



**XXXII. Országos
Tudományos Diákköri
Konferencia**

2015



**Kevert berendezésekben használt keverő- és
terelőelemek szimulációs vizsgálata**

Készítette:

Till Zoltán

II. évf. vegyészmérnök MSc hallgató

Témavezetők:

Dr. Chován Tibor

Dr. Varga Tamás

Dr. Egedy Attila

Folyamatmérnöki Intézeti Tanszék
Vegyészmérnöki és Folyamatmérnöki Intézet
Mérnöki Kar

Pannon Egyetem

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés.....	1
2. Irodalmi rész.....	3
2.1. Kevert berendezések modellezése.....	3
2.1.1. Holtterek kialakulásának okai	3
2.1.2. Keverőelem hatása a keveredésre	9
2.1.3. Terelőlemezek hatása a keveredésre	15
2.1.4. Reológia	17
2.2. A hőmérséklet, mint üzemeltetési paraméter jelentősége	21
3. Gyakorlati rész	23
3.1. A vizsgált fermentorok bemutatása.....	23
3.2. Geometriai modellek.....	25
3.3. Impulzusmérleg megoldása.....	29
3.3.1. Kísérleti üzemi fermentorokban kialakuló áramlási képek vizsgálata.....	31
3.3.2. Üzemi fermentorokban kialakuló áramlási képek vizsgálata	36
4. Összefoglaló	43
Irodalomjegyzék.....	45
Mellékletek.....	47
Jelölések	50
Köszönetnyilvánítás	52

1. Bevezetés

A bioreaktorok olyan, egyre nagyobb jelentőségű vegyipari készülékek, melyek valamilyen biológiai folyamat, kontrolált körülmények közötti megvalósítására alkalmasak. A bioreaktorok közé sorolhatóak például az enzim reaktorok és a fermentorok, utóbbiakban élősejtek tenyésztése zajlik biomassza vagy valamilyen más termék előállítása céljából. A fermentorok felépítése változatos lehet, azonban gyakran alkalmazott kialakítás a keverős autokláv, mely főképp sokoldalú felhasználhatósága miatt vált elterjedtté.

A kevert üstreaktorok mind az anyagátadási, mind a méretnövelési összefüggések tekintetében elég részletesen ismert berendezések. A fermentorok kialakítása azonban több okból is eltér a vegyiparban megszokott reaktorok felépítésétől. Egyrészt az oxigénbevitel szempontjából kedvező a magasabb folyadékszint, ezért a fermentorok karcsú kialakításúak. A nagyobb magasság – átmérő arány több keverőelem használatát teszi szükségessé a berendezésben a megfelelő belső kevertség elérése érdekében. A fermentorban tenyésztett mikrobák szaporodása kis hőmérséklettartományban optimális, valamint érzékenyek a tápanyagok koncentrációjára is, ezért ezen berendezések esetén hatékony keverés megvalósítása szükséges. Nagyobb térfogatoknál a hőelvonás is problémát okozhat, mert a reaktorok térfogatának növekedésével a fajlagos falfelület csökken, így a hőátadó felület nagysága korlátozott. Emiatt a nagy térfogatú fermentorokban belső hőcserélő elemek elhelyezése szükséges, melyek egyben terelőelemként is funkcionálhatnak, ezzel is javítva a rendszer belső keveredését.

Munkám elsődleges célja az volt, hogy megvizsgáljam, hogyan hat a fermentorok ezen – viszonylag bonyolult – belső kialakítása a berendezések áramlási viszonyaira. A numerikus áramlástani (Computational Fluid Dynamics – CFD) modellek elterjedésével ezek a kérdések számítógépes szimuláció segítségével könnyebben megválaszolhatóak. A fermentor hidrodinamikai viselkedésének leírására alkalmas impulzusmérleg numerikus megoldása bonyolult feladat és sokszor egyszerűsítéseket igényel, de összességében a CFD megközelítés jól alkalmazható, hatékony megoldás különböző fermentor konstrukciók összehasonlítására. Konkrét esetekben megvizsgáltam, hogy a keverőelem alakja, vagy a terelőlemezek száma, állása miként hat a berendezés kevertségére, mely esetekben érdemes

merülőcsöves hőcserélővel segíteni a hőelvonást. A dolgozat keretein belül különböző geometriájú fermentorok összehasonlítását végeztem el az áramlási viszonyok alapján. További célunk a geometriai változtatások hatásának szisztematikus vizsgálata, mellyel a fermentor tervezését megkönnyítő információk lesznek elérhetőek.

2. Irodalmi rész

Három fő témakörre bontottam fel az összefoglalómat. A kevert berendezésekre vonatkozó részben a keverést, mint műveletet, a kevert tartályok jellegzetes áramlási viszonyait, valamint a berendezések tényleges áramlási képét befolyásoló tényezőket mutatom be. Ezután összefoglalom, hogy miként lehet ezekben a műveleti egységekben leírni a hőátadást dimenziómentes számok segítségével. A harmadik részben pedig előretételeként a hőmérséklet, mint üzemeltetési paraméter hatását mutatom be.

2.1. Kevert berendezések modellezése

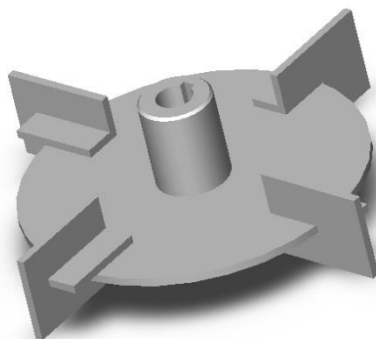
A kevert berendezések vizsgálatokor egyik fő feladat az áramlási kép meghatározása, ekképpen a jól kevert zónák és a holtterek feltérképezése. Az ezzel kapcsolatos irodalmi részben írok a keveredés mechanizmusáról, a holtterek kialakulásának okairól, a keverőelemek okozta jellegzetes áramlásokról, valamint arról, hogy miként hat a berendezés geometriája (keverőelemek, terelőelemek helyzete) a kialakuló áramlási képre.

A berendezés geometriáján kívül a kevert fázis tulajdonságai is befolyásolják a keveredést, ezért ebben a részben összefoglalom a fermentlevek jellegzetes reológiai tulajdonságait, valamint, hogy miképpen jelenik meg a folyási viselkedés a CFD modellezésben.

2.1.1. Holtterek kialakulásának okai

A jelen dolgozatban vizsgált egyfázisú bioreaktorok esetén a keverés elsődleges célja a koncentrációkiegyenlítés. A keveréssel létrehozott áramlás miatt, a különböző koncentrációjú fáziselemek koncentrációi kiegyenlítődnek. Ez a folyamat segíti elő a keverés további céljainak megvalósulását is, mint például a hőmérséklet kiegyenlítődése, vagy a konverzió növelése, a reakció lejátszódásának elősegítése. Bioreaktorok esetén ez a különböző tápoldat komponensek, szubsztrátok homogenizálását jelenti abból a célból, hogy a mikroba a bioreaktor minden pontján egyenletesen növekedhessen. Amennyiben a sejttömeg szabadon lebeg a folyadékban, akkor a keverés során a sejtkoncentráció is kiegyenlítődik.

A gyakorlati részben szereplő klasszikus kevert-levegőztetett fermentor esetén, a keverést a tartály központi részén a folyadékba benyúló forgó keverőszáron elhelyezett keverőelemek biztosítják. Leggyakrabban használt keverőelem típus a Rushton-turbina, melynek felépítését a 2.1. ábra szemlélteti. Elterjedt radiális keverő, általában négy vagy hat lapáttal szerelt.



2.1. ábra: Négylapátos Rushton keverőelem

A standard fermentor geometriai arányait a 2.2. ábra mutatja [1]. Amennyiben az ábrán jelölt H_L/D_T arány meghaladja az 1,0 értéket (ún. karcsú fermentorok), több keverőelem elhelyezése válik szükségessé a keverőszáron. Több keverőelem alkalmazása esetén azok kialakítása lehet egyforma, vagy különbözhetnek is egymástól. A biotechnológiában a karcsú kialakítás elterjedt 150 m^3 térfogatig [2]. A folyadékoszlop magasságával arányosan ugyanis javul az oxigénátadás hatásfoka a rendszerben a gáz- és folyadékfázis között [2]:

$$K_L a \approx \frac{H_L \rho D_{O_2}}{d V \mu} \quad (2.1)$$

Ahol:

$K_L a$: eredő folyadékoldali tömegátadási együttható [s^{-1}]

H_L : folyadékoszlop magassága [m]

ρ : fermentlé sűrűsége [kg m^{-3}]

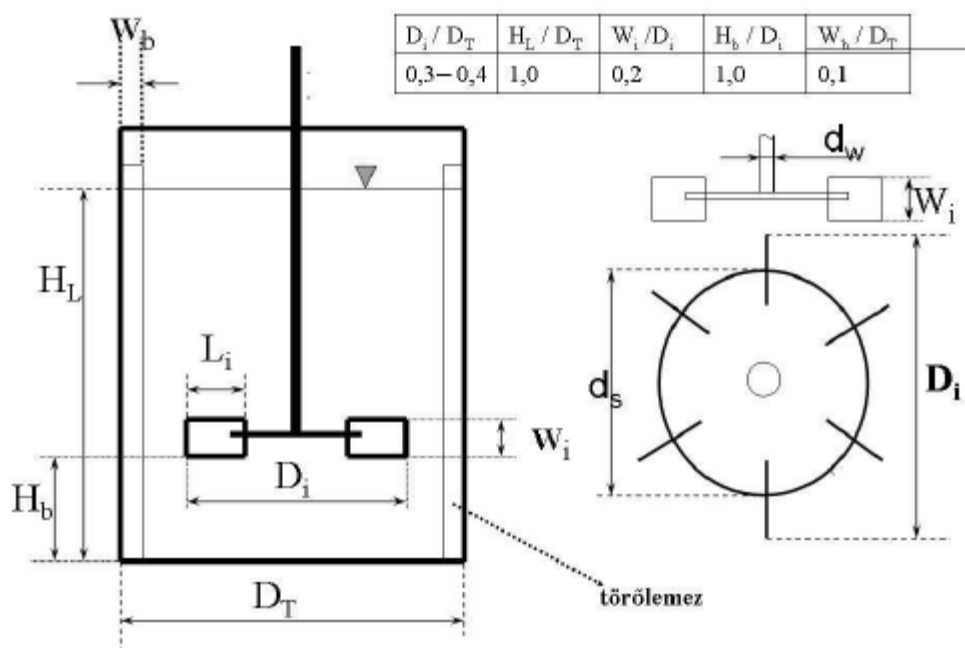
D_{O_2} : oxigén diffúziós együtthatója [$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$]

d : közepes buborékátmérő [m]

V : fermentlé térfogata [m^3]

μ : fermentlé viszkozitása [Pa s]

Vagyis a magasabb fermentorok alkalmazásával javítható az oxigénbevitel többlet energia befektetése nélkül. Mivel a levegőztetés energiaigényes folyamat, ezt a hatást célszerű kihasználni. Nagy levegőigényű (aerob) fermentáció megvalósítására nem elegendő, ezekhez valamilyen módon intenzifikálni kell a fázisok érintkeztetését, kevert tartály esetén például a megfelelő keverőelem kialakítással.



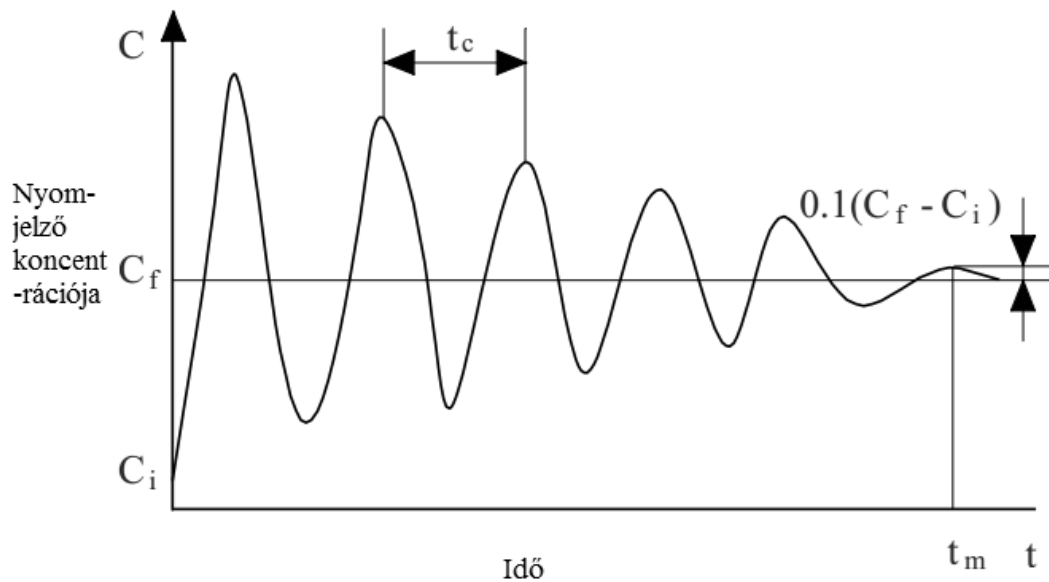
2.2. ábra: Standard fermentor geometriai arányai

A dolgozatban a keveréssel kapcsolatban feladat a jól kevert zónák és a holtterek feltérképezése. Ezzel kapcsolatban fontos definíció a keverési idő (t_M) fogalma: adott mértékű homogenitás eléréséhez szükséges idő. Általában az az elvárás, hogy a kevertség mérésére beinjektált nyomjelző anyag koncentrációja (c) ± 10 %-kal térjen el a stacioner koncentrációtól (2.3. ábra) [1, 2].

A keveredés mechanizmusa az alábbiakban foglalható össze:

- A keverőelem mozgása miatt konvekciós áramvonalak alakulnak ki. A jobb keveredés és átadás miatt célszerű turbulens áramlást kialakítani, ekkor nem szabályos áramvonalak, hanem örvényáramok jönnek létre.

- A nagyobb örvényáramok kisebb örvényáramok keletkezését indukálják a keverőtől távolabbi részekben. Ez a folyamat meggyorsítja a keveredést.
- Amennyiben valamely kialakult örvényáram mozgási energiája túl kicsi, akkor az az energia egészében hővé alakul. Emiatt alakulnak ki a folyadéktérben kvázi álló térfogatok, melyekben csak a diffúzió okoz keveredést. A folyamat meglehetősen lassú, de kis távolságokon elfogadható gyorsasággal megy végbe (30-100 μm mérettartományban a homogenizációs idő 1 s alacsony viszkozitású fluidumokban) [2].



