

基于拓扑优化技术的板式微通道反应器换热流体板散热性能优化

王昊东, 刘鑫, 梅昊, 袁军, 唐腾飞*, 贾丽慧*

武汉工程大学化工与制药学院, 湖北 武汉

收稿日期: 2023年11月7日; 录用日期: 2024年1月2日; 发布日期: 2024年1月10日

摘要

本文针对板式微通道反应器换热流体板散热问题提出了一种基于拓扑优化技术的设计方案, 将拓扑优化方法应用在微通道反应器换热流体板散热的流道设计中。将拓扑优化方法所得到流道同传统多平行流道进行对比, 拓扑优化方法所得到流道的进出口压力降、最高温度、温度均方根均强于传统多平行流道, 为板式微通道反应器换热流体板的优化设计提供了一种新的思路。

关键词

微通道反应器, 换热流体板, 拓扑优化

Optimization of Heat Dissipation Performance of Plate Microchannel Reactor Heat Exchanger Fluid Plate Based on Topology Optimization Technique

Haodong Wang, Xin Liu, Hao Mei, Jun Yuan, Tengfei Tang*, Lihui Jia*

School of Chemical Engineering and Pharmacy, Wuhan Institute of Technology, Wuhan Hubei

Received: Nov. 7th, 2023; accepted: Jan. 2nd, 2024; published: Jan. 10th, 2024

Abstract

This article presents a design scheme using topology optimization technology to address the heat

*通讯作者。

dissipation issue of the fluid plate in the plate microchannel reactor's heat exchanger. The topology optimization method is used in designing the flow channel for the heat dissipation of the heat exchanger fluid plate of the microchannel reactor. By comparing the flow channel obtained through topology optimization with the traditional multi-parallel flow channel, it was discovered that the import and export pressures drop, maximum temperature, and root mean square of temperature of the flow channel obtained through the topology optimization method are more effective than those of the traditional multi-parallel flow channel. This offers a novel approach toward the optimization of heat exchanger plate design for plate-type microchannel reactors.

Keywords

Microchannel Reactor, Heat Exchanger Fluid Plate, Topology Optimization

Copyright © 2024 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

微通道反应器指的是一种化学反应在横向尺寸小于 1 mm 范围内完成的装置[1]。由于其微米到亚毫米的尺寸，微通道反应器表现出高的比表面积和快速混合、高效传热、传质以及高安全性等特点[2]。微通道反应器已广泛应用于各种反应过程，特别是涉及危险化学品和强放热过程的反应，如硝化[3]、重氮化[4]、卤化[5]、和氧化[6]，因此微通道反应器的换热性能是影响安全的重要因素，其结构设计是重要一环。

板式微通道反应器是微通道反应器的一种，其具有流道网络化和功能单元集成化的特点。板式微反应器通常由热交换板和反应板组成，其中反应物在反应板中混合和反应，在反应器板的每一侧，都有一个换热流体板，换热流体流过换热流体板以维持反应板中的温度，在放热反应中，热交换板中通入冷却流体带走反应板中放出的热量[7]。微通道反应器比传统釜式反应器传热能力强几个数量级，但是在面对一些强放热反应的时候依然会存在反应器内温度分布不均的现象[8]。化学反应器中的温度不均匀会造成多种后果，其中包括：产生不需要的副产物[9]、反应失控[10]、反应器性能降低[11]以及反应器空间结构的热应力和变形[12]。通过优化换热流体板的流道来改善微通道反应器的换热性能近年来受到了越来越多的关注[8]，对于换热流体板的流道的拓扑形状大多依赖于设计者的经验[13]，经验设计的方法会在一定程度上限制冷板流道的优化设计，拓扑优化方法能从数学的角度得到最优流道，这能跳出传统经验的限制，提高换热流体板流道的设计水平。

