



МОДЕЛИРОВАНИЕ ПСЕВДООЖИЖЕННОГО СЛОЯ С РАЗДЕЛЕНИЕМ ФРАКЦИЙ ЧАСТИЦ ПОЛИДИСПЕРСНОГО КАТАЛИЗАТОРА

Соловьев С. А. ORCID ID 0000-0001-8428-3367

*Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
«Казанский государственный энергетический университет»,
Казань, Российская Федерация, e-mail: solovev.sa@kgeu.ru*

Реакторы с псевдоожиженным слоем широко распространены в нефтепереработке, нефтехимии и энергетике. На практике часто используются полидисперсные смеси частиц, что может быть использовано как метод влияния на поведение динамики многофазной системы и повышение характеристик работы реакторов. Цель исследования – определить, как выбор разного количества фракций частиц твердой фазы влияет на результат численного моделирования псевдоожиженного слоя, содержащего полидисперсный катализатор. В настоящем исследовании использовался лабораторный реактор, состоящий из вертикальной стеклянной трубки. В экспериментальной части использован полидисперсный порошок микросферических частиц оксида алюминия. Для численного моделирования процесса псевдоожижения использован непрерывный метод Эйлера – Эйлера. Для замыкания моделей использована кинетическая теория газов для гранулярного потока. Численное моделирование полидисперсных частиц проведено с применением упрощенной методологии, в которой средний диаметр частиц характеризует каждую группу гранулированной фазы. Были оценены две различные методики фракционирования: одна использует полное распределение частиц по размерам, а другая разделяет мелкие частицы на основе критерия скорости витания. В результате численного моделирования получены поля и профили среднего объемного содержания твердой фазы. В рассматриваемой постановке использование четырех или пяти групп после отделения мелкой фракции по скорости витания дало наилучшее согласие с экспериментальной оценкой высоты слоя, однако универсальность этого вывода требует проверки на расширенном наборе режимов.

Ключевые слова: псевдоожиженный слой, средний диаметр частиц, непрерывная модель Эйлера – Эйлера, вычислительная гидродинамика

SIMULATION OF A FLUIDIZED BED WITH SEPARATION OF FRACTIONS OF POLYDISPERSE CATALYST PARTICLES

Solovev S. A. ORCID ID 0000-0001-8428-3367

*Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education
“Kazan State Power Engineering University”, Kazan, Russian Federation,
e-mail: solovev.sa@kgeu.ru*

Fluidized bed reactors are widely used in oil refining, petrochemical, and power engineering. Polydisperse particle mixtures are often used in practice, which can be used to influence the behavior of multiphase system dynamics and improve reactor performance. The objective of the study is to determine how the choice of different amounts of solid phase particle fractions affects the results of numerical simulation of a fluidized bed containing a polydisperse catalyst. A laboratory reactor consisting of a vertical glass tube was used in the present study. Polydisperse powder of microspherical alumina particles was used in the experimental section. The continuous Euler-Euler method was used for the numerical simulation of the fluidization process. The kinetic theory of gases for granular flow was used to close the models. Numerical simulation of polydisperse particles was performed using a simplified methodology in which the average particle diameter characterizes each group of the granular phase. Two different fractionation techniques were evaluated: one uses the complete particle size distribution, and the other separates small particles based on the terminal velocity criterion. Numerical modeling yielded fields and profiles of the average solid volume fraction. In the considered formulation, the use of four or five groups after separation of the fine fraction by the terminal velocity gave the best agreement with the experimental estimate of the bed height, however, the universality of this conclusion requires verification on an extended set of modes.

Keywords: fluidized bed, computational fluid dynamics, mean particle diameter, continuous Euler – Euler model

Введение

Реакторы с псевдоожиженным слоем широко распространены в таких отраслях, как нефтепереработка [1], газификация [2] и нефтехимия [3], благодаря эксплуатационным преимуществам. При исследовании процессов в реакторах с псевдоожиженным слоем используются как эксперименты [4], так и методы математического моделиро-

вания [5]. Вычислительная гидродинамика (Computational Fluid Dynamics – CFD) [6] является значимым современным инструментом исследования, дополняя и расширяя экспериментальные работы. Например, в исследовании [7] авторами проведено математическое моделирование работы двух блоков промышленных химических реакторов псевдоожиженного слоя с раз-

ными устройствами подачи газа-сырья. На основе численного решения проведен сравнительный анализ эффективности работы двух блоков, показавший хорошее согласие с результатами анализа промышленных реакторов. Авторы [8] экспериментально и численно с помощью методов вычислительной гидродинамики исследовали циркулирующий псевдоожженный слой, разделенный горизонтальными перегородками. Показано, что распределение давления по высоте колонны в значительной степени определяется распределением частиц катализатора внутри колонны. В новых современных исследованиях CFD-модели дополняются моделями машинного обучения, которые повышают точность расчетов и снижают требования к вычислительным ресурсам [9].

На практике часто используются полидисперсные смеси частиц катализатора. Регулирование состава частиц может быть использовано как метод влияния на поведение динамики слоя частиц и повышение характеристик работы реакторов. Результаты некоторых исследований демонстрируют тот факт, что введение мелких частиц (менее 45 мкм) способствует расширению слоя [10, 11]. При этом в других исследованиях есть результаты, демонстрирующие уплотнение частиц твердой фазы в слое [12, 13]. Большинство исследований показывают, что наличие фракций мелких частиц приводит к умеренному уменьшению эффективной вязкости [14], интенсифицирует образование пузырьков меньшего размера [15], а в значительных объемах способствуют подавлению образования пузырьков, обеспечивая стабильный режим процесса псевдоожжения [16]. Добавление мелких частиц также может оказывать положительное влияние на эффективность химических процессов. В исследовании [17] на примере бидисперсной смеси было продемонстрировано улучшение расширения псевдоожженного слоя, увеличение коэффициента теплопередачи и повышение выхода продуктов реакции. Для моделирования полидисперсных систем можно использовать средний диаметр, например диаметр Саутера (D_{32}) [18]. Однако анализ литературных данных показывает, что имеют место ограничения, связанные с выбором только одного среднего диаметра.

Наличие частиц твердой фазы разного размера в промышленных реакторах с псевдоожженным слоем обусловлено либо разрушением гранул, либо целенаправленным введением мелкой фракции для интенсификации процессов. Корректно выбранный средний диаметр необходим для про-

ведения численных расчетов с помощью непрерывного многоскоростного метода Эйлера – Эйлера, но его применимость ограничена, как правило, случаем гомогенного смешения. Из-за малой массы мелкие частицы более подвижны, что приводит к разделению частиц по высоте слоя: крупные частицы концентрируются в нижней части реактора, а мелкие выносятся вверх [19, 20]. Такая неоднородность делает выбор единого среднего диаметра недостаточным для моделирования псевдоожжения. Для решения этой проблемы распределение частиц можно разделить на несколько фракций, каждую из которых необходимо моделировать отдельно. Так, в работе [21] с помощью критерия скорости витания выделялась фракция мелких частиц, и для полученных групп рассчитывались отдельные значения D_{32} . Скорость витания – скорость восходящего потока газа, при превышении которой твердые частицы не опускаются вниз под действием силы тяжести, а выносятся из аппарата. Было показано, что такой подход дает расчетную границу слоя, значительно ближе экспериментальным данным. Если же мелкие частицы занимают незначительную долю твердой фазы, то их отделение в отдельную фракцию все равно будет влиять на затраты вычислительных ресурсов. В настоящем исследовании рассмотрен вариант полного исключения мелких частиц из численного моделирования. Предполагается, что частицы меньше критического диаметра могут быть вынесены из слоя и не окажут влияния на процесс псевдоожжения.

Цель исследования – определить, как выбор разного количества фракций частиц твердой фазы влияет на результат численного моделирования псевдоожженного слоя, содержащего полидисперсный катализатор на примере частиц оксида алюминия. Основной задачей является определение условий, при которых моделирование с использованием единого среднего диаметра Саутера D_{32} обеспечивает достаточную точность динамики частиц в сравнении с экспериментальными данными. Были оценены две различные методики фракционирования: одна использует полное распределение частиц по размерам, а другая отделяет мелкие частицы на основе критерия скорости витания.

Материалы и методы исследования

В настоящем исследовании использовался лабораторный реактор, состоящий из вертикальной стеклянной трубки высотой 50 см и диаметром 2,2 см [21], схематически изображенный на рис. 1, а.

