

Computational Fluid Dynamics

- en genvej til procesindsigt

I artiklen gives der tre konkrete eksempler på, hvordan CFD kan bruges til at opnå procesindsigt på nuværende anlæg og på processer i udviklingsfasen.

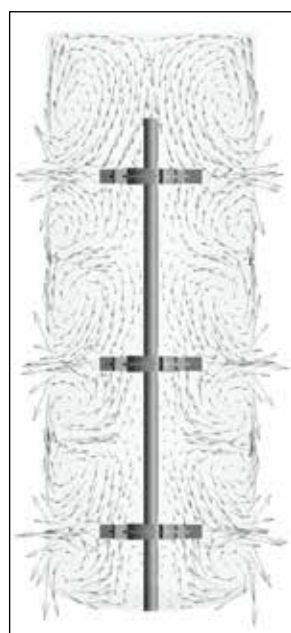
Af Christian Bach¹, Robert Spann¹, Hilde Larsson¹, Inês Rosinha¹, Mads Orla Albæk², Krist V. Gernaey¹ og Ulrich Krühne¹

¹ DTU Kemiteknik

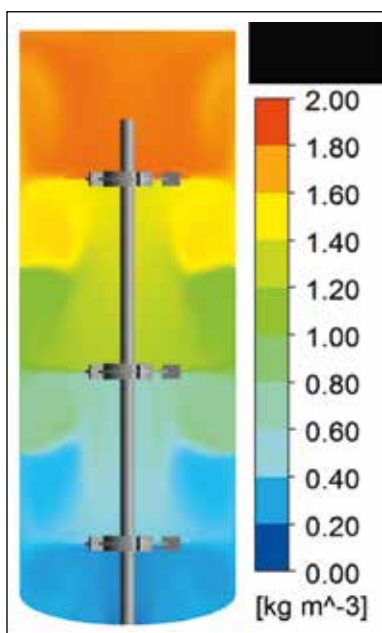
² Novozymes A/S

Bedre forståelse for dynamikken i kemitekniske processer er nøglen til at forkorte udviklingstiden af nye processer og forbedre produktivitet af eksisterende anlæg. Procesindsigt er klassisk set opnået gennem forsøgskampagner, hvor forskellige parametre er varieret og deres effekt på procesydeevnen målt. Den klassiske tilgang er fordelagtig, da troværdigheden af den opnåede procesforståelse er stor og bredt accepteret. Det er dog også begrænset viden, der opnås ved sådanne målinger, og selve forsøgskampagnerne kan være dyre at udføre eller i nogle tilfælde umulige, som f.eks. ved store produktionsanlæg.

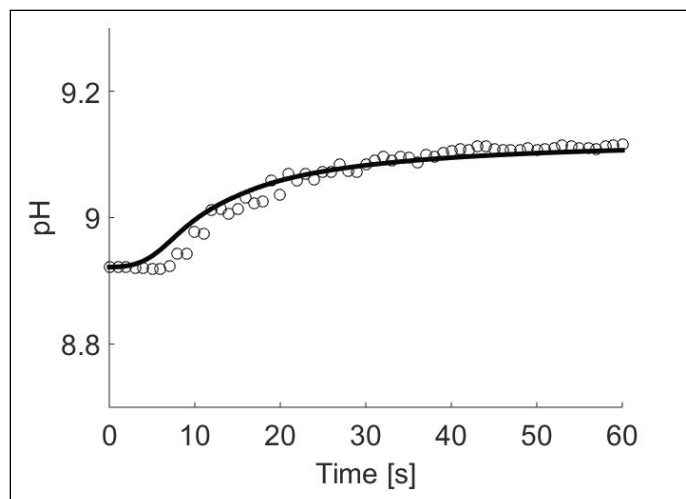
Computational Fluid Dynamics (CFD) tilbyder derimod deterministisk modellering af disse processer uden behov for dyre og tidskrævende forsøgskampagner. Den opnåede viden er



Figur 1. Strømningsvektorer for væsken i en 1000 L bioreaktor.



Figur 2. Sporstofkoncentration efter 20 sekunder som følge af en pulsdosering i toppen af reaktoren.



