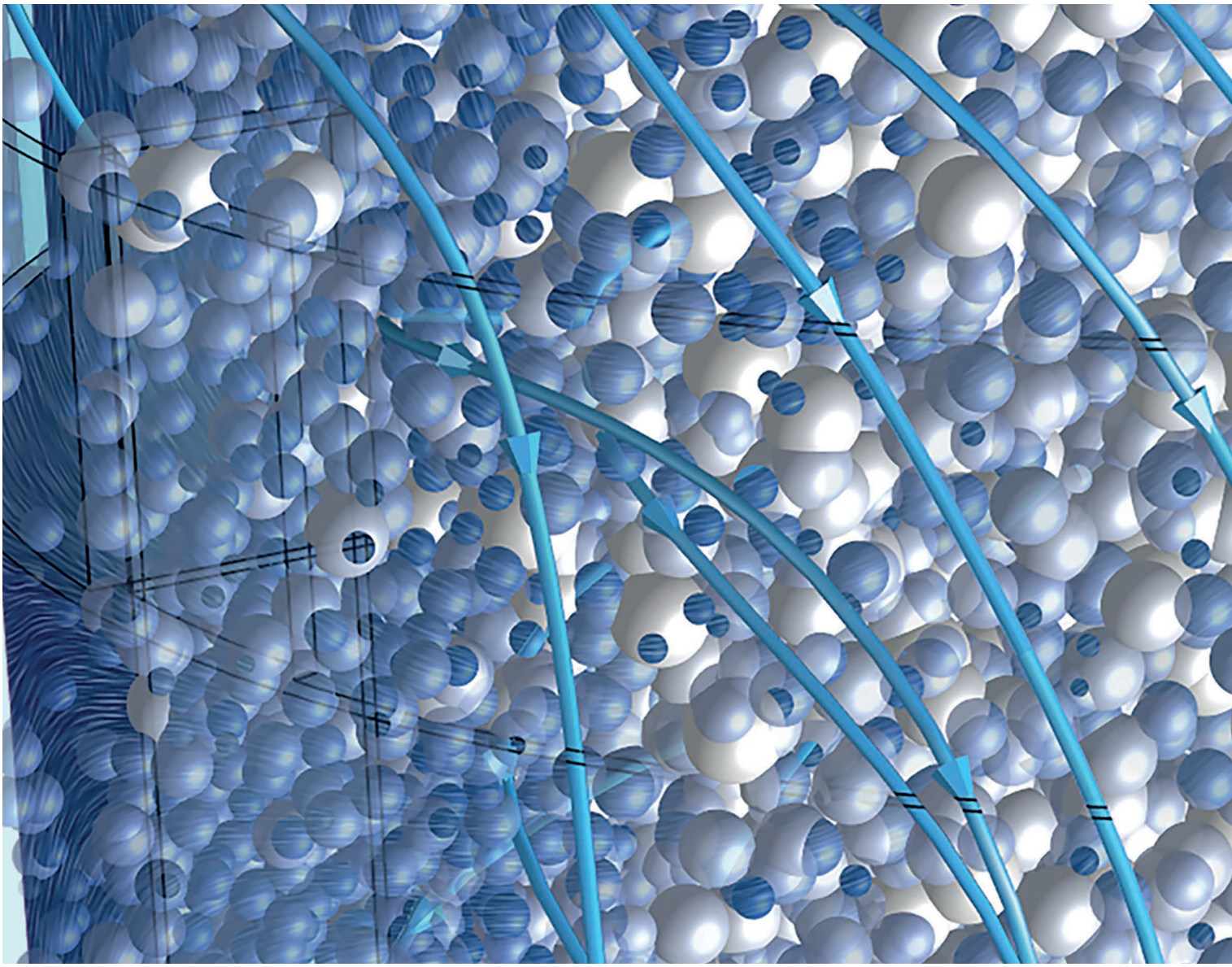
SIEMENS
Ingenuity for life

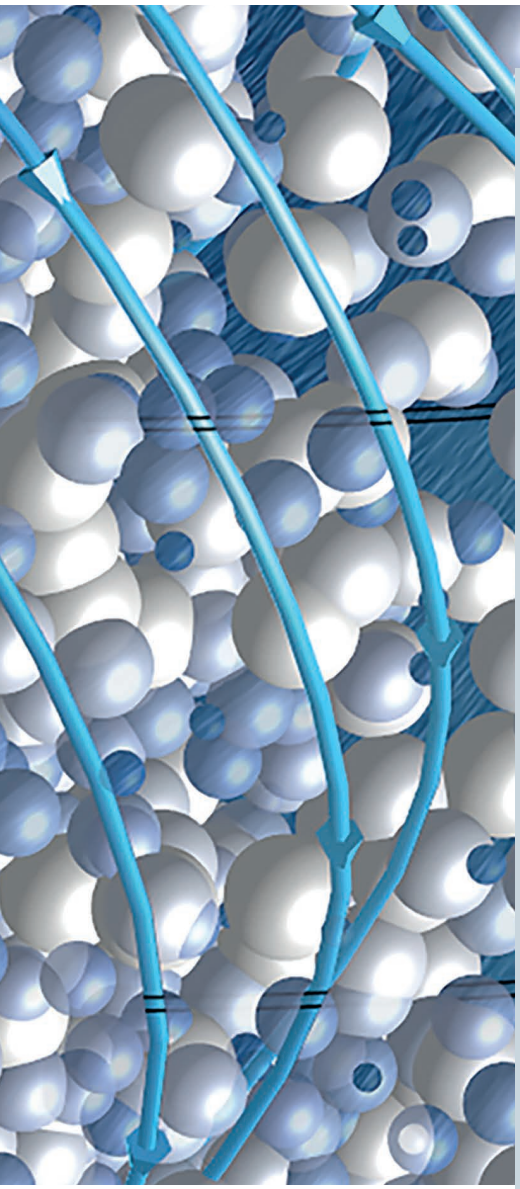
Siemens Digital Industries Software

更快探索更出色的设计

化学加工行业的多学科仿真与设计探索

siemens.com/plm





目录

简介	04 - 05
Simcenter STAR-CCM+ Mixing Vessel Workflow : 因为有时候您希望“搅动，不要摇动”	06 - 07
工艺创新中心展望未来	08 - 09
从微观到宏观 / 从实验室到工厂	10 - 11
通过 Simcenter STAR-CCM+ 打造虚拟工厂	12 - 15
通过仿真改善多层聚酯薄膜的层控制	16 - 21
活性药物成分连续生产的数字仿真	22 - 25
压片和包衣的数字仿真	26 - 29
CFD 为疫苗生产保驾护航	30 - 35
这里的温度在升高! Zeeco 公司使用 Simcenter STAR-CCM+ 揭开加热器运转失常的真正原因	36 - 39
拾取不良振动 : Porter McGuffie 解决加热器振动问题	40 - 43
燃烧工程师简的日常一周	44 - 49
从料滴到瓶子 : 保特罗对完整的玻璃成型工艺进行仿真	50 - 55
激光焊接仿真缩短设计周期，帮助欧文斯科宁优化组件设计	56 - 61
JFE Techno-Research 引领日式制造仿真潮	62 - 65
混合行业 : 通过微调或设计探索实现节约?	66 - 71
Simcenter STAR-CCM+ 为皮埃尔葛安提供竞争优势	72 - 75
流化催化裂化装置的计算分析	76 - 81

简介

拉文德拉·阿格拉夫 (Ravindra Aglave)
化学加工行业总监

化学加工行业使用各种各样的原材料来制造功能性产品。这些材料是其他众多行业研发新功能的基础，例如，智能手机上使用的触敏玻璃，输油管需要的缓蚀剂，汽车喷漆和泡沫塑料，还有飞机上使用的碳纤维。

从历史上看，人类文明之所以能够进步，正是因为人类有能力发现、加工和应用各种新材料，并用这些材料制造人们日常生活中必不可少的各种家用工具和电器，以及交通运输工具。化学加工工程专用技术始于石器时代，经过铜器时代和铁器时代的发展，一直延续并传承至今。事实上，在电影《毕业生》中，有一个词很好地概括了这种发展，那就是“塑料”。

通过反应将相对低价值的原材料转化为高价值的材料，并分离出废料和无用产物——这就是化学工业中任何一项工艺的基本概念。过去，这些工艺的设计和细节大多是基于经验完成的。化学工程作为一门科学和工程的一个分支，诞生于 20 世纪初，当时随着一战和二战的爆发，对橡胶、燃料和爆炸物等材料的需求量出现了大幅增长。人们编写了基本方程式来描述化学工业过程，并补充了相应的实验，用它来推导难以用数学描述的一些现象的相关性。在那个时期，化学工艺工程师主要有三大法宝：实验、分析计算和经验。

随着计算机的出现，20 世纪 70 年代诞生了第一个工艺仿真工具。到了 20 世纪 80 年代，在航空航天和汽车行业的引领下，又发展出了新的数字分析方法。这就是计算流体力学 (CFD)，工程师们借助 CFD，可以测试自己的“原始”设计，而且不需要制作物理原型就可以加以验证。CFD 在汽车和航空航天行业中的应用得到了飞速发展，因为这些学科中的相关设计受流体流动和热传递的影响非常大。相比之下，化学工业中的创新主要由分子化学推动。

此时，人们对化学过程中涉及的微观过程还不甚了解，无法创建 CFD 模型。然而，近年来，学术界在这方面开展了许多重大研究，推动了微观模型的发展，使得更深入、更广泛的应用成为可能，尤其是在燃烧反应领域（应用于内燃机或其他方面）。与此同时，对诸多其他过程的研究也在如火如荼地进行着，如结晶和冷冻干燥等。这种快速的研究步伐也体现在我们对 Simcenter STAR-CCM+ ™ 软件的快速开发上。在短短的几年时间里，我们实现并验证了一系列全新功能（还有更多功能即将实现），使软件的能力实现了巨大飞跃。如今，Simcenter STAR-CCM+ 基本上跨越了宏观传输过程（质量、热量和动量传递）与微观化学过程之间的鸿沟，使工程师能够研究宏观过程对产品质量和产量的影响。

借助 Simcenter STAR-CCM+，仿真经验有限但工艺知识丰富的工艺工程师也能轻松进行仿真。通过将 Simcenter STAR-CCM+ 与混合专用工具 Simcenter STAR-CCM+ Mixing Vessel Workflow 结合使用，还形成了一个虚拟工艺设计与开发平台。随着能力的逐步演进，当 CFD 仿真在化学工业中的应用变得像当前的过程仿真一样普遍时，这丝毫不会让我觉得诧异。毋庸置疑，它将为企业创造以下价值：

- 根据工艺需求，自由测试各种新颖的概念
- 在实际操作条件和规模下测试创意和解决方案
- 根据初步设计和中试知识扩展流程

如今，更多的工程师能够受益于从仿真中获得的见解。正如现在许多工艺工程师大学毕业时便拥有工艺仿真工具方面的经验，我们期待未来的毕业生在从业时不仅能掌握工艺仿真的部署知识，还能够对 CFD 和离散元方法 (DEM) 仿真有充分的了解。这种知识和技能的大量涌入将有助于提高整个行业的成本效益并减少污染，并最终将创新水平推向新高。

“借助 *Simcenter STAR-CCM+*，仿真经验有限但工艺知识丰富的工艺工程师也能轻松进行仿真。”

Simcenter STAR-CCM+ Mixing Vessel Workflow：因为有时候您希望“搅动，不要摇动”

拉文德拉 · 阿格拉夫 (Ravindra Aglave)
化学加工行业总监

结缘马提尼

我与混合概念的情缘始于小时候看到的第一部邦德系列电影。詹姆斯在点马提尼时对酒保说道：“摇动，不要搅动!”(Shaken, not stirred!)。那时候，我并不明白为什么他不希望马提尼被搅动或完全混合。这就相当于一个底部是圆锥的容器中有一个叶轮，液面在容器高度的三分之一处。为了简化，我们可以使用一个被动标量来代表第二种液体。军需官 Q 完全有能力制造出一款可以安装在邦德的 iPhone 或其他装备上的设备。我的工程天赋在小时候就显露出来了。混合鸡尾酒在我的家乡并不常见，因此，关于延迟混合对味道的影响，以及随后酒精在舌尖上的蒸发之感，那时的我对此一无所知。但每次看邦德系列电影时，我都会等待那一刻。

解决工程问题

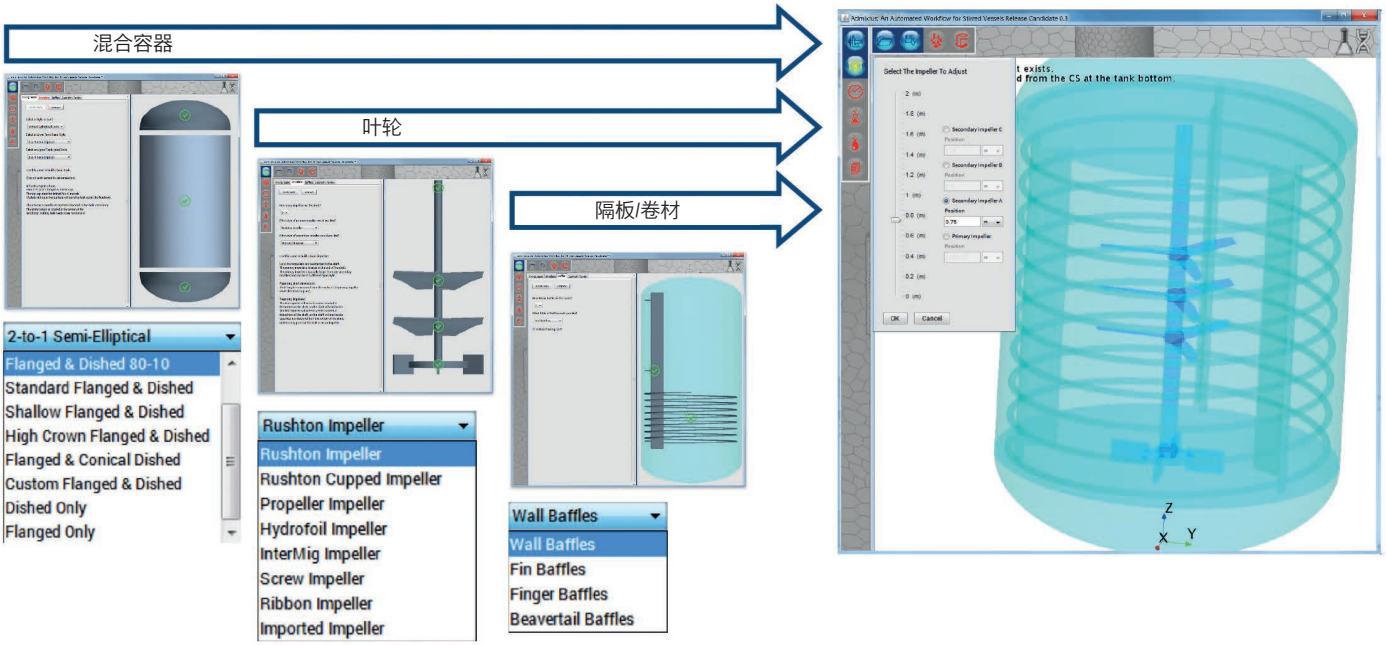
我对这背后的原理——尤其是化学相互作用——非常着迷，这使我最终成为了一名化学工程师，并主攻反应 / 燃烧领域。如今，混合问题往往伴随着更严肃、更专业的需求出现。通过学习建模和 CFD 仿真，我得以从根本上了解这些现象。对于搅拌容器中的混合操作，从几何和材料数据的基本信息到真正开始仿真，这之间有很长的路要走。那么，像 Q 这样一个将虚拟和实际原型制作相结合的天才，会如何解决这个问题呢? 他会遇到障碍吗? 或许他会面临以下问题：

- 创建稍微复杂的几何会非常耗时
- 学习曲线陡峭，因为缺少一套良好的实践
- 成熟用户在转向其他领域时不会丢弃先前的知识
- 后期仿真分析非常耗时

多点仿真

正是多点仿真，推动我和我的同事们构思、设计并打造出了一款可用于执行混合仿真的虚拟产品开发 (VPD) 工具——Simcenter STAR-CCM+ Mixing Vessel Workflow。它能够无缝地引导用户完成必要的步骤。

在每一步，用户都可以输入手头的信息，如几何参数、所选网格类型、材料属性等。借助这个工具，用户可以即刻创建很多标准叶轮类型，也可以导入计算机辅助设计 (CAD) 几何。与此同时，用户还可以设置多相 (G-L、S-L、混相 L-L) 仿真，而系统可自动选择最佳实践值。如果需要，用户也可以设置单点或多点喷淋器。用户还可以选择直接在 Simcenter STAR-CCM+ 中通过创建的 SIM 文件对设置进行任何调整。



加速实现更加卓越的设计!

关键价值来自两个方面 :

1. 对典型绘图、轮廓等的结果自动进行后处理。这将与示踪剂分析功能相结合。所有结果均将导出到 Excel 中，以便进一步分析。
2. 创建的几何会自动实现参数化。这意味着，用户仅需选择几个下拉菜单并点击几下，即可运行设计空间探索研究。

如果化学或工艺工程师（没有仿真经验或 CFD 背景知识）想要参与到混合流程的设计、开发和扩展中，那么不妨现在开始!无论是负责运维、工程、开发还是研究的工程师，抑或是活跃在现场力求解决问题并优化工艺的工程师，Simcenter STAR-CCM+ Mixing Vessel Workflow 都能为他们扫清障碍。有了 Simcenter STAR-CCM+ Mixing Vessel Workflow 的支持，工程师们能够将仿真作为一款现代工程工具引入到现有的问题解决工具集中，并借助 Simcenter STAR-CCM+ 中丰富的多物理场功能的优势，不断扩展其适用性。如果詹姆斯 · 邦德是一名工程师, 而不是一名狡猾的间谍，那么他一定会说:“搅动，不要摇动!”

工艺创新中心展望未来

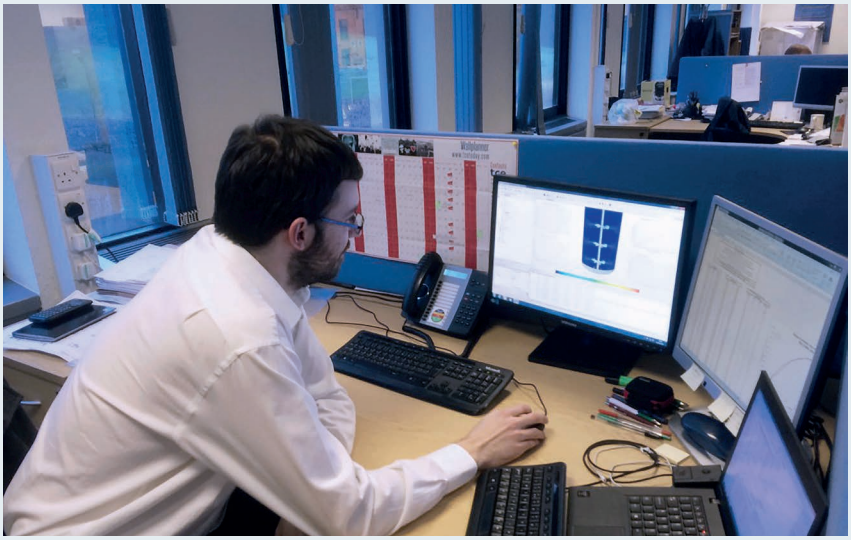


图 1：工艺创新中心高级工艺工程师亚历克斯 · 史密斯 (Alex Smith)。

最近，我与工艺创新中心 (CPI) 的亚历克斯 · 史密斯进行过交流。CPI 是英国的一家技术创新中心，致力于将科学和工程知识融入先进的设施，帮助客户设计和升级到新一代产品和流程。亚历克斯是 CPI 的一名新成员，加入 CPI 即将满一年。作为 CPI 工业生物技术和生物精炼 (IBandB) 部门的一名高级工艺工程师，他很快就熟悉了仿真工作。目前，他主要负责提升该中心在模型开发和未来用户培训方面的 CFD 能力，并开发一些更“标准”的工艺工程任务，例如工厂改进和故障排除演练等。

这听起来就是一种非常有意义而且可持续的仿真能力开发方法，对于一家首次投资 CFD 仿真的公司而言，尤为如此。我向史密斯询问过 CPI 决定投资 CFD 仿真能力的原因。他回答道：“像我们这样的公司，为了协助客户开发令人振奋且往往不同寻常的新工艺，至关重要的一点就是要掌握尖端的工具和技术，这样才能帮助客户获得最佳结果。考虑到这一点，公司决定将重心放在提升我们的建模和仿真能力上，而引入 CFD 建模只是我们不断拓展能力的一部分。”

仿真理念

当被问及 CPI 的仿真理念时，史密斯不厌其烦地指出，CFD 是一种基于传统专业知识的工具，它能够支持和补充传统专业知识，但无法彻底取代传统知识：“在选择试运行条件时，我们主要依靠技术和运营团队的经验与判断。借助经过验证的设备模型，我们可以在试运行前进一步了解可能的结果，并为有经验的人员提供额外的工具和信息，帮助他们选择最合适的试验以继续运行。”

同样，CPI 的 CFD 仿真也用于改善物理测试，而不是取而代之：“基于计算机的仿真无法取代实际测试，”史密斯说道，“建立模型的目的是改善现场测试的重点，帮助用户在测试开始前了解设备的运行情况，从而提高整个流程的效率。这可以为现场测试提供更合适的切入点，并避免在设备上运行不必要或不合适的试验，从而节省时间。”

未来发展

尽管 CPI 在 CFD 领域尚处于起步阶段，但史密斯和他的团队对于整个企业的 CFD 能力在未来的发展已经有了一个清晰的愿景：“CPI 第一次应用 CFD 建模是为现有设备生成经过验证的模型，以加深我们对当前运行的设备的了解，使我们能够对超过工厂现场现有规模的其他规模进行仿真。我们最开始的重点是开发能够准确预测搅拌式反应器中混合行为的模型，而在未来，我们还将研究传氧和其他关键工艺属性。”

最终，CPI 的目标是将 CFD 建模的应用从 IBandB 扩展到公司的其他业务部门。CPI 的不同业务部门在不同的领域开展业务，因此他们使用的仿真软件必须具有出色的适应性，能够覆盖范围

广泛的条件和问题。史密斯表示：“在 IBandB 内部，我们的长期目标是将 CFD 建模作为一款用于验证创新型反应器设计的工具，同时将相关套件用于故障排除和整体工厂性能改进。”

亚历克斯指出，在像 CPI 这样的公司工作最有趣的一点是，你永远不知道接下来会发生什么。他补充道：“我们公司的目标是帮助相关人员和企业开发从实验室到生产规模的流程，因此真正的挑战在于不断适应来自各大院校和中小企业的新流程和想法。”

为何选择 Simcenter STAR-CCM+？

在选择 CFD 供应商之前，史密斯和 CPI 团队对五花八门的软件进行了精心挑选，最终选择了 Simcenter STAR-CCM+ 软件。史密斯说道：“Simcenter STAR-CCM+ 中的一些功能对我们来说非常实用，例如，通过在解决方案开发过程中进行实时监控，我们能够快速查看模型是否符合要求，而无需等待试运行结束，这为我们节省了大量时间。” CPI 的用户也对套件的易用性印象深刻：“一站式窗口理念使得一切都井井有条，使用起来非常直观，” 史密斯说道。

快速的产品开发步伐以及基于客户需求开发项目的意愿 (IdeaStorm) 令 CPI 受益匪浅。史密斯这样说道，“我们见证了软件功能的持续改进，回顾之前的版本，我们不难发现，每一新版本都融入了新的实用功能，而不是只做表面功夫。” 他还表示，拥有一名专职支持工程师 (DSE) 对他们而言尤为重要：“我们可以确信在自己需要技术支持时，我们的工程师能够充分理解我们的需求。”

当被问及是什么让 Simcenter STAR-CCM+ 杀出重围并赢得 CPI 的青睐时，史密斯毫不犹豫地说道：“对我们来说，这不一定关乎物理模型，更重要的是能够动态调整这些模型，并实时监控这些调整对解决方案的影响。这样一来，在运行模型时，我们便可以细化物理条件和模型选择，并即时查看细化的效果。加之 Simcenter STAR-CCM+ 强大的后处理能力，我们能够更快地开发出逼真的模型，而无需进行耗时的迭代来优化网格和物理设置。”

图 2：CPI 的工业生物技术和生物精炼设备 (IBandB)。

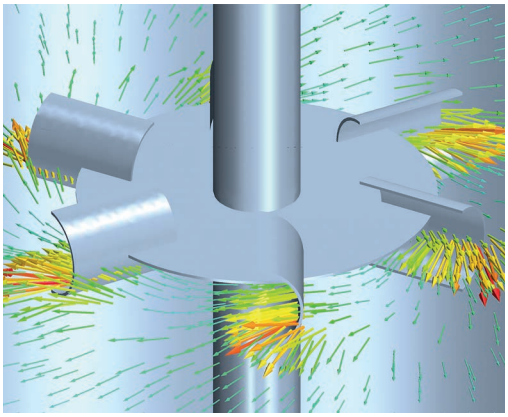


图 3：使用 Simcenter STAR-CCM+ 预测混合罐叶轮周围的三维流动模式。

从微观到宏观 / 从实验室到工厂

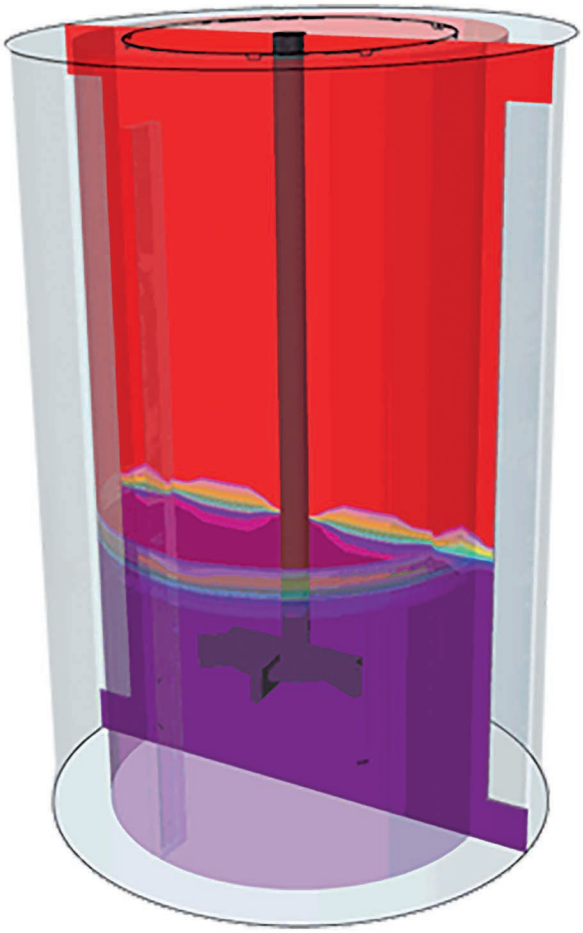
任何一个养育过孩子的人都知道，育儿（无论任何形式）是一个不断进阶升级的问题。每个孩子都是许多错综复杂的变量相互作用的产物。一些显而易见的变量包括：喜好、性情、学习偏好以及情感、社交和生理需求。这些都不是一成不变的，它们会随着孩子的成长而发生变化。大多数人应对这一挑战的方法是从更有经验的父母和看护者身上获取经验和支持，阅读育儿方面的书籍，或者最常见的是，从失败中汲取教训。

如果我们将孩子称作系统（请不要告诉我的妻子我这样说），那么最基本的要求的就是要理解系统的行为。不幸的是，与工业扩展问题不同，该系统遵循的不是任何物理规则，而是更加难以捉摸的心理学规则。

无论哪一种方式，我们都可以基于工艺的预期结果来预测扩展后系统的行为。说回孩子，就是您希望自己的孩子长大后有什么样的表现？这种行为与控制系统的物理学有着千丝万缕的联系。然而，与试图在控制系统的变量之间建立关系相比，更为常见的做法是执行试错过程以理解系统行为。尽管无法对人进行试错，但对给定的工业系统而言是切实可行的，虽说这也有一定的难度。我们可以采用多种方式来实现，例如，使用一维模型，在其中只考虑一部分物理特性，而假设其余部分均处于理想状态（就好像一个孩子学会了阅读和写作，那么理想情况下，他 / 她将能够与人交流）。

或者，我们也可以深入到更详细的三维级别（例如，一个人需要学习阅读和写作，但同时也要了解如何才能与各类人进行有效的交流）。

上面的例子相当于设计添加了两个流束的设备。我们可以将其设计为根据一维反应模型进行反应。潜在的假设是这些流束应以理想的方式混合在一起。您现在应该能意识到，这与现实相去甚远，就像您不能期待一个人学会了阅读和写作就一定能很好地交流一样。下面我们进一步加大这个比喻的复杂度。阅读 / 写作技能是一种微观现象，而沟通技能则是一种宏观现象。宏观层面上的沟通程度决定了微观层面上需要哪些变量或技能。我们可以试着想象一下工业



结晶器中的结晶过程，其中晶体的形成取决于浓度、剪切力等微观变量。宏观上的整体流动和热传递影响着微观上必要变量的控制方式。化学和相关行业中的几乎所有过程都由宏观和微观现象构成，几乎都需要从实验室环境到工厂环境的这一步扩展。业务情况决定了工厂应产出怎样的产品，研究驱动着微观现象如何影响和控制特定过程，而仿真则满足了扩展的需求。

有很多例子和方法展示了如何成功利用仿真，特别是对于难以理解的过程和孩子。它或许也扮演着父母的角色。

通过 Simcenter STAR-CCM+ 打造虚拟工厂

计算流体力学 (CFD) 是用于设备和工厂详细设计的成熟工具。数字仿真的主要优点在于，它可以生成三维流体信息来探索各种优化可能。利乐奶酪和奶粉系统 (CPS) 就使用 Simcenter STAR-CCM+ 软件来执行该过程。

虚拟工厂

专业的工程和仿真软件是至关重要的创新工具。如今在利乐奶酪和奶粉系统中，基础工程（从过程中收集关键数据）和详细工程（设计并优化工厂的管道和各个组件）都是通过计算机辅助工程 (CAE) 进行的。借此，利乐奶酪和奶粉系统能够获得工厂的数字表示，理想情况就是获得 3D CAD 模型。

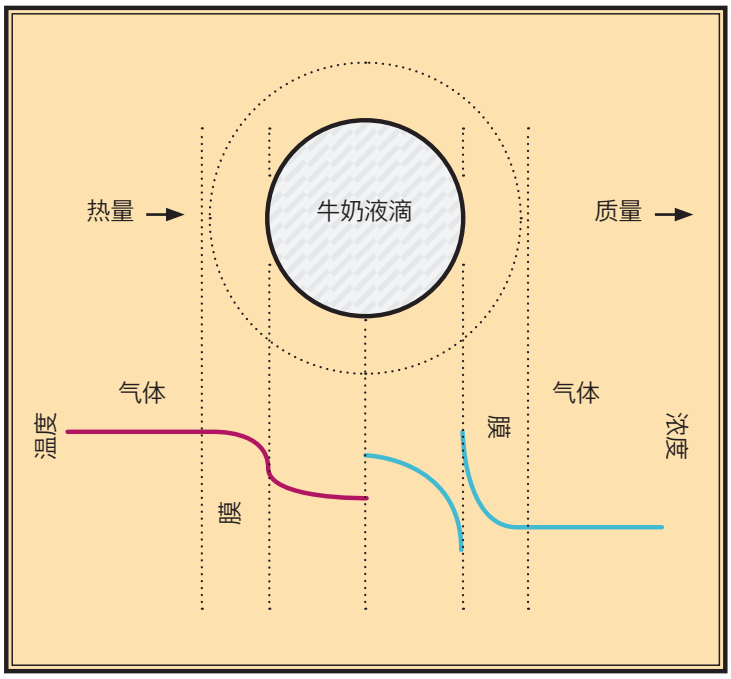
借助 CAE，现在能够以虚拟方式进行以前需要复杂的实验室或试验工厂才能完成的实验，从而更轻松地比较备选方案，执行边际分析，并最终实现优化。这能够显著加快从创意到产品的开发周期，大幅节省时间，并避免成本高昂的物理实验。

CAE 大展身手

CAE 能够提供一种高效、经济的设备和工厂优化方法，这是利乐公司决定使用该工具的一项决定性因素。这是因为他们的客户——食品行业的经营者——非常重视持续改进：他们的目标是在日益精简的工厂中生产更出色的产品，同时降低生产、运营和服务成本。

利乐奶酪和奶粉系统使用的工具之一是 Siemens Digital Industries Software 推出的 Simcenter STAR-CCM+。正如利乐奶酪和奶粉系统研发 (R&D) 经理阿尔弗雷德 · 琼斯玛 (Alfred Jongsma) 所说：“我们积极使用 Simcenter STAR-CCM+ 开展各种设计优化、故障排除和研发项目。”

Simcenter STAR-CCM+ 采用独特的设置方式，用户可以轻松上手。



喷雾干燥器中的干燥过程(热量和质量传递)。

该公司将 Simcenter STAR-CCM+ 广泛应用于诸多领域，例如，研究蒸发过程中的非牛顿流体流，最大限度减小降膜蒸发器中的压力损失，优化分离器的分离效率，优化喷雾干燥器中的气流，以及分析干燥器出口处的废热回收情况。

喷雾干燥器：生产奶粉

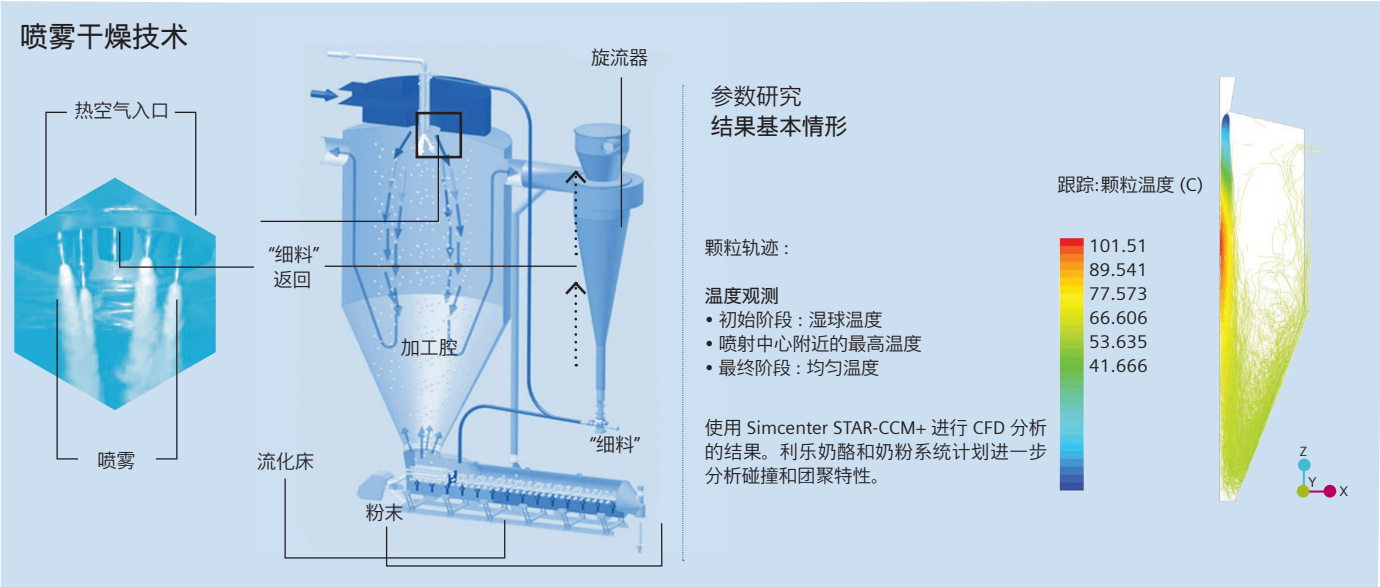
喷雾干燥器基于表面扩大原理，其中牛奶或乳清等液体产品能够通过温度介于 150 到 250℃之间的热气流雾化成细小的液滴。液滴在下落过程中被干燥，暴露在气流中的时间仅为 0.5 到 1 秒。

操作员只会获得高质量的固体产品，在保持较小颗粒尺寸的同时，最大限度减少可能的液滴尺寸分布。喷雾干燥器的尺寸取决于干燥时间（下落时间）和所需的液滴 / 颗粒尺寸。正如琼斯玛所说，这让他们获得了令人惊异的尺寸：“典型的喷雾干燥器体积为 700 立方米（直径：8.5 米；高度：20 米），每小时处理 5 吨牛奶或乳清，功率为 5 兆瓦。能效介于 40% 到 65% 之间，因此每一步优化都是值得的!”喷雾干燥器具有以下重要参数：

- 化学成分和初始浓度
- 热气流的温度
- 液滴和空气的混合属性
- 运动路径和团聚特性

低输出喷雾干燥器生产速率 1,000 千克 / 小时 (kg/h)。典型工厂的输出功率为 5 兆瓦，产量为 5 吨 / 小时。

Tetra Pak CPS :
利乐奶酪和奶粉系统，专业生产奶酪制作设备，并提供成熟的蒸发和干燥粉末技术解决方案。利乐奶酪和奶粉系统隶属于利乐旗下，后者是世界著名的食品加工和包装解决方案公司。我们与客户和供应商密切合作，提供安全、创新和环保的产品，每日可满足全球 170 多个国家 / 地区数亿人的需求。我们在超过 85 个国家 / 地区拥有近 22,000 名员工，以负责任的理念引领行业，并坚守可持续的业务发展模式。我们的座右铭 “PROTECTS WHAT'S GOOD ™”（保护好品质）印证着我们让安全食品随处可得的愿景。



