

用正交配置法求解血液透析超滤的传质动力学模型

张国亮* 张凤宝 王绍亭

陈元勇

(天津大学生物医学工程研究所, 天津 300072)

(天津大学化工系, 天津 300072)

摘 要 提出了血液透析、血液超滤和血液透析超滤过程传质的通用模型, 并利用正交配置技术分析了影响传质速率的各种因素。结果表明, 采用正交配置法进行上述传质过程的模拟时, 简单的三点配置即与解析解的结果接近。采用正交配置法比有限差分法简单、快速和准确。

关键词 血液透析 血液超滤 血液透析超滤 传质模型 正交配置

1 引 言

血液透析(Hemodialysis 简称 HD)、血液超滤(Hemofiltration 简称 HF)以及血液透析超滤(Hemodiafiltration 简称 HDF)是临床治疗慢性肾功能衰竭病人的有效方法。为了达到装置设计的最优化, 要求对其传质机理进行深入的理论分析。文献[1]~[8]的作者分别对单纯透析、伴有低超滤速率透析过程的传质动力学以及超滤器膜件的设计进行了研究。在上述研究中, 对于 HD 或低超滤速率下 HDF 的传质模型, 一般采用解析法求解; 而对于高超滤速率下的 HDF 和 HF 的传质模型, 由于不能实施分离变量法, 故采用数值法求解。解析法缺点是有时模型过于简化, 与实际偏差较大; 至于数值法, 目前文献上报道的多采用有限元差分法^[7,8], 该法耗费的计算机时较大。

为克服上述求解方法的缺点, 本文采用正交配置的数值技术进行了 HD、HF 和 HDF 传质动力学的模拟。

2 模型及求解

2.1 模型建立及其分析

本文以临床上广泛使用的空心纤维膜件为研究对象。在建立其传质模型时假定^{〔5〕}:

1. 血液为牛顿型流体, 在纤维通道内的流动为充分发展的二维稳态层流;
2. 溶质的轴向扩散可忽略;
3. 血液的物性参数保持不变。

基于上述假定, 可得血液侧溶质的对流扩散方程

1992-07-23 收到初稿, 1993-01-11 收到修改稿。

* 通讯联系人。

$$u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial r} = D \left(\frac{\partial^2 c}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial c}{\partial r} \right) \quad (1)$$

边界条件

$$(I) \quad x = 0, \quad c = c_0$$

$$(II) \quad r = 0, \quad \partial c / \partial r = 0$$

$$(III) \quad r = R, \quad -D \frac{\partial c}{\partial r} + v(x, R)c_w = k_w(c_w - c_D) + c_w v(x, R)T$$

边界条件(III)表示溶质扩散与对流到膜表面上的通量等于溶质由膜表面向膜内传递的通量。

式(1)中的速度分布可引用 Koziniski 等⁽⁹⁾的结果。

$$u(x, r) = [2Q_0 / (\pi R)^2 - 4v_0 x(1 - e^{-\alpha x}) / R][1 - (r/R)^2] \quad (2)$$

$$v(x, r) = V_0 e^{-\alpha x} [2r/R - (r/R)^3] \quad (3)$$

为便于方程求解,作下述无因次变换

$$c^* = c / c_0, \quad r^* = r / R, \quad x^* = xD / (2R^2 u_b)$$

$$\psi = V_0 R / D, \quad u^* = u / u_b, \quad v^* = v / V_0, \quad Sh_w = k_w R / D$$

式中

$$u_b = Q_0 / (\pi R^2)$$

将式(1)写成

$$\frac{\partial c^*}{\partial x^*} = \frac{2}{u^*} \left(\frac{\partial^2 c^*}{\partial r^{*2}} + \frac{1}{r^*} \frac{\partial c^*}{\partial r^*} \right) - \frac{2\psi v^*}{u^*} \frac{\partial c^*}{\partial r^*} \quad (4)$$

边界条件

$$(I) \quad x^* = 0, \quad c^* = 1$$

$$(II) \quad r^* = 0, \quad \frac{\partial c^*}{\partial r^*} = 0$$

$$(III) \quad r^* = 1, \quad \frac{\partial c^*}{\partial r^*} = -Sh_w(c_w^* - c_D^*) + (1 - T_R)\psi E(x^*)c_w^*$$

