

УДК 51-74:66.096.5-932.2
DOI 10.17513/snt.40902



CC BY 4.0

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СПОСОБОВ РАЗДЕЛЕНИЯ ПОЛИДИСПЕРСНЫХ ЧАСТИЦ НА ДИСКРЕТНЫЕ ГРУППЫ В ЧИСЛЕННОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ПСЕВДООЖИЖЕННОГО СЛОЯ

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*

Несмотря на широкое промышленное применение реакторов с псевдоожиженным слоем, исследование гидродинамики гетерогенных фаз остается сложной задачей из-за большого количества параметров, влияющих на динамику процесса. Распределение частиц по размерам оказывает влияние на неоднородность распределения твердой фазы по высоте реактора и унос части гранул из активной зоны реактора. Цель исследования – изучить влияние двух способов разделения полидисперсных частиц на дискретные группы на результат численного моделирования псевдоожиженного слоя: разделение на равные диапазоны диаметров для каждой группы с расчетом полученного объемного содержания; разделение на равные объемы твердой фазы с расчетом диаметров частиц, ограничивающих каждую группу. В исследовании использованы результаты экспериментов из ранее опубликованной работы для цилиндрического лабораторного реактора диаметром 2,2 см и высотой 50 см. При численном моделировании использована двухжидкостная непрерывная многоскоростная Эйлерова-Эйлерова многофазная модель. При построении модели в качестве дополнения используются результаты кинетической теории гранулярного потока для учета столкновений твердых частиц. В результате моделирования построены поля объемного содержания фракций твердой фазы, а также профили общего осредненного объемного содержания твердой фазы. Для количественной оценки результатов использованы четыре критерия на основе объемного содержания твердой фазы и общего объема частиц в реакторе. Анализ полученных результатов показал, что оба способа разбиения гранулометрического состава оказывают влияние на расчетную высоту псевдоожиженного слоя. Относительное отклонение результатов численного моделирования от экспериментальных данных составило от 0,639 до 37,129%. Выбор достаточного количества фракций в настоящем исследовании зависит от критерия определения границы псевдоожиженного слоя. Наилучшее согласие с экспериментальными данными показали результаты моделирования при разделении состава частиц на 2, 3 и 4 фракции. Полученные результаты численного моделирования применимы для расчета реакторов с барботажным режимом псевдоожижения с формированием ограниченного по высоте слоя частиц. Результаты применимы для одномодального распределения частиц по размерам с содержанием мелких частиц.

Ключевые слова: псевдоожиженный слой, численное моделирование, полидисперсные частицы, функция распределения частиц, многогрупповой подход

INVESTIGATION OF THE INFLUENCE OF METHODS FOR SEPARATING POLYDISPERSE PARTICLES INTO DISCRETE GROUPS IN NUMERICAL SIMULATION OF A FLUIDIZED BED

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*

Despite the widespread industrial application of fluidized-bed reactors, studying the hydrodynamics of heterogeneous phases remains a challenging task due to the large number of parameters affecting process dynamics. The particle size distribution affects the non-uniformity of the solid-phase distribution along the reactor height and the entrainment of some granules from the active zone of the reactor. The aim of this study is to investigate the effect of two methods of dividing polydisperse particles into discrete groups on the results of numerical simulation of a fluidized bed: division into equal diameter ranges for each group with calculation of the resulting volume fraction; and division into equal solid-phase volumes with calculation of the particle diameters delimiting each group. The study uses experimental results from a previously published work for a cylindrical laboratory reactor 2.2 cm in diameter and 50 cm in height. In the numerical simulation, a two-fluid, continuous, multi-velocity Eulerian–Eulerian multiphase model was used. In constructing the model, results from the kinetic theory of granular flow are used as a supplement to account for solid-particle collisions. As a result of the simulation, volume fraction fields of the solid-phase fractions were obtained, as well as profiles of the overall averaged solid-phase volume fraction. Four criteria based on the solid-phase volume fraction and the total particle volume in the reactor were used for quantitative evaluation of the results. Analysis of the obtained results showed that both methods of particle size distribution division affect the calculated fluidized-bed height. The relative deviation of the numerical simulation results from the experimental data ranged from 0.639% to 37.129%. The choice of a sufficient number of fractions in the present study depends on the criterion for determining the fluidized-bed boundary. The best agreement with experimental data was shown by simulation results when the particle composition was divided into two, three, and four fractions. The obtained numerical simulation results are applicable to the calculation of reactors with a bubbling fluidization regime with the formation of a particle bed limited in height. The results are applicable to a unimodal particle size distribution containing fine particles.

Keywords: fluidized bed, numerical simulation, polydisperse particles, particle distribution function, multigroup approach

Введение

В современной промышленности широкое применение реакторов с псевдоожиженным слоем обусловлено тем, что они обеспечивают высокие характеристики тепло-массопереноса между фазами типа газ – твердые частицы [1]. При этом частицы, интенсивно перемещаясь внутри реактора, могут истираться и разрушаться, что является фактором снижения общего времени эксплуатации, а также поддержания проектных режимов работы [2].

Численное моделирование динамики многофазных сред в реакторах с псевдоожиженным слоем возможно с применением современных методов, таких как подходы Эйлера – Эйлера и Эйлера – Лагранжа. В подходе Эйлера – Эйлера все фазы рассматриваются как взаимопроникающие континуумы, что позволяет моделировать крупномасштабные реакторы с использованием небольших вычислительных ресурсов. Для учета особенностей дискретной твердой фазы при построении модели, в качестве дополнения используют результаты кинетической теории, что, в свою очередь, является допущением и приносит в моделирование погрешности [3]. Несмотря на экономичность вычислительных ресурсов, непрерывный подход уступает в точности методам дискретных элементов. Именно вычислительная эффективность подхода Эйлера – Эйлера делает его доступным инструментом для расчета режимов работы крупномасштабных промышленных реакторов.

В последние годы методы машинного обучения также стали широко применяться в исследованиях реакторов с псевдоожиженным слоем, например, для прогнозирования скорости истирания угольной золы на основе сгенерированных данных [4]. Кроме того, машинное обучение может использоваться для прогнозирования распределения температуры [5] и характеристик потока внутри реактора [6].

Несмотря на широкое промышленное применение реакторов, исследование гидродинамики псевдоожиженного слоя остается сложной задачей из-за большого количества параметров, влияющих на динамику процесса [7; 8]. Такие параметры определяют градиенты давления, распределение твердой фазы по высоте реактора, способность частиц удерживаться в плотном слое или циркулировать в системе реактора [9]. Очевидно, что скорость газа оказывает влияние на время пребывания частиц в слое [10], а исследование масштабирования указывает на необходимость сохранения гидродинамического подобия при экстраполяции

поведения реактора на более крупные масштабы [11]. При этом гранулометрический состав твердой фазы является дополнительным параметром, который необходимо явно учитывать в моделировании.

Широкое распределение частиц по размерам оказывает влияние на неоднородность распределения твердой фазы по высоте реактора и унос части гранул из активной зоны реактора [12]. Различия в уносе частиц разных размеров очевидны: мелкие фракции активно переносятся газовой фазой, более крупные частицы характеризуются пониженным уносом и кластеризацией в нижних зонах реактора [13]. Кроме того, мелкие частицы оказывают существенное влияние на характер псевдоожижения из-за высокого отношения площади поверхности к массе [14]. В высокотемпературных процессах, таких как горение, наличие мелких фракций влияет на эксплуатационные особенности, такие как спекание и агломерацию частиц [15].

В исследовании [16] предложен простой метод выбора количества фракций для полидисперсной гранулированной фазы с целью улучшения качества результатов численного моделирования. Показано, что разделение полидисперсного порошка на четыре различные фракции твердой фазы позволило добиться удовлетворительного соответствия с экспериментальными данными относительно среднего значения границы слоя. В работе [16] также показано, что при разделении полидисперсных частиц на несколько групп могут быть получены фракции с незначительным объемным содержанием, которые оказывают несущественное влияние на результат численного моделирования, но увеличивают затраты вычислительных ресурсов.

Цель исследования – изучить влияние двух способов разделения полидисперсных частиц на дискретные группы на результат численного моделирования псевдоожиженного слоя: разделение на равные диапазоны диаметров для каждой группы с расчетом полученного объемного содержания; разделение на равное количество объема твердой фазы с расчетом диаметров частиц, ограничивающих каждую группу.

