

Алгоритъм за изграждане на 3D геометричен модел на биореактор с разбъркващо устройство за прилагане на метода CFD

Добрин Георгиев, Диян Радев

3D geometric model algorithm for stirred tank bioreactor with CFD achievement: A computational fluid dynamic method in stirred tanks with central located impeller is presented. An algorithm for 3D computational grid building for a stirred tank with rotating impeller is exhibited. Flow fields parameters, such as velocity, flow patterns, power number, circulation number and pressure coefficient were numerically solved. A RANS model (Reynolds Averaged Navie - Stocks) was employed in order to describe a real fluid motion in mixing condition. The rotating zone was solved by the MRF (multi-reference frames) solution procedure. In order to illustrate the computational fluid dynamics' abilities, flow fields, velocity stream vectors and iso-surfaces of the velocity are visualized. The results are used in a discussion of possible application area.

Keywords: mixing, computational fluid dynamics (CFD), geometrical model, flow characteristics

ВЪВЕДЕНИЕ

Използването на съдове с разбъркване е широко застъпено в редица отрасли на химичната и биохимичната технологии. За да се анализира спецификата на процеса разбъркване [1] в етапите на проектиране, контрол и оптимизация на биореактори е нужно неговото детайлно познаване. Определянето на характеристики, като моментни скоростни слагаеми или турбулентни флукутации е силно затруднено с класически методи, поради което в световната практика се налагат локални съвременни методи за анализ. В настоящия доклад е представен алгоритъм за изграждане на триизмерен геометричен модел на биореактор с разбъркващо устройство, на чиято база е генерирана мрежа от изчислителни клетки с последващо прилагане на метода CFD (изчислителна механика на флуиди).

CFD КАТО МЕТОД

Изчислителната механика на флуиди (CFD), представлява числено симулиране на движението на флуидите в геометрични модели, изградени по реални размери на налични образци с цел анализ. Въпреки наличието на достатъчно прецизни съвременни физични методи за изследване структурата на потоците, CFD се налага все повече като предпочитан метод поради две основни причини: (1) намалява потребността от голям брой реални експерименти, нужни за установяването или внедряването на дадена идея (проблем, хипотеза), като спестява огромна по количество физическа работа, усилия, време и средства; (2) дава възможност за достатъчно точен анализ в условия, непозволяващи провеждането на реален физически експеримент. Освен това, в някои случаи прилагането на изчислителен подход при анализа на хидродинамични процеси може да даде много по-детайлни резултати, при многократно по-малко финансови разходи [1-6].

МАТЕМАТИЧЕН АПАРАТ

В основата на симулирането на процеси свързани с движението на флуидите стоят уравненията за непрекъснатост на потока, уравненията на Навие – Стокс и моделни уравнения за симулиране на турбулентността при движението на флуида.

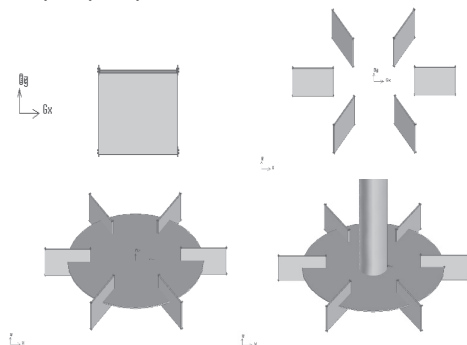
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho U_i) = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial(\rho U_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho U_i U_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial U_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \right] + \rho g_i + F_i \quad (2)$$

Диференциалните уравнения (1) и (2) описват непрекъснатото движение на флуида във времето и пространството. Тяхното решаване в обема на геометричния модел използва редица прийоми, основен от които е пространствена дискретизация във вид на изчислителна мрежа от клетки, която да следва точно геометричната специфика на модела [7]. Това се свежда до трансформиране на геометричния модел в последователност от свързани крайни обеми с определена форма (тетраедри, полиедри, призми или паралелепипеди). Уравненията в математичния апарат, описващи хидродинамичните процеси също се дискретизират и се привеждат в алгебричен вид [8-10]. По този начин непрекъснатата съвкупност от процеси, протичащи във флуида се представя във вид на малки стъпки и интервали, чието финално сумиране изгражда пълната хидродинамична картина в анализирания обект.