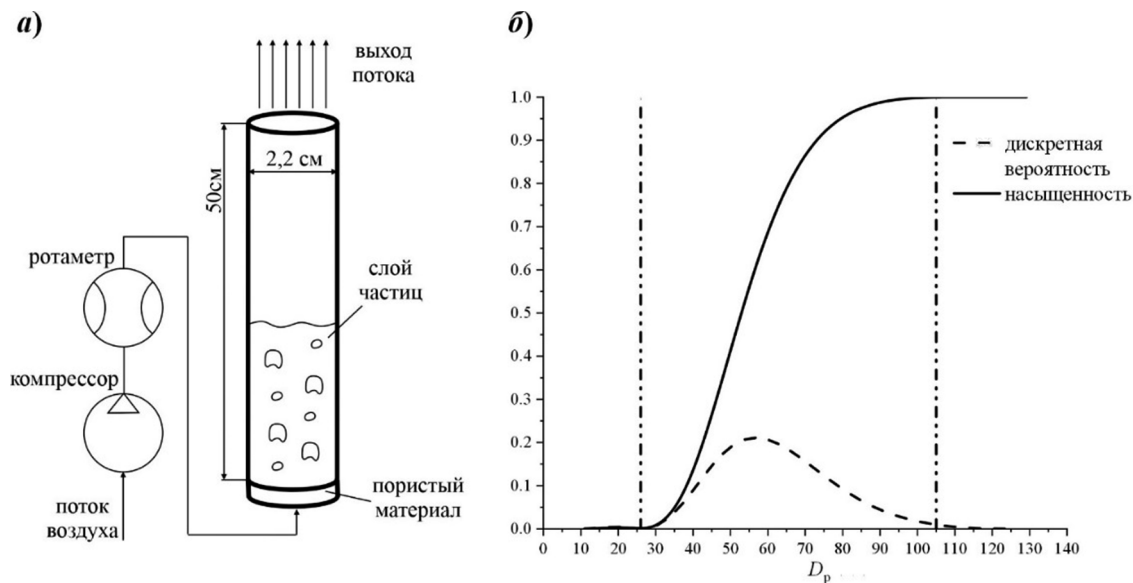


Рис. 1. Лабораторный реактор: (а) схема экспериментальной части;
(б) функция распределения частиц
Примечание: составлен автором по результатам данного исследования

Гранулированный материал состоял из полидисперсных частиц оксида алюминия плотностью 2400 кг/м^3 . Распределение частиц по размерам представлено на рис. 1, б. В реактор был загружен неподвижный слой массой 30 г твердой фазы с начальной высотой 7,9 см. Снизу подавался воздух через многослойную пористую пластину, которая обеспечивала равномерный профиль скорости по поперечному сечению трубки и предотвращала падение твердых частиц в систему подачи газа. Динамика псевдоожижения регистрировалась с помощью высокоскоростной камеры. Граница слоя частиц фиксировалась путем анализа записанных кадров с помощью собственного кода на языке Python.

В экспериментальной части использован полидисперсный порошок микросферических частиц оксида алюминия, классифицированных как группа Гельдарта В, с диаметрами от 20 до 140 мкм. Эти частицы используются в производстве катализатора для дегидрирования изобутана [22, 23]. Более 99 % частиц имели размер от 26 до 105 мкм, этот диапазон был выбран для дальнейшего исследования. Для вычислительного анализа была выбрана скорость

восходящего потока воздуха $0,1213 \text{ м/с}$, значение которой определялось с помощью ротаметра перед попаданием в трубку реактора. Из эксперимента получены измерения высоты слоя псевдоожиженных частиц. Из-за образования пузырьков в слое и их разрушения на поверхности слоя, в процессе псевдоожижения граница слоя является нестационарной. Наблюдаемая высота слоя колебалась между минимумом 13 см и максимумом 24 см, что дало усредненную по времени высоту 17,21 см.

Для численного моделирования процесса псевдоожижения использован непрерывный метод Эйлера – Эйлера. Для каждой фазы (газа и твердых частиц) выполняются уравнения сохранения массы и импульса. Уравнение сохранения массы для газовой или твердой фазы:

$$\frac{\partial \alpha_q \rho_q}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) = 0, \quad (1)$$

где α_q – объемное содержание, ρ_q – истинная плотность, $\vec{v}_q$ – скорость.

Уравнение сохранения импульса для газовой фазы:

$$\frac{\partial \alpha_g \rho_g \vec{v}_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \vec{v}_g \vec{v}_g) = -\alpha_g \nabla p + \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}}_g + \alpha_g \rho_g \vec{g} + \sum_{i=1}^N \vec{R}_{gs,i}, \quad (2)$$

где p – давление, $\bar{\bar{\tau}}$ – тензор касательных напряжений, $\vec{R}_{gs,i}$ – сила взаимодействия между газовой фазой и i -й твердой фазой. В уравнении (2) тензор касательных напряжений имеет вид

$$\bar{\bar{\tau}}_q = \alpha_q \mu_q (\nabla \vec{v}_q + \nabla \vec{v}_q^T) + \alpha_q \left(\lambda_q - \frac{2}{3} \mu_q \right) \nabla \vec{v}_q \bar{\bar{I}}, \quad (3)$$

где μ_q и λ_q – сдвиговая и объемная вязкости газовой или твердой фазы, $\bar{\bar{I}}$ – единичный тензор. Сила межфазного взаимодействия записывается в виде

$$\vec{R}_{gs,i} = K_{gs,i} (\vec{v}_g - \vec{v}_{s,i}), \quad (4)$$

где $K_{gs,i}$ – коэффициент межфазного взаимодействия между газом и i -й твердой фазой. В многоскоростном методе Эйлера может быть рассмотрено одновременно несколько твердых фаз, которые отличаются по плотности, размеру частиц и другим параметрам. Каждая непрерывная твердая фаза характеризует частицы одного диаметра.

Уравнение сохранения импульса для i -й твердой фазы:

$$\frac{\partial \alpha_{s,i} \rho_{s,i} \vec{v}_{s,i}}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_{s,i} \rho_{s,i} \vec{v}_{s,i} \vec{v}_{s,i}) = -\alpha_{s,i} \nabla p - \nabla p_{s,i} + \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}}_{s,i} + \alpha_{s,i} \rho_{s,i} \vec{g} + \vec{R}_{s,ig} + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \vec{R}_{s,ij}, \quad (5)$$

где $p_{s,i}$ – давление гранул в i -й твердой фазы, $\vec{R}_{s,ij}$ – сила взаимодействия между i -й и j -й твердыми фазами.

Уравнениями сохранения энергии в работе пренебрегают. Используемые уравнения реализуются замыканием межфазного обмена импульсом для газо-твердотельных потоков с использованием модели Гидаспова [24]. Когда $\alpha_g > 0.8$, коэффициент имеет вид

$$K_{gs,i} = \frac{3}{4} C_D \frac{\alpha_{s,i} \alpha_g \rho_g |\vec{v}_{s,i} - \vec{v}_g|}{d_{s,i}} \alpha_g^{-2.65}, \quad C_D = \frac{24}{\alpha_g \text{Re}_{s,i}} \left[1 + 0.15 (\alpha_g \text{Re}_{s,i})^{0.687} \right]. \quad (6)$$

Когда $\alpha_g \leq 0.8$, коэффициент имеет вид

$$K_{gs,i} = 150 \frac{\alpha_{s,i} (1 - \alpha_g) \mu_g}{\alpha_g d_{s,i}^2} + 1.75 \frac{\rho_g \alpha_{s,i} |\vec{v}_{s,i} - \vec{v}_g|}{d_{s,i}}. \quad (7)$$

Свойства твердой фазы, включающие вязкость и давление гранул, описываются моделями, выведенными из кинетической теории гранулярного потока [24–26]. Для описания режима турбулентного псевдооживления была применена модель дисперсной турбулентности, когда для газовой фазы применена k - ε модель, а вихревое движение твердых частиц рассчитывается на фоне движения газовой фазы.

Расчетная область для численного моделирования представляла собой цилиндр (рис. 2, а), геометрически соответствующий экспериментальной трубке. Весь объем был разбит на равномерную структурированную сетку с размером ячейки 0,001 м (рис. 2, б).

Для оценки качества сеточного разбиения были проведены расчеты с разным значением параметров размера ячейки и шага по времени. В табл. 1 представлены результаты тестирования размера ячейки сеточного разбиения при постоянном значении шага по времени 0,0005 с. В табл. 2 представлены результаты тестирования шага по времени при постоянном значении размера ячейки 0,001 м.

