

УДК 532.5

Влияние приведенной скорости газа на динамику процессов в биореакторе

Т.Т. Деви, Б. Кумар

Индийский технологический институт, Гувахати, Ассам, Индия

E-mail: bimk@iitg.ernet.in

Анализируются механизмы гидродинамики и массопереноса в крыльчатках Раштона и CD-6 в широком диапазоне (0,0075–0,25 м/с) приведенной скорости газа в газожидкостном биореакторе путем применения вычислительной гидродинамики. Найдено, что осредненная по объему величина скорости и скорость диссипации возрастают с увеличением поверхностной скорости газа. Расчеты дают более высокую относительную силовую тягу в случае крыльчатки CD-6, чем в случае крыльчатки Раштона, но заметного различия в осредненном по объему коэффициенте массопереноса для обоих типов крыльчаток не наблюдается. Найдено, что отношение силовой тяги к коэффициенту массопереноса выше для крыльчатки CD-6 (на 25–50 %), чем для крыльчатки Раштона.

Ключевые слова: крыльчатка CD-6, вычислительная гидродинамика, коэффициент массопереноса, силовая тяга, крыльчатка Раштона, приведенная скорость газа.

Введение

Газожидкостные биореакторы широко используются в промышленности, где имеет место массоперенос в режиме турбулентного течения жидкости в условиях разбрызгивания. Эффективность такого реактора зависит от физических, геометрических и эксплуатационных факторов. Система нуждается в насыщении газом (газ непрерывно подается через разбрызгиватель) для того, чтобы повысить эффективность этих биореакторов с заданной приведенной скоростью газа (объемного расхода, поделенного на площадь поперечного сечения реактора). Система, насыщенная газом, обеспечивает дополнительный кислород, требуемый микроорганизмам для их поддержания и клеточного роста, а также других метаболических процессов в биологической системе (аэробная ферментация, обработка сточных вод). В этих процессах кислород является важным питательным веществом, и его нехватка влияет на эффективность процесса [1–2]. Перенос кислорода может быть описан и проанализирован посредством коэффициента массопереноса $k_L a$. Он является наиболее важным параметром при проектировании и эксплуатации смешанных разбрызгивателей биореакторов [3]. Силовая тяга, управляющая операцией перемешивания путем вращения крыльчаток, влияет на характеристики жидкого перемешивания и массопереноса и является одним из существенных проектных параметров для многофазной среды в механически активируемом биореакторе с движущимся резервуаром. Нужно исследовать его оптимальное использование в промышленности на основе условий эксплуатации, таких, как приведенная скорость газа в разбрызгивателях.

Знание влияния вводимой мощности на условия эксплуатации дает полезные сведения о процессе, следовательно, эффективность процесса перемешивания с минимальной энергией представляет большой интерес [3].

Для того, чтобы понять, как лучше масштабировать конкретную приведенную скорость газа, нужно проектировать такие биореакторы с разбрызгивателем при варьировании доли кислорода в сочетании с силовой тягой. Влияние приведенной скорости газа изучалось несколькими исследователями [4, 5]. Осевое изменение коэффициента массопереноса анализировалось в монографии [6] при различных приведенных скоростях газа. В работе [7] рассматривались силовая тяга и $k_L a$ в широком диапазоне приведенных скоростей газа. В обширной работе по биореакторам [8] была показана сильная взаимная зависимость между скоростью массопереноса, силовой тягой и приведенной скоростью газа (v_g).

Эффективность биореактора на основе резервуара перемешивания также зависит от типов и количества используемых крыльчаток. Проектирование и эксплуатация промышленного реактора находятся в процессе постоянного развития и продолжающихся споров по поводу наиболее подходящего типа мешалки для перемешивания газожидкостных смесей в реакторах и биореакторах, которые показали, что традиционная крыльчатка Раштона [7, 9–10] уступает новым типам крыльчаток в каких-то отношениях. Недостатки крыльчатки Раштона включают в себя снижение силовой тяги p_g/p_0 примерно на 50 % при аэрации и наличие “барьеров течения” (или зонирование) при их многократном использовании [11]. Нужно использовать современные крыльчатки для того, чтобы найти альтернативы крыльчатке Раштона [9]. Эффективность перемешивания с применением крыльчатки вогнутого типа (CD-6) [12], отличающейся от стандартной крыльчатки типа Раштона, исследуется численно с учетом различных видов динамики процесса (гидродинамики, коэффициента массопереноса и мощности) в системе двойного перемешивания. Эти динамические механизмы управляются в широком диапазоне приведенной скорости жидкости, которая рассматривается в качестве важнейшего параметра, подлежащего изучению в условиях газожидкостного течения. Общая эффективность биореактора с резервуаром перемешивания выражается в терминах энергоэффективности (качественной функции силовой тяги и скорости массопереноса), и сравниваются результаты для обоих типов крыльчаток при различных поверхностных скоростях газа.

1. Материалы и методы

В настоящей работе применялись методы вычислительной гидродинамики (CFD). Они полностью основываются на численных методах, использующих уравнения сохранения массы вместе с другими дополнительными уравнениями переноса. Некоторые исследователи [13, 14] успешно применяли CFD в своих исследованиях в областях моделирования процессов перемешивания (в турбулентном режиме) в газожидкостных реакторах.

1.1. Основные уравнения

Основные уравнения, моделирующие двухфазное течение, следуют эйлерово-эйлеровому подходу [15–18]. Эйлерово-эйлерова модель многофазной среды широко используется при моделировании газожидкостного биореактора [19–21], и в настоящем исследовании она применяется для моделирования гидродинамики. Эта модель также используется при моделировании течений газожидкостных сред в каналах, трубах [22–26]. Фазы (непрерывная и дисперсная) рассматриваются как взаимопроникающие среды, идентифицируемые с помощью их локальных объемных концентраций. Сумма объемных концентраций равна единице, и они рассчитываются из уравнения неразрывности. Для каждой фазы решаются осредненные по Рейнольдсу уравнения баланса массы и количества движения, они приводятся ниже.

Уравнение неразрывности:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \rho_i) + \nabla \cdot (\alpha_i \rho_i \vec{U}_i) = 0, \quad (1)$$

$$\alpha_l + \alpha_g = 1, \quad (2)$$

где ρ_i , α_i , \vec{U}_i — соответственно плотность, объемная концентрация и осредненная скорость фазы i (l — жидкость, g — газ).

Уравнение количества движения:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_i \rho_i \vec{U}_i) + \nabla \cdot (\alpha_i \rho_i \vec{U}_i \vec{U}_i) = -\alpha_i \nabla p + \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}}_{\text{eff}i} + \vec{R}_i + \vec{F}_i + \alpha_i \rho_i \vec{g}, \quad (3)$$

где p — давление обеих фаз и \vec{R}_i — члены межфазного обмена количеством движения, \vec{g} — сила тяжести; \vec{F}_i представляет собой силу Кориолиса и центробежную силу, действующие в модели крыльчатки,

$$\vec{F}_i = -2\alpha_i \rho_i \vec{N} \times \vec{U}_i - \alpha_i \rho_i \vec{N} \times (\vec{N} \times \vec{r}), \quad (4)$$

где \vec{N}_i — угловая скорость (рад с⁻¹) и \vec{r} — радиус-вектор точки (м).

Тензор напряжений Рейнольдса $\bar{\bar{\tau}}_{\text{eff}i}$ включает в себя ламинарные и турбулентные напряжения и по гипотезе Буссинеска определяется из уравнения

$$\bar{\bar{\tau}}_{\text{eff}i} = \alpha_i (\mu_{\text{lam},i} + \mu_{t,i}) (\nabla \vec{U}_i + \nabla \vec{U}_i^T) - \frac{2}{3} \alpha_i (\rho_i k_i + (\mu_{\text{lam},i} + \mu_{t,i}) \nabla \cdot \vec{U}_i) \bar{\bar{I}}, \quad (5)$$

где $\mu_{\text{lam},i}$ и $\mu_{t,i}$ — ламинарная и турбулентная вязкости для фазы i , k_i — кинетическая энергия турбулентности для фазы i , а $\bar{\bar{I}}$ — единичный тензор.