Материалы и методы исследования

В исследовании использованы результаты экспериментов авторов [16] для цилиндрического лабораторного реактора диаметром 2,2 см и высотой 50 см. В реактор были загружены частицы оксида алюминия массой 30 г и плотностью 2400 кг/м³. Начальный слой твердой фазы имел высоту 7,9 см. Рассчитанное начальное объемное содержание твердой фазы в слое составило

$\alpha = 0,41639$. Для ожежения частиц подавали воздух со скоростью 0,1213 м/с снизу через многослойную пористую пластину, которая обеспечивала равномерное распределение скорости по поперечному сечению трубки реактора и исключала попадание частиц в газоподводящую систему.

Поведение псевдоожженного слоя частиц записывалось с использованием высокоскоростной камеры. Положение границы слоя определяли путем покадрового анализа записанных изображений с использованием оригинальной программы, разработанной на языке Python. Вследствие образования газовых пузырей и их разрушения на поверхности слоя граница раздела фаз в процессе псевдоожжения оставалась нестационарной. Наблюдаемая высота слоя изменялась в диапазоне от 13 до 24 см; среднее по времени значение составило 17,21 см. В экспериментах авторы [16] использовали полидисперсные частицы с диаметрами в диапазоне от 20 до 140 мкм. Гранулометрическое распределение по объемной доле представлено в табл. 1.

Таблица 1

Гранулометрическое
распределение частиц

Диаметр частицы, мкм	Насыщенность по объемному содержанию
22,000	0,0000
26,303	0,0020
30,200	0,0030
34,674	0,0226
39,811	0,0817
45,709	0,2028
52,481	0,3855
60,256	0,5962
69,183	0,7838
79,433	0,9116
91,201	0,9754
104,713	0,9972
120,226	1,0000
138,038	1,0000

Примечание: составлена авторами на основе источника [16].

Анализ распределения частиц показывает, что более 99% частиц имели размер от 26 до 105 мкм. Этот интервал выбран для настоящего исследования. Для описания полидисперсных гранулированных материалов общепринятым приемом является характеристика смеси частиц при помощи

среднего диаметра. Исходя из этого был выбран стандартный средний диаметр Саутера D_{32} , который рассчитывается на основе функций плотности распределения частиц по размерам в соответствии с методикой [17]:

$$D_{32} = \frac{\int_0^{\infty} f(D) D^3 dD}{\int_0^{\infty} f(D) D^2 dD}, \quad (1)$$

где D – диаметр частицы твердой фазы, $f(D)$ – функция плотности распределения частиц по размерам.

Значения размеров частиц, представленных на оси абсцисс для функции распределения частиц, разделены на несколько групп, в настоящем исследовании от 1 до 5, двумя способами. Способ 1 – равные диапазоны диаметров частиц для каждой группы с последующим расчетом объемного содержания твердой фазы для каждой группы. Способ 2 – равное количество объема твердой фазы с последующим расчетом диаметров частиц, ограничивающих каждую группу для функции распределения по размерам. Здесь исследуется численная дискретизация для построения математической модели процесса псевдоожжения полидисперсных частиц, что не является реальным физическим разделением частиц на несколько отдельных фракций.

На рис. 1, а, представлена функция распределения с отметками границ пяти групп частиц и средними диаметрами для каждой группы для способа 1. На рис. 1, б, представлена функция распределения с отметками границ пяти групп частиц и средними диаметрами для каждой группы для способа 2.

Из рис. 1, а, видно разделение на равные отрезки по оси с размером частиц. В группах 2–5 значение среднего диаметра находится примерно в середине между границами фракций. В группе 1, в которой выделены самые мелкие частицы из общей совокупности частиц, значение среднего диаметра смещено к правой границе. Из рис. 1, б, видно, что отрезки по оси абсцисс имеют разные размеры. Размеры групп 2–4 небольшие, и значение среднего диаметра находится примерно в середине между границами фракций. Группа 1 значительно больше, и значение среднего диаметра смещено к правой границе. Группа 5 имеет самые большие размеры по значениям диаметров частиц. После определения границ каждой группы на функции распределения частиц по размерам, рассчитывается средний диаметр D_{32} для каждой группы по формуле (1).

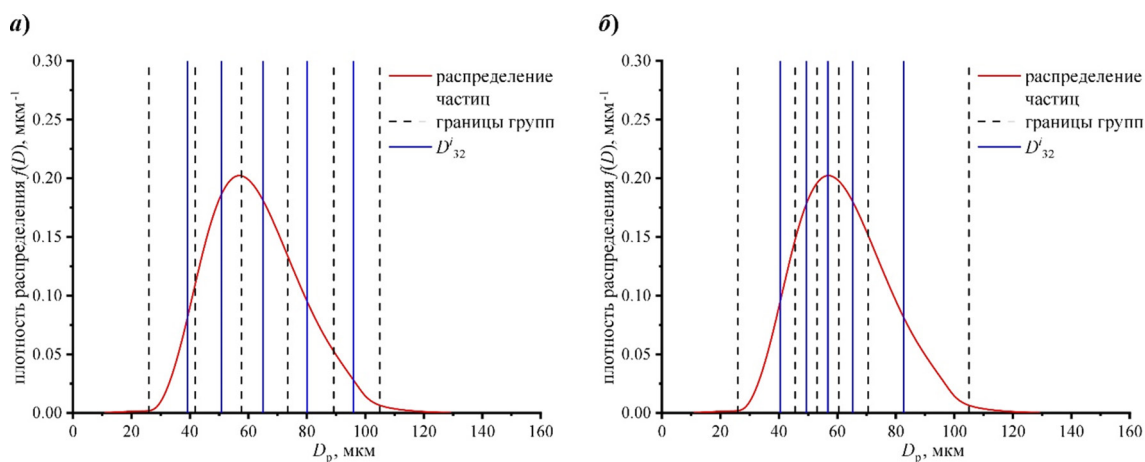


Рис. 1. Функция распределения частиц по размерам с выделенными значениями границ фракций и среднего диаметра: (а) способ 1; (б) способ 2
Примечание: составлен авторами по результатам данного исследования

Таблица 2

Средние диаметры и объемное содержание для групп твердой фазы при разделении частиц на несколько фракций по способу 1

Количество групп фракций	Группа 1: D_{32} , мкм; α	Группа 2: D_{32} , мкм; α	Группа 3: D_{32} , мкм; α	Группа 4: D_{32} , мкм; α	Группа 5: D_{32} , мкм; α
1	65,7931 0,41639	—	—	—	—
2	53,4259 0,29414	80,583 0,12225	—	—	—
3	46,8794 0,15881	64,8208 0,21677	88,799 0,04081	—	—
4	40,6514 0,08490	56,1474 0,20924	73,5095 0,09856	93,0146 0,02369	—
5	39,1769 0,05101	50,7486 0,16726	64,9566 0,12999	80,0647 0,05338	95,962 0,01474

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

В табл. 2 представлены результаты рассчитанных средних диаметров частиц для каждой группы и рассчитанное объемное содержание α для способа разделения на равные диапазоны диаметров частиц.

Из табл. 2 видно, что объемное содержание твердой фазы сильно различается для каждой группы при всех рассмотренных случаях выбора количества групп фракций. При разделении на две группы более мелкие частицы более чем вдвое превышают более крупные частицы по объемному содержанию. При разделении на большее количество групп видно, что наибольший объем в слое занимает, как правило, одна средняя фракция. При этом фракции самых мелких и самых крупных частиц занимают небольшую долю объема. При разделении

на пять групп самые мелкие частицы занимают 12,25 %, а самые крупные частицы занимают 3,54 % от общего объема твердой фазы.

В табл. 3 представлены результаты рассчитанных средних диаметров частиц для каждой группы и объемное содержание для способа разделения с равным объемом твердой фазы с последующим расчетом диаметров частиц, ограничивающих каждую группу для функции распределения по размерам. Из табл. 3 видно, что каждая группа имеет одинаковые значения объемного содержания твердой фазы. То есть при разделении частиц на несколько фракций по способу 2 каждая фракция будет оказывать влияние на результат численного моделирования.