拓扑优化方法最初由 Bendsøe 和 Kikuchi 提出[14]，该方法通过数学计算获得结构的最优配置。对于流场的拓扑优化问题，Borrvall 和 Petersson 做了初步的工作[15]，他们通过在层流流动模型中插入阻尼项建立了 Brinkman 模型，然后用 SIMP 方法研究了流体中耗散功率最小的问题。Olkels 等研究了流体传热拓扑优化问题[16]，将拓扑优化方法应用于微流体系统的设计。针对一个内部方形的微流体系统，他们将温度场加入到拓扑优化的 Navier-Stokes 流动问题中。2009 年，Dede 团队使用商用有限元软件(COMSOL)和 MATLAB 研究传热和流体流动多物理场问题的拓扑优化[17]。

目前将拓扑优化技术运用在微通道反应器冷却流体板的设计优化上的报道有限，本文采用拓扑优化技术设计优化板式微通道反应器传热流体板，分别在热源功率为 3000 w、5000 w、7000 w 的情况下得到三种新的流道结构，为微通道反应器传热流体板设计提供一种新思路。本文使用商业软件 COMSOL 对优化问题进行建模和求解。

2. 优化模型

2.1. 几何模型和边界条件

如图 1, 微通道反应器传热流体板类似于一个冷板流道, 其中心平面二维流动状态和三维流动状态十分相似[18], 因此我们以传热流体板的中心平面作为拓扑优化对象建立了二维共轭传热拓扑优化模型。传热流体版为长 160 mm, 宽 120 mm 的矩形, 在设计域施加功率为 Q 的均匀热源, 入口流速 0.01 m/s 的温度 0°C 的冷却水冷却目标区域。构成传热流体板的流体和固相材料物性见表 1。

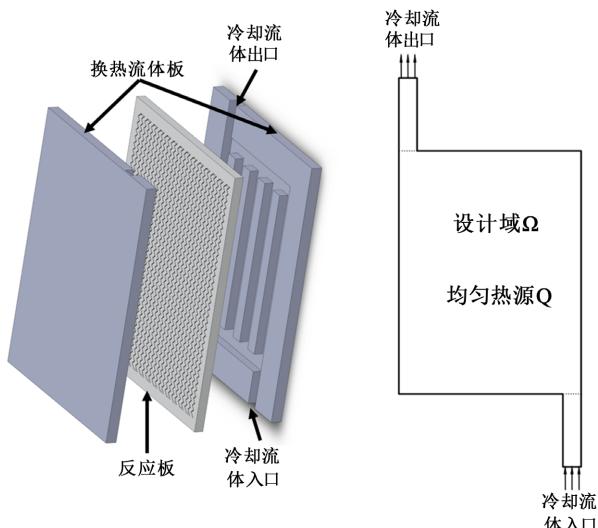


Figure 1. Schematic diagram of heat transfer fluid plate of microchannel reactor
图 1. 微通道反应器传热流体板示意图

Table 1. Physical properties of fluid and solid phase materials for heat transfer fluid plates
表 1. 传热流体板的流体和固相材料物性表

材料	密度	定压热容	导热系数	黏度
水	1000	4180	0.6	0.001
碳化硅 β 相	3220	710	120	-

2.2. 数学模型

进口雷诺数计算公式(1)计算进口处的雷诺数

$$Re = \frac{\rho UL}{\mu} \quad (1)$$

式中, ρ 为流体密度; U 为进口处的平均速度; L 为进口段的特征长度; μ 为流体动力粘度。

2.2.1. 速度场

本文采用不可压缩的层流流动模型描述流场。

流体连续性方程:

$$\rho \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2)$$

其中 ρ 是流体密度, \mathbf{u} 是流体速度场。

为了区分流体和固体，在流体动量守恒方程中加入阻力项 \mathbf{F} ，

$$\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = \nabla \cdot [-p\mathbf{I} + \mathbf{K}] + \mathbf{F} \quad (3)$$

$$\mathbf{K} = \mu \left(\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right) \quad (4)$$

