

氯化钠水溶液膜蒸馏过程的传质传热数值模拟

潘艳秋^{1*}, 宋小沫¹, 邵会生², 沈馥臣¹, 俞路¹

(1. 大连理工大学化工与环境生命学部, 辽宁 大连 116024;

2. 中国石油天然气股份有限公司大连石化分公司, 辽宁 大连 116031)

摘要:利用自制管式煤基炭膜开展膜蒸馏氯化钠溶液(模拟海水)的研究。在实验的基础上,采用计算流体力学方法进行模拟,用C语言编写UDF后代入FLUENT软件,结合实验数据计算得到相关传质过程参数。二维传质模拟结果表明,沿流体流动方向,管内浓差极化因子逐渐增大、传质系数降低;在料液入口温度为60℃、浓度10 g/L时,随着流量的增加,传质系数增大。三维传热模拟结果表明,在料液流量40 L/h、温度60℃、质量浓度20 g/L情况下,沿流动方向,膜管内压力降低,管中心速度增加,温度降低;边界层充分发展后,管内速度分布基本保持不变。

关键词:膜蒸馏;CFD;海水淡化;模拟;浓差极化

中图分类号:TQ028.8

文献标志码:A

文章编号:0253-4320(2016)07-0174-04

DOI:10.16606/j.cnki.issn0253-4320.2016.07.043

Numerical simulation on mass and heat transfer in membrane distillation of aqueous NaCl solution

PAN Yan-qiu^{1*}, SONG Xiao-mo¹, SHAO Hui-sheng², SHEN Yu-chen¹, YU Lu¹

(1. School of Chemical Engineering, Dalian University of Technology, Dalian 116023, China;

2. PetroChina Dalian Petrochemical Company, Dalian 116031, China)

Abstract: Membrane distillation of aqueous NaCl solution is experimentally investigated with a home-made coal-based tubular carbon membrane. Computational fluid dynamics method is used to simulate based on experimental results. User defined function (UDF) codes are written with C language combined with experimental data in the FLUENT software platform to work out relevant mass transfer process parameters. Two-dimensional simulation results of mass transfer show that factor of concentration polarization is gradually increased while mass transfer coefficient is decreased along the direction of fluid flow inside the carbon tube. Under 60℃ of the inlet temperature and 10 g/L of the salt concentration, the mass transfer coefficient is increased with the increase in feed flow rate. Three-dimensional simulation results of heat transfer indicate that along the flow direction, during which pressure inside the tube is reduced, the velocity is increased and the temperature is decreased in the center of the tube under the conditions of 60℃, 20 g/L and 40 L/h of the feed flow rate. After full development of the boundary layer, velocity distribution inside the tube remains unchanged substantially.

Key words: membrane distillation; CFD; seawater desalination; simulation; concentration polarization

膜蒸馏是以疏水性多孔膜两侧的组分蒸汽压差为驱动力的膜分离过程^[1]。由于具有操作温度和压力低、可利用低品位热源等优点,在海水淡化领域具有十分广阔的应用前景^[2]。但目前膜蒸馏技术仍未很好地应用于工业过程中,主要原因在于其渗透通量小、热效率低等^[3-4]。因而制备高效膜材料、优化操作参数、探讨过程机理、预测过程参数等,成为目前的研究热点^[5]。

计算流体力学(computational fluid dynamics, CFD)软件目前已广泛应用于膜蒸馏过程模拟研究,如 Shirazian 等^[6]利用 CFD 软件模拟了直接接触式膜蒸馏微孔膜中水蒸汽的传递过程,探究了气体和

液体流速等操作参数对该过程性能的影响; Yu 等^[7-8]对直接接触式中空纤维膜蒸馏过程中传热传质现象进行 CFD 模拟,建立耦合了潜热和平衡方程的膜管内二维传热模型,并结合 N-S 方程,对层流状态下的局部传热系数、热边界层厚度、膜壁温度等参数进行预测,对膜蒸馏过程进行模拟分析,发现对于具有高传质系数的分离膜,在组件壳壁内增设环形挡板可显著提高质量流量和温度极化系数; Li 等^[9]为提高错流式真空膜蒸馏过程渗透通量,设计了3种新型壳程液体分布器,用 CFD 进行模拟与优化; Tang 等^[10]利用 CFD 对 NaCl 水溶液的真空膜蒸馏浓缩过程进行模拟,探讨了多孔膜材料内部的传

收稿日期:2016-05-06;修回日期:2016-05-16

基金项目:大连理工大学基本科研业务费专项项目(DUT13JN04)