喷雾干燥器设计。

仿真的质量取决于基础模型的准确性，即相关的物理、化学和技术流程的数字描述与实际情况的吻合度。此外，为了确保快速优化，仿真设置和执行应该简单、直观且高效。Simcenter STAR-CCM+ 具有无与伦比的网格划分技术、高保真的物理特性和简单易用的界面，能够满足所有这些要求。琼斯玛证实，产品期望与现实情况高度吻合，他表示，“我没办法定量说明，但我可以说，我对套件本身、相关工作流和提供的支持非常满意。虽说目前通过 CFD 进行描述（物理特性）确实仍存在一定的局限性，但我看到了 Simcenter STAR-CCM+ 功能的稳步改进。这一切之所以能够实现，离不开世界各地众多研究所的研究成果，并且这一趋势在未来一段时间内仍将持续。”琼斯玛继续说道：“总体而言，我可以说，通过积极使用 CFD，我们显著加深了对喷雾干燥器复杂物理特性的理解。现在我们对有利于喷雾干燥器运行的条件有了更多了解。我们的目标是优化喷雾干燥器的输出，并最大限度减少污垢。污垢会限制喷雾干燥器的运行时间，几周便需清理一次。此外，最大限度减少污垢对容量也有积极影响。我们优化了进入系统的气流以及引入液体的方式（通过高压喷嘴）。”我们可以清楚看到这为客户带来的好处：生产能力提升，粉末质量得到改进，同时延长了喷雾干燥器的必要清洁间隔时间。

制胜法宝：Simcenter STAR-CCM+

Simcenter STAR-CCM+ 在单个集成套件中提供了全面的工程仿真功能。Simcenter STAR-CCM+ 不仅是一个 CFD 求解器，它还是一个可解决（流体或固体）流动、热传递和应力问题的完整工程流程。尽管这听起来颇为复杂，但实际上，它非常实用，也很容易上手，正如琼斯玛所说：“这一点一再得到印证：即使只基于相对简单的模型，由计算机控制的仿真也能带来惊人的结果。Simcenter STAR-CCM+ 采用独特的设置方式，用户可以轻松上手。创建网格、执行仿真以及分析结果均在同一个界面中进行。此外，我们可以在运行仿真时执行后处理，这有助于实现收敛解算。”

通过仿真改善多层聚酯薄膜的层控制

简介

书籍、电路板、太阳能电池板、新鲜食品、冷冻食品以及驾照有什么共同点?这些东西已经渗透到我们日常生活的方方面面，普遍到我们几乎不再有感觉。答案就是聚酯薄膜——上个世纪最普遍、最实用的创新成果之一。聚酯薄膜可广泛应用于各大领域，包括光伏、包装、建筑、医疗保健、成像和电子产品等。杜邦帝人薄膜 (DTF) 公司早在 20 世纪 20 年代和 30 年代便开始了革命性研究，一直走在普及这种多用途产品的最前沿，引领了尼龙和聚酯薄膜的发现和发展。如今，DTF 是普通聚对苯二甲酸乙二醇酯 (PET) 和聚萘二甲酸乙二醇酯 (PEN) 聚酯薄膜的全球领先生产厂商，不断推动着聚酯薄膜的产品和工艺创新。

本文总结了 DTF 如何利用数字仿真对多层膜 (MLF) 的层结构和控制进行研究，其研究结果将直接应用于量产工厂。DTF 与伯明翰大学化学工程系开展合作，利用数字仿真进一步了解用于生产 MLF 的共挤出工艺。当不同的聚合物熔体层第一次在以下设备中聚集在一起时，便会形成 MLF：i) 连接到末端进料模头的喷射块，或 ii) 多流道模头 (MMD)。这项研究为整个行业带来了深远影响和诸多益处，并因此得到了工程和物理科学研究委员会 (EPSRC) 的大力赞助。

聚酯薄膜生产

一般来说，聚酯薄膜是使用挤出工艺制成的，其中聚合物被挤出到冷却流延鼓上以制造出聚合物薄膜，然后使用拉延工艺拉伸该薄膜。随后，薄膜在高温环境中在张力作用下结晶，并形成最终的形状和分子取向。聚酯基 MLF 是 DTF 产品组合的主要组成部分。当不同的聚酯熔体（一种温度高于其玻璃化 / 结晶温度的聚合物液体）在共挤出过程中聚合在一起时，便形成了 MLF。MLF 可用于反射膜、数据存储、卡片和光电池等。在 DTF，相异的多个聚合物熔体层在连接到模具的喷射块或 MMD 中形成单一的 MLF 结构。在喷射块中，熔体在整个模具中扩散之前彼此组合，而在 MMD 中，熔体在扩散之后进行组合。图 1 显示了 DTF 生产的典型

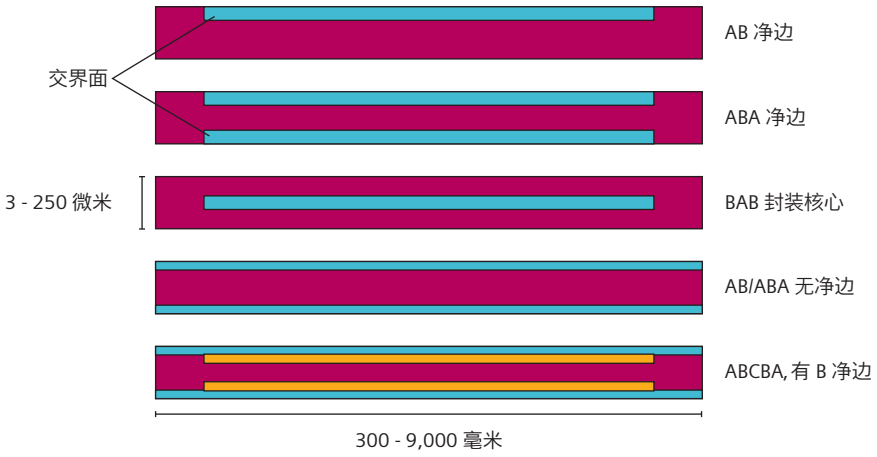


图 1：典型的 MLF 结构。

MLF 结构，其中 A、B 或 C 代表 MLF 中的独立聚合物层。在加工这种 MLF 的过程中，关键在于熔体在整个模具中的扩散。扩散后，薄膜经过冷却以及前向和横向拉伸，就形成了最终的聚酯薄膜。MLF 通常厚 3-250 微米，长约 300-9,000 毫米 (mm)。

典型的生产工艺会在分发之前修剪边，通常修剪较薄的辅助层成本较高。辅助层还有可能污染修剪夹，导致高昂的维修费用。因此，理想情况是在端部具有主要层净边（在业内称为净边）。而由于多种多样的熔体层的厚度和熔体流属性各不相同，因此控制单个熔体层和边缘的宽度和厚度变得日益困难；这种情况下，关键就在于进行正确的层控制，确保在提升产品性能的同时减少成本高昂的实验。

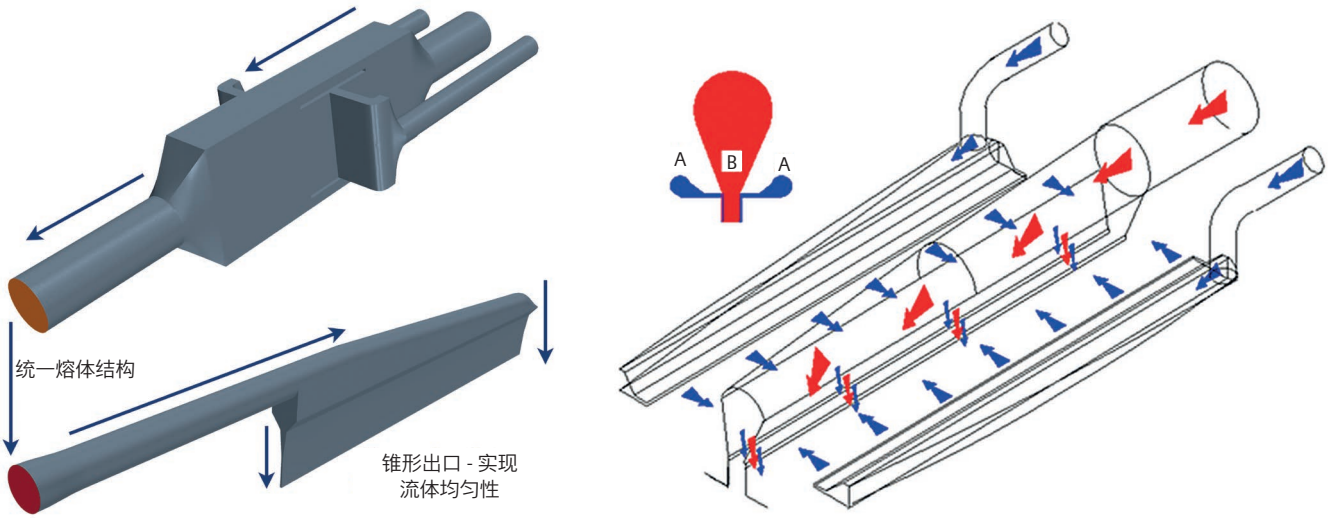


图 2：常见的 DTF 共挤出结构：喷射块和末端进料模头（顶部）以及多流道模头（底部）。

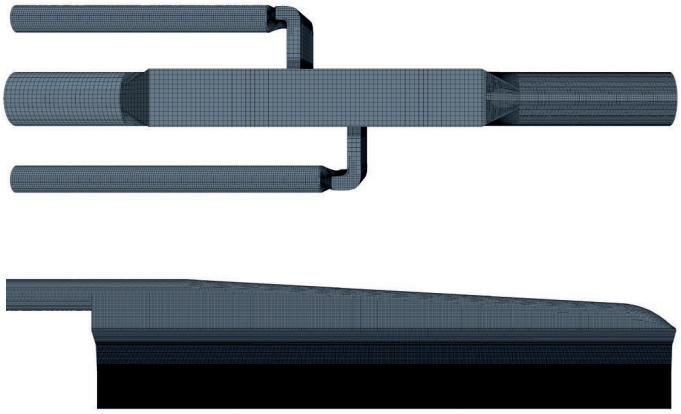


图 3：喷射块和末端进料模头上的网格。

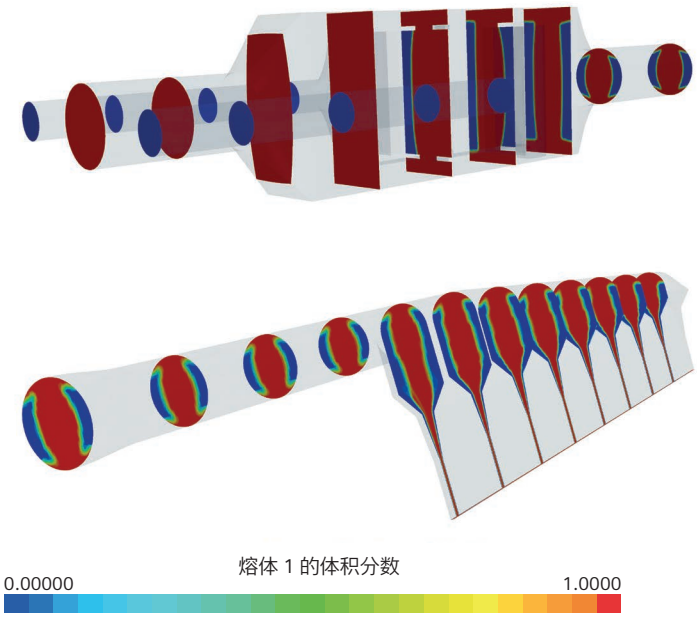


图 4：各段的渐进体积分数：喷射块（上）和末端进料模头（下）。

CFD 建模 - 末端进料模头

DTF 使用的两种共挤出结构如下图所示。在第一种情形中，聚合物熔体被送入喷射块，合为一体的熔体结构随后通过锥形出口流出，获得均匀的流体和均匀的最终膜结构。在 MMD 中，主要层进入主喷射块，而辅助层进入侧通道，合为一体的熔体通过锥形模头出口排出。下面提供了 DTF 使用的两种共挤出工艺的对比计算研究。在针对此目的评估不同的计算工具后，Simcenter STAR-CCM+ 成了他们的首选仿真平台。

首先，该公司对喷射块和末端进料模头中的共挤出工艺进行了欧拉多相流 (EMP) 仿真。他们使用 Simcenter STAR-CCM+ 的流体域体积 (VOF) 功能对不同聚合物熔体之间的交界面进行仿真和跟踪，使用的 EMP 模型可对两相或多相进行无缝仿真。流体被假设为层状、不可压缩的牛顿流体。两种熔体最初的性质完全相同，而随后的仿真增加了辅助熔体的粘度。随后，在 Simcenter STAR-CCM+ 中使用经过修剪的六面体单元对域进行离散化。喷射块中包含 150 万个体积单元，而末端进料模头中包含 1450 万个单元。两种熔体的初始温度为 285 ℃，密度为 1,250 千克 / 立方米，熔体粘度为 170 帕秒，导热系数为 0.2 瓦 / 米 / 度。主要熔体 1 的质量流量为 80 千克 / 小时 (kg/hr)，辅助熔体 2 的质量流量为 20 千克 / 小时，因此相应的体积分数分别为 80% 和 20%。所有仿真均在内存为 32 GB 的 Dell Precision 工作站中运行。

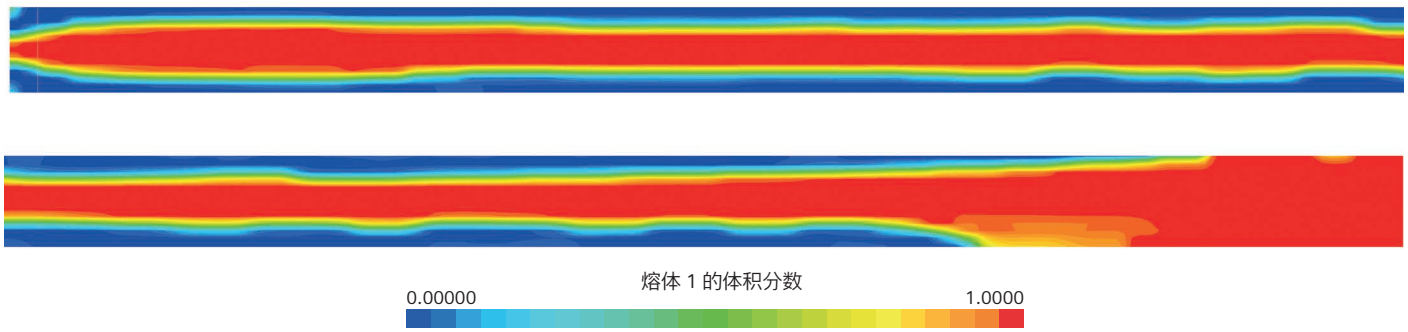


图 5：喷射块和末端进料模头出口处的体积分数。

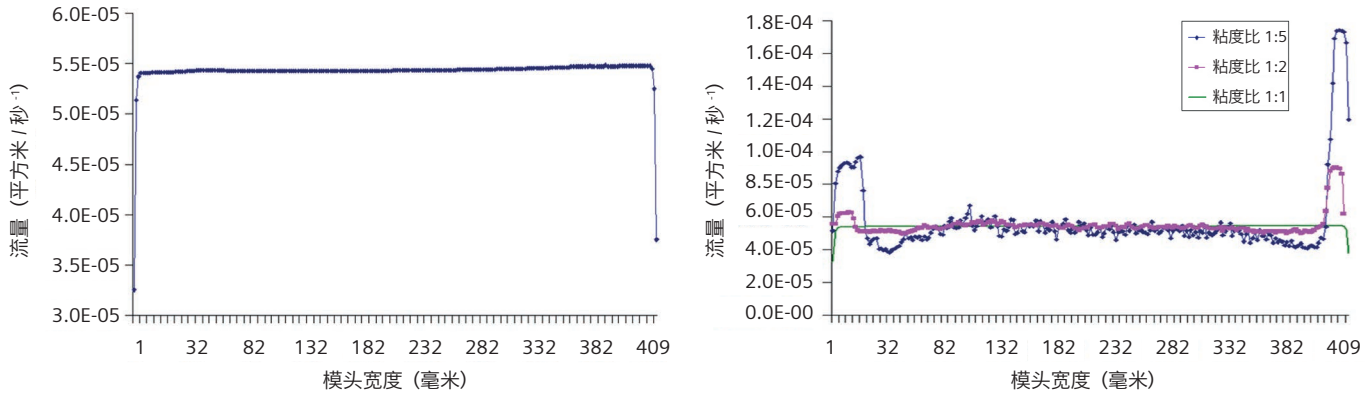


图 6：粘度比为 1:1 时流经出口的流量（左），以及粘度比增加后流经出口的流量（右）。

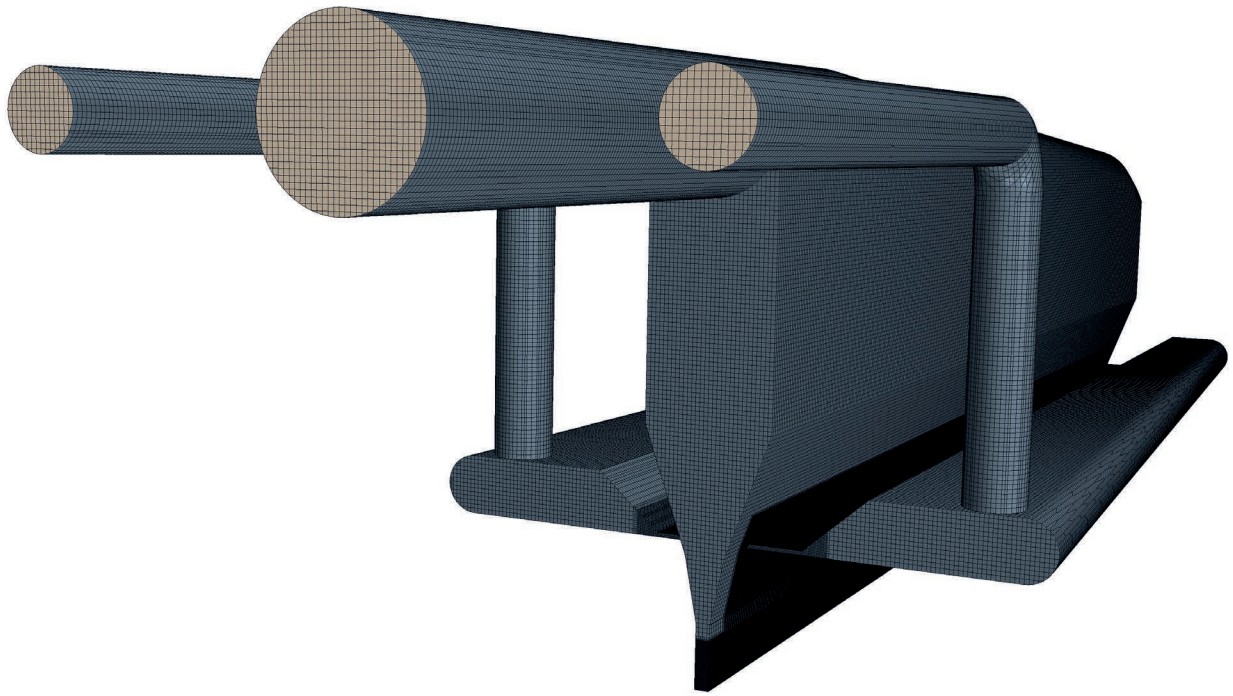


图 7：多流道模头 (MMD) 上的网格。

粘度（熔体 1: 熔体 2，帕秒）	操作侧，空气侧净边宽度（毫米）	流量差（百分比）
170:170	7.2	0.73
170:340	7.2	4.14
170:850	9.8	9.56

表 1：出口处的流量差。

粘度（熔体 1: 熔体 2，帕秒）	净边宽度（毫米）	流量差（百分比）
170:170	11.0	5.04
170:340	10.9	3.11
170:850	10.7	2.66
170:850	10.1	2.18
170:1,700	9.7	2.00

表 2：MMD 出口处的流量差。

下图显示了熔体通过喷射块和末端进料模头时的渐进体积分数。出口处的统一熔体结构为 ABA 型，中间为红色熔体 1，两侧为蓝色熔体 2。从渐进体积分数图中可以看出，ABA 结构在喷射块和末端进料模头中均保持了平滑的交界面。喷射块的几何形状是不对称的，左侧熔体 2 先于右侧熔体 2 进入。第二幅图显示了末端进料模头的出口体积分数。仿真显示，在 0 毫米边缘处，两个熔体 2 层均没有净边，而实验结果表明存在净边。仿真中之所以缺少净边，可能是因为模头中从水平流体到垂直流体的过渡区域未能通过更精细的网格正确求解。在仿真中，与底部熔体 2 的层相比，顶部熔体 2 的层在 410 毫米边缘处扩散得更宽（图 5）。最终，在末端进料模头出口处形成了均匀的厚度。从整个出口宽度上的流量图可以看出，流量差非常小，这表明由于锥型部分较宽，最终厚度将十分均匀（图 6）。

此外，还通过将辅助熔体层的粘度增加到主要熔体层粘度的 2 倍和 5 倍来进行了仿真。在这三种情形中，如整个出口宽度上的流量图（图 6）所示，随着第二层粘度的增加，出口处的流体均匀性将降低，最终熔体层的均匀性也将随之降低。附表中列出了末端进料模头出口 410 毫米末端处的净边宽度，以及所有熔体比率下整个出口宽度上的流量差。

多流道模头的 CFD 建模

与喷射块和末端进料模头的建模类似，仿真也基于 MMD 理念进行，以比较最终层的结构和厚度。如图所示，沿着锥形端创建了具有 1200 万个体积单元的修剪六面体单元网格，并进行了充分的细化。仿真条件与喷射块和末端进料模头相同。从通过 MMD 的渐进体积分数的轮廓图可以看出，熔体层之间形成了具有光滑交界面的 ABA 结构。流场的速度矢量显示了熔体 2 第一次进入的效果，即导致熔体 1 变形。出口体积分数图显示了最终统一膜的结构，其均匀度比最终末端进料模头更好。MMD 中的流体更加对称，两侧均有等宽的净边。因此，鉴于最终薄膜中辅助熔体 2 的层均匀性和出口两侧的净边，MMD 更适合进行加工。辅助层的粘度也相应地增加到了主要层的 2、3、5 和 10 倍。仿真显示，在整个出口宽度上，统一结构的核心部分是线性的且厚度均匀，但边缘具有极端的峰值，仅存在粘性较低的主要熔体 1 层。增加辅助层粘度后流量差有所减小，这表明 MMD 更适用于辅助层粘度更大的结构，计算效率更高。

数字仿真可帮助用户了解聚酯薄膜的共挤出工艺以及如何获得净边。这不仅能够降低加工难度和成本，而且可以带来净边。

结论

通过对分别在 MMD 和连接到末端进料模头的喷射块中形成多层聚酯薄膜的过程进行数字仿真对比，我们可以发现，从 MMD 可获得更干净的净边，这更有利于生产。此外，MMD 产生的最终薄膜更均匀，熔体交界面更平滑，同时还具有更宽的粘度比范围。数字仿真的应用还可以延伸到更广泛的工业规模几何体，有助于清楚地了解聚酯薄膜的共挤出过程以及如何获得更干净的净边。此外，仿真还可以揭示粘度较小的辅助层对聚酯基 MLF 形成的影响。这不仅能够降低加工难度和成本，而且可以带来净边。

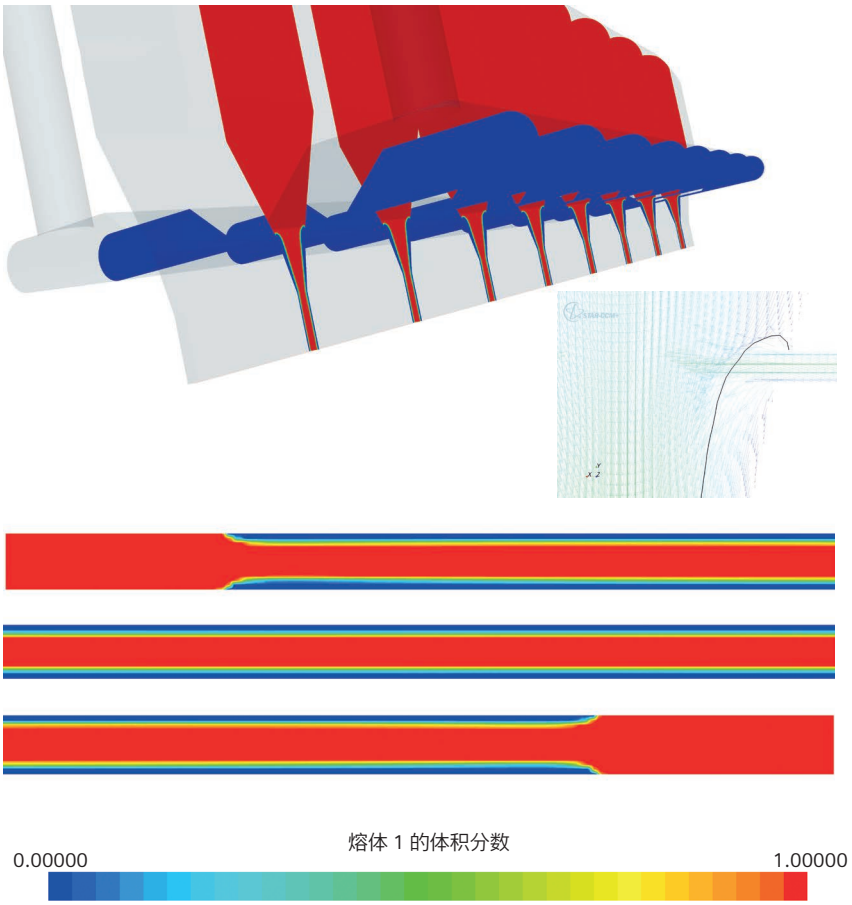


图 8：MMD 中的渐进体积分数（上）和出口体积分数（下）。

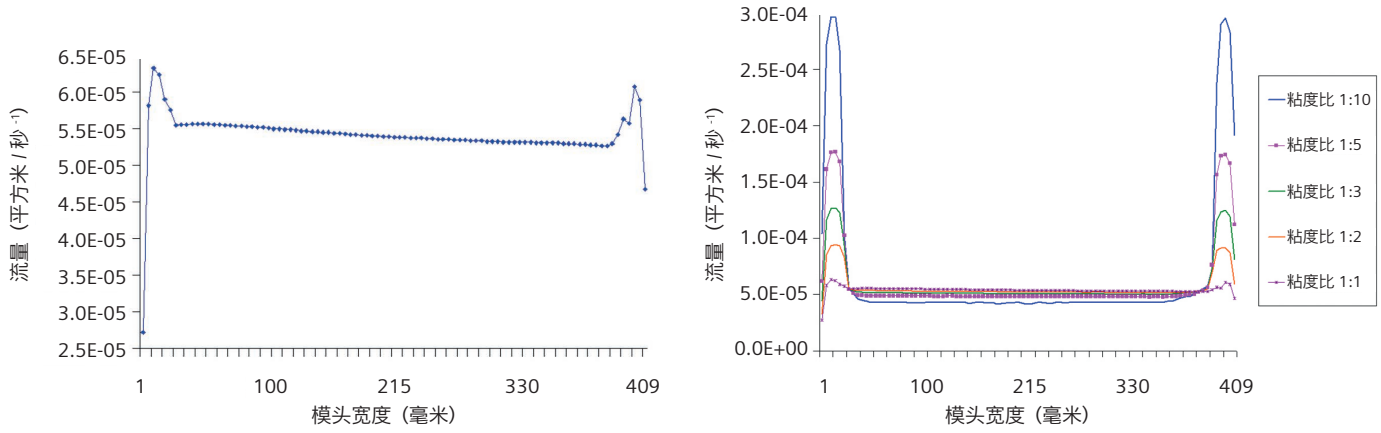


图 9：MMD 中粘度比为 1:1 时流经出口的流量（左），以及粘度比增加后流经出口的流量（右）。

活性药物成分连续生产的数字仿真

在前所未有的经济压力和日益激烈的全球竞争下，制药公司都在想方设法提高自己的工艺效率和产品质量，以期获得竞争优势。如今，以分批处理工艺为代表的传统制造工艺难以为继，毫无疑问，连续制造才是通往精益工艺的有效途径。多物理场数字仿真的出现有望对整个行业进行洗牌，这一技术能够对整个系统进行虚拟原型制作、优化和建模，实现活性药物成分 (API) 的连续制造。

从分批生产转向连续生产

如今，制药业饱受生产效率下降问题的困扰，而过去行之有效的分批生产工艺正是问题的根源。目前采用的分批系统之所以效率低下，是因为分段步骤往往使用多个设施，并且涉及批次的启停、站点之间的转移以及仓库存储。产品的质量评估在后期生产过程中通过取样完成，操作十分麻烦，容易导致较长的交付周期和浪费。

相比之下，连续制造是一种不间断的端到端制造流程，可以实现工业的现代化，令生产效率危机迎刃而解。在麻省理工学院 (MIT) 最近的一次会议上，诺华制药首席执行官 (CEO) 约瑟夫 · 希门尼斯 (Josef Jimenez) 表示，从分批生产到连续生产的转变将颠覆全球范围内的药物生产方式，从研发到上市的时间将有望缩短一半 [1]。这些工艺的实施将精简工厂规模、降低库存成本、减少碳排放以及提高产品质量 [2]。

监管机构也开始着手迎接连续生产时代，他们采取了一些措施 [3、4] 并建立了监管框架，例如，过程分析技术 (PAT) 和质量源于设计 (QbD) 等。这些都鼓励人们将质量纳入流程并采用基于科学的量化风险方法，以此推动全新制造技术的开发。

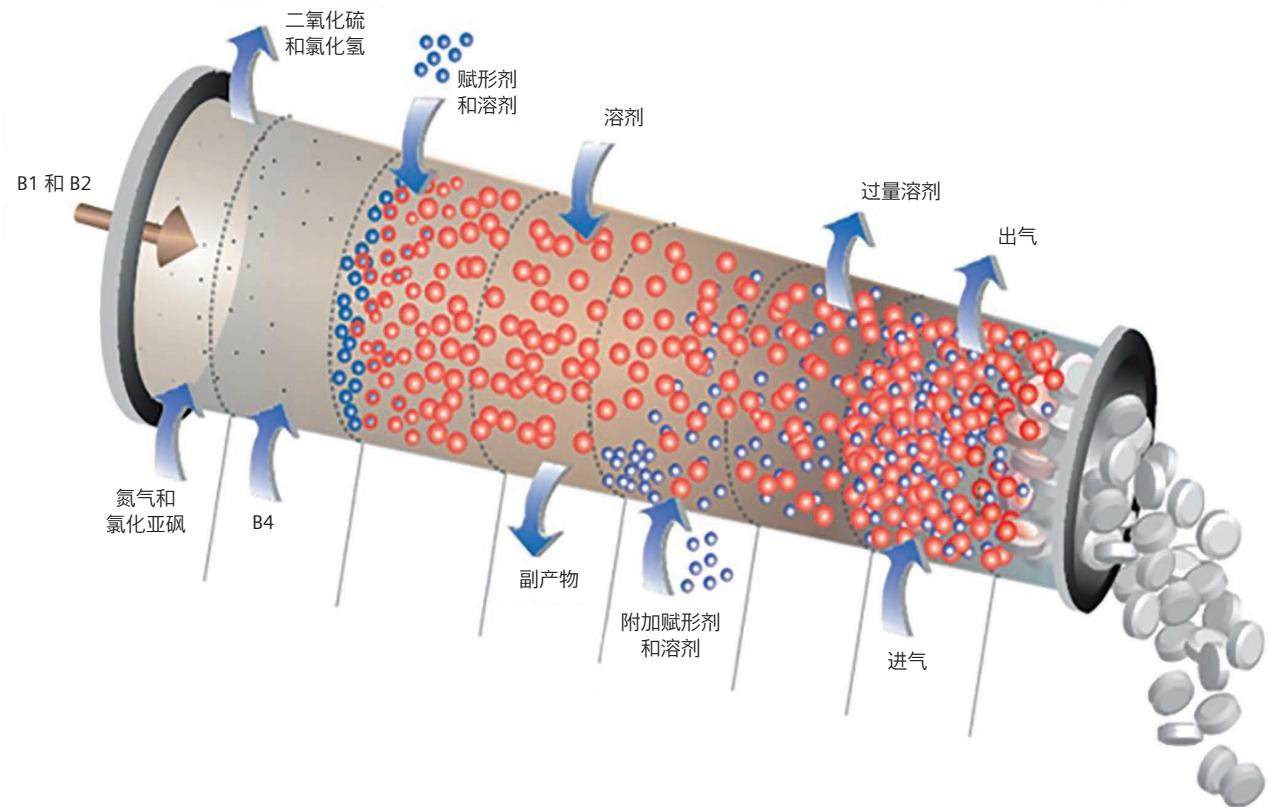


图 1：从化学合成开始到最终药物剂型的超精益制造（由诺华制药与 MIT 连续制造中心提供）。

如今，化学和食品加工业都成功地在工厂中推行了连续生产，进而提高了生产效率。显而易见，制药行业迈向 21 世纪新发展已成为大势所趋，而监管障碍和保守思维再也不能作为停滞不前的借口。

数字仿真和连续制造

在连续制造成为主流之前，必须设计和确定合适的备选流程，并且必须分析和降低风险。这将有助于管理合规性，并为实施提供充分的商业理由。多物理场计算流体力学 (CFD) 是一种用于预测流体、气体和粒子流耦合行为（包括热量和质量传递）的数字方法，能够帮助用户充分了解和设计这些新奇的过程。

虚拟原型

传统的制造流程基于 “设计 - 制造 - 测试” 原则，其中设计更改的影响需要通过对物理原型进行实验测试来量化。目前，很少有供应商会开发用于连续制造的集成系统，因此，预计制作物理原型的成本十分高昂。借助数字仿真，工程师可以建立一个虚拟实验室，能在测试之前就了解产品性能。这样一来，便可预先评估由主要流程和设备变更带来的不确定性，从而显著降低风险并节约成本。

多物理场 CFD 和尖端的可视化工具也提供了大量的详细信息，而这些是无法随时随地从实验室或实验测试中获得的。这不仅加深了对流程内部情况的详细了解，还推动了创新。例如，多物理场 CFD 有助于探索通过连续流程制造的药物的新反应和新分子。

案例分析 1：
药丸包衣的离散元建模 (DEM)

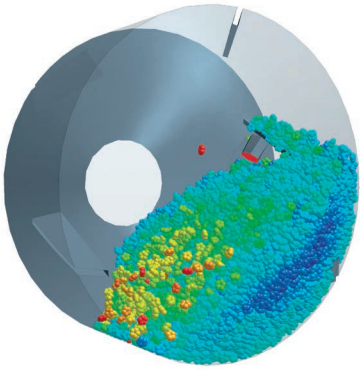


图 2：使用 Simcenter STAR-CCM+ 进行的 DEM 仿真，显示了药片在包衣锅内翻滚时的速度幅值。

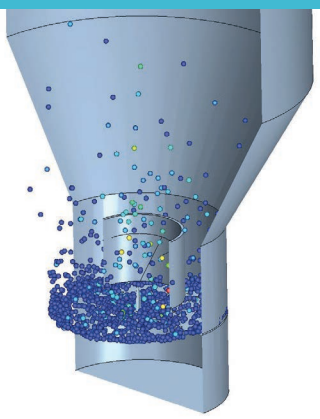


图 3：使用 Simcenter STAR-CCM+ 进行的片剂包衣 DEM 仿真，显示了流化床中的药丸包衣厚度。

DEM 可对大量相互作用的粒子的运动进行仿真，并采用数字上高效的方式进行跟踪，从而对由于粒子之间的碰撞和热传递而产生的接触力和能量传递进行建模。DEM 在连续包衣工艺的设计和优化中尤其重要，有助于确定设备设计的关键要素（例如喷枪数量）和最佳设备操作条件（例如入口温度）。

图 2 和图 3 显示了 Simcenter STAR-CCM+ 为目前用于实际片剂包衣的两种设备——包衣锅（转鼓）和流化床——提供的解决方案。在这些仿真中，DEM 用于分析涂覆包衣层时粒子的随机运动。在此期间会跟踪粒子速度、停留时间和包衣厚度等参数，以评估和改善片剂包衣均匀性。除了片剂包衣，DEM 还可用于对其他制造步骤进行仿真，如灌装、过滤和输送流程。

设计探索和优化

近年来，计算能力的显著提高和仿真工具的日益成熟为在生产环境中使用数字设计优化奠定了基础。参数研究和优化对于设计和调整连续制造所需的新设备（通常为小型设备）至关重要，同时可确保操作能够高效处理快速反应并保持灵活性。

此外，CFD 生成的响应（通过基于一系列操作条件和设备设计参数进行实验设计而获得）还可以与统计模型相结合，以识别风险并实现可靠的实时流程控制。这最终可以降低可变性，实现一致、可重复的流程。Optimate ™（Simcenter STAR-CCM+ 中的一个模块，使用 HEEDS ™ 软件）便是一款非常强大的工具，它能够在智能设计探索中轻松考虑假设情景，并确定影响质量的关键制造点。例如，用于连续制造的进料装置会影响所有下游工序，而对进给率等参数进行设计探索将有助于确定它们对最终混合均匀性的影响。

系统仿真

要解决复杂的实际问题，必须采用一种精确无误、易于使用的多学科方法对完整的系统进行仿真。诸如 Simcenter STAR-CCM+ 这类专注 CFD 方法的多物理场工程仿真工具可提供准确、全面的工程结果，制药行业应充分利用这些工具来推动连续制造工艺的开发。现在，在生产环境中集成数字仿真需要大量的专业知识，但这不再是一个障碍。得益于工具的自动化和易用性，复杂的多物理场应用也可以轻松部署 CFD。

例如，Simcenter STAR-CCM+ 在单一集成环境中提供了先进的网格划分，实现了与 CAD 的无缝集成以及复杂运动零件的简单建模。这样一来，工程师无需进行仿真准备和设置，而是可以腾出更多时间来分析数据，从而确保更快地成功完成工程设计。概括来说，连续制造需要采用多物理场方法来解决问题。无论是混合、包衣还是干燥，多相流都是制药加工业的核心所在。离散元建模

案例分析 2：
混合的欧拉多相 (EMP) 建模

图 4：混合器模型，显示了使用 Simcenter STAR-CCM+ 提高气体注入速率的效果。

EMP 建模为研究多相流中的相互作用流和随机分散相提供了有效的途径。Simcenter STAR-CCM+ 中的 EMP 模型包含一系列不同的子模型，如气泡和液滴的破碎和聚结模型，以及粒子流模型。图 4 展示了具有三个旋转叶轮的气液混合器的 EMP 仿真。图中所示为提高气体注入速率对气体的影响。气含率是一个用于控制各相之间质量传递和反应速率的参数，预测气含率的能力是设计这种反应器的一个关键要素。这种方法能够为决策提供更多宝贵的科学依据，有助于为连续制造中的混合和其他流程开发实用的解决方案。

(DEM) 是一种用于计算大量小颗粒之间相互作用的数字方法，而欧拉多相建模 (EMP) 是一种用于对系统中的几个相进行仿真的数字方法，诸如此类的功能对于实现应用程序编程接口 (API) 的连续制造非常重要。本文中的两个案例分析都充分地展示了这些功能。

结论

在当今竞争激烈的环境下，制造业必须变得更加精益，并注重在流程中提高质量。制药行业的连续制造将改变药物的生产方式，而多物理场 CFD 仿真则为新设备和新流程的设计提供了一种经济高效的快速原型制作方法。其中，设计优化工具和强大的多相模型（如 DEM 和 EMP）将发挥尤为重要的作用，制药行业应充分利用这些面向未来的先进技术来设计和实施连续制造工艺。

参考信息

1. "A Defining Moment : The Future of Manufacturing in the US," Presented at The Future of Manufacturing in the US Conference, MIT, May 8-9, 2012.
2. Plumb, K. Continuous Processing in the Pharmaceutical Industry: Changing the Mindset, Chemical Engineering Research and Design, 2005, 83, 730-738.
3. "The FDA Critical Path Initiative and its Influence on New Drug Development," Woodcock J., Woosley, R. , Annu.Rev. Med.2008.59:1–12.
4. "Pharmaceutical cGMPS for the 21st century" - A Risk Based Approach (http://www.fda.gov/ohrms/dockets/ac/03/briefing/3951B1_02_Pharmaceutical%20cGMPs.pdf).

