

搅拌发酵罐内混合时间的 CFD 模拟研究

CFD Simulation of the mixing time in stirred fermenters

夏建业 唐寅 张嗣良

(国家生化工程技术研究中心, 200234)

摘 要:本文应用 CFD 软件 STAR-CD, 结合用户标量及用户子程序模拟了搅拌发酵罐内的混合过程, 主要应用滑移网格方法 (Sliding Mesh method), 通过求解标量方程模拟示踪剂混合实验, 最终求得混合时间。本文分别比较了两种不同时间步长下模拟的混合时间, 同时考察了不同示踪剂注入位置对模拟的混合时间的影响。最后考察了 Sliding Interface 位置对混合过程模拟的影响, 最终得出结论, 不同的 Interface 位置将得到不同的初始速度场, 进而影响混合过程的模拟, 所以混合过程模拟的关键在于 Interface 位置的选择。

关键词:计算流体力学, 搅拌发酵罐, 混合时间, 滑移网格, STAR-CD

Abstract The mixing process in stirred fermenters was simulated using STAR-CD coupled with user scalar and user subroutine. The sliding mesh method was choosed to solve the transport equation of the user scalar, simulating the tracer experiment, and then the mixing time was calculated. Two different time steps were investigated to test its effect on the simulated mixing time; the addition position of the tracer was also investigated at the same time. Finally, the effect of the location of the sliding interface was simulated, it concluded that different interface location would result in different velocity field, which in turn affect the simulated mixing process, so the selection of the interface location is the key to simulate mixing in stirred fomenters.

Key words: Computational Fluid Dynamics, Stirred fermenter, Mixing time, Sliding mesh, STAR-CD

1 引言

搅拌生物反应器以其操作简单、操作条件可控范围大、不易染菌, 并且适应多样化生产等优点而被广泛应用于微生物发酵工程的研究及生产中^[1]。随着其在微生物发酵研究及生产

中的应用,越来越多的人认识到搅拌生物反应器操作在很大程度上取决于反应器内营养物质的混合状况,因此人们花了大量的时间来研究搅拌生物反应器内部的混合特性^[2]。由此可见,正确的描述和考察搅拌生物反应器内混合状况成为生物反应器放大与优化的一个重要内容。

描述搅拌生物反应器内混合状况的方法主要有:混合时间,停留时间分布,循环时间分布等。其中研究最多应用也最广的为混合时间,混合时间的实验测定方法可分为物理与化学两类方法。工程学家们在搅拌生物反应器内混合特性方面做了大量的实验研究^[3],但由于测定方法的差异,得到的结果往往相差较大。随着计算流体力学的发展及其在搅拌生物反应器中的应用,国内外开始有人利用计算流体力学的方法模拟搅拌反应器内的混合过程。Hartmann 等^[4]通过大涡模拟方法求解了湍流状态下搅拌反应器的混合过程,并对混合过程进行了详细的描述。国内周国忠等^[9]首先运用 CFD 工具 CFX 模拟了搅拌槽内的混合过程,并研究了不同模拟策略对模拟混合时间的影响,同时考察了不同监测位置的混合时间。

本文应用 STAR-CD 模拟了 50L 搅拌发酵罐内的混合过程,并考察了不同模拟策略下得到的模拟结果,比较了不同的 Sliding Interface 位置对模拟的监测点响应曲线的影响。本文得到的模拟结果可以作为应用 STAR-CD 模拟搅拌发酵罐内混合过程的一个指导,并可以为微生物培养优化工艺放大等提供有力的模拟工具。

2 模型设置与模拟方法

2.1 模型设置

本文所用发酵罐模型为实验室规模(50L)的带有一层搅拌桨的发酵罐,装液量为 33.4L,发酵罐模型的草图如 Fig 1 所示,罐体各相关几何参数与操作参数列于 Table 1。

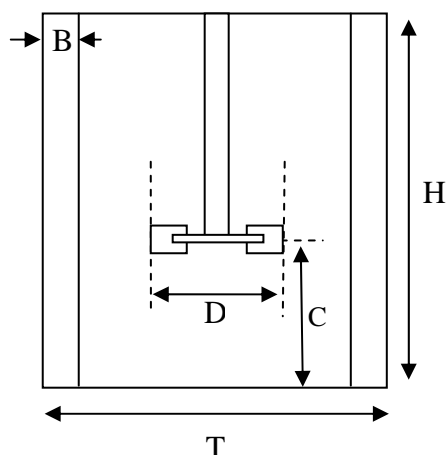


Figure 1 Schematic diagram of the fermenter model

Table 1 Parameters of the fermenter model

参数	参数值
装液高 (H)	0.22m
罐内径 (T)	0.22m
挡板宽 (B)	0.1T
桨直径 (D)	0.46T
桨安装高度 (C)	0.33T
搅拌转速 (N)	50rpm