1.2. Уравнения модели турбулентности

Стандартная k - ε модель турбулентности адекватна для многих инженерных приложений [27] и используется в настоящей работе вместе с дисперсной k - ε моделью для многофазных сред [28–30] для моделирования течения газовых включений (вторичная фаза), растворенных в непрерывной жидкой фазе (первичная фаза). Так как концентрация воздушной фазы растворена в водной фазе, здесь используется дисперсная модель турбулентности. Уравнения турбулентной кинетической энергии k и скорости турбулентной диссипации ε решаются только для жидкой фазы и имеют следующий вид:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_l \alpha_l k_l) + \nabla \cdot (\rho_l \alpha_l \vec{U}_l k_l) = \nabla \cdot \left(\alpha_l \frac{\mu_{t,l}}{\sigma_k} \nabla k_l \right) + \alpha_l G_{kl} - \rho_l \alpha_l \varepsilon_l + \rho_l \alpha_l \Pi_{kl}, \quad (6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_l \alpha_l \varepsilon_l) + \nabla \cdot (\rho_l \alpha_l \vec{U}_l \varepsilon_l) = \nabla \cdot \left(\alpha_l \frac{\mu_{t,l}}{\sigma_\varepsilon} \nabla \varepsilon_l \right) + \alpha_l \frac{\varepsilon_l}{k_l} (C_{1\varepsilon} G_{kl} - C_{2\varepsilon} \rho_l \varepsilon_l) + \rho_l \alpha_l \Pi_{\varepsilon l}. \quad (7)$$

Турбулентная вязкость жидкости дается формулой

$$\mu_{t,l} = \rho_l C_\mu \frac{k_l^2}{\varepsilon_l}, \quad (8)$$

где G_{kl} — скорость производства турбулентной кинетической энергии. Π_{kl} и Π_{el} учитывают влияние дисперсной фазы на непрерывную фазу [31, 32]. C_μ , $C_{1\varepsilon}$, $C_{2\varepsilon}$, $C_{3\varepsilon}$, σ_k , σ_ε — константы стандартной k - ε модели. Их значения равны соответственно 0,09, 1,44, 1,92, 1,2, 1, 1,3. Члены Π_{kl} и Π_{el} учитывают турбулентное взаимодействие между водой и воздухом и моделируются по формулам

$$\Pi_{kl} = \frac{C_D}{\alpha_l \rho_l} (C_{lg} - 2k_l + \bar{U}_{lg} \cdot \bar{U}_{dr}), \quad (9)$$

где C_D — коэффициент сопротивления, C_{lg} — ковариация скоростей воздуха и воды, \bar{U}_{lg} ($=\bar{U}_g - \bar{U}_l$) — относительная скорость воздуха и воды, \bar{U}_{dr} — скорость дрейфа,

$$\begin{aligned} C_{lg} &= 2k_l \left(\frac{b + \eta_{lg}}{1 + \eta_{lg}} \right), \\ \bar{U}_{dr} &= - \left(\frac{D_g}{\sigma_{lg} \alpha_g} \nabla \alpha_g - \frac{D_l}{\sigma_{lg} \alpha_l} \nabla \alpha_l \right). \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь $b = (1 + C_v) \left(\frac{\rho_l}{\rho_g} + C_v \right)^{-1}$, $C_v = 0,5$; D_g и D_l — рассеяния, $\sigma_{lg} = 0,75$ (по умолчанию) — число Прандтля. Выражения для D_g , D_l и η_{lg} можно найти в работе [33]. В соответствии с [31]

$$\Pi_{el} = C_{3\varepsilon} \frac{\varepsilon_l}{k_l} \Pi_{kl}, \quad C_{3\varepsilon} = 1,2. \quad (11)$$

1.3. Межфазный обмен количеством движения

Член межфазного количества движения включает в себя силу Бассе, силу присоединенной виртуальной массы, подъемную силу и силу сопротивления. Сила Бассе возникает из-за развития пограничного слоя вокруг пузырьков, и ее нужно учитывать только в случае нестационарных течений. Величина силы Бассе намного меньше, чем сила межфазного сопротивления, и включение этой силы приводит к увеличению машинного времени счета [34]. Подъемная сила значительна, если градиенты скорости велики, но в резервуаре перемешивания она очень мала внутри основного объема и имеет значение только в области вблизи крыльчатки. Вблизи крыльчатки градиенты давления и силы трения оказывают доминирующее влияние на движение пузырьков. Анализ порядка величины указывает на то, что величина подъемной силы намного меньше, чем сила сопротивления [35]. Было показано, что влияние виртуальной массовой силы значительно вблизи лопастей крыльчатки и что это влияние уменьшается во всем объеме. Аналогичный результат был получен также в работе [34]. Даже после пренебрежения подъемной силой все еще можно получать хорошие результаты сравнения с экспериментальными данными [36–38]. В работах [20–39] изучалось влияние всех межфазных сил (силы Бассе, подъемной силы, виртуальной массы и сопротивления) и было найдено, что влияние других сил слишком мало по сравнению с силой сопротивления. По этой причине некоторые авторы [28, 40–42] предпочитали учитывать только силу

сопротивления при моделировании процессов в газожидкостных подвижных резервуарах с целью снижения машинного времени счета, что очень существенно в области коммерческого моделирования. Сила сопротивления — единственная управляющая сила в подвижных резервуарах и в других устройствах (то есть в пузырьковой колонне), но присутствуют также и другие силы [42]. Сила сопротивления является наиболее важной межфазной силой, действующей на пузырьки и являющейся результатом наличия средней относительной скорости между двумя фазами, дающей дополнительный вклад в объемную концентрацию из-за турбулентных флуктуаций с учетом осреднения уравнений количества движения [32]. Учитывая все это, мы намеренно предпочли использовать в нашем исследовании только силу сопротивления с целью уменьшения расходов на моделирование с пониманием того, что это не окажет значительного влияния на результаты.

Член \bar{R}_l из уравнения (3) записывается с учетом только силы сопротивления в виде

$$\bar{R}_l = -\bar{R}_g = K(\bar{U}_g - \bar{U}_l), \quad (12)$$

где K — коэффициент обмена между газом и жидкостью,

$$K = \frac{3}{4} \rho_l \alpha_l \alpha_g \frac{C_D}{d_b} |\bar{U}_g - \bar{U}_l|, \quad (13)$$

d_b — диаметр пузырька и C_D — коэффициент сопротивления, определяемый как функция относительного числа Рейнольдса Re_p . Стандартная формула для Re_p не учитывает влияния турбулентности на движение пузырька. Поэтому выражение для Re_p было модифицировано с целью учета влияния турбулентности [43]:

$$Re_p = \frac{\rho_l |\bar{U}_g - \bar{U}_l| d_b}{\mu_l + C \mu_{t,l}}. \quad (14)$$

Здесь C — модельный параметр, введенный для учета влияния турбулентности путем уменьшения скорости скольжения. Этот параметр полагается равным 0,3 [13]. Затем коэффициент сопротивления вычисляется с использованием стандартного соотношения Шиллера и Наумана [44], которое записывается в виде

$$C_D = \begin{cases} \frac{24(1 + 0,15 Re_p^{0,687})}{Re_p}, & Re_p \leq 1000 \\ 0,44, & Re_p > 1000. \end{cases} \quad (15)$$

Эта модель сопротивления первоначально была разработана на основе закона Стокса для жесткой одиночной сферы в системах из газа и твердых тел для весьма малых чисел Рейнольдса ($Re_p > 1$), позднее — для диапазона более высоких значений Re , в дальнейшем она стала известна как модель сопротивления Шиллера–Наумана [44]. Закон Стокса также применим в газожидкостных системах, так как пузырьки могут считаться малыми твердыми частицами. Пузырьки имеют малые размеры и являются сферическими в определенных обстоятельствах [45]. Таким образом, модель сопротивления Шиллера–Наумана используется в настоящем исследовании при описании газожидкостных течений в предположении, что пузырьки имеют сферическую форму и их размер очень мал ($d_b = 2$ мм).

1.4. Модель массопереноса

Имеется несколько соотношений для оценки массопереноса, но наиболее часто применяется модель Данкверца [46], она используется для расчета коэффициента массопереноса (k_L), является уточнением теории проникания и дается формулой

$$k_L = \sqrt{D_l} s, \quad (16)$$

где s — скорость обновления поверхности и D_l — коэффициент диффузии жидкости. Этот подход предполагает, что величина k_L связана со средней скоростью обновления поверхности, вытекающей из взаимодействия поверхности раздела пузырька с турбулентными вихрями с переменным временем контакта. Позднее авторы работы [47] предположили, что мелкомасштабное турбулентное движение, которое простирается от наименьшего вязкого движения до инерциального, влияет на скорость массопереноса и s вычисляется на основе теории Колмогорова изотропной турбулентности. Уравнение (16) принимает вид:

$$k_L = KD_l^{0,5} \left(\frac{\varepsilon_l}{\nu_l} \right)^{0,25}, \quad (17)$$

где $K = 0,4$ — константа модели, ε_l — скорость турбулентной диссипации, ν_l — кинематическая вязкость жидкости. Коэффициент объемного массопереноса ($k_L a$) является комбинацией k_L и a , где a — удельная площадь межфазной поверхности раздела, она является функцией локальной объемной концентрации газа α_g и диаметра пузырька d_b и выражается формулой

$$a = \frac{6\alpha_g}{d_b}. \quad (18)$$

Следовательно, объемный коэффициент массопереноса $k_L a$ записывается в виде

$$k_L a = KD_l^{0,5} \left(\frac{\varepsilon_l}{\nu_l} \right)^{0,25} \times \frac{6\alpha_g}{d_b}. \quad (19)$$

1.5. Силовая тяга

Силовая тяга — минимальная сила, требуемая для того, чтобы вал вращал крыльчатку. Силовая характеристика в условиях насыщения газом выражается по отношению к условию, когда газ отсутствует, для того, чтобы получить относительную силовую тягу (P_g/P_0). Она является отношением мощности, подводимой в условиях насыщения газом (P_g), к мощности, подводимой при отсутствии газа (P_0). Величина P_g , получаемая численным моделированием, является произведением скорости крыльчатки $2\pi N$ и вращающего момента τ . Это основная характеристика реакторов [48], она вычисляется из момента, действующего на вал и крыльчатку. Вычисленный момент вращения связан с P_g формулой

$$P_g = 2\pi N\tau. \quad (20)$$

В работе [49] было предложено соотношение для P_0 из экспериментов для сдвоенных крыльчаток в виде

$$\frac{P_0}{V} = 6 \times 10^{-12} \text{Re}^{2,921}, \quad \text{Re} > 10^4, \quad (21)$$

где V — объем резервуара.

