

医药洁净室的计算流体力学模拟及实测对比

彭皓¹, 雷飞²

(1. 中国医药集团联合工程有限公司, 湖北 武汉 430077;
2. 华中科技大学 环境科学与工程学院, 湖北 武汉 430077)

摘要: 采用计算流体力学(CFD)模拟,研究 3 个医药洁净室的气流流型及颗粒物浓度.采用标准 $k-\epsilon$ 双方程模型,通过模拟颗粒物在洁净室的分布,分析合理的污染物散发位置及散发比例.对比参考发尘量下的结果与实测数据的差异,根据实测数据确定污染散发量,通过试验不同的单位容积发尘量,计算对应的洁净度,得到与实测数据吻合最好的单位容积发尘量.在单位容积发尘量为 $1\,000\text{ pc}\cdot(\text{m}^3\cdot\text{min})^{-1}$ 计算条件下,各房间的模拟结果与实测数据数值比较吻合,且经 CFD 预测的 3 个房间的洁净度变化趋势与实测一致.

关键词: 洁净室; 计算流体力学; 污染物; 散发位置; 洁净度; 发尘量

中图分类号: TU 834.844; O 35 **文献标志码:** A

要确保药品的质量,除了应遵照药典规定的特定要求和配方外,还应具有符合要求的生产环境,以防止生产过程中微粒和微生物的污染、交叉污染.因此,医药洁净室的设计就显得尤为重要.在医药洁净室中,除了保证工作区的气流组织符合要求外,室内颗粒物浓度即洁净度也必须达到要求的级别^[1].计算流体力学(computational fluid dynamics,CFD)模拟在洁净室的气流组织设计优化方面已经有不少研究和工程应用^[2-4].然而,其中大部分研究仍停留在气流分析和评价上,间接实现对污染的控制,而直接模拟污染物的去除、污染分布和污染控制的研究较少,且多是在实验室数据基础上,仅采用 CFD 模拟调试数据进行对比^[5-7].本文以 CFD 模拟结果作为辅助设计的计算工具,实现洁净室的污染控制.

1 洁净室的物理模型

1.1 洁净室房间模型

为了实现洁净室内部三维湍流数值计算,考虑到计算因素,建立目标洁净室简化物理模型.模拟洁净室有洁净室 A,B,C,其房间参数如表 1 所示.表 1 中: l,d,h 分别为洁净室的长、宽、高.根据 3 个洁净室内设施,分别制作洁净室 A,B,C 室内设施简化模型,如图 1 所示.

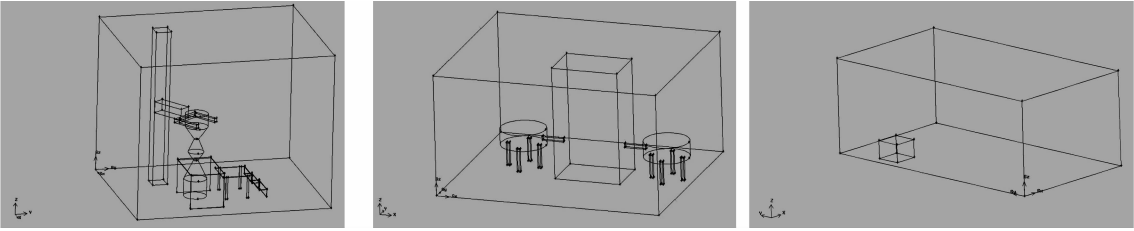
表 1 CFD 模拟洁净室的参数

Tab.1 Parameters of the CFD simulation of the clean room

房间	$l\times d\times h/\text{m}\times\text{m}\times\text{m}$	设计洁净度	模型简称
粉碎 225 室	$5.25\times4.25\times4.20$	B 级	洁净室 A
分装 221 室	$6.30\times5.30\times4.20$	B/A 级	洁净室 B
暂存 220 室	$8.25\times4.55\times3.00$	B/A 级	洁净室 C

1.2 边界条件

- 1.2.1 入口边界条件 入口采用速度入口边界条件,参数主要包括送风速度、送风温度、湍动能和湍流耗散率.在进口,湍动能和湍流耗散率通常是未知的,按标准双方程模型分别取 1.0,1.3.送风速度方向垂直于风口面.
- 1.2.2 出口边界条件 回风口处的速度可由质量守恒定律和能量守恒定律求得.房间底部的回风口按充分发展流动的单向化处理,设为充分发展流动(outflow)或压力出口(outflow)边界条件.又由于需要对回风口的具体风量进行比例的限制,因此,选取充分发展流动边界条件.