压片和包衣的数字仿真

由于生产中的错误和流程控制的不足，固体片剂的制造流程往往缺乏可靠性和稳定性。面对着前所未有的经济压力，制药公司都在想方设法地提高自己的流程效率和产品质量。多物理场数字仿真的出现有望对整个行业进行洗牌，这种技术支持虚拟原型制作和优化，将有助于推动效率、质量和上市速度的全面提升。

固体片剂制造挑战

压片（从粉末压制成固体片剂）和片剂包衣是片剂制造流程中两个至关重要的步骤，将影响最终固体剂型的重量、厚度、密度、硬度和包衣。这些属性的可变性不仅会对药物的释放特性和治疗效果产生负面影响，而且还会改变片剂的崩解和溶出特性，导致片剂缺陷以及散装包装和运输过程中的破损。

随着不间断端到端加工等新制造流程的采用，以及将质量和效率融入生产的趋势所向，固体片剂制造商的前路充满挑战，因为他们必须精准确定关键要素和要求，以实现稳定、可重复的流程，从而生产出卓越产品。

为何选择数字仿真?

多物理场计算流体力学 (CFD) 是一种用于预测流体、气体和粒子流耦合行为（包括热量和质量传递）的数字方法。使用数字仿真的一个显著优点是，它能够帮助用户在执行物理测试之前验证设计或流程。例如，要开发新的片剂形状或包衣材料，需要开展大量成本高昂且耗时巨大的实验，以避免意外变化、确定不可预测的工艺参数并解决扩展问题。使用数字仿真研究这些影响可以显著减少时间、材料和开发成本。此外，数字可视化工具提供了大量的详细信息，而这些是无法随时随地从实验测试中获得的。这不仅有助于加深对流程内部情况的详细了解，还推动了创新。

Simcenter STAR-CCM+ 使问题迎刃而解

Simcenter™ STAR-CCM+™ 软件搭载自动多面体网格划分技术和全面的物理模型，是一个功能完善的多学科仿真工具包，可广泛应用于制药行业。Simcenter STAR-CCM+ 提供了一项尤为适合对片剂制造流程进行仿真的功能，即离散元建模 (DEM)，它能够与数字流仿真完全耦合，并集成在单一软件环境中。

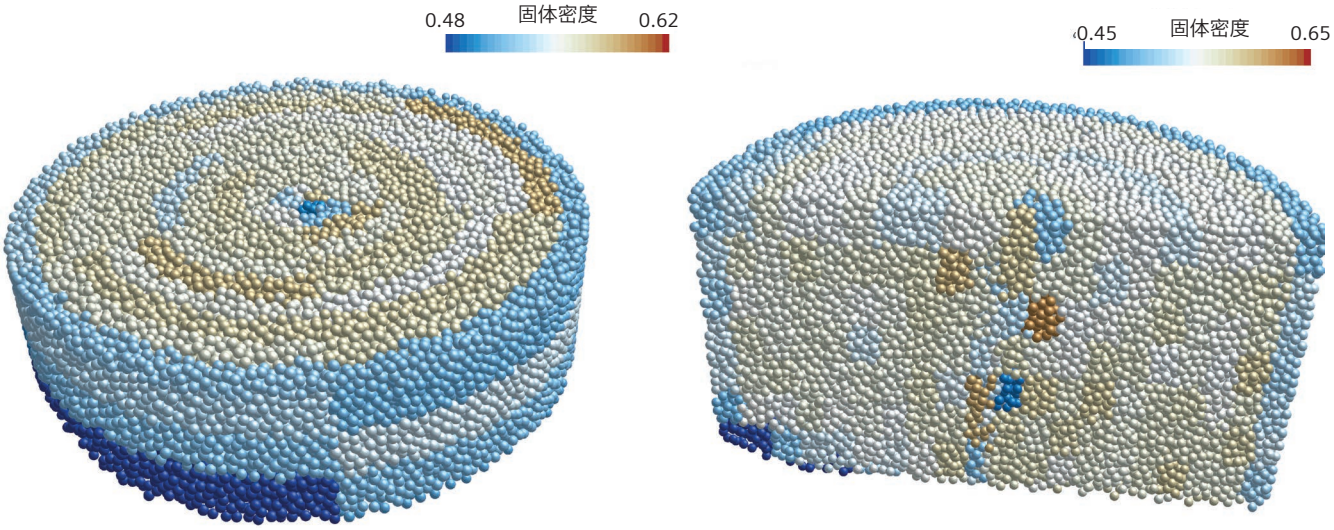


图 1：Simcenter STAR-CCM+ 使用 DEM 方法对片剂模具中进行包装和压制的药物粉末进行的仿真。颜色变化反映了颗粒分布的不均匀性。

压片和包衣流程涉及大量相互作用的离散粒子及其周围的流体。DEM 能够精确跟踪这些相互作用，并对由于粒子和流体之间的碰撞和热传递而产生的接触力和能量传递进行建模。Simcenter STAR-CCM+ 中的 DEM 功能可以在合理的时间内预测超过 100 万个粒子的密集粒子流，进而分析实际的片剂制造流程，如填充、压制、包衣和干燥等。

图 1 显示了 Simcenter STAR-CCM+ 对压片机中的预压制流程进行仿真的结果，旨在确定如何解决常见的片剂缺陷问题（如顶裂——片剂顶部裂开），这些缺陷通常是由于压制过程中夹带空气和微粒迁移而产生的。DEM 用于跟踪在预压制过程中将粒子重新排列并移至空余区域期间，粒子彼此之间以及粒子与模具之间的相互作用。该仿真提供了有关颗粒分布均匀性的详细信息，有助于确定所需的最佳预压制力和停留时间，以确保细小粒子在压制开始前锁定到位，从而显著降低生产过程中出现常见片剂缺陷的风险。

通过对粒子 - 流体的相互作用进行 DEM 仿真，还可以有效评估薄膜包衣厚度的均匀性，这是影响片剂质量的一个关键参数。图 2 描述了使用 Simcenter STAR-CCM+ 对流化床中的包衣流程进行的仿真，其中 DEM 用于分析涂覆包衣层的过程中粒子轨迹变化时的随机运动。仿真期间会监控粒子速度、停留时间和包衣厚度等参数。这些参数可以作为目标函数输入到 Optimate™ 中，这是 Simcenter STAR-CCM+ 中的一个模块，支持智能设计，有助于识别设备设计要素（如喷嘴间距），并确定设备的最佳操作条件。

Simcenter STAR-CCM+ 还具有创新的拉格朗日被动标量功能，可帮助用户轻松监控片剂的包衣厚度和其他特性。图 3 所示情形为一台内部翻滚着超过 70,000 个片剂的工业包衣机。本研究旨在通过确定转鼓中的最佳喷涂设备设置来提高颗粒间的包衣均匀性。这里定义了两个表示包衣厚度的拉格朗日被动标量：其中一个的源体积被限制在表面上方的一个锥体上，而

在当今竞争激烈的环境下，固体片剂的制造必须将重点放在提升流程的质量和效率上。这可以通过多物理场仿真所提供的快速原型制作和优化功能来实现。

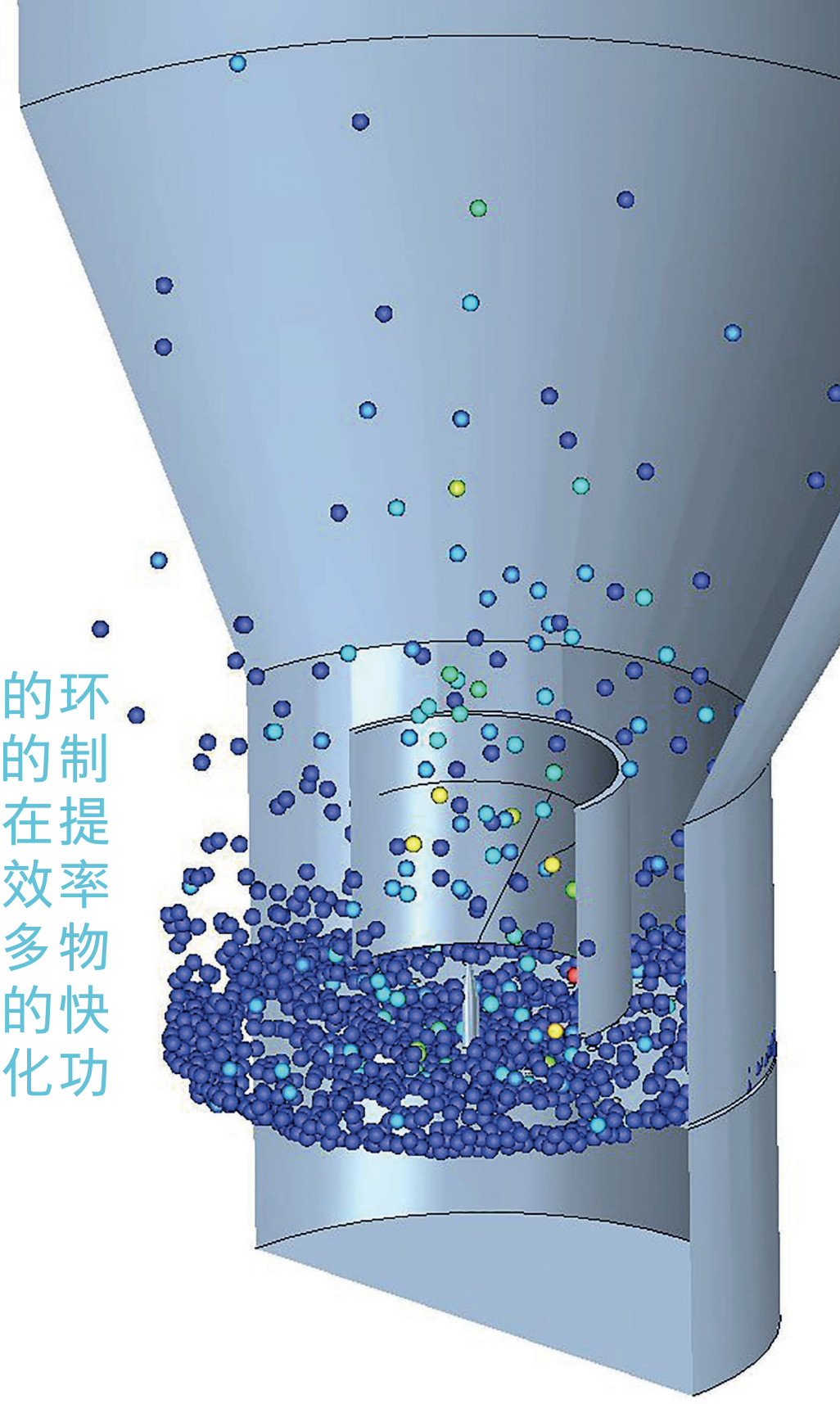
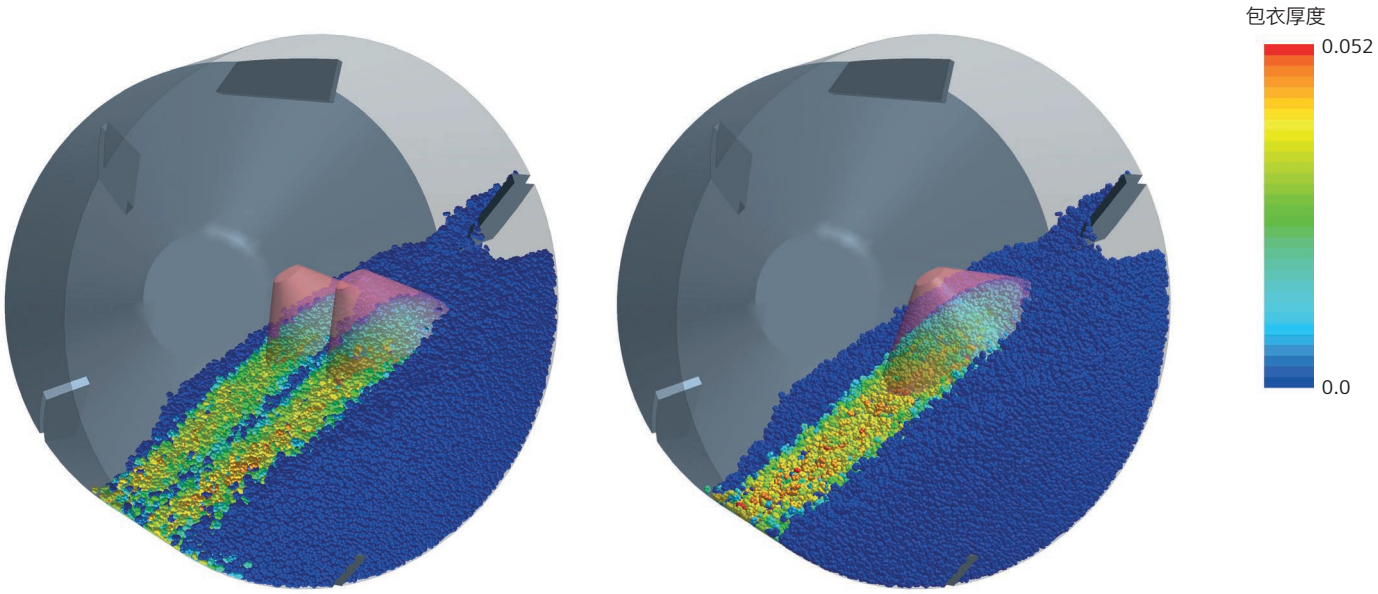


图 2：Simcenter STAR-CCM+ 对流化床中的包衣流程进行的仿真。



另一个的源体积被限制在两个锥体上，其有效喷涂面积与第一个被动标量相同。使用这种方法，通过单一仿真即可比较两个不同喷涂区域的颗粒间包衣均匀性，结果表明双喷涂配置可实现更均匀的包衣分布。

结论

在当今竞争激烈的环境下，固体片剂的制造必须将重点放在提升流程的质量和效率上，而多物理场 CFD 仿真可提供快速原型制作和优化，进而经济高效地实现这一目标。

使用 Simcenter STAR-CCM+ 提供的高端物理模型（包括强大的 DEM 和创新的被动标量功能），用户可以轻松解决与压片和包衣相关的复杂流场问题。制药行业的用户正在充分利用这些先进技术，这为探索提高质量、降低成本和缩短上市时间的创新方法打开了方便之门。

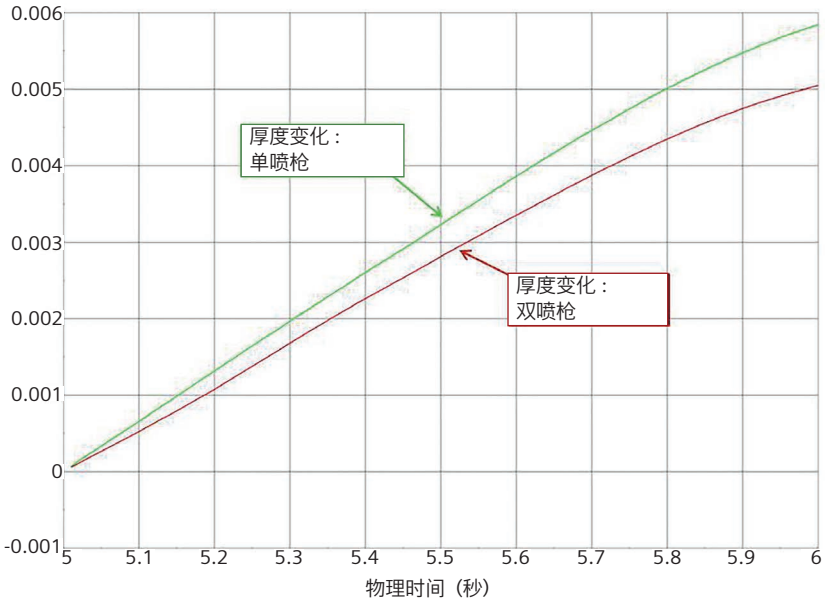


图 3：Simcenter STAR-CCM+ 为比较转鼓中的喷枪数量分别为一个和两个时的包衣厚度变化而进行的仿真。

CFD 为疫苗生产保驾护航

Creaform 受委托辅助设计一个洁净室，其任务是对房间的几何形状进行完整的 3D 重建，并在此基础上进行详细的 CFD 仿真。所述洁净室将用于制造流感疫苗，研究的目的在于设计一个高效的空气动力学屏障，以降低污染风险。演示很有说服力，其中的 CFD 仿真揭示了一些传统烟雾测试从未能解释的现象，尽管后者当前仍广泛用于确保制药环境的合规性。

简介

本研究中的药物洁净室是一个至关重要的环境，需要极高的防污染等级。尽管洁净室是一个 B 级环境，但限制进入屏障系统 (RABS) 的内部受到屏蔽屏障和 HEPA 高效微粒空气 (HEPA) 清洁空气过滤系统的保护，因此被评为 A 级临界区。疫苗灌装机必须组装到 RABS 中，这导致在安装之前，无论是制造商还是集成商，都无法预测许多特定的流体相互作用。 因此，有必要彻底了解流体流动特性，以确保非无菌机器组件周围具有适当的流动路径。不仅洁净室的合规性受到威胁，而且生产线的惊人生产率（每分钟填充数百个小瓶）也意味着污染会造成巨大的经济损失，因为这会导致疫苗剂量的浪费。在这种情况下，Creaform 的 3D 建模和计算流体力学 (CFD) 解决方案就大有用武之地。使用基本的 STL 文件，例如由 3D 扫描仪创建的文件，工程团队使用计算机辅助设计 (CAD) 软件对洁净室进行了数字重现，并使用 Simcenter STAR-CCM+ 开展了一系列 CFD 仿真。

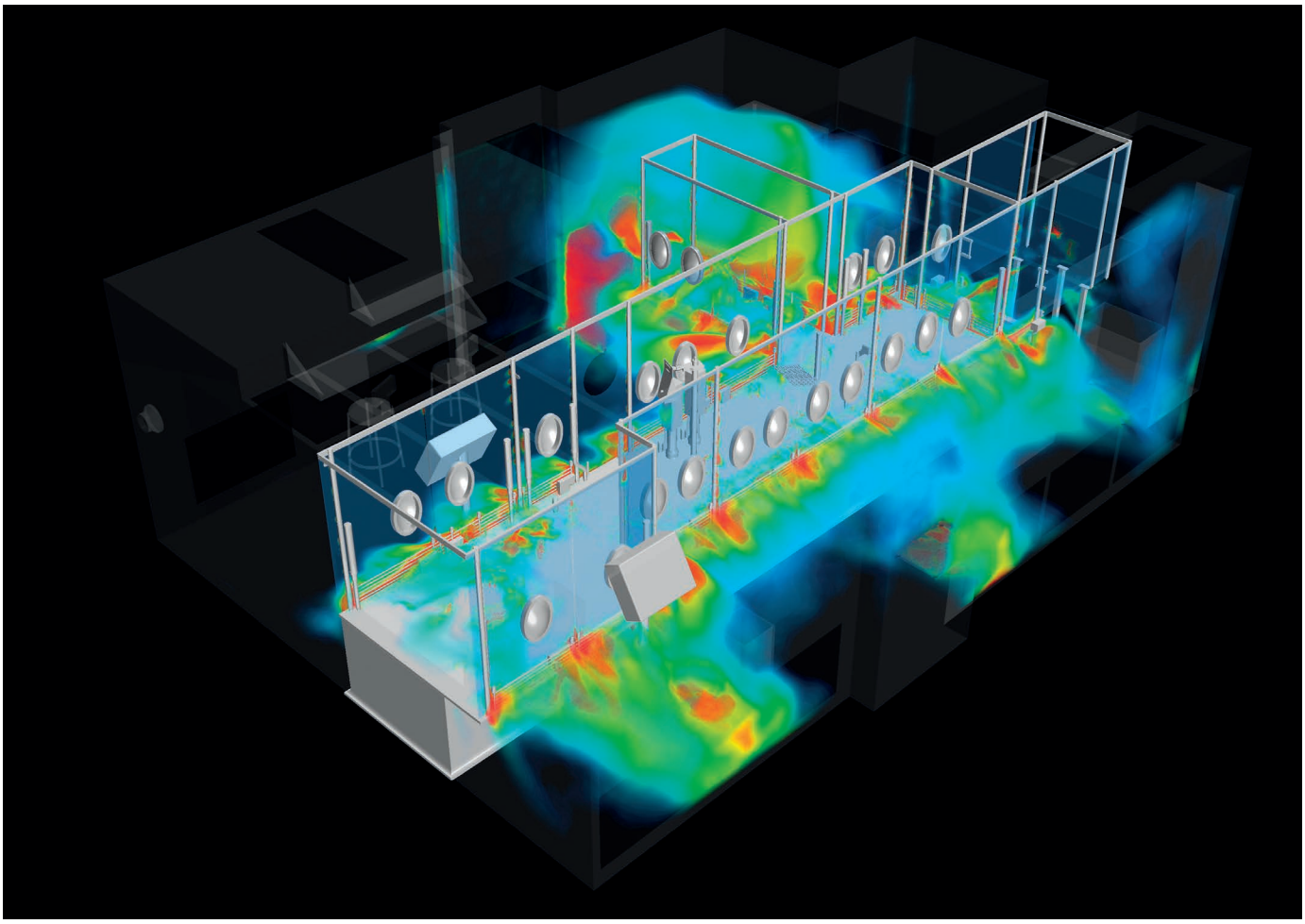
利益相关方

Creaform

Creaform 致力于开发、制造和销售先进的便携式 3D 测量和分析技术，以提高生产效率。凭借多年积累的专业知识以及员工的工作热情和全力投入，Creaform 能够帮助制造行业的公司实现无缝创建、仿真、验证和 3D 协同，显著提高他们的周转速度和盈利能力。在其 3D 工程服务部的支持下，Creaform 开发了强大的 CFD 仿真技术，广泛应用于交通、能源、环境、土木工程、电子元件和暖通空调 (HVAC) 等多个领域。对于这里讨论的项目，Creaform 负责对整个制药生产线和周围洁净室进行 CAD 重现、对 RABS 和 HVAC 系统运行时的空气流动进行 CFD 仿真，以及对空气动力学偏转器进行评估，以优化非无菌组件周围的流动行为。

Laporte consultants Inc.

Laporte 是一家专业从事生物制药、食品和饮料以及工业工程的咨询公司。其员工在加工、建筑和基础设施、自动化、包装和合规性等服务领域拥有丰富的经验。在本项目中，Laporte 负责制药设施升级的工艺设计、安装和调试，其中包括 HVAC 设计和 RABS 系统中的灌装机集成。Laporte 还负责执行用于评估合规性的初步烟雾测试。



计算几何

进行 CFD 分析时，一个典型的难题是没有可用的几何。更令人头痛的是对数字几何没有信心，因为竣工图不完整，或者几何随着时间的推移而发生了变化。这种情况会让工程师们不断质疑 CFD 结果。Creaform 通过提供高效的 3D 扫描解决方案确保高质量的数字重现。Creaform 还可生产快速、便携且易于使用的扫描仪，并提供计量级精度和分辨率。对于 HVAC 行业的 CFD 应用，Creform 的工程师通常会将中端扫描仪采集的完整房间扫描与 Creform 手持扫描仪对特定零部件的精确扫描结合在一起（见图 2）。这样便可生成一个干净的 STL 文件，例如，为制药洁净室构建的此文件。

洁净室的数字几何包括墙壁和家具、HEPA 过滤系统、HVAC 系统、带手套通道（生产线周围的窗户）的物理屏障、控制面板以及带有小瓶堆积台的 RABS、传送带、灌装针、封盖机和许多测量仪器，而得益于 Simcenter STAR-CCM+ 的全面功能，所有这些均纳入了 CFD 仿真中。

图 2：使用 Creaform 手持式 MetraSCAN 扫描房间。

仿真

精确且有代表性的边界条件对洁净室仿真至关重要。以下对象是根据最近的数据采集结果仔细确定的：

- 层流设备性能评估，提供了 HEPA 过滤系统每个扩散器的空气速度分布
- 对包括回风管在内的 HVAC 系统进行的通风平衡测量
- 相邻房间内的精确压力测量，用于了解通过传送带墙壁开口和门轮廓的二次空气流速。

湍流模型是使用 RANS 方法实现的，更具体地说，是使用 SST (Menter) k-omega 模型实现的，因此只能得到稳态结果。此外还使用了全 y+ 壁面处理，这是因为有许多近壁单元落在边界层的缓冲区内。控制整个表面以强制得到粘性子层求解不仅计算成本高昂，而且并无此必要。实际上，我们无需计算粘性力，因为流动分离发生在切刃处，其预测无关紧要。因此，网格为多面体，不使用棱柱层。通过对机器组件表面的细节进行捕捉完成了优先单元细化，导致初始运行（设置检查和初始解决方案）的单元计数为 560 万，而最终运行的单元计数为 1840 万。仿真使用了耦合流模型和二阶离散化。

成效

总体压力分布

传送带上方的理想流动条件由一个完美的垂直流组成。因此，水平面内的压力分布至关重要，并且在 RABS 内必须尽可能均匀。洁净室的第一次 CFD 仿真显示了一个小的压力梯度，这足以引起 RABS 内部速度矢量的纵向分量。Laporte 工程师设计了偏转器来重新分配封盖部分的压力，并拆除了导致药瓶累积段压力增加的隔板。结合 HEPA 过滤的模块化调整，这些改进显著改善了 RABS 中的压力分布（见图 5）。CFD 仿真与对新设计进行的烟雾测试有很好的相关性，并证实了改进的效率。

横向流动

随着纵向流的修正，Laporte 和 Creaform 将重点放在了非无菌机器组件附近的横向速度分量上。CFD 仿真强调了两种需要避免的类似情况：一个在针托周围，一个在封盖臂周围。这两个组件均为非无菌组件，并且来自物理屏障下方的气流会引起显著的横向速度分量。从图 6 (a) 可以看出，这种现象导致了与臂接触的颗粒直接移向在齿板高度输送的小瓶。图 6 (b) 中所示的空气动力学偏转器在仿真中进行了测试，它引起了气流向机器底板

图 3：小瓶传送带的六面体网格。

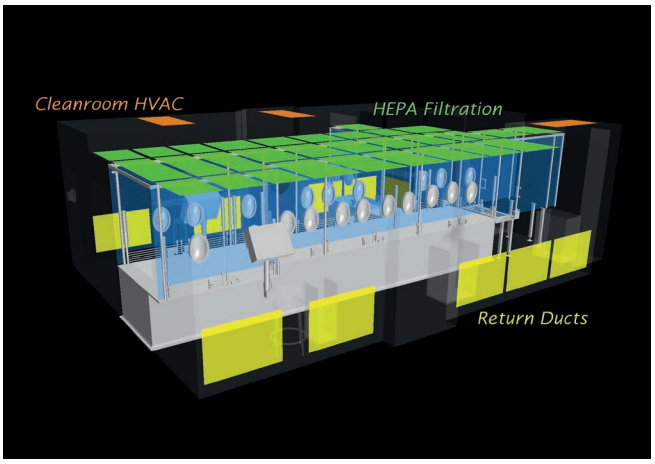


图 4：主要边界条件。

的转移。它使臂附近的流线到达传送带的底部，进而使潜在的污染颗粒远离小瓶。针托高度上也使用了一个类似的偏转器。由 Laporte 设计完毕并外包加工后，这些偏转器进行了现场烟雾测试，结果显示性能非常不错，与 CFD 分析的预测相吻合。

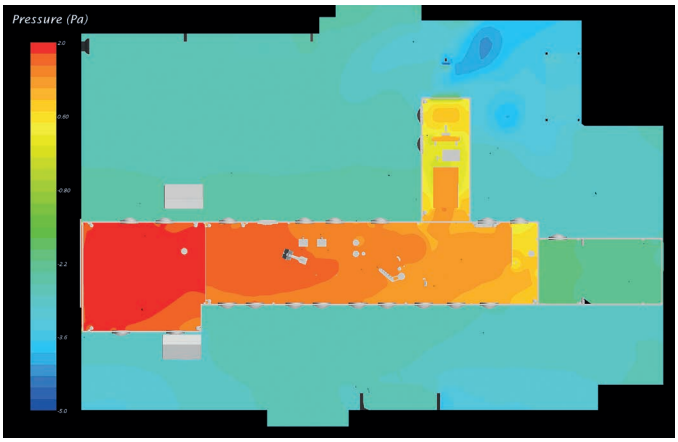
撞击流

通过 CFD 仿真解决的第三种需要避免的情况是由非无菌表面的撞击流引起的：堆积台和传送盘。在这两种情形下，零部件的水平表面会直接暴露在垂直流中，导致出现驻点和不希望的涡流。

在生产线开始处的工作台上，打开的小瓶堆积在一起，并在工作台的外边缘附近形成了一个圆形阵列。该工作台设有一个中心孔，使一定比例的撞击流能够在不接触小瓶的情况下排出。然而，如图 7 所示，一些流线穿过一系列小瓶通过外边缘排出。公司在仿真中测试了许多旨在降低通过中心孔的流压头损失的措施，并证明卓有成效。然后，公司将注意力集中在确定外边缘排出情况的实际污染风险上，并专门针对小瓶周围的流动进行了仿真。这一详细仿真对实际小瓶进行了建模，并使用了全局仿真场来确定边界条件。结果表明，在稳态下，与工作台接触的整个流均将通过瓶肩排出（见图 8），因此能够限制污染风险。Laporte 还提出了一个具体的堆积台清洁程序。

至于非无菌传送盘，它们会产生一个被涡流包围的驻点，最终将颗粒传送到小瓶路径上。因此，最初设计的实心圆盘受到了质疑，Laporte 最终重新制造了圆盘并增加了孔洞，从而可以更好地使流排向机器底板。Laporte 使用 CFD 模型和烟雾喷射对相关调整进行了测试，两种方法都证明这有助于抑制问题。

Creaform 致力于提供数字仿真等咨询服务，并在其软件库中使用 ***Simcenter STAR-CCM+***，因为这能够帮助他们快速处理任何几何，包括原始扫描数据。我们的专家可以利用扫描和任何其他可用数据来重建几何，然后进行 *CFD* 仿真，从而降低成本和中间流程。



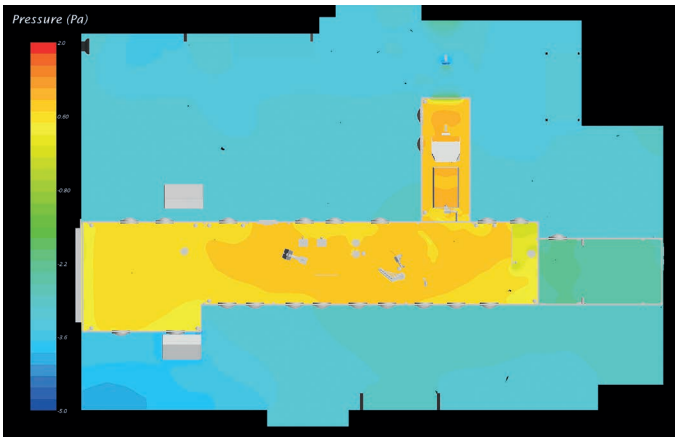
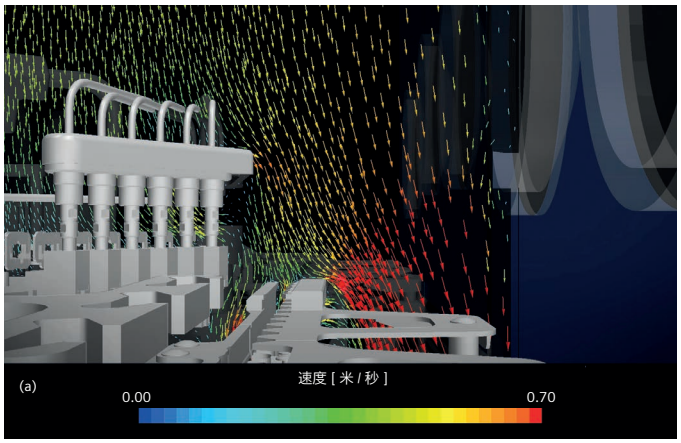


图 5：水平面内的压力分布——设计调整之前（上）和之后（下）。



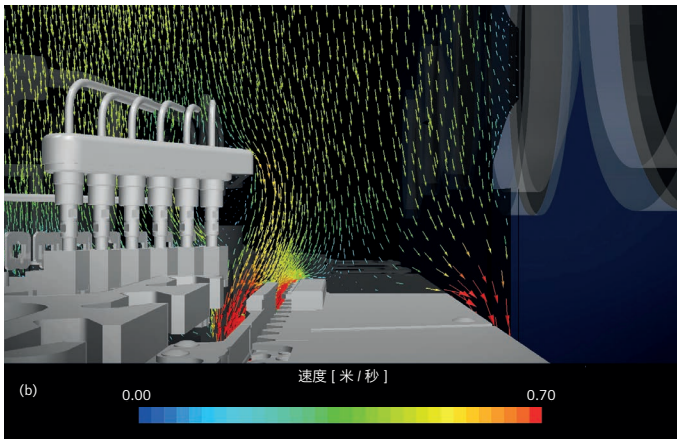


图 6：封盖臂弯头处截面的速度矢量——原始设计（上）和带有空气动力学偏转器的改进设计（下）。

结论

该项目充分证明了逆向工程解决方案与 Creaform 工程服务团队通过 Simcenter STAR-CCM+ 获得的 CFD 能力具有高度互补性。同时，该项目也清楚地展示了 Laporte 的创新方法，即在洁净室调试中采用 CFD 来获得预测性信息，与传统的烟雾测试形成互补。此处的 CFD 结果目前与烟雾测试视频综合在一起，向监管机构展示空气动力学屏障的出色效果。到目前为止，反馈非常积极，因为 CFD 能够帮助用户了解流动特性。Creaform 希望普及 CFD 在未来制药生产线上的应用。因此，有必要彻底了解流体流动特性，以确保非无菌机器组件周围具有适当的流动路径。不仅洁净室的合规性受到威胁，而且生产线的惊人生产率（每分钟填充数百个小瓶）也意味着污染会造成巨大的经济损失，因为这会导致疫苗剂量的浪费。在这种情况下，Creaform 的 3D 建模和 CFD 解决方案就大有用武之地。使用基本 STL 文件，例如由 3D 扫描仪创建的这类文件，工程团队在 CAD 软件中对洁净室进行了数字重现，并使用 Simcenter STAR-CCM+ 完成了一系列 CFD 仿真。