应用 proStar 对模型进行了网格划分, 由于结构比较简单采用六面体网格进行划分, 划分好的网格数为 14 万, 在 r , θ , z 三个方向划分数分别为 35, 90, 46。整个罐体的网格如 Fig 2 所示。由于搅拌桨附近区域速度梯度较大所以对该区进行了较细的网格划分。

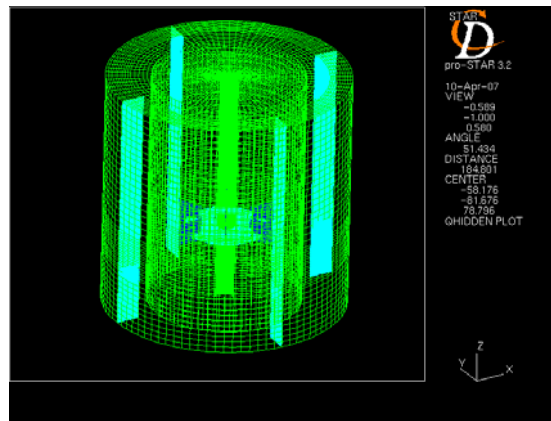


Figure 2 Mesh created by the proStar mesh tool

为了研究不同示踪剂注入位置对混合时间的影响, 本模拟中选用了四个不同的注入位置, 该注入位置的选择与文献^[5]相同, 具体位置如图 Fig 3 所示。另外为了全面考察整个混合过程, 模仿文献^[5], 在模型中放置了 13 个监测点, 前九个监测点位置同文献^[5], 最后四个监测位置取在与搅拌桨相同高度的桨叶排出区, 以考察该区域的混合相应情况。具体的放置位置可参照图 Fig 4。

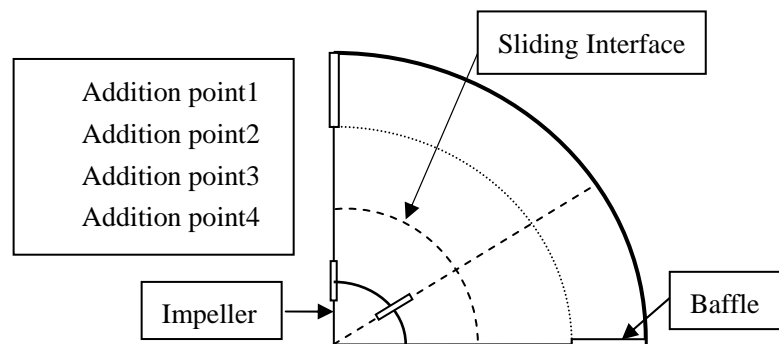


Figure 3. Schematic diagram of top of the fermenter showing the position of the four tracer addition points

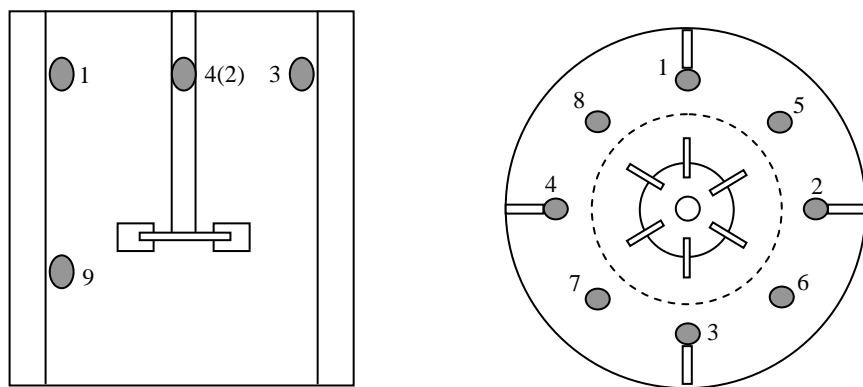
(a) Vertical cross section at $\theta = 0$ (b) Horizontal cross section at $z = 0.11\text{m}$

Figure 4 Schematic diagram of the geometry showing the position of the sensors and the sliding mesh interface, points 10-13, which is not shown at the diagram, is at the height of $z=0\text{m}$, and below points 5-8 respectively.