作者简介:潘艳秋(1962-),女,博士,教授,从事膜分离和系统工程研究,通讯联系人,0411-84986020, yqpan@dlut.edu.cn。

热传质规律。目前膜蒸馏过程 CFD 模拟研究工作主要针对真空式和直接接触式膜蒸馏形式开展,且多为有机中空纤维膜^[11],对以炭膜为膜材料的气隙式膜蒸馏过程的应用研究报道相对较少。

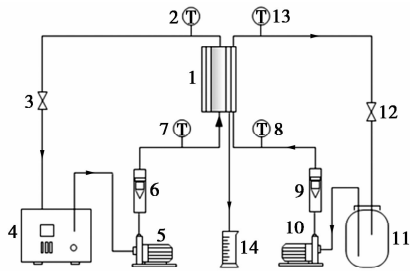
本文中在实验研究基础上建立膜蒸馏氯化钠溶液过程模型,并利用 FLUENT 软件进行数值模拟,确定管式膜内流体的浓度分布与速度、温度和压力分布规律。

1 实验装置及流程

实验装置及流程见图 1。

采用自制管式疏水微孔炭膜进行气隙式膜蒸馏实验。膜管有效长度 100 mm、内径 5 mm、外径 9 mm。用泡压法测得膜平均孔径 0.3 μm。

实验测定不同操作条件下的渗透通量、原料液和渗透液中氯化钠的质量分数,用以进行相关的传热和传质计算。



1—膜组件;2,7,8,13—测温装置(热电阻和温度显示仪表);
3,12—阀门;4—溶液储槽;5—溶液输送泵;6,9—液体流量计;
10—冷却水输送泵;11—冷却水储槽;14—量筒

图 1 实验装置及流程图

2 膜蒸馏二维传质过程数值模型

2.1 网格划分

通过 Gambit 软件对管式膜蒸馏的二维传质模型进行离散化处理,采用 Map 法对膜管内进行四边形结构化网格划分,并对膜壁界面进行了加密处理。参见图 2。

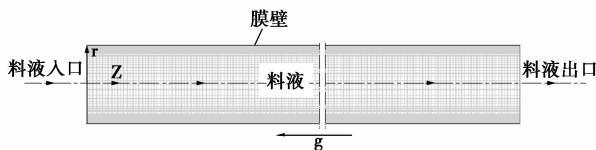


图 2 管式膜蒸馏二维网格划分示意图

2.2 控制方程

根据图 2,建立柱坐标体系控制方程。

(1)连续性方程^[12]

$$\partial \rho / \partial t + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (1)$$

对于稳态、不可压缩流体,式(1)可简化为:

$$\nabla \cdot (\vec{u}) = \partial u / \partial z + \partial v / \partial r = 0 \quad (2)$$

(2)动量守恒方程^[12]

料液流动方向(z轴)上的动量方程:

$$\partial(\rho u) / \partial t + \partial(\rho u u) / \partial z + \partial(\rho u v) / \partial r = \partial p / \partial z + (\partial / \partial z) [\mu (\partial u / \partial z)] + (\partial / \partial r) [\mu (\partial u / \partial r)] \quad (3)$$

渗透方向(r轴)上的动量方程:

$$\partial(\rho v) / \partial t + \partial(\rho v u) / \partial z + \partial(\rho v v) / \partial r = \partial p / \partial r + (\partial / \partial z) [\mu (\partial v / \partial z)] + (\partial / \partial r) [\mu (\partial v / \partial r)] \quad (4)$$

式中, p 为溶液的静压; μ 为溶液的黏度。

(3)能量守恒方程^[12]

$$\partial(\rho T) / \partial t + \partial(\rho u T) / \partial z + \partial(\rho v T) / \partial r = (\partial / \partial z) (k / c_p \partial T / \partial z) + (\partial / \partial r) (k / c_p \partial T / \partial r) \quad (5)$$

式中, k 为溶液的导热系数; c_p 为比定压热容。

(4)湍流方程

对于稳态不可压缩流体,使用简化 Realizable $k-\varepsilon$ 方程^[13]:

$$\partial(\rho k u) / \partial z = (\partial / \partial r) [(\mu + \mu_t / \sigma_k) (\partial k / \partial r)] + G_k - \rho \varepsilon \quad (6)$$

$$\partial(\rho \varepsilon u) / \partial z = (\partial / \partial r) [(\mu + \mu_t / \sigma_\varepsilon) (\partial \varepsilon / \partial r)] + \rho C_1 \varepsilon E - \rho C_2 [\varepsilon^2 / (k + \sqrt{\varepsilon})] \quad (7)$$