Таблица 3

Средние диаметры и объемное содержание для групп твердой фазы при разделении частиц на несколько фракций по способу 2

Количество групп фракций	Группа 1: D_{32} , мкм; α	Группа 2: D_{32} , мкм; α	Группа 3: D_{32} , мкм; α	Группа 4: D_{32} , мкм; α	Группа 5: D_{32} , мкм; α
1	65,7931 0,41639	–	–	–	–
2	48,2908 0,20819	73,5163 0,20819	–	–	–
3	44,1458 0,13880	56,9287 0,13880	77,5705 0,13880	–	–
4	42,0412 0,10410	52,2916 0,10410	62,0477 0,10410	80,5759 0,10410	–
5	40,5309 0,08328	49,3566 0,08328	56,7159 0,08328	65,2762 0,08328	82,7049 0,08328

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

При численном моделировании использована двухжидкостная непрерывная многофазная Эйлерова-Эйлера модель. При построении модели в качестве дополнения используются результаты кинетической теории, для учета столкновений твердых частиц. Предполагается, что все рассматриваемые фазы в сумме занимают весь объем расчетной области. Для каждой из фаз выполняются законы сохранения механики сплошных сред, такие как сохранение массы и импульса [18]. В уравнениях индексом g обозначена газовая фаза, индексом s – твердая гранулированная фаза.

Уравнение сохранения для газовой фазы:

$$\frac{\partial \alpha_g \rho_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \vec{v}_g) = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \alpha_g \rho_g \vec{v}_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \vec{v}_g \vec{v}_g) = -\alpha_g \nabla p + \nabla \cdot \bar{\bar{\tau}}_g + \alpha_g \rho_g \vec{g} + \sum_{i=1}^N \vec{R}_{gs,i}, \quad (3)$$

$$\bar{\bar{\tau}}_g = \alpha_g \mu_g (\nabla \vec{v}_g + \nabla \vec{v}_g^T) + \alpha_g \left(\lambda_g - \frac{2}{3} \mu_g \right) \nabla \vec{v}_g \bar{\bar{I}},$$

где α – объемное содержание, ρ – истинная плотность, $\vec{v}$ – скорость, где p – давление, $\bar{\bar{\tau}}$ – тензор касательных напряжений, $\vec{R}$ – сила межфазного взаимодействия, μ и λ – сдвиговая и объемная вязкости, $\bar{\bar{I}}$ – единичный тензор. Индексом i обозначена группа твердой фазы, N – общее количество групп, используемых в расчете (от 1 до 5).

Уравнение сохранения для твердой фазы:

$$\frac{\partial \alpha_s \rho_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_s \rho_s \vec{v}_s) = 0, \quad (4)$$

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

Уравнение переноса, полученное из кинетической теории, принимает вид [19, с. 282]:

$$\begin{aligned} & \frac{3}{2} \left[\frac{\partial (\alpha_{s,i} \rho_{s,i} \theta_{s,i})}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_{s,i} \rho_{s,i} \vec{v}_{s,i} \theta_{s,i}) \right] = \\ & = \left(-p_{s,i} \bar{\bar{I}} + \bar{\bar{\tau}}_{s,i} \right) : \nabla \vec{v}_{s,i} + \nabla \cdot (k_{\theta s,i} \nabla \theta_{s,i}) - \gamma_{\theta s,i} + \varphi_{gs,i} + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \varphi_{s,ij}, \end{aligned} \quad (6)$$

где $\theta_{s,i}$ – температура гранул твердой фазы, $k_{\theta s,i}$ – коэффициент диффузии энергии, $\gamma_{\theta s,i}$ – диссипация энергии от соударений, $\varphi_{gs,i}$ – обмен энергией между газовой фазой и i -й твердой

фазой, $\varphi_{s,ij}$ – обмен энергией между i -й и j -й твердыми фазами. Индексом j обозначена группа твердой фазы, отличная от твердой фазы i текущего уравнения сохранения. В используемой модели Эйлера – Эйлера уравнения сохранения решаются для каждой группы твердой фазы в отдельности.

Сила межфазного взаимодействия имеет вид [19, с. 36–37]:

$$\vec{R}_{gs,i} = K_{gs,i}(\vec{v}_g - \vec{v}_{s,i}), \quad (7)$$

$$\begin{cases} K_{gs,i} = \frac{3}{4} C_D \frac{\alpha_{s,i} \alpha_g \rho_g |\vec{v}_{s,i} - \vec{v}_g|}{d_{s,i}} \alpha_g^{-2,65}, & \alpha_g > 0,8, \\ C_D = \frac{24}{\alpha_g \text{Re}_{s,i}} \left[1 + 0,15 (\alpha_g \text{Re}_{s,i})^{0,687} \right], \\ K_{gs,i} = 150 \frac{\alpha_{s,i} (1 - \alpha_g) \mu_g}{\alpha_g d_{s,i}^2} + 1,75 \frac{\rho_g \alpha_{s,i} |\vec{v}_{s,i} - \vec{v}_g|}{d_{s,i}}, & \alpha_g < 0,8, \end{cases} \quad (8)$$

где $K_{gs,i}$ – коэффициент межфазного взаимодействия, $d_{s,i}$ – диаметр гранулы i -й твердой фазы, C_D – функция сопротивления, Re – число Рейнольдса.

Коэффициент межфазного взаимодействия между парой твердых фаз определяется по модели [20, с. 15]:

$$K_{s,ij} = \frac{3(1 + e_{s,ij}) \left(\frac{\pi}{2} + C_{fr,ij} \frac{\pi^2}{8} \right) \alpha_{s,i} \rho_{s,i} \alpha_{s,j} \rho_{s,j} (d_{s,i} + d_{s,j})^2 \mathcal{G}_{0s,ij}}{2\pi(\rho_{s,i} d_{s,i}^3 + \rho_{s,j} d_{s,j}^3)} |\vec{v}_{s,i} - \vec{v}_{s,j}|, \quad (9)$$

где $e_{s,ij}$ – коэффициент восстановления частиц твердой фазы после столкновения, $C_{fr,ij}$ – коэффициент трения между i -й и j -й твердыми фазами (может быть задан равным 0), $\mathcal{G}_{0s,ij}$ – коэффициент радиального распределения. Как правило, используется значение по умолчанию $e_s = 0,9$, но это значение можно настроить в соответствии с типом частиц.

Тензор касательных напряжений в твердой фазе содержит сдвиговую и объемную вязкости. Сдвиговую вязкость можно представить в виде [19, с. 289, 314]:

$$\mu_{s,i} = \mu_{s,i-col} + \mu_{s,i-kin}, \quad (10)$$

$$\mu_{s,i-col} = \frac{4}{5} \alpha_{s,i}^2 \rho_{s,i} d_{s,i} \mathcal{G}_{0s,ii} (1 + e_{s,ii}) \sqrt{\frac{\theta_{s,i}}{\pi}}, \quad (11)$$

$$\mu_{s,i-kin} = \frac{10 d_{s,i} \rho_{s,i} \sqrt{\theta_{s,i} \pi}}{96 \alpha_{s,i} (1 + e_{s,ii}) \mathcal{G}_{0s,ii}} \left[1 + \frac{4}{5} (1 + e_{s,ii}) \alpha_{s,i} \mathcal{G}_{0s,ii} \right]^2 \alpha_{s,i}. \quad (12)$$

Объемная вязкость твердой фазы определяет сопротивление гранулированных частиц сжатию и расширению. Она имеет следующую форму [21, с. 247]:

$$\lambda_{s,i} = \frac{4}{3} \alpha_{s,i}^2 \rho_{s,i} d_{s,i} \mathcal{G}_{0s,ii} (1 + e_{s,ii}) \sqrt{\frac{\theta_{s,i}}{\pi}}. \quad (13)$$

Для определения параметра $k_{\theta s,i}$ использована модель [19, с. 315]:

$$k_{\theta s,i} = \frac{150 d_{s,i} \rho_{s,i} \sqrt{\theta_{s,i} \pi}}{768 \eta \mathcal{G}_{0s,ii}} \left[1 + \frac{12}{5} \eta \alpha_{s,i} \mathcal{G}_{0s,ii} \right]^2 + 4 \rho_{s,i} \alpha_{s,i}^2 d_{s,i} \eta \mathcal{G}_{0s,ii} \sqrt{\frac{\theta_{s,i}}{\pi}}. \quad (14)$$