2.3. ábra: Nyomjelző koncentrációjának alakulása a keverés során

Ezt kvantitatíve a makrohomogenizálásra vonatkozó 2.2 egyenlet és Kolmogorov turbulenciaelmélete (2.3. egyenlet) írja le [3]. A két egyenletet összevetve látható, hogy minél nagyobb a folyadékba bevitt energia, annál nagyobb a makrohomogenizálás mértéke (ε növekedésével csökken a diffúzió mérettartománya). A keverőelem átmérőjét, vagy a fordulatszámot növelve ε nő, de nő a keverés teljesítményigénye is. Ez pedig növeli az üzemeltetési költségeket.

$$\varepsilon = \frac{N}{V\rho} = Eu \cdot \frac{D_k^5 \cdot n^3}{V} \quad (2.2)$$

Ahol:

ε : egységnyi folyadéktömegben időegység alatt elnyelt energia [W kg⁻¹]

N : a keverő által a folyadékba időegység alatt bevitt energia [W]

Eu : dimenziómentes Euler-szám $\left(Eu = \frac{P}{\rho v^2}\right)$

D_k : keverőátmérő

n : keverő fordulatszáma

V : folyadéktérfogat

$$\Lambda = \left(\frac{v^3}{\varepsilon}\right)^{\frac{1}{4}} \quad (2.3)$$

Ahol:

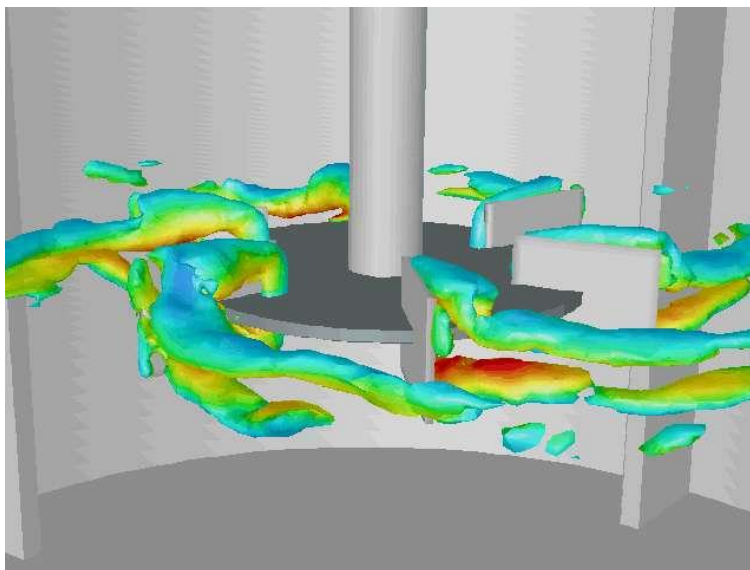
Λ : diffúzió mérettartománya [m]

v : közeg kinematikai viszkozitása [m² s⁻¹]

Lamináris áramlás esetén sem csak a szabályos konvekciós vonalak alakulhatnak ki. Az ekkor is lezajló rendezetlen keveredést a keverőelem elhaladása nyomán az áramlásban létrejövő zavarok okozzák. Ebben az esetben szabályos áramlási trajektóriák alakulnak ki, amik között anyagátadás csak diffúzióval lehetséges [4]. A lapát mentén azonban az áramlási sebesség iránya és nagysága is megváltozik, a folyadék a fal irányába mozdul el, hogy helyet adjon a keverőlapátnak.

Levegőbevitel esetén a cél az önként nem elegyedő folyadék- és gázfázis intenzív érintkeztetése. A minél nagyobb átadási felület érdekében sok kis buborékra kell bontani a belépő gázáramot, ebben a folyamatban pedig a keverés is szerepet játszik. A keverés elősegíti a buborékok egyenletes eloszlását is a folyadékfázisban. A keverőelem forgó mozgása miatt a folyadék torlódik a keverőlapát előtt, mögötte pedig ennek következtében lecsökken a nyomás. Ez okozza a folyadék áramlását. Levegőztetés esetén a keverő alá beáramoltatott levegő a keverőlapát mögé kerül. A buborékok képződéséért az ebben a csökkent nyomású térben kialakuló örvényáramok felelősek. Alacsonyabb levegőztetési sebesség esetén csavarörvények, nagyobb sebesség esetén lapörvények alakulnak ki, melyek

közös jellemzője, hogy tangenciális irányúak (2.4. ábra). A keverőlaptól távolodva a nyomás megnő és a levegőáram buborékokra szakad szét.



2.4. ábra: Rushton turbina mögött kialakuló örvények [5]

Sajnos a CFD modellezés nagy számításigénye még nem teszi célszerűvé a buborékképződés, –mozgás és aggregáció vizsgálatát. A levegős rendszerek CFD modellezése azonban számos problémára megoldást jelenthet. Szennyvíztisztítás esetén például a leghatékonyabb eljárások közé sorolható finom buborékos levegőztetésű eleveniszapos eljárások során a költségek 70 %-át is kiteheti a levegőztetés, aminek optimalizálásával jelentős megtakarításokat lehetne elérni. Ilyen modell már készült, de nem számolták buborékképződést és aggregációt, illetve a buborékok sem egyenként lettek modellezve [6].

Ideális esetben a fentebb említett keveredési mechanizmus tökéletes keveredéshez vezet. A gyakorlatban is a cél ezen állapot minél jobb megközelítése. Abban az esetben ugyanis, ha inhomogenitások alakulnak ki a tartályban, az nemkívánatos eredményre vezethet. Viszont, ha a szubsztrátkoncentráció túl nagy, az gátolhatja a sejt növekedését, amennyiben pedig a hőmérséklet magas, az a mikroorganizmus növekedését gátolja. A szubsztrátok elérhetősége a fermentor adott részében a metabolizmusra is hatással lehet, megváltoztatva ezzel a termékösszetételt [7, 8].

Amennyiben a közeg viszkozitása nagy, akkor a súrlódási veszteségek is megnőnek. Ez egyrészt nagyobb teljesítményű motor alkalmazását teszi szükségessé, másrészt számolni kell a folyadék melegedésével a keverőelem környezetében, ami attól függetlenül vezet inhomogenitáshoz, hogy a keverés hatékonysága nő. Fermentáció esetén a viszkozitás ráadásul változhat is, így még nagyobb az esélye annak, hogy a keverőelemtől távol holtterek alakuljanak ki.

Bioreaktorok esetén, főként fonalas gombák alkalmazásakor, a keverő fordulatszáma hatással van a morfológiára is. Erős kevertetés esetén kis szemcseméretű és rövid fonalas szerkezetű sejtömeg keletkezik. A fonalak rövidülésével a fermentálé feldolgozhatósága romlik, míg a hosszú fonalak azt eredményezik, hogy a bevitt levegő nehezen diszpergálódik a folyadékfázisban, lecsökkentve ezzel az oldott oxigén koncentrációt [9]. A fordulatszám és a lapátátmérő emiatt viszonylag szűkebb tartományban változtatható.

Léptéknövelés esetén a technológiát változatlan eredményekkel, de a termelés volumenét megnövelve, nagyobb méretű berendezésekkel kell kidolgozni. Ebben a problémát az jelenti, hogy a berendezés egyes jellemzői nem egyformán változnak a mérettel. Hőátadás szempontjából változatlan geometria mellett csökken a berendezés fajlagos hőátadási felülete. Keverés esetén a keverőtől távolabb lévő térfogatokat is át kell keverni. Ha azonban arányosan növeljük a keverőelem méretét, a keverés teljesítményszükséglete hatványozottan nő ($\varepsilon \sim d^5$).

Elterjedt különböző terelőlemezek beépítése a tartályba. Ezek megtörik a keverőelem által létrehozott cirkulációs áramokat, olyan irányba terelve a folyadékot, ami elősegíti a jobb keveredést.

2.1.2. Keverőelem hatása a keveredésre

A keverőelem feladata, hogy a motor által a folyadékba bevitt energiát a lehető leghatékonyabb módon a termékbe vigye és alkalmazásával a tartály kevertsége viszonylag rövid időn belül elérje a kívánt szintet. Régóta ismert, hogy a keverőelem geometriai kialakítása hatással van a keveredés mechanizmusára. Alapvetően két folyamat zajlik le az energiabevitelkor: a folyadéktömeg konvektív áramoltatása és nyíróerők ébredése, ami miatt

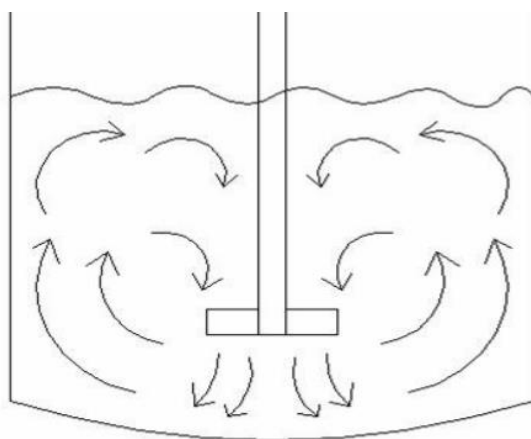
az egyes folyadékreszek eltérő sebességgel mozdulnak el és megtörténik a tényleges keveredés.

A léptéknövelés eredményeként a tartályok kevertsége változatlan geometria mellett romlik. Abban az esetben, ha a tartályt tökéletesen kevert egységként írjuk le, nem kapunk információt a modell alapján ennek okairól. Ennek az lett a következménye, hogy a léptéknövelés főként ökölszabályok alapján, jelentős kísérleti munka eredményeként történhetett meg. A CFD modellezés segítségével lehetőség van arra, hogy a geometriát és a kevertséget a modellben is összekapcsoljuk.

A keverőelemeket csoportosíthatjuk az alkalmazásukkor a tartályban kialakuló áramlási kép szerint. Három fő csoport különíthető el:

- axiális keverők;
- radiális keverők;
- vegyes áramlású keverők.

Az axiális áramlás a keverőszárral és a tank falával párhuzamos (2.5. ábra). Az ilyen áramlást létrehozó keverőelemek általános célú keveréshez, valamint szilárd-folyadék szuszpenzió készítéséhez jól felhasználhatóak. Ide tartozik például a propellerkeverő, mely erős axiális áramlást hoz létre, nagy folyadéktömegek átmozgatásához érdemes alkalmazni [10].

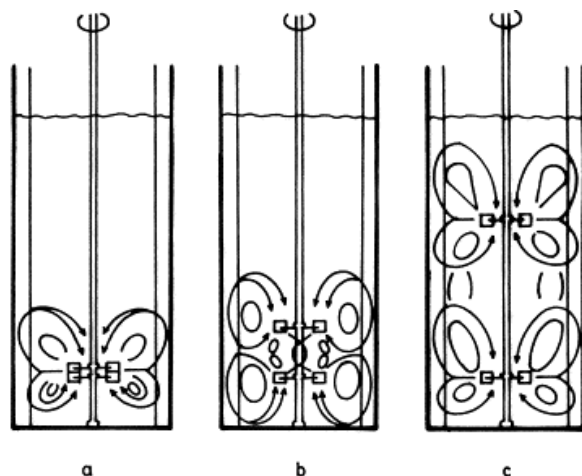


2.5. ábra: Axiális áramlási kép

Radiális keverők alkalmazása esetén a keverőelem mentén, alatta és fölötté is radiális kifelé irányuló áramlás indul meg, ami a tartály falához érve lefelé/felfelé indul, ezzel a

keverő alatt és fölött is visszakeveredést indukál. Ezt a jól ismert áramlási mintát már a korai CFD szimulátorokban is sikerült leképezni [11]. A visszakeveredés mértéke a keverőelemtől távolodva egyre kisebb, így bizonyos távolságon túl célszerű egy újabb keverőelem beépítése. A radiális keverőelemek alkalmazásakor megjelenő áramlási képet a 2.6. ábra szemlélteti.

Radiális keverők alkalmazása abban az esetben ajánlott, ha nagy nyíróerőkre van szükség a keveréshez, illetve elterjedtek gázeloszlatáshoz is, hiszen a felfelé áramló buborékok oldalirányú eltérítésével jobb fázisérintkeztetési hatékonyság érhető el. A nyírás ebből a szempontból nem számít, mivel a gázbuborékok aprózódása erre nem érzékeny. Emiatt axiális keverőket is lehet alkalmazni gázeloszlatáshoz, csak akkor a buborékok nem feltétlenül jutnak el a falig és a diszpergált levegő mennyisége is kevesebb lesz [12].



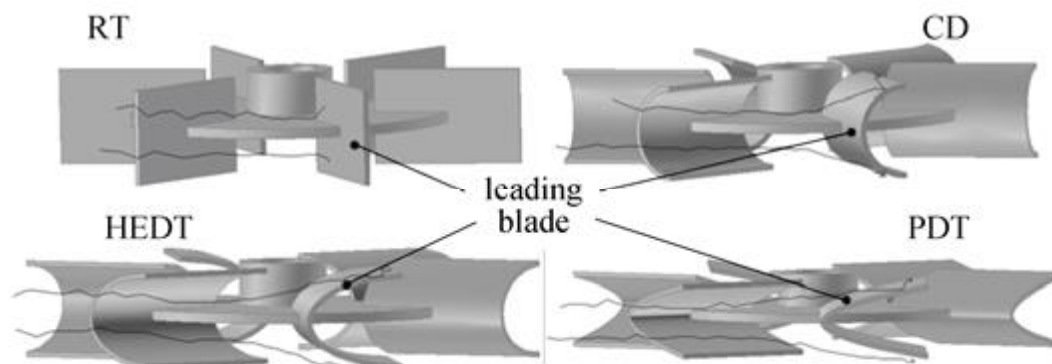
2.6. ábra: Radiális keverőelemek áramlási képe növekvő keverőelem távolság esetén

E két áramlási szélsőérték között található a vegyes vagy kevert áramlási kép. Az ilyen keverőelem alkalmazásával általában tölcserképződés figyelhető meg, ezért olyan esetekben alkalmazzák, amikor a folyadék fölötti térből kell beoldani valamit (porok bekeverése, felszíni levegőztetés). Szuszpendálásra korlátozottan alkalmasak, ugyanis a keverő alatti térben könnyen felgyülemlelenek a nem oldódó szilárd szemcsék.

Aerob ipari fermentációk esetén radiális keverőelemek alkalmazása indokolt. Sokáig ez egyedül Rushton-turbinák alkalmazását jelentette. A keverőelem lapátjai mögött kialakuló örvények elősegítik a turbulens keveredést. Hátrányuk, hogy az örvényáramok létrejöttéhez

nagy nyomaték szükséges, ami magasabb üzemeltetési költséggel jár együtt. Továbbá, mivel a gáz a lapátok mögött akumulálódik, majd onnan szakad le, a gázbevezetés nagy nyomatékesést indukál. Ma már elérhetőek olyan új, konkáv lapátos keverők, melyek tervezése során kiküszöbölték ezen hátrányokat, illetve sikerült az elárasztás nélkül diszpergálható gáz mennyiségét is növelni [12].

A keverőelemek áramlási képe három dimenzióban írható le pontosan. Ehhez nagy segítséget nyújt a CFD modellezés, főként nagy viszkozitású folyadékok keverése esetén, ahol az elterjedt mérési technikák csak korlátozottan alkalmazhatóak. Ha a lapát nem egyenes, hanem rendelkezik valamilyen görbülettel, kisebb és hosszabb örvények alakulnak ki (2.7. ábra), megnő a tartózkodási idő a lapát mögött, tehát azonos fordulatszám és közel azonos teljesítmény mellett jobb gázelosztás érhető el [13].



2.7. ábra: Hajlított keverőlapátok mögött kialakuló örvények

Ez a kialakítás elősegíti a jobb gázelosztást is. A kereskedelmi forgalomban is megjelentek hasonló keverőelemek, ilyen például az Ekato Phasejet® keverő (2.8. ábra), mely a Rushton-turbinához képest hatékonyabb gázelosztást, magasabb elárasztási gázsebességet, emellett alacsonyabb radiális irányú áramlási erőket biztosít, a bekevert energia nagysága levegőztetett és nem levegőztetett esetben nem sokkal különbözik [12].



2.8. ábra: Ekato Phasejet® keverőelem

Több keverőelem alkalmazásakor érdemes megvizsgálni, hogy azok egymáshoz képest való elhelyezése hogyan befolyásolja a keveredést a tartályban. Erre vonatkozóan a keverőelem gyártója is adhat meg ajánlásokat, illetve léteznek ökölszabályok a geometriai arányokra [14].

A keverőelemek távolságának megválasztása is fontos feladat. Ha túl nagy a távolság a keverőelemek között, akkor a gyenge axiális áramlás miatt az egyes keverőelemek környezetében elkülönülő zónák alakulhatnak ki. Az így létrejött zónák egymással nem is érintkeznek, így közöttük csak diffúzióval lehetséges az anyagtranszport. Ez azonban túl lassú a megfelelő homogenizáláshoz, ennek következtében pedig jelentős ingadozások lehetnek például a termékkoncentrációban. A 2.9. ábra Szalai és munkatársai szimulációs eredményeit mutatja, mely ezt a hatást szemlélteti [4]. A reaktor alsó felébe injektált kék, illetve felső részébe juttatott piros nyomjelző részecskék egymással elkeveredése csak nagyon lassan, a keverőszár mentén történik meg. Emellett azt is megállapították, hogy magas Reynolds-szám (2.4. egyenlet) esetén közvetlenül a keverőelem alatt és fölött viszonylag hosszú időtartamra alakulnak ki holtterek a gyors cirkulációs áramok miatt.