一般在 HD 或 HDF 操作时,透析液流率远大于血液流率,故透析液侧溶质浓度可忽略。此时边界条件(III)可表示成

$$(III) \quad r^* = 1, \quad \frac{\partial c^*}{\partial r^*} = -[Sh_w - (1 - T_R)\psi E(x^*)]c_w^*$$

式中 $E(x) = e^{-\alpha x}$ 为超滤衰减函数, $[Sh_w - (1 - T_R)\psi E(x^*)]$ 是表示传质特性的参数,令

$$K(x^*) = Sh_w - \psi(1 - T_R)E(x^*) \quad (5)$$

$K(x^*)$ 为一无因次准数,作者称其为透析-超滤数,其物理意义为:

1. 当 $K(x^*) < 0$, 表示传质过程中 HF 起主导作用,特别当式(5)中的 $Sh_w = 0$, 则为单纯 HF 过程。

2. 当 $K(x^*) > 0$, 表示传质过程中 HD(扩散传质)起支配作用;若 $\psi = 0$, 则为单纯 HD 过程;若 $K(x^*) > 0$ 即为 HDF 过程。

3. 当 $K(x^*) = 0$, 表示 HD 作用与浓差极化作用相抵,此时浓度与径向距离无关,为

常数。此种情况无实际意义。

综上所述,式(4)及边界条件(I~III)为一通用的HD、HF和HDF传质模型,文献报道的研究均为其特例。因此,本文将 $K(x^*)$ 作为模型参数。

2.2 模型的正交配置解

正交配置的数值方法常用于求解化学工程中的非线性问题,分系数法和纵坐标法^[10]。作者采用了易于程序化的纵坐标法。

利用三点配置,将式(4)写成

$$\frac{dc_i^*}{dx_i^*} = \frac{2}{u_i^*} \sum_{j=1}^4 B_{ij} c_j^* - \frac{2\psi v_i^*}{u_i^*} \sum_{j=1}^4 A_{ij} c_j^* \quad (6)$$

边界条件(III)'亦可写成

$$(III)'' \sum_{j=1}^4 A_{4j} c_j^* = -K(x_i^*) c_4^*$$

将边界条件(III)''中的 c_4^* 解出后代入式(6)中,得

$$\frac{dc_i^*}{dx_i^*} = \frac{2}{u_i^*} \left[\sum_{j=1}^3 (B_{ij} - \psi v_i^* A_{ij}) - (B_{i4} - \psi v_i^* A_{i4}) \frac{\sum_{j=1}^3 A_{4j} c_j^*}{K(x_i^*) + A_{44}} \right] \quad (7)$$

式中 A 、 B 为配置矩阵

$$A = \begin{bmatrix} -3.359794 & 5.292432 & -3.101029 & 1.168391 \\ -1.398039 & -1.562754 & 4.319737 & -1.358942 \\ 0.697265 & -3.676675 & -1.126758 & 4.106217 \\ -15.881426 & 5.401063 & -19.174383 & 15.000000 \end{bmatrix}$$

$$B = \begin{bmatrix} -15.881426 & 19.636380 & -5.281186 & 1.526233 \\ 11.151861 & -34.497415 & 29.235709 & -5.890155 \\ -3.540587 & 34.512110 & -99.621159 & 68.649637 \\ -33.869987 & 136.249690 & -252.379700 & 150.000000 \end{bmatrix}$$

配置点 r_i 的矩阵为

$$R_3 = [0.297637 \quad 0.639896 \quad 0.887502]$$

其次,将速度分布式(2)及(3)进行无因次化,然后利用变步长四阶R-K对式(7)求解。

截面上溶质的混合杯浓度可采用权重因子法来计算^[10]。然而计算发现,此法与解析解^[5,6]的偏差较大。因此作者直接利用 c_m 的定义求出

$$c_m^* = \int_0^1 c^* u^* r^* dr^* / \int_0^1 u^* r^* dr^* \quad (8)$$

式中, c^* 采用多项式拟合,即设

$$c^* = a_0 + a_1 r^{*2} + a_2 r^{*4} + a_3 r^{*6} \quad (9)$$

$a_i (i=0,1,2,3)$ 由配置点 R_3 和壁面处($r^*=1$)的 $c_i^* (i=1,2,3,4)$ 值求出

$$\begin{bmatrix} 1 & r_1^{*2} & r_1^{*4} & r_1^{*6} \\ 1 & r_2^{*2} & r_2^{*4} & r_2^{*6} \\ 1 & r_3^{*2} & r_3^{*4} & r_3^{*6} \\ 1 & r_4^{*2} & r_4^{*4} & r_4^{*6} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1^* \\ c_2^* \\ c_3^* \\ c_4^* \end{bmatrix} \quad (10)$$