本模拟中为了考察 Sliding interface 位置对于模拟混合时间的影响，分别取了两种 interface 位置，一种为整个 interface 从罐底一直贯穿到液面，内部柱体网格为随桨叶一起旋转，外部网格为静止区域；另一种 interface 并不贯穿整个罐体，整个 interface 由一个包围搅拌桨的圆柱外表面构成，由此该 interface 将旋转的桨区网格与外部静止网格隔开。具体的 interface 位置如图 Fig 5 所示。模型中所取的两个 interface 在径向均位于桨叶外端到挡板的距离的中间位置处，对于轴向位置，前者从罐底一直贯穿到液面，后者从桨叶下一个桨叶高度贯穿到桨叶上一个桨叶高度处，即以桨叶扫过区为基准上下分别延伸一个桨叶高度，这样便形成上下两个 interface。

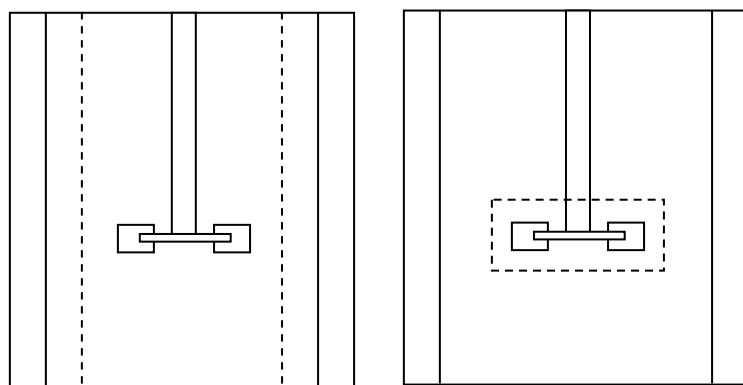


Figure 5 Schematic diagram of the sliding interface location in the fermenter.

2.2 模拟方法

在柱坐标系下，描述搅拌生物反应器内的流场的各种变量的方程可以写成以下统一的形式：

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial(rU\phi)}{r\partial r} + \frac{\partial(V\phi)}{r\partial \theta} + \frac{\partial(W\phi)}{\partial z} = S_\phi + \frac{\partial}{r\partial r} \left(\frac{r\Gamma\partial\phi}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{r\partial \theta} \left(\frac{\Gamma\partial\phi}{r\partial \theta} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\Gamma\partial\phi}{\partial z} \right) \quad (1)$$

式中各量的意义及取值在文献 (Ranade VV, 1991) [6] 中有详细的描述, 在此不再展开。为了模拟混合时间, 在模型中加入用户标量方程, 用以表示示踪剂浓度, 并假设示踪剂对流场不产生影响, 即用户标量为 passive 型标量。然后分别通过 initfi 及 posdat 完成示踪剂 (即用用户标量) 加入及不同监测位置处示踪剂浓度监测的模拟。示踪剂加入及监测位置如 Fig 3, Fig 4 所示。

搅拌反应器内流场有两种模拟方法, 即多参考坐标系方法 (Multiple Reference Frame, MRF method) [7] 和滑移网格法 (Sliding Mesh, SM method) [8], 前面一种方法属于稳态模拟算法, 后者属于瞬态模拟算法。两种方法在 STAR-CD 中均有相应得模型算法。由于假设示踪剂浓度对流场没有影响, 因而本模拟采用将求解流场和求解示踪剂浓度场分开求解, 周国忠等 [9] 通过模拟搅拌反应器内的混合过程得出结论, 在假设示踪剂浓度对流场无影响的情况下, 分开求解流场与浓度场所得到的结果与耦合求解得到的结果相差很小。这里我们也采用这种方法。与 Ranade 等 [6] 所做的模拟类似, 首先通过 SM 方法求解得到一个类似稳定的流场, 并以该流场作为初始条件结合用户子程序继续应用 SM 方法只求解浓度场的变化过程, 进而通过用户子程序监测不同监测点示踪剂浓度变化的情况, 最终通过综合各监测点的监测数据计算混合时间。这里混合时间的定义采用 Bujalski 等 [5] 所采用的定义, 本模拟中以 t_M 表示, 它表示混合程度达到 M% 的程度的时间, 例如 t_{90} 表示混合达到 90% 的时间, t_{95} 表示混合达到 95% 的时间。