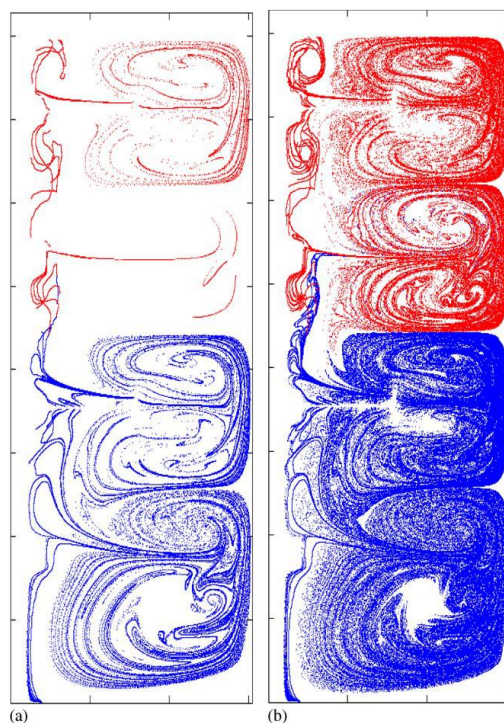
$$Re = \frac{Lv}{\nu} \quad (2.4)$$

Ahol:

L : jellemző méret [m]

v : áramlási sebesség [m s^{-1}]

ν : kinematikai viszkozitás [$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$]



2.9. ábra: Ekato Intermig[®] típusú keverővel kevert reaktor áramlási képe, (a) 20, (b) 40 fordulat után ($Re = 100$).

Ez a hatás többféleképpen is kiküszöbölhető. Ritkán alkalmazott megoldás a keverőszár aszimmetrikus elhelyezése, amely megakadályozza az áramlási kép állandósulását. Azonban, ha a szimmetrikus elhelyezés adott, a fordulatszám program szerinti változtatása is kellő mértékben változtatja az áramlási képet, elősegítve ezzel a jobb keveredést. Megoldást jelenthet a keverőelemek egymástól való távolságának csökkentése is, azonban ez jelentősen növelheti a keverés energiaigényét. Abban az esetben, ha csak a tank alján alakul ki elkülönülő zóna, elegendő lehet csak az alsó két keverőelem távolságának csökkentése. Ez a módosítás nem befolyásolja a konvekciót a felsőbb részeken és a teljesítményszükségletre is kisebb hatással van.

Másik kérdés lehet, hogy egyforma keverőelemeket egymáshoz képest milyen helyzetben szereljenek fel a szárra. Teljesen fedjék egymást, vagy valamilyen szöggel legyenek elforgatva egymáshoz képest? Egy hatlapátos Rushton-turbinánál ez a hatás nem számottevő, bizonyos keverőelemek esetén azonban érdemes megvizsgálni. Ekato Intermig[®] keverők vizsgálatakor Aubin és Xuereb azt tapasztalták, hogy ha a gyártó ajánlásától eltérően

nem 90°-kal, hanem 45°-kal forgatják el egymástól a keverőelemeket, nagyjából azonos teljesítményigény mellett kisebb Re-szám esetén is megfelelő keveredés érhető el [15].

2.1.3. Terelőlemezek hatása a keveredésre

A terelőlemezek elősegítik a jobb keveredést a tartályban, megakadályozzák a tölcserképződést, valamint egyenletesebbé teszik a keverő teljesítményfelvételét is. Nagyobb méretű tartályoknál a terelőelem sokszor plusz hőátadó felületként is funkcionál. A terelőlemezek nem megfelelő, vagy túl nagy számban elhelyezése azonban ahhoz vezethet, hogy elkülönülő terek alakulnak ki a reaktorban.

Lu és munkatársai lapos fenekű tartályban mérték 100 ml impulzusszerűen betáplált 40 tömeg %-os NaCl-oldat keverési idejét. A tartály átmérője 0,288 m volt, a téglalap alapú hasáb alakú terelőlemezek szorosan a falhoz illeszkedve helyezkedtek el a berendezésben. A keveredésre hatást gyakorolt különböző paramétereket egybevetve a következő közelítést alkalmazták a keverési idő számításához [16]:

$$N \cdot t_M = C \cdot n_b^p \cdot \left(\frac{D_t}{D}\right)^q \cdot \left(\frac{Q_g}{N \cdot D_{kev}^3}\right)^r \quad (2.5)$$

Ahol:

N : keverőelem fordulatszáma [s^{-1}]

t_M : keverési idő [s]

n_b : terelőlemezek száma

D_t : terelőlemez szélessége [m]

D : tartály átmérője [m]

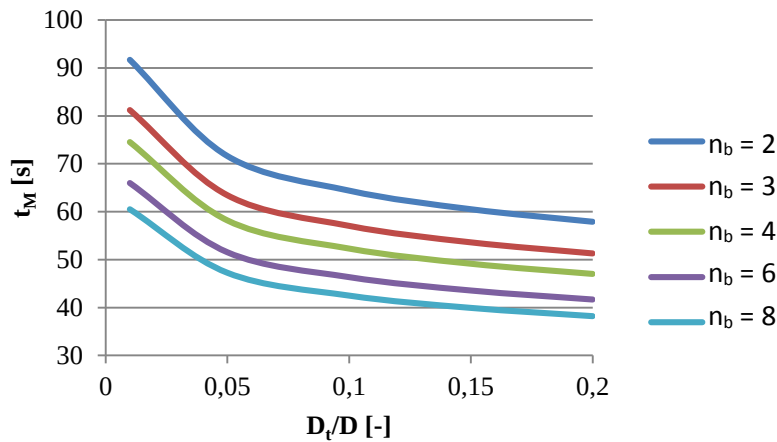
Q_g : levegőáram sebessége [$m^3 s^{-1}$]

D_{kev} : keverőelem átmérője [m]

C, p, q, r értékei a 2.1. táblázatban találhatóak.

2.1. táblázat: 2.4. egyenlet paraméterei

Rushton-turbinák száma	C	p	q	r
1	55,7	-0,3	-0,1535	0,0296
3	46,5	-0,295	-0,327	0,01



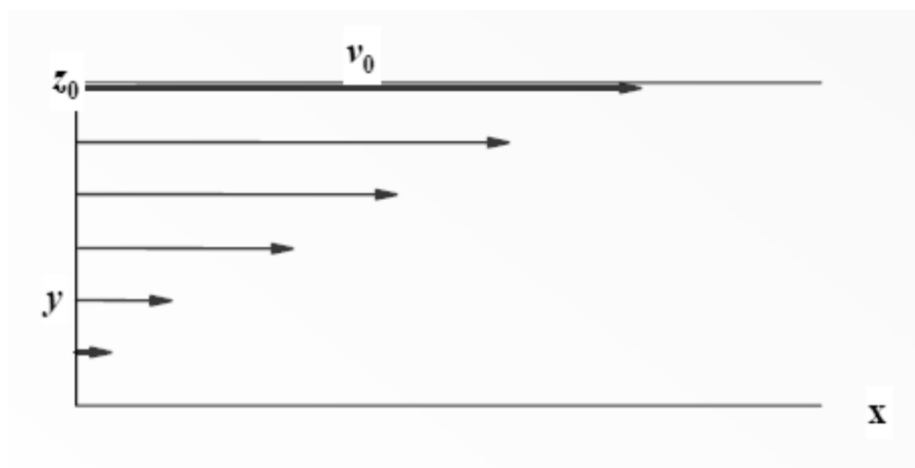
2.10. ábra: Terelőlemez szélességének hatása a keverési időre eltérő terelőelem szám (n_b) esetén, egy Rushton-turbina alkalmazása mellett

Adott fordulatszám mellett a terelőlemezek szélességének növekedésével a keverési idő minimumgörbe szerint változik, melynek leszálló ága közelíthető a 2.5. egyenlettel (2.10. ábra). Ezt a minimumot nehéz elérni, ha a terelőlemezek száma kevesebb, mint három. A keverés hatékonysága Lu és munkatársai szerint 0,25-ös szélesség/átmérő arány fölött kezd újra leromlani. A keverőelemek számának növelése szintén csökkenti a keverési időt, de $n_b > 8$ esetén egyre inkább elkülönülnek az áramlási zónák, ami inhomogenitáshoz vezet a rendszerben. Magasabb keverő fordulatszám esetén megfigyelték, hogy a terelőlemez szélességének hatása nagyobb a keverési időre, olyannyira, hogy annak növelésével geometriától függően nem is érhető el a görbe minimuma.

A terelőlemez hatása a keveredésre összetett folyamat. Azt is megfigyelték, hogy három keverőelem alkalmazásakor a hatások ugyan hasonlóak, de a keverési idő ugyanolyan tartály geometria mellett mindig nagyobb, mint egy keverőelem esetén, bizonyos esetekben akár kétszer akkora. Azaz több keverőelem alkalmazása több terelőlemez beépítését teheti szükségessé. Továbbá, egy keverőelem esetén a terelőlemezek száma, míg három keverőelem esetén azok szélessége volt inkább hatással a keveredési időre.

2.1.4. Reológia

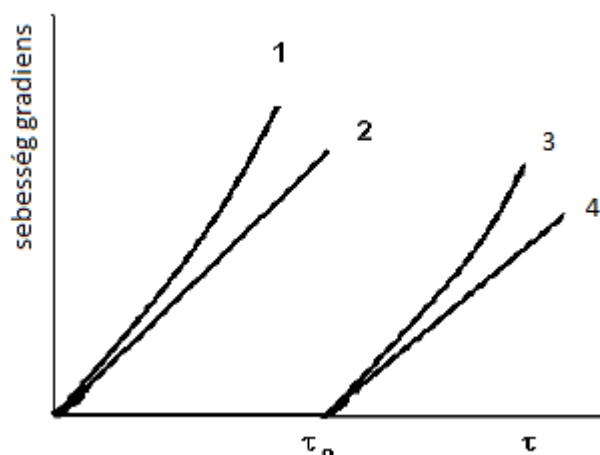
A reológia az anyagok folyását és deformációját tanulmányozza külső feszültségek (erők) hatására. Amennyiben egy folyadékot, vagy akár bizonyos szilárd anyagokat megfelelő külső erőhatás ér, részecskéi egymáson elmozdulnak, ennek következtében folyni kezd. A legegyszerűbb vízszerű folyadékok esetén úgy képzelhető el, hogy a külső nyíróerő hatására a folyadéklapok egymáson elmozdulnak és a nyírásra merőleges sebesség gradiens jön létre (2.11. ábra).



2.11. ábra: Vízszerű folyadékokban kialakuló sebesség gradiens [17]

Az aerob fermentációkban gyakran alkalmazott fonalgombák növekedésével nagy viszkozitású fermentlevek megfelelő keverésére van szükség, melyek reológiai szempontból a következő négy fő csoportba sorolhatóak be (2.12. ábra):

- newtoni fluidumok;
- pszeudoplasztikus fluidumok;
- Bingham-plasztikus fluidumok;
- Casson-plasztikus fluidumok.



2.12. ábra: fermentlevek tipikus folyási görbéi – 1: pszeudoplasztikus – 2: newtoni – 3: Casson-plasztikus – 4: Bingham-plasztikus folyadék

Vízszerű (newtoni) folyadékok esetén a sebesség gradiens és a nyíróerő nagysága között lineáris összefüggés van a 2.6. egyenlet szerint:

$$\tau = \mu \cdot \frac{d\gamma}{dt} \quad (2.6)$$

Ahol:

τ : nyírási feszültség [N m^{-2}]

μ : folyadék dinamikus viszkozitása [Pa s]

$\frac{d\gamma}{dt}$: nyírási síkra merőleges sebesség gradiens („shear rate”) [s^{-1}]

A viszkozitás tehát a külső áramlást előidéző hatással szembeni ellenállás mértékét fejezi ki. Az ideálisan viszkózus folyadékokon kívül sokféle más reológiai tulajdonságú anyag létezik. A pszeudoplasztikus (nyírásra vékonyodó) folyadékok viszkozitását az Ostwald-de Waele egyenlet írja le:

$$\tau = K \cdot \left(\frac{d\gamma}{dt} \right)^n \quad (2.7)$$

Ahol:

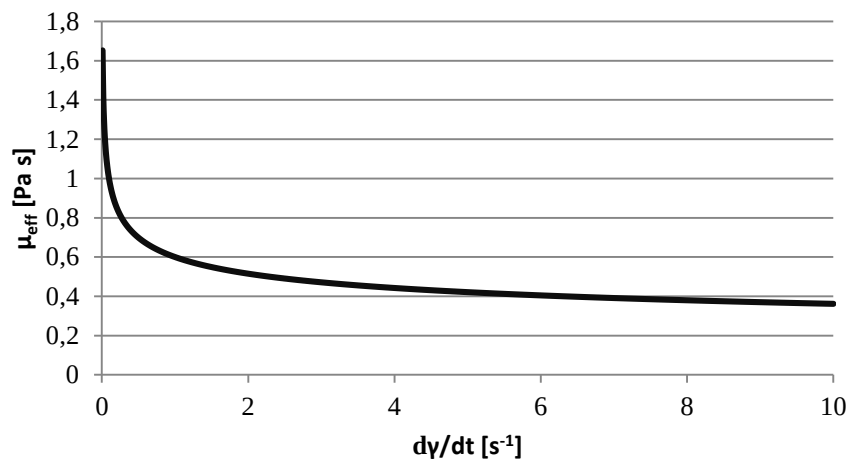
K : áramlási konzisztencia index [Pa s^n]

n : áramlási jelleg index [1] – pszeudoplasztikus folyadékok esetén $n < 1$.

A 2.6. és 2.7. egyenleteket összevetve a pszeudoplasztikus folyadékok effektív viszkozitása:

$$\mu_{eff} = K \cdot \left(\frac{d\gamma}{dt} \right)^{n-1} \quad (2.8)$$

Az effektív viszkozitás a nyírás növelésével hiperbolikusan csökken. Nagyon kis nyíróerők esetén értéke pedig ugrásszerűen megnő (2.13. ábra).



2.13. ábra: 0,5 % karboximetilcellulóz oldat viszkozitásának változása a nyírás függvényében ($K = 0,6$; $n = 0,78$)

A Bingham-plasztikus anyagok szilárd halmazállapotúként viselkednek alacsony nyíróerők mellett, míg egy bizonyos nyírás esetén elkezdenek folyni. Ilyen reológiai tulajdonságokkal sűrű zagyok, paszták (pl. majonéz) rendelkeznek. A csoport a nevét Eugene Bingham kémikusról kapta, aki az alábbi matematikai modellt írta fel az ilyen jellegű anyagok viselkedésének leírására [17]:

$$\tau - \tau_0 = B \cdot \frac{d\gamma}{dt} \quad (2.9)$$

Ahol:

B : látszólagos viszkozitási együttható [Pa s]

A Casson-viszkozitási modell főként micéliumos szuszpenziók reológiai viselkedésének meghatározására alkalmas:

$$\tau^{0,5} - \tau_0^{0,5} = K_C \cdot \left(\frac{d\gamma}{dt}\right)^{0,5} \quad (2.10)$$

Ahol:

K_C : Casson-viszkozitás [$\text{Pa}^{0,5} \text{ s}^{0,5}$].

A különböző viszkozitású fermentlevek keverésének CFD modellezésekor a következőképpen kell eljárni. A modellezés első lépéseként meg kell állapítani, hogy lamináris vagy turbulens áramlásról van szó. A két áramlás matematikai modellje között jelentős eltérések vannak, például ma még nem áll rendelkezésre olyan modell, mely turbulens áramlás esetén kellő pontossággal tudná számolni a folyadékban fellépő nyíróerőket.

Lamináris áramlás esetén a CFD modellben a folyadék tulajdonságok alatt a következőket kell megadni:

- newtoni fluidumok esetén meg kell adni a dinamikus viszkozitás értékét [Pa s];
- a pszeudoplasztikus fluidumok leírására szolgáló Ostwald-de Waele egyenlet lamináris áramlás esetén kiválasztható a programban, K (m) és n értékét kell megadni [18].