用上述方法计算的 c_m , 与解析解非常接近。

根据对流传质的定义, 得

$$d\dot{m} = k_w(c_w - c_D)dS + V_o E(x^*) T_R c_w dS \quad (11)$$

上式亦可写成

$$d\dot{m} = k_d(c_m - c_D)dS + k_u(c_m - c_D)dS \quad (12)$$

或

$$d\dot{m} = k_o(c_m - c_D)dS \quad (13)$$

将式(11)~(13)联立, 当 $c_D \neq 0$ 时, 得

$$Sh_d = Sh_w c_w / c_m \quad (14)$$

$$Sh_u = \psi E(x^*) T_R c_w / c_m \quad (15)$$

$$Sh_o = Sh_d + Sh_u \quad (16)$$

3 结果与讨论

3.1 恒超滤速率 [$E(x^*) = 1$]

Abbas 等^[5,6]对此作了较全面的分析, 但未包括单纯 HF。作者将 Abbas 的分析扩展到 HF 的情形。图 1 为无因次浓度的径向分布。显然在 $K(x^*) > 0$ (HD 和 HDF) 的情况下, c^* 随 r^* 的增大而减小, 于壁面处浓度最低(见图 1 中的曲线 3、4 和 5)。与此相反, 当 $K < 0$ (HF) 的情况下, c^* 随 r^* 的增加而增大, 于壁面处达到最高(见图 1 中的曲线 1、2)。这是由于在 HF 的情况下, 溶质由流体主体传递到壁面处, 一部分溶质被截留, 形成浓差极化所致。此外, 由图 1 可见, 随 ψ 的增大, 曲线向上移动。这是由于 ψ 反映超滤速率的影响, ψ 值越大, 溶质以对流方式传递到壁面的速率越快, 造成壁面处浓度增大, 因而整个截面浓度均相对升高。

同样, 图 2 所示的 c_m^* 随 x^* 变化的趋势与图 1 相同。即当 $K > 0$, c_m^* 沿流动方向降低; 当 $K < 0$, c_m^* 随 x^* 的增加而增大。

图 3 为不同 K 值下 Sh_o 随 x^* 的变化曲线。由图可见, Sh_o 在进口处最大, 以后随着 x^* 的增加逐渐减小, 最后趋于定值。据此在进行膜件设计时, 为提高其传质效率, 在可能的条件下应尽量缩短纤维长度。此外, 当 Sh_w 一定, ψ 越大, Sh_o 越大。

为考察 ψ 对不同尿毒物质传质性能的影响, 本文以临床常用的两种典型膜(铜仿膜 CUP 和聚丙烯腈膜 PAN) 以及尿素和 V_{B12} 为低分子和中分子代表物, 进行了 HDF 传质性能分析, 所用参数示于表 1。图 4 和图 5 分别为尿素、 V_{B12} 的传质 Sherwood 数随超滤数 ψ 变化的曲线。由图可见, Sh_d 随 ψ 的增加略有增大, 而 Sh_u 则几乎随 ψ 呈线性增大。

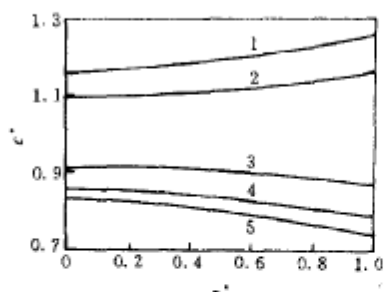


图 1 无因次浓度的径向分布

Fig.1 Dimensionless local concentration vs radial distance for various constant K

($Q_0 = 200 \text{ ml/min}$, $L = 20 \text{ cm}$,

$S = 1.0 \text{ m}^2$, $R = 0.01 \text{ cm}$,

$D = 10 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$, $T_R = 0.6$)