Диссипация энергии при столкновениях $\gamma_{\theta s,i}$ представляет собой скорость диссипации энергии в твердой фазе из-за столкновений между частицами [21, с. 248]:

$$\gamma_{\theta s,i} = \frac{12(1 - e_{s,ii}^2) \mathcal{G}_{0s,ii}}{d_{s,i} \sqrt{\pi}} \rho_{s,i} \alpha_{s,i}^2 \theta_{s,i}^{3/2}. \quad (15)$$

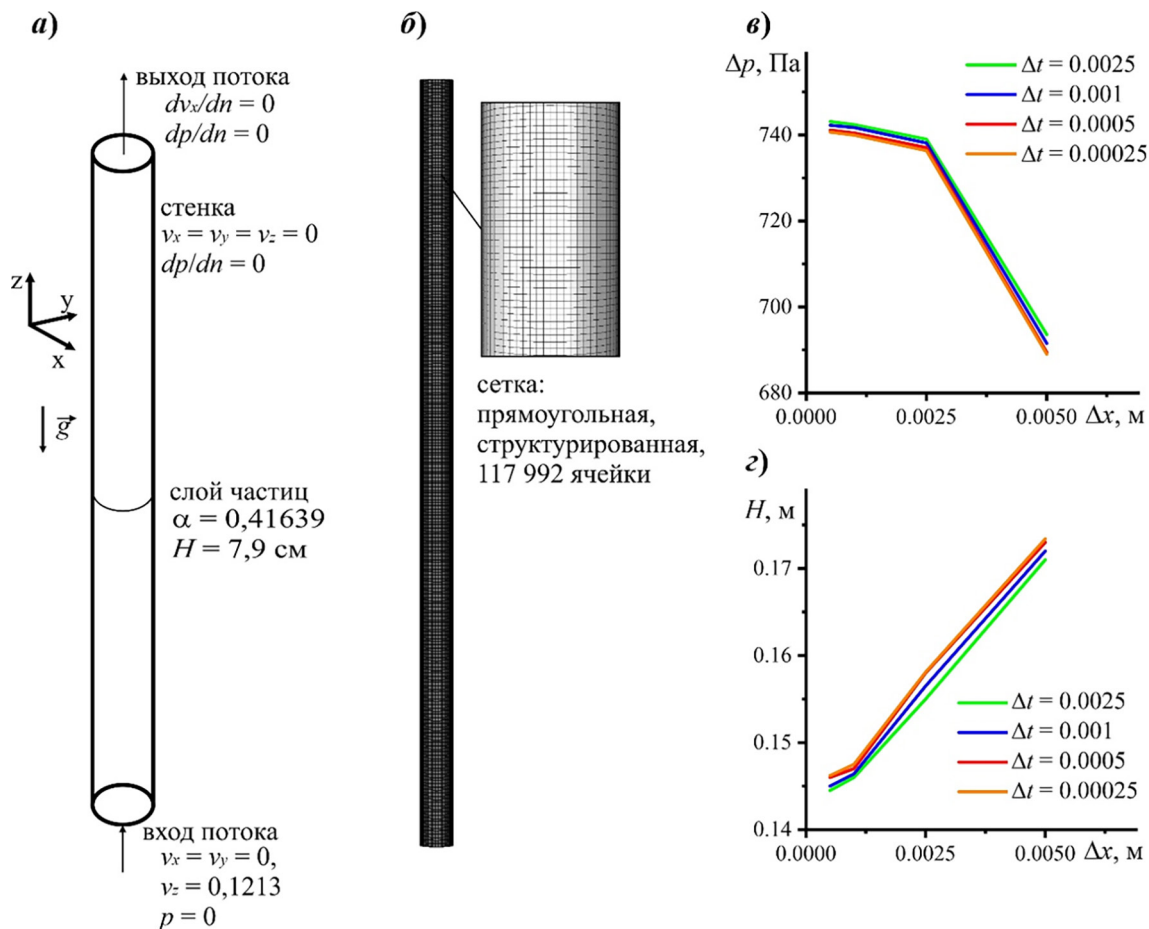


Рис. 2. Модель реактора: (а) геометрическая модель и граничные условия; (б) сеточное разбиение; (в) оценка качества сеточного разбиения по перепаду давления; (г) оценка качества сеточного разбиения по высоте слоя частиц
Примечание: составлен авторами по результатам данного исследования

Перенос кинетической энергии случайных флуктуаций скорости частиц от i -й твердой фазы к газовой или j -й твердой фазе может быть представлен выражением [19, с. 283]:

$$\begin{aligned} \varphi_{gs,i} &= -3K_{gs,i}\theta_{s,i}, \\ \varphi_{s,ij} &= -3K_{s,ij}\theta_{s,i}. \end{aligned} \quad (16)$$

Для описания режима турбулентности использована k - ε модель. Это наиболее общая многофазная модель турбулентности, которая решает набор уравнений переноса k и ε для каждой фазы. Численное моделирование реализовано с использованием пакета программ ANSYS Fluent 19.2.

Для реализации описанной выше численной модели построена геометрическая модель реактора в форме простого цилиндра (рис. 2, а).

На границах расчетной области заданы следующие условия: снизу скорость потока воздуха 0,1213 м/с по направлению оси ци-

линдра, на верхней границе задано атмосферное давление, стенка цилиндра задана непроницаемой без скольжения. Параметры воздуха заданы для температуры 20 °С. В начальный момент времени $t = 0$ с в нижней части цилиндра задано объемное содержание твердой фазы 0,41639 высотой 7,9 см. Плотность твердой фазы 2400 кг/м³. Вся расчетная область покрыта прямоугольной сеткой с размером ячейки 0,001 м (рис. 2, б). Использование очень маленьких ячеек потребует больших затрат вычислительных ресурсов при численном моделировании. Для выбора оптимального размера сетки проведены расчеты для значений размера ячейки от 0,00025 до 0,005 м и шага по времени от 0,0025 до 0,00025 с.

Для оценки качества расчета рассмотрены значения среднего перепада давления между нижней и верхней границами цилиндра (рис. 2, в) и средней высоты слоя твердой фазы (рис. 2, г). Основные изменения в рассматриваемых параметрах на-

блюдаются при изменении размера ячейки сетки. Изменение шага по времени в выбранном диапазоне слабо влияет на результаты моделирования. При изменении размера ячейки от 0,001 к 0,0005 м изменения в контролируемых значениях перепада давления и высоты слоя твердой фазы составляют менее 1 %. Таким образом оптимальным для численного моделирования выбран размер ячейки 0,001 м. Шаг по времени 0,0005 с определен из критерия Куранта для выбранного размера ячейки.

Результаты исследования и их обсуждение

Моделирование проведено для случаев разделения функции распределения частиц по размерам на 2–5 групп. На рис. 3 представлены рассчитанные поля объемного содержания твердой фазы в момент времени 15 с при разделении на две группы фракций частиц.

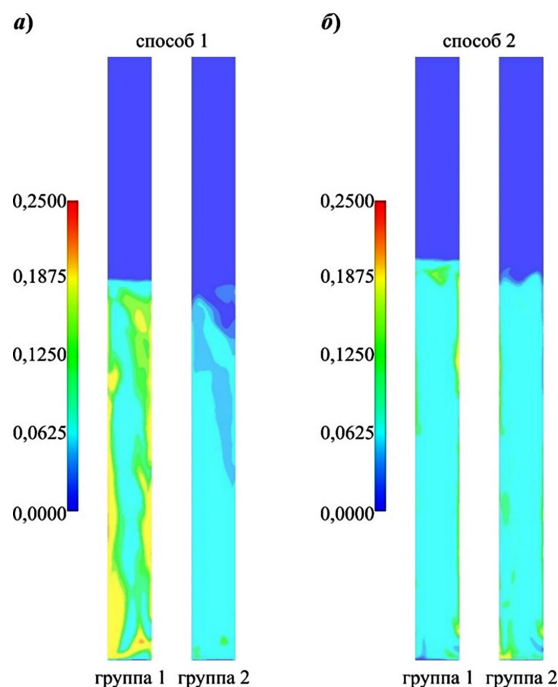


Рис. 3. Объемное содержание твердой фазы при использовании двух групп при $t = 15$ с:

(а) способ 1: $D_{32}^1 = 53,4259$ мкм, $\alpha = 0,29414$,
 $D_{32}^2 = 80,583$ мкм, $\alpha = 0,12225$;

(б) способ 2: $D_{32}^1 = 48,2908$ мкм, $\alpha = 0,20819$,
 $D_{32}^2 = 73,5163$ мкм, $\alpha = 0,20819$

Примечание: составлен авторами по результатам данного исследования

Средний диаметр и объемное содержание для групп твердой фазы соответствуют результатам, представленным в табл. 2 и 3. При разделении по способу 1 (рис. 3, а) видно, что более мелкие частицы имеют большее объемное содержание по сравнению

с более крупными частицами. При этом высоты слоя обеих фракций примерно совпадают. При разделении по способу 2 (рис. 3, б) видно, что обе фракции имеют примерно равное объемное содержание по высоте слоя. Визуально слой частиц, полученный с применением способа 2, немного выше, чем слой, полученный с применением способа 1. Количественная оценка полученных результатов будет представлена ниже.