(a) 洁净室 A (b) 洁净室 B (c) 洁净室 C

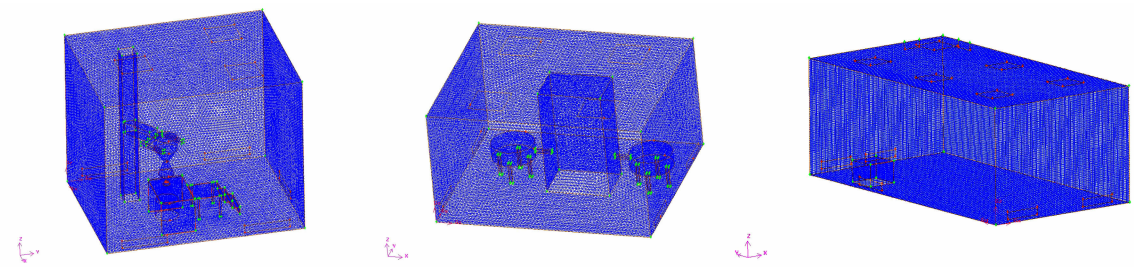
图 1 洁净室室内设施简化模型

Fig. 1 Simplified model of clean room indoor facilities

1.2.3 固体壁面边界条件 由于各房间室内温度相同,壁面间无热量传递,天花板、室内墙壁、地面等作为绝热边界条件处理,取壁面绝热边界条件.

1.3 洁净室的网格划分

由于流入流出口对室内空气流场的重要作用,在网格生成时要尽可能准确地反映流入流出的形状和位置.因课题所研究的洁净室内存在不规则几何形状,故采用结构化网格和非结构化网格相结合的方式.图 2 为洁净室的网格划分示意图.



(a) 洁净室 A (b) 洁净室 B (c) 洁净室 C

图 2 洁净室的网格示意图

Fig. 2 Schematic diagram of grid of clean room

2 洁净室的空气流动模型

洁净室内气体的流动在稳定状态下可视为恒定流.同时因室内空气的流速较低,可视为不可压缩流体,满足理想气体状态方程.此外,洁净室内部空气的流动属于湍流流动,必须遵守流动的质量守恒、动量守恒和能量守恒三大规律.模拟的 3 个洁净室都为混合流洁净室,房间背景流动都为乱流,上送下侧回式,局部为单向层流.

根据室内空气流动特点,在数学模型上做如下 4 点假设与简化:

- 1) 室内流体为不可压缩牛顿流体;
- 2) 室内流体为粘性流体,流体作定常流动,忽略由流体粘性力做功所引起的耗散热;
- 3) 考虑到洁净室密闭性良好,且在测试期间门窗关闭,故不考虑漏风对房间流场和温度场的影响;
- 4) 为了简化计算,不考虑气流的能量损失.

由于洁净室内流体的三维流动在恒定不可压缩的条件下满足紊流雷诺(Reynolds)时均方程,其方程表达式为

$$u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = f_i - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} [(v + \nu_t) (\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_j}{\partial x_i})].$$

综合考虑模型处理的精度和问题解决的耗损,在选择洁净室内流体紊流模型时,采用标准 $k-\epsilon$ 双方程模型.

3 CFD 的模拟试验

为了更好地确立目标洁净室的模拟环境,明确洁净室颗粒物浓度的影响因素,通过设置变量的方

式,利用不同边界条件的算例进行试算. 经过反复模拟探索计算和分析,确定了最佳的模拟方式.

3.1 边界条件试验

系统边界条件分为风口边界条件和离散相边界条件两部分. 最终结果对比发现,各条件下对结果影响不大,趋势较为一致,但为了严格控制风速大小,模拟计算选用速度边界条件,如节 1.2 所定边界条件. 考虑到离散型模型在反应颗粒物浓度受气流组织影响时可行性良好,故采用离散型(DPM)模型对颗粒物浓度进行模拟.