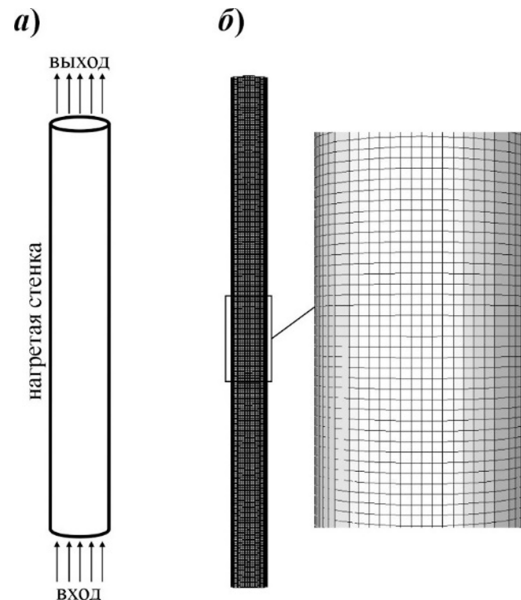


Рис. 2. Модель реактора:

(а) геометрическая модель;

(б) сеточное разбиение

Примечание: составлен автором по результатам данного исследования

Таблица 1

Результаты тестирования размера ячейки сеточного разбиения

№ расчета	Δx , м	Δt , с	Высота слоя, м	ΔP , Па
1	0,005	0,0005	0,173	689,45
2	0,0025	0,0005	0,158	737,05
3	0,001	0,0005	0,147	740,43
4	0,0005	0,0005	0,145	741,12

Примечание: составлена автором на основе полученных данных в ходе исследования.

Таблица 2

Результаты тестирования шага по времени

№ расчета	Δx , м	Δt , с	Высота слоя, м	ΔP , Па
1	0,001	0,0025	0,146	742,38
2	0,001	0,001	0,146	741,71
3	0,001	0,0005	0,147	740,43
4	0,001	0,00025	0,147	739,95

Примечание: составлена автором на основе полученных данных в ходе исследования.

Для определения высоты слоя были построены осредненные профили объемного содержания, полученного численным моделированием в интервале с 5 по 15 с расчета с шагом записи результатов 0,025 с. В качестве критерия высоты слоя выбрано значение границы, ниже которой находится 95 % от общего объема частиц. Перепад давления определялся из численного моделирования как разница между давлением на нижней и верхней границе цилиндрического реактора. Шаг по времени определялся из оценки критерия числа Куранта. Из исследований псевдооживленных систем рекомендуется число Куранта в диапазоне от 0,03 до 0,3 [27]. В моделировании был выбран шаг по времени 0,0005 с для обеспечения численной стабильности и точности. Более подробное исследование выбора сеточного разбиения для аналогичной геометрической модели лабораторного реактора описано в предшествующей работе [21].

В численной модели были приняты следующие граничные условия: на нижней границе устанавливался вход для подачи воздуха и непроницаемые условия для твердой дисперсной фазы; на верхней границе – заданное выходное давление. Цилиндрическая стенка аппарата моделировалась как адиабатическая поверхность с условием отсутствия скольжения. Начальные условия соответствовали плотному слою частиц высотой 7,9 см с объемной долей твердой фазы 0,41639 в случае использования полного распределения частиц и 0,363675 в случае отделения мелких частиц по критерию ско-

рости витания. Плотность частиц принималась равной 2400 кг/м³, физические свойства воздуха задавались для температуры 20 °С. Процесс моделирования состоял из этапов подачи газового потока, расширения слоя до устойчивого псевдооживленного состояния и последующего осреднения по времени характеристик слоя, использованных в дальнейшем анализе. Расчеты проведены в пакете программ ANSYS Fluent 19.2.

Традиционные подходы численного моделирования методом Эйлера – Эйлера, как правило, основаны на предположении о монодисперсных частицах. Для представления полидисперсных гранул стандартной практикой является характеристика смеси с помощью среднего диаметра. Стандартный средний диаметр Саутера D_{32} был рассчитан из функции распределения плотности частиц по размерам, следуя методу [18]:

$$D_{32} = \frac{\int_0^{\infty} f(D) D^3 dD}{\int_0^{\infty} f(D) D^2 dD}. \quad (8)$$

В рамках модели Эйлера – Эйлера общий объем частиц дискретизируется с помощью многогруппового подхода. Этот метод преобразует функцию распределения вероятностей в дискретные скаляры, причем каждый скаляр соответствует определенной фракции частиц по размеру, что требует решения отдельных уравнений переноса для каждой определенной группы.

Таблица 3

Значения средних диаметров при разделении распределения частиц на несколько фракций

Количество групп фракций	D_{32} , мкм, группа 1	D_{32} , мкм, группа 2	D_{32} , мкм, группа 3	D_{32} , мкм, группа 4	D_{32} , мкм, группа 5
1	65,7931	—	—	—	—
2	53,4259	80,583	—	—	—
3	46,8794	64,8208	88,799	—	—
4	40,6514	56,1474	73,5095	93,0146	—
5	39,1769	50,7486	64,9566	80,0647	95,962

Примечание: составлена автором на основе полученных данных в ходе исследования.

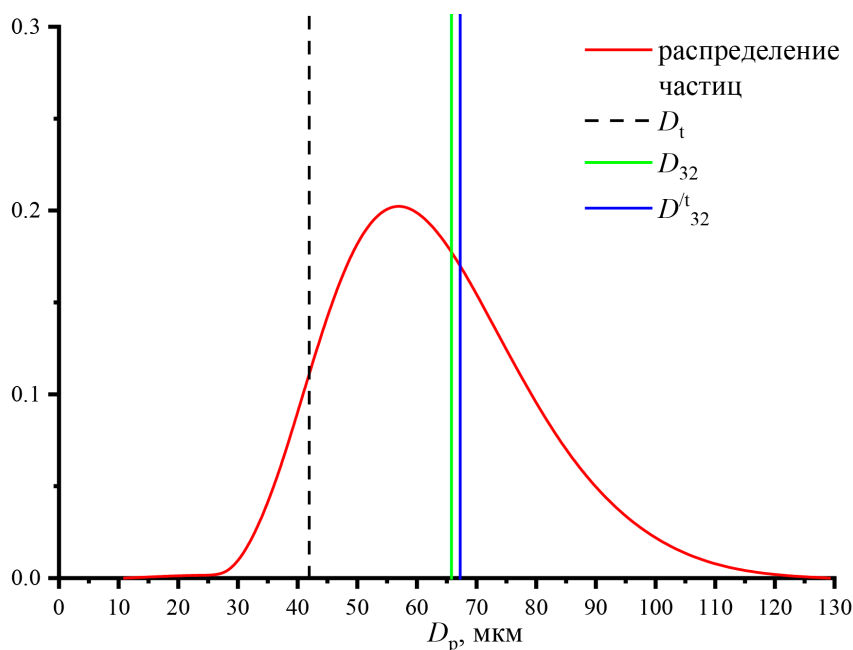


Рис. 3. Функция распределения частиц по размерам с выделенными значениями среднего диаметра
Примечание: составлен автором по результатам данного исследования

Разделим рассматриваемый диапазон частиц 26–105 мкм на несколько групп одинакового размера. Рассмотрено 1, 2, 3, 4 и 5 групп, и для каждой группы рассчитано значение среднего диаметра. В этом случае рассчитанное общее объемное содержание твердой фазы будет одинаковым для суммы использованных групп 0,41639. В табл. 3 представлены полученные результаты.

Для отделения мелких частиц использован критерий скорости витания. Скорость витания определяется как минимальная скорость газа, необходимая для выноса частицы из реактора. В настоящем исследовании использовано следующее выражение [21]:

$$v_t = \left[\frac{4gD(\rho_s - \rho_g)}{3\rho_g C_D} \right]^{0.5}. \quad (9)$$

Коэффициент сопротивления, определенный в исследовании [24], применяется к уравнению (9) для определения критического диаметра частицы, D_c . Это значение представляет собой пороговый размер, ниже которого частицы выносятся из аппарата потоком газа. При заданной скорости воздуха 0,1213 м/с рассчитанное значение D_c составляет 41,95 мкм. На рис. 3 показана функция распределения частиц по размерам (красная линия), значение среднего диаметра (зеленая линия), значение диаметра, соответствующее предельной скорости (черная пунктирная линия), и новый средний диаметр при отделении мелких частиц (синяя линия).