1.6. Конфигурация резервуара и граничные условия

В настоящем исследовании используется газожидкостный биореактор с двойной крыльчаткой, снабженный комбинацией крыльчаток Раштона и CD-6. Его размеры приведены на рис. 1. Расстояние (S_1 и S_2 — расстояния от дна резервуара до нижней и верхней крыльчаток соответственно) между крыльчатками подобрано так, чтобы получить параллельное течение [13, 50], которое считается устойчивым в реакторах. Параллельное течение — это траектория течения, создаваемая двумя крыльчатками, действующими независимо. Крыльчатка вращается со скоростью $N = 450$ оборотов в минуту и создает режим полностью турбулентного течения с числом Рейнольдса $Re = Nd^2/\nu = 72699$, где ν — кинематическая вязкость ($1,005 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$), d — диаметр и N — скорость вращения крыльчатки. Газ непрерывно подается через разбрызгиватель под крыльчаткой (на расстоянии $0,07 \text{ м}$ от дна резервуара) для того, чтобы усилить эффективность перемешивания. Используется широкий диапазон изменения скорости газовой фазы v_g ($0,002$ – $0,2 \text{ м/с}$) для управления эффективностью перемешивания в терминах коэффициента массопереноса и силовой тяги. Используется постоянный диаметр пузырьков (d_b), равный 2 мм .

При моделировании резервуаров перемешивания размер созданной сетки также является важным фактором в точном расчете результатов. Поэтому в настоящем исследовании

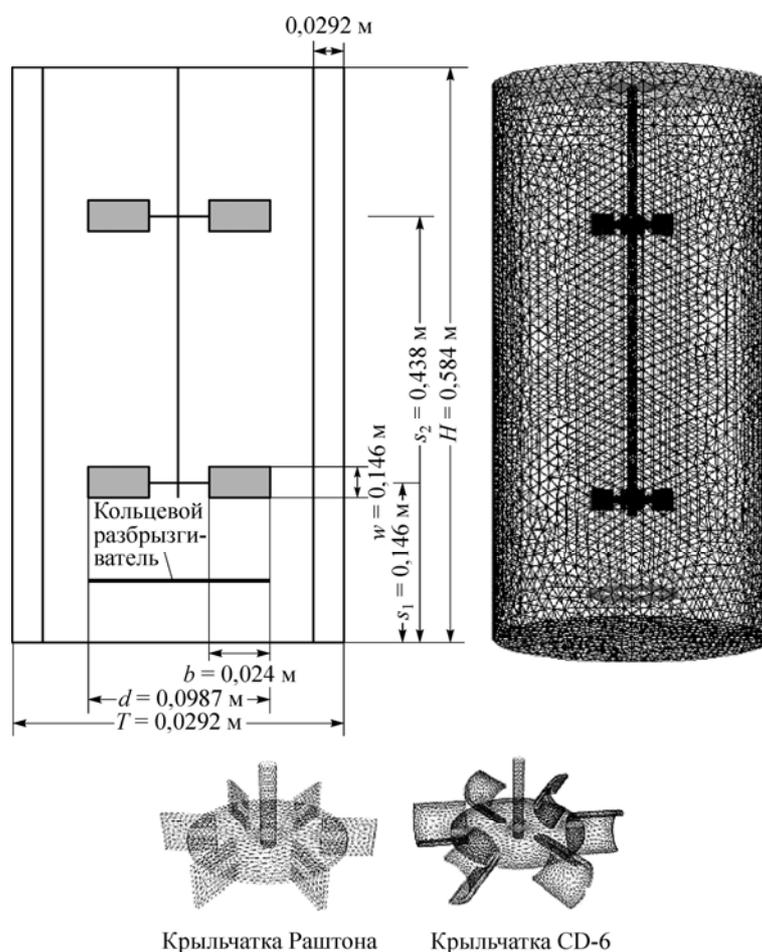
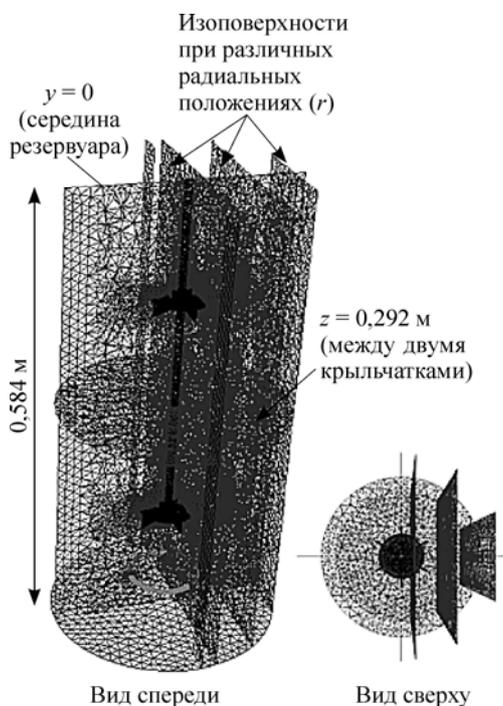


Рис. 1. Конфигурация резервуара и расчетная сетка.

довании рассматривалось несколько вариантов размеров сетки из литературы. Разные размеры сетки исследовались в работе [51] (очень грубая, грубая, умеренно мелкая и мелкая сетка) на примере резервуара перемешивания с одной крыльчаткой, где круглый резервуар имел диаметр и высоту 0,15 см, и было найдено, что умеренно мелкая сетка давала хорошее согласование с результатами экспериментов. Здесь же отмечалось, что мелкая сетка приводила к малому улучшению результата. Также является фактом то, что применение более мелкой сетки увеличивает стоимость моделирования. Поэтому был сделан вывод: для уменьшения расходов на вычисления можно использовать умеренно мелкую сетку для расчета полей течения, однако точный расчет турбулентности требует более мелких сеток. Были построены неструктурированные (тетраэдральные) умеренно мелкие сетки, состоящие примерно из 900 тысяч ячеек для резервуара с крыльчаткой Раштона и 1100 тысяч ячеек для крыльчатки CD-6, с учетом того, что более мелкая сетка требует большего машинного времени для моделирования. С целью учета сложного течения жидкости (турбулентности) вблизи области крыльчатки в этой частной области применялась более мелкая сетка вместо того, чтобы строить мелкую сетку во всем сосуде, так что точное моделирование турбулентности обеспечивалось за умеренное машинное время. В качестве рабочего давления рассматривается атмосферное давление (101325 Па), сила тяжести рассматривается как имеющая отрицательную величину ($-9,81\text{м/с}^2$). Необходимо применять граничное условие на поверхностях раздела каждой фазы. Входное граничное условие для скорости применяется на кольцевом разбрызгивателе. На верхней поверхности рассматривается условие отсутствия газа, задаваемое функциями, определяемыми пользователем, которые удовлетворяют условию, что газ должен покидать расчетную область, а жидкость (вода) будет оставаться внутри области.

2. Результаты их обсуждение

В этом разделе будут представлены результаты расчета гидродинамики, силовой тяги и скорости массопереноса при различных приведенных скоростях. Результаты представлены для различных изоповерхностей, вид этих изоповерхностей приведен на рис. 2: осевые (между двумя крыльчатками) и радиальные.



2.1. Расчет гидродинамики

Гидродинамические условия в био-реакторах оказывают сильное влияние на перенос газа и жидкости в течение био-процесса [52]. Расчет гидродинамики очень важен в условиях существования турбулентного течения. Характеристики турбулентности зависят от нескольких геометрических и эксплуатационных факторов, особенно от типов крыльчаток и от приведенной скорости газа (v_g) в условиях насыщения газом. Нужно детально исследовать различные величины скоростей газа и воды

Рис. 2. Изоповерхности.

в газожидкостном биореакторе, так как это дает прямое представление об эффективности процесса перемешивания. На рис. 3 сравниваются средняя скорость (воздуха и воды), осредненная по объему, и скорость диссипации (ε) при трех различных v_g для крыльчаток Раштона и CD-6. Видно, что величина скорости становится выше при более высоких значениях v_g для воздуха и воды в обоих случаях: для крыльчаток Раштона и для CD-6. Скорость диссипации существенно возрастает с увеличением значений v_g . Скорость воздуха в расчете получается несколько выше, чем скорость воды в крыльчатке Раштона, однако в случае крыльчатки CD-6 она оказывается ниже при более низких значениях v_g . Расчетное значение ε намного выше для крыльчатки CD-6, чем для крыльчатки Раштона. Более высокие значения ε заметно повышают эффективность процесса перемешивания в биореакторе.

