

Joanna KARCZ, Agnieszka RADUCKA

e-mail: joanna.karcz@zut.edu.pl

Instytut Inżynierii Chemicznej i Procesów Ochrony Środowiska, Wydział Technologii i Inżynierii Chemicznej,  
Zachodniopomorski Uniwersytet Technologiczny, Szczecin

## Numeryczne modelowanie pola prędkości płynu i stężenia nośnika w zawieszinie w bioreaktorze z mieszadłem

### Wstęp

Bioreaktory zbiornikowe z mieszadłem są często rekomendowane do prowadzenia procesów biochemicznych. Rolę katalizatorów w bioreaktorach zbiornikowych mogą pełnić immobilizowane enzymy (głównie poprzez kowalencyjne związanie z nośnikiem ciała stałego) zawieszane w cieczy. Unieruchomione enzymy mają wiele zalet, między innymi, zapewniają wielokrotność użycia, są bardziej stabilne w środowisku reakcyjnym oraz odporniejsze na czynniki zewnętrzne [1]. Jednak w reaktorze z mieszaniem mechanicznym występują naprężenia ścinające, dlatego ważną kwestią stanowi określenie odpowiednich częstości obrotów mieszadła (na tyle dużych, aby zawiesić cząstki biokatalizatora w mieszaninie reakcyjnej, ale na tyle małych, aby uniknąć uszkodzenia, a w konsekwencji dezaktywacji biokatalizatora).

Jakość wytworzonej zawiesiny oraz wartość optymalnych częstości obrotów mieszadła zależą od typu i wielkości mieszadła, wymiarów i konfiguracji zbiornika, gęstości i stężenia rozpraszanych cząstek ciała stałego oraz gęstości i lepkości cieczy [2].

Analizę przepływu cieczy i ciała stałego w bioreaktorze z mieszadłem można przeprowadzać, posługując się takim nowoczesnym narzędziem, jakim jest metoda CFD [3, 4]. Shan i wsp. [5] symulowali tą metodą przepływ płynu w układzie ciecz – ciało stałe w zbiorniku bez przegród wyposażonym w mieszadło turbinowe o łopatkach pochyłonych (PBT). Charakterystykę przepływu płynu w zbiorniku z przegradami zaopatrzonego w mieszadło PBT badali Kumaresan i wsp. [6] oraz Jaworski i Zakrzewska [7]. Ci autorzy porównali wyniki symulacji z danymi empirycznymi otrzymanymi metodą LDA. Stwierdzili, że stosując standardowy model burzliwości  $k - \epsilon$  uzyskuje się wyniki obliczeń zbliżone do danych doświadczalnych.

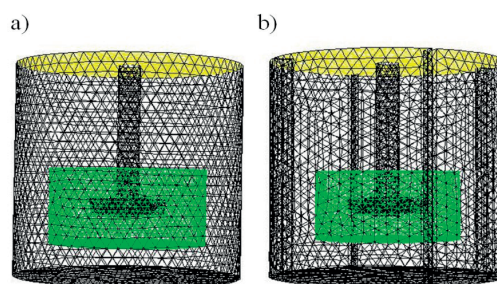
Badania przedstawione w tej pracy miały na celu określenie pola prędkości płynu i rozkładu stężenia nośnika biokatalizatora w zawieszinie wytwarzanej w bioreaktorze zaopatrzonym w mieszadło. W bioreaktorze przebiegał proces hydrolizy sacharozy w obecności enzymu (inwertazy), unieruchomionego kowalencyjnie na pumeksie.

### Zakres symulacji

Modelowanie numeryczne pola prędkości płynu i rozkładu stężenia nośnika w bioreaktorze zbiornikowym przeprowadzono za pomocą komercyjnego oprogramowania FLUENT 6.3.26. Symulacje zostały wykonane dla zbiornika o średnicy wewnętrznej  $D = 0,1$  m wyposażonego w mieszadło turbinowe o sześciu łopatkach pochyłonych pod kątem  $45^\circ$ . Kierunek obrotów mieszadła był taki, że następowało pompowanie płynu do dna zbiornika (PBT↓). Zbiornik był napełniony płynem do wysokości  $H = D$ . Mieszadło o średnicy  $d = 0,33D$  było umieszczone na wysokości  $h = 0,33 H$  licząc od płaskiego dna zbiornika. Testowano dwa zbiorniki bioreaktora: pierwszy z nich nie miał przegród ( $J = 0$ ), a drugi zbiornik był wyposażony w cztery płaskie przegradki ( $J = 4$ ) o szerokości  $B = 0,1D$ , rozmieszczone symetrycznie na wewnętrznej ścianie zbiornika.