Figur 3. pH-profil efter en basepuls i toppen af bioreaktoren. Målt data (o) og CFD-forudsigtelse (-) ved en måleposition mellem de to nederste omrørere.

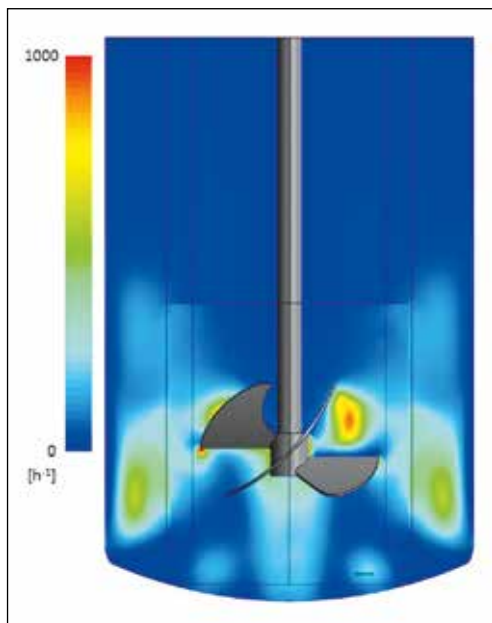
tilgængelig i hele processen og ikke kun i det enkelte målepunkt, hvilket giver en naturlig helhedsforståelse.

Blanding og massetransport i en bioreaktor

Opblanding i omrørte bioreaktorer har opnået stor forskningsinteresse, da produktiviteten af de biologiske processer er stærkt afhængige af, hvor god opblandingen i reaktoren er. Dette skyldes, at substrater bliver tilført reaktoren kontinuert gennem processen og for at opnå højst produktivitet, skal disse substrater homogeniseres hurtigst muligt. Eftersom CFD-modeller kan simulere de fænomener, der foregår under blandingprocessen, er dette værktøj ideelt til at forbedre indsigt og forudsigelserne omkring blanding.

Store industrielle bioreaktorer, i størrelsesordenen af 100 m³, benytter normalt flere omrørere for at opnå tilstrækkelig opblanding af substrater. Alt efter hvilken konfiguration af omrørere der benyttes, vil strømningsskemaet i reaktoren ændre sig.

En bioreaktor hos Chr. Hansen med et volumen på 1.000 L og tre Rushton-turbiner er blevet undersøgt både eksperimentelt og med CFD-simuleringer. Strømningsskemaet, opnået ved hjælp af CFD-simuleringerne, viser seks karakteristiske recirkuleringsløkker, hvilket ses i figur 1. Recirkulationsløkkerne dannes både over og under hver omrører, hvilket resulterer i

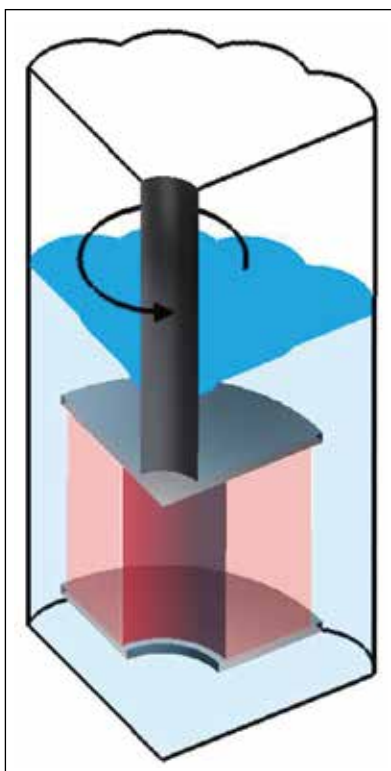


Figur 4. Masseoverførselskoefficient, $k_L a$, i en omrørt 550 liter pilot fermentor.