Поле течения, определяемое векторами средней скорости крыльчаток Раштона и CD-6 и показанное на рис. 4, изображает разные траектории течения, сгенерированные этими двумя крыльчатками. Рассматриваются только три значения (0,0075, 0,05 и 0,2 м/с), так как другие значения не дают заметных отличий в значениях $k_L a$, представляемых в следующем разделе. Поле течения вокруг крыльчатки и у разбрызгивателя преобладает над другими областями реактора. Это связано с сильным движением лопастей крыльчатки и непрерывной подачей газа из кольцевого разбрызгивателя. Нет отчетливого формирования пары вихрей в условиях насыщения газом, что является обычным в условиях отсутствия газа в случае двойной крыльчатки Раштона. Крыльчатка CD-6 также не образует пару вихрей в условиях насыщения газом. Причиной этого является сильное возмущение, вносимое подаваемым газом, которое разрушает известную траекторию непрерывного течения, сформированного лопастями крыльчатки. При более низких значениях v_g наблюдается меньшее возмущение, вносимое газом от кольцевого разбрызгивателя, но оно заметно увеличивается, если v_g увеличивается далее, и в случае крыльчаток Раштона и в случае крыльчаток CD-6. Величина локального распределения средней скорости оказывается намного выше при более высоких значениях v_g . Нижняя крыльчатка, скомбинированная с разбрызгивателем, производит более сильную циркуляцию

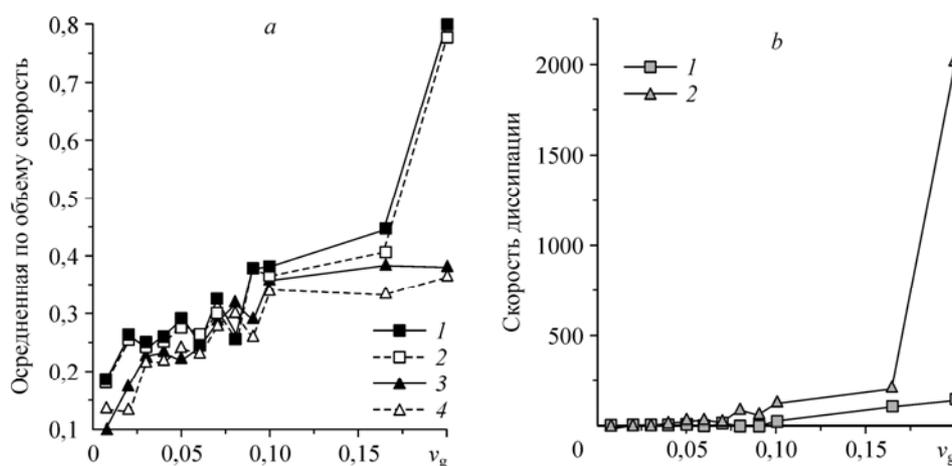


Рис. 3. Сравнение скорости, осредненной по объему (а), и скорости диссипации (б) крыльчаток Раштона и CD-6 при различных v_g .

а — крыльчатки Раштона для воздуха (1) и воды (2) и крыльчатки CD-6 для воздуха (3) и воды (4); б — крыльчатки Раштона (1) и CD-6 (2).

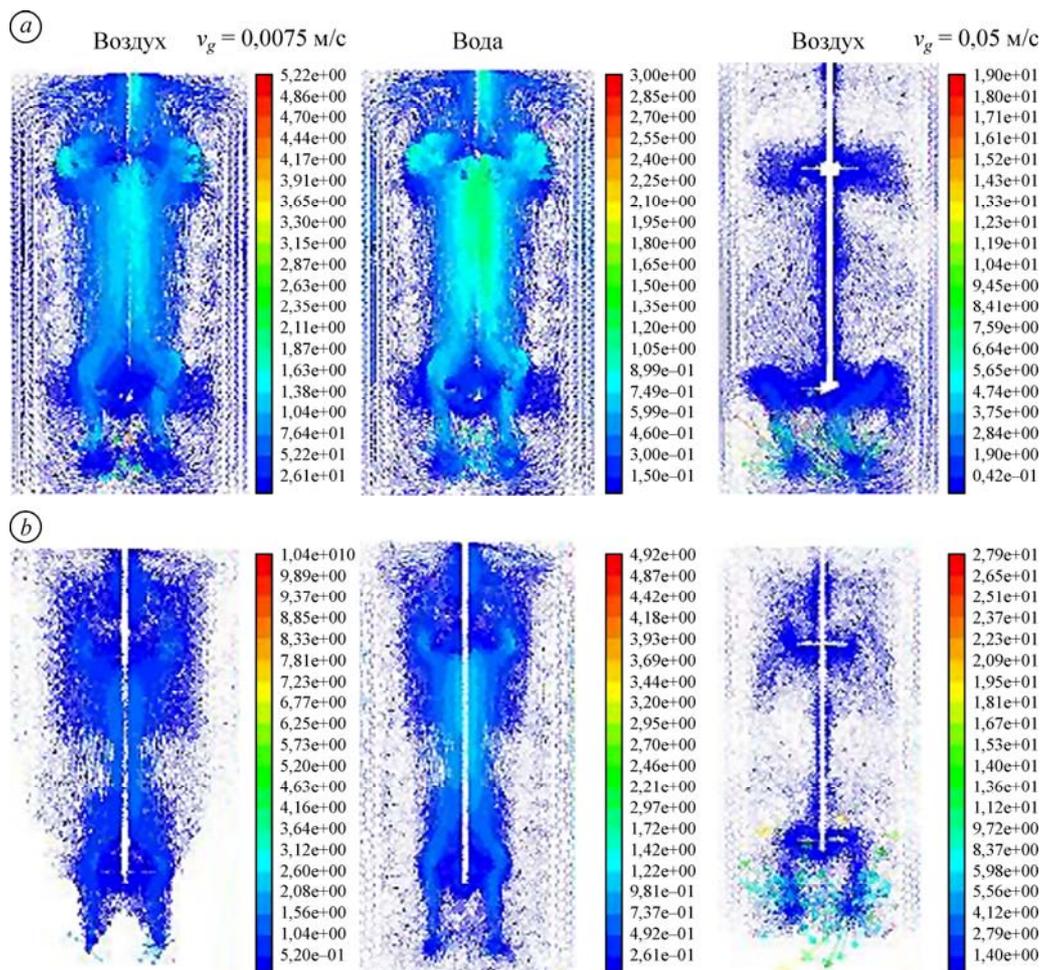


Рис. 4. Сравнение величины скорости воздуха и воды для крыльчаток Раштона (а) и CD-6 (б) при различных v_g . Начало.

течения, чем верхняя крыльчатка. На направленную вверх циркуляцию воды оказывают значительное влияние более высокие значения v_g .

2.2. Расчет P_g/P_0 и $k_L a$

Относительная силовая тяга P_g/P_0 и коэффициент массопереноса $k_L a$ являются существенными факторами (управляющими макропараметрами), которые нужно оценить количественно при изучении динамики процессов в биореакторах. Величину P_g/P_0 нужно вводить в газожидкостную фазу, так как подвод мощности в условиях насыщения газом отличается от условия отсутствия газа. На эти крупномасштабные факторы, воздействующие на динамику жидкости, влияют несколько причин, таких, как различие в типах крыльчаток и поверхностная скорость газа в газожидкостной фазе. На рис. 5 сравниваются вычисленные значения P_g/P_0 и осредненные по объему $k_L a$ при различных значениях v_g для крыльчаток Раштона и CD-6. Величина P_g/P_0 более завышена в случае крыльчатки Раштона, чем в случае крыльчатки CD-6, и корреляция для крыльчатки CD-6

