1,s} \vec{v}_{1,s}) = -\alpha_{1,s} \nabla p - \nabla p + \nabla \cdot \bar{\tau}_{1,s} + \vec{F} + \alpha_{1,s} \rho_{1,s} \vec{g} \quad (2)$$

式中,1,s 代表液相和固相; p 为压力; $\bar{\tau}$ 为应力-应变张量(stress-strain tensor); α 是体积分数; ρ 是密度; μ 为剪切黏度; \vec{v} 是速度; \vec{F} 为固液相之间的相互作用力^[8]。

选用某工程公司实验所得丁二酸晶体为模拟对象,小试实验中丁二酸晶体的粒度分析显示粒径分布在 0.18~0.7 mm 的范围,约占总粒径的 87%,选取占比最多的粒径 0.2 mm 进行模拟,转速设置为 300 r/min。参数见表 1。

表 1 模拟参数

参数	丁二酸 粒径/mm	丁二酸溶液 密度/($\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$)	水溶液密度/ ($\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$)	丁二酸固相初始 体积分数/%
数值	0.2	1572	1000	10

对丁二酸固相采用颗粒模型,用 Syamlal-obrien 模型表征颗粒黏度,用 Lu-et-al 模型来计算颗粒体积黏度。采用多重参考系法(MRF)计算搅拌叶轮的运动。液面设置为 Symmetry,叶轮表面、搅拌轴、结晶釜壁面设置为 Wall,设置速度入口和压力出口。当所有变量残差小于 10^{-3} 时模拟收敛。

2 结果与分析

2.1 结晶釜底形状

小试实验中使用平底结晶釜时,釜底会出现 2

个低速的循环回路,在这2个区域里面流速小,湍动能低,因此在搅拌桨下方和釜底与壁面交界处,由于液体流速低,在这2个区域会出现固体颗粒堆积。将釜底形状更改为曲面之后,结果如图3所示,与文献[9]对比发现分布接近,说明所用模型方法正确。可以看到曲面釜底形状的结晶釜底部仍然有固体颗粒堆积,而且堆积的体积分数比平底釜底的大,这是因为由于釜底形状变为曲面,釜底距离搅拌叶轮变远,底部的能量变得更小,出现了更多堆积。但是可以看到在釜底与壁面交界处,曲面釜底的固体颗粒堆积少,这说明曲面釜底一定程度上改善了固相分布的情况。对于曲面釜底堆积过多的情况,考虑更换叶轮的类型,进一步优化结晶釜结构。

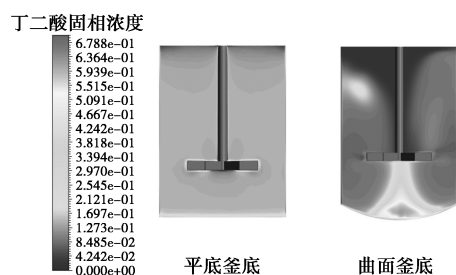


图3 不同形状釜底的固相体积分布

2.2 叶轮结构的影响

搅拌釜式结晶器的搅拌叶轮结构会对结晶器内的流体流型和颗粒分布等产生重大的影响,是提高产品质量和评判结晶器能效的关键参数。固液两相的分布是评价结晶器固-液混合性能的重要指标,为分析叶轮结构对釜内丁二酸晶体分布的影响,选取丁二酸晶体粒径分布最多的0.2 mm,搅拌转速设置为300 r/min,绘制了结晶釜剖面上的固相体积分布如图4所示。涡轮平直叶式叶轮底部有明显颗

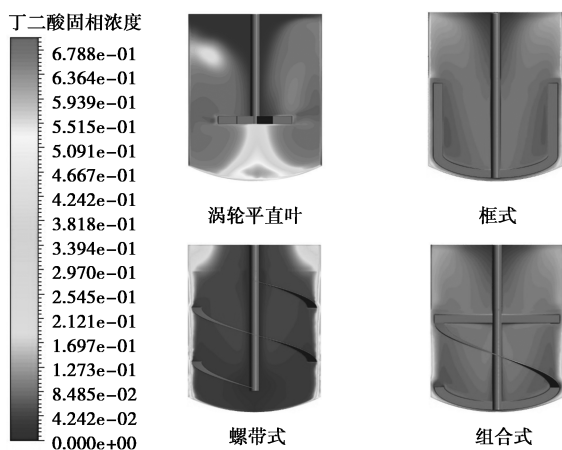


图4 不同叶轮结构固相体积分布

粒堆积,而另外3种结构的叶轮底部没有明显堆积,说明叶轮范围大加强了固体颗粒的悬浮效果,有利于大型结晶釜进行结晶。螺带式叶轮虽然在底部没有颗粒堆积,但是在釜的两侧有堆积,它将颗粒带到更高的位置,形成了堆积,这不仅不利于结晶的进行,而且还增大了能耗。综上所述丁二酸结晶釜中框式和组合式叶轮的效果明显优于涡轮平直叶和螺带式叶轮。