Turbulens áramlás választásakor pedig:

- newtoni fluidumok esetén meg kell adni a dinamikus viszkozitás értékét [Pa s];
- mivel a turbulencia modell nem számolja $\frac{d\gamma}{dt}$ értékét, arra vonatkozóan közelítéssel kell élni. Fermentációs gyakorlatban általában az alábbi összefüggés használatos az átlagos nyírás meghatározására [19]:

$$\overline{\left(\frac{d\gamma}{dt}\right)} = k \cdot N \quad (2.11)$$

Ahol:

k : konstans [1]

N : keverő fordulatszáma [s^{-1}]

A viszkozitás ebből pedig analóg módon a 2.7. egyenlettel:

$$\overline{\mu_{eff}} = K \cdot (k \cdot N)^{n-1} \quad (2.12)$$

2.2. A hőmérséklet, mint üzemeltetési paraméter jelentősége

A fermentorok üzemeltetésénél több paramétert is szűk tartományon belül kell tartani. Ilyen a hőmérséklet is, ugyanis a legtöbb mikroba csak viszonylag szűk hőmérséklettartományban szaporodik optimálisan. Az élő sejtben számtalan enzimkatalizált folyamat játszódik le, melyek sebessége az élőlényre jellemző tartományban Arrhenius-összefüggéssel írható le. Ezek a folyamatok külön-külön általában nem mérhetőek, de a hőmérséklet eredő hatása a mikroorganizmus növekedési sebességére szintén exponenciális jellegű. Ilyen kutatásokat általában élesztőgombákkal végeznek, mint például a mikrobiológia modell mikrobájának tekinthető *E. coli* vagy a *S. cerevisiae*. Utóbbi fermentációs vizsgálatok Phisalaphong és munkatársai azt találták, hogy 30-42 °C hőmérséklettartományban különböző kiindulási szubsztrátkoncentrációk mellett, a reakciósebesség (növekedés, elhalálozás, stb.) hőmérsékletfüggését az Arrhenius-egyenlet kellő pontossággal írja le [20].

Magasabb hőmérsékleten a sejt riboszómái és fehérjéi denaturálódnak, ez okozza, hogy a tenyészet aktivitása lecsökken. Végso soron e két hatás eredőjeként a fermentáció sebességének hőmérsékletfüggését vizsgálva egy maximumgörbét kaphatunk [1]:

$$\mu_X = A_1 \cdot e^{-\frac{\Delta E_1}{RT}} - A_2 \cdot e^{-\frac{\Delta E_2}{RT}} \quad (2.13)$$

Ahol:

μ_X : fajlagos növekedési sebesség [h^{-1}]

A_1 ; A_2 : konstansok

ΔE_1 : a növekedés látszólagos aktiválási energiája [kJ mol^{-1}]

ΔE_2 : a denaturálódás látszólagos aktiválási energiája [kJ mol^{-1}]

A valóságban létezik egy minimálisan szükséges hőmérséklet, mely alatt a mikroorganizmus beszünteti az élettevékenységét. Ugyanakkor a denaturációnak nincs ilyen határhőmérséklete, ez a hatás folyamatosan nő (bár egy adott érték után teljesnek tekinthető).

A fermentáció optimális hőmérsékletének meghatározásakor azonban nemcsak a fajlagos növekedési sebesség értékét kell figyelembe venni. Az oxigén oldhatósága ugyanis a fermentálé hőmérsékletének növekedésével romlik, ami miatt az elérhető oxigénmennyiség limitálhatja a növekedést, ezért célszerű e két hatás eredőjét figyelembe venni.

A hőmérséklet hatása még színesebb képet mutat, ha nem sejttömegtermelés, hanem valamilyen anyagcseretermék előállítása a cél (pl.: gyógyszerhatóanyag). Ebben az esetben általában a termékképződés optima nem esik egybe a növekedés optimumával. Elképzelhető olyan eset is, hogy a növekedés számára optimális paraméterek mellett felszaporítják az inokulumot a fermentorban, majd a hatóanyag termelése már más paraméterek mellett történik. Ebből látható, hogy a fermentáció hőmérsékletprofiljának meghatározása bonyolult probléma, melyben nagy segítséget jelent a kísérlettervezés és a matematikai modellezés eredményeinek felhasználása.

3. Gyakorlati rész

A gyakorlati részben a kidolgozott CFD modell és az elvégzett szimulációs vizsgálatokat, illetve azok kiértékelését mutatom be. Először ismertetem a vizsgált fermentorok geometriai jellemzőit, illetve azok leképezését az alkalmazott COMSOL Multiphysics programcsomagban. Ezt követően vizsgálom a berendezések belsejében számított áramlási képeket egy kisebb és egy nagyobb fordulatszámon. Az áramlási sebességek relatív értékei alapján értékelem az egyes berendezések geometriai felépítésében mutatkozó különbségek keverésre gyakorolt hatását.

3.1. A vizsgált fermentorok bemutatása

Jelen dolgozatban négy fermentor áramlási képének vizsgálata kapott helyet, melyek közül kettő kísérleti üzemi, kettő pedig üzemi léptékű gyógyszergyári berendezés. Ezek a fermentorok fontos szerepet töltenek be az egyes hatóanyag előállítási technológiák léptéknövelésénél.

A kísérleti üzemben a laboratóriumi mérések eredményeit (táptalaj összetétel, levegőztetés, nyírás) felhasználva kell kidolgozni a hatóanyag optimális gyártási eljárását. Ebben a lépcsőben a folyamatok már online méréssel is követhetőek, lehetőség van a pH, az oldottoxigén-koncentráció és a fermentorokból távozó gáz összetételének (CO_2 -tartalom) mérésére. Ezen felül offline módon mérnek különböző biokémiai paramétereket (pl.: viszkozitás, sejtsúly, glükóz-, glutamát-, glutamin-, ammónia- és laktóztartalom). A kísérleti üzemi munka célja:

- üzemi körülmények között implementálható technológiai eljárás kidolgozása;
- kellően nagy produktivitás elérése (gazdaságossági szempont);
- a kapott fermentlé feldolgozhatóságának optimalizálása.

Ezen célok eléréséhez fontos, hogy mind az üzemi, mind a kísérleti üzemi fermentorokról minél részletesebb ismeretekkel rendelkezünk. A fermentorok áramlási és hőátadási viszonyainak numerikus áramlástanai módszerekkel történő vizsgálata olyan részletesebb információkkal szolgálhat, melyek elősegíthetik a technológia léptéknövelését.

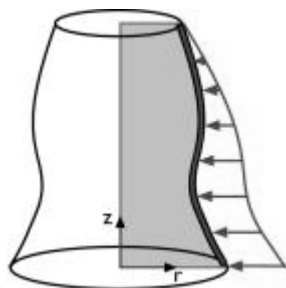
A megfelelő szimulációs vizsgálatokkal támogatott léptéknöveléssel csökkenteni lehet a kísérletek számát, ezáltal pedig jelentős költségmegtakarításra nyílik lehetőség.

A legegyszerűbb geometriai kialakítással az 1. kísérleti üzemi fermentor (KF 1) rendelkezik, melyben három darab azonos kialakítású hatlapátos Rushton-turbina, valamint három terelőlemez található. A 2. kísérleti üzemi fermentor (KF 2) előbbihez hasonlóan három terelőlemezt tartalmaz, de az ebben lévő keverőelemek már az üzemi fermentorokban alkalmazottakkal azonos kialakításúak, melyek már kétféle keverőelemet is tartalmaznak. Az alsó elem Ekato PhaseJet típusú (3.3. ábra, bal oldal), melyet a bevezetett levegő diszpergálására terveztek. A felső kettő négy lapátos Ekato Viscoprop keverő (3.3. ábra, jobb oldal), utóbbi jellemzője a viszkózus folyadékok hatékony keverése, valamint a fal mentén létrejövő erős axiális áramlás, mely a jobb hőátadást segíti elő [21]. Az üzemi léptékű készülékekben (F 1 és F 2) jelentősen eltér egymástól a belső hőcserélő kialakítása. Előbbi öt, egyenként 6+5 csőből álló köteget tartalmaz, míg utóbbi 8x8-as kialakítású.

3.2. Geometriai modellek

Az alábbi fejezetben szeretném bemutatni, hogyan kell a COMSOL Multiphysics programban a kevert berendezések geometriáját leképezni [18]. Alapvetően kétféle modellezés alkalmazható keverés esetén: 2D tengelyszimmetrikus és 3D-s alakzatok építhetők meg.

A 2D tengelyszimmetrikus geometria r , φ és z koordinátákat alkalmaz. Az épített geometria tulajdonképpen egy forgásszimmetrikus alakzat féltengelymetszete, ezért azt csak az $r \geq 0$ és z koordináták mentén rajzoljuk meg. A teljes 3D alakzat megkapható, ha körbefordítjuk a 2D-s geometriát a z tengely mentén (3.1. ábra). Természetesen egy ilyen megközelítés komoly megkötéseket tartalmaz, hiszen keverőelemként is csupán egy tengelyszimmetrikus alakzat képezhető le, ami nem teszi lehetővé az általam vizsgált fermentorok keverőelemeinek leképezését. Előnye viszont az ilyen modellek megoldásának, hogy alacsony az erőforrásigénye és viszonylag gyorsan eredményeket kapunk a tartályban kialakuló áramlási képről. 2D tengelyszimmetrikus geometria építésére nem került sor jelen dolgozat feladatai során.



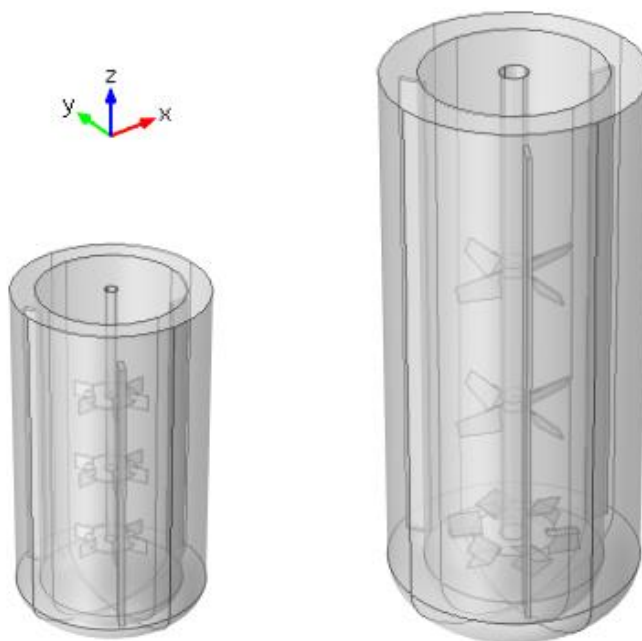
3.1. ábra: 2D geometria körbeforgatásával kapott 3D-s alakzat

A 3D-s geometria x , y , és z koordináták mentén lehetővé teszi a berendezés geometriájának pontosabb leképezését. Az itt bemutatásra kerülő fermentorok geometriája viszonylag bonyolult, többféle geometriájú keverőt és változatos elrendezésű terelőelemeket tartalmaz, ezért nagyobb számítási igényére tekintettel is indokolt a három dimenziós modellek alkalmazása.

Amint a 3.1. pontban említettem, két kísérleti üzemi és két üzemi léptékű fermentor áramlási képének vizsgálatára került sor, melyek geometriai modelljét a pontos méretek

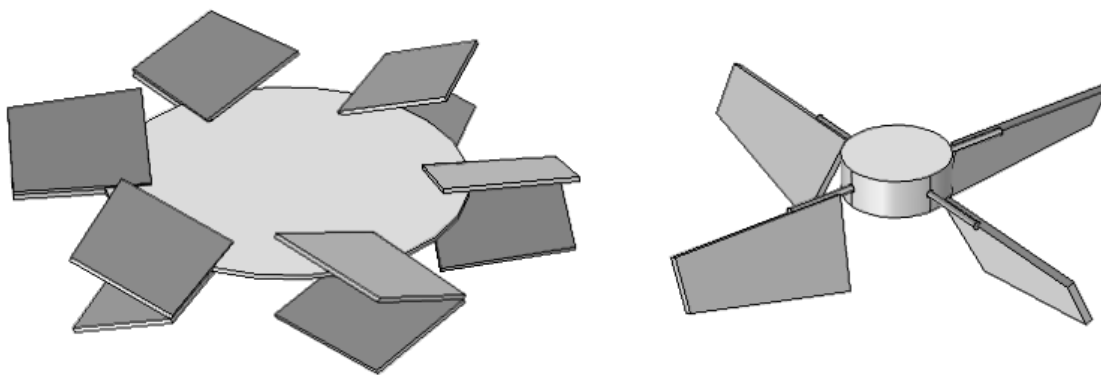
részletezése nélkül szeretném az alábbiakban bemutatni. Ennek oka, hogy ezek létező, működő reaktorok, melyek tényleges kialakítása nem minősül nyilvános információnak.

A kísérleti üzemi fermentorok COMSOL modell geometriáját az 3.2. ábra mutatja. Mivel a COMSOL modellbe csak a folyadéktér került be, a modell geometria valamivel alacsonyabb, mint a fermentorok tényleges magassága. Az ábrákon a belső térben lévő elválasztás az impulzusmérleg megoldásához szükséges két tartomány határát jelöli (bővebb információ erről a 3.3. pontban található).

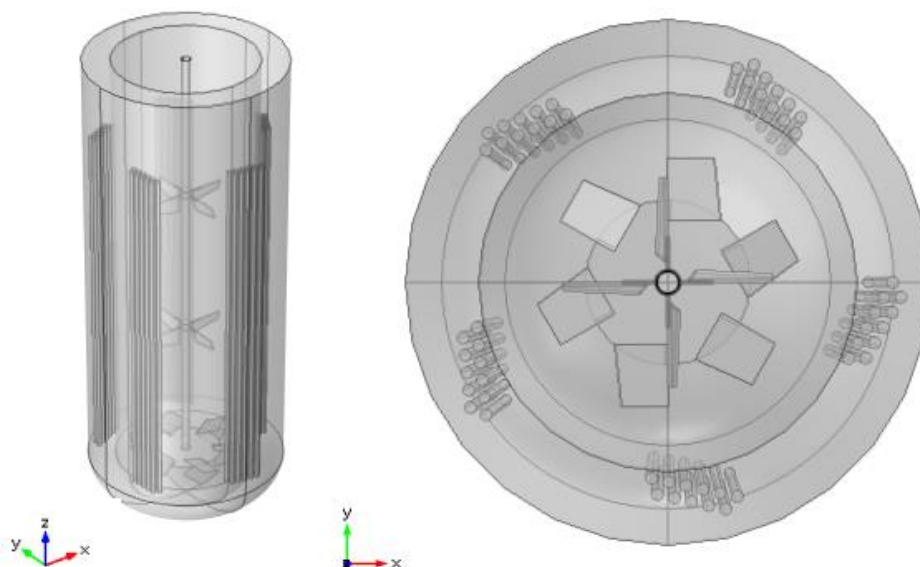


3.2. ábra: KF 1 (balra) és KF 2 (jobbra) fermentor geometriai modellje

A keverőelemek COMSOL programbeli leképezését az 3.3. ábra mutatja. A keverők méretezése a rendelkezésre álló makettek, illetve szemrevételezés alapján történt.



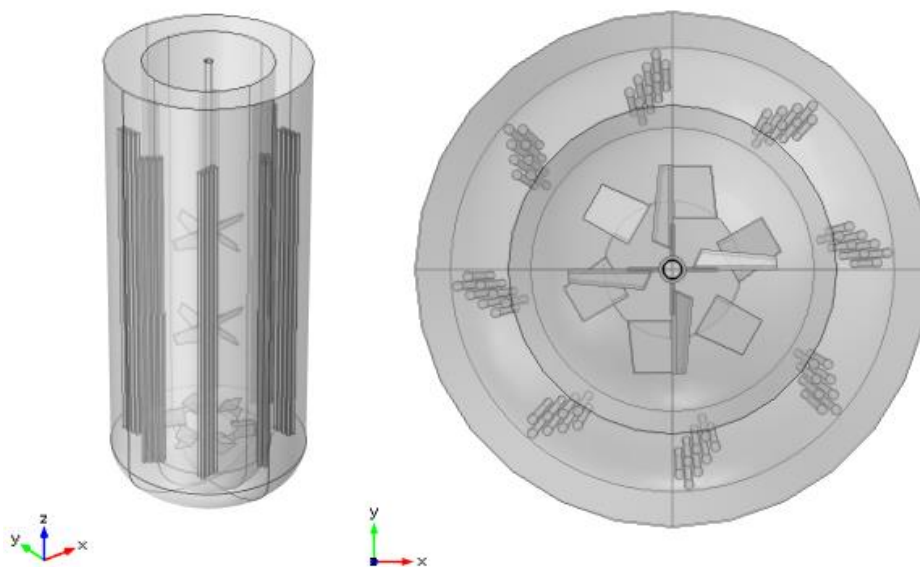
3.3. ábra: PhaseJet (balra) és Viscoprop keverőelem (jobbra) COMSOL modellje



3.4. ábra: F 1 fermentor geometriai modellje – balra: 3D nézet, jobbra: felülnézet

Az üzemi fermentorok kialakítását a 3.4. ábra és a 3.5. ábra mutatja. A két készülék között a fő különbség a terelőelemként is funkcionáló, belső hőcserélők kialakításában mutatkozik meg. Az F 1 berendezésben öt csősor található egyenként tizenegy csővel az ábra szerinti 6+5 bontásban, míg az F 2 fermentor nyolc darab nyolc csőből álló hőcserélőt tartalmaz 4+4 elrendezéssel. Ezen kívül lényeges különbség látható a terelőelemek állását tekintve. A keverők forgása mindkét készülékben az óramutató járásával megegyező (negatív irányú), tehát az F 2-es fermentorban a terelőelemek az áramló folyadék útját várhatóan

jobban keresztezik, mint az F 1-es berendezés esetén, ahol a terelőelemek inkább az áramlással azonos irányultságúak.