3.2 颗粒物浓度试验

发生方式的设置是颗粒物模拟中很重要的一部分,对洁净度和尘粒分布有很大影响. 在此选取 3 种发尘面,进行颗粒物浓度模拟试验:1) 房间四周侧壁面发尘;2) 房间四周 2 m 以上侧壁面发尘;3) 除去层流罩的吊顶区域作为发尘面. 通过与实测数据对比,以上 3 种发尘量确定方法并不能达到理想的可行效果. 最终通过查阅《不同送风面积下洁净室浓度场的数值模拟分析》引入不同发尘比例的方式,反复进行模拟,较好地实现了与实测数据的吻合.

4 CFD 模拟工况及结果分析

4.1 污染物散发位置及比例对洁净度的影响

为了探究放散比例对洁净度的影响,选定洁净室 C 作为模拟对象,在 3 种不同的发尘比例情况下进行模拟. 3 种发尘比例(γ)分别为 1:3:10,1:5:100 和 1:5:200,选取工作面高度 1.2 m 作为评价高度. 3 种发尘比例情况下,洁净室 C 房间发尘参数设置,如表 2 所示. 表 2 中: Q 为粉尘质量流量; M 为散发量;洁净室单位容积发尘量(G)为 $5\,000\text{ pc}\cdot(\text{m}^3\cdot\text{min})^{-1}$ (pc 为颗粒,下同)^[8].

表 2 不同发尘比例下洁净室 C 的参数设置

Tab. 2 Parameter settings of clean room C under different dust proportions

γ	$Q/\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}$	$M(\text{顶棚})/\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}$	$M(\text{墙面})/\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}$		$M(\text{地面})/\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}$
			$l\times h$	$d\times h$	
1:3:10	1.54×10^{-10}	1.10×10^{-11}	5.86×10^{-12}	1.06×10^{-10}	1.10×10^{-10}
1:5:100	1.54×10^{-10}	1.45×10^{-12}	1.29×10^{-12}	2.34×10^{-12}	1.45×10^{-10}
1:5:200	1.54×10^{-10}	7.47×10^{-13}	6.64×10^{-13}	1.20×10^{-13}	1.49×10^{-12}

通过模拟计算,得出 3 种发尘比例时,1.2 m 工作高度的颗粒物浓度(C)和房间总浓度(C_{tot})的走势情况,结果如图 3 所示. 具体数值结果,如表 3 所示. 表 3 中: C_{ave} , C_{max} 分别为室内颗粒物的平均浓度和最大浓度; C_{n} 为室内颗粒物的浓度标准值.

表 3 洁净室 C 的全室洁净度

Tab. 3 Whole room cleanliness of clean room C $\text{pc}\cdot\text{m}^{-3}$				
γ	C_{ave}	C_{max}	C_{n}	$C_{\text{ave}}+2C_{\text{n}}$
1:5:100	2 119	148 085	4 375	10 369
1:3:10	2 966	134 669	4 696	12 358
1:5:200	1 739	125 525	4 168	10 075

综合文献和模拟的结果,建议对洁净室 C 采用围护结构面源发尘模式,发尘比例 $\gamma=1:5:100$. 然而在对洁净室 A,B 采用发尘比例 $\gamma=1:5:100$ 时,模拟所得 1.2 m 处颗粒物平均浓度趋势与实测结果不符. 经过反复探索及验算,对房间内无设备的情况(洁净室 C),计算中房间内部空间没有发尘面.

综合分析,采用围护结构发尘模式,发尘比例 $\gamma=1:5:100$. 对于房间内有设备(洁净室 A,B),房间内部空间有发尘面的,将发尘位置设置在设备上.

