

搅拌生物反应器混合特性的数值模拟与实验研究

洪厚胜, 张庆文, 万红贵, 欧阳平凯

(南京工业大学制药与生命科学学院, 江苏 南京 210009)

摘要: 以工程流体计算软件CFX-4.4为工具, 对不同规模的机械搅拌生物反应器的混合特性进行数值模拟, 研究了不同操作条件下反应器混合时间的变化规律. 采用pH电极在位监测[H⁺]的方法实验测定混合时间. 模拟结果与实验测定值之间的误差随反应器容积增大而逐渐减小, 对容积为25 m³的反应器误差小于11.6%.

关键词: 搅拌生物反应器; 混合时间; 计算流体力学; 数值模拟

中图分类号: TQ018 **文献标识码:** A **文章编号:** 1009-606X(2005)02-0131-04

1 前言

尽管目前已开发出许多新型的生物反应器, 但机械搅拌式生物反应器因其搅拌桨结构的多样性、混合与传质方面的高弹性而具有通用性强、操作范围宽等特点, 在食品发酵、生物制药等生物技术行业中的应用仍占统治地位, 而且这种趋势在近期不会改变^[1]. 反应器的混合时间是衡量其混合传质性能的重要指标, 主要受反应器的结构与操作条件的影响^[2], 对反应器的设计放大及操作优化具有重要的参考价值.

传统的混合时间测量方法主要有脱色法^[3]、光学法^[4]及电导法^[5,6]等, 这些测量方法都存在着一一定的局限性, 应用于大型生物反应器混合传质研究往往成本高、精度低、操作困难. 本工作用计算流体力学(Computational Fluid Dynamics, 简称CFD)技术对0.05, 1.0, 25.0 m³三种规模的机械搅拌式生物反应器的混合行为进行数值模拟, 研究在不同操作条件下混合时间的变化规律, 并将模拟结果与实测结果进行比较, 验证CFD模拟技术用于机械搅拌生物反应器混合性能研究的可行性, 以期为工程应用建立基础.

2 实验

2.1 实验设备

实验设备是常用的机械搅拌式通风发酵罐, 又称标准罐, 如图1所示, 主要由椭圆封头、挡板、标准六平叶圆盘涡轮搅拌桨(Rushton型)构成. 挡板与器壁间空隙取反应器内径的1%, 具体尺寸见表1.

位点A及B分别为测定混合时间时的加料点和监测点, 加料点A高度在上搅拌桨的上边缘位置, 监测点B高度约在下两个搅拌桨高度的中点处, 两位点均在相邻两挡板之间的中点且离器壁0.1 m左右处. 反应器内

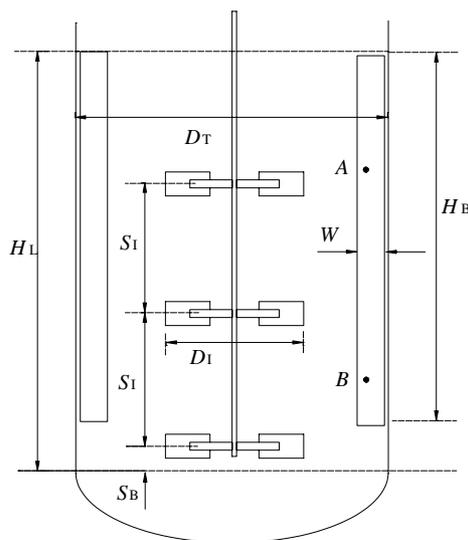


图1 机械搅拌生物反应器几何结构示意图
Fig.1 Sketch of stirred biochemical reactor

表1 实验设备主要尺寸

Table 1 Main dimensions of experimental apparatus

Tank data	Tank 1	Tank 2	Tank 3
Liquid volume, V (m ³)	0.05	1.0	25.0
Liquid height, H_L (m)	0.5	1.42	4.0
Tank diameter, D_T (m)	0.3	0.8	2.4
Number of baffles, N_B	3	4	4
Number of impellers, N_I	2	3	3
Baffle width, W (m)	0.03	0.06	0.24
Baffle depth, H_B (m)	0.425	1.3	4.03
Impeller diameter, D_I (m)	0.125	0.28	0.75
Space between impellers, S_1 (m)	0.25	0.56	1.4
Bottom-impeller elevation, S_B (m)	0.025	0	-0.165

料液装填系数为78%.