为进一步考察4种叶轮优劣,引入叶轮的循环效率对其评价^[10]。叶轮泵送流量的计算公式:

$$Q = (N_Q/N_P^{1/3}) [(P/\rho)D^4]^{1/3} \quad (3)$$

式中, $N_Q/N_P^{1/3}$ 为叶轮循环效率因子,是用来评价叶轮循环效率高低的参数。通过John等^[11]提出的流量测量方法,计算出流量准数 N_Q ,即可推算出叶轮循环效率因子。各叶轮类型 N_P 、 N_Q 及叶轮循环效率因子模拟值汇总如表2。

表2 不同叶轮 N_P 、 N_Q 及循环效率因子

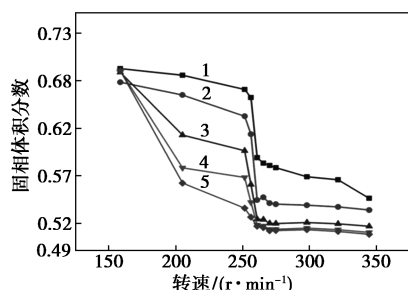
叶轮类型	流量/($\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$)	N_Q	N_P	$N_Q/N_P^{1/3}$
涡轮平直叶	0.0022	0.54	0.57	0.65
框式	0.0026	0.63	0.98	0.63
螺带式	0.0033	0.71	1.72	0.59
组合式	0.0025	0.73	1.04	0.72

从表2对比得出,螺带式的叶轮循环因子最小,而组合式的叶轮循环因子最大,说明螺带式的功率高的代价是增大了能耗,此时其效率最低,不利于工业生产,而对比框式和组合式叶轮,可以看到组合式叶轮的循环效率因子更高,结合固相体积分布可以说明在釜内固相分布差异不大的同时,组合式叶轮的效率最高,在实现良好固液分散效果的同时还拥有最高的效率,这有利于实际工业生产。综上所述,组合式叶轮的搅拌效果最好,是最适合丁二酸结晶釜的搅拌桨类型。

2.3 临界悬浮转速

在设计结晶釜时,不需要晶体完全悬浮,而是达到一个临界悬浮转速,为考察组合式叶轮的临界悬浮转速,为工业生产效益最大化提供搅拌速度的参考,根据小试实验所用300 r/min,选取了5个转速150、200、250、300、350 r/min,采用面平均浓度法计算出此组合式叶轮结晶釜的临界悬浮转速。图5为结晶器内不同高度处的固相面平均浓度随搅拌速度变化的曲线。从图中可以看出,当搅拌器的转速达到260 r/min时,所有的浓度曲线都呈现出了骤降。在达到或超过这一转速后,堆积在叶轮下方的固体颗粒开始悬浮起来。各个平面的浓度变化趋势在此

时基本一致,这说明组合式叶轮搅拌釜的临界悬浮转速为 260 r/min,在生产中可以参考这个速度进行搅拌速度的确定,能节约生产成本和实现良好的搅拌结晶效果。



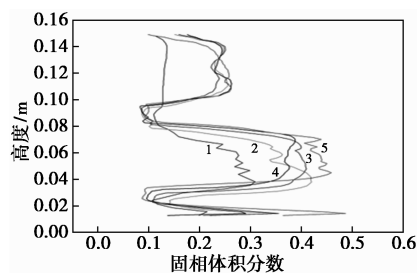
1—1 mm; 2—5 mm; 3—10 mm; 4—15 mm; 5—20 mm