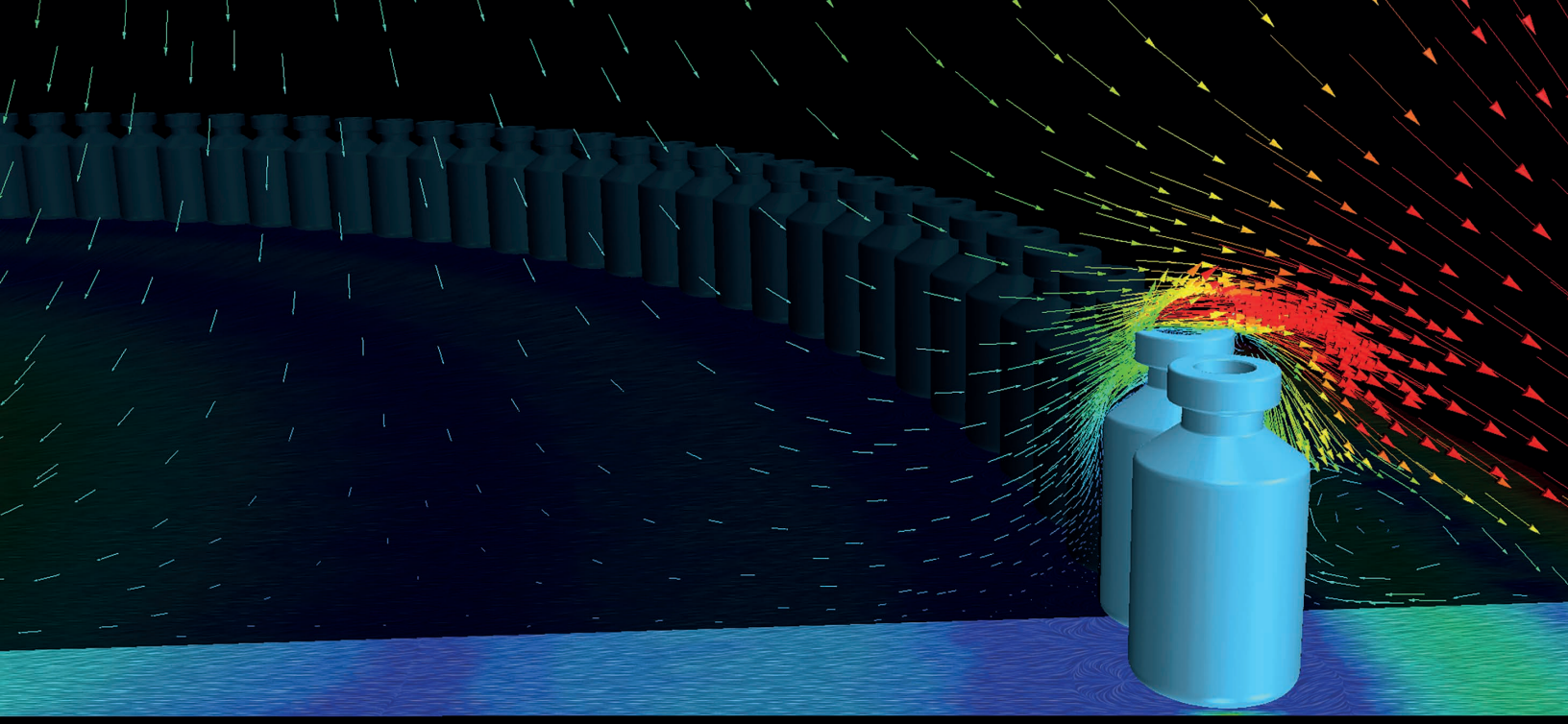


图 7：堆积台上的撞击流。

Creaform 提供了一个集扫描、*CAD* 重构和 *CFD* 分析于一体的综合性解决方案，可以为无形气流问题提供既直观又准确的答案。

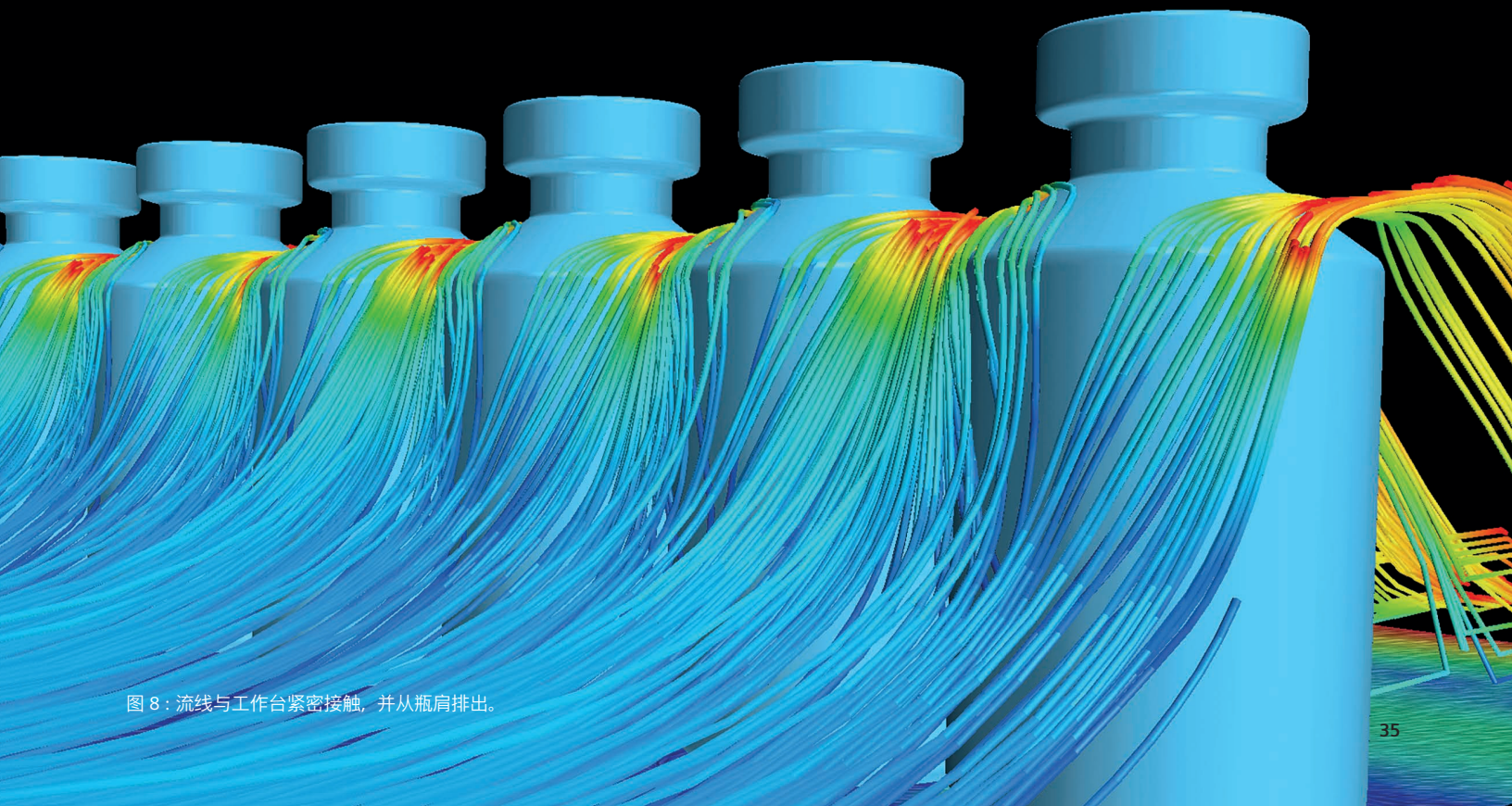


图 8：流线与工作台紧密接触，并从瓶肩排出。

这里的温度在升高! Zeeco 公司使用 Simcenter STAR-CCM+ 揭开加热器运转失常的真正原因

简介

工程咨询期间，高效及时地解决客户面临的问题是建立业务关系的基础。因此，除了派遣高素质工程师解决问题以外，配备合适的工具同样至关重要。本文展示了一个相关示例，印证了优秀的工程师可以将现代数字仿真软件打造成高效且行之有效的虚拟故障排除工具。Zeeco Inc. 是一家燃烧和环保解决方案提供商，参与过大量燃烧器、火焰和焚烧炉工程的设计与制造。此外，Zeeco 还面向客户提供工程咨询服务。曾有一家客户找到 Zeeco，表示其加热器出现问题，性能十分拙劣。本文重点介绍了 Zeeco 如何使用 Simcenter STAR-CCM+ 软件切实排除加热器故障，找出加热器运行效率低下的原因。

工业加热器问题

存在问题的工业加热器如图 1 所示。这一经过建模的系统包含位于两侧底部的燃烧炉和位于顶部的辐射段，以及沿加热器四周分布的处理管。该模型中未包含对流段和烟道。处理管会输送经过处理的流体，从顶部流入加热器并从底部流出。燃烧炉上装有助燃空气分配管，可均衡地向各个燃烧炉分配燃烧所需的空气。加热器壁的材料为耐火砖和陶瓷纤维模块。

该加热器在使用时存在下列问题，Zeeco 需要找出问题原因并提供解决方案：焦化：焦化是指加热器管内形成焦炭，降低了加热器的热传导能力。处理管会输送烃类流体，这些流体中分子量较大的物质容易导致焦化。使用期间，发现处理管内出现焦化。运行周期：最初设计该加热器时，预期运行周期为约 10 个月。然而由于焦化问题，该加热器只运行了三到四个月，之后便不得不关闭加热器来清理管道内的焦化物。

热行为：管壁金属上的温度读数显示了管道表面的温度及热通量分布不均匀。由于难以进入系统内部，因而用肉眼检测加热器及其各类组件的故障不仅极其困难，而且不切实际。Zeeco 决定采用虚拟仿真来深入了解加热器性能。为此他们使用了西门子的多物理场仿真软件 Simcenter STAR-CCM+ 作为故障排除工具。

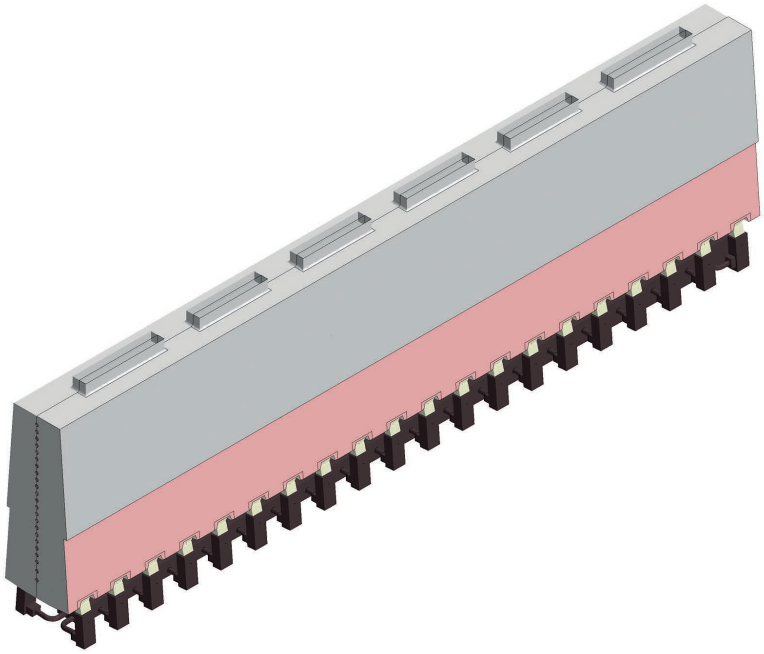


图 1：穿过齿轮箱外壳的 X 切剖面显示了模型网格细节。

加热器的 CFD 设置

他们使用 SolidWorks® 软件准备了加热器几何体的 CAD 模型来执行分析工作。该计算模型包含加热器辐射段，以及处理管、燃烧炉和空气分配管。在 Simcenter STAR-CCM+ 中使用经过修剪的六面体单元对域进行离散化（图 2），并在这些单元中解算纳维 - 斯托克斯方程。此处仅使用约 1300 万个单元对加热器的一半进行建模，对于另一半则假定条件对称。围绕燃烧炉的计算网格已充分细化，可准确解析流动场和燃烧。加热器长 85 英尺，高约 25 英尺，宽 10 英尺，并按比例进行了建模。

Simcenter STAR-CCM+ 中的分离流求解器非常适合用于低速流，因而此处使用了它。加热器中的燃料气混合物为炼制油气，包含氢以及诸如甲烷和丙烷等烃类化合物。Simcenter STAR-CCM+ 提供一整套燃烧模型，可对各种燃烧现象进行仿真。多组件物质模型则用于为加热器引入各种燃气成分。Simcenter STAR-CCM+ 中的涡破碎 (EBU) 模型通过解算计算网格上物质的个体输运方程求得均值，从而对物质的非预混燃烧进行了建模。根据加热器火焰特性，并未将点火纳入考量；通常认为，标准 EBU 模型与可实现的 k- ϵ 湍流模型结合使用，将足以对燃烧进行建模。选择 Simcenter STAR-CCM+ 中的灰度热辐射模型后，也将辐射纳入了考量范围。

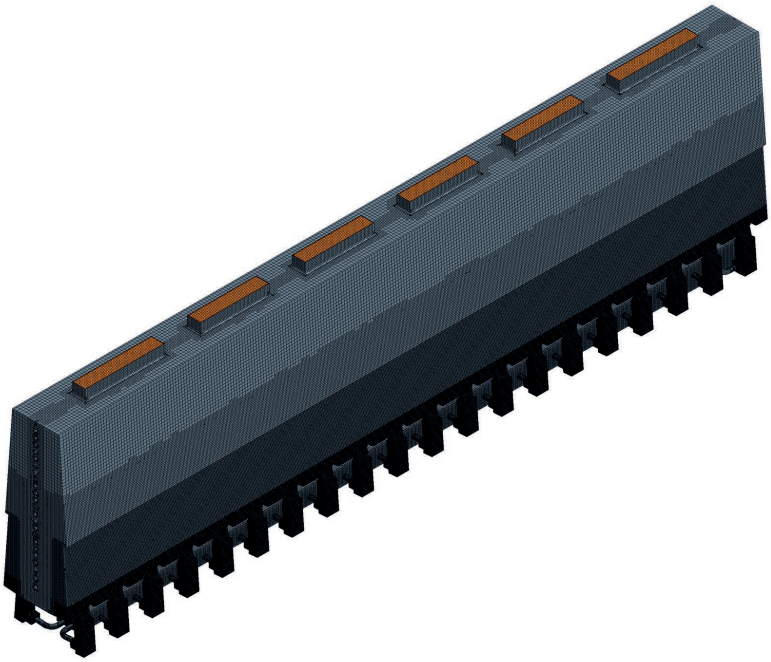


图 2：三种不同注油量的初始分布。

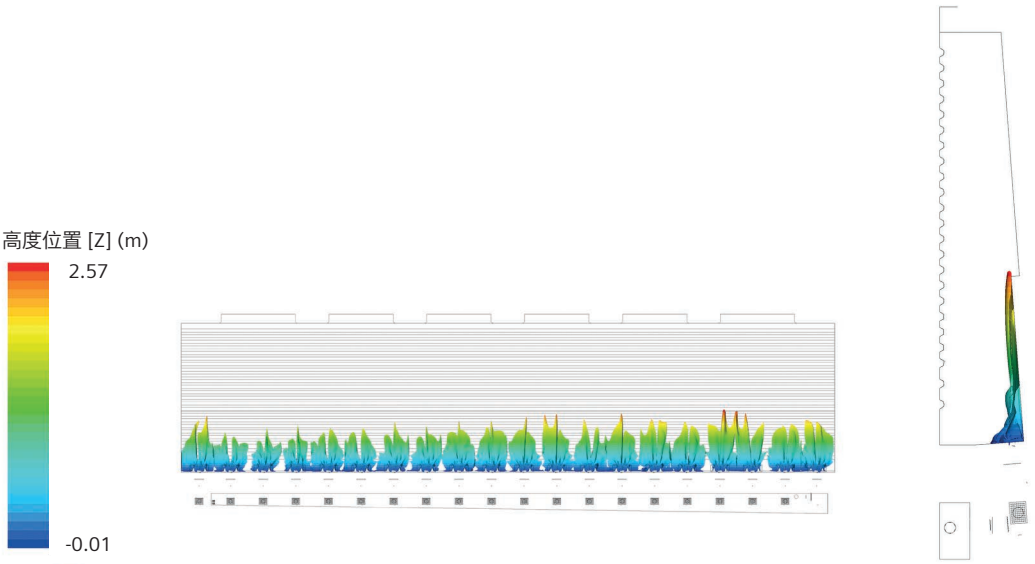


图 3：中油位时油量分布的实时变化。

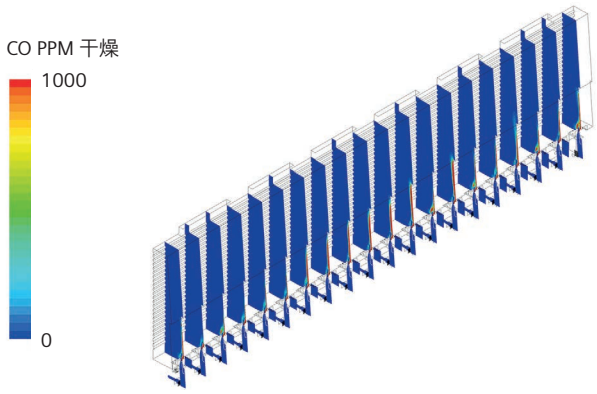


图 4：(a) 显示啮合齿轮间的瞬态流特征的流线，以及 (b) 齿轮箱内的瞬态速度流场变化。

利用仿真识别加热器问题

图 3 所示为利用燃烧输出物质的等值面所描绘的预测燃烧火焰轮廓。助燃空气会从右向左进入分配管，因而随着可用助燃空气减少，火焰高度从右向左降低。最左边的燃烧炉呈现了火焰较高的反常现象，这是由最左端的特殊管道设计引起的。火焰（正视图）与侧壁极为贴近，通过目视查看加热器的观察孔就可以确定这一点。根据图 4 所示，一氧化碳 (CO)（左侧）和未燃烧烃（右侧）集中在各燃烧炉的中心面上；此外还显示了 CO 快速烧尽，表明燃烧完全度并不存在问题。图 5 所示为各燃烧炉中心面上的氧气含量。氧气浓度定量分析表明过量氧气的数值约为 5%，与加热器设计一致。

经过处理的流体会从顶部流入加热器并从底部流出，使温度从上到下逐步升高。图 6 中的管壁金属温度的视觉分析证实了这一行为。管道的废气温度表明右侧存在热点，而左侧的温度较低。

对于任何加热器，只有热通量适当均匀地分布在管道表面，才可实现优化运行。若热通量分布不均匀，不仅会导致加热效果差，而且会导致加热器内烃类化合物易于焦化。图 7 所示为管道表面的热通量分布。该图对加热器左侧、右侧和中间截面进行了勘查，旨在分析热通量分布。图 8 对三个不同位置截面的加权热通量进行了比较。加权热通量代表的是所有管道表面的局部热通量与总平均热通量之间的比值。可以看出左侧管道表面吸收的热少于右侧表面。

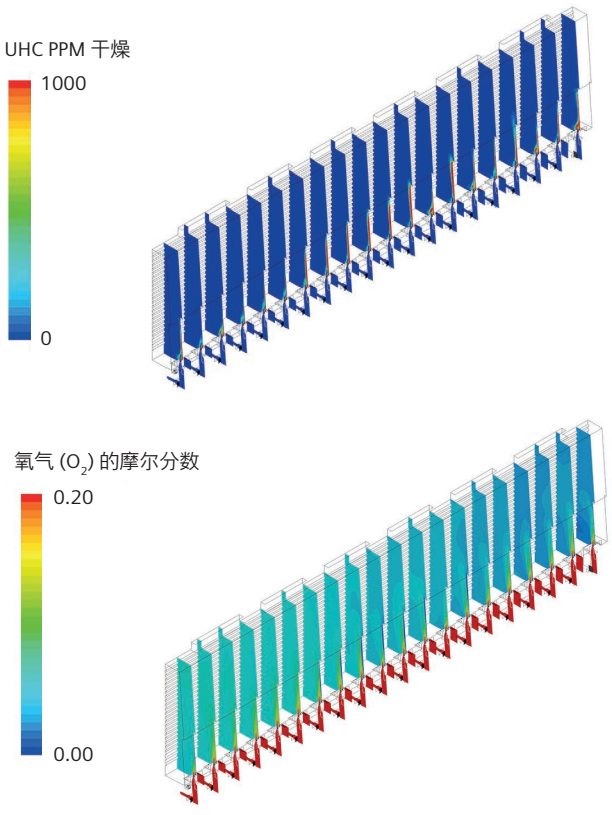


图 5：齿轮箱内压力条件随时间变化的情况。

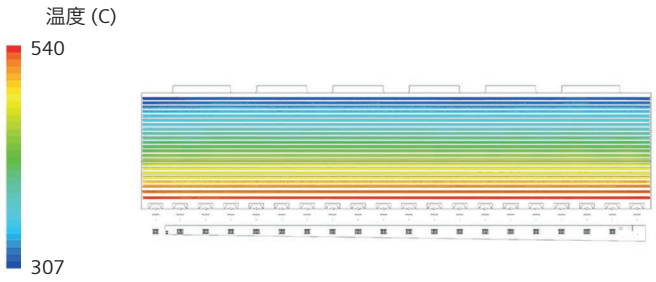


图 6：互相啮合的齿轮间的含油率和 1/3 r 情况下三种不同注油量的含油率（以及 1/2 r 情况下高注油量的含油率）。

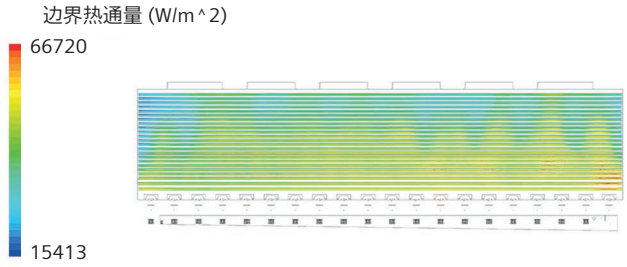


图 7：a) 齿轮箱内的含油率和 b) 1/3 r 和 1 r 后齿面上的含油率。

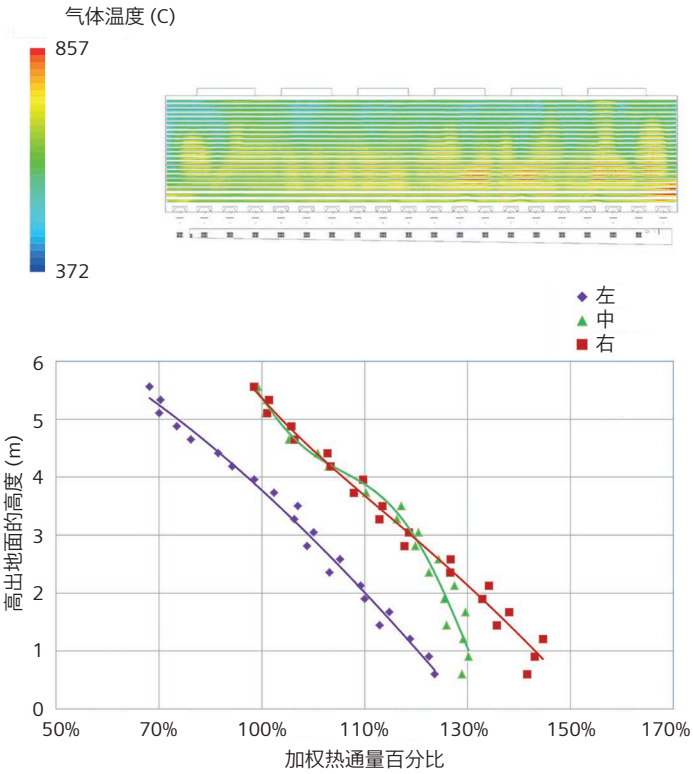


图 8：齿轮箱 1 和齿轮箱 2 的齿面上含油率的时间演变特性。

加热器问题和建议

对于制程加热器，下层的热通量较高是十分常见的；在下层，燃烧火焰进入加热器的情况与加热器内的较高处截然相反，较高处的热传导量和热通量均较少。在图 8 中可以清晰看出，在较低处，加热器左侧的加权热通量为 125%，右侧的同一数值则跃升到了 145%。这表明右侧管道表面所吸收的热量比左侧多 20%，导致这些较高温度处的烃类化合物焦化。由此可认定管道表面的热传导分布问题就是加热器运行不良的原因。因此，建议在助燃空气分配管内引入更多隔板和导流板，从而改变流动型态。这样可以更加均匀地向所有燃烧炉分配空气，因而可减少加热器一端较之另一端过热的情况发生。

Zeeco 使用 Simcenter STAR-CCM+ 成功对加热器的运行进行仿真，并确定了加热器故障的原因。他们基于数值仿真提出了一系列建议以便改进性能。Simcenter STAR-CCM+ 让 Zeeco 能够以及时、经济高效的方式妥善应对客户的工程挑战，这进一步凸显了 Simcenter STAR-CCM+ 在任意工程咨询机构中的核心地位。

拾取不良振动：Porter McGuffie 解决加热器振动问题

处理设计过程中被忽略的物理特性，随后还得排除由其引起的问题，这令大多数工程师感到头疼不已。这种现象普遍存在于整个工程界，随之而来的是以无数种不同方式出现的设备运行问题。有些意外的物理行为可以轻松解决和修正。而有些问题，例如 Porter McGuffie 经常遇到的问题，诊断和解决的难度比较大。

Porter McGuffie, Inc. (PMI) 是一家位于堪萨斯州劳伦斯的计算力学和工程测量服务公司，提供的以 FEA 和 CFD 分析为后盾的工程解决方案应用于范围广泛的各种领域。有个客户的加热器内管道出现可以看到和听到的晃动，其操作人员吓了一大跳，因此客户要求他们解决这个特殊的设计问题。加热器的管道系统（图 1）发生晃动的原因未知。在某些操作条件下，每个方向的振荡位移约为 1 英寸。对于安全操作而言，这种振动水平确实过高。要想限制振动，就必须大幅降低加热器吞吐量。

为了开始分析，PMI 对加热器进行了现场勘查。他们将加速度计连接到加热器的管道上，以精确测量管道的振动。测量结果（在图 2 所示的位置获得）表明，最显著的振动发生在 10 和 9 赫兹 (Hz) 频率处，如图 3 所示。随后的分析中，将这两个频率确定为系统中两个单独回路的机械共振频率。通过对振动数据进一步分析，结果表明，振动幅度的包络具有周期性。如图 4 所示，主要周期长度约为 27 秒，次要周期长度约为 13.5 秒。这种幅度变化在加热器的两个回路之间来回交换，一个回路以约 10 Hz 振动，另一个以约 9 Hz 振动。两个环路之间的这种幅度变化的相差几乎为 180 度。

通过分析这些数据，PMI 将振动水平的变化与两相馏出物流中的氢气流量关联起来。为了确定氢气流量变化的原因，PMI 对加热器管道系统进行了 CFD 分析，在 Simcenter STAR-CCM+ 中重新创建了整个流态。他们设置了使用 Simcenter STAR-CCM+ 欧拉多相模型来跟踪管道中的气相和液相组分，并使用 S-gamma 子模型来跟踪单个液滴的尺寸。

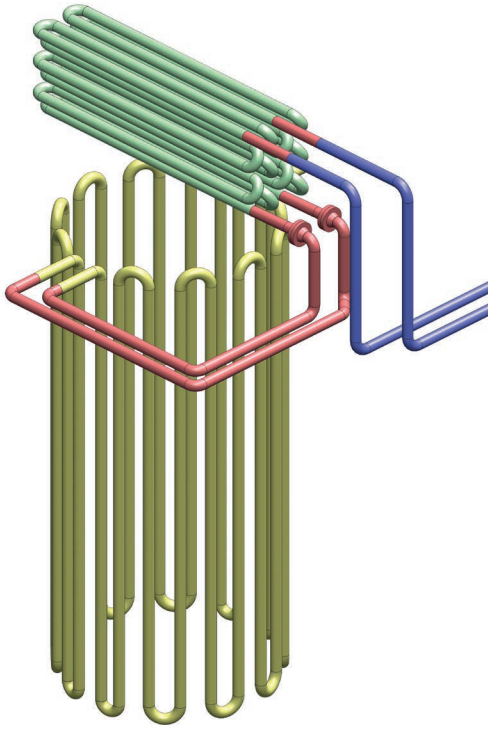


图 1：管道的几何图形，按段着色。

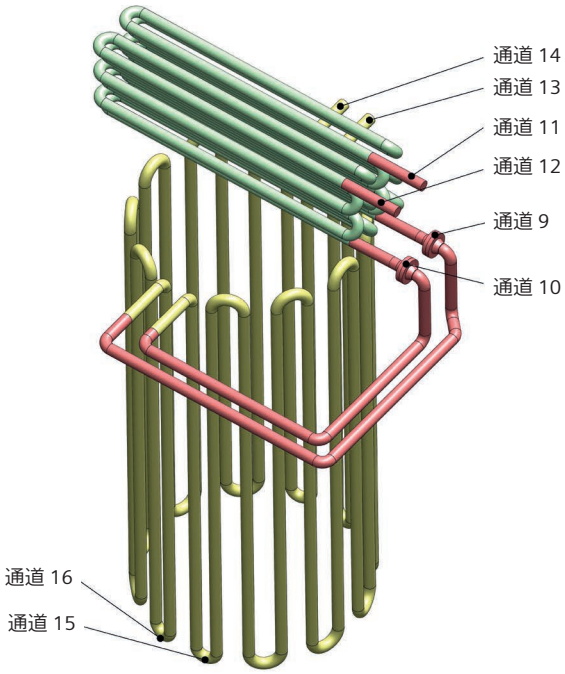


图 2：加速度计在测试系统中的位置。

为了跟踪模型各部分中的各种量值，他们创建了五个区域：入口管段、对流段、交叉段、辐射段和出口三通。为了准确读取加热器的状况，在仿真中，PMI 在每个弯头和管道上都设置了相当数量的 3D 力监控器，并在每段的入口处都设置了液体和气体压力和质量流量监控器。他们通过目视检查静止图片和动画来识别仿真中的各个流态。图 5A 所示为其中一个压力图的快速傅立叶变换 (FFT)，指示了压力的振荡峰值周期。图 5B 所示为每种流量配置下，通过辐射和对流段的压力脉冲的测量周期和仿真周期。可以清楚看出，仿真和测量的频率计算值非常一致，证明了从模型中获得的时域压力和力变化轨迹是可信的。

仿真结果表明，对流区域的流动模式（以层流为特征）没有明显的振荡。另一方面，辐射段的流态表现出明显的环形节涌（液相沿着壁流动，中央有气核），从而导致高度不稳定的流动模式（图 6）。形成的节涌模式与管道振动的频率相匹配。这些节涌模式还与在辐射、交叉和对流段中测得的压力脉冲有关联。尽管这足以成为振动原因的良好环境证据，但 Porter McGuffie 并不满意。他们又使用 PMI 专有的耦合软件将 Simcenter STAR-CCM+ 与 Algor（一种有限元分析代码）一起运行，进行了进一步研究。PMI 还应用来自 CFD 仿真的力载荷数据预测出了管道的位移（图 7）。图中以红色突出显示加热器中振动位移最大的区域。图 8 所示为 FEA 预测加速度与实测加速度的叠加比较，详细展示了明显的相关性。

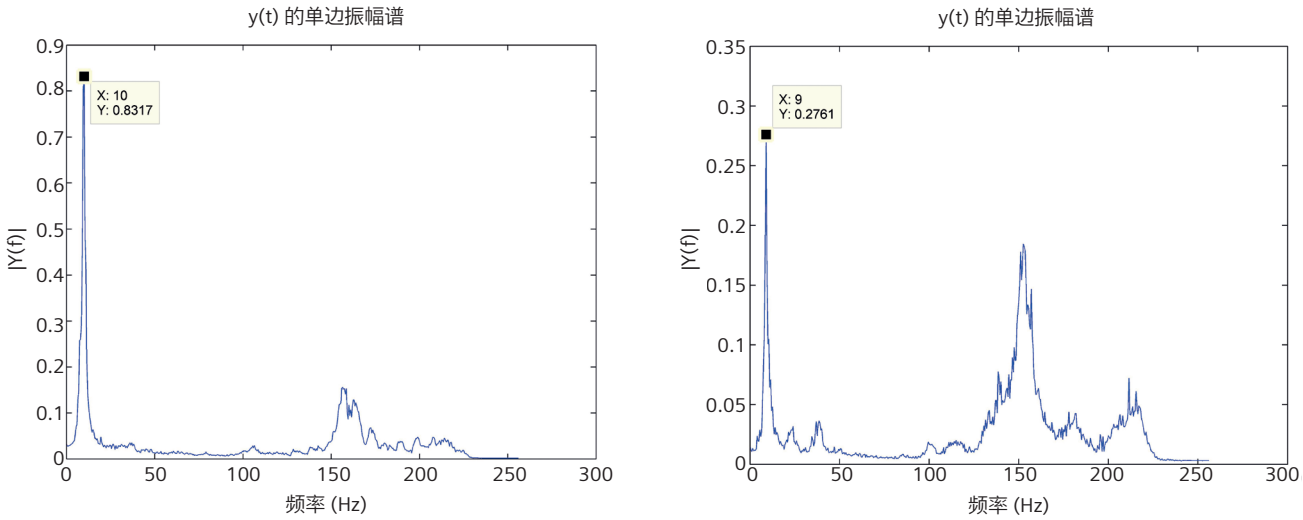


图 3：在位置 9 和 10 处测得的振动频率。

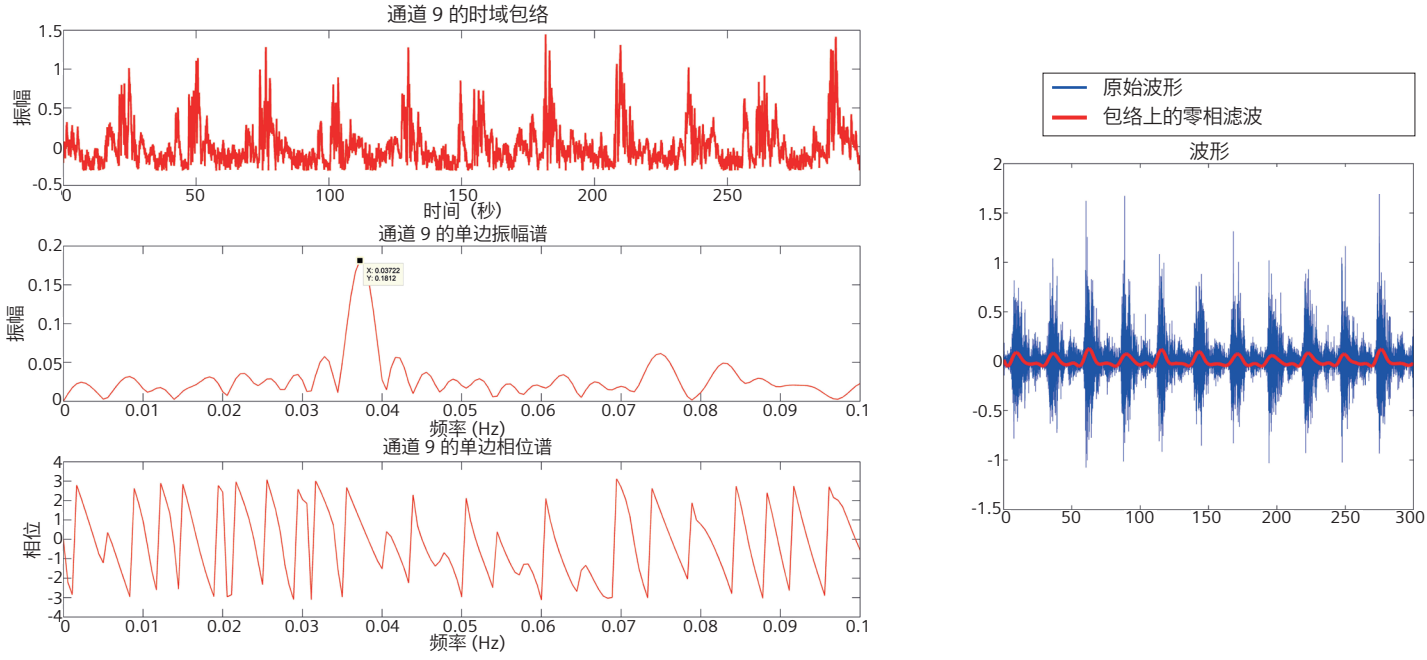


图 4：振动幅度的周期性分析。

Porter McGuffie 因此能够向客户详细说明其加热器出现如此高振幅振动的原因。辐射段中的两相流导致了仿真辐射段中的显著压力变化，这是 H2 管线中质量流量变化的原因。定性地说，压力变化与现场测得的氢气流振荡频率是一致的。在 CFD 仿真和结构振动分析中预测的力大小也与实测数据非常吻合。进一步的实验和仿真表明，尽管流的脉动幅度随总吞吐量变化，但管道振动的频率保持恒定。同样，这与测量数据非常吻合。因此很明显，发生振动时管道的共振模式被激发了。

PMI 使用 Simcenter STAR-CCM+ 在几周内就完成了测量和仿真。欧拉多相模型与 S-gamma 子模型的结合使用，使他们只用一周时间，就在 12 个处理器内核上使用数百万个单元对一个大型两相系统运行了分析。而更传统的流体域体积 (VOF) 模型方法，在使用正确的网格密度时，需要超过 500 亿个单元和数周的运行时间。

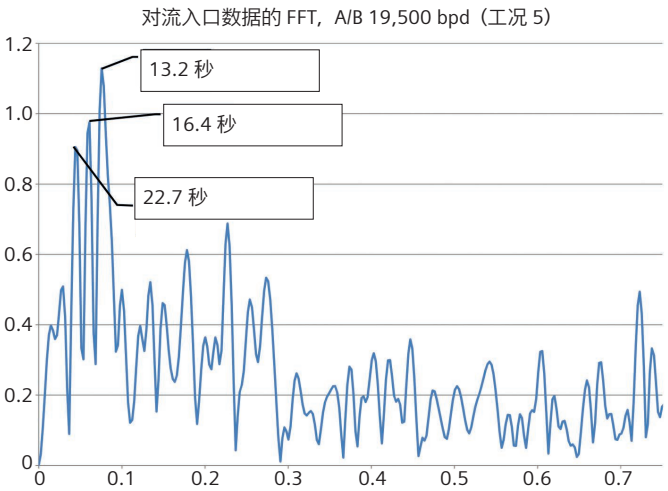


图 5A：压力从时域到频域的 FFT。

工况编号	入口配置	流体配置	近似测量周期 (秒)	初次 CFD 计算周期 (秒)
1	缩径	A/B 14,500	13.3	11
2		A/B 19,500	27	23
3		C/D 14,500	13.3	14
4		C/D 19,500	27	29
5	至交换器出口	A/B 19,500	27	27
7		A/B 24,500	24.5	22
8		A/B 35,000	不适用	19

图 5B：实验测量数据与 CFD 结果的比较。

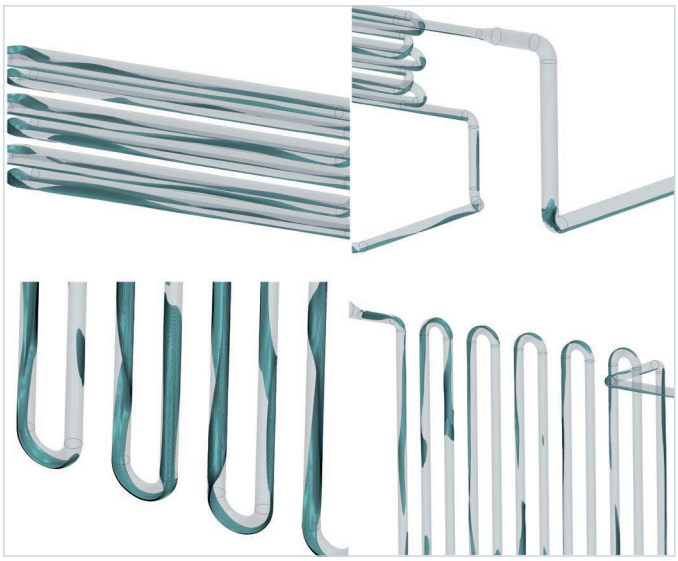


图 6：CFD 计算得到的管道中液流，显示出严重节涌。

PMI 的总工程师迈克 · 波特 (Mike Porter) 表示，如果不使用 Simcenter STAR-CCM+ 进行仿真，就无法查看管道内的流体流动情况，并且需要数月的分析和研究来诊断和解决问题。总而言之，Porter McGuffie 只用几周时间就完成了传统方法和工具通常需要耗费数月才能完成的工作，包括完成测试、分析并根据建议完成重新设计。

PMI 建议的更改计划于今年 10 月进行，几乎可以确定该加热器将能够满负荷运行。Porter McGuffie 随后就可以宣称他们将继续保持 100% 的分析和设计解决方案成功率记录，这让大型企业集团中的大多数工程公司和部门羡慕不已。

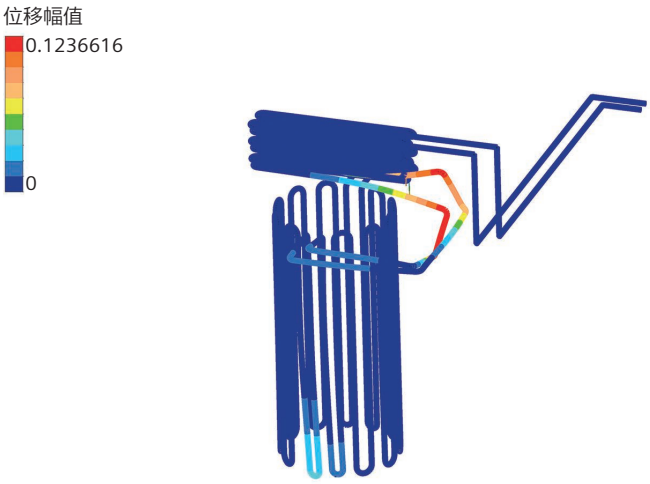


图 7：CFD 计算得到的流体管道位移，准确预测了最剧烈的振动位置。

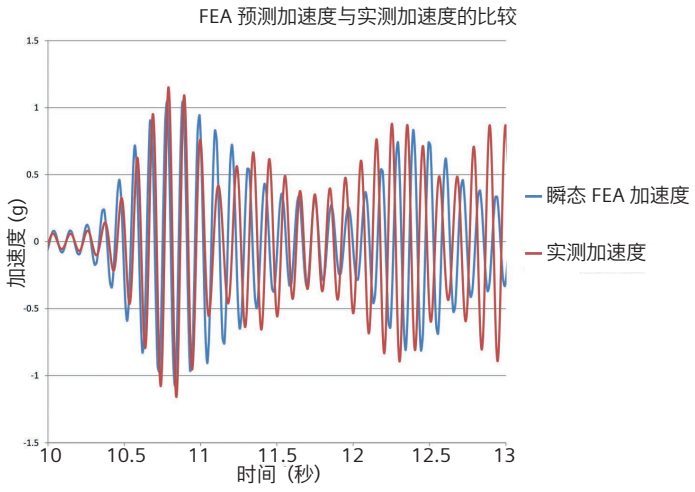


图 8：FEA 预测加速度与实测加速度的比较。

燃烧工程师简的日常一周

最近，柴油乘用车的排放性能和驾驶周期测量结果在媒体上引起了轩然大波。这些讨论凸显了减排和性能的重要性，也揭示了这项工作的巨大挑战。如果世界上一些汽车制造业翘楚都在艰难奋斗以期满足排放限值，那么显然这并非易事!