3.5. ábra: F 2 fermentor geometriai modellje – balra: 3D nézet, jobbra: felülnézet

Amint látható, a vizsgált négy fermentor geometriai kialakítása változatos képet mutat, ezért a gyakorlati rész az adott elrendezés konkrét hatásait vizsgálja az áramlási viszonyokra. Ezek összehasonlítása az áramlási sebességek alapján korlátozott hatékonysággal történhet, ezért további célom a kvantitatív összehasonlítás, melyre például a reaktorban kialakuló hőmérsékleti kép homogenitásának vizsgálata lehet alkalmas.

3.3. Impulzusmérleg megoldása

A keverés CFD modellezéséhez a COMSOL Multiphysics Rotating Machinery modelljét használtam fel. Ehhez a tartályt két tartományra kell felosztani. A belső forgó rész tartalmazza a keverőelemet, míg a külső, „álló” rész a terelőlemezeket (ez figyelhető meg a 3.2. pontban, a fermentorok COMSOL programban való leképezésénél). A két tartomány között nem lehet átfedés, hiszen nem történhet meg, hogy valami egyszerre áll és mozog. Annak érdekében, hogy a forgó rész hasson az álló részre, a geometria véglegesítésekor a két tartomány határfelületén azonossági kritériumokat kell létrehozni. Annál pontosabb a modell, minél nagyobb a forgó rész, de a terelőelemeknek teljes egészében az álló tartományon belül kell maradniuk.

A fluidum mozgását leíró Navier-Stokes-egyenleteket a program forgó koordinátarendszerre fogalmazza meg a következőképpen:

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho(u \cdot \nabla)u = \nabla \cdot \left[-pI + \mu(\nabla u + (\nabla u)^T) - \frac{2}{3}\mu(\nabla \cdot u)I \right] + F \quad (3.1)$$

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u) = 0 \quad (3.2)$$

$$dx = dx(r_{bp}, \omega, t) \quad (3.3)$$

$$\frac{d\omega}{dt} = w \quad (3.4)$$

Ahol:

ρ : sűrűség [kg m^{-3}]

u : sebesség ($(u_x; u_y; u_z = u; v; w)$ [m s^{-1}]

t : idő [s]

p : nyomás [Pa]

μ : dinamikai viszkozitás [Pa s]

I : impulzus [kg m s^{-1}]

F : folyadék összenyomhatóságával összefüggő térfogati erő [N m^{-3}]

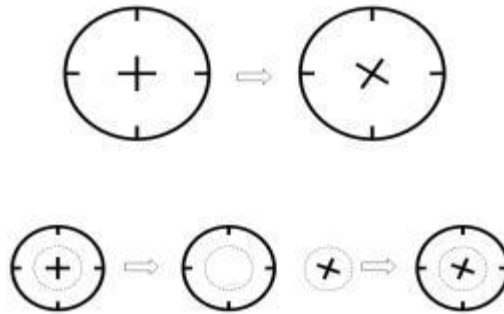
x : helykoordináta ($x; y; z$) [m]

r_{bp} : forgási tengely koordinátái [m]

ω : aktuális szögelfordulás [rad]

w : szögsebesség [rad s⁻¹]

A mozgó domain előre definiált fordulatszámmal forog. Adott időpontban a program kiszámítja a mozgó domain új helyzetét és tulajdonságait, majd az azonossági kritérium segítségével a program egymáshoz igazítja a mozgó és az álló domain-eket (3.6. ábra).



3.6. ábra: Rotating Machinery, Fluid Flow modellezés sémája

Összefoglalva tehát, a Rotating Machinery (forgó szerkezet) modellegyenlet alkalmazásának lépései:

- a folyadéktulajdonságok alatt megadtam a kevert folyadék sűrűségét és dinamikai viszkozitását.
- felvettem a forgó térrészt és hozzárendeltem a geometriában kialakított belső tartományt. Itt kell megadni a fordulatszám értékét. A COMSOL programban a numerikus problémákat elkerülendő a beírt értéket meg kell szorozni egy, a változók alatt definiált egységugrás-függvénnyel. Ezzel azt érem el, hogy a szimuláció álló térrészekkel indul és a forgó tartomány fokozatosan gyorsul fel.
- felvettem egy áramlási folytonossági összefüggést (azaz az érintkező peremeken a sebesség azonos a perem két oldalán) és hozzárendeltem a tartományok határán kialakított azonossági párt.
- Szimmetria kritériumot vettem fel a geometria felső részén, mely arra utal a modellben, hogy a reaktor felülről nem zárt.

- felvettem egy meghatározott nyomású pontot a kezdeti értékek számításához. Ennek koordinátáit a program által felajánlott pontok közül történő választással adtam meg.

Munkám során lamináris keverési modellel dolgoztam, melyeket 10 másodperces időközben modelleztem viszonylag kis elemszámú háló (mesh) alkalmazása mellett. A szimulációs kísérleti terv a következőképpen alakult: a sűrűség értéke állandó 1200 kg m^{-3} volt, míg a dinamikai viszkozitás $0,5 \text{ Pa s}$ volt. Ezek egy prokarióta fonalas baktériummal végzett fermentáció reológiai adatai, melyet a fermentorok geometriai adataival együttesen bocsátottak rendelkezésemre. A kísérletek paramétereit összefoglalóan a 3.1. táblázat tartalmazza. A kiértékelés során az egymáshoz jobban hasonlító kísérleti üzemi, valamint üzemi fermentorokat külön pontban tárgyalom, a 3.3. fejezetben szereplő ábrák a dinamikus szimulációk utolsó időpillanatában ábrázolják az eredményeket

3.1. táblázat: Vizsgálati paraméterek

	KF 1	KF 2
Sűrűség [kg m^{-3}]	1200	1200
Viszkozitás [Pa s]	0,5	0,5
Forgás iránya	negatív ¹	negatív
Fordulatszám [rpm]	közepes: 500	közepes: 220
	gyors: 750	gyors: 330

	F 1	F 2
Sűrűség [kg m^{-3}]	1200	1200
Viszkozitás [Pa s]	0,5	0,5
Forgás iránya	negatív	negatív
Fordulatszám [rpm]	közepes: 100	közepes: 100
	gyors: 150	gyors: 140

3.3.1. Kísérleti üzemi fermentorokban kialakuló áramlási képek vizsgálata

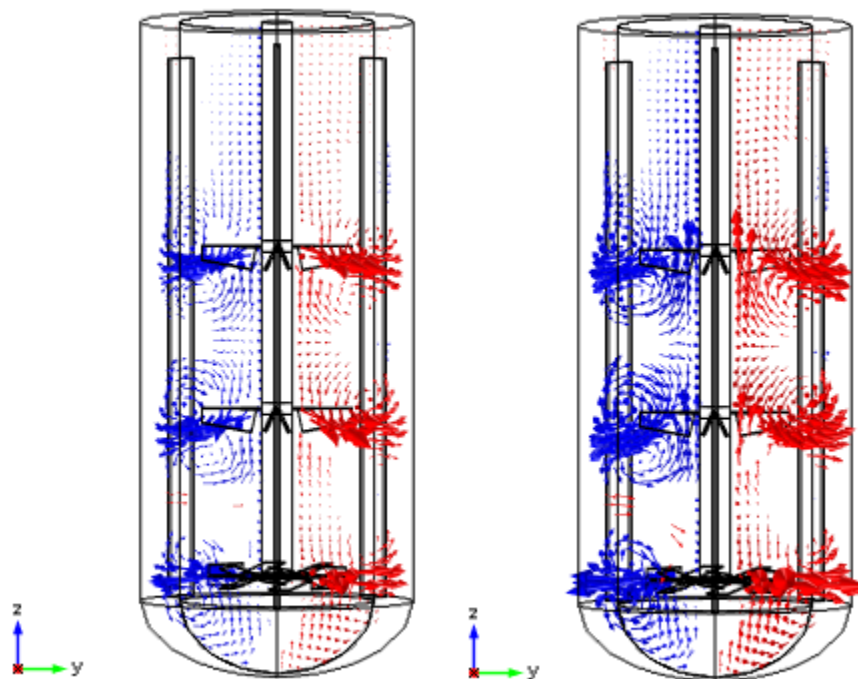
A könnyebb összehasonlíthatóság érdekében az ábrákon a sebességeloszlást a 0 és 1 közötti relatív skálán ábrázoltam, amelynek felső határa az adott berendezésben eredményül kapott maximális áramlási sebesség (mely elméletileg a keverőelem külső pontjának sebessége), melyek az alábbiak:

- KF 1:

¹ óramutató járásával megegyező

- közepes kevertetés: $4,57 \text{ m s}^{-1}$
- gyors kevertetés: $6,19 \text{ m s}^{-1}$
- KF 2:
 - $6,30 \text{ m s}^{-1}$
 - $9,45 \text{ m s}^{-1}$

A 3.7. ábra a lap síkjából kiinduló sebességvektorokat mutatja a KF 2 fermentorban. Jól megfigyelhető a Viscoprop keverők lefelé nyomó jellege. A sebességvektorok nagysága a keverőelemek közötti térben lényegesen lecsökken, ami a reaktor teljes hosszában való lassabb átkeveredést eredményezhet a betáplálás helyétől függően. Az alsó és a középső keverő között ez a hatás erősebb.



3.7. ábra: yz síkból kiinduló sebességvektorok a KF 2 fermentorban (balra: 220 rpm, jobbra: 330 rpm) (kék: befelé mutató, piros: kifelé mutató vektorok)

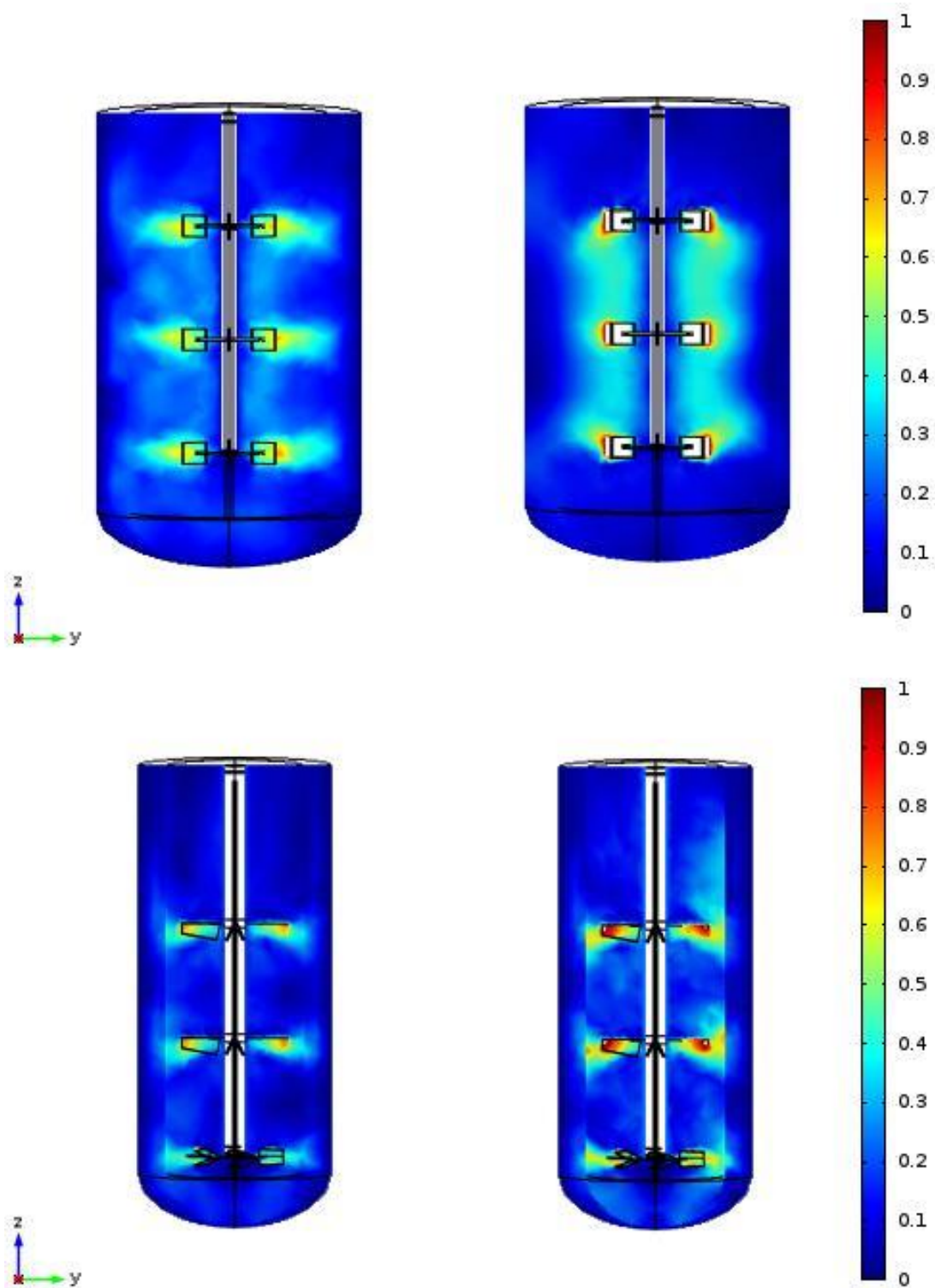
Közepes és magas kevertetés esetén a kísérleti üzemi fermentorokban kialakuló áramlási képet a 3.8. ábra oldalnézeti metszeti képben mutatja. Ennek alapján a KF 1 fermentor keverőelemei kellően közel vannak egymáshoz a radiális áramlási zónák

átlapolódásához, illetve viszonylag nagy áramlási sebességek láthatók a keverőelemektől viszonylag távol is, tehát a KF 1 készülék függőleges átkevertsége jónak tekinthető. Ez persze annak is köszönhető, hogy kisebb folyadéktérfogatot viszonylag könnyebb átkeverni. A sebesség értékek egyedül a tartály alsó részén alacsonyak, ez kedvezőtlenül hathat a gázbevezetésre. Erre egy megoldás lehet a keverőelemek egymástól való távolságának megnövelése és az alsó turbina lentebb helyezése.

Ennél a berendezésnél a fordulatszám növelésének hatása a keverőelemek környezetében jelentős, főként azok között nő meg az áramlási sebesség. A falhoz közeledve azonban a növekedés mértéke egyre csökken a közepes fordulatszámon kapott eredményekhez képest. Tehát a fordulatszám növelése csak korlátozottan javítja a berendezés kevertségét, a további emelésnek pedig valószínűleg nem lenne észlelhető hatása.