4.2 污染物散发量对洁净度的影响

选取 $\gamma=1:5:100$,参照实测数据(颗粒物平均浓度为 $5\,000\text{ pc}\cdot\text{m}^{-3}$),对相应的边界条件、污染

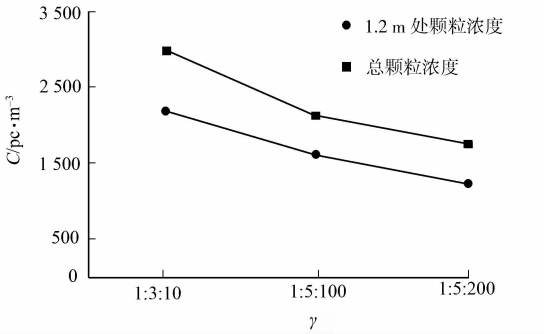


图 3 不同发尘比例下模拟输出结果走势图
Fig. 3 Simulation charts output results of different dust proportions

散发量进行估计,模拟结果如表 4 所示. 计算结果表明:污染散发量与房间的洁净度有线性关系.

表 4 两种发尘量的洁净室 C 模拟全室洁净度

Tab. 4 Simulated whole room cleanliness of clean room C under two kinds of dust contents

项目	$G/\text{pc} \cdot (\text{m}^3 \cdot \text{min})^{-1}$	$C_{\text{ave}}/\text{pc} \cdot \text{m}^{-3}$	$C_{\text{max}}/\text{pc} \cdot \text{m}^{-3}$	$C_{\text{n}}/\text{pc} \cdot \text{m}^{-3}$	$(C_{\text{ave}} + 2C_{\text{n}})/\text{pc} \cdot \text{m}^{-3}$
参考发尘量	5 000	2 119	148 085	4 375	10 869
实测数据反算发尘量	1 250	574	39 292	1 218	3 010

为了进一步确定污染物散发量对洁净度的影响,研究中采用两个方法确定污染散发量,即取洁净室单位容积发尘量(G),并计算对应的洁净度(C). 方法 a:参考《药厂洁净室设计、运行与 GMP 认证》提供的数值^[8],取洁净室单位容积发尘量(G)为 $5\,000\text{ pc} \cdot (\text{m}^3 \cdot \text{min})^{-1}$,在此简称参考发尘量. 方法 b:根据实测数据结果确定污染散发量,以 CFD 模拟结果接近实测数据结果为准,在此简称反算发尘量(G_{n}). 在测试平面 1.2 m 下,洁净室 A,B,C 的实测数据分别为 616,212,333 $\text{pc} \cdot \text{m}^{-3}$.

4.3 模拟工况设置

模拟洁净室有 3 个,研究中将洁净室 C 的模拟工况作为分析对象,其他两个洁净室模拟过程相近,不再重复赘述. 洁净室 C 总风量按设计值 $12\,034\text{ m}^3 \cdot \text{h}^{-1}$ (包括散流风口的风量 $3\,740\text{ m}^3 \cdot \text{h}^{-1}$ 和层流罩风量 $8\,294\text{ m}^3 \cdot \text{h}^{-1}$),散流风口面积为 0.6 m^2 . 洁净室几何参数及送回风口尺寸位置均为给定值,如表 5 所示. 表 5 中: l,d,h 分别为洁净室的长、宽、高. 选取 $\gamma=1:5:100$,污染物参数设置如表 6 所示. 表 6 中: l,d,h 分别为洁净室的长、宽、高; V 为房间体积; G 为单位容积空间颗粒浓度; C 为空间颗粒物浓度; Q 为粉尘质量流量; M 为散发量.

表 5 洁净室 C 的 CFD 几何模型参数

Tab. 5 CFD geometric model parameters of clean room C

项目	l/m	d/m	h/m	数量	位置
房间	4.55	8.25	3.0	—	—
送风口	0.77	0.77	—	5	吊顶
回风口	1.20	0.20	—	5	底面距地面 0.15 m
设备	0.80	0.80	0.6	1	—
层流罩	3.20	2.20	0.5	1	吊顶