На рис. 4, а, показан профиль средней объемной доли частиц для случая, когда используется все распределение частиц по размерам. Также показаны наблюдаемые

минимальные и максимальные линии границы слоя частиц и рассчитанная средняя линия границы слоя. Видно, что в расчетах граница слоя находится выше наблюдаемого минимума, но не достигает экспериментальной средней линии.

На рис. 4, б, показаны результаты расчетов для случая отделения мелких частиц. Очевидно, что в этом случае рассчитанная средняя объемная доля частиц ниже, чем при рассмотрении первого случая. Здесь

также отметим, что во втором случае рассчитанный средний диаметр имеет большее значение, а начальная объемная доля частиц меньше и составляет 0,363675.

В табл. 4 показаны рассчитанные значения средних диаметров при разделении распределения частиц на несколько фракций с учетом отделения мелких частиц по критерию скорости витания. Отметим, что все значения больше по сравнению с вариантом, учитывающим все размеры частиц.

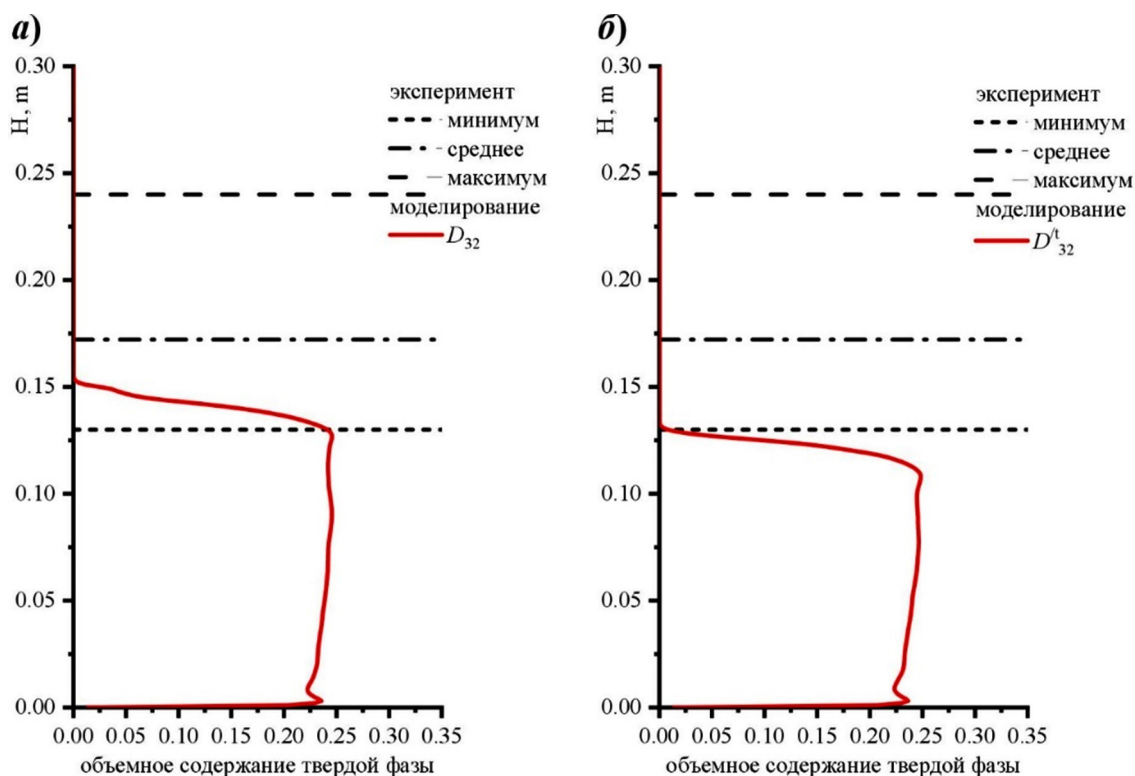


Рис. 4. Профиль среднего объемного содержания для модели с одним средним диаметром частиц:

а) случай использования всей функции распределения частиц;

б) случай отделения мелких частиц по скорости витания

Примечание: составлен автором по результатам данного исследования

Таблица 4

Значения средних диаметров при разделении распределения частиц на несколько фракций с учетом отделения мелких частиц по скорости витания

Количество групп фракций	D_{32} , мкм, группа 1	D_{32} , мкм, группа 2	D_{32} , мкм, группа 3	D_{32} , мкм, группа 4	D_{32} , мкм, группа 5
1	67,24356	—	—	—	—
2	58,7973	84,6087	—	—	—
3	53,73521	71,91769	92,23534	—	—
4	50,90123	65,07595	80,14065	95,99688	—
5	49,0464	60,82744	73,08165	85,73799	98,70000

Примечание: составлена автором на основе полученных данных в ходе исследования.

Далее в анализе результатов численного моделирования будет обозначено: вариант 1 – расчеты с использованием полной функции распределения частиц; вариант 2 – расчеты с использованием функции распределения частиц с отделением мелких частиц.

Результаты исследования и их обсуждение

На рис. 5 представлены результаты численного моделирования для одного среднего диаметра D_{32} с использованием всей функции распределения частиц: поля объемной доли твердой фазы при скорости газа 0,1213 м/с для моментов времени 0, 2, 4, 6 и 8 с. Можно видеть, что режим барботажного псевдоожижения формируется уже к четвертой секунде расчета.

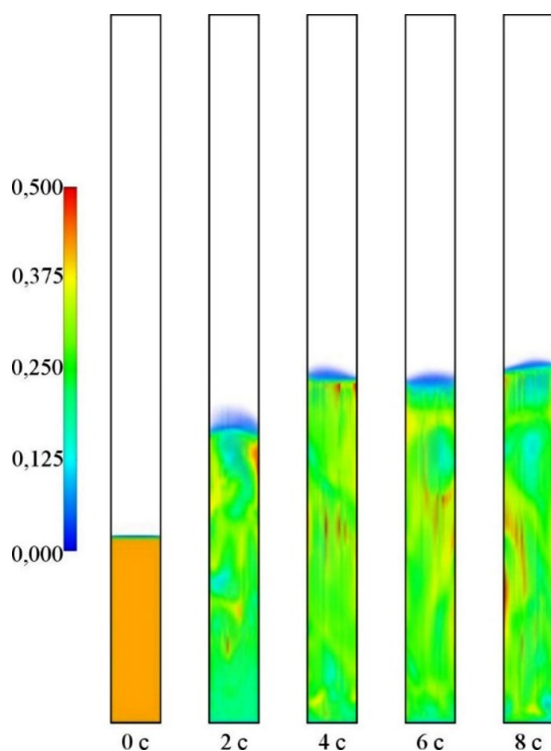


Рис. 5. Объемное содержание твердой фазы для численного моделирования одной фракции частиц со средним диаметром $D_{32} = 65,7931$ мкм

Примечание: составлен автором по результатам данного исследования

С целью получения среднего профиля объемной доли проводилась регистрация и последующее осреднение результатов в интервале с 5 по 15 с с шагом 0,025 с. Полученный таким образом средний профиль объемного содержания твердой фазы для расчета с выбором одной фракции частиц был показан на рис. 4, а. Там же нанесены экспериментально определенные границы слоя

частиц. Результаты численного моделирования не согласуются со средними экспериментальными данными. Полученная кривая для среднего профиля объемного содержания твердой фазы расположена ниже экспериментального среднего значения 17,21 см. Твердая фаза полностью расположена в нижней части аппарата, уноса частиц газовым потоком нет. Это свидетельствует о том, что используемое значение диаметра является завышенным, вследствие чего моделируемый слой не достигает наблюдаемой в опытах степени расширения.

Далее проведены расчеты с использованием численного моделирования для разного количества фракций твердой фазы с выбором среднего диаметра D_{32} для каждой группы. На рис. 6 представлены поля объемного содержания твердой фазы частиц для случая разделения на 5 групп фракций в момент времени 15 с работы реактора. Средние диаметры для каждой группы представлены в табл. 3. Объемное содержание каждой фракции представлено отдельно.