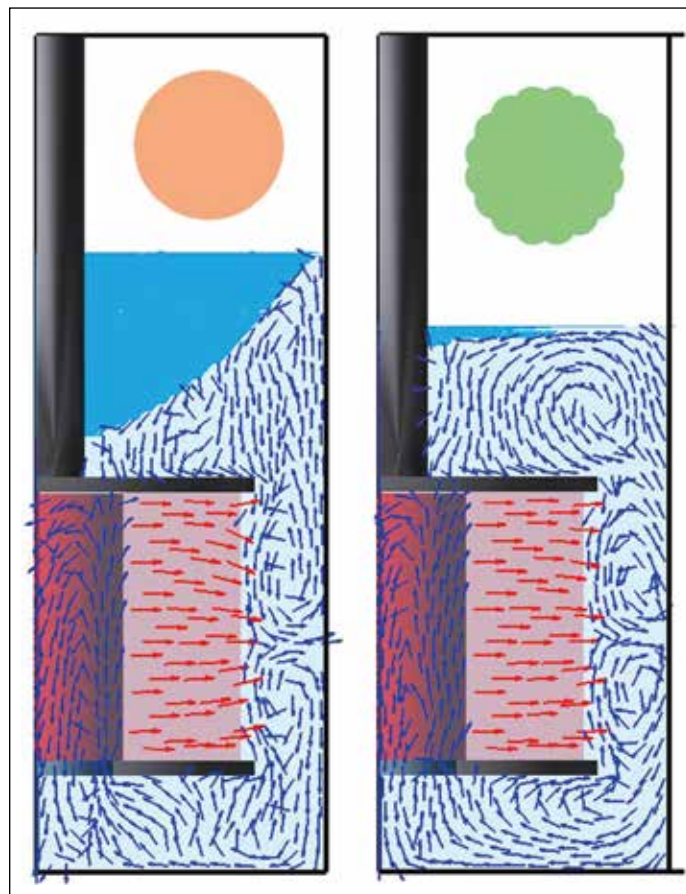
god opblanding omkring den individuelle omrører, men væskestrømningen mellem omrørerne er begrænset. Dette tydeliggøres ved simulering af tilførsel af et sporstof i reaktorens top, hvilket kræver mere end 30 sekunder for at blive homogent blandet. Figur 2 viser denne tydelige kompartmentalisering efter 20 sekunders opblanding af sporstofpuls, hvor der er klar mangel på vertikal blanding. Generelt er det muligt at forudsige blandetiden i bioreaktoren vha. CFD, hvilket er et mål for, hvor hurtigt en opløsning bliver homogeniseret i reaktoren. Eksperimentel validering af disse simuleringer blev foretaget ved tilførsel af en basepuls til bioreaktoren, hvorefter pH blev målt kontinuerligt og sammenlignet med CFD-simuleringen. Dette ses i figur 3.

En anden essentiel parameter ved forskning i bioreaktorer er massetransport fra gas til væske, hvilket skyldes et behov for ilt til processen, som leveres gennem lufttilførsel. Ilttilførsel kan i nogle tilfælde være hastighedsbestemmende i processen og kvantificeres som koefficienten $k_L a$.

I samarbejde med Novozymes A/S blev iltoverførsel i en 500 L pilot fermentor undersøgt ved brug af CFD, og det var muligt at bestemme den lokale masseoverførselskoefficient $k_L a$. I figur 4 ses et tværsnit af reaktoren, hvor $k_L a$ er plottet, og det er tydeligt, at der overføres mest ilt i bunden af fermentoren.



Figur 5. Den undersøgte RBR placeret i en glasbeholder med blomsterformet væg. Væskevolumenet er omtrent 160 ml.



Figur 6. Strømningslinjerne i væskefasen (blå) og i det porøse katalysatormateriale (rød) i en tank henholdsvis med og uden blomsterformet væg. Reaktorprofilen set ovenfra er vist i grøn og orange over figuren.

Denne undersøgelse viser, at CFD er et brugbart værktøj til forudsigelse af væskestrømning og massetransport i bioreaktorer i pilot skala under industrielle betingelser. Den næste udfordring bliver at implementere kemiske reaktioner i sammenkobling med de udviklede CFD-modeller for at illustrere strømningens indflydelse på effektiviteten af reaktoren.