式中 ρ 是流体的密度； \mathbf{u} 是速度场； p 为压力场； μ 为流体动力粘度， \mathbf{F} 为阻力项。

2.2.2. 温度场

在流固流体和固体共存的拓扑优化问题中，控制温度场的传热方程需要同时考虑到流体相和固体相的共存[13]，因此采用多孔介质传热方程：

$$\rho c_p \nabla \cdot (\mathbf{u} T) = \nabla \cdot (k \nabla T) + Q \quad (5)$$

2.2.3. 拓扑优化列式

本文中我们使用 Borrvall 和 Petersson (2003) 提出变密度惩罚方法(SIMP)来进行拓扑优化[15]。该方法假设设计域的介质是理想的多孔介质，我们引入变量 γ 来表示设计域的孔隙率。当该区域 $\gamma=1$ 时表示该区域为流体，当 $\gamma=0$ 时表示该区域为固体，为了区分固体和流体，在流体控制方程中，我们引入了阻力项 \mathbf{F} ， \mathbf{F} 的表达式为：

$$\mathbf{F} = \alpha \mathbf{u} \quad (6)$$

式中 α 表示阻尼系数， \mathbf{u} 表示速度矢量

在 Brinkman 惩罚模型中， α_{\max} 是达西数的函数[19]

$$\alpha_{\max} = \frac{\mu}{Da \cdot L^2} \quad (7)$$

式中， Da 为达西数，通常取一个较小的值； L 为进口段的特征长度。

在多孔介质中，达西值越大，表明多孔介质的渗透性越大，本文中 Da 取 10^{-4} 。

2.2.4. 阻尼系数及物性插值

为了获得多孔介质的物性参数和阻尼系数，使用插值法对 γ 介于 0 和 1 之间的区域的物性和阻尼系数进行定义，为了避免优化后结构产生 γ 介于 0 和 1 之间的区域，我们使用凸函数对阻尼系数及导热系数进行插值，密度和定压热容则采用线性插值[13]。

$$\alpha(\gamma) = \alpha_f + (\alpha_s - \alpha_f) \frac{q(1-\gamma)}{q+\gamma} \quad (8)$$

$$k(\gamma) = k_s + \gamma \frac{(k_f - k_s)(1-q)}{\gamma+q} \quad (9)$$

$$\rho(\gamma) = \rho_s + \gamma (\rho_f - \rho_s) \quad (10)$$

$$Cp(\gamma) = Cp_s + \gamma (Cp_f - Cp_s) \quad (11)$$

2.2.5. 优化目标

本文的优化的目的是提升微通道反应器内的温度分布均匀性，而温度的均方根值可以非常好的反映了散热面温度分布的均匀性[13]，所以本文选择温度的均方根值作为评价传热性能的指标。因此在本文中采用温度的均方根作为其热优化目标。

$$OBJ_T = \sqrt{\frac{1}{S} \int_{\Omega_d} (T - \bar{T})^2 d\Omega_d} \quad (12)$$

$$\bar{T} = \frac{1}{S} \int_{\Omega_d} T d\Omega_d \quad (13)$$

式中, OBJ_T 表示设计域的温度优化目标, S 表示设计域的面积; T 表示设计域的温度场; \bar{T} 为设计域的平均温度。

此外, 我们的目标是获得最佳的流动渠道。为了构建数学模型, 我们利用数学中流体的耗散功率来表示拓扑优化过程中格式化的流道。从其他研究人员之前的工作中, 我们可以知道, 当规定的速度是均匀的和垂直于边界时, 最小化耗散的功率相当于最小化通过域的阻力或平均压降[15]。我们把流体的动能耗散功率作为第二优化目标。

$$OBJ_f = \int_{\Omega_d} \left\{ \frac{1}{2} \mu \sum_{i,j} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)^2 + \sum_i \alpha(\gamma) u_i^2 \right\} d\Omega_d \quad (14)$$