其中, $\sigma_k = 1.0$, $\sigma_\varepsilon = 1.2$, $C_2 = 1.9$, $C_1 = \max[0.43, \eta / (\eta + 5)]$, $\eta = (2E_{ij} \cdot E_{ij})^{1/2} (k / \varepsilon)$, $E_{ij} = (1/2) (\partial u / \partial r + \partial v / \partial z)$;湍动黏度 μ_t 与系数 C_μ 按下式计算:

$$\mu_t = \rho C_\mu (k^2 / \varepsilon) \quad (8)$$

$$C_\mu = 1 / (A_0 + A_S U^* k / \varepsilon) \quad (9)$$

其中, $A_0 = 4.0$, $A_S = \sqrt{6} \cos \phi$, $\phi = 1/3 \cos^{-1} (\sqrt{6} W)$, $W = E_{ij} / (E_{ij} E_{ij})^{1/2}$, $U^* = E_{ij}$ 。

(5)组分输运方程^[14]

$$\partial(\rho u m_A) / \partial z + \partial(\rho v m_A) / \partial r = (\partial / \partial z) [\rho D_{AB} (\partial m_A / \partial z)] + (\partial / \partial r) [\rho D_{AB} (\partial m_A / \partial r)] \quad (10)$$

$$\partial(\rho u m_B) / \partial z + \partial(\rho v m_B) / \partial r = (\partial / \partial z) [\rho D_{AB} (\partial m_B / \partial z)] + (\partial / \partial r) [\rho D_{AB} (\partial m_B / \partial r)] \quad (11)$$

式中, m_A 、 m_B 分别为氯化钠和水的质量分数; D_{AB} 为氯化钠在水中的扩散系数。

2.3 边界条件

(1)入口边界条件。当 $z = 0$ mm, -2.5 mm $< r < 2.5$ mm,定义抛物线形入口速度分布:

$$u_r = u_{\max} (1 - |r| / R)^n \quad (12)$$

式中, u_{\max} 为料液管中心处流速; n 取 1/6(管内雷诺数在模拟计算中范围为 4 000 ~ 12 000);料液入口处 NaCl 的质量分数为 0.02。

(2)出口边界条件。当 $z = 100$ mm, $r = -2.5 \sim 2.5$ mm,常压。

(3) 壁面边界条件。当 $r = 2.5 \text{ mm}$ 或 $r = -2.5 \text{ mm}, z = 0 \sim 100 \text{ mm}$ 时, $u = 0, v = 0$, 且满足式 (13):

$$u_v m_A - D_{AB} (\partial m_A / \partial r) = u_v m_{AP} \quad (13)$$

式中, u_v 为渗透速度; m_{AP} 为渗透液中氯化钠的质量分数。

2.4 模拟结果与讨论

2.4.1 浓差极化因子的分布

浓差极化现象的强弱用浓差极化因子 Γ 衡量:

$$\Gamma = m_{AW} / m_{A0} - 1 \quad (14)$$

其中, m_{A0} 为料液中氯化钠的质量分数; m_{AW} 为管壁处氯化钠的质量分数, 可结合式 (13), 采用 C 语言编写 UDF 后代入 FLUENT 软件计算得到。式 (13) 中的 u_v 和 m_{AP} 均由实验测得。

图 3 和图 4 是料液温度、浓度、流量分别为 60°C 、 20 g/L 和 40 L/h 时, 距膜管入口不同距离膜壁处及膜管内浓差极化因子 Γ 的数值。可以看出, Γ 值沿流动方向不断增大, 且浓差极化现象主要发生在膜管内壁处。另外, 因壁面处速度梯度在入口区域大, 导致浓差极化因子增大较为显著, 在接近完全发展区域时增加平缓。