Reaktordesign af en Rotating Bed Reactor

Under udvikling af nye reaktorkonfigurationer er det vigtigt at kunne undersøge geometriske aspekter i reaktordesignet uden at skulle bygge prototyper. Denne opgave kan med fordel kombineres med CFD-simuleringer for at få indblik i eventuelle gevinster ved et givent design uden brug af prototyper. Udviklingen af reaktortværsnittet i en Rotating Bed Reactor (RBR) er et sådan tilfælde.

Retsch
Solutions in Milling & Sieving

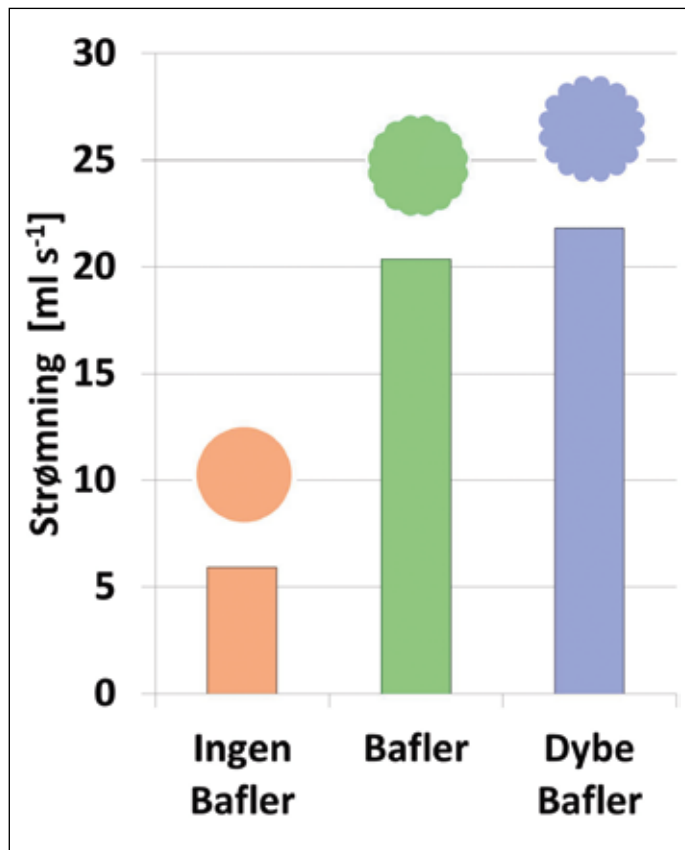
The revolution in ultra-fine grinding:
The new E_{max} achieves finer and faster grinding results than any other ball mill!

part of **VERDER** scientific

Kvinderupvej 30 · 3550 Slangerup · Tlf: 4738 1014 · www.retsch.dk

SKANLAB

NEW!



Figur 7. Strømningen gennem katalysatormaterialet ved forskellig vægudformning.

blev gennemført ved at flytte enzym fra ineffektive områder til områder, der blev identificeret som højt produktive. Optimeringsrutinen bevirkede derfor, at koncentrationen forskellige steder i reaktoren blev ændret, mens den totale mængde immobiliseret enzym blev holdt konstant.