为了合并两个优化目标, 需要将两个优化目标进行归一化在使用一定的加权系数相加

$$OBJ'_T = (OBJ_T - OBJ_T^{(\min)}) / (OBJ_T^{(0)} - OBJ_T^{(\min)}) \quad (15)$$

$$OBJ'_f = (OBJ_f - OBJ_f^{(\min)}) / (OBJ_f^{(0)} - OBJ_f^{(\min)}) \quad (16)$$

$$OBJ = nOBJ'_T + mOBJ'_f \quad (17)$$

2.2.6. 亥姆霍兹方程过滤和正曲双切投影

为了使获得独立于网格的优化结果避免棋盘格问题, 需要使用亥姆霍兹方程对优化问题进行正则化[20]。

$$\gamma_f = R_{\min}^2 \nabla^2 \gamma_f + \gamma_c \quad (18)$$

式中 γ_c 表示输入设计变量, 其中 R_{\min} 为亥姆霍兹过滤半径, γ_f 为滤波后的设计变量。

亥姆霍兹过滤会产生 γ 介于 0 和 1 的区域, 该区域在实际加工中无法实现, 因此在拓扑优化中我们要尽量避免产生 γ 介于 0 和 1 的区域, 因此我们通过双曲正切函数对设计变量进行投影

$$\gamma = \frac{\tanh(\beta(\gamma_f - \gamma_\beta)) + \tanh(\beta\gamma_\beta)}{\tanh(\beta(1 - \gamma_\beta)) + \tanh(\beta\gamma_\beta)} \quad (19)$$

式中 γ_β 为投影点, β 为投影斜率。

3. 结果和讨论

分别对热源 Q 为 3000 w/m^2 、 5000 w/m^2 、 7000 w/m^2 情况进行拓扑优化, 通过迭代优化分析, 得到了流道的拓扑形状, 优化结果如图 3, 其中黑色部分表示固体, 白色部分表示流过的液体。

为了验证拓扑优化后结构散热性能, 将优化后结果和常见的多平行流道进行对比, 多平行流道模型如图 4。同样在目标区域施加功率为 Q 的面外热源, 使用入口流速为 0.01 m/s , 温度 0°C 的冷却水冷却目标区域, 采用不可压缩的层流流动模型描述流场。

模拟所得多平行流道速度场和拓扑优化所得到流道的速度场进行对比见图 5。在速度场分布中可以看出在多平行流道中流动分布不均匀, 中间流道几乎没有冷却流体经过, 这会造成中间部分热量难以转移, 模拟所得多平行流道温度场和拓扑优化所得到流道的温度场进行对比见图 6, 从温度场分布也可以

看出多平行流道中间部分存在局部热点，而通过拓扑优化所得到的流道流动分布则更为均匀的将冷却流体引向流体板的不同位置，使得冷却流体能更均匀的带走不同区域的热量，在温度场分布中也可以看出在施加不同功率的热量下优化后流道均未出现局部热点。