2.2 混合时间测量方法

实验在25℃下进行, 用HCl溶液作为酸性示踪剂, 在加料点A处瞬间注入, 同时通过安装在监测点B处的pH电极和与之相联的计算机记录液体pH值的变化, 从

而反映液体中 $[H^+]$ 浓度的变化. 典型的 $[H^+]$ 变化过程如图2所示^[7]. 一般混合过程中示踪剂浓度变化曲线的振幅随时间指数递减, 而其频率与时间无关, 混合时间可以从曲线上读出. 混合时间 t_m 是指示踪剂注入反应器至达到一定混匀程度的时间. 混匀程度的定义为

$$m = \frac{C_x - 0.5\Delta C}{C_x} \times 100\% .$$

通常认为 m 达到95%时, 流体即混合均匀, 此时的混合时间常用 t_{95} 来表示.

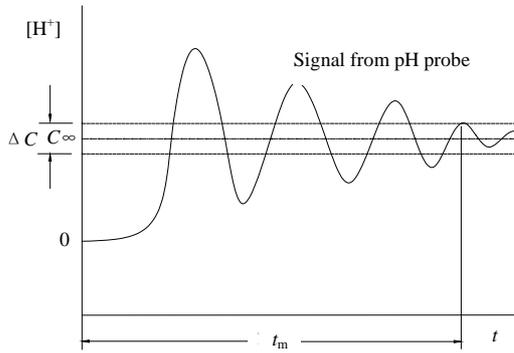


图2 混合程度与混合时间关系曲线
Fig.2 Related curve between mixing degree and time

3 CFD 数值模拟

3.1 基本原理

3.1.1 基本数学模型

在工业生产常用的操作条件下, 生物反应器内液体湍流运动可由时均方程组来描述, 其流动守恒方程组由张量表示的通用形式描述如下:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\bar{\phi}) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\bar{\rho}v_k\bar{\phi}) = \frac{\partial}{\partial x_k}(\Gamma_\phi \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial x_k}) + \bar{S}_\phi ,$$

式中, ϕ 表示质量组分、速度、压力、湍流动能、湍流耗散等变量, S_ϕ 为源项, Γ_ϕ 为湍流扩散, 在计算示踪剂浓度场时, $\Gamma_\phi = \rho D_\phi + \mu_T / \sigma_\phi$, D_ϕ 为示踪剂分子扩散系数, μ_T 为湍流动力粘度, 其值取于速度场湍流 $k-\epsilon$ 双方程模型, σ_ϕ 为湍流Prandtl数.

3.1.2 混合时间模拟

生物反应器中物料在混合过程中的浓度分布随时间变化的非稳态过程通常有两种数值计算方法, 一种是联立所有方程进行求解, 另一种是假设速度场稳定, 单独进行流场计算. 本研究的混合时间计算采用后一种方法. 具体模拟分两步进行: 第一步, 用单物质模型计算稳态流场, 模拟的单物质是水; 第二步, 在上述稳态流场的基础上引入双物质模型(如水和示踪剂)进行非稳态计算. 在加料点设置初始示踪剂的注入量, 在计算过程

中求解监测点示踪剂的浓度变化, 当混匀程度达到95%时, 即认为达到了完全混合. 这段时间就称为搅拌反应器的混合时间, 记为 t_{95} .

3.2 数值计算

3.2.1 几何模型的构建及网格划分

对于带有六平叶圆盘涡轮桨及挡板的搅拌生物反应器, 由于其结构的对称性, 故可以用通过轴心的垂直截面将其分成对称的若干部分. 如 1.0 m^3 机械搅拌发酵罐就可以对称地分成两部分, 只对其中一部分进行几何构建及网格划分. 机械搅拌生物反应器中搅拌桨与挡板之间相对移动的动界面可采用滑移网格法处理. 这种方法将计算区域分为两部分, 如图3所示, 一部分包含了运动的搅拌桨叶, 另一部分包含反应器的其他静止部分, 两部分网格之间要求彼此独立, 两者之间的物质、动量传递通过定义接触边界面的粘联来实现.

网格划分采用在正交圆柱坐标下的结构化网格, 同时采用分块网格技术, 在反应器中心部位网格线较密、外围较疏, 这也是由流动的特点决定的. 这样可以减少假扩散, 对解的收敛和求解速度都十分有利. 其对应的3种反应器($0.05, 1.0, 25.0 \text{ m}^3$)几何体划分的网格总数分别为158268, 215712和246996, 网格的划分对求解已经达到了无关性标准. 1.0 m^3 反应器具体网格空间划分见图3所示.