排放物是化学过程的副产物，要理解、预测和设计符合要求的车辆，就必须充分了解基本的化学反应途径。本文旨在向您介绍可以帮助您更轻松、更简洁明了地理解和预测化学过程的工具。下面我要讲一个故事，主人公简是一名燃烧室设计工程师，我会介绍一下她面临的日常挑战。

认识简!

简是 CombustionCorp 的新聘设计工程师，该公司刚刚开始在其开发项目的主要工作中使用 CFD，燃烧室设计就是其中之一。分配给简的第一项任务是研究和改进天然气燃烧室的设计。她使用 Simcenter STAR-CCM+ 快速完成了几何和物理设置，同时选择了标准涡破碎 (EBU) 燃烧模型。她认为，通过仅建模一个总体反应来简化工作是一个不错的起点，因为管理层要求尽快完成工作，她为此倍感压力。她获得了流场和温度场，并验证了结果是准确的。接下来，她开始使用 Optimate+™ 进行设计，这使她能够优化燃料喷嘴的放置，快速、自动地改进设计。

几天后，实验室的一位科学家告诉她，她设计的燃烧室在使用不同质量的天然气时性能不同。她不知自己是否需要考虑更复杂的方法，于是提出了疑问。

为什么燃烧室在使用不同质量的天然气时性能会有所不同?

不同质量的天然气中包含不同数量的大分子烃类。优质天然气主要由甲烷组成，而劣质天然气包括几个百分点的乙烷、丙烷和丁烷。大分子烃比甲烷的化学键更容易断裂，因此劣质天然气的点燃速度更快。

提前点火对整体燃烧行为会有什么影响?

为了了解这一点，简在隔离环境中，在消除流场影响的情况下研究该化学效应。她发现可以使用 DARS 来完成此任务。

DARS 是 Siemens Digital Industries Software 出品的一个独立工具，可用来分析零维和一维理想反应器中的化学反应。该工具可以读取和分析化学反应方案；例如后处理系统中的碳氢化合物燃烧和催化过程。

简打开 DARS 并阅读了 DARS 随附的标准天然气化学物质组成。然后，她将几个不同的反应器连接到读取机制模块（图 1）：

- 自由传播火焰：此模块计算层流火焰速度，这是火焰传播以及燃烧室燃烧行为的重要属性。该模块还计算火焰中的组分分布和温度
- 恒压：该模块计算均质恒压条件下自动点燃事件的点火延迟时间、组分分布和热力学属性。它也可用于计算排放量
- 小火焰库：此模块计算扩散火焰中的组分和温度曲线。它还计算熄灭极限
- 平衡：此模块计算平衡组分和温度。对于每个模块，简在 DARS 中都尝试了使用两种不同质量的燃料：
- 纯甲烷，以仿真高品质天然气
- 甲烷与少量大分子烃（C2-C4）的混合

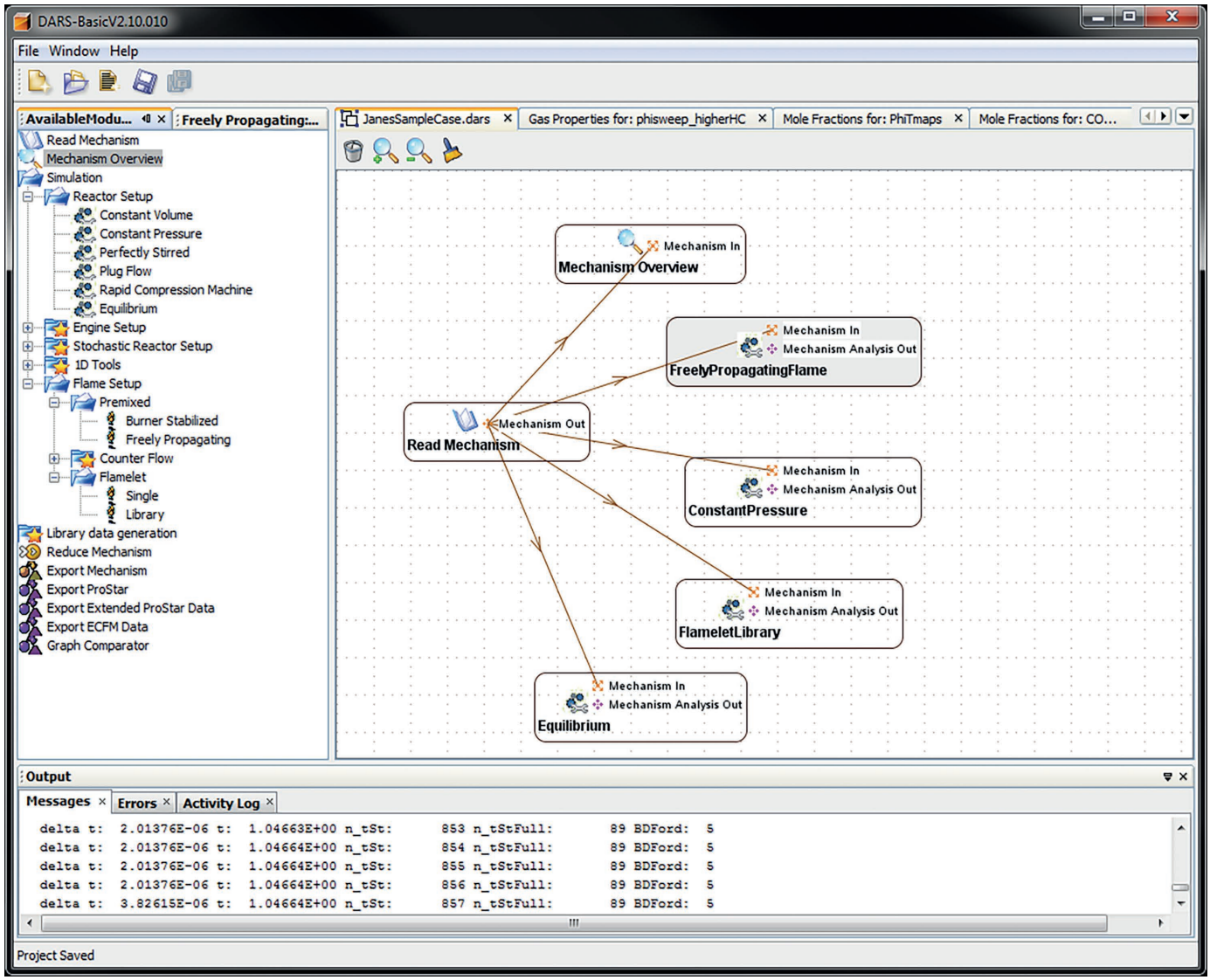


图 1：在 DARS 中为化学分析设置工况。

她首先针对一系列当量比计算层流火焰速度。层流火焰速度是预混合条件下自由传播火焰的速度。她发现低质量混合物的火焰速度约为每秒 1 厘米 (1 cm/s)。她思量这对她的设计是否重要。

火焰速度更快对燃烧室意味着什么？

简认为这会增加燃烧室中反闪的风险。她还注意到，在非常稀薄的条件下，纯甲烷燃料的速度比低质量燃料慢约 14%，这表明高质量的天然气更容易产生稀薄的吹气（图 2）。

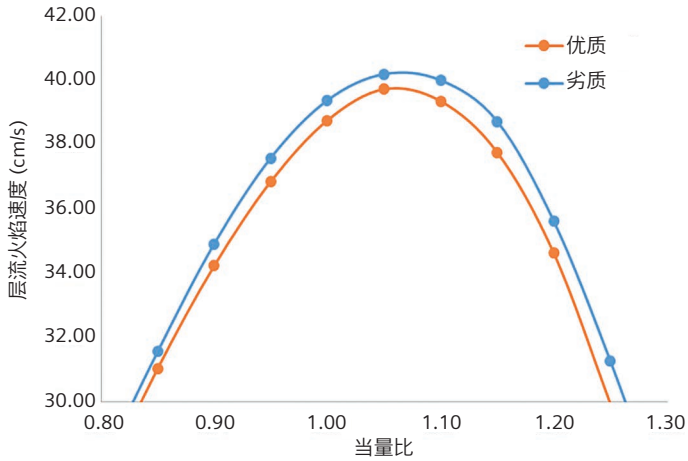


图 2：优质和劣质天然气的层流火焰速度。

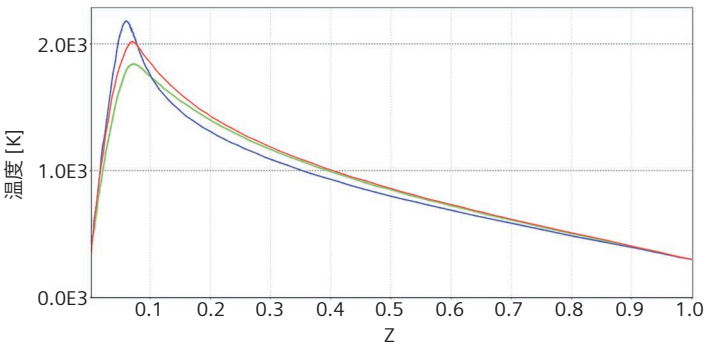


图 3: 各种标量耗散率下劣质天然气的小火焰温度（绿线: 标量耗散率非常低; 蓝线 : 标量耗散率低 ; 红线 : 标量耗散率中等 ; 绿线 : 标量耗散率非常接近熄灭）。

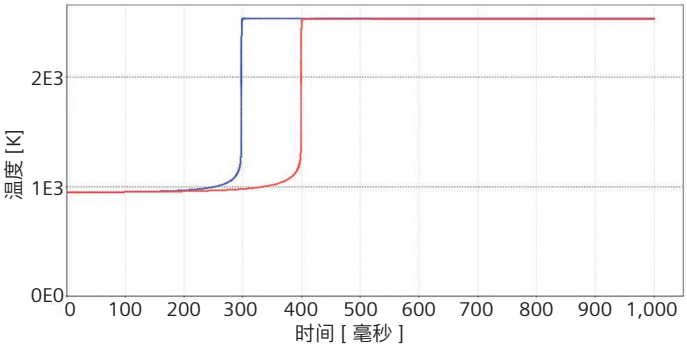


图 4 : 初始温度为 950K 时，不同天然气质量的可燃性（红线 : 优质 ; 蓝线 : 劣质）。

为了了解扩散燃烧过程中的行为，她计算了每种燃料成分的火焰库。小火焰是理想化的层流扩散火焰，小火焰库是一组用于各种标量耗散（混合）速率的小火焰。她观察到, 在高标量耗散率下，低质量燃料的小火焰的最高温度大约高出 30,000。这使得高质量天然气火焰更容易熄灭 ; 她注意到低质量燃料的熄灭标量耗散率为 41/s，而高质量燃料为 35/s。熄灭标量耗散率是扩散火焰被吹灭时的混合速率。这表明吹灭对于高品质天然气更为普遍 (图 3)。

简计算了点火延迟时间，以了解可燃性并评估燃烧室混合区中的提前点火趋势。她创建了一个以甲烷为燃料的参数扫描（在 DARS 中称为 “多次运行”），扫描给定入口温度和环境压力下的整个燃油 - 空气当量比范围。几秒钟后计算完成，她可以观察到混合物点燃了。她注意到劣质天然气的点火时间缩短了约 25%，这增加了混合区中提前点火的风险（图 4）。从平衡计算中，她观察到劣质天然气的绝热火焰温度比高质量天然气的绝热火焰温度高约 5,000。看到仅很小的燃料成分变化对燃烧行为的影响后，简认识到她需要继续进行 CFD 仿真研究，以量化对燃烧室行为的影响。她现在需要弄清楚几个问题。

如何在 CFD 计算中考虑不同的混合燃料?

简弄清了她可以在 Simcenter STAR-CCM+ 中使用小火焰生成流形 (FGM) 模型来做到这一点。该模型包括完整详细的限速率化学，且不会影响执行速度。通过为每种燃料混合物创建一个 FGM 库来考虑不同燃料混合物的影响。FGM 库根据详细的化学特性生成。

如何获得用于 Simcenter STAR-CCM+、包含燃烧室条件的 FGM 库?

简最终发现也可使用 DARS 完成此项工作。她打开自己的 DARS 项目, 将 FGM 库生成模块拖到工作台上, 设置计算并运行库生成。她针对各种不同的天然气混合物创建了一组 FGM 库，并将其用于自己的 CFD 计算，为 Optimate+ 优化添加了不同的燃料质量。她找到了一种同样适用于劣质天然气的设计，并提交给实验室工程师进行测试。此次更新之后，她的同事对行为的变化非常感兴趣，并想知道其中原因。

怎样才能了解混合燃料变化的影响?

为此，她使用劣质天然气和纯甲烷重新运行了均质恒压反应器，然后检查了组分敏感性分析。纯甲烷燃烧的结果如图 5 所示。

甲烷和氧气是燃烧过程的主要物质，这在意料之中。然后，她绘出了劣质天然气的相同敏感性分析，如图 6 所示。

丙烷仅占混合燃料的 1.5%，但对燃烧的影响程度几乎与甲烷相同。丁烷仅占混合物的 0.3%，对燃烧也有重大影响。这说明大分子烃类有很大的影响。为了了解这种行为背后的反应，她检查了它们的敏感性。她注意到，除了氧化反应以外，丙烷和丁烷的裂解是两个重要的过程（图 7）。

敏感性分析、点火延迟时间图和 CFD 仿真，有了这些，简足以向同事解释此过程中发生的各种现象。不久后，实验室工程师又找到她并询问有关排放的信息。某些载荷点的一氧化碳 (CO) 排放量高得令人无法接受。她准备好迎接下一项挑战了吗？

如何改善排放性能？

为了更好地了解一氧化碳 (CO) 排放，简启动 DARS 并在恒温下运行了一组均质恒压反应器，得到了排放图（图 8）。

在此图中，她看到不同燃料 - 空气当量比和不同温度下的 CO 产生情况。通过与 CFD 中的混合分数和温度流场进行比较，她发现在其同事指出的载荷范围内，在靠近燃料出口的一些富燃料区中燃烧室产生了较多 CO。她需要改善这些区域中的混合，从而对这些区域中的最大当量比设置约束，以用于下一优化循环。她设法以损失效率为代价来降低 CO，并且研究了 CO 排放与效率之间的权衡关系。为了进一步了解 CO 产生情况，她将 CO 添加到自己的 FGM 库生成的后处理组分中，然后重新生成 FGM 库。现在，她可以在 CFD 仿真中直接研究 CO 产生情况（图 9）。

最后，为了全面了解详细化学性质的影响，她在 Simcenter STAR-CCM+ 中选择了一种工况并应用了复杂化学，然后用 DARS 中使用的化学机制执行了完整的 CFD 仿真。这可以用作构建其他燃烧模型的一个很好的基准。她说服自己的经理，尽管完成这些仿真需要更长的时间，但它们将提供更好的准确性。毕竟，公司肯定不希望因为不合规而被叫停。较长的计算时间可能只是一笔很小的费用。

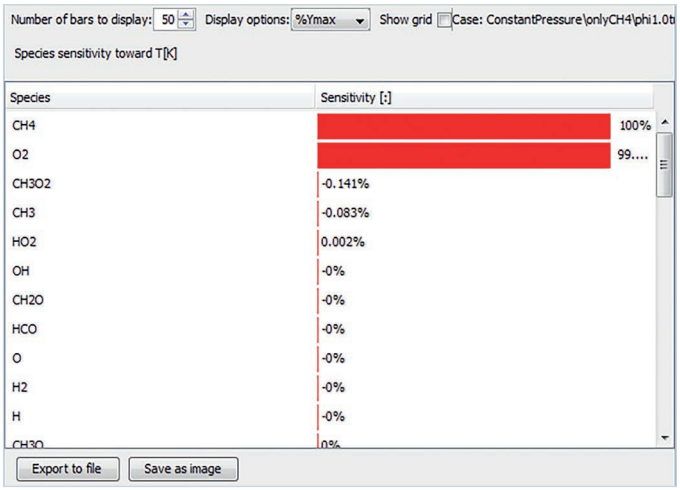


图 5：优质天然气燃烧的组分敏感性。

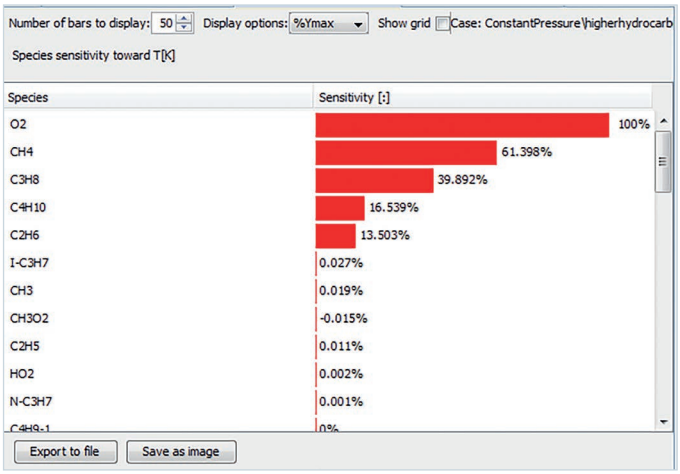


图 6：劣质天然气燃烧的组分敏感性。

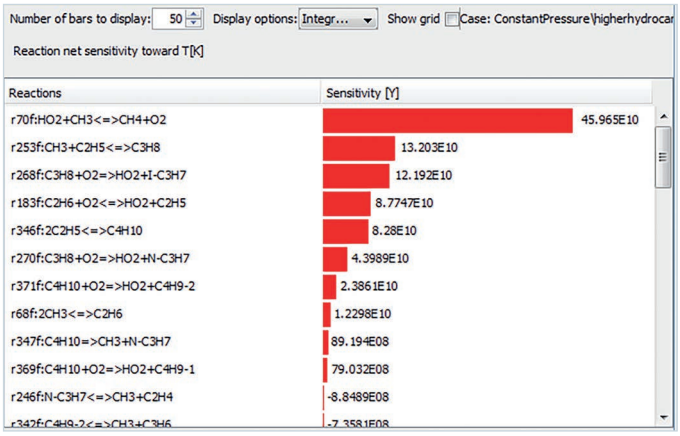
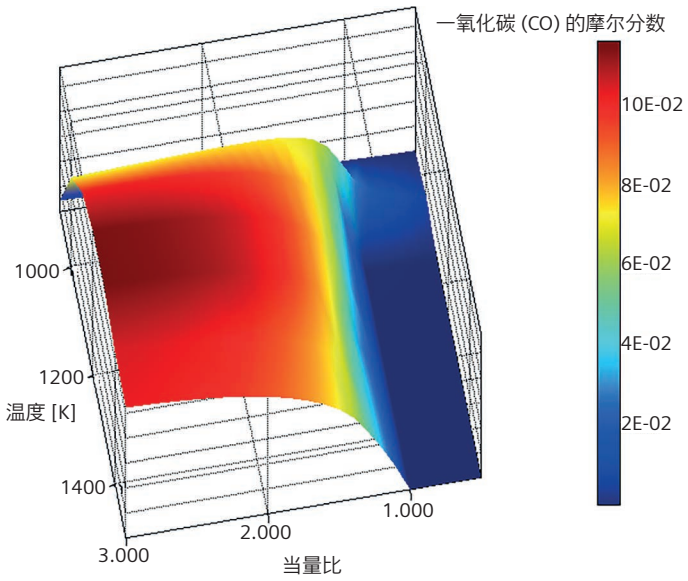


图 7：劣质天然气燃烧的反应敏感性。



关于 DARS 的更多信息
除了执行本文所述的复杂化学计算外，DARS 还可以用于：

- 生成用于缸内燃烧的燃烧和排放库：
  - ECFM-3Z TKI
  - ECFM-CLEH TKI + 平衡
  - PVM-MF
  - 碳烟
- 计算层流火焰厚度
- 计算催化剂（DOC、TWC、DPF 等）中的表面和气相化学特性
- 减少机制
- 使用随机反应器模型计算缸内燃烧

图 8：一氧化碳排放随温度和当量比的变化。

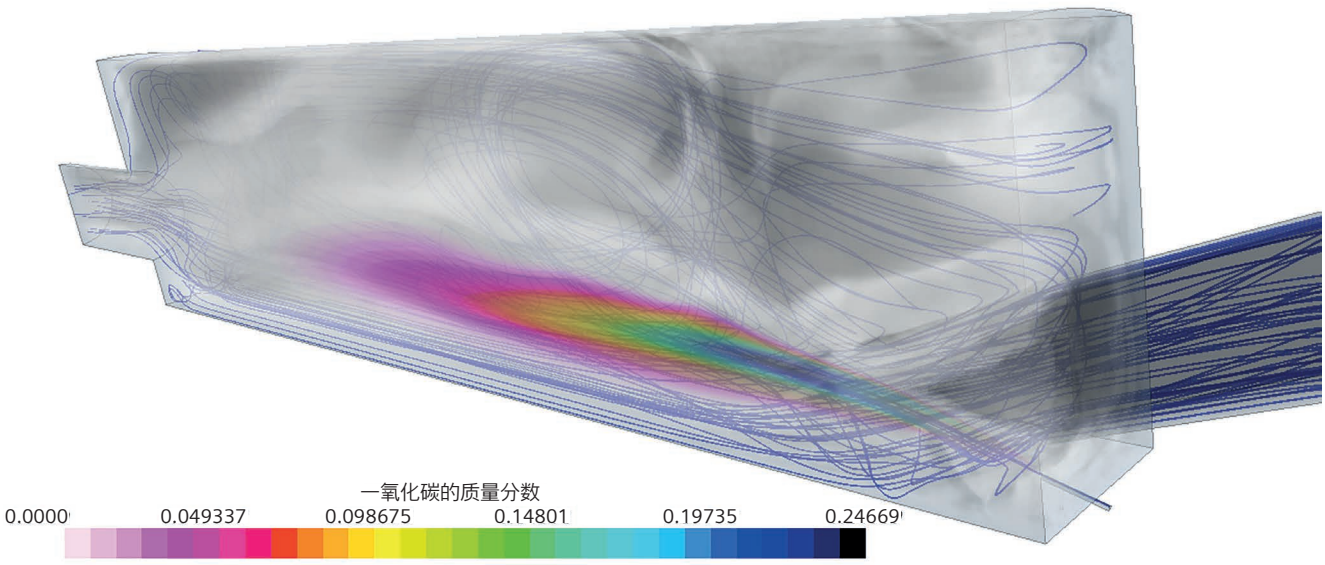


图 9：使用 FGM 燃烧模型的玻璃熔炉仿真中的一氧化碳质量分数场。

从料滴到瓶子：保特罗对完整的玻璃成型工艺进行仿真

简介

玻璃容器的生产通常不易把握，各公司经常需要投入大量时间和金钱来确保交付质量合适的产品。玻璃确实是一种行为极其复杂的材料，通常难以预测制造过程中会发生什么。到目前为止，生产参数的调整完全取决于操作员的经验。

保特罗是玻璃机械领域一家过程导向的著名公司，业务遍及全球。该公司为了摆脱上述困境，于是与多个大学实验室以及生产专家合作，开发了一种基于仿真的方法。这项工作的目的是为玻璃厂提供制造工具方面的支持，以最终大大减少启动流程所需的时间。

计算机仿真不仅有助于获得更好的见解并帮助设计最佳的瓶子形状，还可以替代工厂通常采用的耗时且昂贵的反复试验过程。代表性的数字仿真有助于最小化容器壁厚的意外变化，并在保持强度的同时减轻重量。仿真在优化冷却条件和提高生产速度方面也具有极大价值。所有这些都有可能显著降低玻璃制造工艺的成本。

玻璃容器成型工艺

在此过程中，首先将容器成型为中间形状，称为型坯，然后将其吹制成最终形状。根据制成型坯的不同方式，有两种玻璃工艺：吹 - 吹法，其中型坯使用压缩空气制成；或压 - 吹法，其中型坯使用冲头以机械方式制成。本文下面介绍的是对压 - 吹法的研究和仿真。

熔融玻璃离开熔炉时，其温度超过 1400 摄氏度 (° C)，然后穿过成型通路和进料器，再由剪切和分配系统切成均匀的玻璃料滴。之后，每个料滴被送到单部分玻璃制品成型机，在这里温度降至 1200° C 以下，然后将料滴强制制成模具形状。成型机由两套称为初模和吹模的模具组成。

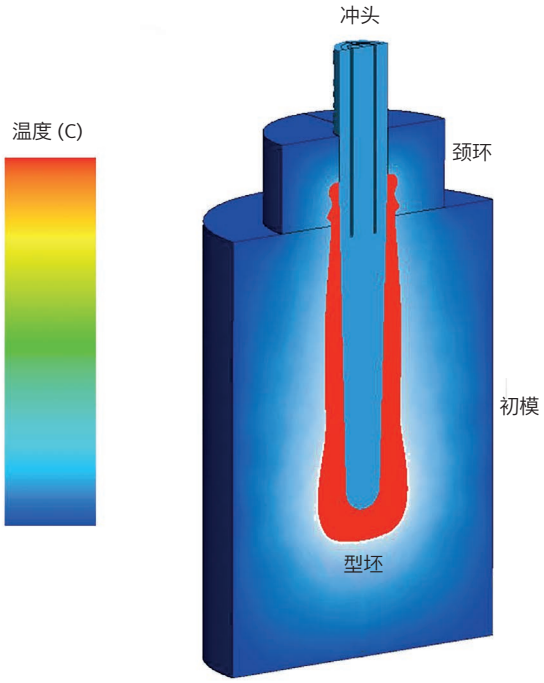


图 1：在初模中形成的型坯的三维温度分布。

首先，料滴在初模中从上方掉落并被压成模具形状，形成厚壁的预成型坯。然后，机械臂将型坯从初模中取出，进行倒置并输送到第二个模具（吹模）中。此时，预成型坯在重力作用下开始向模具底部拉伸。最后，设备注入压缩空气并形成真空，将型坯膨胀成最终的瓶形。然后，容器被输送到退火炉中，在此处进行再加热，以消除成型期间产生的应力。此后，容器在受控条件下冷却，完成制造。

玻璃成型的仿真需求

玻璃成型过程涉及高温，并且对加工时间、玻璃成分和环境条件的变化极为敏感。由于几乎不可能实际看到不同阶段中模具内部发生的情况，数字仿真是唯一可帮助更好地了解过程中的物理细节的工具。在这项工作中，以实验方法验证仿真结果，方法为比较玻璃和设备的红外表面温度测量值并检查最终容器、玻璃分布（壁厚）和可能存在的缺陷。在构建仿真方法时要特别注意，以确保使用了最逼真的模型。这意味着，要对仿真中的近似值加以限制，并将玻璃成型过程建模为紧密耦合的热流体动力学过程。在此过程中，热玻璃通过传导和辐射将热量传递给模具，而且玻璃仅部分发射 / 吸收红外光。另外，玻璃和环境之间也通过对流和辐射进行热交换。这些热交换界面在几何形状上很复杂，并且在瓶子成型期间会随着时间发生巨大变化。

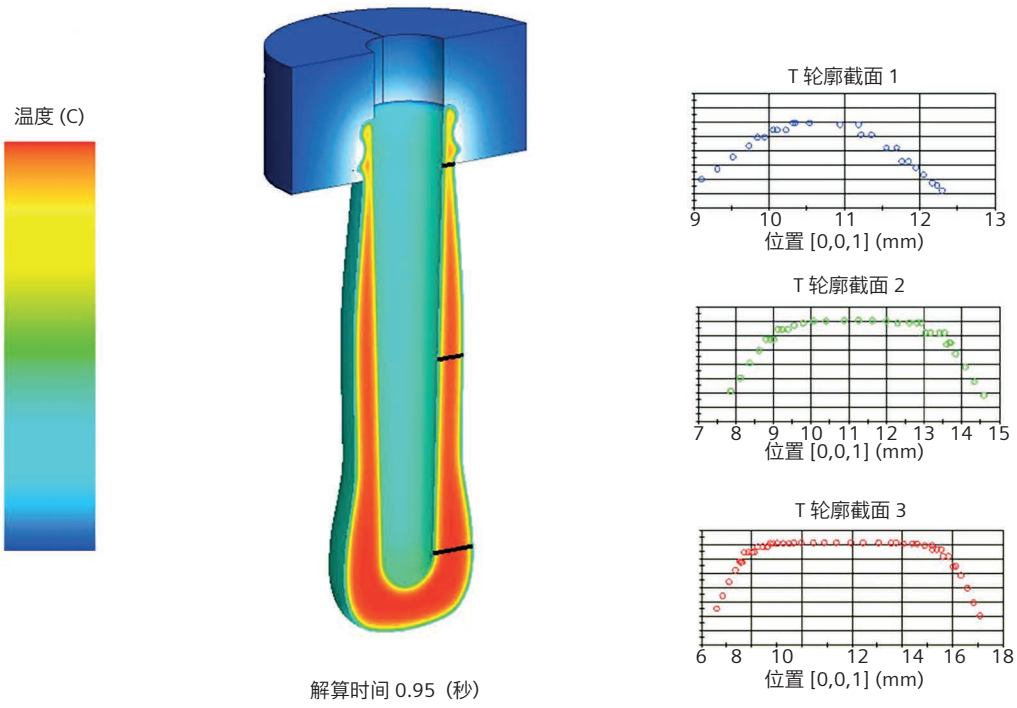


图 2 : 型坯的详细 3D 温度模型，显示了逼真的垂直温度趋势。

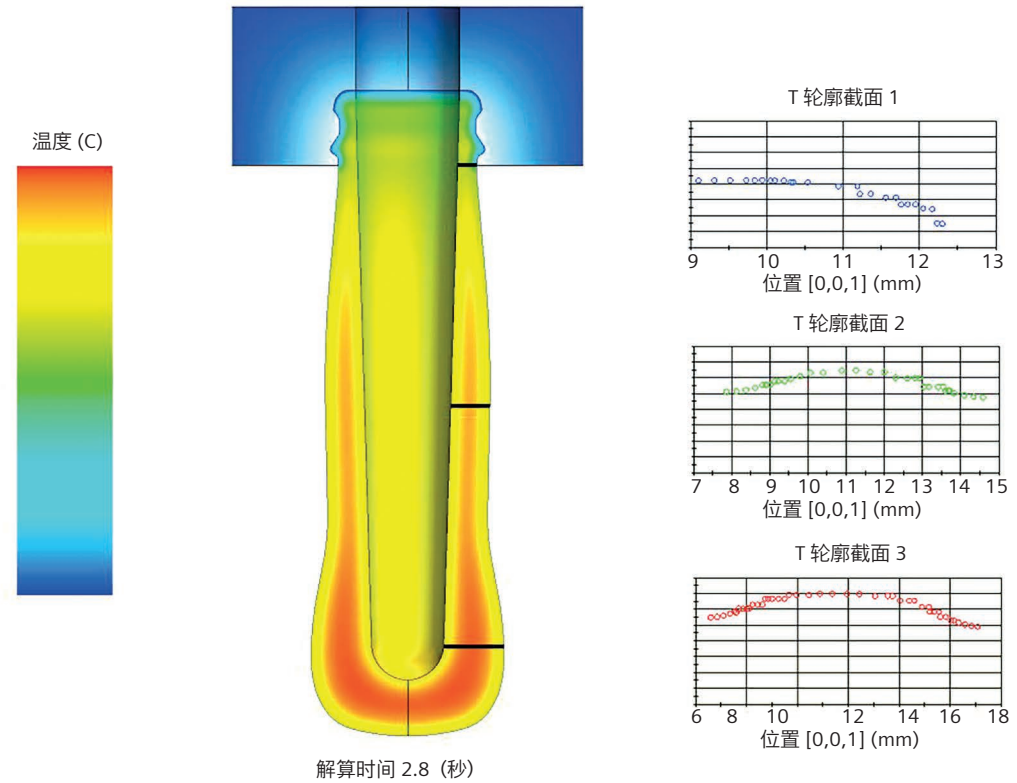


图 3 : 再加热期间的型坯温度，显示了温度的重新分布。

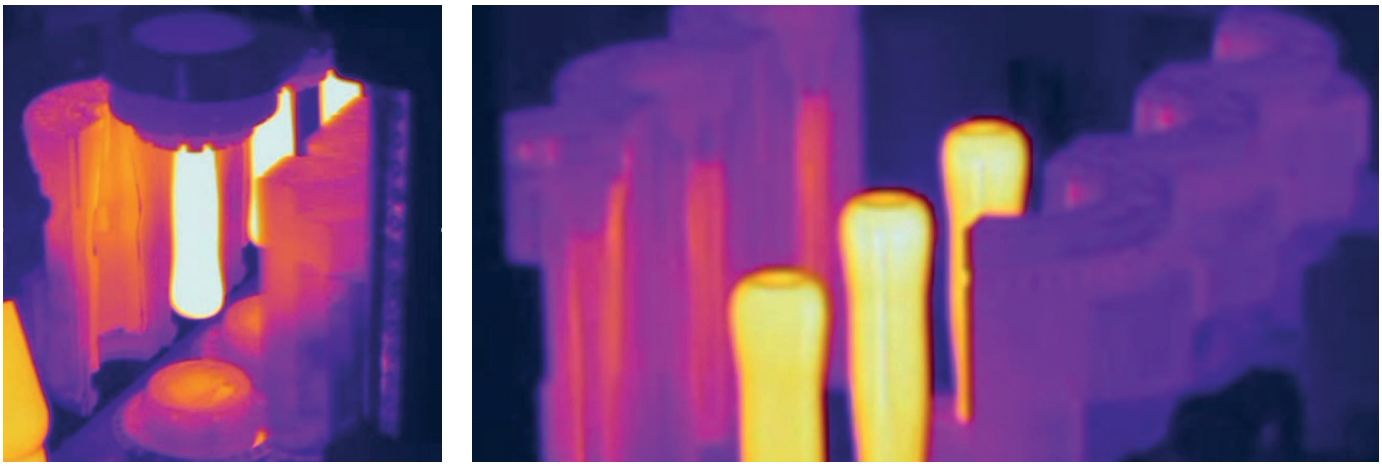


图 4：针对玻璃进行了实验测试，证实了与仿真的良好关联

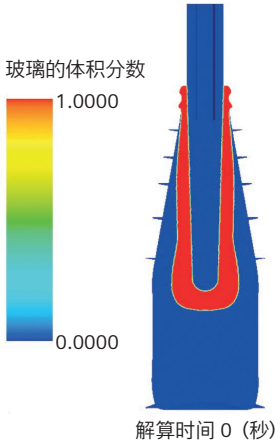


图 5：用于仿真形状变化的型坯动力学模型中的玻璃的体积分数。

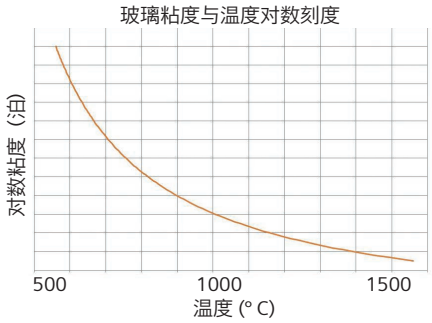


图 6：玻璃成型过程中玻璃粘度随温度的变化。

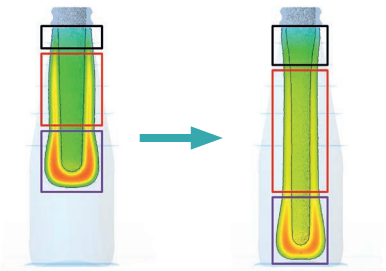


图 7：使用 Simcenter STAR-CCM+ 进行的仿真，显示了型坯在吹模中的形状变化。

建模方法

利用 Simcenter STAR-CCM+ 可以仿真此生产周期的整个物理系统，从热玻璃料滴一直到成品瓶的形成。位于意大利库尼奥的超级计算基地拥有 25 台服务器，可同时在具有 450 多个核心的高性能计算群集上运行。它通过非常精细的体网格促进了 CFD 仿真，产生了大量元素，并确保了极高的空间分辨率，可以准确捕获成型过程。