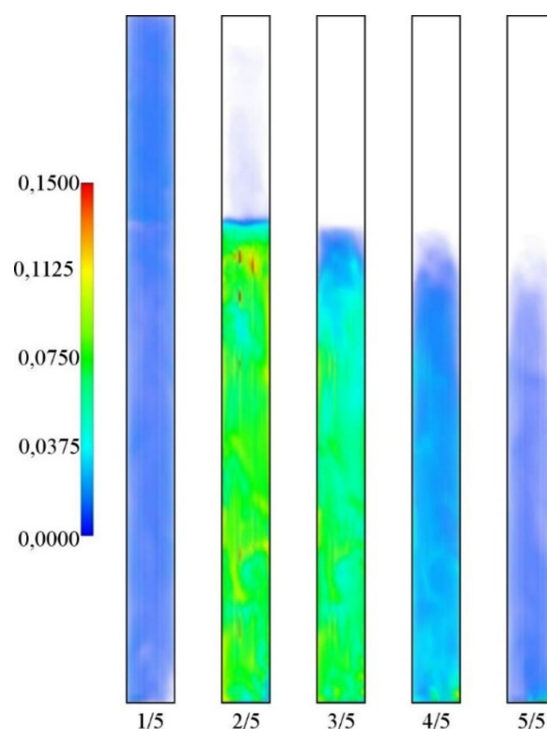


Рис. 6. Объемное содержание твердой фазы для каждой из пяти групп

в момент времени 15 с для варианта 1
Примечание: составлен автором по результатам данного исследования

Видно, что мелкие частицы (группа 1) находятся во всем объеме реактора. При этом остальные группы фракций частиц образуют ограниченный по высоте слой.

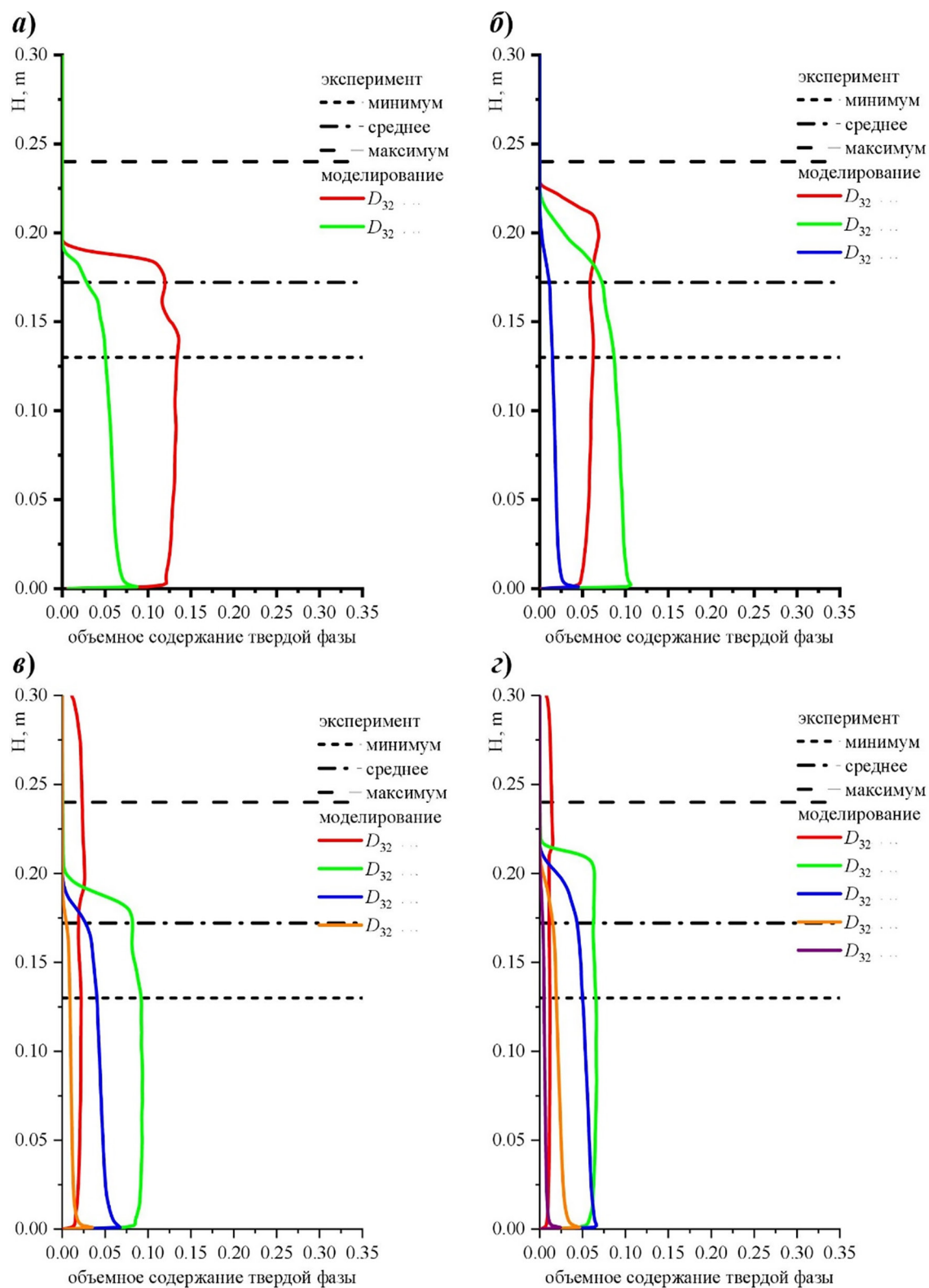


Рис. 7. Профиль среднего объемного содержания для варианта 1:

а) 2 группы; б) 3 группы; в) 4 группы; г) 5 групп

Примечание: составлен автором по результатам данного исследования

Наименьший объем занимают фракции самых мелких и самых крупных частиц. Это соответствует графику функции распределения частиц по размерам. Основной объем занимает фракция 2, затем следует фракция 3. Это фракции средних частиц, которых больше всего в исследуемом псевдооживленном слое. Видно, что при использовании пяти групп фракций высота псевдооживленного слоя существенно выше, чем высота слоя при моделировании с использованием одной фракции со средним диаметром.

На рис. 7 показаны профили среднего объемного содержания частиц для случая, когда используется все распределение частиц по размерам. Поскольку результаты для одной группы частиц уже представлены на рис. 4, а, здесь рассмотрены результаты моделирования с использованием 2, 3, 4 и 5 групп. Из рисунка видно, что применение большего числа фракций показывает среднюю высоту слоя частиц существенно выше, чем при использовании одной фракции. Во всех случаях высота слоя выше, чем определенное экспериментальное среднее значение. При этом во всех случаях результаты численного моделирования не превышают границу экспериментально максимума. Хорошее соответствие эксперименту показывает случай использования двух групп фракций. Дальнейшее увеличение количества групп приводит к размытию границы слоя, наблюдаемого в результатах численного моделирования.

Результаты численного моделирования демонстрируют положительный эффект от использования нескольких групп фракций твердых частиц при сопоставлении результатов с экспериментальными наблюдениями. Однако самые мелкие частицы находятся во всем объеме реактора. При длительном расчете они могут быть полностью вынесены из реактора и не будут оказывать влияние на результаты моделирования. При этом выделенная фракция (или несколько фракций) мелких частиц, вынесенных из реактора, будет вносить вклад в скорость и точность моделирования. Поэтому далее рассмотрим результаты расчетов, когда мелкие частицы отделены по критерию скорости витания и не учитываются при разделении функции распределения частиц на группы. На рис. 8 представлены поля объемного содержания твердой фазы частиц для случая разделения на 5 групп фракций в момент времени 15 с работы реактора для варианта 2. Средние диаметры для каждой группы представлены в табл. 4. Здесь для всех вариантов групп твердых частиц видно четкую границу псевдооживленного слоя, которая значительно ниже, чем для варианта 1.

На рис. 9 показаны профили среднего объемного содержания частиц для результатов моделирования с использованием 2, 3, 4 и 5 групп. Видно, что граница слоя частиц немного ниже экспериментального среднего значения. Наилучшее соответствие эксперименту можно наблюдать при моделировании процесса с использованием пяти групп фракций твердой фазы. Представленные графики демонстрируют поведение каждой фракции в отдельности.