1— $K = -0.1000$, $Sh_w = 0$, $\psi = 0.25$;

2— $K = -0.0668$, $Sh_w = 0$, $\psi = 0.1667$;

3— $K = 0.0667$, $Sh_w = 0.1667$, $\psi = 0.25$;

4— $K = 0.1267$, $Sh_w = 0.1667$, $\psi = 0.1$;

5— $K = 0.1667$, $Sh_w = 0.1667$, $\psi = 0$

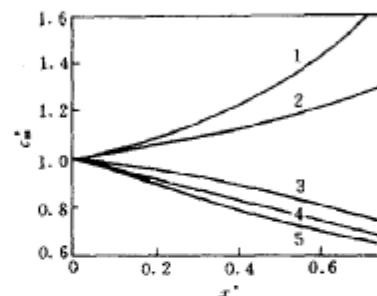


图 2 混合杯浓度随轴向距离的变化

Fig.2 Mixing-cup concentration vs axial distance for various constant K

($Q_0 = 200 \text{ ml/min}$, $L = 20 \text{ cm}$,

$S = 1.0 \text{ m}^2$, $D = 1.0 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$,

$R = 0.01 \text{ cm}$, $T_R = 0.6$)

1— $K = -0.1000$, $Sh_w = 0$, $\psi = 0.25$;

2— $K = -0.0668$, $Sh_w = 0$, $\psi = 0.1667$;

3— $K = 0.0667$, $Sh_w = 0.1667$, $\psi = 0.25$;

4— $K = 0.1267$, $Sh_w = 0.1667$, $\psi = 0.1$;

5— $K = 0.1667$, $Sh_w = 0.1667$, $\psi = 0$

3.2 与解析解及有限差分解的比较

在 $E(x^*) = 1$ 即 K 为常数情况下, 将本文的正交配置解与相同条件下的解析解^[5] 进行比较, 发现两者的结果非常接近。表 2 列出了相同条件下由三点配置求出的无因次浓度与解析解值部分结果的比较。由表 2 可见, 采用正交配置法求解时, 仅用简单的三点配置即与解析解结果的 3 位有效数字一致。

此外计算发现, 若达到相同的计算精度, 有限差分法所耗费的计算时间约为正交配置法的 8 倍。

3.3 $E(x^*)$ 对传质的影响

在 HF 或 HDF 的实际操作中, 超滤速率沿流动方向是不断衰减的, 这是由于大的超滤通量引起了壁面附近的浓差极化^[7]。计算结果表明, $E(x^*)$ 对 Sh_d 的影响很小; 但对 Sh_w 的影响极大, 且分子越大, 这种影响也越大。因此, 对于伴有低超滤速率的 HDF 过程, 由于其传质由扩散控制, 故

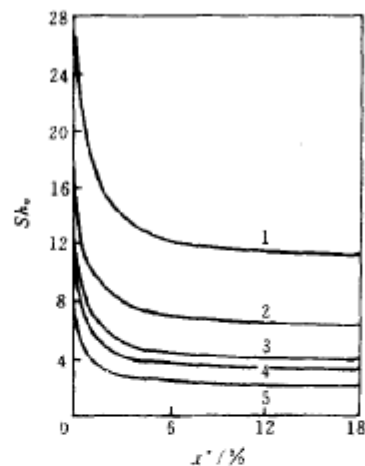


图 3 总 Sherwood 数随轴向距离的变化曲线

Fig.3 Total Sherwood number vs axial distance

($Q_0 = 200 \text{ ml/min}$, $L = 20 \text{ cm}$,

$S = 1.0 \text{ m}^2$, $D = 1.0 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$,

$R = 0.01 \text{ cm}$, $T_R = 0.6$)

1— $K = 0.0667$, $Sh_w = 0.1667$, $\psi = 0.25$;

2— $K = 0.1267$, $Sh_w = 0.1667$, $\psi = 0.1$;

3— $K = 0.1667$, $Sh_w = 0.1667$, $\psi = 0$;

4— $K = -0.1000$, $Sh_w = 0$, $\psi = 0.25$;