На рис. 4 представлены рассчитанные поля объемного содержания твердой фазы в момент времени 15 с при разделении на 5 групп фракций частиц. Для способа 1 разделения значений размеров частиц наблюдается наибольшая объемная доля для групп 2 и 3. Частицы группы 1 (мелкие) находятся во всем объеме реактора. Частицы группы 5 (крупные) находятся в нижней части реактора и имеют незначительное объемное содержание. Для способа 2 каждая группа имеет одинаковое объемное содержание, но мелкие частицы занимают весь объем реактора. При этом видно сепарирование более крупных частиц на границе слоя, каждая фракция более крупных частиц имеет более низкий уровень расположения границы. Исследование наличия фракций мелких частиц в составе полидисперсного катализатора на результаты численного моделирования представлены в работе [22].

Рассмотрим профили среднего объемного содержания твердой фазы для проведенных расчетов численного моделирования, полученные путем регистрации данных объемного содержания твердой фазы с последующим осреднением результатов в интервале с 5 по 15 с с шагом 0,025 с. Результаты представлены на рис. 5, а, для способа 1 и на рис. 5, б, для способа 2.

Из рис. 5 видно, что отличия в результатах численного моделирования, полученных двумя разными способами разделения значений размеров частиц, наблюдаются с увеличением количества групп фракций. При использовании способа 1 для разделения полидисперсных частиц на группы видна более четкая граница, когда объемное содержание твердой фазы становится небольшим. В этом случае в верхней части реактора остаются только мелкие частицы, объемное содержание которых незначительное. При использовании способа 2 для разделения частиц на группы граница слоя менее выражена. В этом случае группа мелких частиц имеет большее объемное содержание. Размытие границы слоя наблюдается при использовании более двух групп фракций твердой фазы. В этих случаях явно выделяются группы мелких частиц, которые могут находиться во всем объеме реактора.

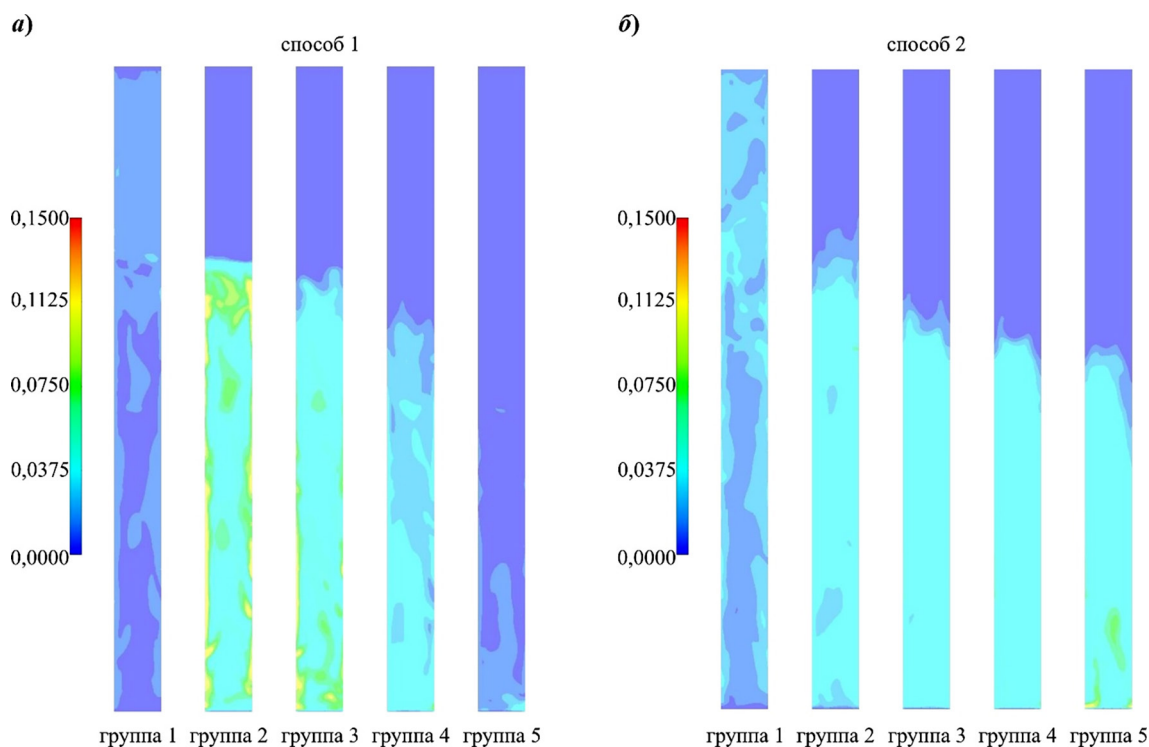


Рис. 4. Объемное содержание твердой фазы при использовании пяти групп при $t = 15$ с:

(а) способ 1: $D_{32}^1 = 39,1769$ мкм, $\alpha = 0,05101$, $D_{32}^2 = 50,7486$ мкм, $\alpha = 0,16726$, $D_{32}^3 = 64,9566$ мкм, $\alpha = 0,12999$, $D_{32}^4 = 80,0647$ мкм, $\alpha = 0,05338$, $D_{32}^5 = 95,962$ мкм, $\alpha = 0,01474$;
 (б) способ 2: $D_{32}^1 = 40,5309$ мкм, $\alpha = 0,08328$, $D_{32}^2 = 49,3566$ мкм, $\alpha = 0,08328$, $D_{32}^3 = 56,7159$ мкм, $\alpha = 0,08328$, $D_{32}^4 = 65,2762$ мкм, $\alpha = 0,08328$, $D_{32}^5 = 82,7049$ мкм, $\alpha = 0,08328$