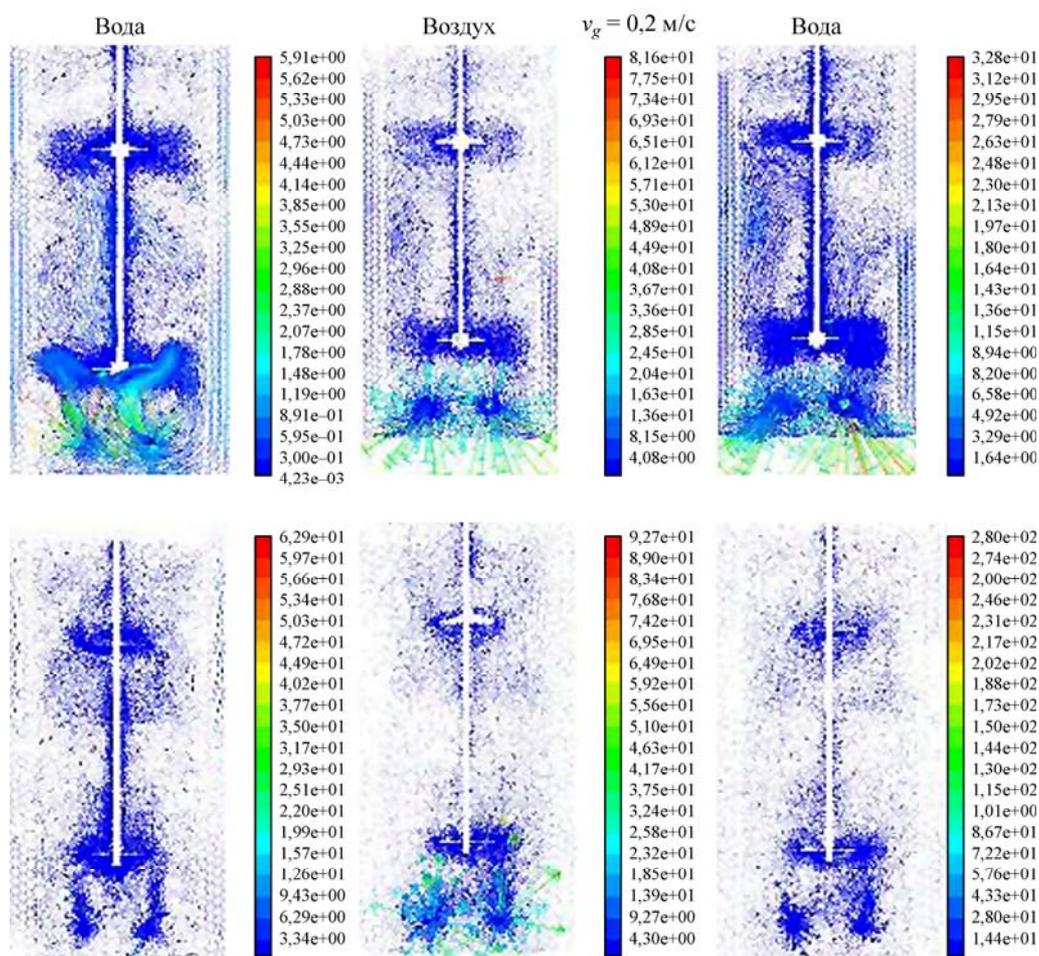


Рис. 4. Окончание.

для вычисления P_0 с помощью однофазной модели оказывается несколько выше, чем корреляция, предложенная в работе [48] на основе крыльчатки Раштона (рис. 5, *b*). При низких значениях v_g нет заметных различий в значениях $k_L a$ в случае использования крыльчаток Раштона или CD-6, затем при некоторых более высоких значениях v_g величина $k_L a$ постепенно убывает, но для крыльчатки CD-6 она убывает несколько сильнее, если v_g увеличивать дальше, оба значения принимают одинаковую величину (рис. 5, *a*). Из рис. 5, *c* видно, что дальнейшего улучшения в среднем значении $k_L a$ при возрастании параметра P_g/P_0 нет.

Локальное распределение $k_L a$ лучше помогает понять суть процесса массопереноса между двумя фазами, чем средние значения $k_L a$, из-за формирования различных зон внутри резервуара, таких, как область разгрузки крыльчатки (в этой области имеет место более высокая эффективность), основного объема (умеренная эффективность) и мертвая зона (самая низкая эффективность). Мертвая зона обычно существует на дне в углу резервуара, где имеет место наименьшее взаимодействие между воздухом и жидкостью. Вследствие того, что такое неравномерное взаимодействие течения жидкости в этих

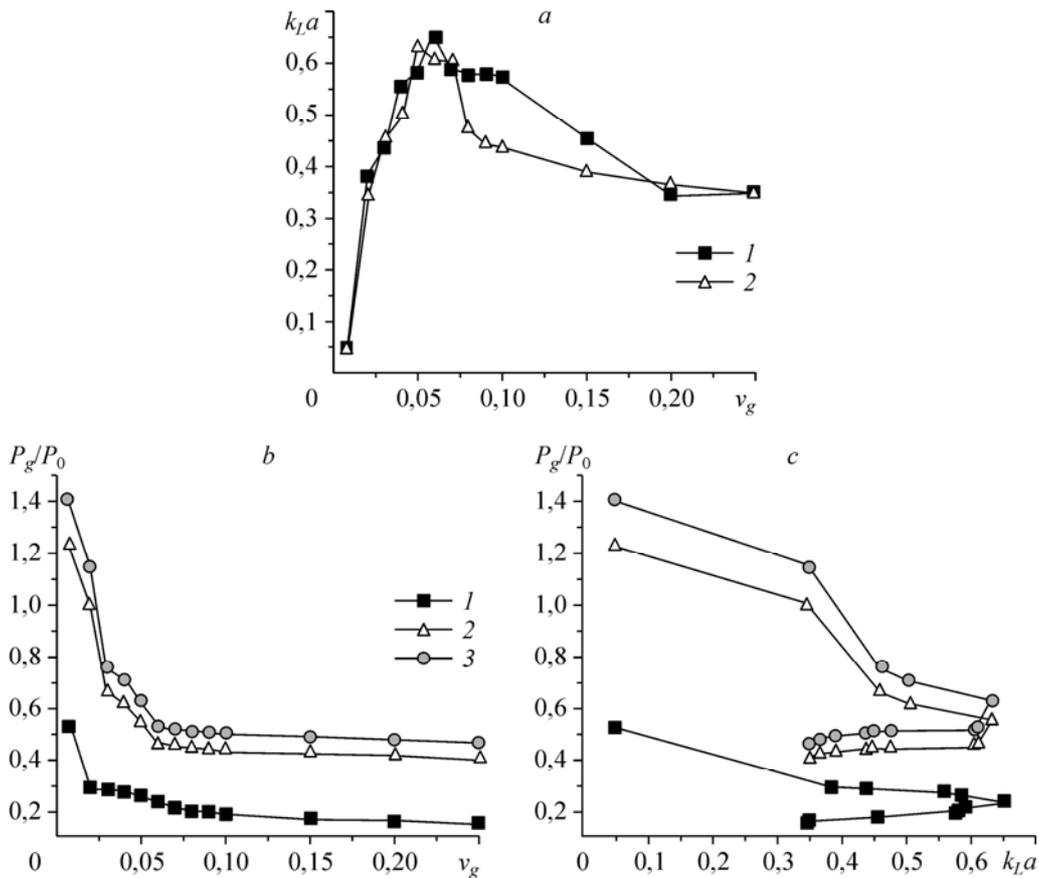


Рис. 5. Сравнение крыльчаток Раштона и CD-6 по $k_L a$ (a) и по P_g/P_0 (b) при различных v_g , сравнение по P_g/P_0 и $k_L a$ (c).

Крыльчатки: 1 — Раштона (P_0 вычислено по [48]), 2 — CD-6 (P_0 вычислено по [48]), 3 — CD-6 (P_0 вычислено с помощью однофазного численного моделирования).

зонах также влияет на средние значения $k_L a$, возникает необходимость наблюдать за локальными распределениями. Локальное распределение $k_L a$ будет представлено только для трех различных v_g (0,0075, 0,05 и 0,2 м/с) из-за его сильного изменения, рассчитанного при этих частных значениях v_g .

На рис. 6 сравниваются контуры локального распределения вычисленных $k_L a$ при трех различных v_g для крыльчаток Раштона и CD-6. Видно, что локальное распределение $k_L a$ выше при некоторых более высоких значениях v_g , но если далее увеличивать v_g , то уже нет заметных различий для крыльчаток Раштона и CD-6. Большой размер мертвой зоны под разбрызгивателем при более низких значениях v_g указывает на меньшую дисперсию газа в этой зоне, и когда v_g увеличивается далее, эта зона почти исчезает. Более высокие значения $k_L a$ получаются на верхней открытой поверхности резервуара; это является следствием того факта, что на взаимодействие между воздухом, подаваемым из разбрызгивателя, и водой оказывает большое влияние атмосферный воздух. Параметр $k_L a$ не может достичь в радиальном направлении стенки резервуара при более низких значениях v_g , а при более высоких значениях эта величина равномерно распределена в обоих случаях крыльчаток Раштона и CD-6.