模拟中流体介质为 25 的水; 挡板, 反应器壁面及罐底均作为无滑移的墙面 (rough wall); 对于液面由于该搅拌发酵罐已经达到全挡板条件, 近似认为液面保持水平, 在模拟中将其设为光滑的墙面 (smooth wall); 搅拌轴设定为转速为 50rpm 的墙面且无滑移, 其它固体表面设置采用软件默认值。

本模型采用 STAR-CD3.24 设定求解, 模拟类型为 Transient, 转速为 50rpm, 湍流模型为低雷诺数 $k-\varepsilon$ 模型, 求解算法为 AMG 算法。模拟实验所使用的机器配置为: CPU 为 AMD 64 位 3200+, 2G 内存, 单机运算。

3 结果与讨论

3.1 时间步长的影响

在进行混合时间模拟时, 首先考察了时间步长的选择对于模拟得到的混合时间的影响, 本模拟中选择了两种时间步长, 分别为 0.02s 及 0.12s, 对应于切向网格时间步长为 1.5 个网格和 9 个网格。分别用两种步长求得初始速度场及示踪剂混合场, 得到的混合时间的结果列

于表 Table 2 中。表中的 Point 1, Point 2, Point 3, Point 4 分别对应于 1-4 号示踪剂注入位置。

Table 2 Simulated mixing time of different time step compared with literature

	混合时间	t	Point 1	Point 2	Point 3	Point 4
模拟值	t ₉₀	0.12s	14.16	13.20	12.84	11.88
		0.02s	12.50	11.74	11.58	10.92
	t ₉₅	0.12s	18.96	18.24	17.16	15.84
		0.02s	15.80	14.64	14.36	13.16
	t ₉₉	0.12s	31.68	32.76	28.44	29.28
		0.02s	33.28	33.46	32.80	33.92
文献值 ^[5]	t ₉₀	0.11s	28.00			13.00
	t ₉₅		33.00			17.00
	t ₉₉		46.00			25.00

从该表中可以看出,对于本次模拟所采用的两种时间步长,模拟得到的混合时间的误差最大为 19.7%,最小只有 8%。从中可以得出对于混合时间的模拟,采用 0.12s 及 0.02s 相差并不大,这与 Bujaski 等^[5]和 Ranade 等^[6]所得到的结论相符。Bujaski 等^[5]还比较了经历不同时间的初始速度场对模拟混合时间的影响,结果显示初场只要基本达到稳定后经历不同的时间对模拟混合时间将不产生影响,在本模拟中也得到了相同的结论,在此不再详述。