Алгоритъм за създаване на геометричен модел на реакторен съд с разбъркващо устройство

В настоящия доклад е изложен алгоритъм за изграждане на изчислителна мрежа на биореактор с 6-лопаткова централно разположена турбинна бъркачка с помощта на софтуерното приложение GAMBIT. Изграждането на точен геометричен модел в трите пространствени направления, който да отговаря на реален образец преминава през дефинирането на множество геометрични модули в интерфейса на GAMBIT (фиг.1). Алгоритъмът е подбрано да започва с единична лопатка (правоъгълен паралелепипед) с точно зададени размери. Всяка една лопатка изисква дефинирането на 6 стени, 8 върхове и 12 ръбове във декартова координатна система с три пространствени направления (x , y , z).

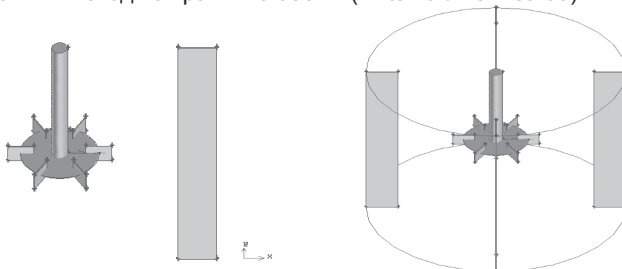


Фиг. 1. Създаване на геометричен модел на разбъркващото устройство: лопатка, диск и вал.

С цел спестяване на време и усилия веднъж изградена единичната лопатка на разбъркващото устройство се „мултиплицира“, чрез изпълняване на 5 кратна ротация около оста на въртене през ъгъл 60° . Резултатът от тази процедура са 6 лопатки, симетрично разпределени около оста на въртене. Дискът на който са монтирани лопатките и валът на който се държи цялата конструкция от геометрична гледна точка представляват цилиндри. В GAMBIT всеки геометричен „примитив“ изисква посочването на специфична информация, която в случая за диска и вала са радиус и височина на цилиндрите.

Следваща стъпка е задаване на цилиндрично тяло очертаващо външните контури на съда. В конкретния случай, това е цилиндър с височина 0.4m и радиус 0.2m съответстващи на реален образец.

Резултатът от горната последователност е илюстриран на фиг.2. Този своеобразен виртуален прототип на обекта за анализ следва да бъде представен по такъв начин, че за всяка точка от неговия обем да бъдат решени уравненията за движение. Това налага всяка точка от него да бъде индексирани и класифицирана. На практика за улеснение се борави не с всяка точка от виртуалния обем, а с множество от клетки – метод на крайните обеми (finite volume method).



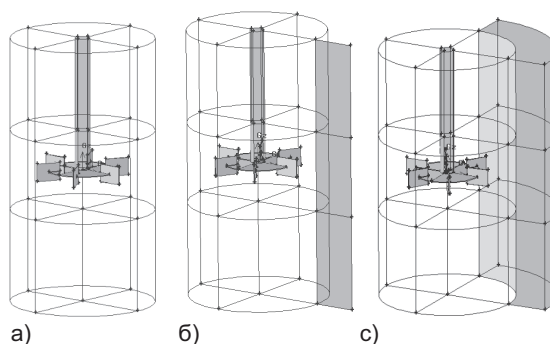
Фиг. 2. Създаване на виртуален макет: надлъжни прегради и външни контури на съда.

Съвкупността от всички клетки на които е „разбит“ виртуалния обем представлява изчислителната мрежа.

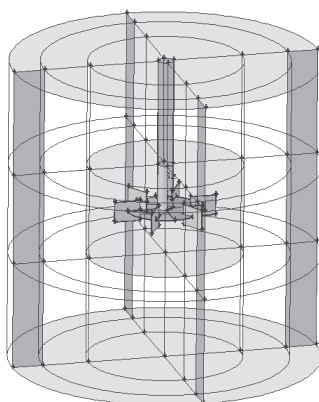
За омрежването на реактор с разбъркващо устройство може да се използват следните допълнителни процедури за опростяване на геометричните примитиви от които е изграден съда с разбъркване (фиг.3):

- създаване на вътрешен цилиндричен обем около разбъркващото устройство (по този начин съда се разделя на външен и вътрешен обем с гранична повърхност между тях);
- разделяне вътрешния цилиндър на четвъртини;
- всяка повърхност се транслира така, че да формира обем над и под разбъркващото устройство;
- страничните ръбове се транслират (образуват се нови лица);
- образуване на обем между централната част на реактора и корпуса (чрез копиране на ръбове, създаване на лица и тяхното ротиране на 90°);
- формиране на външни стени на съда, надлъжни прегради, дъно и горна повърхност.