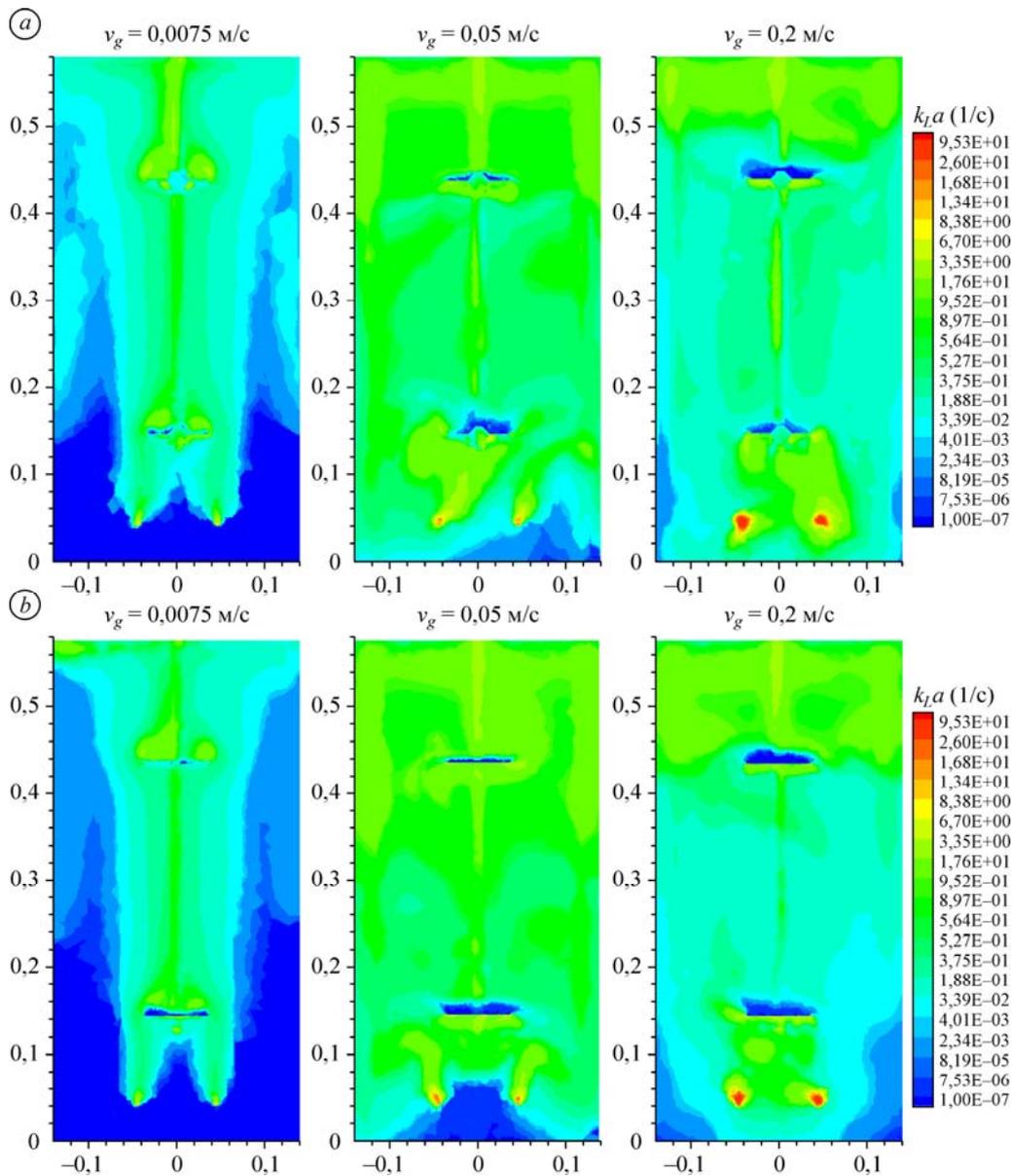


Рис. 6. Сравнение рассчитанных локальных k_La при различных v_g для крыльчаток Раштона (а) и CD-6 (б) на изоповерхности при $y = 0$.

Имеется неравномерность в пространственном распределении массопереноса. Изменение величины k_La вдоль оси и между нижней и верхней крыльчатками имеет большое значение для изучения того, как расстояние между крыльчатками влияет на эффективность биореактора. Такой тип изменения радиальных и осевых расстояний дает дополнительное понимание при детальном исследовании локального распределения k_La в высоком биореакторе, имеющем много крыльчаток. На рис. 7 сравниваются локальные k_La в случаях крыльчаток Раштона и CD-6 при различных радиальных положениях и при различных v_g . Максимальное локальное значение k_La имеет место у разбрызгивателя. Более высокие значения k_La наблюдаются у вершины крыльчатки ($r = 0,04865$ м). Верхняя и нижняя крыльчатки производят почти одинаковые значения k_La . Равномерное

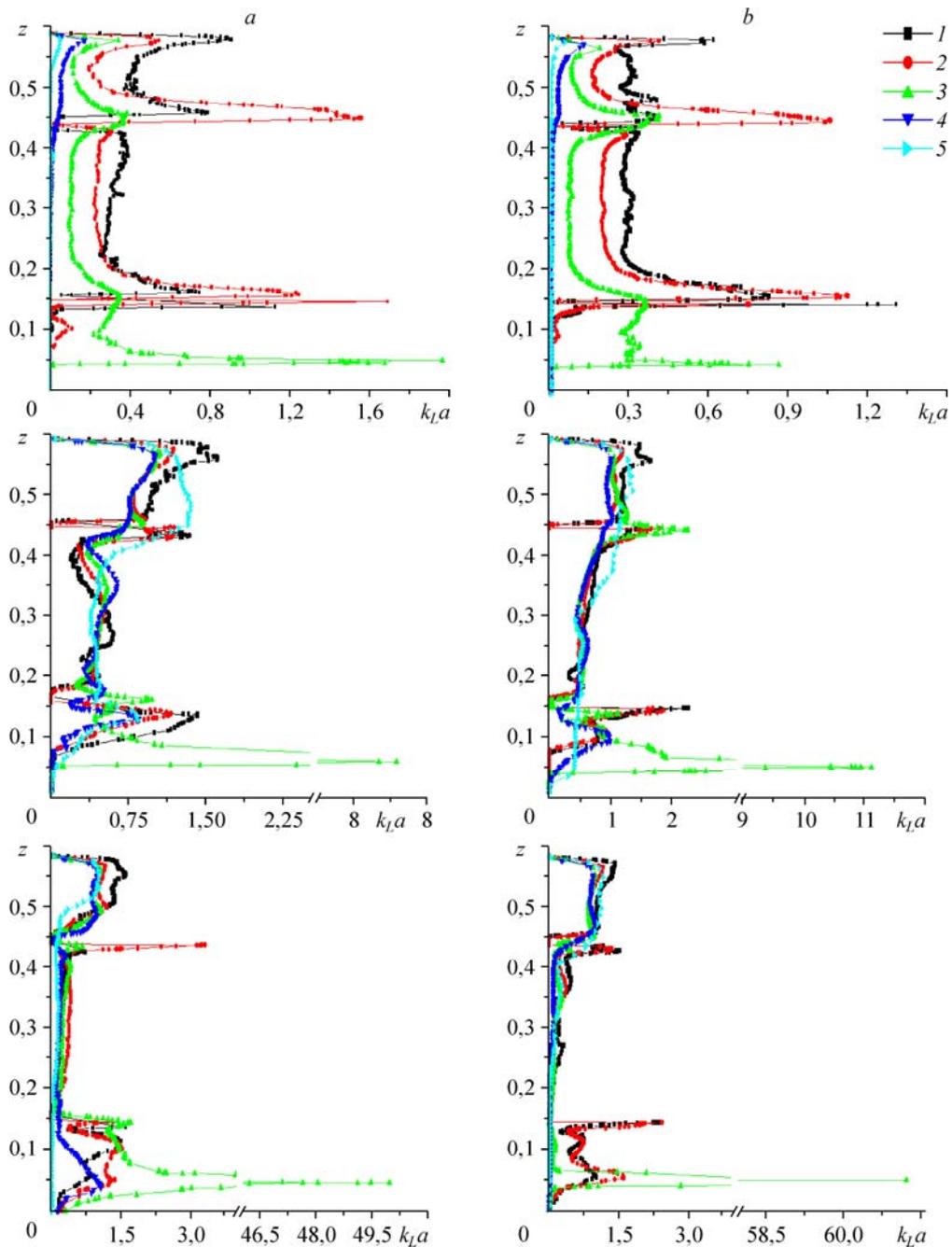


Рис. 7. Сравнение расчетных локальных $k_L a$ для крыльчаток Раштона (а) и CD-6 (b) при различных радиальных положениях (r) для различных v_g .
 v_g — 0,0075 (вверху), 0,05 (по центру), 0,2 м/с (внизу); r — 0/01 (1), 0,024 (2), 0,04865 (3), 0,07775 (4), 0,1315 (5) м.

распределение $k_L a$ наблюдается при более высоких значениях v_g (0,05 и 0,2 м/с) в радиальном направлении.

Сравнение осевого распределения локальных значений $k_L a$ для крыльчаток Раштона и CD-6 ($z = 0,292$ м) при различных значениях v_g приводится на рис. 8, а–с. Нет большого различия в $k_L a$ вдоль оси между крыльчатками Раштона и CD-6. Более высокие