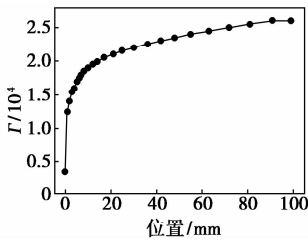


图 3 膜壁处不同位置的浓差极化因子

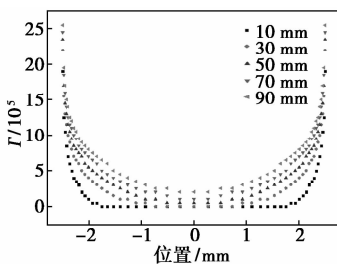


图 4 膜管内不同位置的浓差极化因子

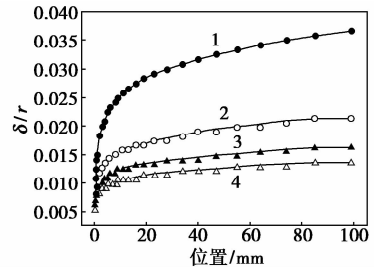
2.4.2 溶液流量对浓差极化层厚度的影响

根据模拟得到的膜壁处氯化钠的质量分数 m_{AW} , 可利用式 (15) 计算浓差极化层厚度 δ :

$$\delta = \ln[(m_{AW} - m_{AP}) / (m_{A0} - m_{AP})] \times (D_{AB} / u_v) \quad (15)$$

图 5 为料液温度和浓度分别为 60°C 、 20 g/L 时, 料液流量不同时的无量纲浓差极化层厚度 δ/r (r 为膜管内半径) 在管内的分布情况。可见, 浓差极化层厚度沿流动方向逐渐增加; 随料液流量的增大, 浓差极化层的厚度逐渐变薄, 这是因为料液流量越

大, 管内的湍动程度越剧烈, 可以减弱浓差极化层的影响, 阻止其继续增长。



1—20 L/h; 2—40 L/h; 3—60 L/h; 4—80 L/h

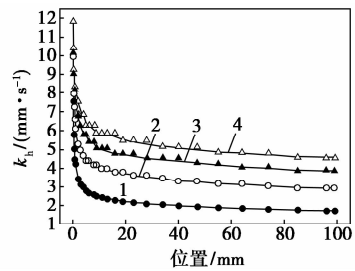
图 5 料液流量对膜管内不同位置处浓差极化层厚度的影响

2.4.3 料液流量对传质系数的影响

由式 (16) 可以计算膜管内的传质系数 k_h :

$$k_h = D_{AB} / \delta \quad (16)$$

图 6 为管内料液温度和浓度分别为 60°C 、 10 g/L 时, 料液流量对膜管内传质系数的影响。可以看出, 当料液的温度和浓度一定时, 随料液流量增加传质系数逐渐增大, 因入口处膜壁处速度的迅速递减, 致使传质系数变化显著; 传质系数在接近充分发展区时变化趋于平缓。



1—20 L/h; 2—40 L/h; 3—60 L/h; 4—80 L/h

图 6 料液流量对膜管内不同位置处传质系数的影响

3 膜蒸馏三维传热过程数值模拟

3.1 网格划分

通过 Gambit 软件对管式膜蒸馏的三维传热模型进行离散化处理, 将区域划分为六面体/楔形的结构化网格, 参见图 7。

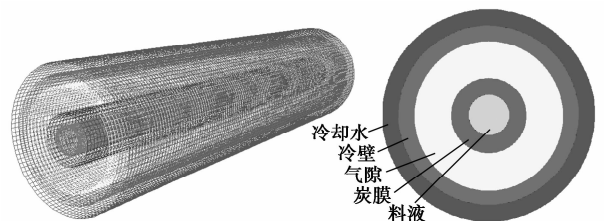


图 7 管式膜蒸馏三维网格划分示意图

3.2 控制方程

所采用的流体动力学控制方程包括连续性方程、动量守恒方程、能量守恒方程以及湍流方程,与2.2节中一致。

3.3 边界条件

(1)入口边界条件:湍流参数的指定方式选用湍流强度 I 和水力直径 L (即圆管内径),湍流强度的计算公式如下:

$$I = 0.16\text{Re}^{-1/8} \quad (17)$$

其他料液入口边界条件、出口条件与二维模型一致(参见2.3节)。

(2)冷却水入口边界条件:当 $z = 100 \text{ mm}$, $r = 11 \sim 13 \text{ mm}$ 及 $r = -13 \sim -11 \text{ mm}$,冷却水流速 $u = 0.33 \text{ m/s}$,温度 20°C 。由式(17)计算得 $I = 6.52\%$ 。

(3)冷却水出口边界条件: $z = 0 \text{ mm}$, $r = 11 \sim 13 \text{ mm}$ 及 $r = -13 \sim -11 \text{ mm}$,常压。

(4)其他边界条件:①实验条件下的渗透通量较小^[14],故忽略膜管内质量传递的影响,只考虑热量传递;②膜、气隙以及冷壁设置为固体区域;③膜管料液进出口两侧边界设为绝热壁面,对液固区域的接触面进行液固耦合处理。