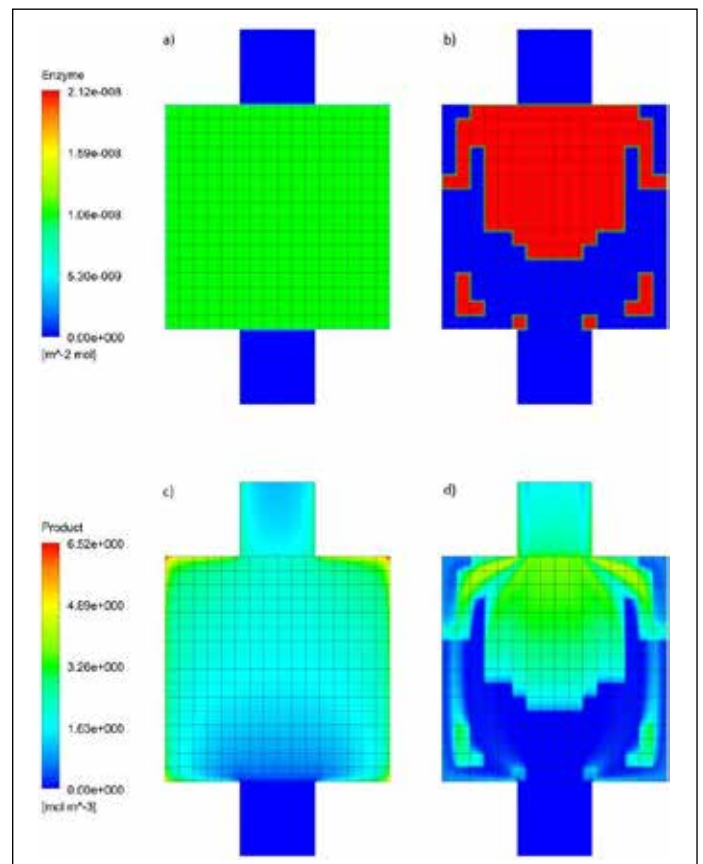
Det undersøgte mikroreaktorkammer er en kvadratisk kanal med følgende dimensioner: 30 mm bred, 30 mm lang og 0,25 mm høj. Enzymet blev immobiliseret på toppen og i bunden af den indre overflade i kammeret. Disse flader blev opdelt i små kvadratiske felter, som blev brugt til optimeringen. I udgangspunktet blev enzymet uniformt fordelt over begge overflader, som vist i figur 8a. Den uniforme fordeling ved starten og den endelige fordeling af enzym er vist i figur 8a og b, og de tilsvarende produktkoncentrationsprofiler er vist i figur 8c og d.

En RBR består af en roterende kurv, som pakkes med katalysatormateriale, som for eksempel ionbyttermateriale eller immobiliserede enzymer. Når kurven roterer, bliver væsken inde i det pakkede materiale accelereret mod væggen og ny væske suges ind fra bunden. Dette medfører en konstant strømning over katalysatormaterialet. Reaktionshastigheden er direkte påvirket af, hvor hurtigt væsken transporteres over katalysatormaterialet. En sådan RBR (SpinChem® S2, www.spinchem.com) blev simuleret ved hjælp af CFD for at undersøge effekten af udformningen af reaktorvæggen [1]. Et kvart udsnit af reaktoren, hvor kurven er placeret i en reaktor med blomsterformet væg, ses i figur 5, side 15. Denne blomsterform virker som preplader i reaktoren, og derved undgås dannelsen af en sugetragt.

Effekten af denne vægudformning blev undersøgt ved at simulere væskestrømningen i en reaktor med og uden denne vægudformning, som ses i figur 6, side 15. Det ses tydeligt fra hastighedsvektorerne i strømningsfeltet, at vægudformningen medvirker til en flad væskeflade og et øget flow igennem det porøse katalysatormateriale. Figur 7 viser gennemsnitsstrømningen gennem katalysatormaterialet ved forskellige udformninger af væggen i reaktoren, og der er en tydelig forøgelse af strømningen i kurven ved denne blomsterformede væg. Dette viser, hvordan CFD kan bruges tidligt i udviklingen af reaktordesign, når væskestrømningen har stor indvirkning på reaktionshastigheden.

Topologioptimering af en mikroreaktor

En tredje applikation af CFD er i kombination med optimeringsrutiner som f.eks. topologioptimering til forbedring af reaktordesign og lignende. Topologioptimering er ofte benyttet inden for udvikling af konstruktioner, og er karakteriseret ved fjernelse af unødigt materiale. I dette tilfælde blev topologioptimering benyttet sammen med CFD til at bestemme den optimale fordeling af immobiliseret enzym i en mikroreaktor ved hjælp af Evolutionary Structural Optimization (ESO) [2]. Dette



Figur 8. Enzymfordeling:
a) ved start og
b) efter optimeringsrutinen
c) den resulterende produktkoncentration ved start af optimeringen og
d) ved afslutning af optimeringen.