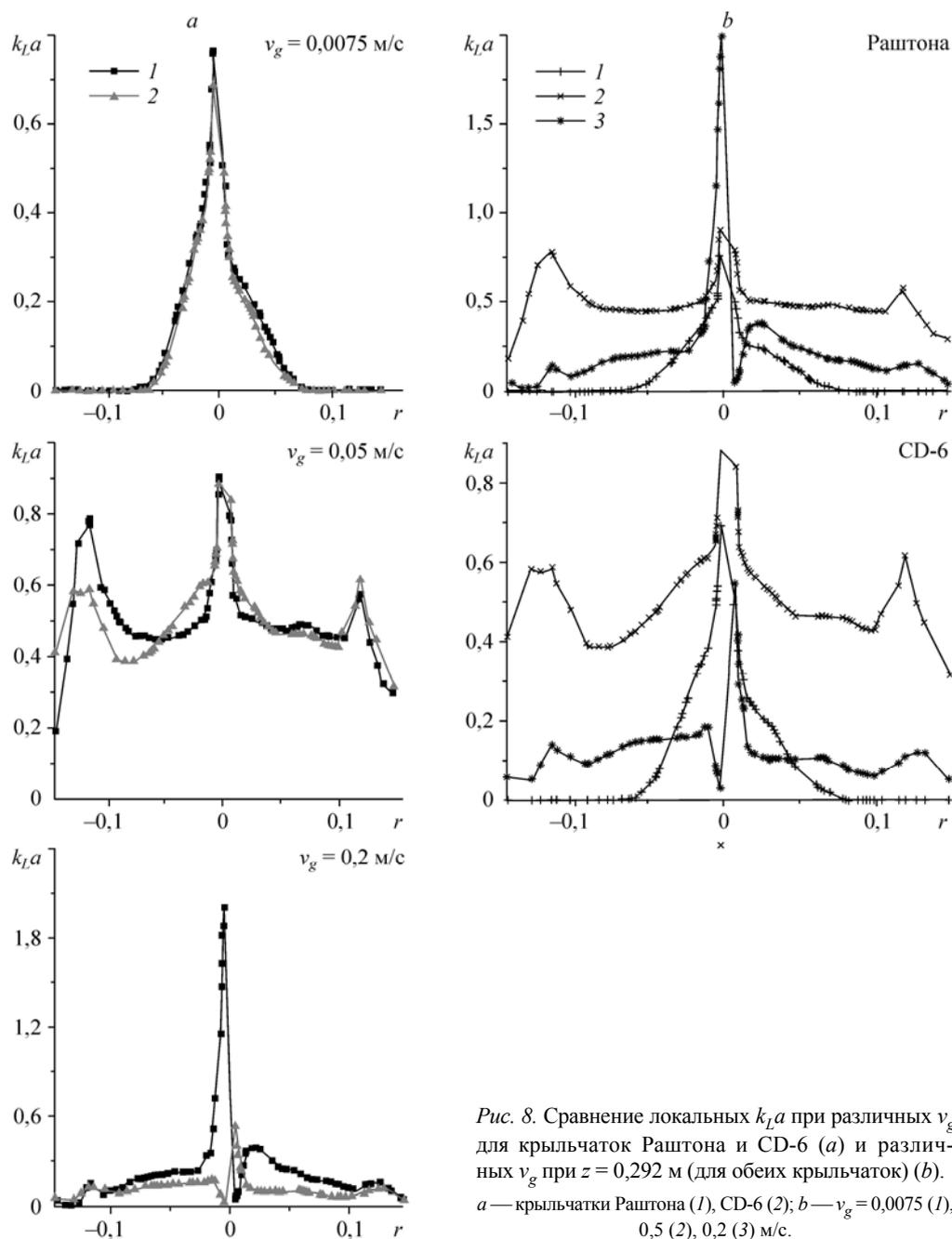


Рис. 8. Сравнение локальных $k_L a$ при различных v_g для крыльчаток Раштона и CD-6 (a) и различных v_g при $z = 0,292$ м (для обеих крыльчаток) (b). a — крыльчатки Раштона (1), CD-6 (2); b — $v_g = 0,0075$ (1), 0,5 (2), 0,2 (3) м/с.

значения v_g приводят к более высоким $k_L a$ в осевом направлении между верхней и нижней крыльчатками. Представляется, что изменение в осевом распределении $k_L a$ намного меньше, чем осевое распределение, представленное в работах [53] и [6].

Так как $k_L a$ зависит от нескольких факторов, нельзя судить об общей эффективности биореактора с резервуаром перемешивания лишь на его основе. Эффективность имеет тесную связь с силовой тягой, которой обладают разные типы крыльчаток при различных v_g . Можно выразить эффективность биореактора с резервуаром перемешивания в газожидкостной системе в терминах энергетической эффективности, и она является

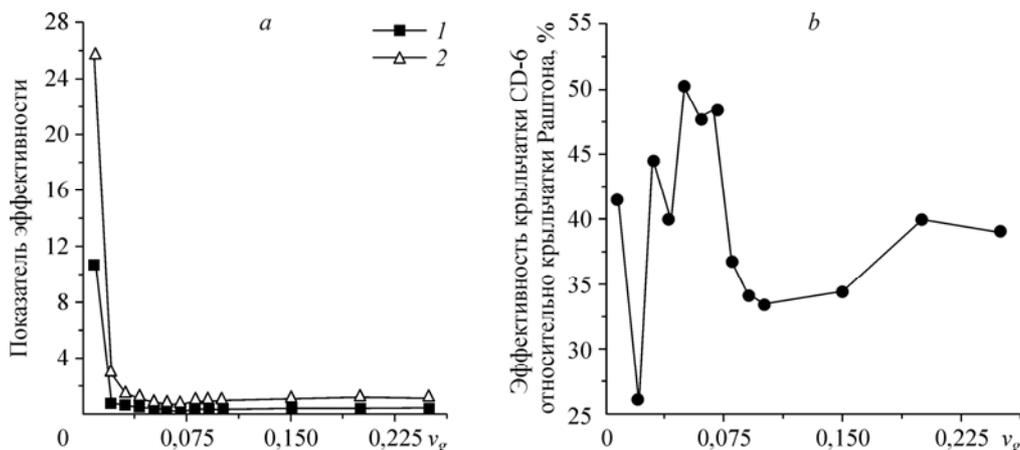


Рис 9. Сравнение эффективности крыльчаток CD-6 и Раштона (а) и их процентное отношение (б).
а — Раштона (1), CD-6 (2).

качественной функцией силовой тяги и скорости массопереноса в системе (энергия = = силовая тяга/скорость массопереноса). Силовая тяга берется как P_g/P_0 и скорость массопереноса как $k_L a$ для того, чтобы получить эффективность биореактора.

Показатель эффективности и более высокая процентная эффективность для крыльчатки CD-6 по сравнению с крыльчаткой Раштона представлены на рис. 9. Найдено, что эффективность выше для крыльчатки CD-6 (рис. 9, а). Общая процентная эффективность крыльчатки CD-6 по сравнению с крыльчаткой Раштона выше на 25–50 % в широком диапазоне v_g . Найдено, что эффективность выше при конкретных значениях v_g (0,0075–0,075 м/с), затем она начинает снижаться при более высоких значениях v_g (выше 0,075 м/с) до значений 0,25 м/с.

Заключение

Рассчитана и изучена динамика процессов в биореакторе с резервуаром перемешивания в случаях крыльчаток Раштона и CD-6 в широком диапазоне значений приведенной скорости газа. Величина скорости растет с увеличением приведенной скорости газа. Скорость диссипации заметно увеличивается при более высоких значениях приведенной скорости газа. Относительная силовая тяга выше в случае крыльчатки CD-6. Нет заметного различия в осредненном по объему коэффициенте массопереноса между крыльчатками Раштона и CD-6. Оптимальная поверхностная скорость газа наблюдается при 0,0075–0,075 м/с. Найдено, что общая эффективность биореактора, выражаемая в терминах энергетической эффективности, выше в случае крыльчатки CD-6 примерно на 25–50 %, чем в случае крыльчатки Раштона.

Список литературы

1. Liu Y.S., Wu J.Y., Ho K.P. Characterization of oxygen transfer conditions and their effects on *Phaffia rhodozyma* growth and carotenoid production in shake-flask cultures // *Biochem. Eng. J.* 2006. Vol. 27. P. 331–335.
2. Amaral P.F.F., Freire M.G., Leao M.H.M.R., Marrucho I.M., Coutinho J.A.P., Coelho M.A.Z. Optimization of oxygen mass transfer in a multiphase bioreactor with Perfluorodecalin as a second liquid phase // *Biotechnol. Bioeng.* 2008. Vol. 99. P. 588–598.
3. Karimi A., Golbabaee F., Neghab M., Mehrnia M.R., Mohammad K., Pourmand M.R., Nikpey A. Investigation of oxygen transfer in a two-phase partition stirred tank bioreactor in the presence of silicone oil // *Chem. Biochem. Eng. Q.* 2011. Vol. 25. P. 209–219.