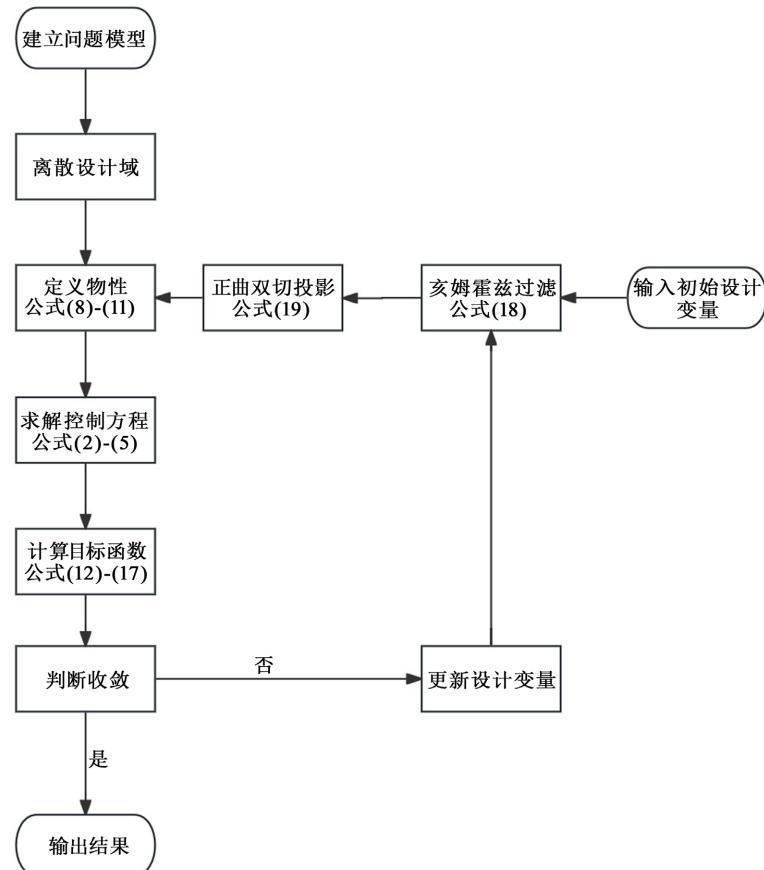


Figure 2. Flowchart of topology optimization
图 2. 拓扑优化流程图

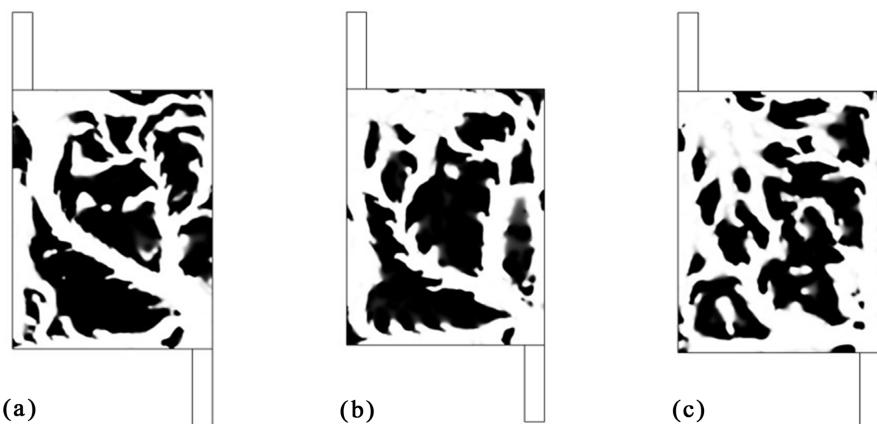


Figure 3. (a) Topology obtained for heat source power $Q = 3000 \text{ w/m}^2$; (b) Topology obtained for heat source power $Q = 5000 \text{ w/m}^2$; (c) Topology obtained for heat source power $Q = 7000 \text{ w/m}^2$

图 3. (a) 热源功率 $Q = 3000 \text{ w/m}^2$ 时得到的拓扑结构; (b) 热源功率 $Q = 5000 \text{ w/m}^2$ 时得到的拓扑结构; (c) 热源功率 $Q = 7000 \text{ w/m}^2$ 时得到的拓扑结构

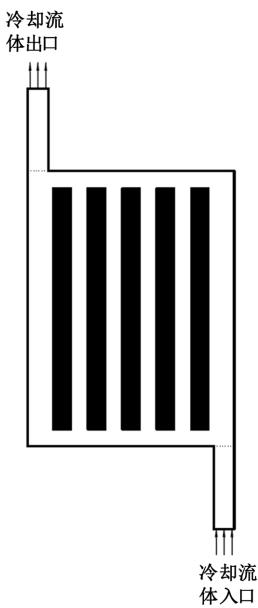


Figure 4. Schematic diagram of multi-parallel flow channel
图 4. 多平行流道结构示意图

在不同输入热量下优化流道和多平行流道的压力降见表2 在输入热源功率 Q 为 3000 w/m^2 、 5000 w/m^2 和 7000 w/m^2 的情况下拓扑优化所得的流道压力降较平行流道分别降低 16.1%、9.0%、4.0%，这表明这三种结构的流体在流体的过程中耗散的能量均小于平行流道；不同输入热量下优化流道和多平行流道的最高温度和温度均方根见表 3，在输入热源功率 Q 为 3000 w/m^2 、 5000 w/m^2 和 7000 w/m^2 的情况下拓扑优化所得的流道的最高温度比平行流道分别低 5.40 K、10.04 K、14.21 K，温度均方根均比平行流道分别低 47.6%、45.2%、46.1%。