5— $K = -0.0667$, $Sh_w = 0$, $\psi = 0.1667$

表 1 尿素和 V_{B12} 的 Sh_w 和 T_R 值⁽⁵⁾ ($R=0.01\text{cm}$)Table 1 Values of wall Sherwood number and membrane transmittance coefficient referred⁽⁵⁾ to $R=0.01\text{cm}$

	尿素		V_{B12}	
	PAN	CUP	PAN	CUP
$D \times 10^5 / \text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	1.0	1.0	0.2388	0.2388
$k_w \times 10^4 / \text{cm} \cdot \text{s}^{-1}$	13.2	11.5	2.35	0.59
Sh_w	1.32	1.15	0.9843	0.2471
T_R	1.0	1.0	0.94	0.629

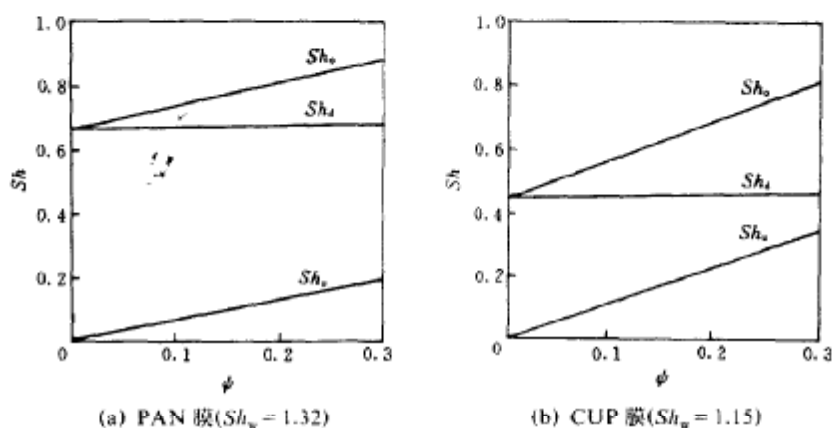
图 4 尿素的 Sh 数随 ψ 的变化曲线

Fig.4 Sherwood number vs ultrafiltration Peclet number in the case of urea

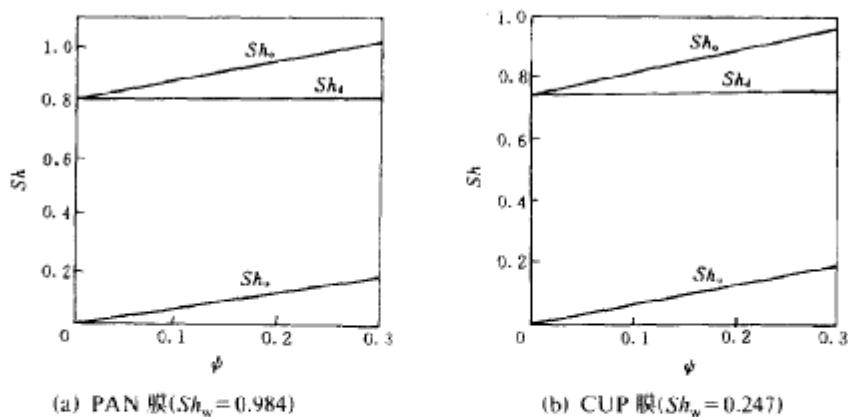
($Q_o = 200\text{ml/min}$, $L = 20\text{cm}$, $S = 1.0\text{m}^2$, 其它参数见表 1)图 5 V_{B12} 的 Sh 数随 ψ 的变化

Fig.5 Sherwood number vs ultrafiltration Peclet number in the case of Vitamin B12

($Q_o = 200\text{ml/min}$, $L = 20\text{cm}$, $S = 1.0\text{m}^2$, 其它参数见表 1)

$E(x^*)$ 的影响可以忽略, 即假定超滤速率沿流动方向不变是合理的。然而, 对于 HF 过程或其它旨在截留大分子的超滤操作, 由于物质在膜中的传递主要借助对流方式, 故 $E(x^*)$ 的影响不容忽视。