图 5 不同面固相平均体积分数随转速变化曲线

2.4 叶轮安装高度的影响

为进一步优化结晶釜结构,设计出拥有最佳结晶效果的结晶釜,对叶轮安装高度进行优化,从上文实验结果也能看出叶轮下部区域对于晶体堆积现象有较大的影响,对于叶轮安装高度的研究有很大必要。叶轮安装高度是指叶轮底部到釜底的距离,针对组合式叶轮的搅拌结晶釜,根据大型搅拌叶轮和釜底的距离不宜过大的原则选取了 5 种不同的安装高度(20、40、60、80、100 mm),转速选取为临界悬浮转速 260 r/min,模拟对比搅拌效果。

图 6 为叶轮不同安装高度轴向的固相体积分数分布。可以看到安装高度为 20 mm 时,结晶釜上部的固体颗粒分布比较少,而安装高度为 100 mm 时,结晶釜下部的固体颗粒分布较高,2 种结晶效果不好,而另外 3 种安装高度的固体颗粒分散更加均匀。对比 40、60、80 mm 安装高度时,可以看到结晶釜上部的固相分布相差不大,但是在结晶釜中部,当固相分布随着釜中高度下降而增大的时候,相同固相分布 80 mm 的高度更大,说明安装高度为 80 mm 时,釜中更多颗粒被带到更高的位置,釜中固相分布更加均匀,结晶效果最好。



1—20 mm; 2—40 mm; 3—60 mm; 4—80 mm; 5—100 mm

图 6 不同叶轮安装高度固相体积分数轴向分布

3 结论

(1) 通过将平面釜底转换为曲面釜底,可有效减少搅拌式结晶釜角落处的晶体堆积,改善固相分布情况。

(2) 相较于涡轮平直叶式、框式及螺带式搅拌叶轮,组合式搅拌叶轮具有更高的循环效率及更好的搅拌效果:在大型结晶釜内,涡轮平直叶式叶轮在整个釜内固液分散效果差,螺带式叶轮固液分散效果好,但是功耗较大、叶轮循环效率较低;组合式叶轮在保有良好固液分散效果的前提下,叶轮循环效率因子更高且能耗更低。

(3) 组合式搅拌叶轮的临界悬浮转速和最佳安装高度分别为 260 r/min 与 80 mm,此时釜底颗粒堆积少,固液分散效果良好,有利于结晶。

组合式叶轮结晶釜的设计对于丁二酸结晶工艺有着重要的指导意义,后续将结合中试实验对模型做进一步优化。

参考文献

- [1] 陈雨龙,赵立环,王玉稳,等.生物可降解合成纤维研究进展[J/OL].棉纺织技术.[2024-02-27].<http://kns.cnki.net/kcms/detail/61.1132.TS.20231123.1047.002.html>.
- [2] 段梦珊,骆碧君,王玉琪,等.计算流体力学仿真模拟在工业结晶中的应用[J].盐科学与化工,2018,47(12):17-24.
- [3] Zarkadas D M, Sirkar K K. Cooling crystallization of paracetamol in hollow fiber devices[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2007, 46(10): 2928-2935.
- [4] 李少利,吴娟萍.搅拌形式对硫酸镍结晶效果的影响[J].中国有色冶金,2008,(4):33-34.
- [5] Shimizu K, Nomura T, Takahashi K. Crystal size distribution of aluminum potassium sulfate in a batch crystallizer equipped with different types of impeller[J]. Journal of Crystal Growth, 1998, 191(1/2): 178-184.
- [6] Antonija K, Akrap M, Nenad K. Effect of impeller position in a batch cooling crystallizer on the growth of borax decahydrate crystals[J]. Chemical Engineering Research & Design, 2013, 91(2): 274-285.
- [7] 丁杨,宗原,奚桢浩,等.固液两相体系中双层搅拌浆叶的结构优化数值模拟[J].华东理工大学学报:自然科学版,2015,(6):750-757.
- [8] 贾翔飞,钱嘉澍,吴幼青,等.鼓泡塔反应器中两相流动 CFD-PBM 耦合数值模拟[J].华东理工大学学报:自然科学版,2021,47(1):1-10.
- [9] 覃滢兰,张磊,都健.间歇冷却结晶过程的 CFD-PBM 数值模拟[J].大连理工大学学报,2023,63(3):231-240.
- [10] Fört I. On hydraulic efficiency of pitched blade impellers[J]. Chemical Engineering Research and Design, 2011, 89(6): 611-615.
- [11] John T P, Fonte C P, Kowalski A, et al. The effect of radial impeller geometry on the link between power and flow numbers[J]. AIChE Journal, 2021, 68(1): 2-10. ■