Siatki numeryczne z układem wielokrotnego odniesienia MRF (*Moving Reference Frame*) wygenerowano przy użyciu modułu przygotowawczego *MixSim 2.0*. Za jego pomocą zdefiniowano geometrię i wymiary bioreaktora. Siatka numeryczna dla zbiornika bez przegród zawierała 210 tysięcy komórek obliczeniowych, a dla zbiornika z prze-

gradami – 157 tysięcy komórek. Siatki numeryczne dla obu analizowanych geometrii bioreaktora (zbiornik bez przegród lub z przegradami) ilustruje rys. 1. W obliczeniach realizowanych w programie Fluent 6.3.26 przyjęto standardowy model burzliwości  $k - \epsilon$  dla przepływu ustalonego w czasie i model wielofazowy *mixture*.



Rys. 1. Siatki numeryczne uzyskane dla zbiornika bez przegród (a) i zbiornika z przegradami (b)

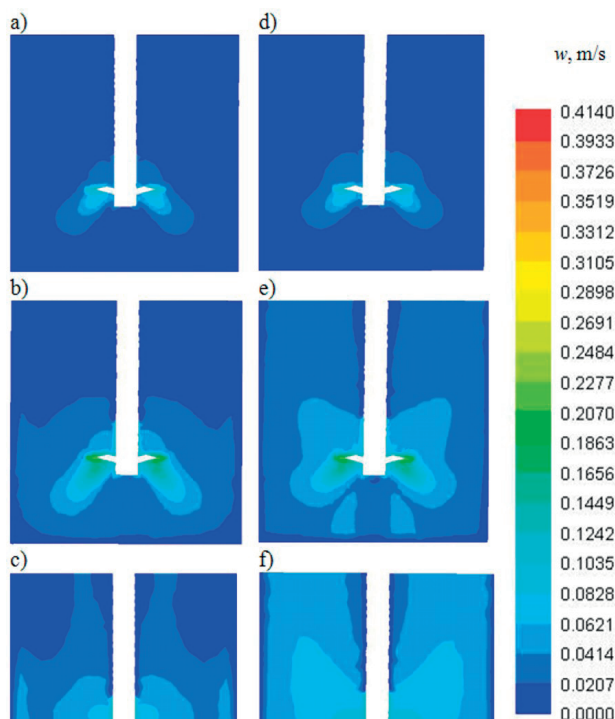
Analizowanym układem ciecz – ciało stałe była zawieszina kruszonego pumeksu w wodnym roztworze sacharozy o stężeniu  $0,05 \text{ mol/dm}^3$ . Udział objętościowy fazy stałej wynosił  $0,006 \text{ m}^3/\text{m}^3$ . Fazę ciągłą stanowił wodny roztwór sacharozy o gęstości  $\rho_c = 1006 \text{ kg/m}^3$  oraz lepkości  $\eta_c = 1,03 \text{ mPa}\cdot\text{s}$ , natomiast fazę rozproszoną – kruszony pumeks o średnicy zastępczej cząstek  $d_z = 143 \mu\text{m}$  i gęstości  $\rho_s = 2356 \text{ kg/m}^3$ . Symulacje przeprowadzono dla trzech częstości obrotów mieszadła  $n$  wynoszących  $1,33 \text{ s}^{-1}$ ,  $2,67 \text{ s}^{-1}$  lub  $4 \text{ s}^{-1}$ .

### Wyniki badań

Wyniki modelowania numerycznego zostały przedstawione na rys. 2 w postaci konturów prędkości przepływu zawiesiny oraz na rys. 3–6 w postaci rozkładów stężenia cząstek ciała stałego w cieczy.