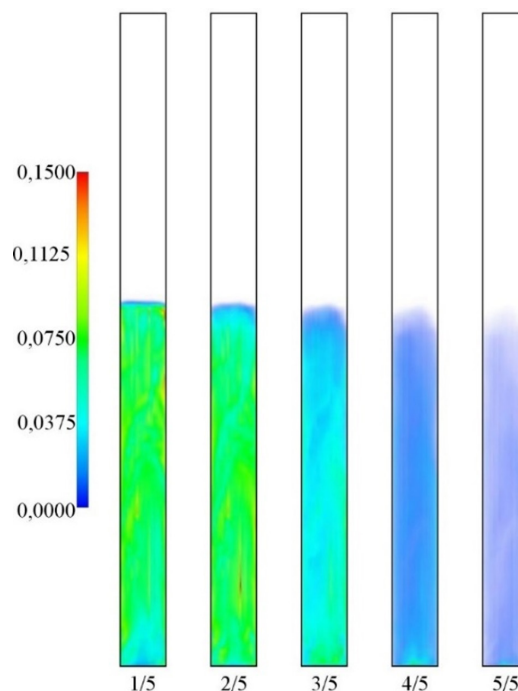


Рис. 8. Объемное содержание твердой фазы для каждой из пяти групп в момент времени 15 с для варианта 2
Примечание: составлен автором по результатам данного исследования

Для оценки поведения псевдооживленного слоя просуммируем объемное содержание каждой фракции в каждой ячейке расчетной области. На рис. 10 представлены поля объемного содержания твердой фазы частиц в момент времени 15 с работы реактора для варианта 1. Каждый рисунок соответствует количеству групп фракций, используемых в численном моделировании. Из рисунка видно, что при изменении количества групп фракций твердой фазы, граница наблюдаемого слоя изменяется не монотонно. Это связано с разным объемом твердой фазы мелких частиц, которые были выделены в отдельные группы и будут вынесены из реактора. Здесь сложно определить, какое количество фракций рекомендуется выбрать для численного моделирования процесса.

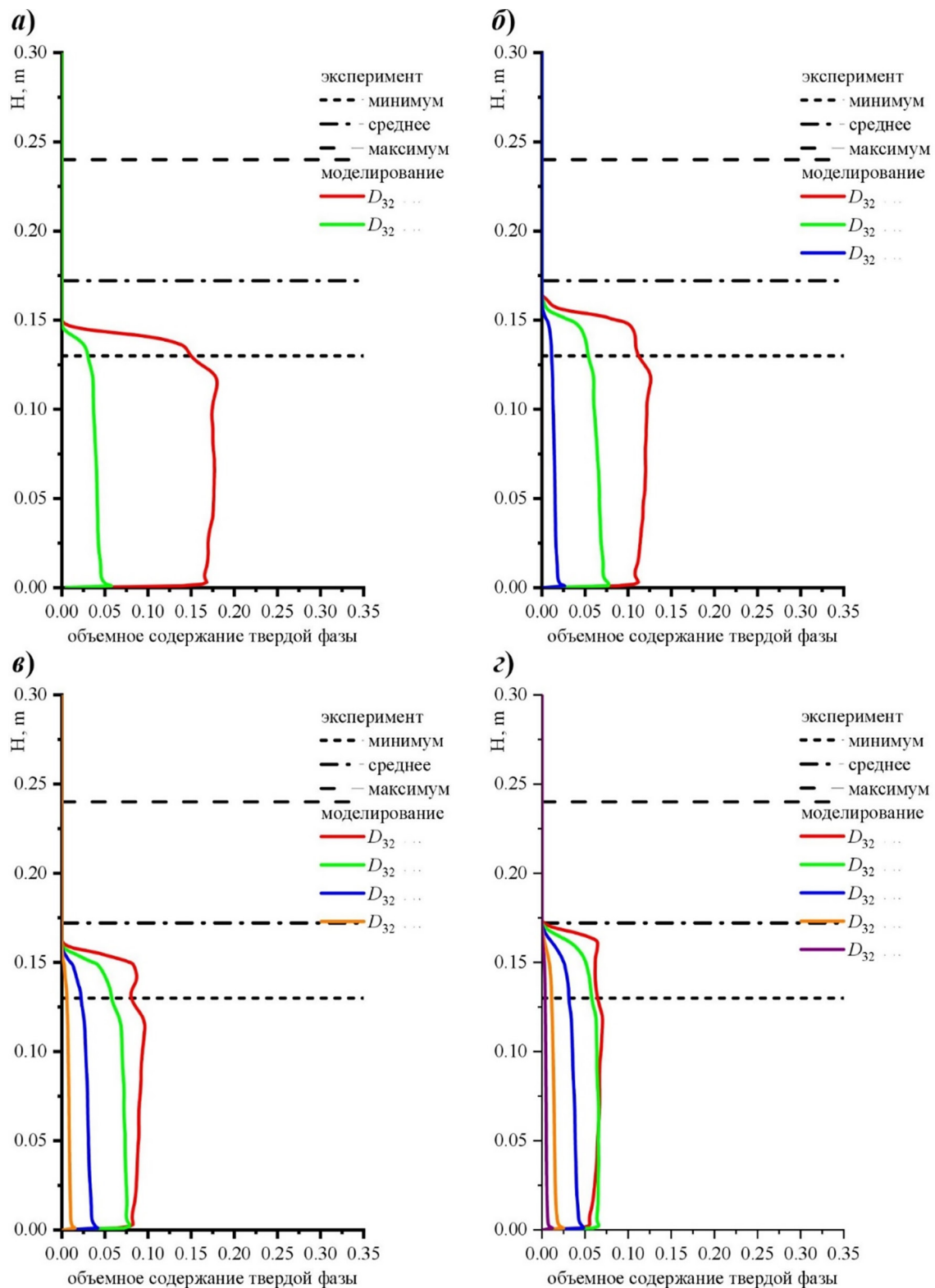


Рис. 9. Профиль среднего объемного содержания для варианта 2:

а) 2 группы; б) 3 группы; в) 4 группы; г) 5 групп

Примечание: составлен автором по результатам данного исследования

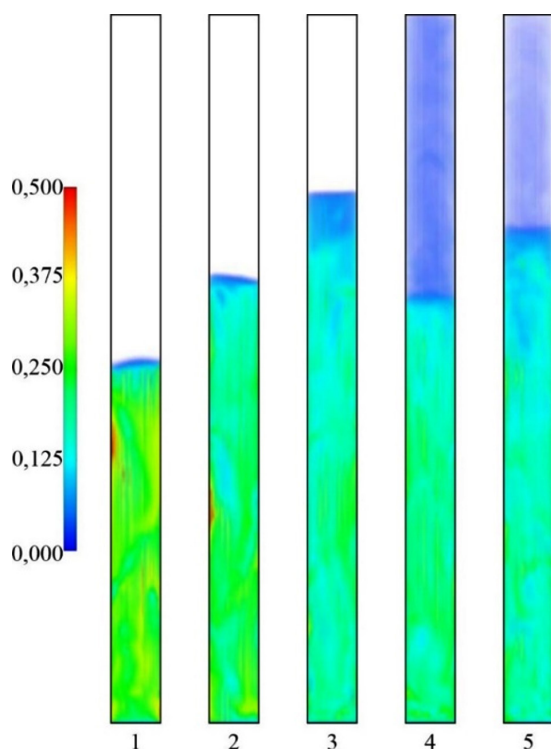


Рис. 10. Общее объемное содержание твердой фазы для случаев выбора разного количества групп в момент времени 15 с для варианта 1
Примечание: составлен автором по результатам данного исследования

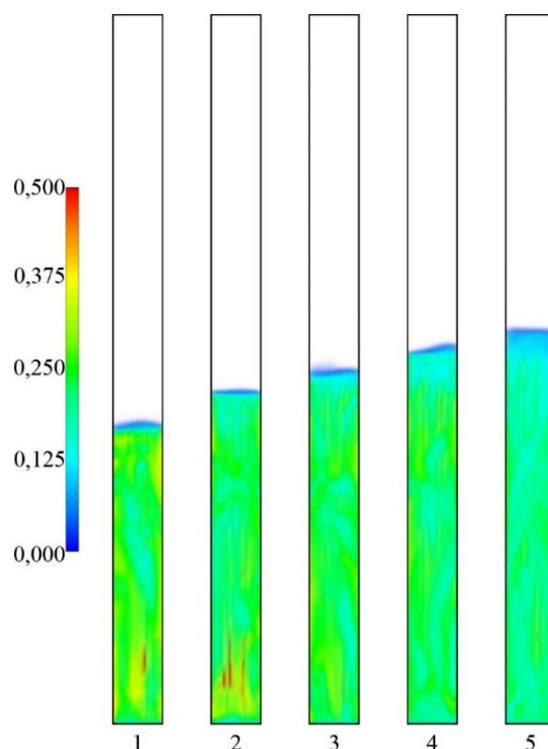


Рис. 11. Общее объемное содержание твердой фазы для случаев выбора разного количества групп в момент времени 15 с для варианта 2
Примечание: составлен автором по результатам данного исследования

На рис. 11 представлены аналогичные результаты поля объемного содержания твердой фазы частиц в момент времени 15 с работы реактора для варианта 2.