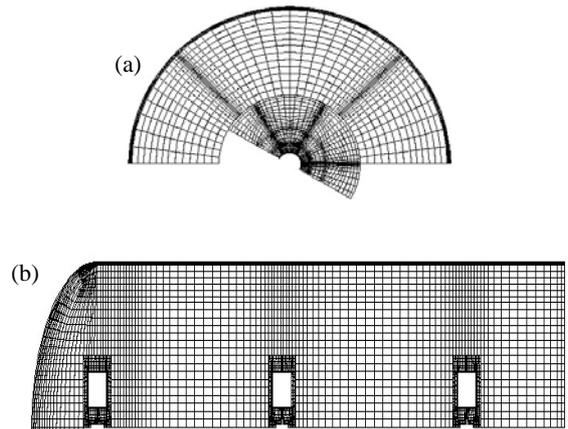


图3 1.0 m^3 搅拌生物反应器的有限体积网格
Fig.3 Finite volume grid of 1.0 m^3 stirred tank
radial profile (a) and axial profile (b)

3.2.2 边界条件

设定流体在反应器壁处的流动速度为0, 即无滑移边界条件; 假定流体表面与大气无摩擦, 在反应器的液体表面采用所谓的自由滑移边界条件; 在轮轴处采用无移动及轴对称设定.

3.2.3 数值求解

整个方程组的求解通过流体工程软件 CFX-4.4 完

成, 通过有限体积法将微分方程组离散成差分代数方程组后, 各变量差分方程用沿主流方向逐线扫描的低松弛迭代求解. 压力-速度耦合求解采用 SIMPLEC 算法.

4 结果与讨论

对于大多数生化反应, 物料的混匀效果和混合速率决定着反应效率和生产成本, 对生物反应器的混合特性的研究具有现实意义. 在搅拌生物反应器中, 物料的混合作用主要由主体流动、湍流及分子扩散这 3 种机理的协同作用引起. 图 4 所示是 0.05 m^3 反应器在 230 r/min 的搅拌转速下不同时刻示踪剂浓度值的分布. 从图中可以很直观地观察到示踪剂的混合过程.

图 5 为不同体积搅拌生物反应器的混合时间模拟结果与实验结果的比较. 从图中可以看出, 模拟结果在趋势上与实验结果有很好的一致性, 随着搅拌转速的提高, 反应器混合时间逐渐变小. 从图也清楚地看出数值模拟得到的搅拌混合时间均比实验验证值要大, 产生此误差的原因有很多, 主要是由采用的计算方法所引起的. 因为这种方法计算首先要假设流场稳定, 而实际搅拌反应器内流场并不是稳定不变的, 而是呈无规则变化的非稳态过程, 但流场的不稳定可以促进传质的进行, 从而使混合时间减小. 就这一点来看, 本研究的模拟结果与 Schmalzriedt 等^[8]、Bujalski 等^[9]所描述的情况基本一致. 混合时间的模拟与实验结果的误差比较见表 2.