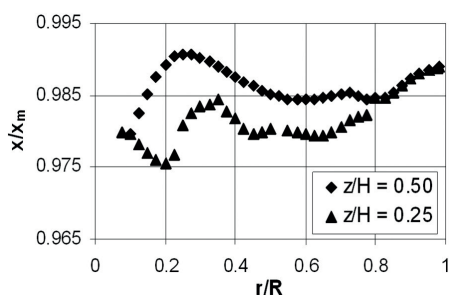
Kontury prędkości płynu na rys. 2 zostały zestawione w taki sposób, aby umożliwić porównanie profili przepływu dla tej samej częstości obrotów mieszadła w zbiorniku z przegradami i w zbiorniku bez przegród. W przypadku zbiornika oprzegrodowanego do analizy wybrano przekroje osiowe zbiorników, odzwierciedlające obraz w płaszczyźnie usytuowanej w połowie odległości między sąsiadującymi przegradami. Przy najmniejszej częstości obrotów mieszadła turbinowego o łopatkach pochyłonych (PBT↓), czyli  $1,33 \text{ 1/s}$ , strefa intensywnego mieszania płynu zlokalizowana jest w obszarze mieszadła. Tendencja ta występuje zarówno w zbiorniku z przegradami jak i bez przegród (Rys. 2a i 2d). Wraz ze wzrostem częstości obrotów mieszadła  $n$  strefa ta powiększa się (Rys. 2b i 2e) i obejmuje obszar nad i pod mieszadłem. Przy częstości obrotów wynoszącej  $n = 4 \text{ 1/s}$  mieszanie płynu jest najintensywniejsze (Rys. 2c i 2f). Z analizy rozkładów prędkości płynu przedstawionych na rys. 2 wynika, że kształt profili prędkości w zbiorniku bioreaktora zależy zarówno od intensywności mieszania, jak i obecności płaskich przegród w zbiorniku. Wraz ze wzrostem częstości obrotów mieszadła strefa o dużej intensywności mieszania zawiesiny w bioreaktorze znacząco powiększa się.

Bezwymiarowe profile stężenia cząstek ciała stałego  $x/x_m$  w wybranych płaszczyznach promieniowych dla założonych wartości bezwymiarowej współrzędnej osiowej  $z/H$  oraz częstości obrotów mieszadła

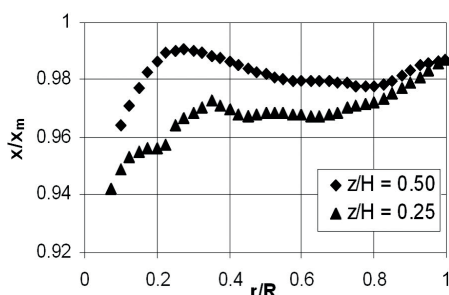


Rys. 2. Kontury prędkości przepływu zawiesiny w przekroju osiowym zbiornika przesuniętym o 45° względem płaszczyzny przegród (a, b, c) i zbiornika bez przegród (d, e, f) dla częstotliwości obrotów  $n$ : a, d) 1,33 1/s; b, e) 2,67 1/s; c, f) 4 1/s

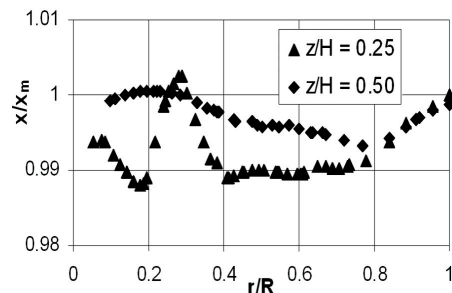
$n$  są przedstawione na rys. 3 i 4 dla zbiornika bez przegród oraz na rys. 5 i 6 dla zbiornika z przegradami. Na tych rysunkach wielkość  $x$  oznacza lokalną wartość stężenia cząstek ciała stałego,  $x_m$  – wartość średnią,  $r$ ,  $z$  – współrzędne promieniowa i osiowa, a  $R = D/2$ . Wartość bezwymiarowej współrzędnej osiowej  $z/H = 0,25$  odpowiada wysokości pod mieszadłem, a wartość  $z/H = 0,5$  charakteryzuje poziom nad mieszadłem. Z porównania wygenerowanych rozkładów stężenia kruszonego pumeksu w wodnym roztworze sacharozy wynika, że profile te są stosunkowo płaskie, a zależności  $x/x_m = f(r/R)$  przyjmują wartości