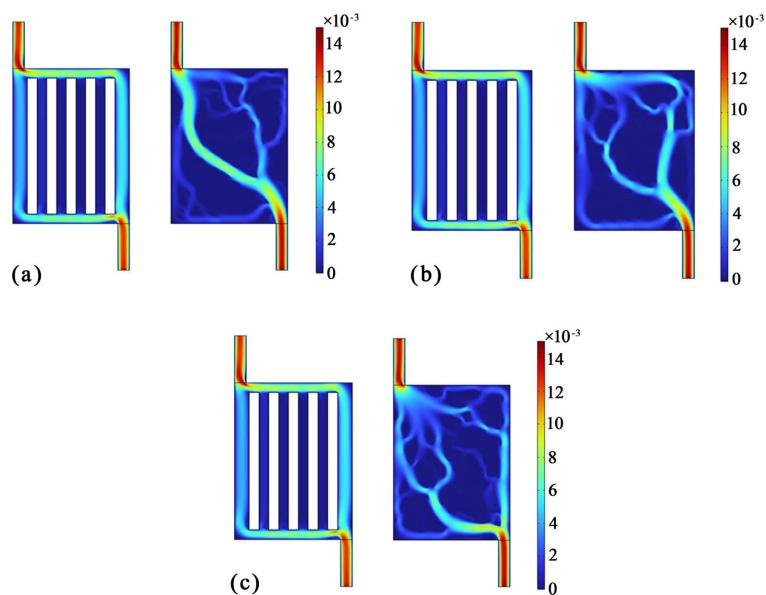


Figure 5. Velocity fields of multi-parallel flow channel under (a) 3000 w , (b) 5000 w , and (c) 7000 w heat sources and the velocity fields of the flow channel obtained by topology optimization

图 5. (a) 3000 w 、(b) 5000 w 、(c) 7000 w 热源下多平行流道速度场和拓扑优化所得到流道速度

Table 2. Pressure drop in the flow channel obtained by multi-parallel flow channel and topology optimization
表 2. 多平行流道和拓扑优化所得到流道压降

输入热量 $Q(\text{w/m}^2)$	优化流道压降(Pa)	多平行流道压降(Pa)
3000	0.271	0.323
5000	0.294	0.323
7000	0.310	0.323