Здесь видно монотонное увеличение наблюдаемой высоты псевдоожиженного слоя с увеличением количества групп фракций твердой фазы в численном моделировании процесса. Хотя высота слоя продолжает увеличиваться даже при увеличении количества фракций с 4 до 5, дальнейшее увеличение количества фракций нецелесообразно с точки зрения сильного увеличения затрат вычислительных ресурсов. Далее рассмотрим профили общего среднего объемного содержания твердой фазы для проведенных расчетов численного моделирования. Результаты представлены на рис. 12.

Результаты показывают, что применение критерия отделения мелких частиц к модели с ограниченным числом групп твердой фазы приводит к заметному уменьшению моделируемой границы слоя. Это возникает из-за того, что средние размеры частиц в этих группах достаточно большие,

что препятствует их уносу из реактора. Таким образом, численная модель заменяет физическое поведение мелких частиц объемной долей более крупных. Однако при использовании более точной дискретизации с многочисленными группами твердых частиц, мелкие фракции моделируются как отдельные фазы. В этой конфигурации предварительное разделение мелких частиц оказывает положительное влияние на общее качество моделирования.

В табл. 5 представлены значения средней высоты слоя частиц, полученные численным моделированием, а также абсолютное и относительное отклонение результатов численного моделирования от эксперимента. В таблице: N – количество групп фракций твердой фазы для численного моделирования, H – высота слоя частиц, Δ – абсолютное отклонение результата численного моделирования от эксперимента, δ – относительное отклонение результата численного моделирования от эксперимента, индексы 1 и 2 указывают на вариант 1 и 2 соответственно.

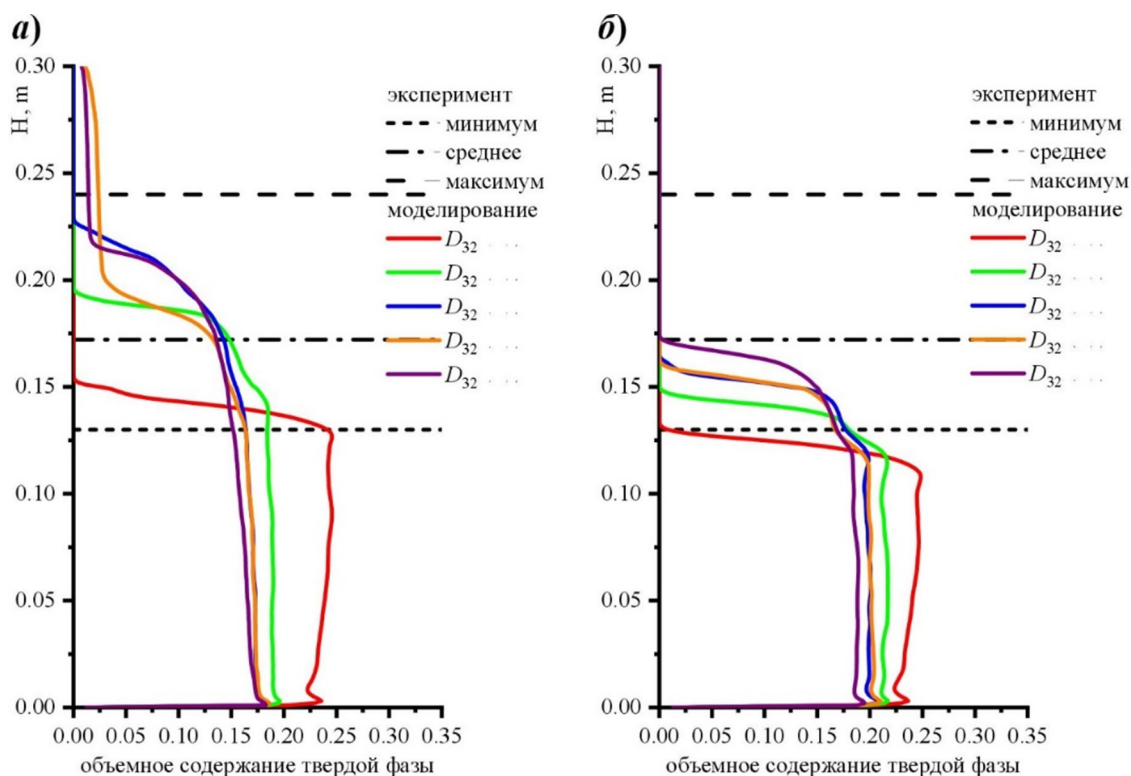


Рис. 12. Профиль общего среднего объемного содержания твердой фазы:
а) вариант 1; б) вариант 2

Примечание: составлен автором по результатам данного исследования

Таблица 5

Средняя высота слоя частиц, абсолютное и относительное отклонение результатов численного моделирования от эксперимента

N	H_1 , м	Δ_1 , м	δ_1	H_2 , м	Δ_2 , м	δ_2
1	0,147	0,0251	0,1458	0,127	0,0451	0,2621
2	0,189	0,0169	0,0982	0,144	0,0281	0,1633
3	0,215	0,0429	0,2493	0,155	0,0171	0,0994
4	0,193	0,0209	0,1214	0,156	0,0161	0,0936
5	0,212	0,0399	0,2318	0,168	0,0041	0,0238

Примечание: составлена автором на основе полученных данных в ходе исследования.

Из табл. 5 видно, что для варианта 1 наибольшее отличие результатов численного моделирования от экспериментальных данных наблюдается при использовании трех и пяти фракций. Наилучшее согласие с экспериментом по высоте слоя частиц наблюдается при использовании двух групп твердой фазы и составляет 9,82 % относительно экспериментально среднего. Для варианта 2 относительное отклонение уменьшается с увеличением числа фракций до 2,38 % для пяти групп.

Отметим, что результаты численного моделирования получены для одной гео-

метрии, одного материала, одного распределения частиц, одной скорости газа и одной модели CFD. Предложенная методология определения наиболее приемлемого числа фракций частиц со средним размером для других форм реакторов и параметров газа и частиц требует дополнительных исследований.

Заключение

В настоящем исследовании рассмотрена методология определения наиболее приемлемого числа фракций частиц со средним

размером, предназначенная для численного моделирования псевдооживленного слоя для рассматриваемых условий по критерию согласия с высотой слоя. Экспериментальные исследования барботажного псевдооживленного слоя проводились на стеклянной трубке с использованием полидисперсного порошка оксида алюминия. В качестве объекта исследования использовался порошок, предназначенный для производства промышленного катализатора. Данный материал характеризуется четко выраженным одномодальным составом гранул с преобладанием частиц средней фракции. Показано, что варьирование количества выделяемых групп твердой фазы позволяет добиться удовлетворительного согласия рассчитанной высоты слоя со средним значением высоты слоя из экспериментальных данных. При этом увеличение числа фракций различных размеров обеспечивает более точное приближение к реально наблюдаемым результатам. Однако рост количества фракций сопряжен со значительным повышением вычислительных затрат.

Некоторые частицы небольшого размера могут быть унесены из слоя и не участвовать в процессе с псевдооживленным слоем. Эта ситуация показана в результатах для рассматриваемых условий, когда проведено разделение твердой фазы на три-пять групп. В этом случае наиболее приемлемо использовать методологию, которая связывает размер твердых частиц со свойствами твердой фазы. Отделение мелких частиц с применением критерия скорости витания позволило получить новые группы фракций твердой фазы. Результаты указывают на благоприятное влияние отделения мелких частиц с помощью критерия скорости витания в численном моделировании полидисперсного псевдооживленного слоя с использованием большого количества фракций твердой фазы для рассматриваемых условий. В рассматриваемой постановке использование четырех или пяти групп после отделения мелкой фракции по скорости витания дало наилучшее согласие с экспериментальной оценкой высоты слоя, однако универсальность этого вывода требует проверки на расширенном наборе режимов.

Полученные результаты численного моделирования применимы для рассмотренной геометрии небольшого лабораторного реактора цилиндрической формы, выбранного материала полидисперсного катализатора на основе оксида алюминия с заданным распределением частиц, одной скорости газа и одной настроенной моде-

ли CFD. Перенос моделей и методологии определения наиболее приемлемого числа фракций частиц со средним размером на промышленные реакторы требует дополнительной проверки.