Примечание: составлен авторами по результатам данного исследования

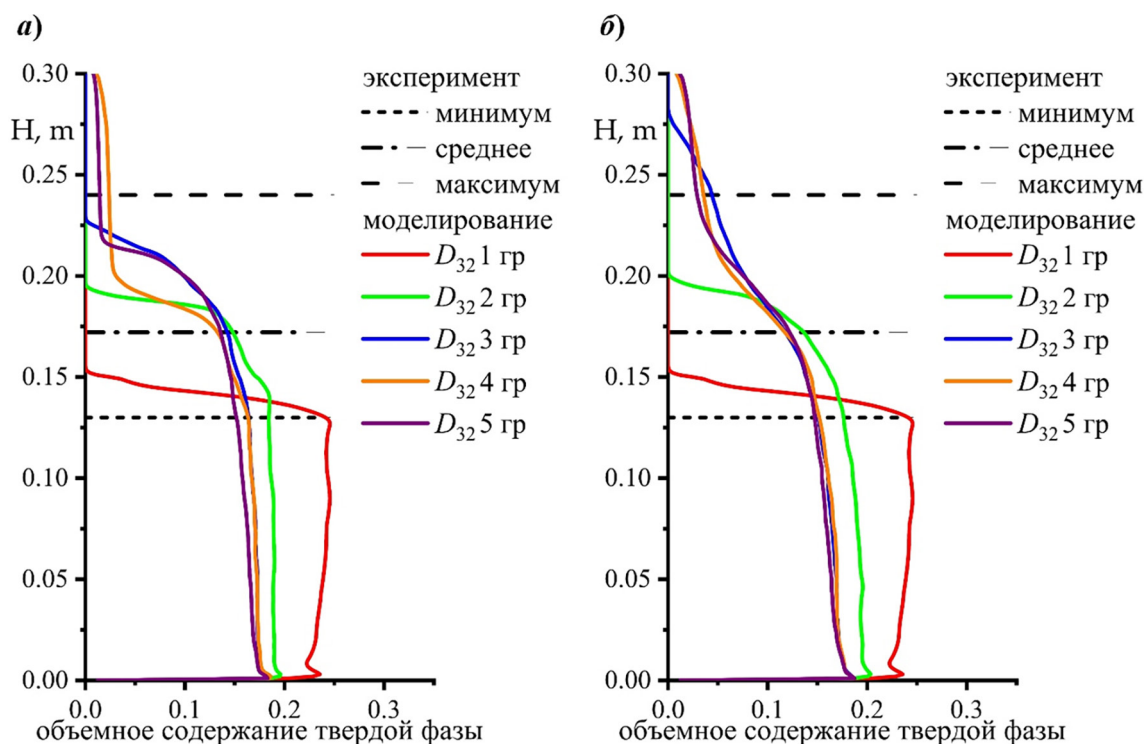


Рис. 5. Профиль общего среднего объемного содержания твердой фазы: а) способ 1; б) способ 2

Примечание: составлен авторами по результатам данного исследования

Из рис. 5 граница слоя частиц определялась визуально по среднему значению объемного содержания твердой фазы. Далее определим несколько критериев для расчета границы псевдооживленного слоя в рассматриваемых результатах численного моделирования. Первые два критерия связаны с величиной объемного содержания твердой фазы. Твердые частицы могут занимать весь объем реактора, при этом их концентрация может быть разной: от незначительной до 0,63 в плотной упаковке гранул. При этом объемное содержание твердой фазы в верхней части реактора может быть больше, чем в нижней, при турбулентных режимах псевдооживления. В настоящем исследовании среднее значение объемного содержания твердой фазы меняется монотонно от нижней к верхней части реактора. Поэтому уменьшение объемной доли может быть критерием для определения границы псевдооживленного слоя.

Первые два критерия определим с помощью параметра объемного содержания α . Из рис. 5 видно, что для способа 1 использование 1, 2 и 3 групп частиц позволяет получить профиль среднего объемного содержания твердой фазы с ограниченным по высоте слоем. При использовании четырех и пяти групп мелкие частицы находятся во всем объеме реактора. При этом объемное содержание мелких частиц в верхней части реактора составляет 0,023–0,029 для четырех групп и 0,013–0,017 для пяти групп. Для способа 2 использование одной и двух групп позволяет получить ограниченный по высоте слой. При использовании четырех и пяти групп мелкие частицы находятся во всем объеме реактора. При использовании трех групп частицы находятся почти во всем объеме реактора, но не достигают верхней части аппарата. При этом объемное содержание мелких частиц в верхней части реактора составляет 0,023–0,051 для четырех групп и 0,021–0,056 для пяти групп. При использовании способа 2 уменьшение объемной доли твердой фазы по высоте реактора более плавное, чем при использовании способа 1, и определить границу слоя сложнее. Выберем два значения величины объемной доли твердой фазы, которые можно будет использовать для определения условной границы слоя частиц. Тогда критерий 1 определяет границу слоя частиц, когда объемное содержание твердой фазы становится меньше 5% ($\alpha < 0,05$), критерий 2 – когда объемное содержание твердой фазы становится меньше 10% ($\alpha < 0,1$).

Также выделим интегральную характеристику – объем твердой фазы. Здесь также нужно задать условие определения грани-

цы, так как небольшое количество мелких частиц может находиться во всем объеме реактора. Объем твердой фазы можно рассчитать как

$$V_{\text{слой}} = V_1 + V_2 + \dots + V_N,$$

где V_i – объем твердой фазы в поперечном ряду ячеек, V_1 – объем частиц в ряду ячеек в нижней части реактора, V_N – объем частиц в ряду ячеек в верхней части реактора. Такой способ допустим в используемой геометрии и структурированной сетке. Если двигаться от нижнего ряда ячеек к верхней части реактора, то общий объем твердой фазы накапливается. Для каждой ячейки точного разбиения объем твердой фазы равен αV_c , где V_c – объем ячейки, полученный из построенной модели. Здесь сложно определить, какой объем частиц можно считать границей слоя. Введем условные значения 95 и 90% для анализа полученных результатов численного моделирования. Тогда критерий 3 определяет границу слоя частиц, когда накопленный от нижней части реактора объем твердой фазы достигает 95% общего объема твердой фазы, критерий 4 – общий объем твердой фазы достигает 90%.

На рис. 6 представлены результаты расчета высоты слоя частиц по выбранным критериям. Числовые значения результатов представлены в табл. 4. Также на рисунке отмечены определенные экспериментально границы слоя, наблюдаемые минимум и максимум и рассчитанное среднее. Заштрихованными областями обозначены стандартные отклонения границы слоя частиц, которые были получены в сериях расчетов.

Из рис. 6 и табл. 4 видно, что использование способа 1 во многих случаях показывает лучшее приближение рассчитанных результатов к экспериментальным данным. При выделении двух групп твердой фазы отличия незначительны. Наибольшие отличия наблюдаются при применении критериев из рис. 6, а и в. Там важную роль играет объем мелких частиц, попавших в отдельную группу.

В табл. 4 представлены осредненные результаты расчета высоты слоя частиц, полученные численным моделированием. При этом в эксперименте среднее по времени значение высоты слоя частиц было 17,21 см. Для количественной оценки отличия результатов численного моделирования от экспериментальных данных, рассчитаны значения относительного отклонения δ в процентном выражении. Результаты представлены на рис. 7. Заштрихованными областями обозначены стандартные отклонения для серии рассчитанных результатов. Числовые значения результатов представлены в табл. 5.