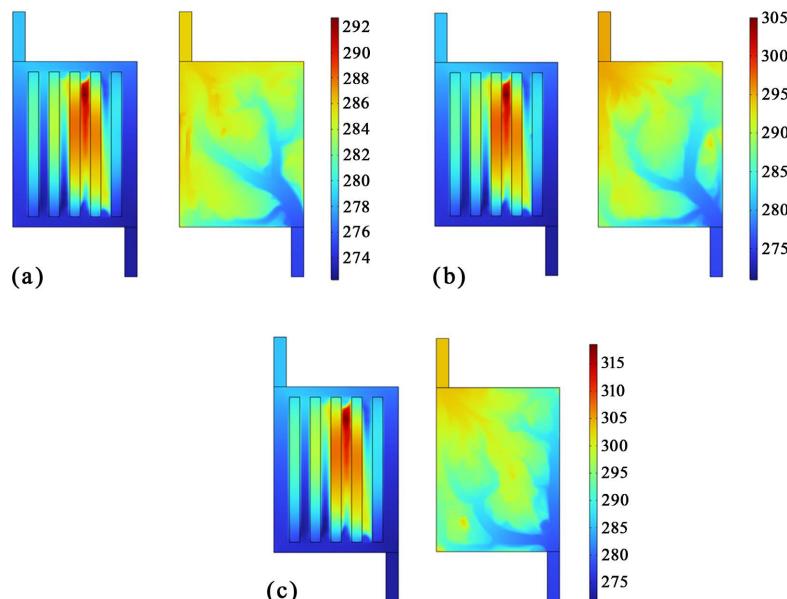


Figure 6. Temperature fields of multi-parallel flow channel under (a) 3000 w, (b) 5000 w, and (c) 7000 w heat sources and the velocity fields of the flow channel obtained by topology optimization

图 6. (a) 3000 w、(b) 5000 w、(c) 7000 w 热源下多平行流道速度场和拓扑优化所得到流道温度场

Table 3. Maximum temperature and temperature root mean square in the temperature field of the flow channel obtained by parallel flow channel velocity field and topology optimisation

表 3. 平行流道速度场和拓扑优化所得到流道温度场中最高温度和温度均方根

输入热量 $Q(\text{W})$	优化流道最高温度(K)	多平行流道最高温度(K)	优化流道均方根(K)	多平行流道均方根(K)
3000	287.32	292.72	2.39	4.56
5000	295.45	305.49	4.18	7.63
7000	304.41	318.62	5.72	10.61

4. 总结

本文采用拓扑优化方法对微通道反应器传热流体板进行了设计，建立了微通道反应器传热流体板二维拓扑优化模型，以温度均方根和流体耗散能为优化目标，在施加热量功率为 3000 w/m^2 、 5000 w/m^2 、 7000 w/m^2 时对模型进行求解，得到了三种优化后的流道结构，将这三种结构和传统多平行流道传热流体板进行对比结论如下：