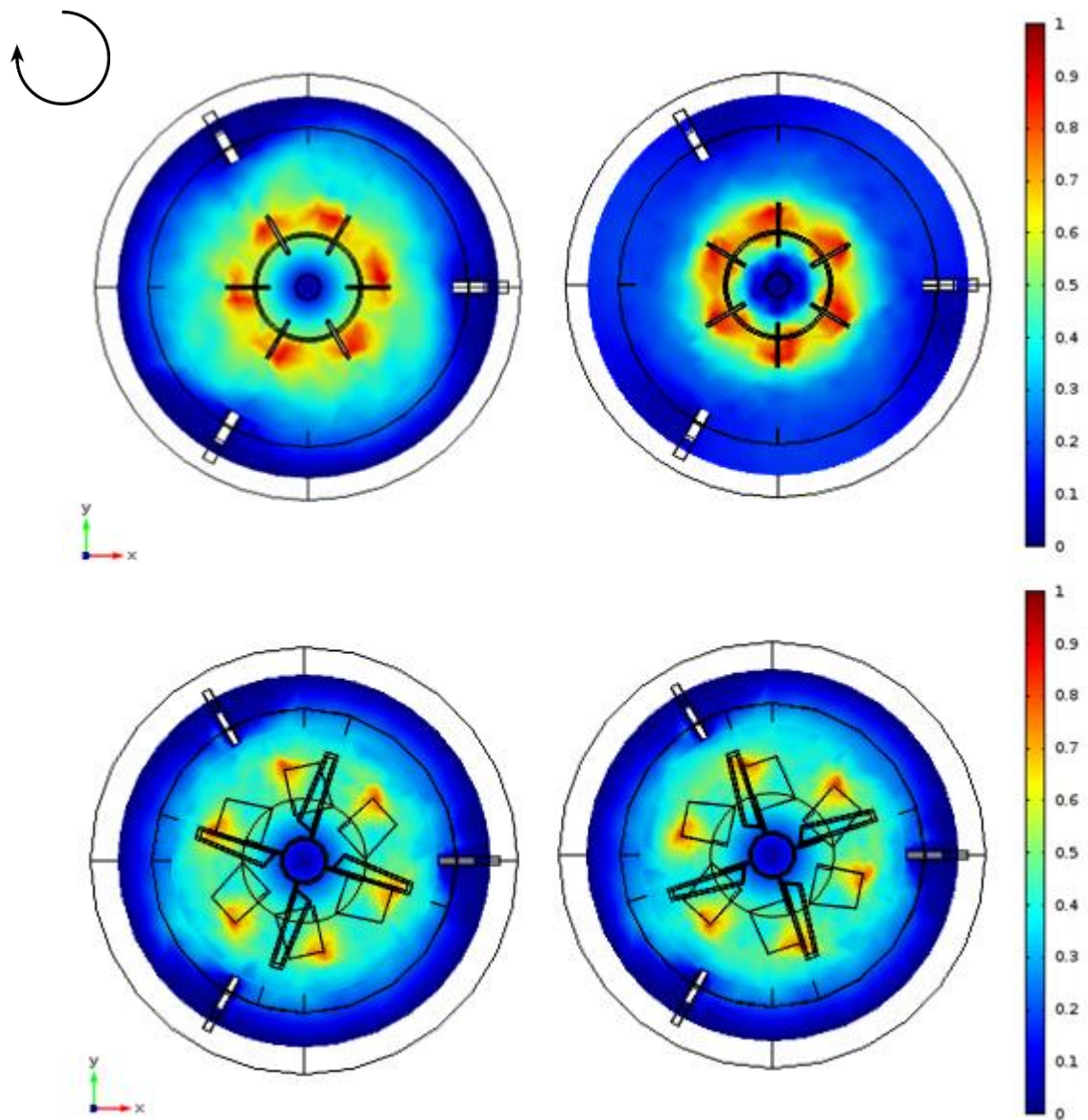
A KF 2 fermentorban nagyobb fordulatszám esetén a keverőelemek közötti térben az áramlási sebesség csökkenésének mértéke kisebb, továbbá mivel az áramlási sebességek abszolút értékei is nagyobbak, megállapítható, hogy a fordulatszám emelése egyenletesen javítja a vertikális átkeveredést, ellentétben a KF 1 fermentor esetével. Továbbá KF 2 készülék áramlási képét vizsgálva az is látható, hogy ilyen keverőelem elhelyezés esetén ennél kisebb folyadékszintet érdemes tartani a berendezésben, mivel a felszín közeli rész nem keveredik megfelelő sebességgel.

Az alsó keverőelemek síkjában kapott áramlási képet és relatív sebesség eloszlást a 3.9. ábra mutatja. A Rushton-turbina és a PhaseJet keverőelem által létrehozott áramlási kép ebben a síkban meglehetősen hasonló, ezért képes utóbbi az előbbi kiváltására a fermentorban. Érdemes kiemelni a terelőelemek hatékonyságát. A fal környezetében is viszonylag nagy sebességgel áramlik a kevert fermentlé, mindössze közvetlenül a terelőlemezek mögött alacsony a sebessége. Az áramlástörő hatás a KF 2 fermentor esetében erősebb, ennek oka a készülék nagyobb térfogata. Az ábra alapján megállapítható az is, hogy a KF 1 készülékben magasabb fordulatszámon a fal környezetében az áramlási sebesség gyakorlatilag nem nő, relatív értéke pedig csökken, míg a KF 2 esetében a relatív skálán látható kép nagyobb fordulatszámon közel azonos, tehát egyenletes javulás tapasztalható a berendezésben.

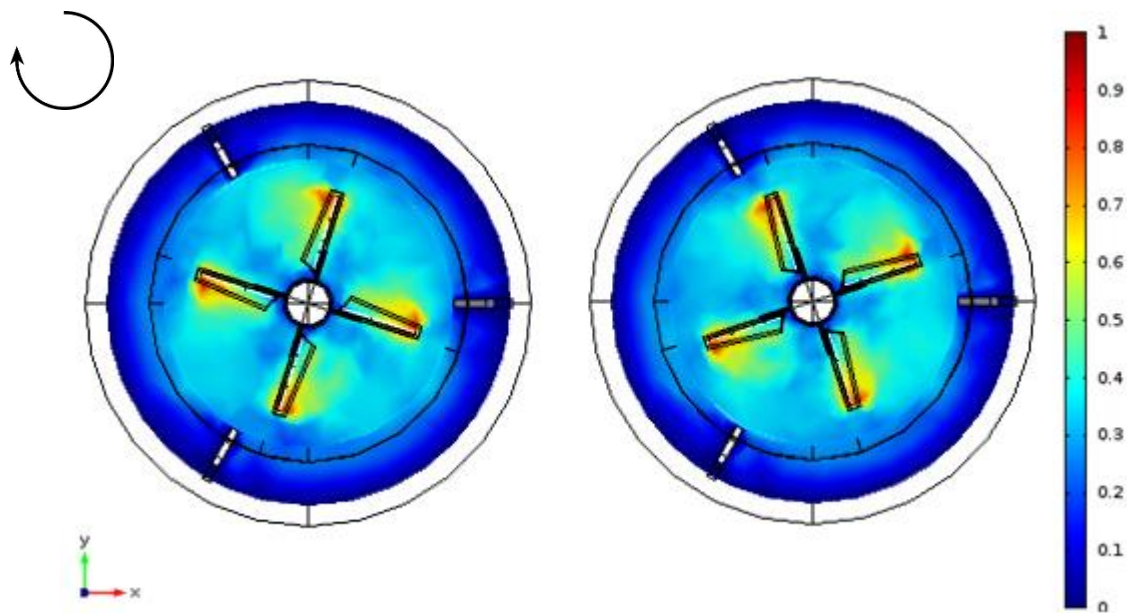


3.8. ábra: Kísérleti üzemi fermentorokban kialakuló áramlási képek (oldalnézet) – felül:

KF 1, 500 rpm, 750 rpm – alul: KF 2: 220 rpm, 330 rpm



3.9. ábra: Kísérleti üzemi fermentorok alsó keverőelemeinek síkjában kialakuló áramlási képek – felül: KF 1, 500 rpm, 750 rpm – alul: KF 2: 220 rpm, 330 rpm



3.10. ábra: KF 2 fermentor középső keverőelemének síkjában kialakuló áramlási képek –
balra: 220 rpm, jobbra: 330 rpm

A KF 1 fermentor három azonos kialakítású Rushton-turbinát tartalmaz, ezek síkjában a kialakuló áramlási képek a várakozásoknak megfelelően nem térnek el lényegesen egymástól (a kapott, hivatkozott ábráktól lényegileg nem különböző eredményeket a melléklet tartalmazza). A KF 2 fermentor esetében a két Viscoprop keverőelem síkjában is nagyon hasonló áramlási kép alakul ki, melyek körül a középső síkjában kapott eredményeket mutatja a 3.10. ábra. A terelőlemezek hatása az áramlási képre kisebb, ennek oka, hogy a fermentorban lévő Viscoprop keverő átmérője nagyobb, mint a PhaseJet keverőé (amint a 3.9. ábra is mutatja). Ennek eredménye az is, hogy az áramlási sebesség a berendezésben felfelé haladva nő. A keverőátmérő növelése tehát javítja a kevertséget, ettől függetlenül azonban annak mérete nem növelhető tetszőlegesen, az átmérőarány tipikusan 0,4-0,6 közötti [1].

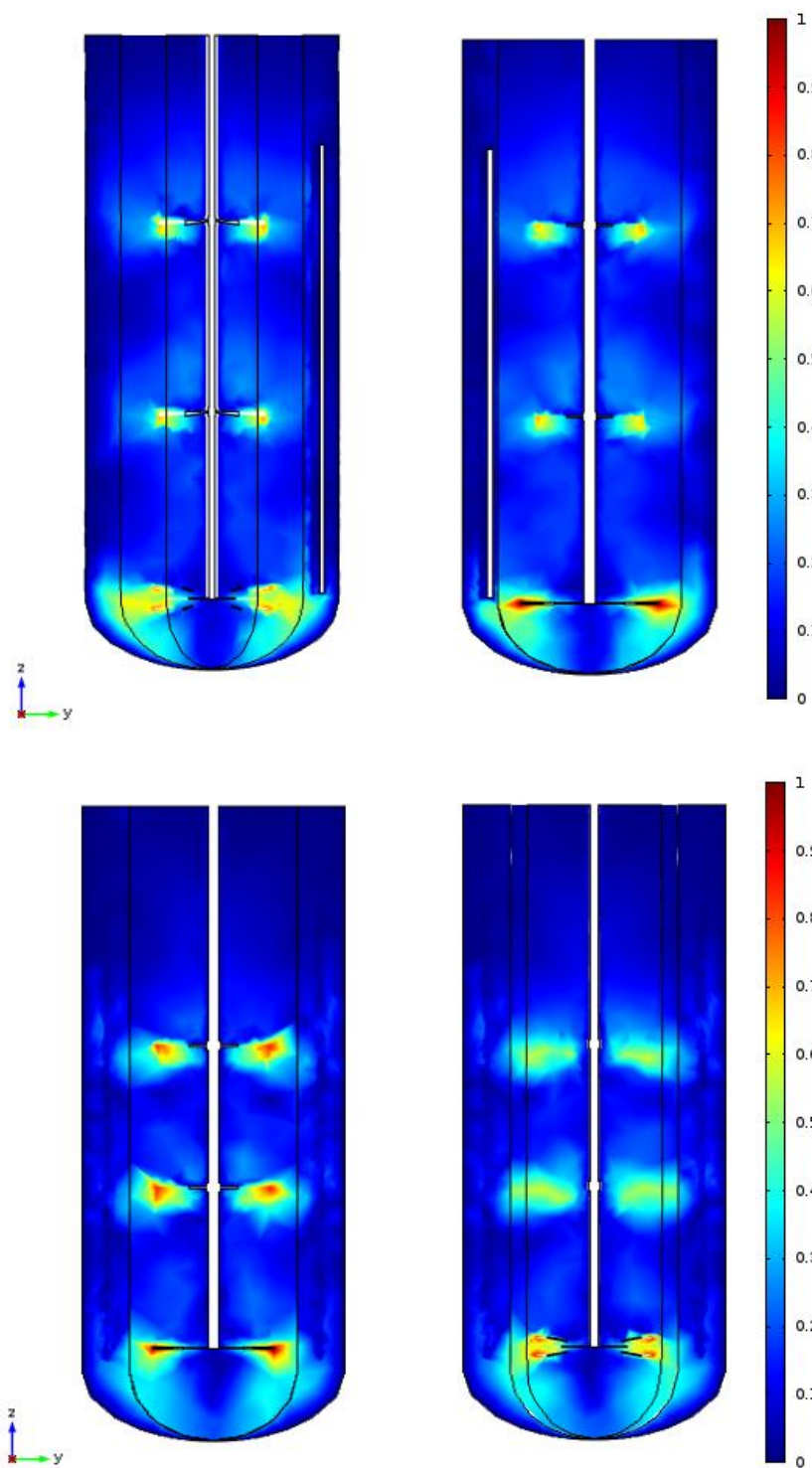
3.3.2. Üzemi fermentorokban kialakuló áramlási képek vizsgálata

Az üzemi fermentorokban kialakuló maximális sebesség értékek a szimulációk végén:

- F 1:
 - közepes kevertetés: $6,58 \text{ m s}^{-1}$

- gyors kevertetés: $9,45 \text{ m s}^{-1}$
- F 2:
 - közepes kevertetés: $6,70 \text{ m s}^{-1}$
 - gyors kevertetés: $9,46 \text{ m s}^{-1}$.

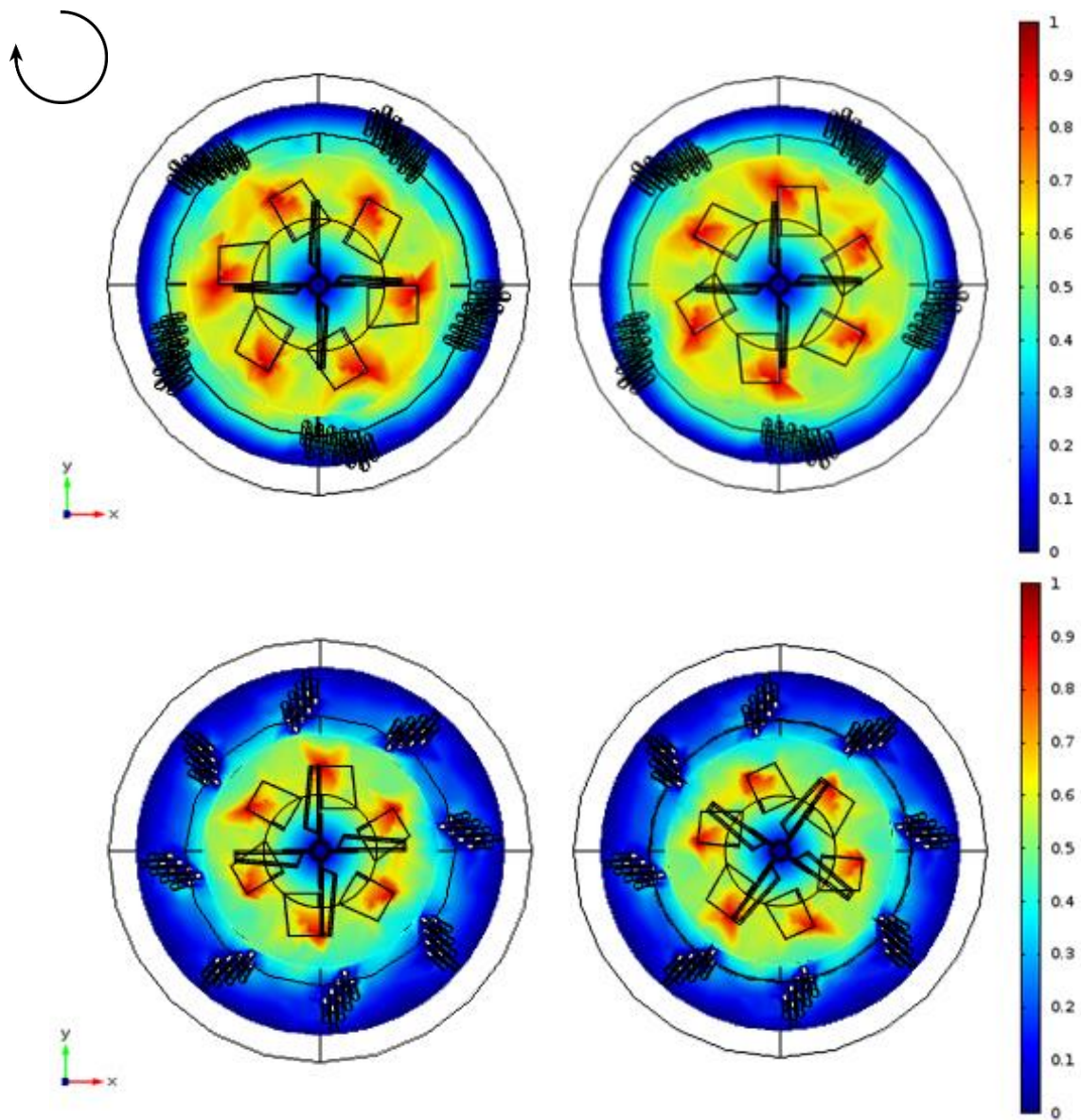
A kapott áramlási képeket oldalnézeti metszetben a 3.11. ábra mutatja. A legnagyobb sebességek a tartály alsó részén mutatkoznak, ez elősegíti a bevezetett levegő jobb diszpergálását a fermentorban. Az F 1 fermentor esetében a keverőelemek között az áramlási sebesség viszonylag kisebb, de egyenletesebb képet mutat, mint az F 2 fermentor. Tekintettel arra, hogy a fordulatszámok közel azonosak a két berendezésben, valamint a keverőelemek távolsága is közel azonos, ennek oka a nagyobb keverőátmérő az F 2-es berendezésben, melynek következtében annak kerületi sebessége is nagyobb. Tehát az F 2 fermentor keverőelemeinek környezetében nagyobb az áramlási sebesség, míg a keverőelemek közötti térben az F 1 fermentorhoz hasonlóan lecsökken. Az F 2 fermentor felső részében – hasonlóan a KF 2 fermentorhoz – nagyon alacsony sebességek láthatóak, ezért ezen berendezésben is érdemes lehet lecsökkenteni a folyadékszintet. A keverőelemek közötti távolság hatása az áramlási képre az eddigi szimulációk alapján kapcsolatba hozható a keverőátmérővel, mégpedig célszerű, ha a kettő körülbelül megegyezik.