开发该工艺的第一步是执行非稳态仿真，以获得将玻璃料滴压入初模时产生的型坯的三维温度分布（图 1）。数字模型使用实验条件（例如温度曲线）进行初始化，包括设备的所有细节，然后求解离散坐标模型 (DOM) 的辐射和传导。玻璃与铸铁交界面处的接触传热系数不仅是温度的函数，还取决于许多其他参数（例如时间、压力、模具粗糙度，是否存在润滑剂等），因此不能视为理想系数。仿真所使用的传热系数通过实验确定。

瞬态仿真产生了型坯的详细 3D 温度模型，并显示了预期的逼真温度趋势：型坯壁越厚的地方玻璃温度越高。这种典型的垂直温度趋势是形成良好最终产品所必需的，而且在实验中非常难以控制。与预期相同，由于玻璃的粘度取决于其温度，因此冷颈区的行为就像固体玻璃，而型坯的热底部仍然柔软且易于加工。使用类似方法来仿真型坯的再加热，在此期间，模具打开，型坯温度沿厚度方向重新分布，整个过程大约持续两秒（图 3）。

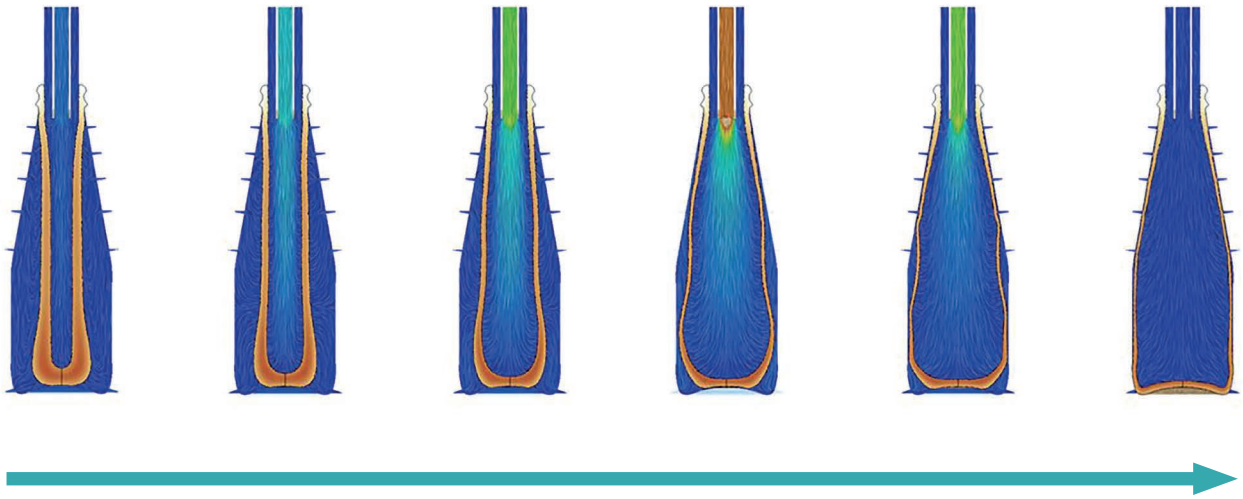


图 8 : 使用 Simcenter STAR-CCM+ 对玻璃成型过程（从初始玻璃料滴直至最终形状）执行的完整仿真。

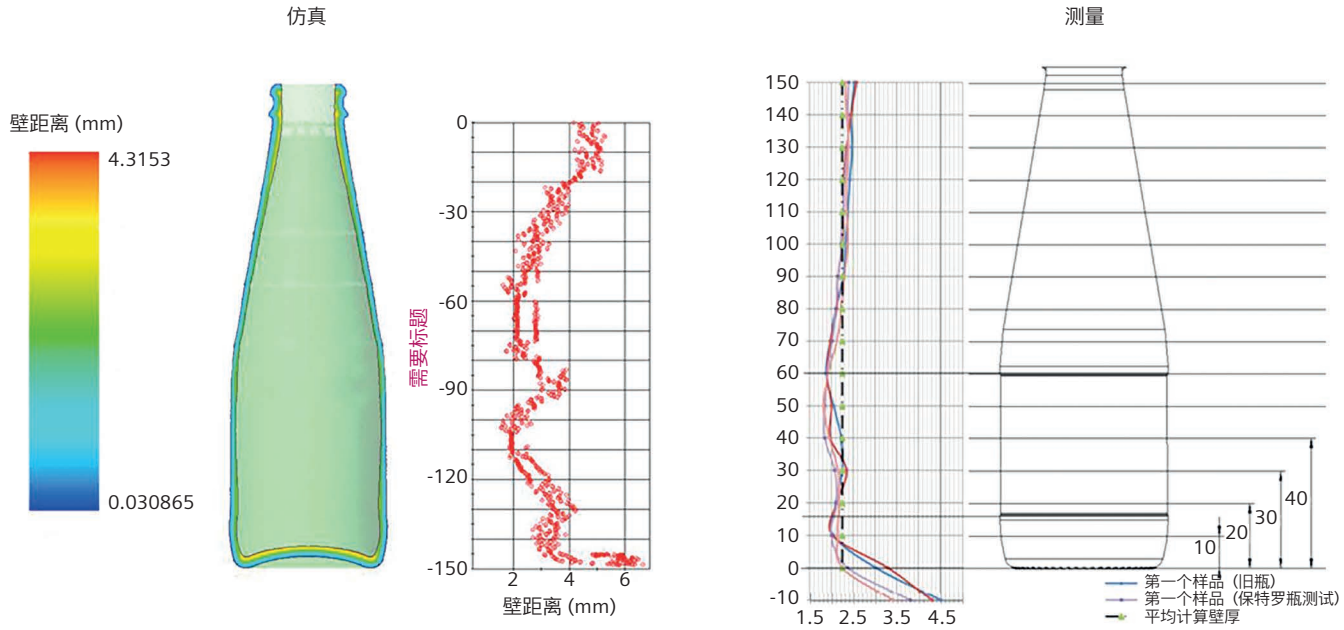


图 9 : 对使用 Simcenter STAR-CCM+ 进行的数字仿真进行验证，结果表明壁厚与实际瓶子具有很好的可比性。

使用 Simcenter STAR-CCM+ 进行仿真，不仅可以计算型坯的完整体积温度（表面和内部），还有助于您更全面地理解获得的玻璃和模具热红外测量值，因为这些测量值仅提供表面信息，未能提供型坯内部信息。在玻璃上进行实验测试（图 4）以验证仿真结果，从而证实了仿真与实验数据之间存在良好相关性。

接下来，建立型坯的动态模型，用于预测吹模中的形状变化，仿真操作从上一步中获得的初始温度分布开始。这是玻璃成型过程中最重要的步骤之一，因为它会极大影响最终的瓶子形状。仿真中的以下两种流体都使用 Simcenter STAR-CCM+ 中的流体域体积 (VOF) 模型建模:玻璃 (密度和粘性) 和型坯外围的空气 (图 5)。

使用 VOF 方法可以对玻璃和气流的细节准确建模，玻璃和气流由明确定义的交界面（自由表面）分隔开，并可以在每个时间步求解交界面在精确时间点的位置。其中考虑了材料的机械和热属性，包括粘度、密度、电导率和比热。此外，由于玻璃的粘度取决于温度，而温度会随时间变化，因此仿真中热通量和温度分布将与交界面的运动同时求解。

使用玻璃比粘度随温度变化的实验测量值（图 6）和在上一步中获得的温度曲线,成功仿真了型坯在吹模中演变时的机械行为（形状改变）。该模型由对应于瓶子最终形状的模具内表面组成。

压力在空气从顶部注入的地方流入，侧面有数个压力流出点，以便在该过程的最后步骤中形成真空。

在吹模的前 2.2 秒内，型坯仅在重力作用下向下拉伸至底部，因此没有空气注入。此过程（也称为拉伸）对于获得合适的瓶壁厚度至关重要，并且对型坯温度极为敏感，因为它会影响玻璃的粘度。

从图 7 可以看出，仿真表明从玻璃型坯的顶部开始，在瓶颈区域，玻璃是冷的，因此即使下方有较高的重力载荷，玻璃也不会拉伸。此外还可以清楚看到，型坯的中央部分是拉伸的主要区域，而在底部（重力载荷最低），即使玻璃是软的也不会拉伸。

通过在 Simcenter STAR-CCM+ 模型中同时预测动态和热特征，成功地仿真了此物理过程。此方法考虑了在发生拉伸时的再加热期间（局部粘度因此随时间精确变化）玻璃的温度重新分布。

在玻璃成型过程仿真的最后一步期间，空气从顶部注入，并通过侧孔产生真空，将玻璃吹成最终的瓶子形状，如图 8 所示。即使仿真这种快速运动并非易事且带来了挑战，但求解器在整个仿真过程中仍保持稳定。

通过将实际瓶子的壁厚与过程仿真获得的值进行比较，验证了仿真结果（图 9）。相关性非常好，证实了数字模型的可靠性，尤其是考虑到它是许多连续步骤的最终结果。这一点不足为奇，因为非常小心地确保了数字模型代表的是真实过程，其中考虑了玻璃（其属性严重受温度影响）、空气、模具和所有生产设备。玻璃数据是在专业实验室中用实验方法测得的，还考虑了实验设备的时间。

结论

在这项研究中，我们进行了玻璃容器成型过程的数字实施，该过程先前已在实际制造条件下进行了测试。成型过程的压制步骤和吹塑步骤均使用 Simcenter STAR-CCM+ 进行建模。我们计算了型坯的实际不均匀温度分布，并介绍和分析了成品的最终形状。

所有计算都在三个维度上进行，因此可以研究非旋转对称的型坯，从而评估初始型坯中的某种缺陷是如何随着时间发展的。当前模型对粘性流体有效，但经过修改可以用于粘弹性流体等。

本文介绍的数字仿真对玻璃制造行业极有价值，因为它们可以帮助您深入了解物理细节，从而可以优化生产过程，并最终显著减少制造时间和成本。

欧文斯科宁利用激光焊接仿真缩短设计周期并优化组件设计

这是一项特殊任务。拜伦 · 贝米斯 (Byron Bemis) 是欧文斯科宁的一名高级助理研究员，他的团队受命设计一种无法使用现有制造工艺制造的新一代制造部件。欧文斯科宁是全球领先的住宅和商用建筑材料生产商，产品包括：隔热材料和油毡瓦；用于汽车、轮船、风叶和智能手机等产品的玻璃纤维增强材料；以及用于复合系统的工程材料。该公司在俄亥俄州的格兰维尔设有一个科学技术中心，公司的大部分研发工作都在这里进行，贝米斯就在这里工作。

在这个特殊的研发项目中，贝米斯和他的团队开拓了新的领域。为了设计并制造所需的零件，他们的初始设计需要穿透一个钣金零件进行盲孔焊接并进入另一个钣金零件。贝米斯说：“确定焊接参数以确保这些焊件牢固可靠需要大量反复试验。如果使用物理原型来实现，则意味着要制造各个组成部分，然后按照一组预定参数将它们激光焊接起来，看看效果如何。我们需要不断执行这个操作过程，直至找到正确的组合。”贝米斯补充说，该项目的最大挑战之一是必须在小特征附近或者拐角或边缘附近焊接。如果激光作业温度太高或移动太慢，特征或边缘就可能熔化，从而损坏零件。

这些焊缝都非常小，尺寸从毫米到亚毫米不等，焊接在有极高制造精度要求的很小零件上。贝米斯说他们使用了很窄的焊接光束——许多工况下为 50 微米焊点，单个焊点使用的激光功率高达一千瓦 (kWh)。

使用的材料是具有高熔点、高熔融金属粘度和表面张力的合金。这导致了一些有趣的、非标准的焊接物理特性。

其中还涉及复杂的几何形状，包括小特征、边缘和圆形截面。由于制造该零件需要深度穿透，因此需要穿透式焊接。在穿透式焊接技术中，集中热源（例如激光）完全穿透工件，在熔融焊接金属的前缘形成孔。随着热源的推进，熔融金属会在舱室后面填充，形成熔敷焊道。所有这些需要考虑的因素，尤其是盲孔穿透焊接，意味着大量的反复试验。使用昂贵的合金和高价值的零部件进行数百次重复物理实验，不仅非常昂贵而且耗时。显然，仿真才是解决之道。但是，对整个穿透孔的物理特性进行高保真仿真非常复杂、昂贵而且缓慢。为了指定最佳的激光加工参数，该仿真必须充分预测各种相关数值，例如熔池直径、焊接区形状以及透入深度。

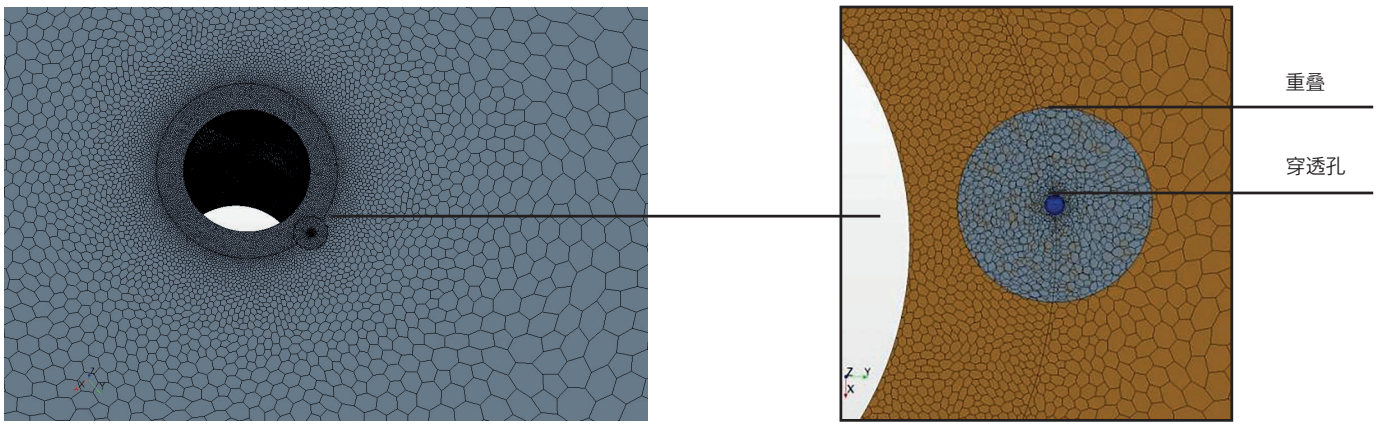


图 1：贝米斯发现了 Simcenter STAR-CCM+ 极为有用的一个独特功能——重叠网格，这是仿真技术的一大进步。

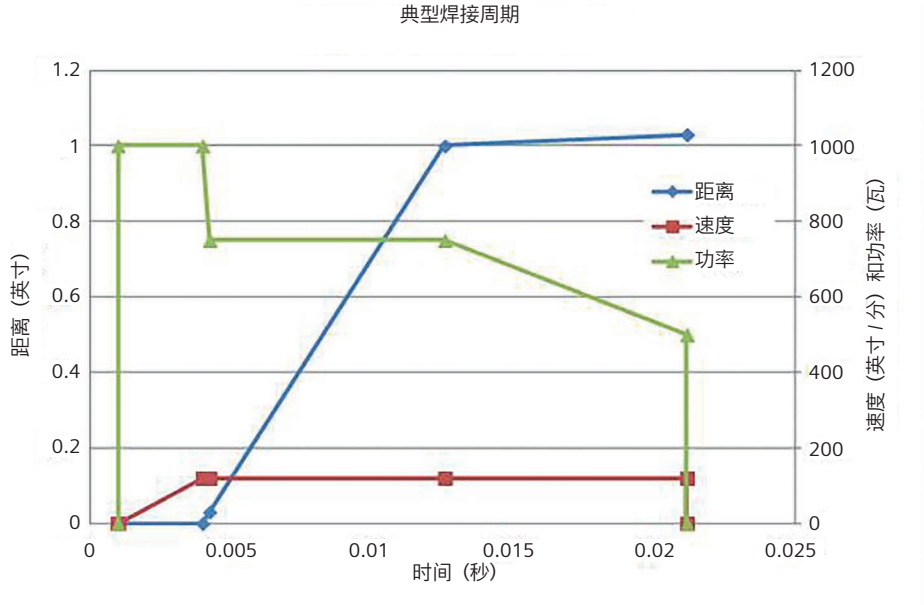


图 2：典型焊接周期。

寻求解决方案

贝米斯回忆到，经过深思熟虑后他们认为，“我们需要一种经济可行的解决方案 – 一种快速、可靠且易于使用的解决方案。”为了寻找这种解决方案，他与负责为 Siemens Digital Industries Software 提供技术支持而且具有焊接仿真经验的工程师进行了交谈。根据指导，他决定使用 Simcenter STAR-CCM+ 执行仿真。

Simcenter STAR-CCM+ 具有全面的几何创建和准备工具套件，可显著减少准备模型时进行网格划分所需的工时。此外，Simcenter STAR-CCM+ 具有单一集成环境，为从复杂 CAD 模型到工程解决方案的整个流程提供了快速且自动化程度最高的路线。这符合贝米斯的两项主要标准：快速和可靠。在易于使用方面，该软件强大的网格划分工具将几何图形的准备工作和网格划

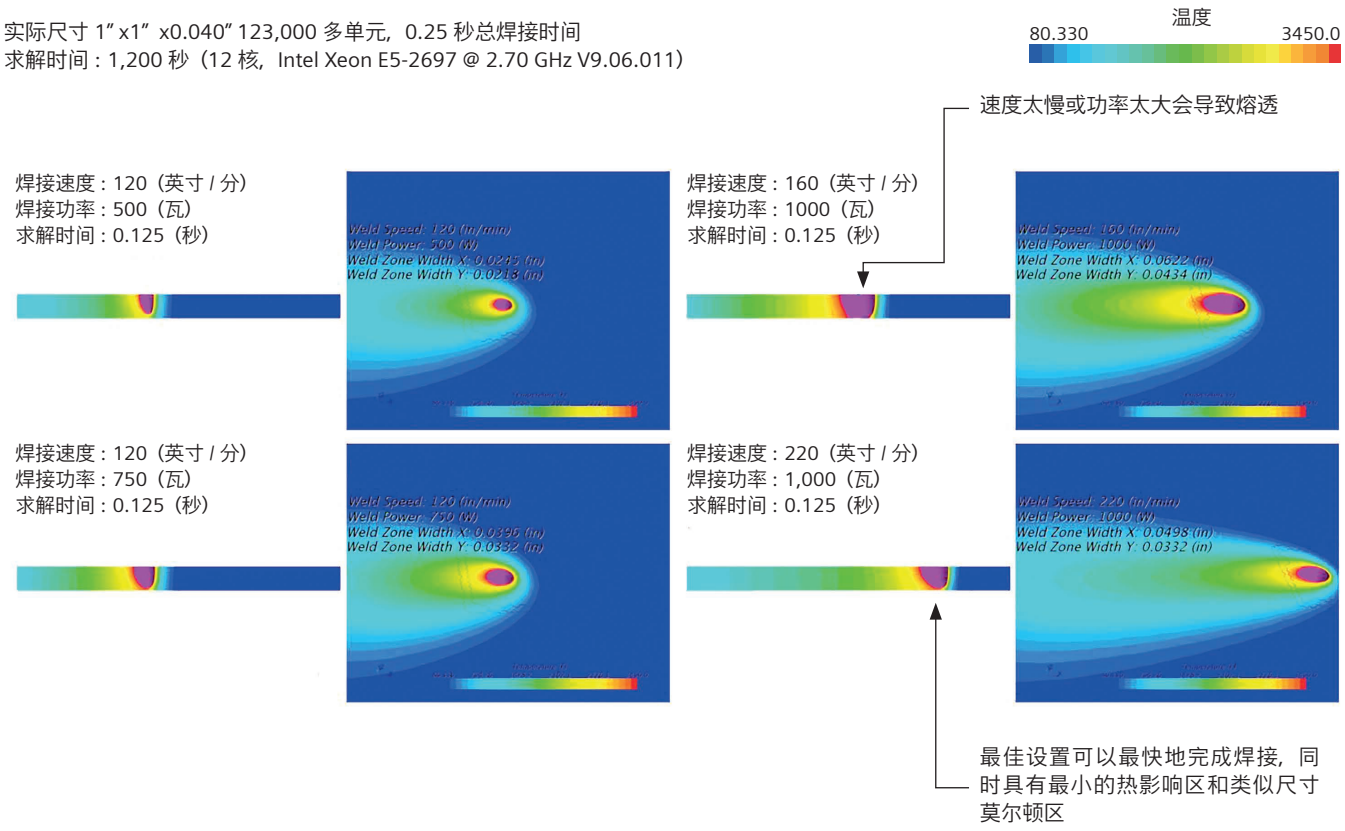


图 3 : 贝米斯在设计组件时采用的 MDX 概念之一是被称为 Simcenter STAR-CCM+ / Optimate 的附加模块。

分时间从数周和数月缩短至数小时，同时可在复杂几何上实现高质量的网格划分。所有这些功能都可以在熟悉的计算机辅助设计 (CAD) 和产品生命周期管理 (PLM) 环境中加以利用。贝米斯使用了 Simcenter STAR-CCM+ 来仿真焊接传热过程。结果证明，无论是预测焊缝宽度还是预测受盲焊影响的特征的行为，该解决方案都非常出色。“Simcenter STAR-CCM+ 进行焊接过程仿真的能力与众不同，并能以实用且足以满足工业需求的速度洞察焊接过程中的热瞬态，”贝米斯说道。

重叠网格划分的强大力量

在过去 30 年里，工程师们一直在努力执行计算流体动力学 (CFD) 仿真，目的就是为了处理多个移动物体之间的相互作用。传统上，这需要生成对象之间的互连网格，这是一个非常困难且耗时的人工密集型过程。实际上，在涉及极端的运动范围或各对象之间有紧密相互作用时，这几乎是不可能的。

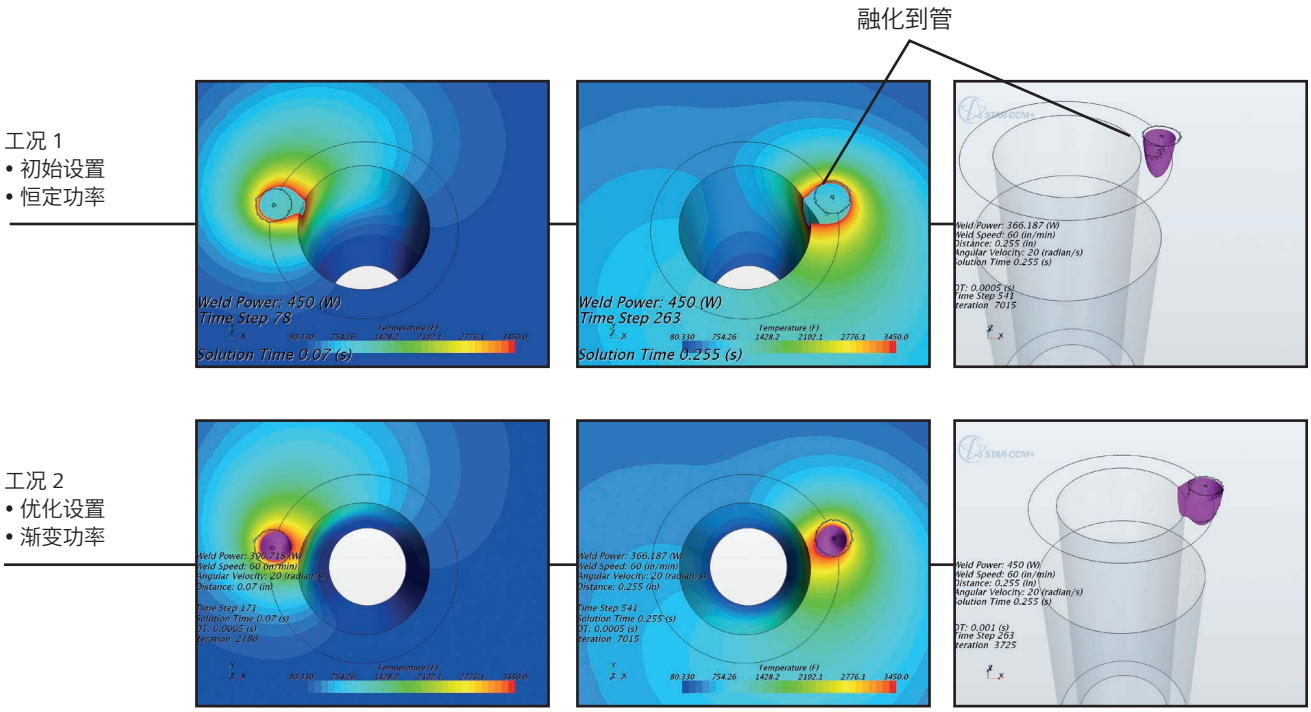


图 4 : 经过优化的起始停留时间和坡度可在起始时产生全深度焊缝。随着热量的累积，逐渐减小通过圆形焊缝的功率，以保持焊缝的大小和深度。

Simcenter STAR-CCM+ 借助重叠网格解决了该问题。Simcenter STAR-CCM+ 具有重叠网格划分功能（有时称为嵌合网格），为处理与移动对象相关的复杂物理特性的建模和仿真提供了一种新的且更有效的方式。这种方法使用户可以围绕每个运动对象生成单独的网格，然后可以在背景网格上随意移动这些网格。“在焊接过程中，您可以移动热源或材料，”贝米斯说。“利用重叠网格划分，可以仿真热源与被焊接在一起的零件之间的相对运动。这种运动与激光的功率一起共同决定了焊缝的宽度、熔融区的大小和透入深度。通过使用重叠网格，我们能够运行相当粗糙的背景网格以及精细划分的焊缝区详细网格。我们在背景网格中任意移动，然后生成自己想要的任何焊接图案。有些焊缝长 100 毫米，厚 0.5 毫米，长宽比很大，而非常大的网格数量可以改善焊缝区的仿真效果。”

贝米斯曾处理过一个移动目标。热量往往会在焊缝区中积聚，导致在焊缝之间移动时参数会不断改变。重叠网格可以考虑传热导致的被加工材料的特性变化，使设计人员可以仿真零件上的各个焊缝。具有移动重叠网格的隐式非稳态仿真可以预测熔融区域沿接缝延伸的范围、工件中的温度以及向固定装置传递的热量。可以调整激光功率、行进速度、加速度和脉冲频率等参数，以提供所需的最佳焊缝。

新技术

该研究小组还采用了一种称为“多学科设计探索”(MDX) 的方法。MDX 允许在概念阶段初期就针对可能影响性能的所有物理特性对设计进行自动测试。之所以可行，是因为 Simcenter STAR-CCM+ 等复杂仿真软件的功能不断增强，使工程师能够确定产品在其生命周期内将面临的条件下的性能。

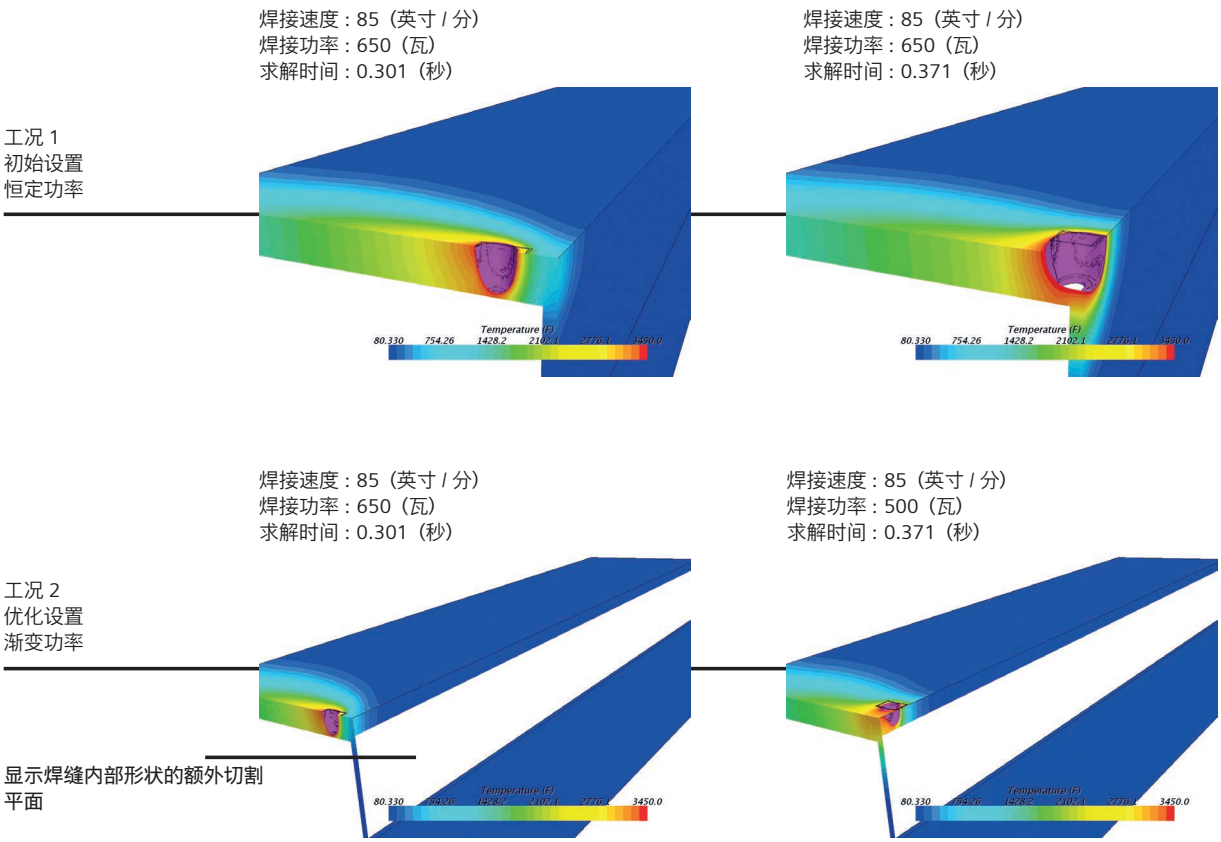


图 5 : 工况 1 显示了焊池如何以恒定的功率和速度熔化穿透拐角。工况 2 显示了可以在整个焊接周期内形成均匀熔池的优化设置。

“我们使用 Optimate 预先探索了参数空间，并更改了工艺和组件，以获得我们想要的最终结果，”贝米斯解释说。“我们成功设置了焊接速度、功率和场函数来模仿激光控制。我们可以上下倾斜激光器、仿真输入电压以及 Optimate 可以访问的所有其他参数。然后，我们使用该软件运行各种工况来确定一些事项，例如，需要在距离拐角多远的地方减速，以及为了绕锐角进行焊接同时保持基础材料组分中的热有效区不变而需要降低多少激光功率。仿真使我们能够在设计流程早期就确定所有焊接参数以进行实验验证。”

“足够准确”

贝米斯指出，使用 Simcenter STAR-CCM+ 仿真解决方案可以确保结果 “足够准确”。他们并没有试图完美地仿真问题，而是获得了可提供足够信息来准确预测实际焊接特性、评估参数并确定行动方向的数据。贝米斯说，考虑到这是一个带有运动和重叠网格划分的完全瞬态仿真，该过程非常快。他在装有 Simcenter STAR-CCM+ / Optimate 的高端工作站上成功运行了足够多的工况，实现了设计空间试验和优化。该软件相当灵活，足以使用热输入场函数交界面中的时间相关参数来仿真复杂运动。贝米斯解释说 : “如此强大的功能触手可及且无需自己编写 C 代码或 FORTRAN，真是令人难以置信。我认为我们节省了至少六个月的反复试验开发时间 – 六个月的实验室时间 – 这是多么大的收获。实际上，通过腾出更多的时间进行设计，我们成功弄清楚了如何避免使用盲焊，这是绝对的优势。使用 Simcenter STAR-CCM+ 和 Optimate 进行的高质量仿真使我们能够同时探索部件的研究、设计和分析以及制造工艺。我

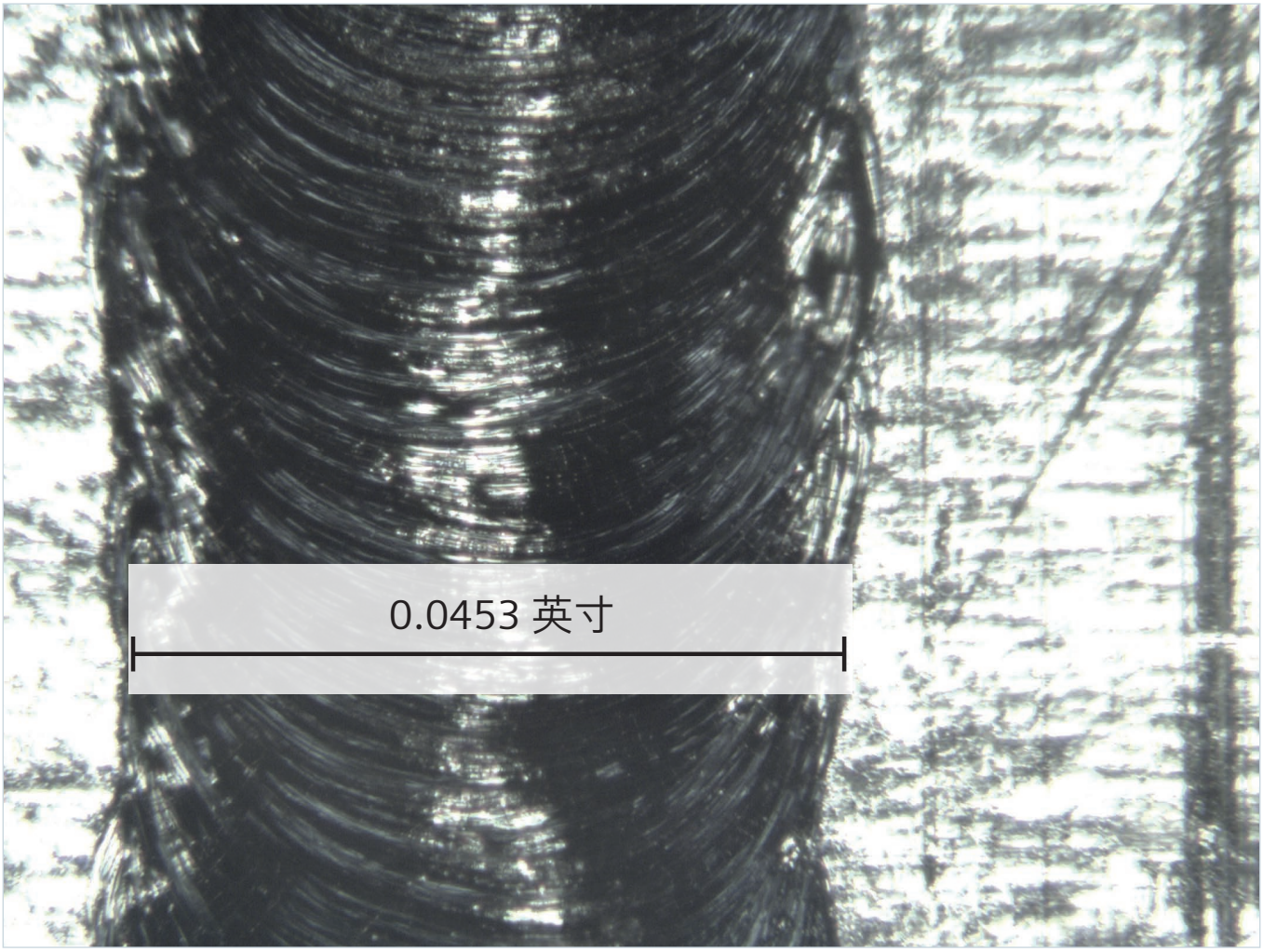


图 6 : 使用光学显微镜验证焊接区宽度和深度。

们成功地将最终组件设计交付到制造工厂，所有制造步骤和工艺均齐备。这种工作方式太给力了。

“我们每天都使用 Simcenter STAR-CCM+，该软件已成为我们设计和开发活动不可或缺的一部分。”

参考资料

Praxair Direct : 焊接术语词汇表

JFE Techno-Research 引领日式制造仿真潮

CAE 中心主任 Toshiki Hiruta。

Joji Kato（中）与 Katsuhiro Iwasaki（左）和 Norikazu Sato（右）。

JFE Techno-Research 在 JFE 集团内部的角色

JFE 钢铁公司在钢铁行业的历史已有 100 多年，其粗钢产量全球排名第五。JFE Techno-Research Corporation 是 JFE 集团的成员，从事流体分析、结构分析以及 JFE 业务的其他领域，包括材料评估、调查和检查。他们服务于集团内的钢厂、环境工程和其他领域，并积极与集团外部签约。特别值得一提的是，它承接不同行业领域的工程服务项目，包括汽车、机械、电力机械、电子零部件、建筑以及土木工程和研究机构。他们基于高度可靠的分析和评估技术为这些领域提供工程解决方案和咨询服务。

JFE Techno-Research 专注于以下两个领域：

1. 不仅基于分析，而且还基于钢铁行业多年积累的经验提出解决方案
2. 带有测试结果的推荐软件包：解决方案部 (Kawasaki) 由 CAE 中心、传感和可视化分析中心、结构性能部、材料性能评估部、设备和工艺技术部以及其他专门的测试和分析部门组成，提供全套服务。

JFE Techno-Research 提供分析结果说明、设计改进指南以及与 “Monodzukuri”（日式制造）所有方面相关的咨询，以帮助稳定产品质量并降低生产成本。本文涵盖了我们与 JFE Techno-Research 的 CAE 中心成员所讨论的数字分析在 Monodzukuri 中的关键作用。