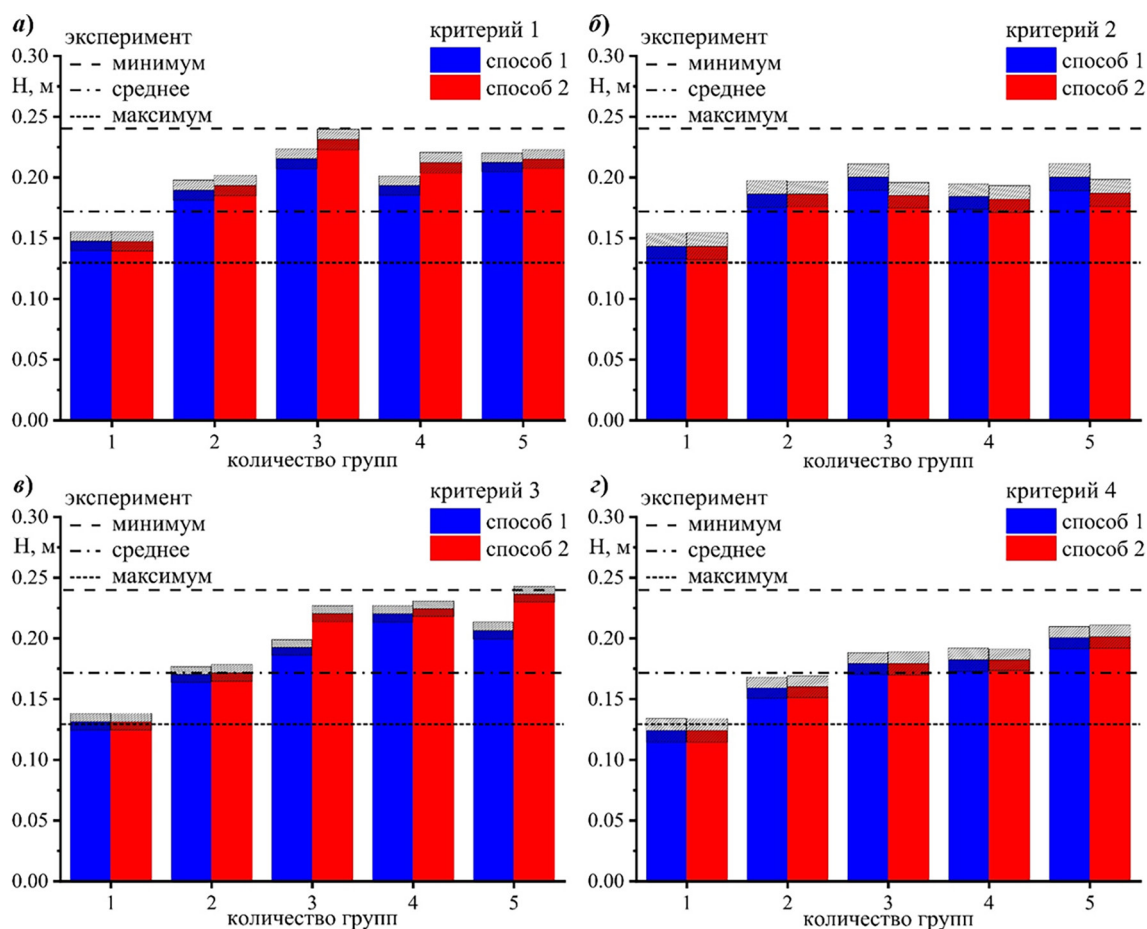


Рис. 6. Результаты численного моделирования для способа 1 и способа 2 в сравнении с экспериментом: (а) по объемному содержанию твердой фазы меньше 5%; (б) по объемному содержанию твердой фазы меньше 10%; (в) по общему объему твердой фазы 95%; (г) по общему объему твердой фазы 90%
Примечание: составлен авторами по результатам данного исследования

Таблица 4

Средняя высота слоя твердой фазы, рассчитанная по рассматриваемым критериям для результатов численного моделирования

Количество групп фракций	Критерий 1		Критерий 2		Критерий 3		Критерий 4	
	Способ 1	Способ 2	Способ 1	Способ 2	Способ 1	Способ 2	Способ 1	Способ 2
1	0,147	0,147	0,143	0,143	0,131	0,131	0,124	0,124
2	0,189	0,193	0,186	0,186	0,170	0,171	0,159	0,160
3	0,215	0,231	0,200	0,185	0,192	0,220	0,179	0,179
4	0,193	0,212	0,184	0,182	0,220	0,224	0,182	0,182
5	0,212	0,215	0,200	0,187	0,206	0,236	0,200	0,201

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

Из рис. 7 и табл. 5 видно, что при использовании критериев по объемному содержанию твердой фазы в реакторе наименьшее отклонение от среднего экспериментального значения для способа 1 – 2 группы (9,82%) и 4 группы (12,14%) по критерию объемного содержания менее 5%, 2 группы

(8,07%) и 4 группы (6,91%) по критерию объемного содержания менее 10%; для способа 2 – 2 группы (12,14%) по критерию объемного содержания менее 5%, 2 группы (8,08%), 3 группы (7,5%), 4 группы (5,75%) и 5 групп (8,66%) по критерию объемного содержания менее 10%.

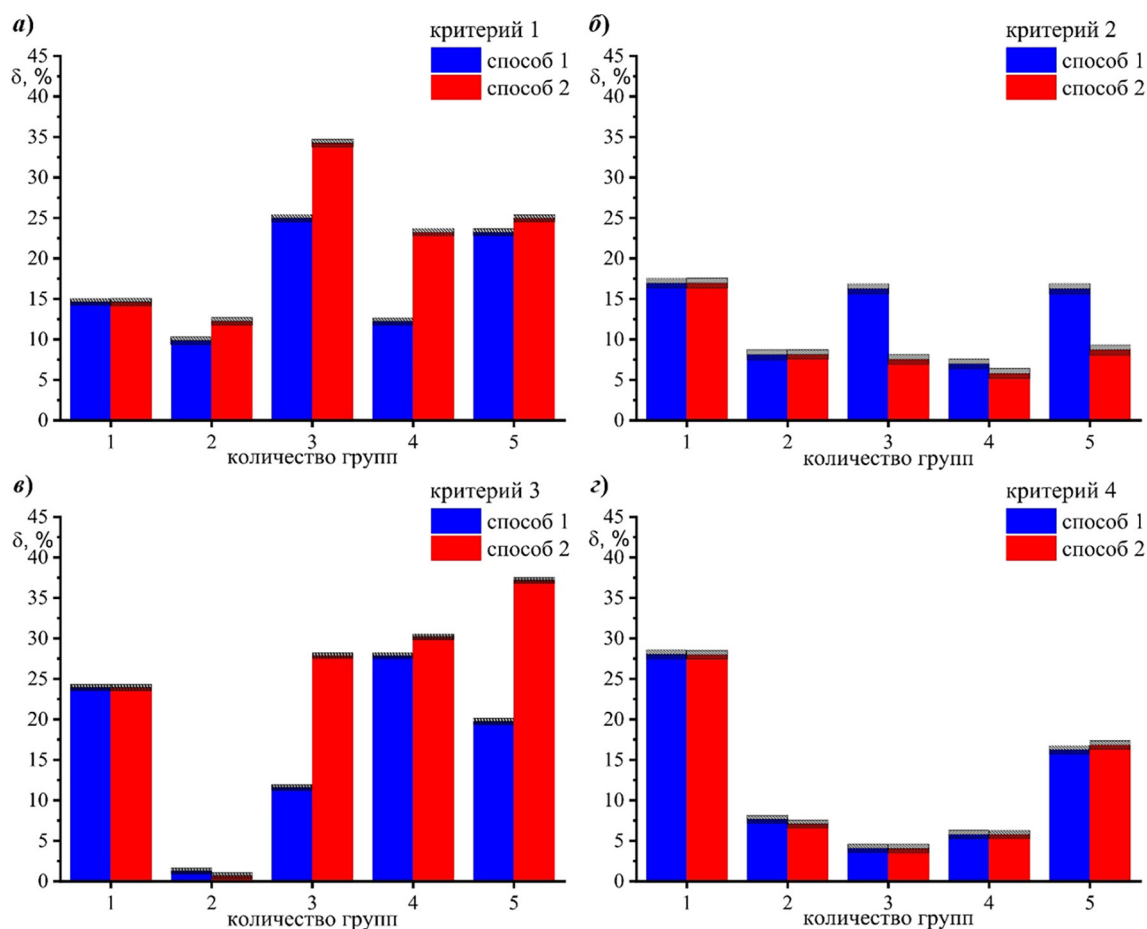


Рис. 7. Относительное отклонение результатов численного моделирования от эксперимента:

(а) по объемному содержанию твердой фазы меньше 5 %;

(б) по объемному содержанию твердой фазы меньше 10 %;

(в) по общему объему твердой фазы 95 %; (г) по общему объему твердой фазы 90 %

Примечание: составлен авторами по результатам данного исследования

Таблица 5

Относительное отклонение результатов численного моделирования, рассчитанных по рассматриваемым критериям, от экспериментальных данных

Количество групп фракций	Критерий 1		Критерий 2		Критерий 3		Критерий 4	
	Способ 1	Способ 2	Способ 1	Способ 2	Способ 1	Способ 2	Способ 1	Способ 2
1	14,585	14,585	16,909	16,908	23,881	23,881	27,949	27,949
2	9,820	12,144	8,077	8,076	1,220	0,639	7,612	7,031
3	24,927	34,224	16,211	7,495	11,563	27,832	4,010	4,009
4	12,144	23,184	6,915	5,752	27,833	30,157	5,753	5,752
5	23,184	24,927	16,212	8,658	19,698	37,129	16,211	16,793

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

При использовании критериев по рассчитанному объему частиц наименьшее отклонение от среднего экспериментального значения для способа 1 – 2 группы (1,22%)

по критерию объема более 95%, 2 группы (7,61 %), 3 группы (4,01) и 4 группы (5,75%) по критерию объема более 90%; для способа 2 – 2 группы (0,64%) по критерию объ-

ема более 95 %, 2 группы (7,03 %), 3 группы (4,01 %) и 4 группы (5,75 %) по критерию объема более 90 %.