表 6 $\gamma=1:5:100$ 下污染物的参数设置

Tab. 6 Parameter settings of pollutants by $\gamma=1:5:100$

房间	$l \times d \times h/\text{m} \times \text{m} \times \text{m}$	设计洁净度	V/m^3	$G/\text{pc} \cdot (\text{m}^3 \cdot \text{min})^{-1}$	$C/\text{pc} \cdot \text{m}^{-3}$
洁净室 A	$4.55 \times 8.25 \times 3$	BA 级	112.6	5 000	563 000
洁净室 B	$6.5 \times 5.3 \times 4.2$	BA 级	140.2	5 000	701 000
洁净室 C	$4.25 \times 5.25 \times 4.2$	B 级	93.7	5 000	465 500

房间	$Q/\text{kg} \cdot \text{s}^{-1}$	$M(\text{顶栅})/\text{kg} \cdot \text{s}^{-1}$	$M(\text{墙面})/\text{kg} \cdot \text{s}^{-1}$		$M(\text{地面})/\text{kg} \cdot \text{s}^{-1}$
			$l \times h$	$d \times h$	
洁净室 A	1.54	1.45	1.29	2.34	1.45
洁净室 B	1.92		设备表面发尘		
洁净室 C	1.28		设备表面发尘		

4.4 参考发尘量模拟结果与分析

对于洁净室 C,工作平面(1.2 m)的颗粒物浓度为 $1\,610\text{ pc} \cdot \text{m}^{-3}$. 图 4(a)~(g)分别为各截面上颗粒物浓度分布图. 表 7 为 3 个房间的全室洁净度及测试平面 1.2 m 的洁净度汇总表.

表 7 3 个房间的洁净度汇总表

Tab. 7 Cleanliness summary table of three rooms

房间	算例	$G/\text{pc} \cdot (\text{m}^3 \cdot \text{min})^{-1}$	全室洁净度/ $\text{pc} \cdot \text{m}^{-3}$				测试平面洁净度/ $\text{pc} \cdot \text{m}^{-3}$			
			C_{ave}	C_{max}	C_{n}	$(C_{\text{ave}} + C_{\text{n}})$	C_{ave}	C_{max}	C_{n}	$(C_{\text{ave}} + C_{\text{n}})$
洁净室 A	设备发尘	5 000	9 206	2 746 165	49 007	107 220	3 685	1 075 753	28 185	60 055
洁净室 B	设备发尘	5 000	1 720	1 636 367	11 880	25 480	1 352	280 515	7 701	16 754
洁净室 C	$\gamma=1:5:100$	2 119	148 085	4 375	10 869	5 000	1 610	47 998	3 527	8 664