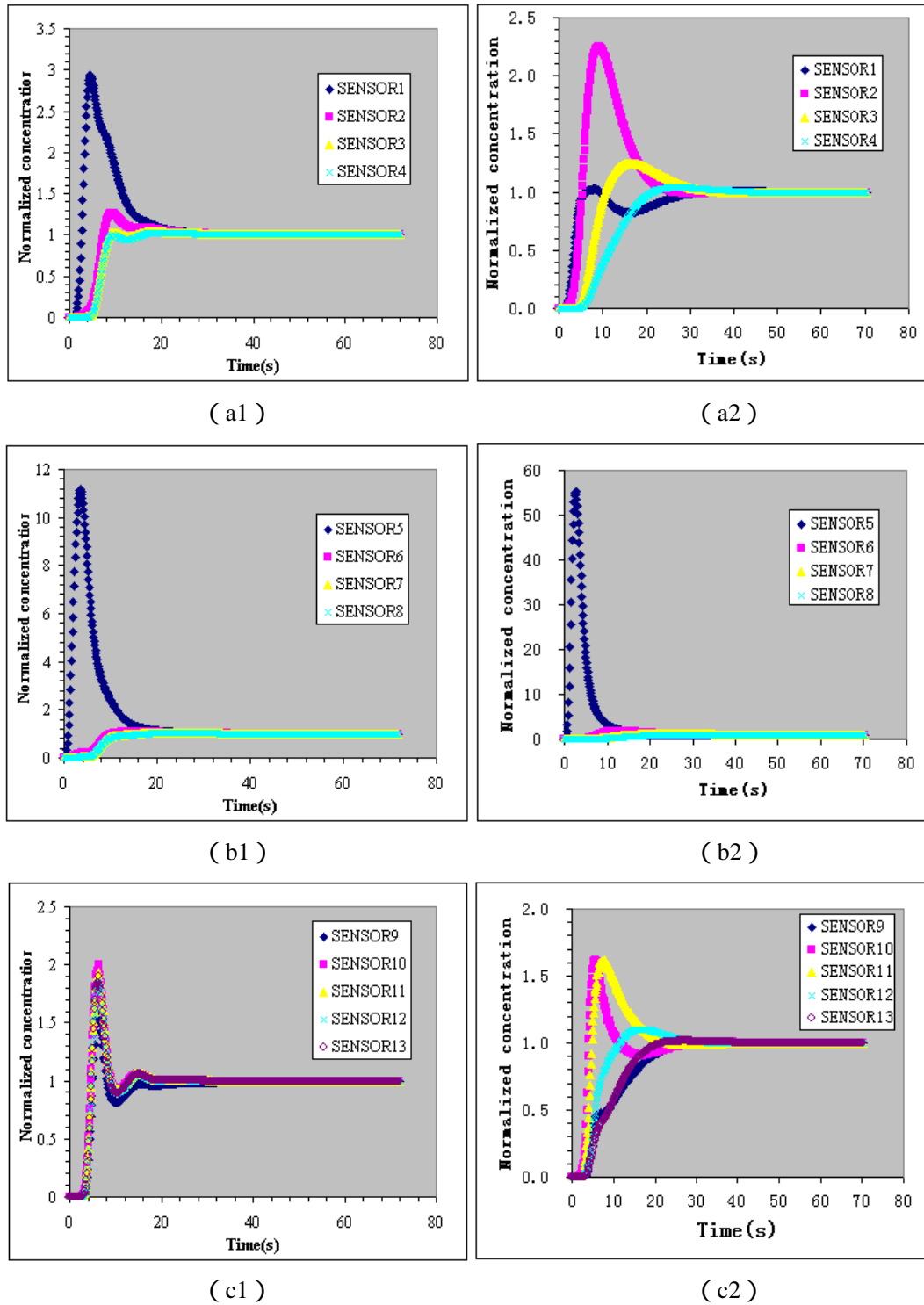
另外本模拟得到的结果与 Bujaski 等所不同的一点为,对于不同的示踪剂注入位置 (Points 1-4) 模拟的混合时间的值相差并不大,最多相差 3s,这与实验观察到的结果是一致的。而 Bujaski 等得到的模拟时间,Point 1 处注入与 Point 4 处注入混合时间相差一倍多,如表 Table 2 所示。这可能与两个模拟软件算法差异有关(本模拟采用的 STAR-CD, Bujaski 等采用的 CFX)。

3.2 Sliding interface 位置的影响

文献当中应用 SM 方法模拟混合时间,几乎没有关于 Interface 位置对混合时间影响的报道。本文针对这一问题考察了两种不同 interface 位置对模拟的混合过程的影响。根据 Bujaski 等^[5]的模拟结果,Point 4 注入位置所得到的混合时间与实验值符合更好,而我们得到的模拟结果显示 Point 1 得到的模拟结果更接近于实验值。所以这里我们采用 Point 1 注入示踪剂得到的模拟结果。结果显示无论是采用 interface 1 还是采用 interface 2 所得到的模拟结果均相差很小。结果如表 Table 3 所示。从表 Table 3 来看,不同 interface 位置对于混合时间的模拟似乎并没有影响,但是进一步研究发现,对于不同监测位置得到的示踪剂浓度响应曲线却有很大的不同,结果列于图 Figure 6 中。

Table 3 Simulated mixing time of different interface locations

混合时间	Interface 1	Interface 2
t_{90}	10.56	11.64
t_{95}	17.04	16.56
t_{99}	27.36	28.68

**Figure 6** Response-curve of different sensors of different interface location. a1-c1 for interface 1 and a2-c2 for interface 2.

首先从图中可以肯定一点,无论 sliding interface 在什么位置,不同监测点得到的浓度响应曲线都是有差别的,这与我们的常识及文献报道是吻合的。不过对于本模拟中采用的两种位置,不同监测点监测到的响应曲线也有很大差异,对于 interface 1 来说,相似位置处(例如 sensor1-sensor4, sensor5-sensor8, sensor9-sensor13)的响应曲线也基本相似,只是对于 sensor1-sensor4, sensor1 略有不同, sensor5-sensor8 中 sensor5 明显有一个很高的峰,这是由于其周向位置离注入点最近所致,但是对于注入位置 point4, sensor5 的响应曲线并没有这样的高峰而是和其它几个类似,这里结果没有列出。Sensor9-sensor13 的响应曲线则基本重合。然而对于 interface 2 来说,并不存在类似的“相似位置”,它所形成的响应曲线各不相同,同组之间差异也很大。