Из сравнения полученных результатов численного моделирования с экспериментальными данными видно, что оба способа разделения значений размеров частиц оказывают влияние на рассчитанную высоту псевдоожиженного слоя. Очевидно, что в настоящем исследовании при выбранной геометрии реактора, скорости воздуха и составе частиц твердой фазы значительное влияние на результат численного моделирования оказывают мелкие частицы, которые движутся по всей высоте реактора. При использовании способа 1 фракция с мелкими частицами содержит небольшой объем от общего содержания твердой фазы. Это позволяет сосредоточить основной объем частиц в более крупных фракциях, которые создают ограниченный по высоте слой частиц. Однако выделенная фракция мелких частиц может содержать незначительное количество гранул, не оказывая влияние на результат численного моделирования, но занимая вычислительные ресурсы. При использовании способа 2 обеспечивается равное объемное содержание для каждой группы твердой фазы, что вносит существенный вклад каждой фракции в результат численного моделирования. Однако объемное содержание мелких частиц в построенной модели может оказаться больше, чем в реальном эксперименте. Это окажет негативное влияние на итоговое расширение псевдоожиженного слоя.

Таким образом, при численном моделировании полидисперсного псевдоожиженного слоя изначально требуется применять оба способа разделения частиц на группы с последующим определением наиболее подходящего для задачи. Отметим, что результаты численного моделирования получены для одной выбранной постановки задачи и расчеты для другого состава частиц могут быть другими и требуют дополнительных исследований.

Заключение

В настоящем исследовании проанализированы два подхода к разделению полидисперсных частиц на фракции при численном моделировании псевдоожиженного слоя. Анализ полученных результатов показал, что оба способа разбиения гранулометрического состава оказывают влияние на расчетную высоту псевдоожиженного слоя. Наилучшее согласие с экспериментальными данными показали результаты моделирования при разделении состава

частиц на две фракции при оценке по критерию 3, когда граница слоя определялась достижением накопленного от нижней части реактора объема твердой фазы более 95 % общего объема. Относительное отклонение результатов численного моделирования от экспериментальных данных составило 1,22 % для способа 1 и 0,639 % для способа 2 разделения частиц на группы. При выборе критериев 2 и 4 с ограничением объемного содержания более 10 % или достижением накопленного от нижней части реактора объема твердой фазы более 90 %, хорошее согласие с экспериментальными данными показали результаты моделирования при разделении состава частиц на 2, 3 и 4 фракции. Здесь относительное отклонение результатов численного моделирования от экспериментальных данных составило от 4,009 % для способа 2 при разделении частиц на 4 группы до 16,211 % для способа 1 при разделении частиц на 3 группы. Выбор достаточного количества фракций в настоящем исследовании зависит от критерия определения границы псевдоожиженного слоя. Полученные результаты численного моделирования применимы для расчета реакторов с барботажным режимом псевдоожижения с формированием ограниченного по высоте слоя частиц. Дополнительным ограничением применения результатов является форма рассматриваемой функции распределения полидисперсных частиц по размерам. Результаты применимы для одномодального распределения с содержанием мелких частиц, которые могут быть полностью вынесены из реактора, крупных частиц, остающихся в нижней части реактора, и средних частиц, составляющих основной объем твердой фазы.

Список литературы

1. Chew J. W., Cocco R. Fluidization Processes: Design and Operation. Weinheim: Wiley-VCH, 2026. 666 p. DOI: 10.1002/9783527849703. ISBN: 978-3-527-84970-3.
2. He J., Dong S., Zhu Z., Wu D. Catalyst attrition and particle characteristics evolution in a fluidized bed // Chemical Engineering Science. 2026. Vol. 328. Art. 123775. DOI: 10.1016/j.ces.2026.123775.
3. Wang J. Continuum theory for dense gas-solid flow: A state-of-the-art review // Chemical Engineering Science. 2020. Vol. 215. Art. 115428. DOI: 10.1016/j.ces.2019.115428.
4. Li D., Deng Q., Lee D. H., Jeon C. Prediction of attrition rate of coal ash for fluidized bed based on chemical composition with an artificial neural network model // Fuel Processing Technology. 2022. Vol. 225. Art. 107024. DOI: 10.1016/j.fuproc.2021.107024.
5. Grochowalski J., Jachymek P., Andrzejczyk M., Klajny M., Widuch A., Morkisz P., Hernik B., Zdeb J., Adamczyk W. Towards application of machine learning algorithms for prediction temperature distribution within CFB boiler based on specified operating conditions // Energy. 2021. Vol. 237. Art. 121538. DOI: 10.1016/j.energy.2021.121538.

6. Chew J. W., Cocco R. A. Application of machine learning methods to understand and predict circulating fluidized bed riser flow characteristics // *Chemical Engineering Science*. 2020. Vol. 217. Art. 115503. DOI: 10.1016/j.ces.2020.115503.
7. Harris A. T., Davidson J. F., Thorpe R. B. Particle residence time distributions in circulating fluidised beds // *Chemical Engineering Science*. 2003. Vol. 58. Is. 11. P. 2181–2202. DOI: 10.1016/S0009-2509(03)00082-4.
8. Schmid J. C., Pröll T., Kitzler H., Pfeifer C., Hofbauer H. Cold flow model investigations of the countercurrent flow of a dual circulating fluidized bed gasifier // *Biomass Conversion and Biorefinery*. 2012. Vol. 2. Is. 3. P. 229–244. DOI: 10.1007/s13399-012-0035-5.
9. Wang J., Shao Y., Yan X., Zhu J. Review of (gas)-liquid-solid circulating fluidized beds as biochemical and environmental reactors // *Chemical Engineering Journal*. 2020. Vol. 386. Art. 121951. DOI: 10.1016/j.cej.2019.121951.
10. Hua L., Wang J. Residence time distribution of particles in circulating fluidized bed risers // *Chemical Engineering Science*. 2018. Vol. 186. P. 168–190. DOI: 10.1016/j.ces.2018.04.027.
11. Macías R. J., Maya J. C., Chejne F., Ceballos C. M., Gómez A. F. A new scaling strategy for bubbling fluidized bed reactors based on population-balance model // *Powder Technology*. 2025. Vol. 453. Art. 120637. DOI: 10.1016/j.powtec.2025.120637.
12. Fuchs J., Konior A. Segregation in circulating turbulent fluidized beds with a broad particle size distribution: A Froude number-based model approach // *Chemical Engineering Journal*. 2026. Vol. 544. Art. 178493. DOI: 10.1016/j.cej.2026.178493.
13. Yang S., Wang S., Wang H. Impact of polydispersity on the flow dynamics in the riser of a circulating fluidized bed // *Powder Technology*. 2021. Vol. 381. P. 489–502. DOI: 10.1016/j.powtec.2020.12.015.
14. Marnani A. K., Bück A., Antonyuk S., Van Wachem B., Thévenin D., Tomas J. The effect of the presence of very cohesive Geldart C ultra-fine particles on the fluidization of Geldart fine particle beds // *Processes*. 2019. Vol. 7. Is. 1. Art. 35. DOI: 10.3390/pr7010035.
15. Geleta D. D., Suh I. K., Lee J. Effect of process parameters on fluidization and agglomeration behavior of iron ore fines // *Powder Technology*. 2026. Vol. 467. Art. 121500. DOI: 10.1016/j.powtec.2025.121500.
16. Solovev 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.
17. 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.
18. ANSYS Inc. Ansys Fluent Theory Guide, Release 2026 R1. Canonsburg, PA: ANSYS Inc., 2026. URL: https://ansyshelp.ansys.com/public/account/secured?returnurl=/Views/Secured/corp/v261/en/flu_th/flu_th.html (дата обращения: 29.07.2026).
19. Gidaspow D. *Multiphase Flow and Fluidization: Continuum and Kinetic Theory Descriptions*. San Diego: Academic Press. 1994. 467 p. DOI: 10.1016/C2009-0-21244-X. ISBN 978-0-08-051226-6.
20. Jalali P., Hyppänen T. Momentum transport between two granular phases of spherical particles with large size ratio: two-fluid model versus discrete element method // *Powder Technology*. 2015. Vol. 273. P. 13–18. DOI: 10.1016/j.powtec.2014.12.026.
21. Lun C. K. K., Savage S. B., Jeffrey D. J., Chepurmy 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.
22. Соловьев С. А. Моделирование псевдоожиженного слоя с разделением фракций частиц полидисперсного катализатора // *Современные наукоемкие технологии*. 2026. № 7. С. 172–186. DOI: 10.17513/snt.40873.

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.