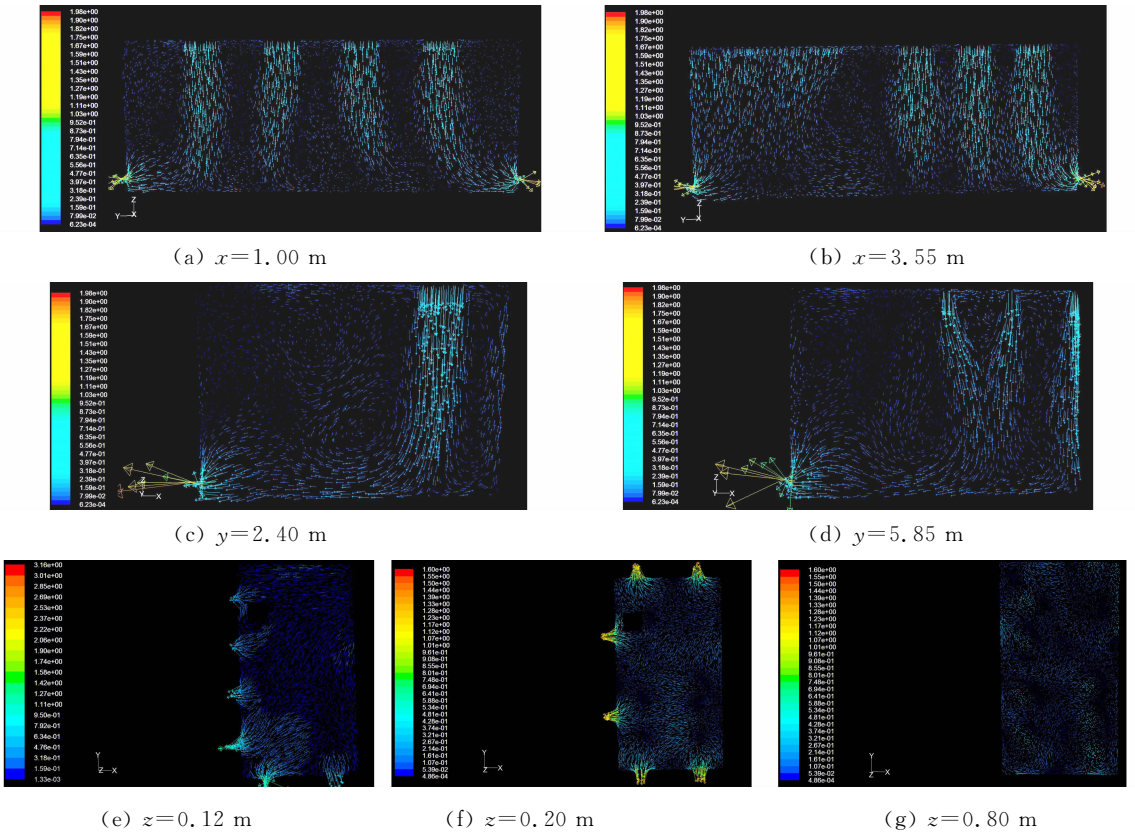


图 4 各截面上颗粒物的浓度分布

Fig. 4 Concentration distribution of particles on each cross section

从图 4 的各 y 轴截面图可看出:没有排风口的侧墙面,颗粒物无法通过近壁面排除,在没有排风口的墙面中上部,容易形成较明显的涡流区,以致颗粒物在此积累明显,浓度较高.此外,层流罩回风口对颗粒物有较为明显的卷吸作用,在回风口附近存在局部颗粒物浓度偏高的现象.

从图 4 的各 z 轴截面图可看出:在无层流罩覆盖的墙壁角落,有尘粒积累现象;远离层流罩覆盖区域,向排风口移动的趋势,整体排污效果良好.

综合图 4 可知:层流罩覆盖区域,尘粒浓度控制良好,洁净度级别在要求范围内.

4.5 反算发尘量下的模拟结果与分析

由参考发尘量模拟结果可以看到,3 个房间的洁净度级别均在要求的范围之内,但和实测数据相比还有一定差距.在此,提出模拟向实测靠拢的方法,根据实测数据结果确定污染散发量,通过试验不同的单位容积发尘量 G ,计算对应的洁净度,其他计算边界条件同参考发尘量工况.由靠拢算例所得模拟结果,如表 8 所示.

不同的单位容积发尘量下的,气流分布完全相同,污染分布特点也相同.污染散发量与洁净度近似成线性关系.在单位容积发尘量 $5\,000\text{ pc}\cdot(\text{m}^3\cdot\text{min})^{-1}$ 的参考发尘量计算条件下,各个房间模拟结果符合洁净度的设计标准,但实测工况结果远远优于设计标准,与实测数据并不能合理地适应.在单位容积发尘量 $1\,000\text{ pc}\cdot(\text{m}^3\cdot\text{min})^{-1}$ 反算发尘量的计算条件下,各个房间模拟结果与实测结果吻合较好;模拟结果显示,除单位容积发尘量外,研究确定的其他各个边界条件比较合理.

5 结论

采用 CFD 方法对洁净室的洁净度进行预测,并与实测数据对比,得出以下 3 点主要结论.

表 8 不同单位容积发尘量下测试平面的洁净度

Tab. 8 Test plane cleanliness under different unit volume of dust content $\text{pc}\cdot\text{m}^{-3}$

洁净室	$G/\text{pc}\cdot(\text{m}^3\cdot\text{min})^{-1}$			实测结果
	5 000	1 250	1 000	
洁净室 A	3 685	927	671	616
洁净室 B	1 352	303	282	212
洁净室 C	1 610	401	319	333

1) 不同的污染物散发位置及比例将直接影响到 CFD 模拟结果. 对无设备、内部空间没有发生面的房间内, 围护结构发生为主, 采用的发生比例为 $\gamma=1:5:100$; 对于房间内有设备, 房间内部空间有发生面的情况, 将发生位置设置在设备上. 采用以上方式, CFD 模拟结果与实测数据一致.