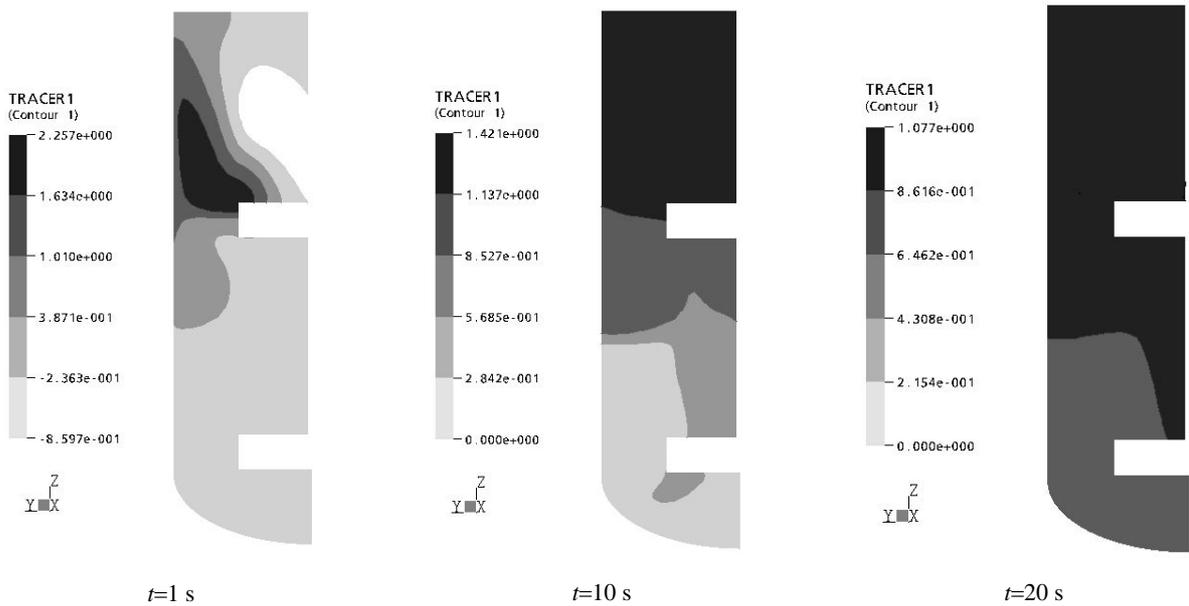


图 4 混合过程示踪剂浓度值的分布图
Fig.4 Concentration distributions of trace at different times (0.05 m^3 , 230 r/min)

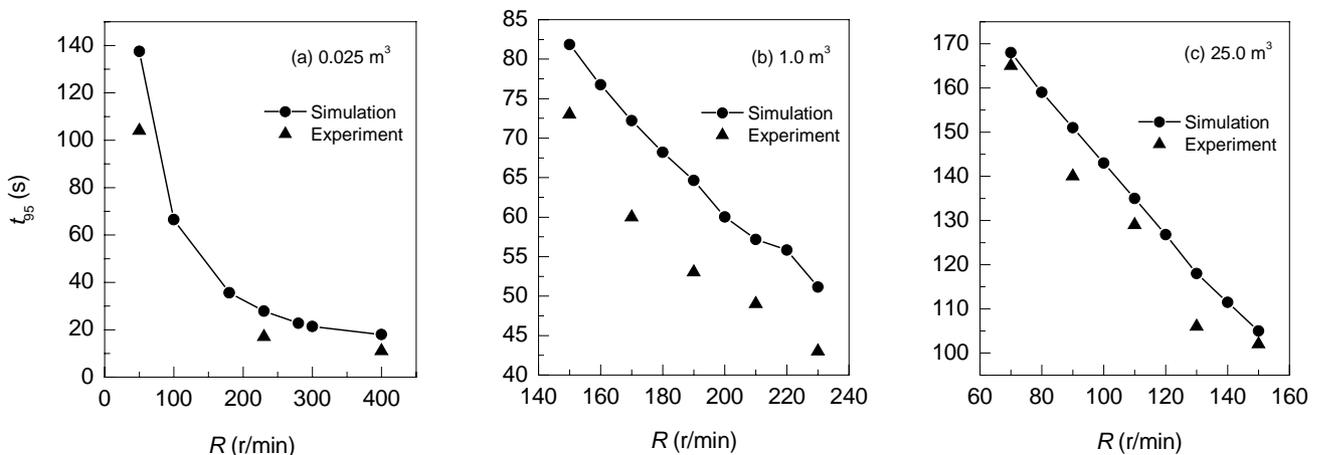


图 5 混合时间的模拟与实验结果比较
Fig.5 Comparison between simulative and experimental mixing times

表2 混合时间的模拟与实验误差比较

Table 2 Comparison of deviations between simulative and experimental mixing times

	Tank 1			Tank 2				Tank 3					
	50	230	400	150	170	190	210	230	70	90	110	130	150
Simulation value (s)	137.5	27.9	18.0	81.9	72.2	64.6	57.2	51.1	167.4	151.1	135.3	118.3	105.0
Experiment value (s)	104.0	17.0	11.0	73.0	60.0	53.0	49.0	43.0	165.0	140.0	129.0	106.0	102.0
Deviation (%)	32.2	64.1	63.6	12.2	20.3	21.9	16.7	18.8	1.5	7.9	4.9	11.6	2.9

分析比较图5和表2所给数据还可以得知,它们的误差分别在64.1%, 21.9%及11.6%以下.随着搅拌生物反应器容积的增大,数值模拟与实验结果之间的误差逐渐变小,模拟的可靠性逐渐增大.对容积为25 m³的工业规模的生物反应器,模拟与验证之间的误差值小于11.6%,完全符合当前数值模拟的工程应用要求.产生这种现象可能是小反应器中流场的无规则周期性振荡更甚,偏离本研究数值计算的第一步流场稳定的假设条件更远所致.