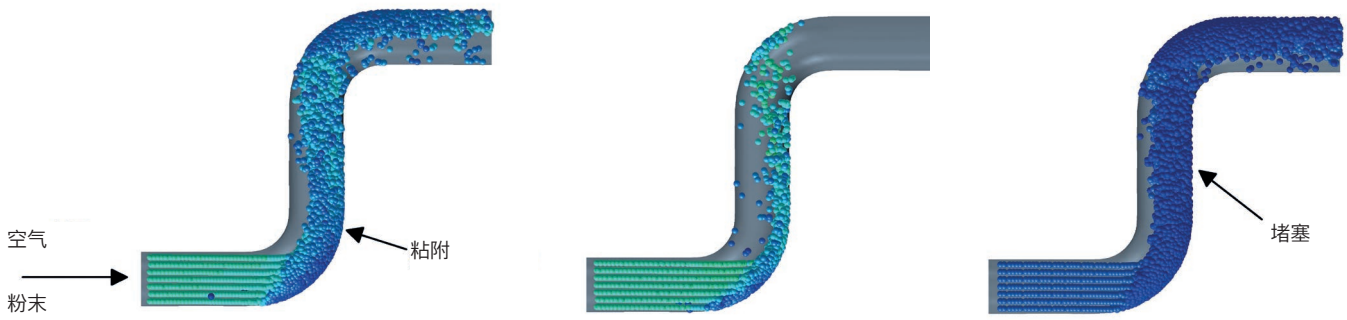


图 1：使用 Simcenter STAR-CCM+ 对粉末输送管道中的粉末进行行为分析。

提高计算精度：与测量部门合作进行验证

工程仿真中最大的挑战是数字结果的验证。数字分析与物理测试的相关性可提高最终结果的准确性。JFE 常规流量分析与测试结果相比的目标精度为 ± 3%。但是，对于包含化学反应、多相流和其他现象的复杂模型，分析精度通常会降低到 ± 10% 左右。CAE 中心主任 Toshiki Hiruta 指出："虽然我们的目标是 ± 3%，但积累了一定程度经验的员工通过检查测试结果，即可合理地判断分析成果是否合适。"

高级研究工程师 Katsuhiro Iwasaki 做出了以下评论："根据客户的不同，在某些情形下，我们会同时收到测试和分析请求。这实际上带来了一个相当严峻的挑战，并且由于我们会得出测试值，因此需要在下一阶段根据分析结果进行调整。随着分析变得越来越复杂，我们越发看到，解释测试值并与分析结果进行对比是多么重要。某些情形下，客户会向我们提供测试结果，然后要求我们基于这些结果所建议的模型进行定制。"

在 JFE Techno-Research，他们在 CFD 相关工作中利用经营测量部门的优势来实际测量温度、流速、气体成分和其他参数。然后，他们将所得数据与 CFD 结果进行比较，以验证其合理性并进一步提高成果的准确性。图 1 到 3 显示了 JFE Techno-Research 的一些仿真应用领域：粉末输送管道中的粉末行为分析、铸件流动性和凝固分析以及氢泄漏扩散行为分析。

应对形形色色的 CFD 挑战：从单相流到多相流

在 CAE 中心的 CFD 相关工作中，Iwasaki 负责化学反应、燃烧、爆炸和其他热流体过程问题的仿真。除了这项工作外，他还主动参与支持和研发，以及从基础研究到机械制造的其他任务。同时，副总经理 Norikazu Sato 担任 CFD 技术团队成员，主要从事涉及热流体、传热和颗粒的多相流分析以及其他工作。Hiruta 概要介绍了仿真在 CAE 中心的作用和分析主题："这里的工作涉及多个领域，但我们业务的核心在于承接结构、流体和流体 - 结构相互作用 (FSI) 分析方面的项目。除了上述任务外，CAE 中心还积极开发用于各种新领域的分析方法。例如，在流体分析中，不仅针对单一现象的研发工作取得了很大进展，针对更复杂现象（称为多物理场）的研究也得到了改进。公司设有一个部门专门负责开发我们自己的数字仿真代码，他们也利用商业 CFD 软件来扩展适应领域。" JFE Techno-Research 和 Siemens Digital Industries Software 共同合作来构建支持此类研发工作的模型。

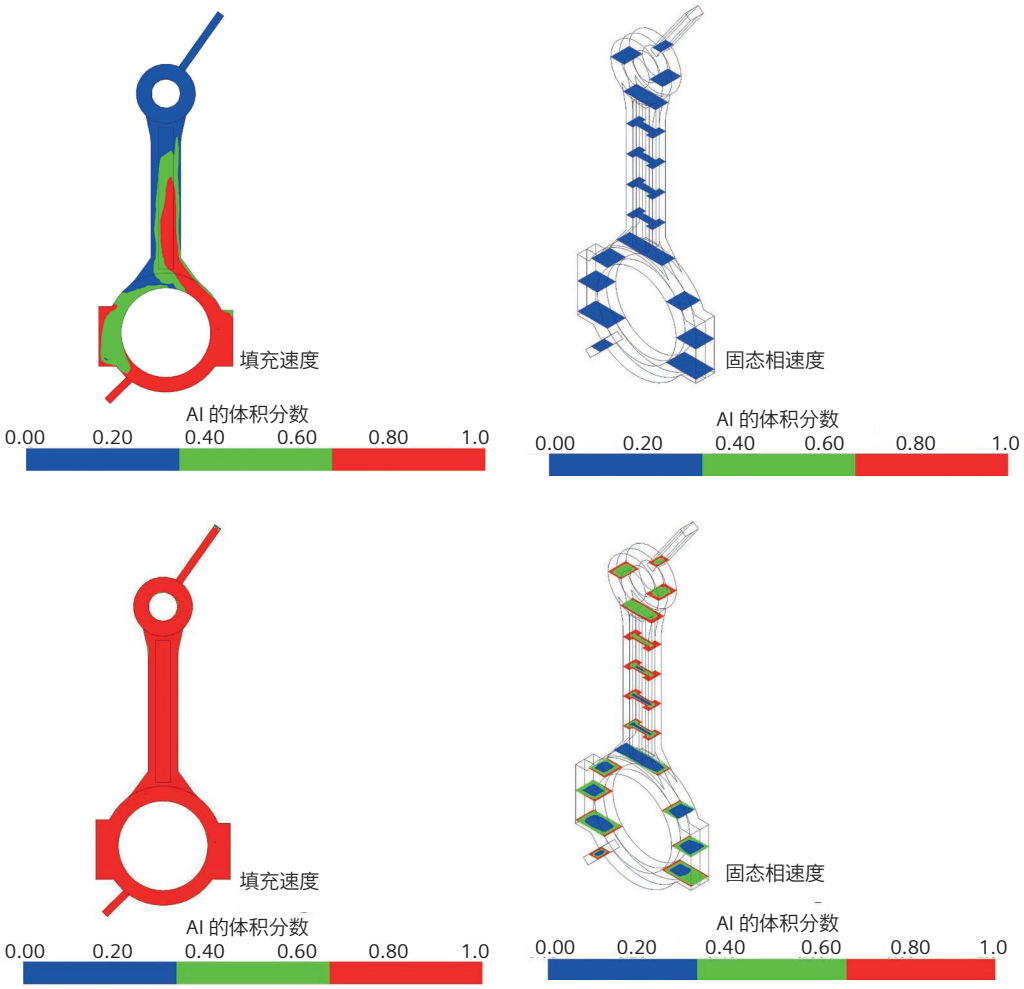


图 2：使用 Simcenter STAR-CCM+ 进行的铸件流动性和凝固分析，显示了铸造期间（上）和铸造后凝固期间（下）的填充速度和固态相速度。

解析和评估分析结果的重要性

Sato 解释了用于执行分析操作的系统：“我们中心的质量管理体系 (QMS) 已通过 ISO 9001 认证。在执行分析时，我们会为每个工程服务项目指定项目经理，同时有效部署检查系统以确保正确执行分析并始终符合规范。大多数情形下，标准方法是由一名技术成员担任项目经理，由一到两名年轻团队成员执行实际分析。虽然由年轻员工负责使用 CFD 代码来推进工作，但根据具体的分析任务，某些情形下高级工程师也会介入并操作分析软件，还会执行定制、测试计算和其他任务。”接下来，我们询问了他们作为一个团队承接分析任务时的关键注意点、在公司各个部门 / 地点之间共享信息的方式以及其他相关挑战。Iwasaki 这样解释他们的交流方法：“我们特别注意在报告、联络和磋商中保持密切联系，并保持机密性。同时，我们希望年轻团队成员的在职培训 (OJT) 可以有效地提高他们的潜力，让公司的技术得到传承。如果相互之前没有高效的交流，我们就有可能各自为战并犯下无法弥补的错误。”

他继续说道：“在规定条件或假设的基础上进行分析时，我们还假设客户可能会就结果的可行性提出疑问，并会在推进工作的同时与我们的年轻成员分享想法。在模型构建方面，我感到非常需要与年轻人密切交流，以确定我们的结果是否适当地反映了分析目标的技术概念、如何评估分析结果以及如何向客户解释成果。特别是，由于事实常常证明使用 CFD 完全仿真实际物理现象、化学反应过程或其他条件是不可行的，因此我们特别注意假设和预测的方法，以及对分析结果的解释和评估。对于我们的年轻成员，我特别留出了时间和精力向他们强调，务必要抓住客户想了解的内容、他们内心的真正想法以及其他重点关注问题。”

Hiruta 补充说：“当我们承接客户委托的分析项目时，我们的团队将执行分析并编写报告。我的任务是最终确认报告。在此过程中，最重要的事情是考虑在结果未能达到客户期望的情形下，如何提高我们未来分析的质量。同时，检查结果自然很重要，但单独对分析结果进行此类严格审查仍然非常困难。”

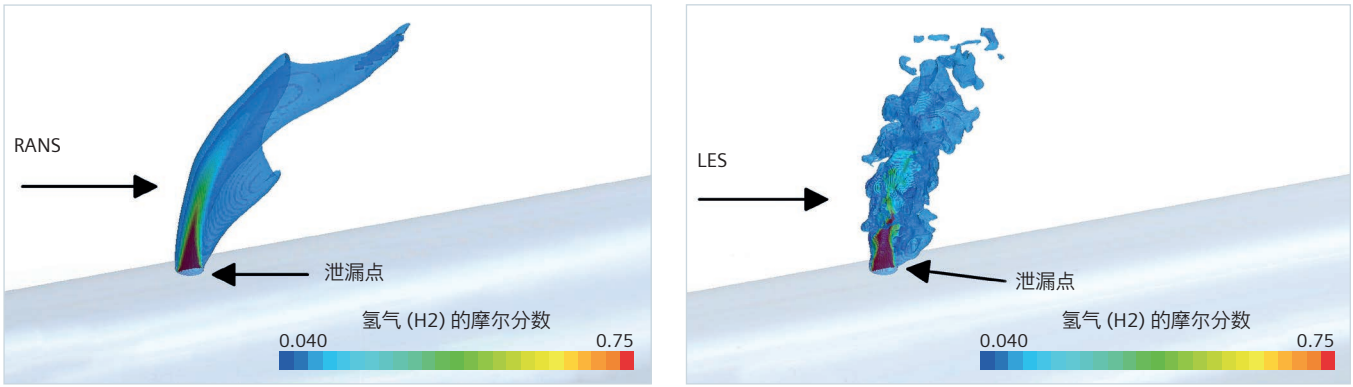


图 3：在 Simcenter STAR-CCM+ 中使用 RANS（左）和 LES（右）进行的氢气泄漏扩散分析。

Simcenter STAR-CCM+ 使人们极有望获得超越 CFD 的可扩展性

在 JFE Techno-Research，Simcenter STAR-CCM+ 在两大方面获得了出色的评价。第一是被视为非常易于使用的集成工作流，它跨几何准备、网格划分、物理建模、分析和后处理流程。第二是多学科软件包，它在代码内以及通过与 Abaqus 和其他应力求解器耦合来提供线性应力分析选项，从而促进了其在材料选择评估中的使用。展望未来，人们也非常希望从 v10.04 开始增加 FEM 功能，进一步扩展 FSI 分析域。

根据 Sato 的说法，Simcenter STAR-CCM+ 的网格划分功能非常出色，赢得了广泛赞誉：值得注意的是，即使是处理相当复杂的几何，也可以通过简单的操作创建网格。他说，这是快速分析原型的关键。Sato 还称赞 Simcenter STAR-CCM+ 能够轻松链接多个物理模型，可以通过场函数和脚本进行定制，当然还有其他优势。

最后，我们询问了他们希望 Simcenter STAR-CCM+ 和西门子服务在哪些方面进一步增强。Iwasaki 正在独立使用 Simcenter STAR-CCM+ 进行简化制造工艺仿真的研究和评估。

他希望输出冷却速度以及凝固分析、弥散强化材料中次相的分布，并在材料属性中反映它们。Iwasaki 相信，如果可以将这些工作的结果传回 Simcenter STAR-CCM+ 进行线性应力分析，找到应力集中区域，就有可能实现更有效的形状和工艺。Sato 正在推进 DEM、FSI、大规模计算和优化领域的分析建议和工程服务工作。他相信，借助 Simcenter STAR-CCM+ 提供的高水平定制功能，将有可能提供更高水平的复杂分析技术建议。Hiruta 还提到了在医疗保健相关领域的潜在应用——特别是目前正在大力投入的植入物结构分析领域。他还承认，虽然生命科学中的流体分析仍然是一个未知的领域，但它无疑是一个充满挑战的增长领域。

结论

JFE Techno-Research 的 CAE 中心目前承接了 JFE 集团以外的许多项目。有关他们如何在其他领域发挥其 CAE 经验优势的报告令人鼓舞。此后，除了 CFD 分析外，他们还将进入 FSI 分析和医疗保健等新领域。西门子当然也时刻准备着，动员全球资源，尽一切可能，为他们的工作提供支持。

混合行业：通过微调或设计探索实现节约？

简介

混合技术是将一组组分混合在一起，使其转变为匀质产品的艺术，在许多化学工艺和制药应用中起着至关重要的作用。想一想您日常生活中使用的所有产品，再想象一下如果没有混合，我们的工业将如何瘫痪，我们的生活将如何因此陷入困顿。从杂货店中的食品、保健和医药产品到聚合物、矿物质、油漆和涂料、生物燃料等，混合是生产大多数产品的关键步骤。为了让工业生产出所需重量 / 体积的均匀混合物，使其具有一致的颗粒尺寸分布、颜色、纹理、反应性或其他任何必需属性，并避免因混合不良造成的高昂罚款，控制混合操作的质量至关重要。

除了消除因运行有缺陷系统产生的成本外，还迫切需要改进产品，因此找到最佳的策略至关重要，这样才能以最小的投资和运营成本获得更快的混合时间和更高的混合质量。先进的仿真和优化软件使人们不再需要通过常规的反复试验方法来获得最佳设计。工程师确定了重要的混合性能参数后即可快速仿真数百个设计点，找出能够提高系统效率并获得竞争优势的最佳设计。

搅拌罐设计优化研究

对于普通搅拌罐反应器，设计目标通常有混合时间、混合质量和功耗。这些目标分别需要达到最小值、最大值和特定值。为了实现这些目标，需要对设计流程的许多方面进行改进，包括机械、电气和化学部分。从机械角度来看，设计参数可以是叶轮配置、容器尺寸、容器类型、导流板数量等。此类优化问题的一个核心是设计参数与设计目标之间存在非线性关系，这使得设计修改既繁琐又耗时。进行改进时，如果设计工程师需要通过在实验室规模进行新系统原型设计，然后再扩大至生产规模，则不仅成本昂贵而且耗时。数字设计优化的巨大价值在此体现出来，因为它允许自主并精细地改进设计参数，让您能在建造物理原型之前就生成最佳的搅拌反应器。混合器数字优化应被视为可以满足盈利要求的决定性业务工具，在提高产品质量的同时还提供了明显的竞争优势。

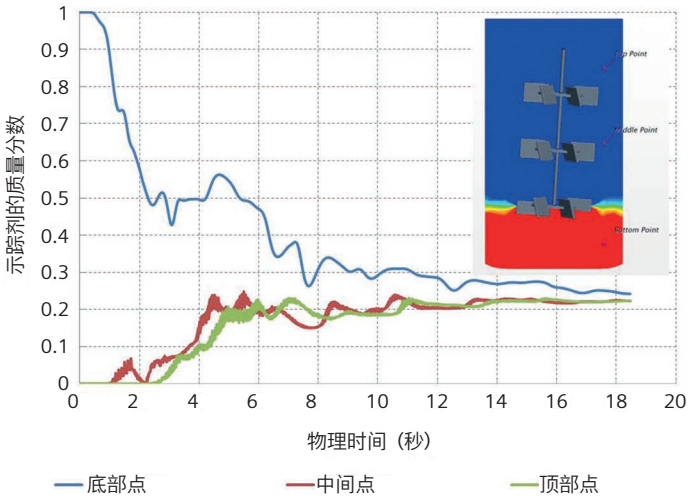


图 1A：惰性示踪剂法（类似于广泛使用的实验技术）显示了局部浓度随时间的定量变化。

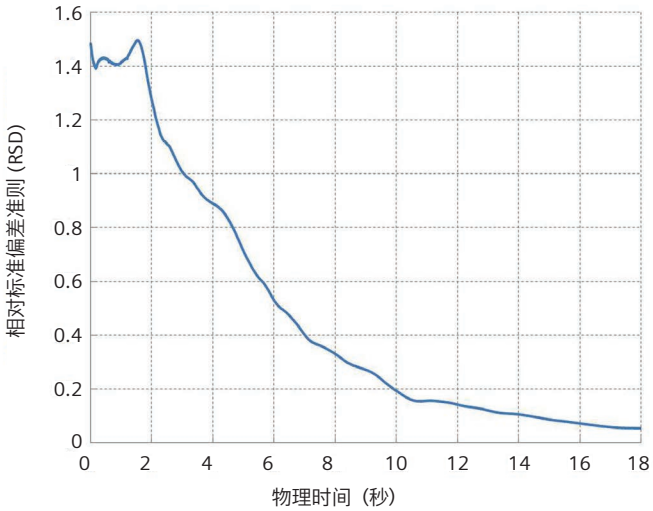


图 1B：相对标准偏差法。

值得注意的是，对于优化研究而言，各个目标在本质上通常是冲突的，因此没有单一的优化设计。例如，如果混合器设计工程师既想缩短混合时间又想降低功耗，那么没有任何设计能够同时满足这两个目标的最佳值。混合时间的改善只能通过牺牲功耗来实现。在这种情况下，非支配排序算法会找到在各冲突目标的给定值下，对另一目标而言最佳的设计。帕累托优化研究的结果是满足此条件的一组设计，也称为非支配设计条件。

在这项研究中，确定了搅拌罐设计的一系列调整参数以及两组冲突目标：

1. 功率数与混合时间。

2. 叶轮力矩与混合质量。

研究的主要目标就是找到每种情形下冲突目标之间的最佳平衡。在这方面，已经使用 MOSHERPA 进行了多目标混合研究，这是一组帕累托最优设计。在直接采用数字方法之前，我们首先需要确定混合准则，这将在下一节中介绍。

混合准则

混合时间可以定义为混合物达到预定均匀度所需的时间。可能很难找到在时间和质量方面量化混合操作的最佳方法。有几种实验方法可以用来评估混合质量，例如脱色、导电率和 pH 测量。但是，所有这些方法都具有不确定性，因为它们基于将示踪剂注入混合物中，然后通过目视或在不同位置使用探头的方式测量其浓度。例如，获得 90% 均质度所需的混合时间是示踪剂浓度的波动小于理想混合情况下获得的浓度的 10% 所需的时间。但是，研究表明，此值受到探头大小或示踪剂注入位置的显著影响。另外，这些方法仅指示了有限数量的探头位置处的混合质量，因此需要更多数量的采样点以获得更准确的全局质量，这又是一项繁琐、耗时且昂贵的任务。而使用数字技术，将可以轻松克服此类缺点，最好的方法是对数字域内每个单元的混合质量进行统计分析。在这方面，Simcenter STAR-CCM+ 能够根据需要定义多种不同的数学公式，通过场函数测量混合质量。此外，Simcenter STAR-CCM+ 还允许定义均质度阈值，使用户能够可视化整个混合周期内的不良混合区域。

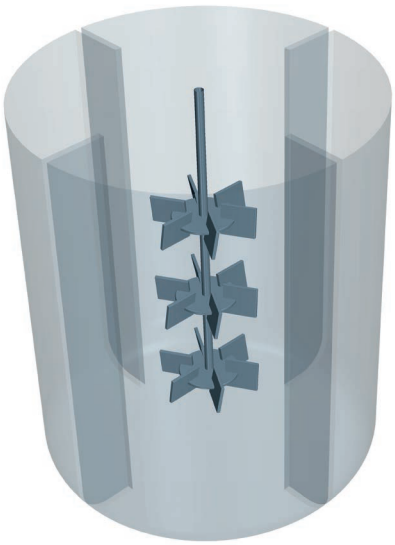


图 2A：在 Simcenter STAR-CCM+ 中创建的混合罐几何形状。

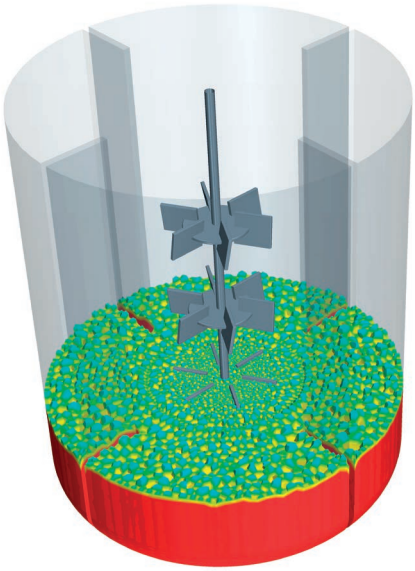


图 2B：由场函数定义的跟踪器初始条件。

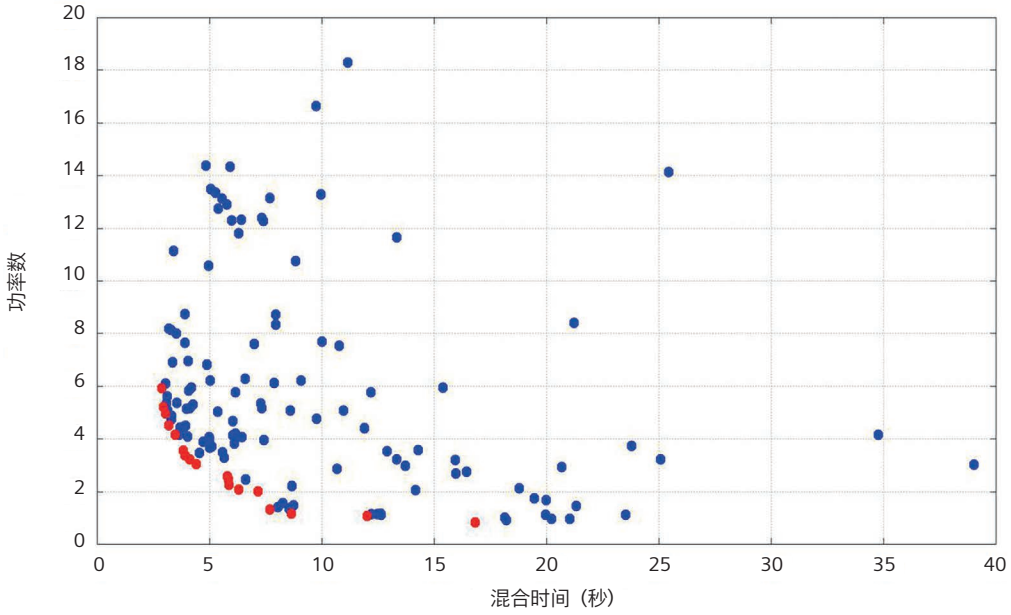
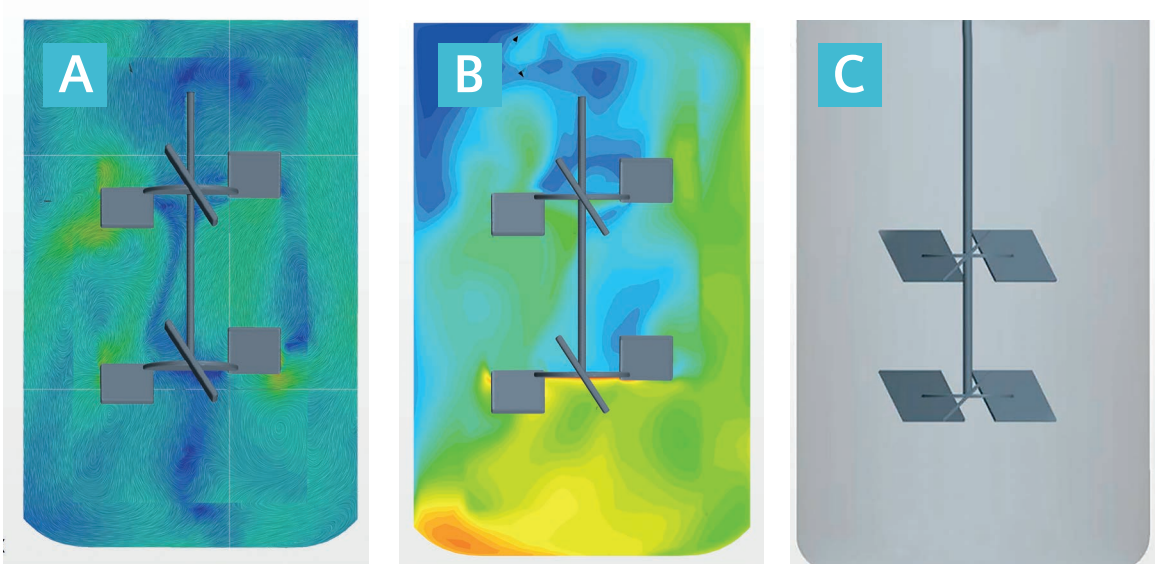


图 3：帕累托前沿（红点）的结果显示优化器将设计推向最佳角位置。

可用于评估混合质量的数字技术之一是相对标准偏差 (RSD) 方法，它是示踪剂质量分数在整个域中的标准偏差与其对应的平均浓度之比。RSD 计算公式可以表示如下：

$$RSD = \frac{\sigma}{\bar{C}} \qquad \text{其中} \qquad \sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(C_i - \bar{C}}{n-1}}$$

其中 Ci 是第 i 个单元中示踪剂的质量分数，C 是整个域中示踪剂的质量分数的体积平均值，n 是单元数。良好的混合对应于较低的 RSD 值。图 1 所示为类似于传统实验技术的惰性示踪剂方法 (1A) 和 RSD 方法 (1B) 之间的比较，两者均使用 Simcenter STAR-CCM+。可以看出，实验方法跟踪了局部浓度随时间的定量变化，而 RSD 保证



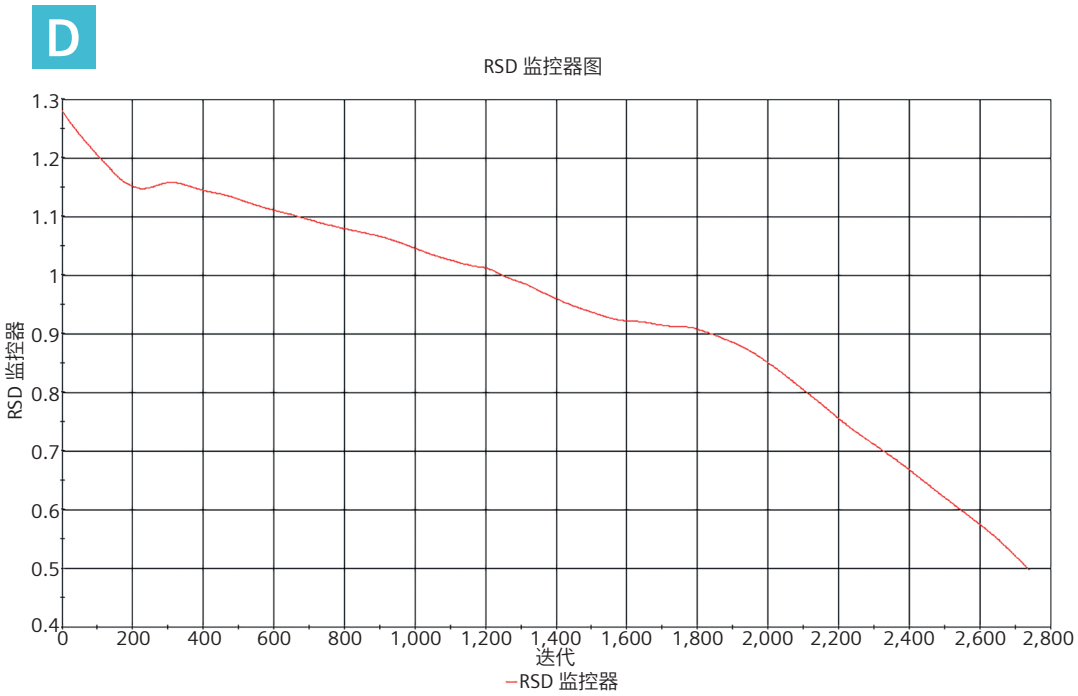


图 4 : 帕累托前沿设计点之一的速度场 (A)、示踪剂的质量分数 (B)、CAD 几何形状 (C) 以及 RSD 与时间 (D)。

了整个域内混合操作的质量。因此，RSD 可以解决实验方法的空间偏差问题。这是 CFD 与实验相比的重要优势之一。

在这项研究中，使用 RSD 方法对混合质量进行量化，并且将混合时间定义为达到 RSD 值 0.3 所需的时间，该值不表示理想混合，而是用作良好混合的常用值。

数字方法

在 Simcenter STAR-CCM+ 中使用三维 CAD 建模器创建混合罐参数化几何（图 2A）。将混合液体作为被动标量跟踪，该被动标量最初在罐底处于静止状态（图 2B）。使用移动参考系 (MRF) 方法执行瞬态仿真。在此讨论两组冲突目标 : 1) 功率数与混合时间，以及 2) 叶轮力矩与混合质量。

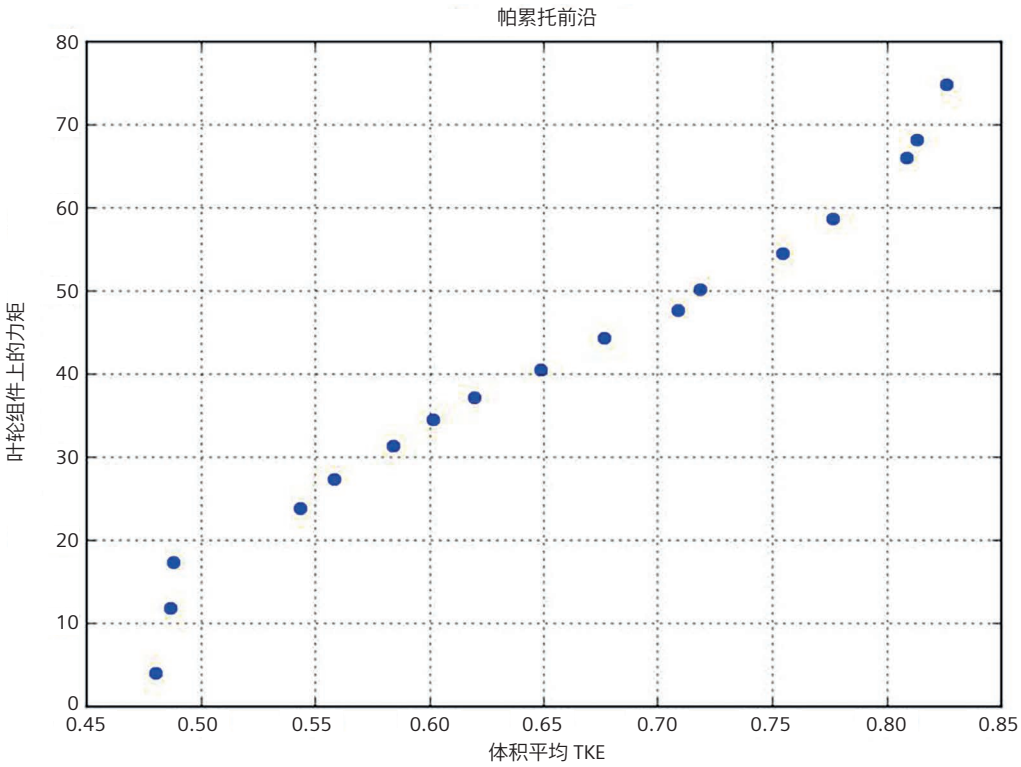


图 5：叶轮组件上的力矩与体积平均 TKE 的帕累托前沿。

冲突目标 1：功率数与混合时间

使用 Simcenter STAR-CCM+ 中的高级 CAD 建模功能，用户可以将任何设计特征定义为参数化变量，然后可以将其用作使用 Optimate 进行优化的输入变量。在这项研究中，选择了七个设计变量进行优化：

- 叶轮数 (2/4/3)
- 每个叶轮叶片数 (3/9/7)
- 叶轮叶片角 (0/45/16)
- 叶轮叶片高度 (0.01/0.06/11)
- 叶轮半径分数 (0.2/0.5/21)
- 导流板数 (2/6/5)
- 导流板高度分数 (0.6/1/21)

(A/b/c) 格式中的三个数字分别表示起点、用于增加参数的分隔数以及终点。除了分隔数之外，Optimate 还可以选择指定增量。例如，叶轮数量的增量为 1（最小值 = 2，最大值 = 4，增量 = 1）。在 Optimate 中，两种方法都定义了可以在其中微调变量的范围。在这项研究中，此数字对应于总共 8,149,680 个变化。手动覆盖此设计空间几乎是不可能的。Optimate 不会运行超过 800 万个设计点，而是使用 Sherpa 优化算法，可以将每个设计变量的评估次数减少到省时的运行次数。该算法可以在运算过程中不断学习，并修改其策略以确保有效地搜索设计空间，从而大大减少了运行次数，同时仍有可能得到更好的答案。在本案例中，Optimate 仅花了几天时间来搜索设计空间，完成了数百次评估以获得最佳结果。第一组优化目标定义如下：

- 最小化功耗
- 最小化混合时间

优化产生的结果集称为帕累托前沿。在图 3 中，靠近帕累托前沿的点群集说明了优化器如何将设计推向最佳角位置，这对应于更低的混合时间和功率数。此图回答了“特定混合时间的最小可能功率数是多少?”或者“对于指定的功率数，可能的最小混合时间是多少?”之类的问题。在混合工业中，这些问题可能涉及高达数百万美元。图 4 所示为一个示例 CAD 设计、示踪剂的质量分数和 RSD 时间图，由 Optimate 针对设计点之一计算得出。

冲突目标 2：叶轮力矩与混合质量

为了研究此目标，考虑了以下参数：

- 叶轮数 (1/5/5)
- 叶轮叶片角 (0/90/19)
- 导流板数 (0/9/10)
- 导流板高度 (0.005 m/0.012 m/15)

请注意，根据用户目标的不同，可以指定不同的变量。

优化目标如下：

- 最大化体积平均湍动能 (TKE)
- 最小化叶轮组件上的力矩

帕累托前沿（图 5）显示设计在给定叶轮组件的力矩下，达到了最大的可能体积平均 TKE。

结论

搅拌罐设计工程师一直渴望获得最高的混合效率，这受冲突目标的影响，例如混合时间与功耗，或者叶轮组件上的力矩与湍流动能。由于这些目标很大程度上取决于罐和叶轮的几何形状，因此需要进行多目标参数研究，以确定在两个目标方面都具有优势的最佳设计。

Simcenter STAR-CCM+ 提供了 SHERPA，这是 Optimate 插件提供的基于混合算法的可靠优化方法，可在短时间内研究大型设计空间。在根据实验数据验证基线仿真后，进行优化研究可针对一组预定的操作条件提供最佳设计，最终节省数百万美元成本。

帕累托前沿图可以为混合行业内涉及数百万美元的问题提供答案，例如，“特定混合时间的最小可能功率数是多少?”或者“对于指定的功率数，可能的最小混合时间是多少?”