Список литературы

1. Bai P., Etim U. J., Yan Z., Mintova S., Zhang Z., Zhong Z., Gao, X. Fluid catalytic cracking technology: current status and recent discoveries on catalyst contamination // *Catalysis Reviews*. 2019. Vol. 61. Is. 3. P. 333–405. DOI: 10.1080/01614940.2018.1549011.
2. Basu P. Combustion and Gasification in Fluidized Beds. Boca Raton: CRC press, 2006. DOI: 10.1201/9781420005158. ISBN 978-0-429-07501-8.
3. Solovlev S. A., Soloveva O. V. Numerical simulation of the isoparaffins dehydrogenation process in fluidized bed reactor: from laboratory to industry // *ChemEngineering*. 2025. Vol. 9. Is. 6. Art. 129. DOI: 10.3390/chemengineering9060129.
4. Кленов О. П., Носков А. С., Парахин О. А. Влияние плотности микросферического катализатора на режимы работы псевдооживленного слоя // *Катализ в промышленности*. 2017. № 4. С. 295–303. DOI: 10.18412/1816-0387-2017-4-295-303.
5. Klenov O. P., Dubinin Yu. V., Yazykov N. A., Yakovlev V. A. Hydrodynamics of a reactor for thermocatalytic oxidation of sewage sludge // *Chemical Engineering Science*. 2023. Vol. 270. Art. 118535. DOI: 10.1016/j.ces.2023.118535.
6. Tu J., Yeoh G. H., Liu C., Tao Y. Computational Fluid Dynamics: A Practical Approach. 4th ed. Amsterdam: Elsevier, 2023. DOI: 10.1016/C2021-0-01771-5. ISBN 978-0-323-93938-6.
7. Соловьев С. А., Егоров А. Г., Ламберов А. А., Егорова С. Р., Катаев А. Н. Влияние конструкции устройства подачи сырья в реакторах псевдооживленного слоя на эффективность протекания реакции на примере процесса дегидрирования изопарафинов в кипящем слое алюмохромового катализатора // *Катализ в промышленности*. 2015. Т 15. № 6. С. 62–69. DOI: 10.18412/1816-0387-2015-6-62-69.
8. Klenov O. P., Noskov A. S., Parakhin O. A. Investigation of behaviors of the circulating fluidized bed // *Chemical Engineering Journal*. 2017. Vol. 329. P. 66–76. DOI: 10.1016/j.cej.2017.06.092.
9. Qin L., Zhou L., Li Z., Lei H., Zhu L. T. CFD analysis of operating parameters and machine learning-aided optimization of reactor performance in a polyethylene pyrolysis fluidized bed // *Fuel*. 2026. Vol. 421. Art. 138977. DOI: 10.1016/j.fuel.2026.138977.
10. Grace J. R., Sun G. Influence of particle size distribution on the performance of fluidized bed reactors // *The Canadian Journal of Chemical Engineering*. 1991. Vol. 69. Is. 5. P. 1126–1134. DOI: 10.1002/cjce.5450690512.
11. Van Ommen J. R., Nijenhuis J., van den Bleek C. M., Coppens M.-O. Four Ways To Introduce Structure in Fluidized Bed Reactors // *Industrial and Engineering Chemistry Research*. 2007. Vol. 46. Is. 12. P. 4236–4244. DOI: 10.1021/ie061318o.
12. Khoe G. K., Ip T. L., Grace J. R. Rheological and fluidization behaviour of powders of different particle size distribution // *Powder Technology*. 1991. Vol. 66. Is. 2. P. 127–141. DOI: 10.1016/0032-5910(91)80094-Y.
13. Saayman J., Ellis N., Nicol W. Fluidization of high-density particles: The influence of fines on reactor performance // *Powder Technology*. 2013. Vol. 245. P. 48–55. DOI: 10.1016/j.powtec.2013.04.011.
14. Beetstra R., Nijenhuis J., Ellis N., van Ommen J. R. The influence of the particle size distribution on fluidized bed hydrodynamics using high-throughput experimentation // *AIChE Journal*. 2009. Vol. 55. Is. 8. P. 2013–2023. DOI: 10.1002/aic.11790.

15. Brouwer G. C., Wagner E. C., van Ommen J. R., Mudde R. F. Effects of pressure and fines content on bubble diameter in a fluidized bed studied using fast X-ray tomography // *Chemical Engineering Journal*. 2012. Vol. 207–208. P. 711–717. DOI: 10.1016/j.cej.2012.07.040.
16. Gu Y., Ozel A., Sundaresan S. Numerical studies of the effects of fines on fluidization // *AIChE Journal*. 2016. Vol. 62. Is. 7. P. 2271–2281. DOI: 10.1002/aic.15229.
17. Solovlev S. A., Antipin A. V., Soloveva O. V., Khusainov R. R. Determination of effective diameter of solid particles for the Eulerian–Eulerian modelling approach of fluidized bed // *Journal of Physics: Conference Series*. 2019. Vol. 1210. Art. 012133. DOI: 10.1088/1742-6596/1210/1/012133.
18. Wang D., Fan L.-S. Particle characterization and behavior relevant to fluidized bed combustion and gasification systems // *Fluidized bed technologies for near-zero emission combustion and gasification*. Woodhead Publishing Series in Energy. 2013. P. 42–76. DOI: 10.1533/9780857098801.1.42.
19. Liu C., Zhao Y., Li Y., Feng Y., Duan C., Zhou C., Dong L. A model for predicting the segregation directions of binary Geldart B particle mixtures in bubbling fluidized beds // *Particuology*. 2024. Vol. 90. P. 340–349. DOI: 10.1016/j.partic.2024.01.006.
20. Li Y., Hong K., Zhou C., Zhang Y., Dong L. Resonance-induced particle mixing and segregation phenomena in a forced oscillation fluidized bed // *Chemical Engineering Science*. 2024. Vol. 299. Art. 120448. DOI: 10.1016/j.ces.2024.120448.
21. Solovlev S. A., Soloveva O. V. Study of the influence of the mean particle diameter choice and the fractions number on the quality of fluidized bed numerical simulation // *Processes*. 2024. Vol. 12. Is. 11. Art. 2528. DOI: 10.3390/pr12112528.
22. Егорова С. Р., Ламберов А. А. Опыт разработки и внедрения алюмохромовых катализаторов серии КДИ для дегидрирования изобутана в кипящем слое // *Катализ в промышленности*. 2022. Т. 22. № 5. С. 61–69. DOI: 10.18412/1816-0387-2022-5-61-69.
23. Bekmukhamedov G. E., Morozov V. I., Tuktarov R. R., Bukharov M. S., Egorova S. R., Lamberov A. A., Yakhvarov D. G. Electronic interaction between Cr³⁺ ions in chromia-alumina catalysts for light alkane dehydrogenation // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. 2022. Vol. 167. Art. 110778. DOI: 10.1016/j.jpcs.2022.110778.
24. Gidaspow D. *Multiphase Flow and Fluidization: Continuum and Kinetic Theory Descriptions*. San Diego: Academic Press, 1994. DOI: 10.1016/C2009-0-21244-X. ISBN 978-0-08-051226-6.
25. Ogawa S., Umemura A., Oshima N. On the equations of fully fluidized granular materials // *Journal of Applied Mathematics and Physics*. 1980. Vol. 31. Is. 4. P. 483–493. DOI: 10.1007/BF01590859.
26. Lun C. K. K., Savage S. B., Jeffrey D. J., Chepurnyi N. Kinetic theories for granular flow: inelastic particles in Couette flow and slightly inelastic particles in a general flowfield // *Journal of Fluid Mechanics*. 1984. Vol. 140. P. 223–256. DOI: 10.1017/S0022112084000586.
27. Cornelissen J. T., Taghipour F., Escudie R., Ellis N., Grace J. R. CFD modelling of a liquid–solid fluidized bed // *Chemical Engineering Science*. 2007. Vol. 62. Is. 22. P. 6334–6348. DOI: 10.1016/j.ces.2007.07.014.

Конфликт интересов: Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.

Conflict of interest: The author declares that there is no conflict of interest.

Финансирование: Работа выполнена за счет гранта, предоставленного Академией наук Республики Татарстан образовательным организациям высшего образования, научным и иным организациям на поддержку планов развития кадрового потенциала в части стимулирования их научных и научно-педагогических работников к защите докторских диссертаций и выполнению научно-исследовательских работ.

Financing: The work was carried out with the help of a grant provided by the Academy of Sciences of the Republic of Tatarstan to higher education institutions, scientific and other organizations to support plans for the development of human resources in terms of stimulating their scientific and scientific-pedagogical staff to defend doctoral dissertations and carry out research work.