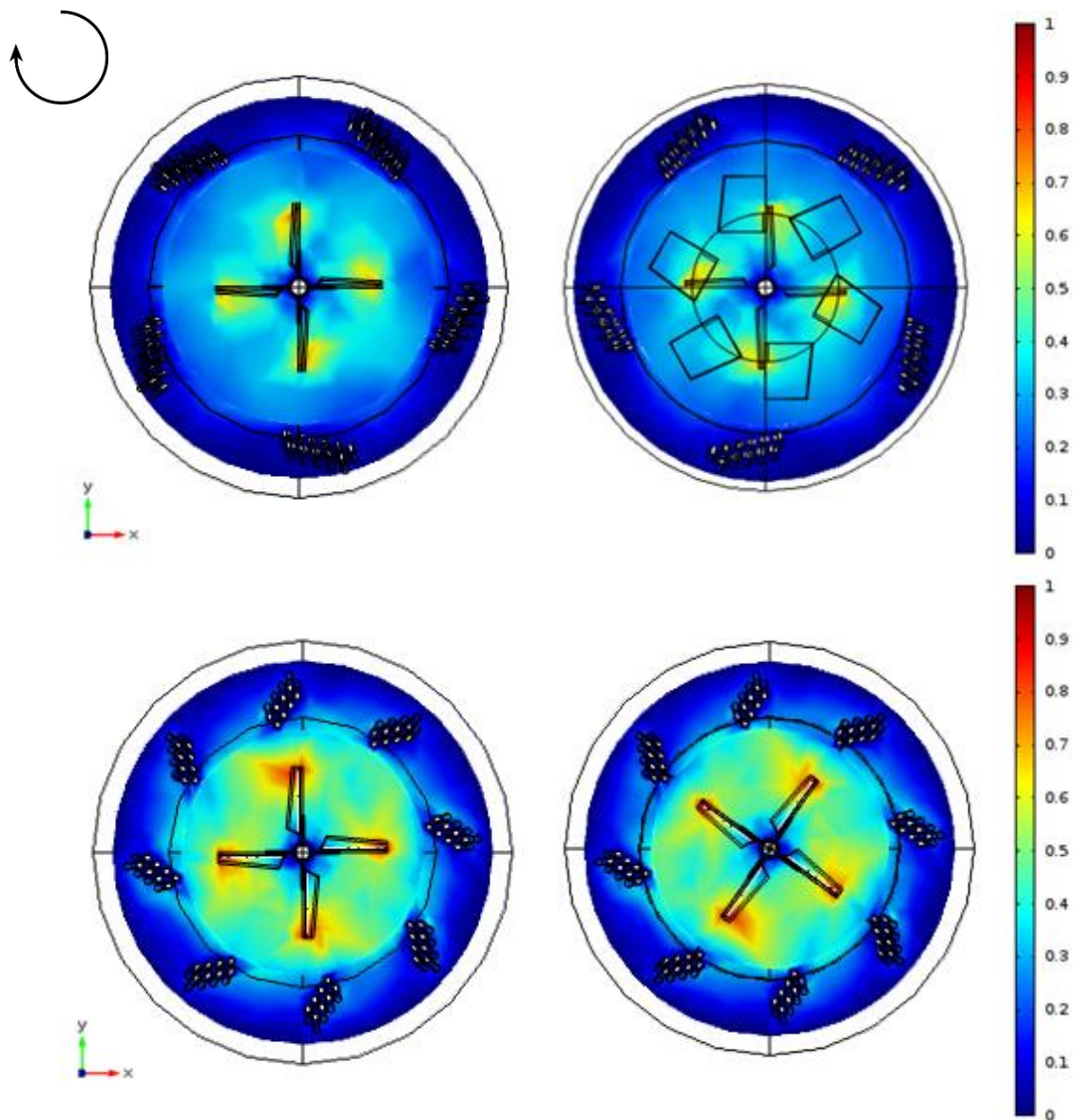
3.11. ábra: Üzemi fermentorokban kialakuló áramlási kép (oldalnézet) – felül: F 1 100 rpm, 150 rpm, alul: F 2 100 rpm, 140 rpm

Az üzemi fermentorok alsó keverőelemeinek síkjában kialakuló áramlási képet a 3.12. ábra mutatja. Az F 2 tartály átmérője körülbelül 20 %-kal nagyobb, míg a keverőátmérő azonos, emiatt az F 1 fermentor esetében jóval nagyobb áramlási sebességek láthatóak a berendezés falához közeledve. Ebben az esetben a terelőelemek hatása nem látható, ennek oka, hogy azok valamivel magasabban helyezkednek el, mint a keverő, így annak síkjában nem törik meg a folyadék áramlását. Az F 2 fermentor esetében azonban jól kivehető a hőcserélők áramlástörő hatása. A fordulatszám növelésével a berendezésekben egyenletesen növekedett az áramlási sebesség, ezért a relatív eloszlás nem változott. Tehát az üzemi fermentorokban a fordulatszám növelése hatékony eszköz a berendezések kevertségének javítására.

A terelőelemek elhelyezkedésének hatása a 3.13. ábra alapján vizsgálható meg. A két fermentor között a Viscoprop keverőelemek méretében is különbség van. A kisebb méretű keverőelem miatt az F 1 fermentorban a várákosoknak megfelelően kisebb áramlási sebességek figyelhetők meg, a berendezés kevertségét azonban a hőcserélők állása is rontja. Ebben az állásban azok ugyanis inkább takarják a tartály falát, míg az F 2 fermentor esetében azok hatékony áramlástörő elemekként funkcionálva a fal felé irányítják az áramló folyadékot, melynek következtében a hőcserélők és a fal környezetében is kevésbé csökken le az áramlási sebesség az F 1 fermentorhoz viszonyítva. A szimulációk eredményei alapján kijelenthető, hogy a terelőelemek állásának hatása az áramlási képre a keverő forgatásának irányával egyértelműen kapcsolatba hozható, azoknak keresztezniük kell az áramlást, ellenkező esetben ugyanis takaró hatást fejtenek ki. Célszerű lehet továbbá több terelőelem elhelyezése, figyelembe véve a 2.1.3. fejezetben foglaltakat.



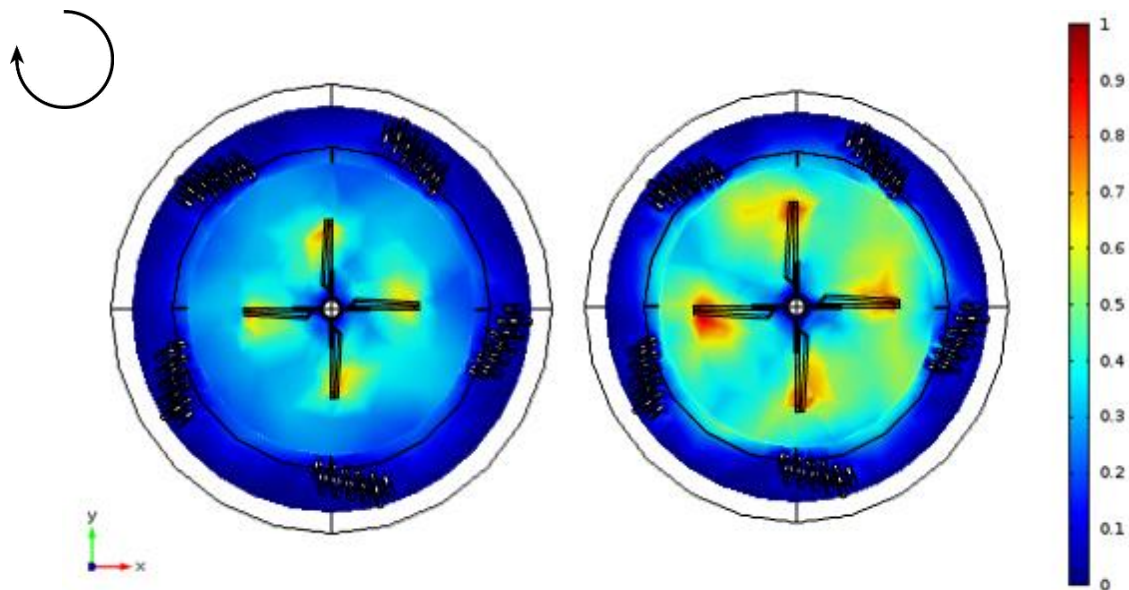
3.12. ábra: Üzemi fermentorok alsó keverőelemeinek síkjában kialakuló áramlási kép –
 felül: F 1 100 rpm, 150 rpm, alul: F 2 100 rpm, 140 rpm



3.13. ábra: Üzemi fermentorok középső keverőelemeinek síkjában kialakuló áramlási kép –
felül: F 1 100 rpm, 150 rpm, alul: F 2 100 rpm, 140 rpm

Az üzemi fermentorok áramlási képében tapasztalt eltérés oka tehát kettős, a hőcserélő állásában és a keverőátmérőben is különbözik a geometria. Ezért az F 1 fermentor Viscoprop keverőelemeinek átmérőjét egy újabb szimulációban az F 2-ben alkalmazott méretre növeltem meg. Az eredményeket 100 rpm fordulatszámon a középső keverőelem síkjában a 3.14. ábra mutatja. Látható, hogy a maximális áramlási sebesség értéke megnőtt, valamint az

áramlási sebesség értékek is nagyobbak a keverő síkjában. Azonban a terelőelemek falat takaró hatása még mindig megfigyelhető, tehát az F 1 fermentorban tapasztalt rosszabb áramlási viszonyokat nemcsak a kisebb keverő alkalmazása okozza.



3.14. ábra: F 1 fermentor középső keverőelemének síkjában kialakuló áramlási kép (100 rpm) – balra: eredeti, jobbra: megnövelt keverőátmérő

4. Összefoglaló

A kevert tartály kialakítású fermentorok geometriai felépítése változatos, erre vonatkozóan négy példát vizsgáltam meg eddigi munkám során, melyek közül kettő kísérleti üzemi, kettő pedig üzemi léptékű berendezés. Ezen készülékek áramlási és hőátadási viszonyainak vizsgálata és összehasonlítása hasznos információkkal szolgálhat a fermentációs technológia léptéknövelésének során.

A kísérleti üzemi fermentorok kialakítása a keverőelemekben különbözik egymástól. A KF 1-es berendezés három egyforma Rushton-turbinát tartalmaz, míg a KF 2-es fermentor keverőelemei az üzemi fermentorokéval azonos kialakításúak, az alsó részen egy PhaseJet keverőelem található, melyet két egyforma Viscoprop keverőelem egészít ki. A szimulációk eredményéből megállapítható, hogy utóbbi rendszer alkalmas a hagyományosnak tekinthető Rushton-keverők kiváltására. A keverőrendszer által létrehozott áramlási kép bonyolultabb, a radiális áramlás mellett a Viscoprop keverők lefelé nyomó jellege befolyásolja azt számottevően. Ebben a léptékben a három hagyományos terelőelem alkalmazásával viszonylag jól kevert berendezéseként jellemezhetőek a fermentorok, a fordulatszám emelése azonban ez csak korlátozottan javítható, főként a KF 1 fermentor esetén.

Az üzemi fermentorok felépítése hasonló, mindkettő három keverőelemet tartalmaz, melyek közül a felső kettő azonos típusú. A fő különbség a terelőelemek számában és állásában van. Az F 1 fermentor öt hőcserélő elemet tartalmaz, míg az F 2-es nyolcat, s ezek állása a két készülékben ellentétes. Az impulzusmérlegek megoldása azt mutatja, hogy a kisebb fermentor hőcserélői ebben az állásban jobban takarják a fal menti részt. A várakozásoknak megfelelően a nagyobb átmérőjű keverőelemekkel magasabb áramlási sebességek érhetőek el, a keverőátmérő azonban csak korlátozottan növelhető. Az áramlási képre gyakorolt hatás tekintetében összefüggésbe hozható a keverőelemek távolsága és azok átmérője – célszerű, ha ez a két érték összemérhető.

További munkánk során a rendelkezésre álló idő és a modellek pontosságának függvényében nagyságrendileg vizsgálni lehet a fermentorokban kialakuló hőátadási viszonyokat. Az alkalmazott mikrobák általában rendkívül érzékenyek a hőmérsékleti egyenlőtlenségekre, ezért ezek a készülékek hőmérsékleti szempontból nagyfokú

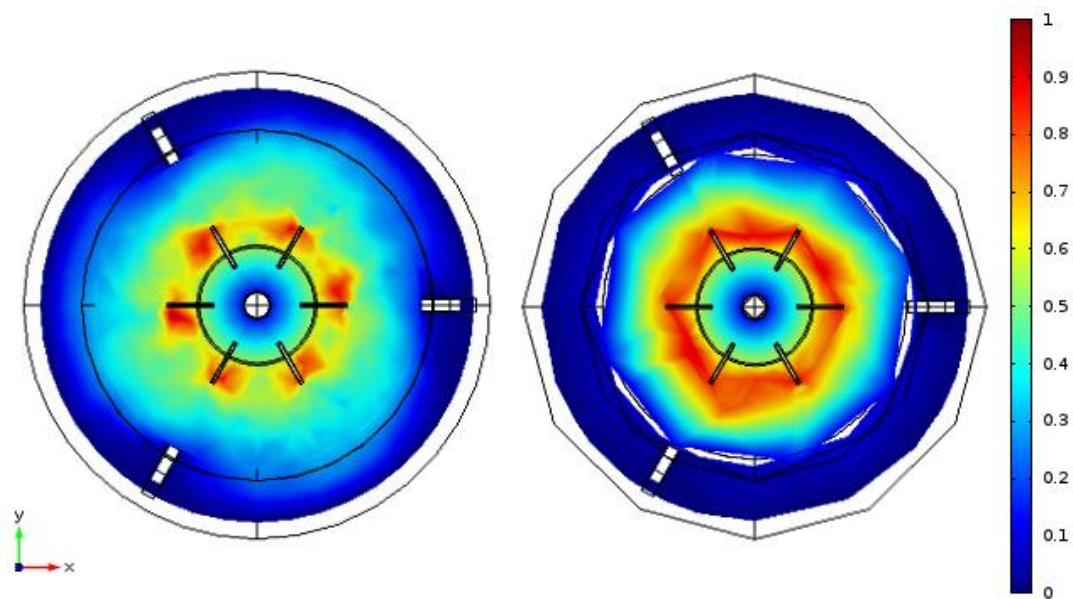
homogenitást biztosítanak, ezen feltételezés ellenőrzése újabb lehetőséget nyújthat például a modellek validálására, továbbá alkalmas a berendezések teljesítményének kvantitatív összehasonlítására, ezáltal pontosabb kép alkotható a geometriai viszonyok kevertségre gyakorolt hatásáról.