Simcenter STAR-CCM+ 为皮埃尔葛安提供竞争优势

简介

像许多成功的企业家一样，皮埃尔葛安最初成立了一个很小的家族企业。公司成立于 1949 年，只有五名员工，业务涉及农业和乳制品维护设备。公司产品、品牌、人员和创新技术经过数十年的不断演变，这个初创公司已变身为一家成功企业，目前是业界公认的化学 / 食品 / 饮料和制药行业不锈钢工艺混合容器的主要欧洲供应商。对这些行业而言，混合是关键的设备操作，因为产品的质量高度依赖于具有不同属性的各组分相互高效且有效地混合，以达到具有所需属性的均匀混合。

对于皮埃尔葛安来说，要想保持在市场上的竞争优势，他们设计和制造的设备必须确保最高水平的混合质量，同时尽可能降低客户的操作时间和成本，这至关重要。在这种情形下，采用传统的将实验室规模扩展到生产规模的方法从来都不是一件容易的事。它需要进行耗时且昂贵的实验，以测试和验证设计过程中产生的任何新想法。CFD 仿真提供了将系统建模为工厂规模的强大工具，还可以捕获连续空间中的所有关键物理特性和必需数量，更快地探索设计空间，从而减少了优化搅拌罐所需的试验次数。这样，工程师就能只提交最有希望的设计进行物理测试。在混合容器应用中，有一些主要的目标特性，包括排量数、功率数和混合时间。为了选择最有效的 CFD 工具来预测这些数字，皮埃尔葛安的混合工程师使用几种 CFD 软件工具（包括 Simcenter STAR-CCM+）进行了验证研究。

本文概述了 Simcenter STAR-CCM+ 的数字结果与为验证该公司专利叶轮的性能而进行的实验之间的比较，还对圆盘涡轮桨进行了类似验证研究并记录在案 [1]。

几何和网格

Simcenter STAR-CCM+ 可用来对皮埃尔葛安制造的不同类型的叶轮 / 容器进行建模（图 1）。在本研究中，几何形状由一个具有四个导流板的平底容器和一个皮埃尔葛安 HTPG4 叶轮组成（图 1A）。容器的几何形状和导流板使用 Simcenter STAR-CCM+ 中的三维 CAD 建模器创建，叶轮使用 Simcenter STAR-CCM+ 表面包络功能从中性格式 CAD 文件中提取，该功能可生成闭合体积块，并从体积块自动生成三维非结构化多面体网格。多面体网格划分方法的一个主要优点是多面体单元具有许多相邻单元(量级通常为 10)。这样可以更有效地跨相邻单元传输变量。与四面体网格相

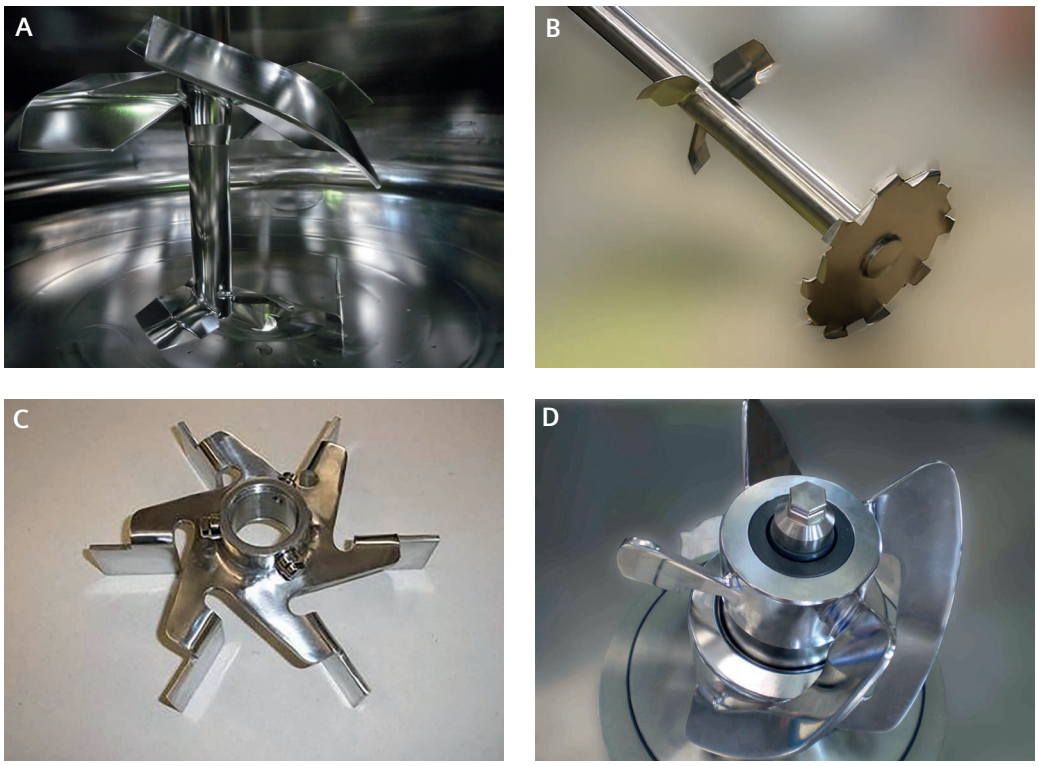


图 1：皮埃尔葛安制造的不同类型叶轮：(A) 用于细胞培养的低剪切力 HTPG4 螺旋桨；(B) 用于粉末分散的 Heli Turbo 搅拌器 HTA；(C) 用于有氧发酵的圆盘涡轮桨；(D) 用于辅助容器的磁力搅拌器 PG-MAG。

比，它们可以更好地捕获复杂的几何体，而单元数却少得多。较少的单元数意味着较低的计算要求。

此外，多面体网格的全局 / 局部细化功能以及边界处的棱柱层网格生成器使皮埃尔葛安的工程师能够准确捕获叶轮周围的流体，这是准确计算功率的关键要求。图 2 显示的计算网格描绘了叶轮区域中以及沿壁的边界层中的精细网格。该域由附着在容器壁上的外部静止框架与中央旋转部分之间的交界面分隔。这导致该域中有 40 万个单元。

假设与边界条件

用于仿真的工艺流体被视为具有恒定密度的单相液体。使用移动参考框架 (MRF) 方法来仿真带有导流板的搅拌罐的旋转 [2]。使用转子 - 定子方法来建模叶轮运动。为了对轴的旋转进行建模，定子域中的轴部分在相反方向上具有相对转速。使用雷诺平均纳维尔 - 斯托克斯 (RANS) 方法以及可实现的 k- ϵ 两层模型进行湍流建模。不必了解叶轮叶片附近的流动分离，因此无需求解粘性子层方程。但是边界层在梯度生成中有作用，因此必须求解缓冲层。此模型的使用已通过叶轮和轴上的壁 y+ 计算得到验证。壁 y+ 介于 1 和 20 之间。由于恒密度流及其不可压缩的特性，因此选择了分离流求解器。为了评估混合，Simcenter STAR-CCM+ 提供了被动标量方法。被动标量是用户定义的任意值变量，分配给流体相或没有可感知质量或体积的单个颗粒，并且对仿真的物理属性没有影响。也可以在域中定义和注入多个被动标量。此功能可用于跟踪注入流体流中的数字染料，以及分析具有相同

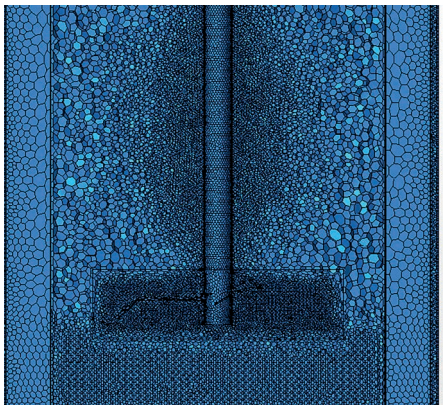


图 2：使用 Simcenter STAR-CCM+ 的容器和 HTPG4 叶轮计算流体域中的多面体网格。

属性的两种或多种液体流的混合。在这项研究中，达到稳态解后，流体求解器将立即冻结，并使用隐式非稳态计算和刚体运动求解器来求解被动标量传输方程。此外，还使用二阶迎风方案求解了隐式非稳态求解器方程。

成效

在四核并行计算的情况下，大约 17 分钟即可实现 10e-4 量级的收敛。图 3 所示为数字速度矢量场，靠近壁 / 导流板处流动方向向上，靠近叶轮轴处流动方向向下。可获得整个域中任意横截面的速度场数字结果。通过实验不能测量整个流场连续体，而工程分析则限于被测量的有限点数。访问速度场和域中的其他场可以获得有关系统中流动模式和混合行为的宝贵深入见解。

功率和排量数

为了验证 Simcenter STAR-CCM+ 预测混合性能的准确性，皮埃尔葛安的工程师计算了以下特征数：功率数、排量数和无量纲混合时间。这些数对于几何配置以及操作条件是唯一的。为了计算每种叶轮特有的功率消耗，无量纲数定义为使用以下公式计算的功率数 (Np)：

$$N_p = \frac{\tau \, \omega \, g_c}{\rho \, N^3 \, D^5}$$

其中τ (N.m) 是合成转矩，ω (rad/s) 是叶轮角速度，N (RPM) 是叶轮转速，ρ (kg/m3) 是密度，D (m) 是叶轮直径，gc 是重力常数。

用于计算混合叶轮的每种几何形状所独有的流量或泵送量的另一个无量纲数是排量数 (NQ)。该值可通过以下公式计算得出：

$$N_Q = \frac{Q}{N \, D^3}$$

其中 Q (m3/s) 是叶轮产生的流量，N (RPM) 是叶轮转速，D (m) 是叶轮直径。以数字方式计算这些数，然后与表 1 中的实验结果进行比较。从该表可以看出，Simcenter STAR-CCM+ 的结果与实验结果非常一致，功率数和排量数的差异百分比很小（分别为 1.94% 和 0.92%）。

在表 1 中，N.Tm 是无量纲混合时间，是混合时间 Tm 与叶轮转速 (N) 的乘积。

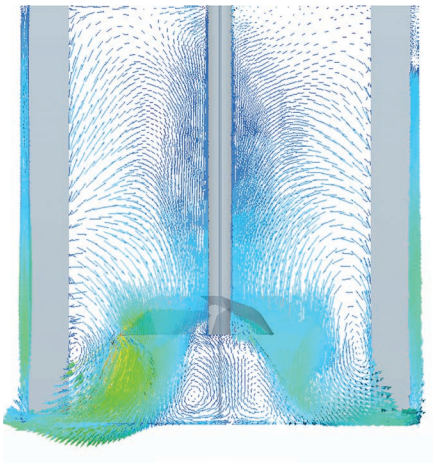


图 3：速度矢量和功率数。

混合时间

混合时间定义为在运行的搅拌容器中达到一定程度的均匀度（在本例中，理想的均匀度为 95%）所需的时间 [2]。它用作评估混合性能的关键参数之一。所有实验方法背后的总体思路是，将示踪剂注入混合物中，然后通过目视或在不同位置使用多个探头的方法测量随时间变化的浓度。尽管这些方法存在空间偏差（因为它们只能提供有关整个域的有限信息），但目前已广泛用作唯一可用的实验工具。而另一方面，CFD 可以通过提供连续空间中的流场和浓度场来轻松解决数据不足的问题。这样，就可以考虑数字域内每个单元的混合质量，并为混合时间测量定义统计上更为精确的结果。

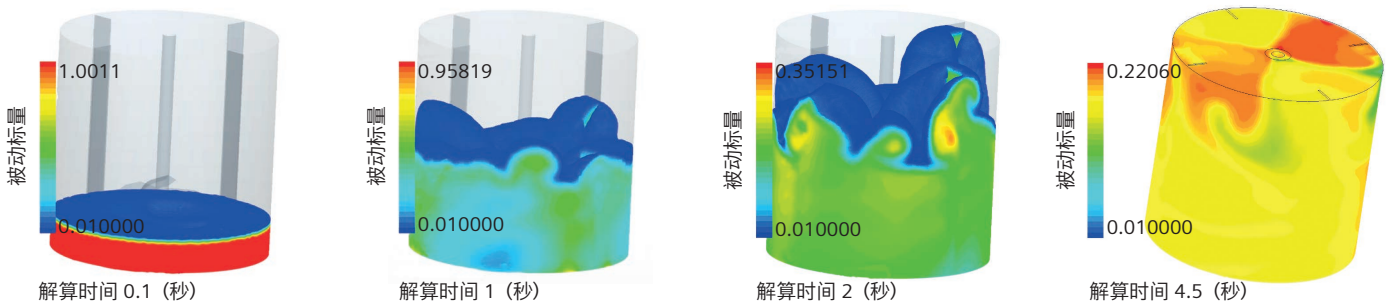


图 4：被动标量随时间的变化。

在这方面，Simcenter STAR-CCM+ 提供了预定义的方程式，可用来测量整个域的体积均匀度。混合液体被作为被动标量跟踪，该被动标量最初在罐底处于静止状态（参见图 3，求解时间 0.1 秒）。被动标量就像随时间推移与水混合的数字示踪剂，最终混合物在整个域中达到均匀浓度。图 3 说明了示踪剂浓度随时间的视觉变化。当然，为了量化均匀性，在域内定义了几个点，然后在这些点上跟踪被动标量示踪剂随时间变化的浓度。图 5 显示了相应结果。为了实现理想的均匀混合，将混合时间定义为所有示踪点均达到 100% 均匀度所需的时间（均匀性 = 1）。在这项研究中，工程师希望所有示踪剂达到 95% 的均匀度，并使用它们作为测量混合时间的准则。混合时间的测量值汇总在表 1 中。

结论

他们使用了不同的计算工具对配备有 HTPG4 叶轮的搅拌罐的单相仿真进行了建模。与实验结果相比，Simcenter STAR-CCM+ 的 CFD 仿真结果提供了准确的机械搅拌罐功率数、排量数和混合时间。与具有可比网格单元数的其他测试软件相比，Simcenter STAR-CCM+ 在保持相同精度的同时，得出结果的速度最快。

此外，Simcenter STAR-CCM+ 的易用性、随心所欲的设置、快速周转时间以及各种类型的后处理功能，使皮埃尔葛安获得了远超市场竞争对手的显著优势。该公司因此对 Simcenter STAR-CCM+ 在其未来仿真中的使用充满信心。

	实验	Simcenter STAR-CCM+	百分比差值
N_P（功率数）	0.67	0.657	1.94
NQ（排量数）	0.65	0.644	0.92
N.Tm（无量纲混合时间）	13	13.68	5

表 1：计算结果与实验结果之间的比较。

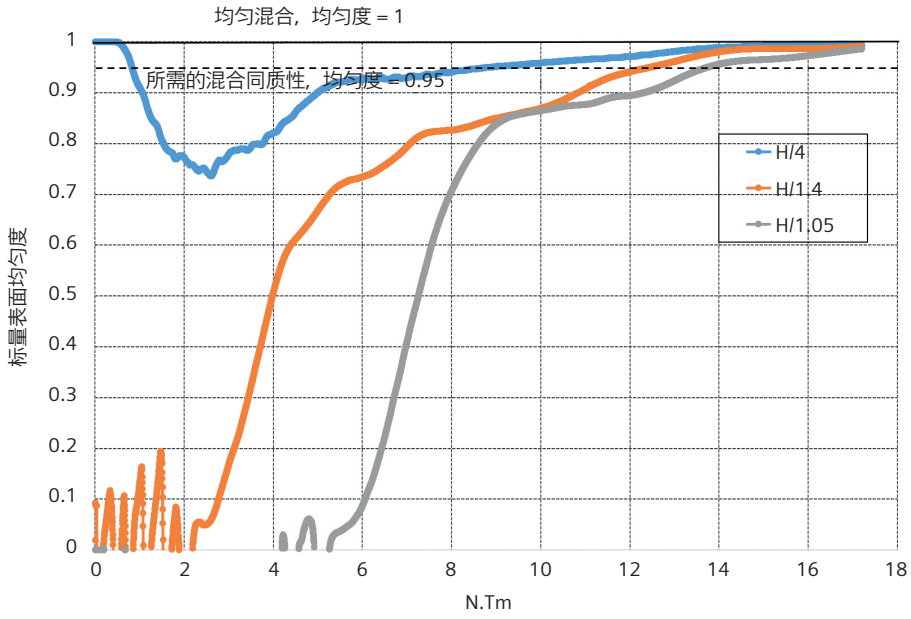


图 5：不同级别上被动标量示踪剂浓度随时间的变化；图中的虚线表示所需的混合同质性（均匀度 = 0.95）。

流化催化裂化装置的计算分析

简介

第二次世界大战之前发明的流化催化裂化装置 (FCC) 仍然是精炼业务的核心。它对于精炼业务的盈利能力至关重要，因为它将长链碳氢化合物裂解为更有价值的产品，例如汽油。

尽管技术已经成熟，但 FCC 仍然是重要的研究课题，无论是设计还是操作层面，人们从未停止对它的研究。本文简要概述了计算流体动力学 (CFD) 和粒子动力学分析的作用，并提供了两个相关的案例研究：FCC 提升管中流化建模，以及气固旋风分离器中流体建模。两个案例都将仿真结果与理论或测试数据进行了比较，并获得了很好的一致性。

FCC 通常包含两个组件：提升管（反应器段）和再生器。在提升管段中，注入热液态油，使其接触热催化剂颗粒。产生的反应导致油裂化和气体膨胀，这将催化剂拖到反应器顶部并进入再生器，它们在此穿过旋风分离器。FCC 中具有复杂的流体和粒子动力学现象以及传热和传质。为简单起见，我们将重点介绍两个部分：固体催化剂颗粒的流化和旋风分离器中的流动。在按比例放大设计（从测试台到工业化生产）或者在排除分布不佳问题时，流化分析是要进行的典型研究。旋风分析可以提高分离效率、确保性能并最大程度减少侵蚀损害。

计算流体动力学

CFD 是一种分析方法，被工程师广泛应用于从石油、天然气和化学工艺到汽车和航空航天行业的各个领域。它是航空航天和汽车工业率先使用的设计工具，如今已是设计评估的常规工具，可提供详细的深入见解，同时减少与产品开发相关的时间和成本。从复杂的流体动力特性、缸内内燃机的喷雾、传热和传质建模，到电动汽车和混合动力汽车的电池技术，它始终是提高车辆发动机效率的关键技术。

除了求解流体动力学、传热和传质问题外，最新的 CFD 代码还能够对粒子运动进行建模。通过求解流体和粒子动力学特性，我们可以开始预测 FCC 中的复杂行为。

此类方法之一是离散元素方法 (DEM)。粒子通过表面接触彼此并与周围的几何体相互作用，这里基于的是粒子可以形成重叠的软粒子形成机制。这种方法可以对粒子系统进行详细建模。然后可以将其耦合到 CFD 仿真中，这样，粒子运动受粒子间的相互作用以及粒子 - 壁撞击和流体力的驱动。

历史上，在对 FCC 之类的系统建模时执行 DEM 仿真在计算上是不可行的，因为分析的计算成本会随着所建模的粒子数量而增加，而 FCC 包

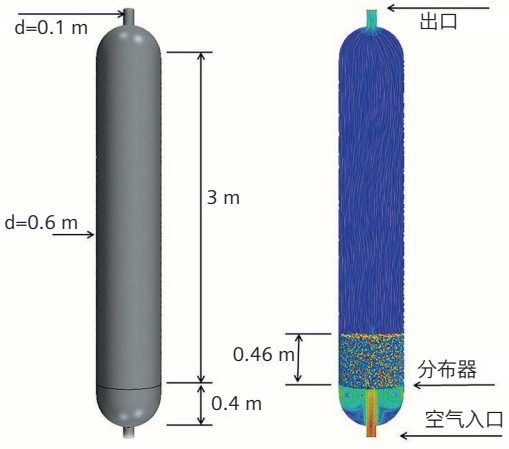


图 1：提升管的几何和边界条件研究。

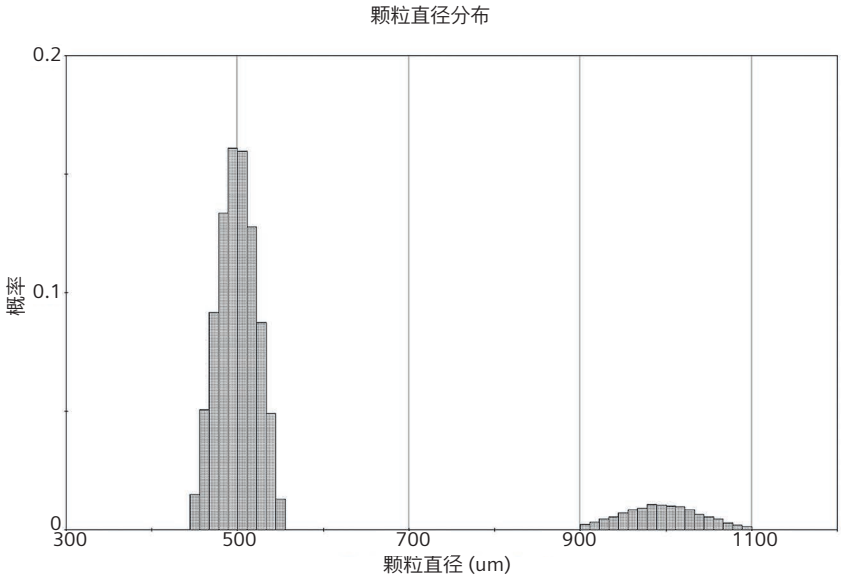


图 2：颗粒尺寸分布：颗粒分布在 500 微米左右，粗颗粒在 1 毫米左右。

含数十亿个粒子。建模技术的最新发展中引入了一种称为粗粒化的方法。在粗粒分析中，可以用单个粒子包来代表大量粒子。系统将计算代表性小粒子的流体 - 颗粒相互作用，然后将其应用于整个粒子包，同时基于粒子包的规模计算接触动力学特性。然后可以扩展该方法，将 FCC 的主要物理特性包括在内，包括可变的颗粒尺寸、传热和传质。[1]

研究 1：FCC 提升管中的流化建模

本研究中的系统是工业规模的测试设备（图 1），高度 3 米，直径 0.6 米。该流化床包含近 10 亿个固体颗粒，直径范围从 500 微米到 1 毫米。

这项研究的目的是对比 Ergun 预测（一种预测流化行为和所导致的压降的理论），了解不同气流速率下的流化行为。此类研究是 FCC 设计中要执行的典型分析。例如，为了确保从试验台规模成功扩大到工业规模，为了确定再生器中分布不良的区域，或者了解可能导致催化剂分解的粒子间作用力。

分析过程从定义提升管的物理几何形状开始，如图 1 中的灰色所示。它通常内置在参数化 3D CAD 软件包中。CAD 模型的参数化本质以及与仿真包的紧密链接使工程师可以更改设计并重新运行分析，快速轻松地探索设计空间。

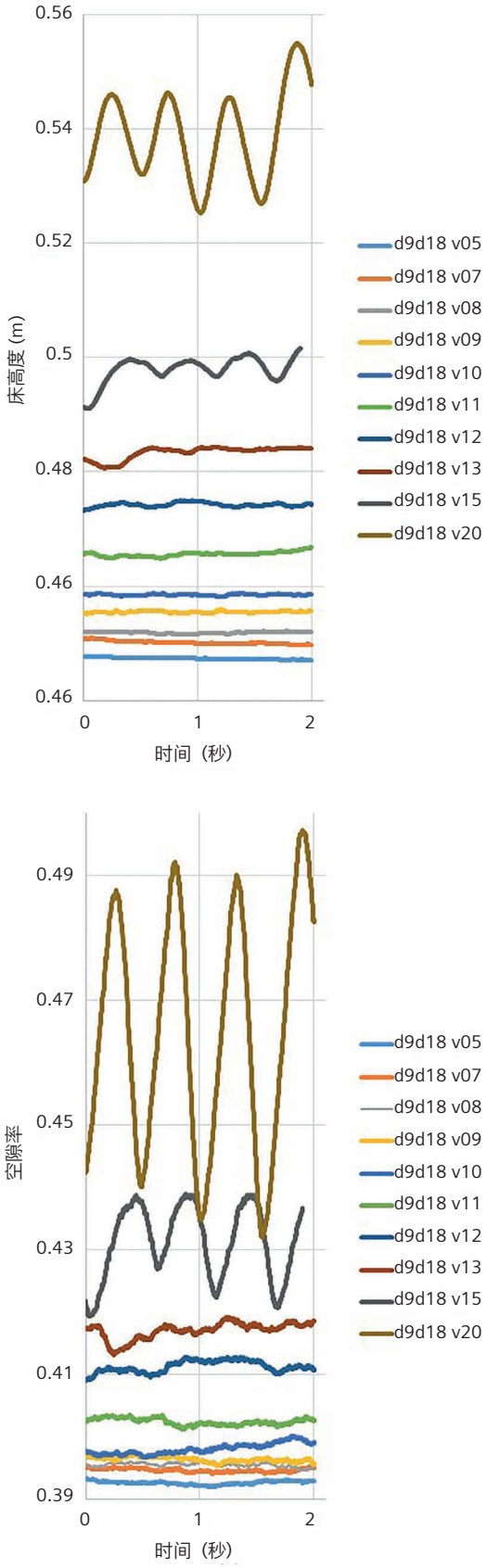


图 3：10 个表观速度下随时间变化的压降和床高。

构建几何图形后，将生成计算网格。可以使用各种类型的网格或单元。本例在核心体积块、近壁边界层中使用了六面体网格，并使用棱柱层网格捕获传热效果。这是一种贴体网格，通过使用棱柱体单元有效解析壁的法向渐变。通过修整六面体以形成多面体单元，六面体核心过渡到近壁网格。这种方法可以使用六面体，这是有利的，因为六面体可以以较低的计算成本获得更高精度，即使是处理此类复杂几何。

构建几何和计算网格之后，需要定义感兴趣的物理属性和边界条件。这项研究使用了不可压缩的空气，将外表速度从 0.139 m/s 更改为 1.139 m/s。对十亿个大小不同的颗粒进行了建模。颗粒大概分为两种尺寸：细颗粒和粗颗粒。细颗粒围绕 500 微米呈正态分布。粗颗粒的平均直径为 1 毫米。然后运行仿真直至达到伪稳态，并在确保任何启动或初始条件的影响都消失后，求取分析时间的最后两秒内压降等变量的平均值。[2]

作为验证步骤，将不同表观速度下预测的平均压降和流化床空隙率与流化床分析理论 Ergun 预测进行了比较（见图 5）。直到流化发生（此时平均压降稳定）为止，随着表观速度的增加，不断增加的压降的绝对值具有良好的一致性。

研究 2：气固旋风分离器中的流动建模

第二项研究对旋风分离器进行了详细分析，最近在意大利米兰举行的国际化学与工艺工程会议 (ICHeaP) 中对此进行了演示。旋风分离器用于分离固体催化剂颗粒。旋风分离器中固体颗粒的旋流会造成侵蚀破坏。设计或性能不佳的旋风分离器会导致严重的维护问题和成本。准确预测旋风分离器中的颗粒流可以对现有设计进行故障排除，并防止此类问题的发生。为了确定仿真方法的准确性，分析了一个标准的旋风测试案例：斯泰曼旋风分离器。其优势是可以获得良好的实验数据。

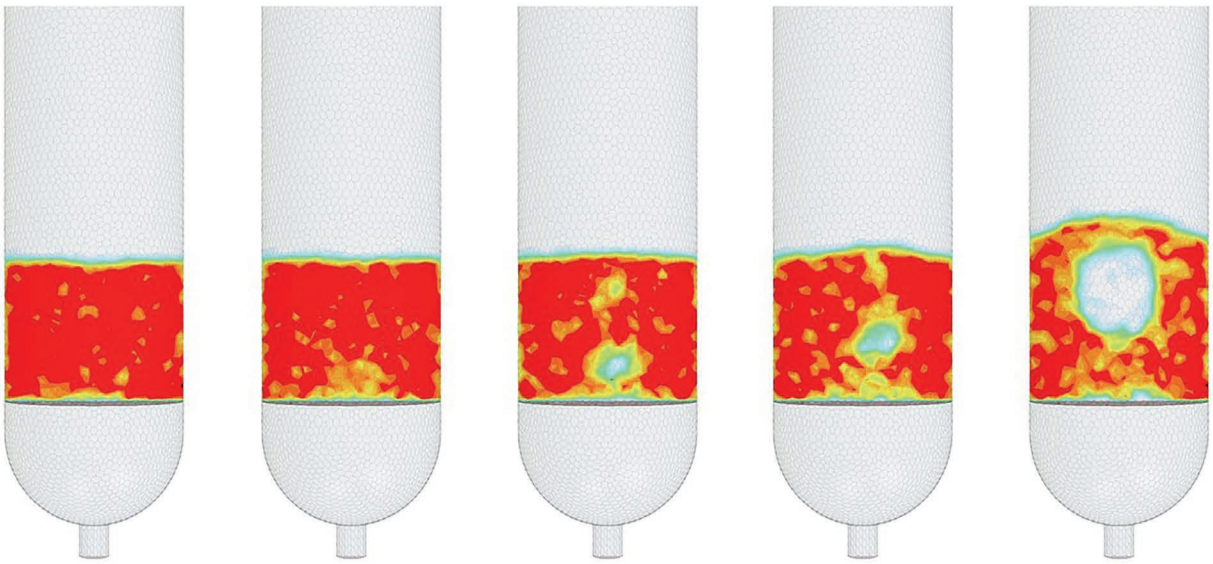


图 4：颗粒尺寸分布：颗粒分布在 500 微米左右，粗颗粒在 1 毫米左右。

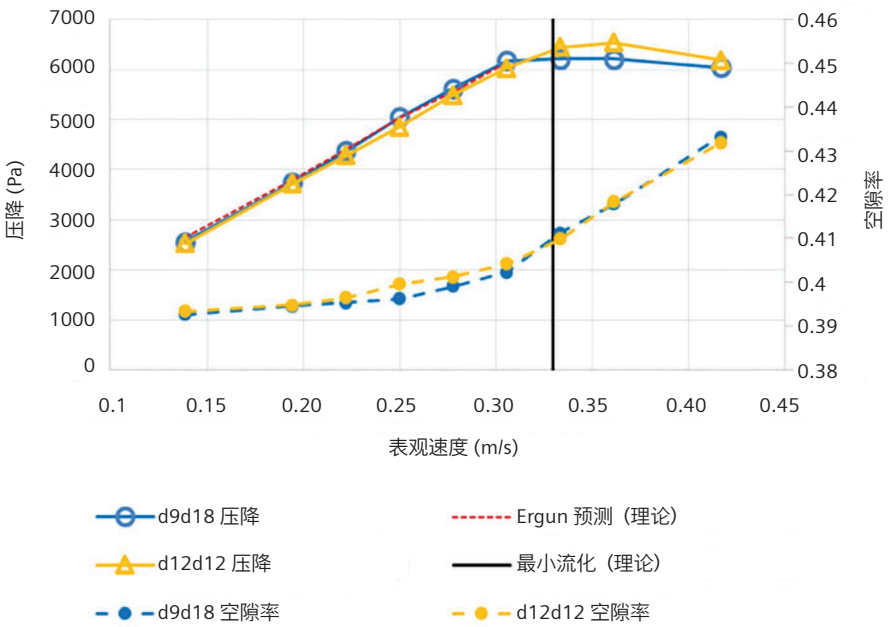


图 5：各种表观速度下的平均压降和空隙率。

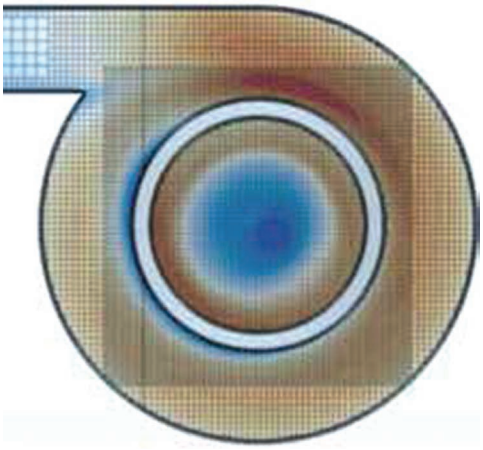


图 6：旋风分离器几何的横截面图、网格和切向速度等值线。

图 7：显示通过中心涡旋将重颗粒（下部出口）和轻颗粒分离的流线。

再次构建 3D CAD 几何，并使用经过修剪的六面体网格。旋风分离器中存在强旋涡，意味着要获得它们的准确结果极具挑战性，行业惯例是使用结构化的流动对齐六面体网格以及高级湍流模型：雷诺应力模型或 RSM。尽管仍然需要 RSM，但这项工作表明，使用自动生成的六面体修剪网格可以获得准确的结果，这大大减少了模型设置时间。该项目的第二个成果是将仿真最佳实践结合到了自动化工作流工具（仿真助手）中，该工具基于所使用的 CFD 包 (Simcenter STAR-CCM+) 运行。

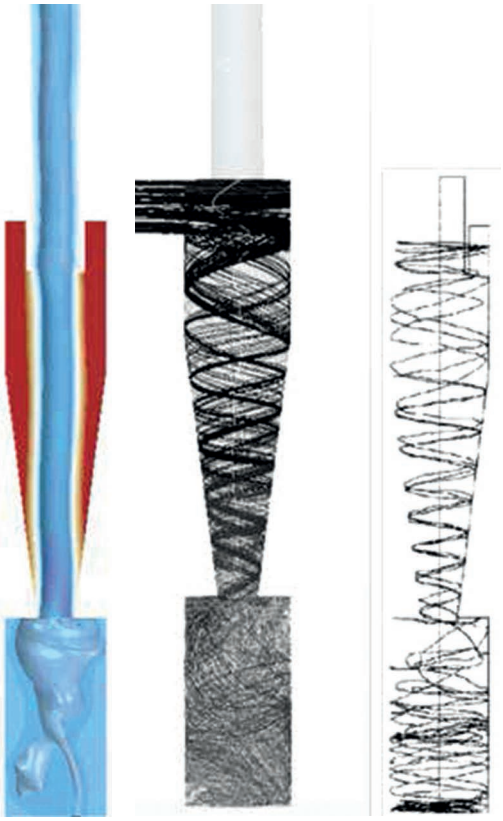


图 8：旋风分离器中心线下方的涡旋快照和颗粒轨迹 – CFD（左）和实验（中和右）。

本例中充分稀释了固体颗粒以便可以忽略颗粒间的相互作用，并可以使用传统的拉格朗日颗粒模型：与 DEM 方法非常相似，此方法可预测颗粒在运动参考框架中的路径，区别在于忽略了颗粒间相互作用，从而减少了计算量。颗粒可以与背景流体进行单向或双向耦合：单向指颗粒运动由流体驱动，但流体中不存在颗粒。图 8、9 和 10 证明了仿真能够准确捕获感兴趣的积分值（例如压降和分离效率）以及颗粒轨迹。后者是侵蚀分析的关键输入：侵蚀模型将颗粒轨迹和速度与磨损或侵蚀速率相关联。

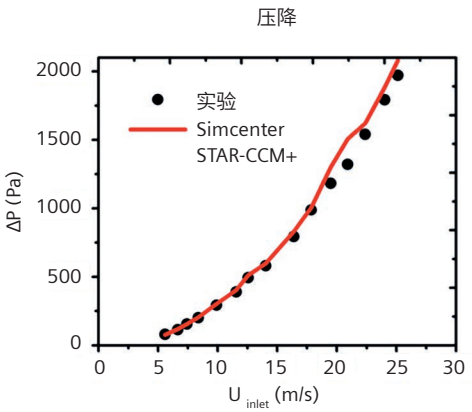


图 9：旋风分离器上的平均压降与入口速度的关系：CFD 和实验。

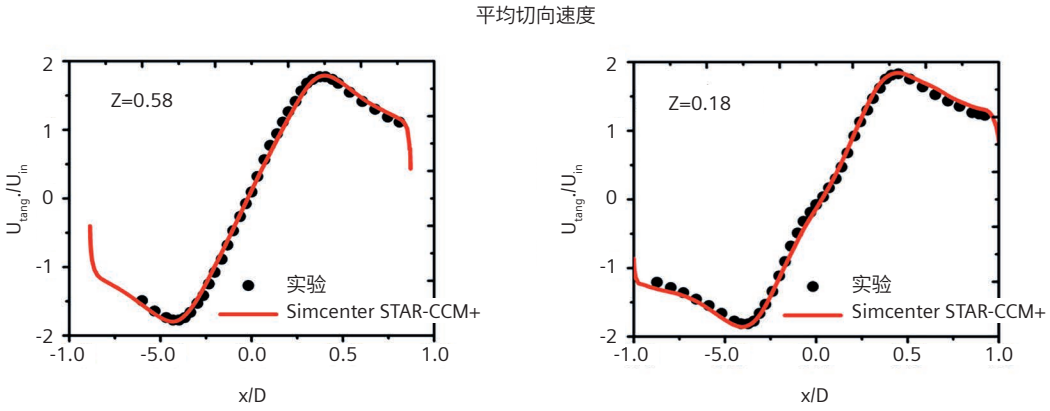


图 10：旋风分离器两个横截面处的平均切向速度：CFD 与实验比较。

结论

本文简要概述了如何使用一流的计算流体和粒子动力学工具来设计 FCC 和 FCC 组件（如提升管或旋风分离器）或对其进行故障排除。

具体来说，说明了 DEM 方法学如何利用技术进步（称为粗粒化）以合理的计算量处理具有大量（超过 10 亿个）颗粒的系统，同时得到准确结果。

其次，现在可以使用高质量的自动网格划分技术（例如，所述的修剪单元法）来精确预测旋风分离器中的流动。将这些与工作流自动化和最佳实践封装工具（例如仿真助手）结合使用时，可大大减少使用 CFD 设计或对设备（如旋风分离器）进行故障排除的工作量。最后，FCC 的流体动力学分析需要混合方法。Simcenter STAR-CCM+ 之类的软件提供了那些久已存在的传统方法所缺乏的先进性。本质上结合了流体流动的 DEM 方法是最新技术。

参考信息

1. AIChE 论文，DEM simulations of industrial size fluidized bed using coarse grain model with particle size distribution（使用具有颗粒尺寸分布的粗粒模型对工业尺寸流化床进行 DEM 仿真），2014 年。
2. Nunhez 等人的演讲，AIChE 年会，2012 年。

关于 Siemens Digital Industries Software

Siemens Digital Industries Software 是 Siemens Digital Industries 的一个业务部门，其致力于推动行业数字化转型，为制造商实现创新创造新机遇，可谓是全球领先的软件解决方案供应商。总部位于美国得克萨斯州普莱诺市，在全球拥有超过 140,000 个客户，并与所有规模的企业协同工作，帮助他们转变将想法变成现实的方式、产品实现方式以及使用和了解运行中产品和资产的方式。有关产品和服务的详细信息，请访问 siemens.com/plm。

总部
Granite Park One
5800 Granite Parkway
Suite 600
Plano, TX 75024
USA
+1 972 987 3000

美洲
Granite Park One
5800 Granite Parkway
Suite 600
Plano, TX 75024
USA
+1 314 264 8499

欧洲
Stephenson House
Sir William Siemens Square
Frimley, Camberley
Surrey, GU16 8QD
+44 (0) 1276 413200

亚太地区
Suites 4301-4302, 43/F
AIA Kowloon Tower,
Landmark East
100 How Ming Street
Kwun Tong, Kowloon
Hong Kong
+852 2230 3333

版权限制 © Siemens 2019。Siemens 和 Siemens 徽标是 Siemens AG 的注册商标。Femap、HEEDS、Simcenter、Simcenter 3D、Simcenter Amesim、Simcenter FLOEFD、Simcenter Flomaster、Simcenter Flotherm、Simcenter MAGNET、Simcenter Motorsolve、Simcenter Samcef、Simcenter SCADAS、Simcenter STAR-CCM+、Simcenter Soundbrush、Simcenter Sound Camera、Simcenter Testlab、Simcenter Testxpress 和 STAR-CD 是 Siemens Product Lifecycle Management Software Inc.、其子公司或其附属公司在美国和其他国家 / 地区的商标或注册商标。所有其他商标、注册商标或服务标记均属于其各自持有方。SolidWorks 是 Dassault Systèmes 的注册商标。Java 是 Oracle 和 / 或其附属公司的注册商标。所有其他商标、注册商标或服务标记均属于其各自持有方。

67143-81965-C4-ZH 4/20 LOC