3.4 模拟结果与讨论

模拟条件:料液流量、温度和浓度分别为 40 L/h 、 60°C 、 20 g/L 。

3.4.1 膜管内的速度分布

图8为距入口不同距离处膜管内的速度分布。可见,随流动距离的增加,速度边界层逐渐形成并发展,管中心的速度逐渐增大;当流动距离大于 50 mm 后,边界层充分发展,管内的速度分布基本相同,与传统的流动规律一致。

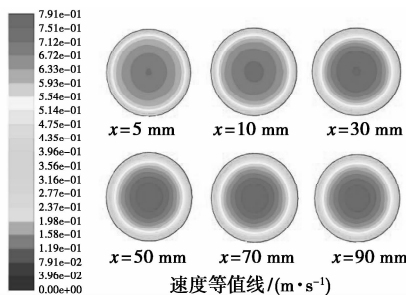


图8 膜管内不同位置的速度等值线图

3.4.2 膜管内的温度分布

图9为膜管内不同流动位置处的温度分布。可见,距入口越远,管中心的温度越小,温度边界层越厚。这是因为随着流动距离的增加,料液中的部分热量用于液体的气化并透过膜,故液体主体温度

降低。

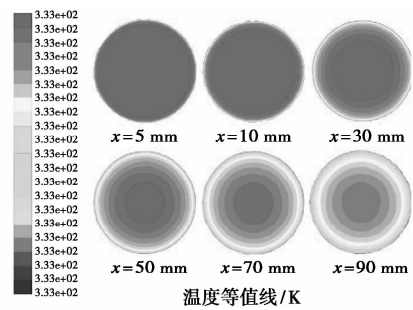


图9 膜管内不同位置的温度等值线图

3.4.3 膜管内的压力分布

图10为膜管内的压力分布。可见,沿流动方向,管内压力逐渐减小。根据机械能衡算方程,流动方向上随着距离的增大,流动阻力增大,所以压力变小。

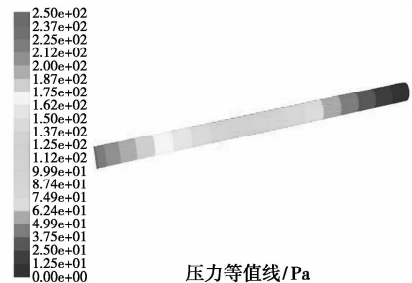


图10 膜管内压力等值线图

4 结论

(1)利用所建二维传质模型模拟得到了膜管内浓差极化因子、浓差极化层厚度和传质系数的分布规律。结果表明,沿流动方向上浓差极化因子增大、浓差极化层变厚、传质系数降低。在膜管内料液温度为 60°C 、浓度为 10 g/L 时,随着料液流量的增加,膜管内传质系数增大、浓差极化层变薄。模拟结果证明 FLUET 软件可用于膜蒸馏过程的模拟。

(2)利用所建三维传热模型模拟得到了膜管内速度、温度和压力分布规律。结果表明,在膜管内料液温度 60°C 、浓度 20 g/L 、流量 40 L/h 情况下,管中心的速度随着边界层的逐渐形成与发展而逐渐增大,管中心的温度逐渐降低,温度边界层逐渐增厚;边界层充分发展后,管内的速度分布基本相同,管内压力沿流动方向逐渐减小。模拟结果证明 FLUET 软件可用于膜蒸馏过程的模拟。

参考文献

- [1] Alkhubhri A, Darwish N, Hilal N. Membrane distillation: A comprehensive review[J]. Desalination, 2012, 287(8): 2-18.

装置监控预警与安全应急系统,在石化企业建立具备设备状态监控、数据互联互通和自动分析、事故快速预警以及安全应急智能决策等一系列功能的物联网系统。

1 系统设计功能

如图1所示,基于物联网的监控预警与安全应急系统具备4大功能模块。

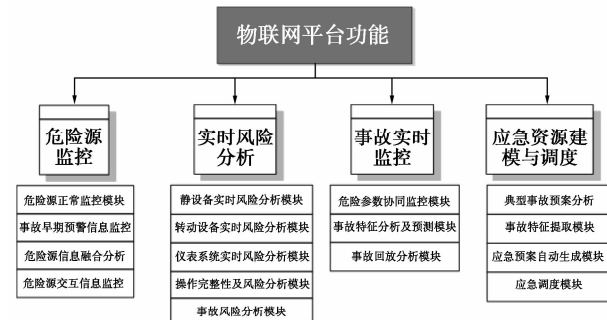


图1 系统功能框图

(1)危险源监控模块,包括危险源正常监控模块、事故早期预警监控模块、危险源交互信息监控模块以及危险源信息融合分析模块。系统监控预警对象一般涵盖石化企业生产、储运场所的动设备(离心式/往复式压缩机组、机泵群组等)以及储罐、塔器、换热器等压力容器和压力管道等设备。