След като биореактора бъде изцяло готов по отношение на геометрични детайли (фиг.4), всяка една повърхност, която има отношение към процеса, който в последствие ще се симулира, следва да бъде класифицирана. Това включва на всеки геометричен елемент да се присвой една от следните основни класификации, налични в GAMBIT: флуид, твърдо тяло, стена, ос, входен поток, изходен поток, свободна повърхност, интериор и пр. Тази класификация е от основно значение, тъй като оказва на изчислителния модул как да третира отделните геометрични „примитиви“. В конкретния случай за реактор с разбъркване бе подбрана следната класификация: разбъркващо устройство (като едно цяло или лопатка по лопатка), вал, надлъжни прегради, дъно, стени, повърхност на съда, вътрешен (около разбъркващото устройство) и външен обем. Класифицирането на отделните елементи е ключова информация, чрез която в последствие изчислителния модул (FLUENT, COMSOL, OpenFOAM и др.) ще решава уравненията от математическия модел в комбинация с граничните условия.

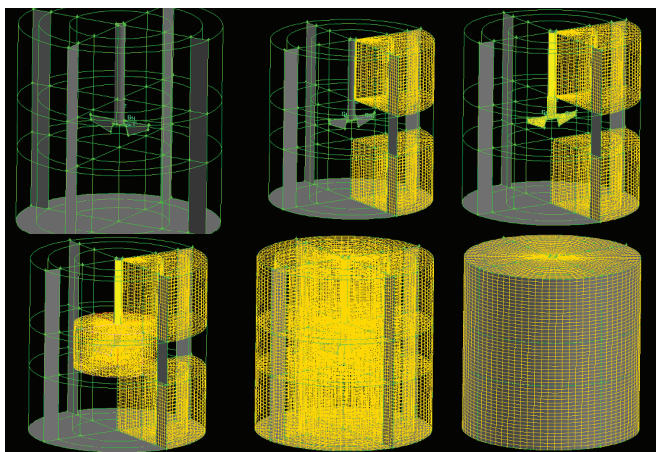


Фиг. 3. Създаване на обем под, над и около зоната на разбъркване (а), транспиране на страничните ръбове и създаване на лица (б), ротиране на лицата и създаване на междинни четвъртини (с)



Фиг. 4 Финален изглед на модел на биореактор с разбъркващо устройство

Най-важната процедура при финализирането на геометричния модел е изграждането на изчислителна мрежа от клетки (омрежване на модела). В настоящата работа бе възприета следната последователност за генерирането на изчислителна мрежа (фиг.5): 1) Първоначално се омрежват стените на разбъркващото устройство. Тъй като формата при разбъркващите елементи има важно значение от хидродинамична гледна точка, изчислителната мрежа на лопатките бе построена с най-голям брой изчислителни клетки, за да се улови влиянието и на най-малките детайли в геометрично отношение. 2) След стените на лопатките се омрежват стените на т.нар. референтна рамка, която представлява цилиндър около разбъркващото устройство. Формират се зони с плътна мрежа от клетки (по лопатките) и зони с по-малък брой клетки (по референтната рамка). Това създава възможност, централния обем на реактора да бъде дискретизиран на мрежа от изчислителни клетки с варираща (променлива) форма и размер. Така, изчислителната мрежа се балансира и се избягва работата с огромен брой крайни обеми, което силно би затруднило последващите изчислителни процедури при решаването на математичния апарат.



Фиг. 5 Пример за поетапно изграждане на изчислителна мрежа на реакторен съд с разбъркващо устройство

3) След обема на референтната рамка, се генерира мрежа във външните зони, граничещи с корпуса на реактора и надлъжните му прегради. Това са обеми в които флуидът следва скоростните градиенти, вече създадени в зоната на разбъркващото устройство и могат да бъдат изградени с по-малки съвкупности от изчислителни клетки. В някои случаи надлъжните прегради могат да бъдат с по-голяма плътност на изчислителната мрежата, но това е обосновано само, ако се изследва детайлно тяхното влияние. 4) Готовата мрежа се изследва за грешки и се прави оценка на нейното качество. Ако този процес завърши с констатация на зони, които имат лошо препокриване на изчислителни клетки, генерирането на изчислителна мрежа следва да бъде извършено отново с корекция във формата или размера на клетките.

Посоченият алгоритъм в настоящата работа бе реализиран в графичния софтуерен код GAMBIT, но със същия успех биха могли да се приложат и други приложения за 3D графика (AutoCad, Catia, 3D Max и др.). В крайна сметка процесът завършва с файл-мрежа (*.msh), който се прочита в изчислителен модул, където с използването на метода на крайните обеми се решава математическият апарат.