Den endelige fordeling er speciel i forhold til, at enzymet er fordelt i områder med lav opholdstid og i nærheden af udgangsstrømmen. En 14,5% forøgelse i produktivitet i forhold til den uniforme fordeling blev opnået ved hjælp af denne simple optimeringsrutine. Det opnåede mønster for enzymfordelingen er et resultat af et optimum for massetransport, lokal reaktionshastighed, substratkoncentration og strømningsforhold, hvilket ville have været utilgængeligt uden brug af CFD. Eksperimentelle data har eftervist, at fordelingen af det immobiliserede enzym i en sådan mikroreaktor har indflydelse på reaktorens ydeevne [3].

Topologioptimering som en del af reaktordesign tilbyder specialbyggede reaktorer, som er konfigureret efter det specifikke behov for en given reaktor, hvilket f.eks. kan øge produktiviteten af reaktoren ved samme mængde katalysator. Endvidere kan disse rutiner udføres, inden eksperimentelt arbejde påbegyndes, hvilket kan spare ressourcer til udvikling af prototyper og derved timer i laboratoriet.

Fremtid

Udviklingen og applikationer af CFD-modeller er støt stigende både i akademisk og industriel sammenhæng, hvilket kan relateres til en forøget brugervenlighed og kommercialisering af softwaren bag CFD-modellerne. Det betyder, at man ikke behøver ekspertviden inden for fluiddynamik for at opnå en øget forståelse af dynamikken i aktuelle kemiske processer. Validering af resultater opnået med CFD-modeller forbliver en nødvendighed i mange sammenhænge, og særligt med henblik på at etablere troværdighed til simuleringresultaterne.

Potentialet for CFD i kemitekniske sammenhænge er fortsat enormt, og det vil uden tvivl forblive et værdifuldt værktøj til fremtidig procesudvikling og procesoptimering.

Forskningen præsenteret i denne artikel er støttet af Innovationsfonden gennem det strategiske forskningscenter BIOPRO2 (sagsnr. 4105-00020B), BIOINTENSE (sagsnr. 312148), BIORAPID (sagsnr. 643056) og Novo Nordisk fonden (sagsnr. 12OC0000819)

E-mail:
Christian Bach: chrba@kt.dtu.dk

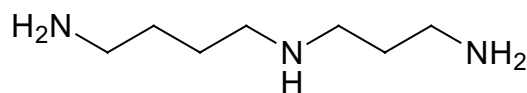
Referencer

1. H.K. Larsson, Modelling of Mass Transfer Phenomena in Chemical and Biochemical Reactor Systems Using Computational Fluid Dynamics, Danmarks Tekniske Universitet (DTU), 2015.
2. Y.M. Xie, G.P. Steven, A simple evolutionary procedure for structural optimisation, *Comput. Struct.* 49 (1993) 885–896.
3. C. Hoffmann, I. Rosinha, J. Thrane, N. Garg, K. Gernaey, M. Pinelo, et al., Area selective surface activation of OSTE+ microfluidic reactors for directed enzyme immobilization and its impact on the reactor performance, *ACS Appl. Mater. Interfaces.* (2016).



Nyt om At stille det biologiske ur

Når man bliver ældre, kommer det biologiske ur ofte ud af takt med det normale 24-timers døgn. Det hænger formentlig sammen med fødens sammensætning og stofskiftet. Nogle forskere mener, at man måske kan regulere denne disharmoni ved et kosttilskud.



SPERMIDIN

Israelske forskere har nu vist, at hos gamle mus kan et tilskud af spermidin, *N*-(3-aminopropyl)butan-1,4-diamin i kosten stille uret. Spermidin findes i soyabønner, grønne ærter, blå oste – og i sæd.

Carl Th.

Circadian Clock Control by Polyamine Levels through a Mechanism that Declines with Age, *Cell Metabolism* 22, November 2015, DOI: 10.1016/j.cmet.2015.09.011

Pipettecenteret

Kalibrering og service af alle fabrikater pipetter.

Vi kalibrerer både ved indsendelse eller på kundens adresse.

Salg af pipetter og laboratorie varer.



Pipettecenteret
Skovkanten 41 · 4700 Næstved
Tlf. 55 73 62 05 · Mobil 30 33 32 49
Email: nielsindgaard@stofanet.dk
www.pipettecenteret.dk