由此分析,两种不同的 interface 位置所形成的初始场应该有一定的差异,才造成了上述差异。图 Figure 7 中显示了两种不同 interface 位置形成的初始速度场的云图。从图中可见,两者在轴向切面上的流场存在很大的差别,这也许就是造成模拟的浓度响应曲线差异的原因。

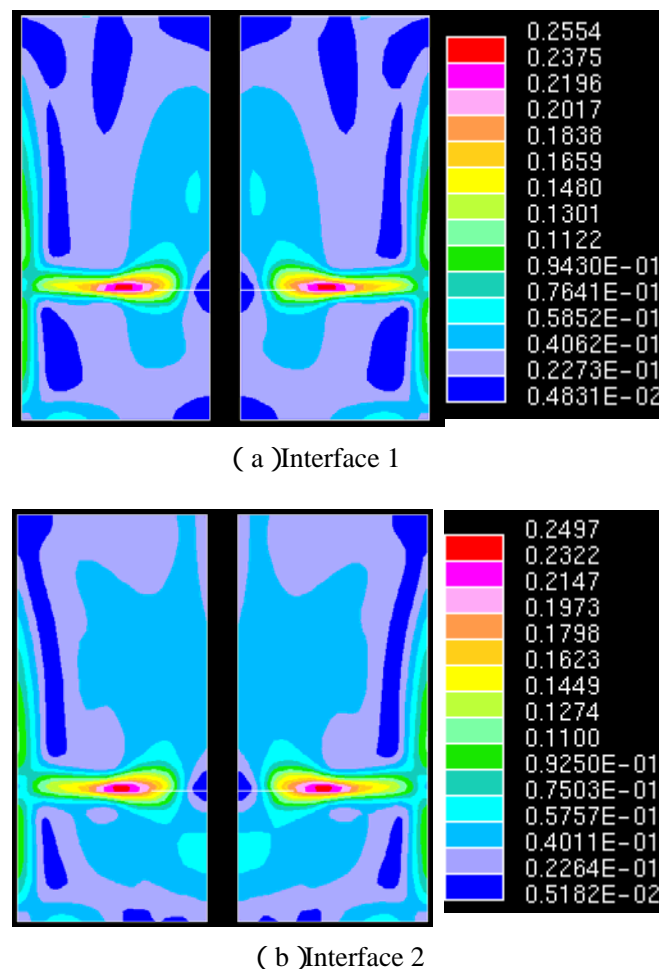


Figure 7 Vertical cross section plot of velocity magnitude of different interface location

4 结论

本文通过 STAR-CD 计算流体力学分析软件,结合用户子程序完成了对搅拌发酵罐的混合过程的模拟,模拟结果显示对于不同径向位置的示踪剂注入点得到的混合时间差异不大,处在近器壁处的注入位置得到的混合时间最接近实验测定值。另外对于时间步长对混合时间模拟影响的考察表明,时间步长对混合时间的影响很小,在初始速度场相同情况下,混合时间与时间步长敏感程度很低,几乎没有影响。另外对于不同 interface 位置的考察表明,在模拟混合时间的数值上,不同 interface 位置得到近似的结果,但是若考察对象为不同位置的浓度响应曲线则有很大差异,这源自于不同 interface 位置形成的初始场的差异。所以合理正确的选择 interface 位置是应用 STAR-CD 进行搅拌发酵罐内混合过程模拟的一个重要因素。

以上得到的模拟结果表明,STAR-CD 软件可以用来模拟搅拌生物反应器内的混合过程,能够作为研究搅拌生物反应器内混合过程的一个强有力的模拟及分析工具。

5 参考文献

- [1] 李艳,发酵工程概论,中国轻工业出版社,1999
- [2] Biggs R.D. AIChE Journal, 1963, 9(5):636-640.
- [3] Sykes P. et al. AIChE Journal, 1965, 11(1):174-184.
- [4] Hartmann H.et al. AIChE Journal, 2006, 52(11):3696-3706.
- [5] Bujalski, J. M., Z. Jaworski, et al. (2002). Chemical Engineering Research & Design 2002 80(A8): 824-831
- [6] Ranade V.V. et al., Chem. Eng. Sci., 1991, 46:1883-1893.
- [7] Ranade V. V., Chem. Eng. Sci., 1997, 52(24), 4473-4484.
- [8] Luo J.Y. et al., Trans IChemE, 1993, 71(Part A),342-344
- [9] 周国忠,王英琛,施力田,“用 CFD 研究搅拌槽内的混合过程”,化工学报,2003, 54(7):886-890.