表 2 正交配置解与解析解⁽⁵⁾ 的比较

Table 2 Comparison of orthogonal collocation and analytic solution for local concentration

r^*	c^*							
	$K=0.1667$		$K=0.1267$		$K=0.0667$		$K=-0.1000$	
	正交配置解	解析解	正交配置解	解析解	正交配置解	解析解	正交配置解	解析解
0	0.8285	0.8288	0.8579	0.8584	0.9123	0.9125	1.1594	1.1597
0.2976	0.8174	0.8181	0.8494	0.8500	0.9077	0.9081	1.1689	1.1692
0.6399	0.7820	0.7831	0.8219	0.8221	0.8926	0.8929	1.2004	1.2007
0.8875	0.7493	0.7500	0.7959	0.7963	0.8788	0.8789	1.2318	1.2321
1.0	0.7349	0.7351	0.7843	0.7848	0.8711	0.8714	1.2462	1.2466

4 结 论

1. HD、HDF 和 HF 可以用 1 个通用的传质模型来描述。采用正交配置法求解该传质模型, 仅用简单的三点配置, 即与解析解的结果接近, 而与有限差分法比较, 具有简便、快速和准确的优点。

2. 对于伴有低超滤速率的 HDF 过程, 忽略 $E(x^*)$ 的影响是合理的。

符 号 说 明

A, B —— 配置矩阵	V —— 壁面超滤速度, cm/s
a_i —— 式(9)中的系数	v —— 径向速度, cm/s
c —— 溶质浓度, mol/cm^3	x —— 轴向坐标, cm
D —— 扩散系数, cm^2/s	α —— 超滤衰减因子
$E(x^*)$ —— 超滤衰减函数	ψ —— 超滤 Peclet 数
K —— 透析-超滤数	上角标
k —— 传质系数, cm/s	$*$ —— 无因次
L —— 纤维长度, cm	下角标
$\dot{m}$ —— 传质速率, mol/s	b —— 平均
Q —— 血液进口流率, ml/min	D —— 透析液
R —— 纤维内半径, cm	d —— 扩散
r —— 径向坐标, cm	m —— 混合杯
S —— 传质面积, cm^2	o —— 进口, 总
Sh —— Sherwood 数	u —— 超滤
T_R —— 膜透过系数	w —— 壁面
u —— 轴向速度, cm/s	

参 考 文 献

- 1 Davis H R, Parkinson G V. Appl Sci Res. 1970, 22:20
- 2 Cooney D O, Kim S S, Davis E J. Chem Eng Sci. 1974, 29:1731

- 3 Kooijman J M. Chem Eng Sci. 1973. 28:1149
- 4 Jagannathan K, Shettigar U R. Med Biol Eng Compt. 1977. 15:500
- 5 Abbas M, Tyagi V P. Chem Eng Sci. 1987. 42(1):133
- 6 Abbas M, Tyagi V P. Int J Heat Mass Transfer. 1988. 31:591
- 7 Shettigar U R, Prabbhu H J, Ghista D N. Med Biol Eng Compt. 1977. 15:32
- 8 Ma P P, Gooding C H, Alexander W K. AIChE J. 1985. 31:1728
- 9 Koziniski A A, Schmidt F P, Lightfoot E N. Ind Eng Chem Fundam. 1970. 9:502
- 10 张建侯, 许锡恩. 化工过程分析与计算机模拟. 北京: 化学工业出版社, 1989. 227

NUMERICAL STUDY OF MASS TRANSFER DYNAMICS FOR HEMODIAFILTRATION BY ORTHOGONAL COLLOCATION

**Zhang Guoliang, Zhang Fengbao
and Wang Shaoting**

*(Institute of Biomedical Engineering, Tianjin
University, Tianjin 300072)*

Chen Yuanyong

*(Department of Chemical Engineering, Tianjin
University, Tianjin 300072)*

Abstract The mass transfer models for hemodialysis(HD), hemofiltration(HF) and hemodiafiltration(HDF) in hollow fiber modules have been established as a generalized duct convective mass transfer model, in which the dialysis-filtration number is taken as the model parameter. A numerical solution of the model is obtained by using the orthogonal collocation method. The influence of some variables on mass transfer characteristics is discussed. The results obtained by orthogonal collocation are compared with those obtained by the finite-difference method and exact analytical solution. With regard to computing-time, the orthogonal collocation has an advantage over the finite-difference method.

Keywords hemodialysis, hemofiltration, hemodiafiltration, mass transfer model, orthogonal collocation