(2)实时风险分析模块,主要依据危险源实时监控数据,结合 Hazop 分析方法、基于风险的检验

(RBI)和信号分析技术进行动静设备的在线风险评估,并建立相应的风险分级机制与标准,实现危险源装置的实时风险分级,指导危险源装置的风险管理。该功能模块包括静设备实时风险分析模块、转动设备实时风险分析模块、仪表系统实时风险分析模块、操作完整性及风险分析模块和事故风险分析模块。

(3)事故实时监控模块,主要用于事故状态下的危险源信息监控,为应急指挥决策提供数据支持,包括危险参数协同监控模块、事故特征分析及预测模块、事故回放分析模块。

(4)应急资源建模与调度模块,为企业建立信息化危险介质信息库、应急资源数据库、应急预案库和应急指挥调度平台,依据危险源所涉及的事故的类型、影响范围和严重程度,自动生成相应的应急救援方案、应急资源需求分配信息以及应急指挥调度方案。该模块包括典型事故预案分析模块、事故特征提取模块、应急预案自动生成模块、应急调度模块。

2 系统组成和网络架构

2.1 系统组成

该物联网系统整体采用浏览器/服务器(Browser/Services)架构,使石化企业管理人员能通过远程终端访问服务器,可以随时随地进行查询、浏览等业务流程。系统由3个层面组成:基础数据层、数据分析

(上接第177页)

- [2] Yao M, Yun C W, Tijing L D, *et al.* Effect of heat-press conditions on electrospun membranes for desalination by direct contact membrane distillation[J]. *Desalination*, 2016, 378: 80 - 91.
- [3] Abu-Zeid E R, Zhang Y, Hang D, *et al.* A comprehensive review of vacuum membrane distillation technique [J]. *Desalination*, 2015, 356: 1 - 14.
- [4] Hou D, Dai G, Fan H, *et al.* An ultrasonic assisted direct contact membrane distillation hybrid process for desalination[J]. *Journal of Membrane Science*, 2015, 476: 59 - 67.
- [5] Guan G, Yang X, Wang R, *et al.* Evaluation of heat utilization in membrane distillation desalination system integrated with heat recovery[J]. *Desalination*, 2015, 366: 80 - 93.
- [6] Shirazian S, Ashrafizadeh S N. 3D modeling and simulation of mass transfer in vapor transport through porous membranes[J]. *Chemical Engineering & Technology*, 2013, 36(1): 177 - 185.
- [7] Yu H, Yang X, Wang R, *et al.* Numerical simulation of heat and mass transfer in direct membrane distillation in a hollow fiber module with laminar flow[J]. *Journal of Membrane Science*, 2011, 384 (s1/2): 107 - 116.
- [8] Yu H, Yang X, Wang R, *et al.* Analysis of heat and mass transfer by

CFD for performance enhancement in direct contact membrane distillation[J]. *Journal of Membrane Science*, 2012, 405/406: 38 - 47.

- [9] Li W, Wang H, Li B, *et al.* Novel design of liquid distributors for VMD performance improvement based on cross-flow membrane module[J]. *Desalination*, 2014, 336(3): 80 - 86.
- [10] Tang N, Zhang H, Wang W. Computational fluid dynamics numerical simulation of vacuum membrane distillation for aqueous NaCl solution[J]. *Desalination*, 2011, 274(1): 120 - 129.
- [11] Shirazi M M A, Kargari A, Ismail A F, *et al.* Computational fluid dynamic (CFD) opportunities applied to the membrane distillation process; State-of-the-art and perspectives [J]. *Desalination*, 2016, 377: 73 - 90.
- [12] Versteeg H K, Malalasekera W. An introduction to computational fluid dynamics-The finite volume method [J]. *Epl*, 1995, 20 (5): 400.
- [13] Shih T H, Liou W W, Shabbir A, *et al.* A new k- ϵ eddy viscosity model for high Reynolds number turbulent flows[J]. *Computers & Fluids*, 1995, 24(3): 227 - 238.
- [14] 许兆广. 气隙式膜蒸馏氯化钠水溶液的研究[D]. 大连:大连理工大学, 2009. ■