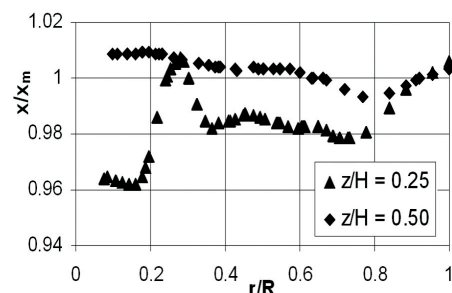
Rys. 3. Zależność  $x/x_m = f(r/R)$  dla częstotliwości obrotów mieszadła  $n = 1,33$  1/s w zbiorniku bez przegród



Rys. 4. Zależność  $x/x_m = f(r/R)$  dla częstotliwości obrotów mieszadła  $n = 2,67$  1/s w zbiorniku bez przegród



Rys. 5. Zależność  $x/x_m = f(r/R)$  dla częstotliwości obrotów mieszadła  $n = 1,33$  1/s w zbiorniku z przegradami



Rys. 6. Zależność  $x/x_m = f(r/R)$  dla częstotliwości obrotów mieszadła  $n = 2,67$  1/s w zbiorniku z przegradami

bliskie jedności, co świadczy o wyrównanych stężeniach w analizowanych obszarach. Na podstawie wyników modelowania numerycznego można przypuszczać, że przyjęty w symulacjach zakres częstotliwości obrotów mieszadła  $n$  jest odpowiedni do wytworzenia zawiesiny cząstek pumeksu o średnicy zastępczej 143  $\mu\text{m}$  i średnim stężeniu 0,05  $\text{mol}/\text{dm}^3$  w roztworze sacharozy. Ewentualny wybór bioreaktora bez przegród będzie skutkował mniejszym zapotrzebowaniem na moc mieszania.

## Podsumowanie

Na podstawie przeprowadzonych za pomocą oprogramowania FLUENT 6.3.26 symulacji numerycznych pola prędkości zawiesiny kruszonego pumeksu w roztworze sacharozy oceniono w zakresie przeprowadzonych obliczeń intensywność mieszania, charakter cyrkulacji zawiesiny oraz rozkład stężenia nośnika w bioreaktorze laboratoryjnym wyposażonym w przegrody (lub nie) oraz mieszadło turbinowe z sześcioma łopatkami pochylonymi pompujące płyn w kierunku dna zbiornika.

Na podstawie analizy rozkładów stężenia kruszonego pumeksu w cieczy w bioreaktorze zidentyfikowano strefy o różnym udziale objętościowym biokatalizatora i uzyskano informacje, umożliwiające lokalizację stref o najwyższej aktywności katalitycznej enzymu unieruchomionego na cząstce ciała stałego.

Wyniki modelowania numerycznego przynoszą dużo informacji bez konieczności wykonywania badań doświadczalnych, co jest bardzo korzystne w przypadku wrażliwego układu biochemicznego. Uzyskuje się w ten sposób oszczędność czasu i zmniejszenie kosztów prowadzenia procesu, a także rozeznanie w zakresie dalszego kierunku badań.

## LITERATURA

- [1] L. Cao: Carrier-bound immobilized enzymes. Principles, application and design, Wiley-VCH, Weinheim 2005.
- [2] J. Kamiński: Mieszanie układów wielofazowych. WNT, Warszawa 2004.
- [3] J.B. Joshi, S.B. Sawann, A.W. Patwardhan, D.J. Patil, S.S. Kshatriya, N.K. Nere: Chem. Eng. Sci. **56**, 443 (2001).
- [4] Z. Jaworski: Numeryczna mechanika płynów w inżynierii chemicznej i procesowej. Akademicka Oficyna Wydawnicza EXIT, Warszawa 2005.
- [5] X. Shan, G. Yu, Z.-S. Mao, W. Zhang: In. Eng. Chem. Res. **47**, 2926 (2008)
- [6] T. Kumaresan, N.K. Nere, J.B. Joshi: Ind. Eng. Chem. Res. **44**, 9951 (2005).
- [7] Z. Jaworski, B. Zakrzewska: Trans IChemE Part A, **80**, 846 (2002).