2) 污染散发量与房间的洁净度有线性关系. 采用参考文献给出的发生量, 即单位容积发生量 $5\,000\text{ pc}\cdot(\text{m}^3\cdot\text{min})^{-1}$, 计算房间的洁净度达到设计标准. 但实测洁净度远低于设计标准, 与采用单位容积发生量 $1\,000\text{ pc}\cdot(\text{m}^3\cdot\text{min})^{-1}$ 的 CFD 计算结果吻合. 说明在现有的工艺水平下, 按参考文献给出的发生量计算过于保守. 数据对比分析, 在单位容积发生量 $5\,000\text{ pc}\cdot(\text{m}^3\cdot\text{min})^{-1}$ 计算条件下, 参考发生量的计算结果能满足洁净室的设计标准, 但实测工况结果远远优于设计标准. 参考发生量的方法与实测数据并不能合理地适应.

3) 在单位容积发生量 $1\,000\text{ pc}\cdot(\text{m}^3\cdot\text{min})^{-1}$ 计算条件下, 各房间的模拟结果与实测数据数值比较吻合, 且 CFD 预测的 3 个房间的洁净度变化趋势一致与实测一致. 说明计算中采用的边界条件应用于这个工程能够很好的预测洁净度, 可作为洁净室气流优化提供参考.

参考文献:

- [1] 许钟麟. 空气洁净技术原理[M]. 3 版. 北京: 科学出版社, 2003: 1-553.
- [2] LIU Jun-jie, WANG Hai-dong, WEN Wen-yong. Numerical simulation on a horizontal airflow for airborne particles control in hospital operating room[J]. Building and Environment, 2009, 44(11): 2284-2289.
- [3] ROUAUD O, HAVET M. Numerical investigation on the efficiency of transient contaminant removal from a food processing clean room using ventilation effectiveness concepts[J]. Journal of Food Engineering, 2005, 68(2): 163-174.
- [4] NOH K C, KIM H S, OH M D. Study on contamination control in a minienvironment inside clean room for yield enhancement based on particle concentration measurement and airflow CFD simulation[J]. Building and Environment, 2010, 45(4): 825-831.
- [5] 黄闻华, 魏琪, 卢启明. CFD 技术在洁净室气流组织设计中的应用[J]. 洁净与空调技术, 2006(2): 7-11.
- [6] 王科. 洁净室气流组织模拟及优化[D]. 武汉: 华中科技大学, 2005: 54-65.
- [7] 张义军. 浅谈 2010 版 GMP 与洁净厂房[J]. 黑龙江科技信息, 2012(5): 26.
- [8] 许钟麟. 药厂洁净室设计、运行与 GMP 认证[M]. 2 版. 上海: 同济大学出版社, 2011: 1-310.

Computational Fluid Dynamics Simulation and Measured Contrast Research of Pharmaceutical Clean Room

PENG Hao¹, LEI Fei²

(1. China National Pharmaceutical Group Corporation, Wuhan 430074, China;

2. School of Environmental Science and Engineering, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China)

Abstract: In this work, the air flow patterns and particle concentrations of three pharmaceutical clean rooms were studied using computational fluid dynamics (CFD) simulation. A standard $k-\epsilon$ double-equation model was used to simulate the distribution of particles in the clean room and analyze the rational pollutant dissemination position and distribution ratio. By comparing the differences between the results of the referenced dust content and the measured data, the pollution emissions were determined according to the measured data. And the corresponding cleanliness was calculated by changing the dust content per unit volume (DCPUV) to get the best DCPUV value which was in accordance with the experimental data. When the DCPUV reached $1\,000\text{ pc}\cdot(\text{m}^3\cdot\text{min})^{-1}$, the numerical simulation results and experimental data of each room fit well, and the cleanliness of three rooms is consistent with the observed trends by the CFD predictions.

Keywords: clean room; computational fluid dynamics; pollutant emission; position; cleanliness; dust content

(责任编辑: 黄仲一 英文审校: 刘源岗)