4. **Li T., Grace J., Shadle L., Guenther C.** On the superficial gas velocity in deep gas–solids fluidized beds // *Chem. Eng. Sci.* 2011. Vol. 66. P. 5735–5738.
5. **Meng F., Liu X.** Parametric effects of superficial gas velocity and cluster internal voidage on the penetrating flow through clusters // *Powder Technol.* 2012. Vol. 224. P. 404.
6. **Deng R., Liu H., Wei F.** Axial flow structure at the varying superficial gas velocity in a downer reactor // *Chem. Eng. J.* 2004. Vol. 99. P. 5–15.
7. **Bakker A.** A new gas dispersion impeller with vertically asymmetric blades // *The Online CFM Book.* 2000 (available at <http://www.bakker.org/cfm>).
8. **Alam M.N.H.Z., Razali F.** Scale-up of stirred and aerated bioengineering™ bioreactor based on constant mass transfer coefficient // *J. Teknologi.* 2005. Vol. 43, No. F. P. 95–110.
9. **Albaek M.O., Germaey K.V., Stocks S.M.** Gassed and ungassed power draw in a pilot scale 550 litre fermentor retrofitted with up-pumping hydrofoil B2 impellers in media of different viscosity and with very high power draw // *Chem. Eng. Sci.* 2008. Vol. 63. P. 5813–5820.
10. **Ahmed S.U., Ranganathan P., Pandey A., Sivaraman S.** Computational fluid dynamics modeling of gas dispersion in multi impeller bioreactor // *J Biosci. Bioeng.* 2010. Vol. 109, No. 6. P. 588–597.
11. **Nienow A.W., Bujalski W.** The versatility of up-pumping hydrofoil agitators // *Chem. Eng. Res. Des.* 2004. Vol. 82. P. 1073–1081.
12. **Gimbun J., Rielly C.D., Nagy Z.K.** Modelling of mass transfer in gas-liquid stirred tanks agitated by Rushton turbine and CD-6 impeller: A scale-up study // *Chem. Eng. Res. Des.* 2009. Vol. 87. P. 437–451.
13. **Kerdouss F., Bannari A., Proulx P., Bannari R., Szerga M., Labrecque Y.** Two-phase mass transfer coefficient prediction in stirred vessel with a CFD model // *Comp. Chem. Eng.* 2008. Vol. 32. P. 1943–1955
14. **Elqotbi M., Vlaev S.D., Montastruc L., Nikov I.** CFD modelling of two-phase stirred bioreaction systems by segregated solution of the Euler-Euler model // *Comp. Chem. Eng.* 2013. Vol. 48. P. 113–120.
15. **Drew D.A.** Mathematical modeling of two-phase flow // *In: Annu. Rev. Fluid Mech.* 1983. Vol. 15. P. 261–291.
16. **Нигматулин Р.И.** Динамика многофазных сред: в 2 ч. М.: Наука, 1987. 464 с. и 359 с.
17. **Crowe C.T., Sommerfeld M., Tsuji T.** *Fundamentals of gas-particle and gas-droplet flows.* CRC Press, Boca Raton, Florida, USA, 1998.
18. **Ishi M., Hibiki T.** *Thermo-fluid dynamics of two-phase flow.* 2nd. ed. New York: Springer, 2011. 535 p.
19. **Khopkar A.R., Kasat G.R., Pandit A.B., Ranade V.** CFD simulation of mixing in tall gas-liquid stirred vessel: Role of local flow patterns // *Chem. Eng. Sci.* 2006. Vol. 61. P. 2921–2929.
20. **Montante G., Paglianti A., Magelli F.** Experimental analysis and computational modelling of gas-liquid stirred vessels // *Chem. Eng. Res. Des.* 2007. Vol. 85, No. A5. P. 647–653.
21. **Politano M.S., Carrica P.M., Conerit J.** A model for turbulent polydisperse two-phase flow in vertical channel // *Int. J. Multiphase Flow.* 2003. Vol. 29. P. 1153–1182.
22. **Зайчик Л.И., Скибин А.П., Соловьев С.Л.** Моделирование распределения пузырьков в турбулентной жидкости на основе диффузионно-инерционной модели // *Теплофизика высоких температур.* 2004. Т. 42, № 1. С. 111–117.
23. **Kashinsky O.N., Lobanov P.D., Pakhomov M.A., Randin V.V., Terekhov V.I.** Experimental and numerical study of downward bubbly flow in a pipe // *Int. J. Heat Mass Transfer.* 2006. Vol. 49. P. 3717–3727.
24. **Cheung C.P., Yeoh G.H., Tu J.Y.** On the modeling of population balance in isothermal vertical bubbly flows- Average bubble number density approach // *Chem. Eng. Process.* 2007. Vol. 46. P. 742–56.
25. **Rzehak R., Krepper E.** CFD modeling of bubble-induced turbulence // *Int. J. Multiphase Flow.* 2013. Vol. 55. P. 138–155.
26. **Ranade V.V.** *Computational flow modeling for chemical reactor engineering* // A Harcourt Sci. and Technology Company. USA. California: Academic Press, 2002. 452 p.
27. **Kerdouss F., Bannari A., Proulx P.** CFD modelling of gas dispersion and bubble size in a double turbine stirred tank // *Chem. Eng. Sci.* 2006. Vol. 61. P. 3313–3322.
28. **Hanafizadeh P., Sina K.M., Behdad S.E., Ghanbarzadeh S.** Drag coefficient and strouhal number analysis of cylindrical tube in two phase flow // *J. Energy Equipment and Systems.* 2013. Vol. 1, No. 1. P. 34–57.
29. **Xu L., Yuan B., Ni H., Chen C.** Numerical simulation of bubble column flows in churn-turbulent regime: Comparison of bubble size models // *Ind. Eng. Chem. Res.* 2013. Vol. 52. P. 6794–6802.
30. **Elgobashi S.E., Rizk M.A.** A two-equation turbulence model for dispersed dilute confined two-phase flows // *Int. J. Multiphase Flow.* 1989. Vol. 15. P. 119–133.
31. **Fluent 6.3.** *User's Guide,* 2006.
32. **Simonin C., Viollet P.L.** Predictions of an oxygen droplet pulverization in a compressible subsonic coflowing hydrogen flow // *Numerical Methods for Multiphase Flows.* ASME FED. 1990. Vol. 91. P. 65–82.
33. **Khopkar A.R., Aubin J., Xureb C., Le Sauze N., Bertrand J., Ranade V.V.** Gas-liquid flow generated by a pitched blade turbine: PIV measurements and CFD simulations // *Ind. Eng. Chem. Res.* 2003. Vol. 42. P. 5318–5332.
34. **Lane G.L., Schwarz M.P., Evans G.M.** Modelling of the interaction between gas and liquid in stirred vessels // 10th European Conf. on Mixing, Delft, The Netherlands, 2000. P. 197–204.
35. **Pan Y., Dudukovic M.P., Chang M.** Dynamic simulation of bubbly flow in bubble columns // *Chem. Eng. Sci.* 1999. Vol. 54. P. 2481–2489.

36. **Pan Y., Dudukovic M.P., Chang M.** Numerical investigation of gas-driven flow in 2-D bubble columns // A.I.Ch.E. J. 2000. Vol. 46. P. 434–449.
37. **Pan Y., Dudukovic M.P.** CFD simulation of a bubble column-2D versus 3D // 6th World Congress of Chemical Engng, Melbourne, Australia, 2001.
38. **Sanyal J., Vasquez S., Roy S., Dudukovic M.P.** Numerical simulation of gas-liquid dynamics in cylindrical bubble column reactors // Chem. Eng. Sci. 1999. Vol. 54. P. 5071–5083.
39. **Aubin J., Le Sauze N., Bertrand J., Fletcher D.F., Xureb C.** PIV measurements of flow in an aerated tank stirred by a down- and an up pumping axial flow impeller // Exp Therm. Fluid Sci. 2004. Vol. 28. P. 447–456.
40. **Ranganathan P., Sivaraman S.** Investigations on hydrodynamics and mass transfer in gas-liquid stirred reactor using computational fluid dynamics // Chem. Eng. Sci. 2011. Vol. 66. P. 3108–3124.
41. **Buffo A., Vanni M., Marchisio D.L.** Multidimensional population balance model for the simulation of turbulent gas-liquid systems in stirred tank reactors // Chem. Eng. Sci. 2012. Vol. 70. P. 31–44.
42. **Bakker A., Van Den Akker H.E.A.** A computational model for the gas-liquid flow in stirred reactors // Trans. IChemE. 1994. Vol. 72. P. 594–606.
43. **Ishii M., Zuber N.** Drag coefficient and relative velocity in bubbly, droplet or particulate flows // AIChE J. 1979. Vol. 25. P. 843–855.
44. **Clift R., Grace J.R., Weber M.E.** Bubbles, Drops and Particles. New York: Academic Press. 1978, 380 p.
45. **Danckwerts P.V.** Significance of liquid-film coefficients in gas absorption // Ind. Eng. Chem. 1951. Vol. 43. P. 1460–1467.
46. **Lamont J.C., Scott D.S.** An eddy cell model of mass transfer into the surface of a turbulent liquid // AIChE J. 1970. Vol. 16. P. 513–519.
47. **Zadghaffari R., Moghaddas J.S., Revstedt J.** Large eddy simulation of turbulent flow in a stirred tank driven by a Rushton turbine // Comp. Fluids. 2010. Vol. 39. P. 1183–1190.
48. **Taghavi M., Zadghaffari R., Moghaddas J., Moghaddas Y.** Experimental and CFD investigation of power consumption in a dual Rushton turbine stirred tank // Chem. Eng. Res. Des. 2011. Vol. 89. P. 280–290.
49. **Khopkar A.R., Tanguy P.A.** CFD simulation of gas-liquid flows in stirred vessel equipped with dual Rushton turbines: influence of parallel, merging and diverging flow configurations // Chem. Eng. Sci. 2008. Vol. 61. P. 3810–3820.
50. **Deglon D.A., Meyer C.J.** CFD modelling of stirred tanks: numerical considerations // Miner. Eng. 2006. Vol. 19. P. 1059–1068.
51. **Gracia-Ochoa F.G., Gomez E.E.** Bioreactor scale-up and oxygen transfer rate in microbial processes: an overview // Biotechnol. Adv. 2009. Vol. 27. P. 153–176.
52. **Lehner P., Wirth K.E.** Characterization of the flow pattern in a downer reactor // Chem. Eng. Sci. 1999. Vol. 54. P. 5471–5483.

*Статья поступила в редакцию 28 июня 2013 г.,
после доработки — 5 августа 2013 г.*