5 结论

以流体工程软件CFX-4.4为工具,对不同规模的机械搅拌生物反应器的混合特性进行了数值模拟,建立了最大容积为25 m³的工业规模冷模实验装置和混合时间测定方法,并对模拟结果进行了验证.研究表明,本工作建立的数学模型及采用的算法是可行的;CFD技术可用于机械搅拌式生物反应器混合传质的基础研究和反应器的优化设计及工程放大的应用研究.

符号表:

C_{∞}	理想完全混匀浓度 (mol/L)	m	混匀程度
D_I	搅拌桨直径 (m)	N_B	挡板个数
D_T	反应器内径 (m)	N_L	搅拌桨个数
H_B	挡板深度 (m)	R	搅拌转速 (r/min)
H_L	液位高度 (m)	S_B	下搅拌桨距筒体底间距 (m)

S_L	两搅拌桨间距 (m)	W	挡板宽度 (m)
t	时间 (s)	x_k	坐标位置 (m)
t_m	混合时间 (s)	ρ	流体密度 (kg/m ³)
t_{95}	混匀程度95%的混合时间 (s)	ΔC	信号波峰值波动范围 (mol/L)
v	流体质点的速度 (m/s)	μ_T	湍流动力粘度 [kg/(m·s)]
V	反应器体积 (m ³)	σ_{ϕ}	湍流 Prandtl 数

参考文献:

- [1] 赵学明. 搅拌生物反应器的结构模型、放大及搅拌器改型 [J]. 化学反应工程与工艺, 1996, 12(1): 80-90.
- [2] 韦朝海, 谢波, 吴超飞, 等. 三重环流生物流化床反应器的混合特性 [J]. 化学反应工程与工艺, 1999, 15(2): 174-178.
- [3] 武斌, 戴干策. 搅拌槽内粘稠物系的混合过程 [J]. 高校化学工程学报, 1997, 11(2): 143-149.
- [4] 林猛流, 王英琛, 施力田. 激光法测定搅拌器的混合特性 [J]. 化学工程, 1986, 14(3): 52-56.
- [5] Nienow A W. On Impeller Circulation and Mixing Effectiveness in the Turbulent Flow Regime [J]. Chem. Eng. Sci., 1997, 52(15): 2557-2565.
- [6] Manna L. Comparison between Physical and Chemical Methods for the Measurement of Mixing Times [J]. Chem. Eng. J., 1997, 67(3): 167-173.
- [7] 戚以政, 汪叔雄. 生化反应动力学与反应器, 第二版 [M]. 北京: 化学工业出版社, 1999. 391-392.
- [8] Schmalzriedt S, Reuss M. Application of Computational Fluid Dynamics to Simulations of Mixing and Biotechnical Conversion Processes in Stirred Tank Bioreactors [J]. Recents Progres en Genie des Procedes, 1997, 11(51): 171-178.
- [9] Bujalski W, Jaworski Z, Nienow A W. CFD Study of Homogenization with Dual Rushton Turbines — Comparison with Experimental Results: Part II: The Multiple Reference Frame [J]. Chem. Eng. Res. Des., 2002, 80(A1): 97-104.

Numerical Simulation and Experimental Study on Mixing Characteristics of Stirred Bioreactor

HONG Hou-sheng, ZHANG Qing-wen, WAN Hong-gui, OUYANG Ping-kai

(College of Pharmacy and Life Science, Nanjing University of Technology, Nanjing, Jiangsu 210009, China)

Abstract: By commercial CFD package CFX-4.4, mixing characteristics of stirred bioreactor were simulated and the mixing time variation under various operation conditions was investigated. The liquid mixing time was measured by means of detecting the concentration variety of [H⁺] with a pH probe. The deviation between simulation and experiment becomes smaller as the bioreactor volume is increased, and the error for 25 m³ bioreactor is less than 11.6%.

Key words: stirred bioreactor; mixing time; computational fluid dynamics; numerical simulation