(1) 与传统的多平行流道冷却板相比，优化后的冷却板为微通道反应器提供了更有效的冷却能力，使

微通道反应器在进行高放热反应时温度分布更加均匀。

(2) 优化后的传热流体板内流体流速更均匀, 能将冷却流体引向流体板的不同位置, 使得冷却流体能更均匀的带走不同区域的热量。

(3) 优化后结构进出口压力降、最高温度、温度均匀性均强于传统多平行流道传热流体板且施加热量越高优化流道和多平行流道差距越明显。

基金项目

武汉工程大学研究生创新教育基金(CX2022054)资助。

参考文献

- [1] Watts, P. and Wiles, C. (2007) Recent Advances in Synthetic Micro Reaction Technology. *Chemical Communications*, **2007**, 443-467. <https://doi.org/10.1039/B609428G>
- [2] Gutmann, B., Cantillo, D. and Kappe, C.O. (2015) Continuous-Flow Technology—A Tool for the Safe Manufacturing of Active Pharmaceutical Ingredients. *Angewandte Chemie International Edition*, **54**, 6688-6728. <https://doi.org/10.1002/anie.201409318>
- [3] Li, L., Yao, C., Jiao, F., Han, M. and Chen, G. (2017) Experimental and Kinetic Study of the Nitration of 2-Ethylhexanol in Capillary Microreactors. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, **117**, 179-185. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2017.04.005>
- [4] Wang, F.J., Ding, Y.C. and Xu, J.H. (2019) Continuous-Flow Synthesis of Pigment Red 146 in a Microreactor System. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, **58**, 16338-16347. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.9b03045>
- [5] Fanelli, F., Parisi, G., Degennaro, L. and Luisi, R. (2017) Contribution of Microreactor Technology and Flow Chemistry to the Development of Green and Sustainable Synthesis. *Beilstein Journal of Organic Chemistry*, **13**, 520-542. <https://doi.org/10.3762/bjoc.13.51>
- [6] Sang, F., Huang, J. and Xu, J. (2020) A Circular Microreaction Method to the Safe and Efficient Synthesis of 3-Methylpyridine-N-Oxide. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, **28**, 1320-1325. <https://doi.org/10.1016/j.cjche.2020.02.002>
- [7] Haugwitz, S. and Hagander, P. (2006) Challenges in Start-Up Control of a Heat Exchange Reactor with Exothermic Reactions; A Hybrid Approach. *IFAC Proceedings Volumes*, **39**, 185-190. <https://doi.org/10.3182/20060607-3-IT-3902.00035>
- [8] Jiang, S., Yang, Z., Zhang, J., Duan, X., Qian, G. and Zhou, X. (2022) Development of a Mini-Channel Heat Exchanger Reactor with Arborescent Structures for Fast Exothermic Reactions. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, **61**, 14121-14131. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.2c02601>
- [9] Msaed, M.H.M. (2021) Control of Temperature Uniformity for Exothermic Liquid Reaction in Structured Passages. Master's Thesis, University of Sheffield, Sheffield.
- [10] Taha, M.M., Said, I.A., Zeitoun, Z., Usman, S. and Al-Dahhan, M.H. (2023) Effect of Non-Uniform Heating on Temperature and Velocity Profiles of Buoyancy Driven Flow in Vertical Channel of Prismatic Modular Reactor Core. *Applied Thermal Engineering*, **225**, Article ID: 120209. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2023.120209>
- [11] Milacic, E., Manzano, M.N., Madanikashani, S., Heynderickx, G., van Geem, K., van de Greef, A., Richter, A., Kriebitzsch, S., Buist, K. and Baltussen, M. (2022) Experimental Study on the Temperature Distribution in Fluidised Beds. *Chemical Engineering Science*, **248**, Article ID: 117062. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2021.117062>
- [12] Xu, W., Chen, D. and Qian, H. (2020) Non-Uniform Temperature Fields and Effects of Steel Structures: Review and Outlook. *Applied Sciences*, **10**, Article 5255. <https://doi.org/10.3390/app10155255>
- [13] Qian, S., Wang, W., Ge, C., Lou, S., Miao, E. and Tang, B. (2018) Topology Optimization of Fluid Flow Channel in Cold Plate for Active Phased Array Antenna. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **57**, 2223-2232. <https://doi.org/10.1007/s00158-017-1852-8>
- [14] Bendsøe, M.P. and Kikuchi, N. (1988) Generating Optimal Topologies in Structural Design Using a Homogenization Method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **71**, 197-224. [https://doi.org/10.1016/0045-7825\(88\)90086-2](https://doi.org/10.1016/0045-7825(88)90086-2)
- [15] Borrvall, T. and Petersson, J. (2003) Topology Optimization of Fluids in Stokes Flow. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, **41**, 77-107. <https://doi.org/10.1002/fld.426>
- [16] Okkels, F., Olesen, L.H. and Bruus, H. (2005) Applications of Topology Optimization in the Design of Micro- and

- Nanofluidic Systems. *NSTI-Nanotech* 2005, **1**, 575-578.
- [17] Dede, E.M. (2009) Multiphysics Topology Optimization of Heat Transfer and Fluid Flow Systems. *Proceedings of the COMSOL Users Conference*, 2009, 715.
- [18] Koga, A.A., Lopes, E.C.C., Nova, H.F.V., De Lima, C.R. and Silva, E.C.N. (2013) Development of Heat Sink Device by Using Topology Optimization. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **64**, 759-772.
<https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2013.05.007>
- [19] Kondoh, T., Matsumori, T. and Kawamoto, A. (2012) Drag Minimization and Lift Maximization in Laminar Flows via Topology Optimization Employing Simple Objective Function Expressions Based on Body Force Integration. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **45**, 693-701. <https://doi.org/10.1007/s00158-011-0730-z>
- [20] Kawamoto, A., Matsumori, T., Yamasaki, S., Nomura, T., Kondoh, T. and Nishiwaki, S. (2011) Heaviside Projection Based Topology Optimization by a PDE-Filtered Scalar Function. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **44**, 19-24. <https://doi.org/10.1007/s00158-010-0562-2>