За пълния 3D анализ на реактор с разбъркващо устройство в настоящата работа бе използван и подход известен, като „мулти-референтни рамки“ (MRF) [11-14]. При този подход, геометричният модел се разделя на ротираща и стационарна зона. Уравненията се решават отделно за всяка зона, като върху допирната повърхност между тях (референтната рамка), информацията (скоростните вектори и градиенти) от ротиращата зона се взема като гранични условия за решаване на стационарната зона. Динамичните компоненти са осреднени, което е и основният недостатък на MRF подхода, тъй като не дава информация за изменението на периодичните колебания във времето. За сметка на това е сравнително бърз по отношение на процесорно време (CPU) и дава добри резултати при охарактеризиране на разбъркващи устройства.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложеният алгоритъм за изграждане на триизмерен геометричен модел на биореакторен съд с разбъркващо устройство може да бъде успешно приложен в изследователската практика при анализа на сложната хидродинамична картина в този тип апарати, когато не се разполага с физични методи за анализ (лазер-доплер

анемометрия напр.) С негова помощ може да се достигне до детайлна изчислителна информация за редица хидродинамични параметри, характерни за хидродинамиката в реакторите с разбъркване (време на хомогенизация, циркуляционни контури на потоците, скорост на срязване (особено за биореактори или кристализатори) и др. Алгоритъмът би могъл да бъде успешно внедрен и в учебната практика при подготовката на инженери в областта на инженерната химия, поради все по-нарастващото значение на приложните софтуерни средства за обезпечаване на анализ, контрол и оптимизация в практиката.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Paul E., V. Atiemo-Obeng, S. Kresta, (Eds.), Handbook of industrial mixing science and practice. Wiley-Intersciences, New Jersey, 2004.
- [2] Nienow A., Trans. IChemE, 74 (A), 1996, 417-423.
- [3] Orvalho S.C., J.M.T. Vasconcelos, S.S. Alves, in: H.E.A. Van den Akker, J.J. Derksen (Eds.), Proc. 10th Eur. Conf. on Mixing, Delft, 2000, pp. 461-468.
- [4] Pinelli D., A. Bakker, K.J. Meyers, M.F. Reeder, J. Fasano, F. Magelli, Trans. IChemE, 81 (A), 2003, 448-454.
- [5] Vlaev S.D., P. Mavros, P. Seichter, R. Mann, Can. J. Chem. Eng., 80, 2002, 653-659.
- [6] Szalai E.S., P. Arratia, K. Johnson, F.J. Muzzio, Chem. Eng. Sci., 59, 2004, 3793-3805.
- [7] Shames I., Mechanics of Fluids. 3rd Ed. McGraw-Hill Inc., New York, 1992.
- [8] EKATO Handbook of Mixing Technology, EKATO GmbH, Schopfheim, 2002.
- [9] FLUENT User's Guide, New Hampshire, 1999.
- [10] Ferziger J.H., M. Peric, Computational Methods for Fluid Dynamics, Springer, Berlin, 1997.
- [11] Brucato A., M. Ciofalo, F. Grisafi, R. Tocco, Chem. Eng. Sci. 55, 2000, 291-302
- [12] Hartmann H., J.J. Derksen, C. Montavon, J. Pearson, I.S. Hamill, H.E.A. Van den Akker, Chem. Eng. Sci., 59, 2004, 2419-2432.
- [13] Mavros P., R. Mann, S.D. Vlaev, J. Bertrand, Trans. IChemE 79A, 2001, 857-866.
- [14] Vlaev S.D., P. Staykov, P. Popov, Trans. IChemE , 82(C), 2004, 13-20.

За контакти:

Гл. ас. д-р Добрин Петров Георгиев, Катедра "Химично инженерство",
Университет "Проф. д-р Асен Златаров", e-mail: dpg@abv.bg

Докладът е рецензиран

РУСЕНСКИ УНИВЕРСИТЕТ „АНГЕЛ КЪНЧЕВ“
UNIVERSITY OF RUSE „ANGEL KANCHEV“

ДИПЛОМА

Програмният комитет на
Научната конференция RU&SU'14
награждава с КРИСТАЛЕН ПРИЗ
“THE BEST PAPER”

ДОБРИН ГЕОРГИЕВ, ДИЯН РАДЕВ
автори на доклада

“Алгоритъм за изграждане на 3D
геометричен модел на биореактор с разбъркващо
устройство за прилагане на метода CFD”

DIPLOMA

The Programme Committee of
the Scientific Conference RU&SU'14
Awards the Crystal Prize "THE BEST PAPER" to
DOBRIN GEORGIEV, DIAN RADEV
authors of the paper

“3D geometric model algorithm for stirred tank
bioreactor with CFD achievement “

РЕКТОР
RECTOR

проф. д.т.н. Христо Белоев
Prof. DSc Hristo Beloev, DHC

01.11.2014