Irodalomjegyzék

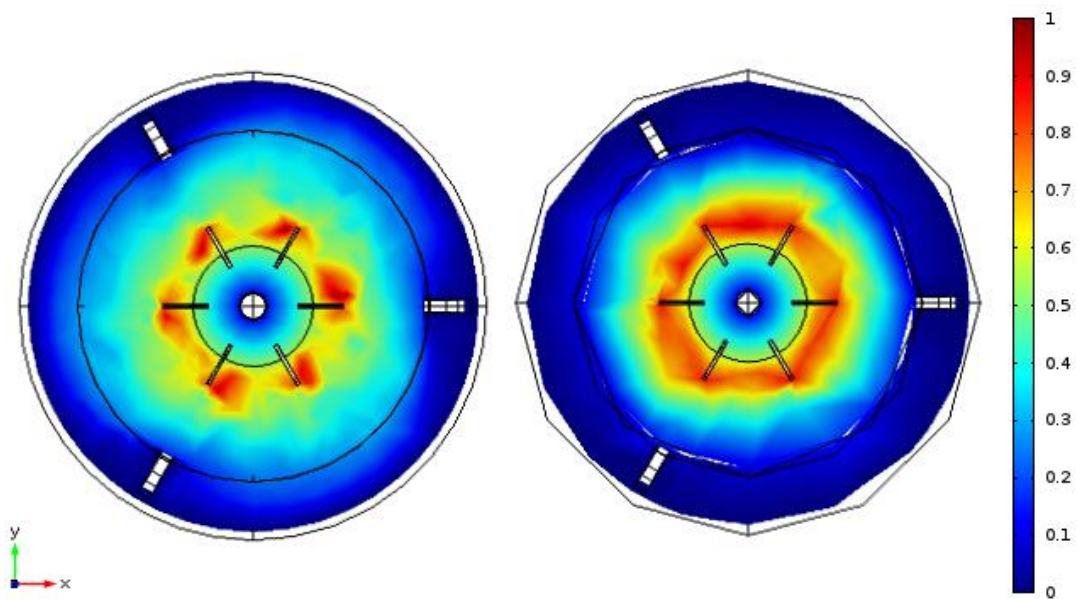
- [1] Sevelle, B. Biomérnöki műveletek és folyamatok. Typotex Kiadó, 2011.
- [2] Bakonyi, P. Bioreaktorok (előadás jegyzet). Pannon Egyetem, Veszprém, 2013.
- [3] Simándi, B. Vegyipari műveletek II. - Anyagátadó műveletek és kémiai reaktorok. Typotex Kiadó, 2011.
- [4] Szalai, E. S. és munkatársai. Mixing analysis in a tank stirred with Ekato Intermig® impellers. *Chemical Engineering Science*. **2004**, 59, 3793-3805.
- [5] Bakker, André. The Colorful Fluid Mixing Gallery. Rushton Turbine Vortices. 2000. [Hivatkozva: 2013. 03. 06.] <http://www.bakker.org/cfm/webdoc17.htm>.
- [6] Fayolle, Y., és munkatársai. Oxygen transfer prediction in aeration tanks using CFD. *Chemical Engineering Science*. **2007**, 62, 7163-7171.
- [7] Keseler, I. M., és munkatársai. EcoCyc: a comprehensive database of Escherichia coli biology. *Nucleic Acids Research*, **2011**, D583-90.
- [8] Vrabel, P., és munkatársai. CMA: integration of fluid dynamics and microbial kinetics in modelling of large-scale fermentations. *Chemical Engineering Journal*. **2001**, 84, 463-474.
- [9] Hyun Jung Kim, Jong Hoon Kim, Hyuck Jin Oh, Chul Soo Shin. Morphology control of Monascus cells and scale-up of pigment fermentation. *Process Biochemistry*. **2002**, 38 (5), 649-655
- [10] Fonyó, Zs. és Fábry, Gy. Vegyipari művelettani alapismeretek. Nemzeti Tankönyvkiadó, 2004.
- [11] Lane, G. L. and Koh, P. T. L. CFD Simulation of a Rushton Turbine in a Baffled Tank. CSIRO, 1997.
- [12] Benz, G. T. Agitator Design Principles for Pharmaceutical and Biotechnology Applications. PDHengineer.com
- [13] Zhao, J., Gao, Z. and Bao, Y. Effects of the Blade Shape on the Trailing Vortices in Liquid Flow Generated by Disc Turbines. *Chinese Journal of Chemical Engineering*. **2011**, 19 (2), 232-242.
- [14] Walas, S. M. Chemical Process Equipment - Selection and Design. Butterworth-Heinemann, 1990.
- [15] Aubin, J. and Xuereb, C. Design of multiple impeller stirred tanks for the mixing of highly viscous fluids using CFD. *Chemical Engineering Science*. **2006**, 61, 2913-2920.
- [16] Lu, W., Wu, H. és Ju, M. Effects of baffle design on the liquid mixing in an aerated stirred tank with standard Rushton turbine impellers. *Chemical Engineering Science*. **1997**, 52 (21-22), 3843-3851.
- [17] Bányai, I. Reológia, a koherens rendszerek tulajdonságai. [PDF] Debreceni Egyetem Kolloid- és Környezetkémiai Tanszék, 2009.
- [18] COMSOL 4.3 Documentation. COMSOL AB. 2012
- [19] Sánchez Pérez, J. A., és munkatársai. Shear rate in stirred tank and bubble column bioreactors. *Chemical Engineering Journal*. **2006**, 124, 1-5.
- [20] Phisalaphong, M., Srirattana, N. and Tanthapanichakoon, W. Mathematical modeling to investigate temperature effect on kinetic parameters of ethanol fermentation. *Biochemical Engineering Journal*. **2006**, 28 (1), 36-43

[21] EKATO HOLDING GmbH. VISCOPROP - Universal impeller for blending, suspension, heat transfer and dispersion. [Hivatkozva: 2013. 04. 27.] <http://www.ekato.com/en/products/product/show/Product/impellers/viscoprop/>

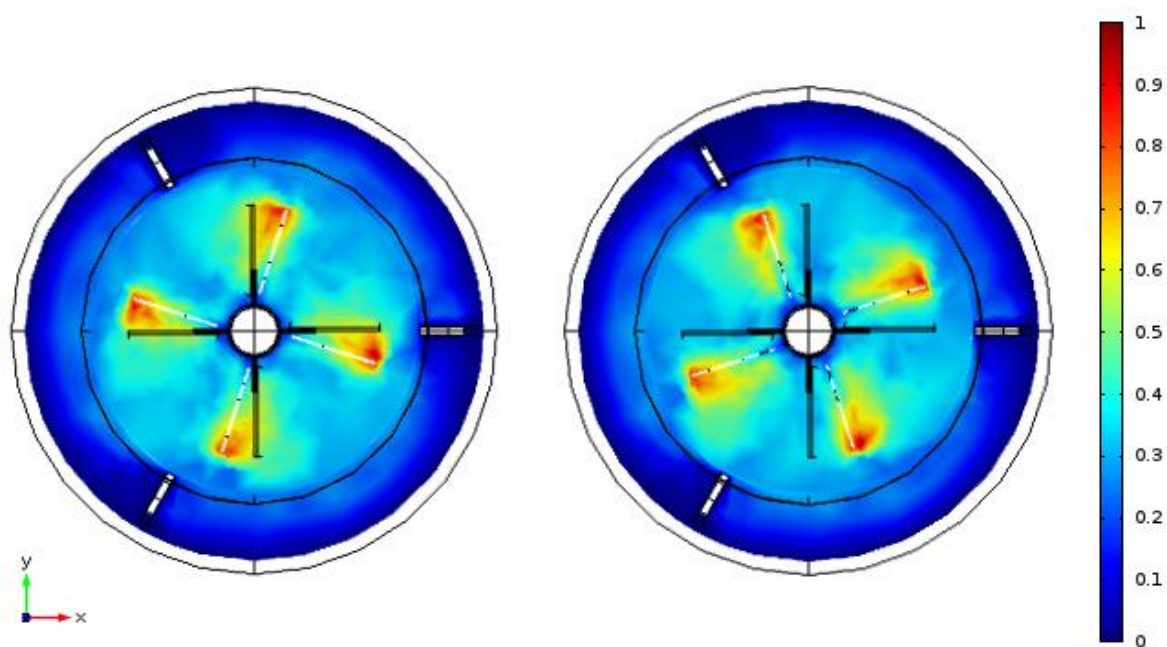
Mellékletek



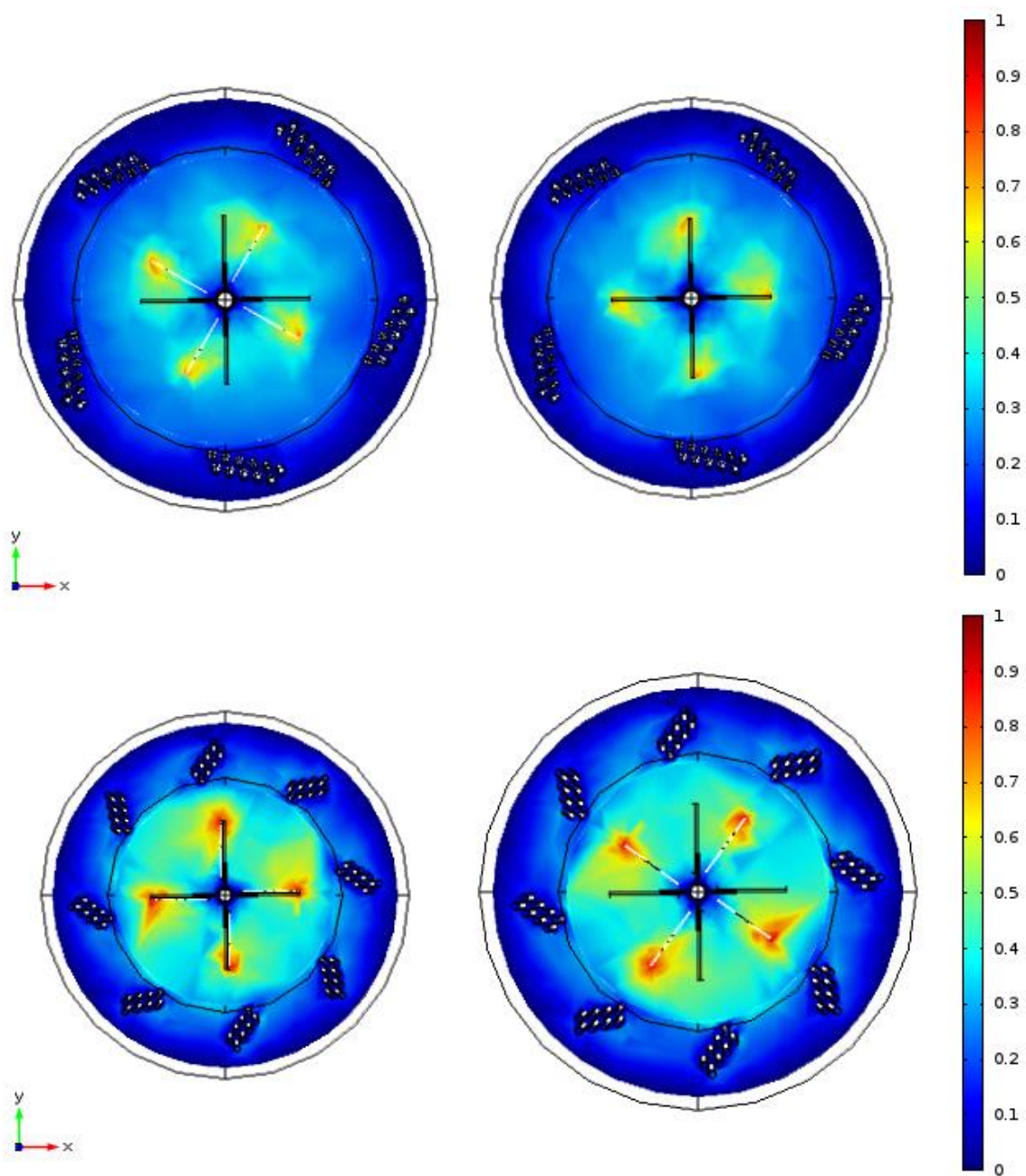
1. melléklet: KF 1 fermentor középső keverőelemének síkjában kialakuló sebességeloszlás
– balra: 500 rpm, jobbra: 750 rpm



2. melléklet: KF 1 fermentor felső keverőelemének síkjában kialakuló sebességeloszlás –
balra: 500 rpm, jobbra: 750 rpm



3. melléklet: KF 2 fermentor felső keverőelemének síkjában kialakuló sebességeloszlás –
balra: 220 rpm, jobbra: 330 rpm



4. melléklet: Üzemi fermentorok felső keverőelemeinek síkjában kialakuló áramlási kép –
felül: F 1 100 rpm, 150 rpm, alul: F 2 100 rpm, 140 rpm

Jelölések

Latin betűk jelentései:

B : látszólagos viszkozitási együttható [Pa s]

c : koncentráció [mmol dm⁻³; mol dm⁻³, mol m⁻³]

d : átmérő [m]

D : tartály átmérője [m]

D_i : keverőelem átmérője [m]

D_k : keverőelem átmérője [m]

D_{kev} : keverőelem átmérője [m]

d_s : keverőtárca átmérője [m]

D_t : terelőlemez szélessége [m]

D_T : tartály átmérője [m]

d_w : keverőszár átmérője [m]

ΔE : aktiválási energia [kJ mol⁻¹]

Eu : Euler-szám

H_b : keverőelem távolsága a tartály aljától [m]

H_L : folyadékszint magassága [m]

K : áramlási konzisztencia index [Pa sⁿ]

K_C : Casson-viszkozitás [Pa^{0,5} s^{0,5}]

K_{La} : eredő folyadékoldali tömegátadási együttható [h⁻¹]

L : hosszúság [m]

jellemző méret [m]

L_i : keverőlapát átmérője [m]

n : keverő fordulatszáma [s⁻¹; rpm]

n_b : terelőelemek száma

N : a keverő által a folyadékba időegység alatt bevitt energia [W]

keverő fordulatszáma [s⁻¹; rpm]

p : nyomás [Pa; bar]

Q_g : gázáram sebessége [m³ s⁻¹]

R : egyetemes gázállandó [$\text{J mol}^{-1} \text{K}^{-1}$]

Re : Reynolds-szám

t : idő [s ; h]

t_M : keverési idő [s ; h]

u : sebesség [m s^{-1}]

v : sebesség [m s^{-1}]

V : térfogat [m^3]

w_b : terelőlemez szélessége [m]

w_i : keverő magassága [m]

Görög betűk jelentései:

$\frac{dy}{dt}$: nyírási síkra merőleges sebesség gradiens [s^{-1}]

ε : egységnyi folyadéktömegben időegység alatt elnyelt energia [W kg^{-1}]

A : diffúzió mérettartománya [m]

μ : dinamikus viszkozitás [Pa s]

μ_{eff} : effektív viszkozitás [Pa s]

μ_X : fajlagos növekedési sebesség [h^{-1}]

ν : kinematikai viszkozitás [$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$]

ρ : sűrűség [kg m^{-3}]

σ : felületi feszültség [N m^{-1}]

τ : nyírási feszültség [N m^{-2}]

Köszönetnyilvánítás

Ezúton szeretném kifejezni köszönetemet mindazoknak, akik szakmai és bármilyen segítséget nyújtottak e dolgozat megírásában. Név szerint témavezetőimnek, Dr. Chován Tibornak, Dr. Varga Tamásnak és Egedy Attilának.

A kutatás a TÁMOP 4.2.4.A/2-11-1-2012-0001 azonosító számú *Nemzeti Kiválóság Program – Hazai hallgatói, illetve kutatói személyi támogatást biztosító rendszer kidolgozása és működtetése konvergencia program* című kiemelt projekt keretében zajlott. A projekt az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósul meg.