

研究论文

DOI: 10.11949/j.issn.0438-1157.20160409

流化催化裂化提升管反应器的 CFD-PBM 耦合模型： 矩方法适用性比较

梁晓飞, 姚亚, 罗正鸿

(上海交通大学化学化工学院, 上海 200240)

摘要: 建立了描述 FCC 提升管中气-固流动行为的 CFD-PBM 耦合模型, 模型同时考虑了颗粒动力学和颗粒聚并破碎内核。讨论了求解耦合模型中众体平衡方程 (PBE) 的 3 种典型矩方法[即: 正交矩方法 (quadrature method of moments, QMOM), 直接正交矩方法 (direct quadrature method of moments, DQMOM) 和固定轴点正交矩方法 (fixed pivot quadrature method of moments, FPQMOM)] 对模拟结果的影响。研究表明 3 种矩方法均能合理预测提升管内径向和轴向颗粒体积分数和颗粒速度分布。通过将模拟结果与实验结果进行比较, 表明 QMOM 在反应器结构简单情况下, 计算结果更接近于实际情况。

关键词: 流化催化裂化; 计算流体力学; 颗粒群平衡; 矩方法

中图分类号: TQ 02

文献标志码: A

文章编号: 0438—1157 (2016) 08—3224—10

Comparison of suitability of MOMs in solving CFD-PBM coupling model for FCC riser reactors

LIANG Xiaofei, YAO Ya, LUO Zhenghong

(School of Chemistry and Chemical Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China)

Abstract: A CFD-PBM coupling model was developed to simulate turbulent gas-solid flow in FCC riser reactors with consideration of kinetics of granular flow as well as agglomeration and core breakage of particles. Three representative methods of numerical moments, namely, the quadrature method of moments (QMOM), the direct quadrature method of moments (DQMOM), and the fixed pivot quadrature method of moments (FPQMOM), were used to solve PBEs in the model and the simulation results were evaluated to compare the effect of each numerical method. All three MOMs could predict reasonably both radial and axial distributions of time-averaged volume fraction and velocity of particles in FCC riser reactors. Compared to DQMOM and FPQMOM, QMOM yielded calculations most agreeable to the experimental data with regards to time-averaged solid density distribution, solid mass flux distribution, and axial pressure drop. The study suggested that QMOM could be applied to solve PBEs in CFD-PBM coupling model for such simple structured reactors.

Key words: FCC; CFD; PBM; method of moments

引 言

多分散流化床反应器 (fluidized bed reactor,

FBR) 在现代工业上被广泛使用, 如工业化的烯烃聚合反应体系和流化催化裂化 (fluid catalytic cracking, FCC) 体系大部分在流化床中进行。为了

2016-03-31 收到初稿, 2016-05-16 收到修改稿。

联系人: 罗正鸿。第一作者: 梁晓飞 (1990—), 男, 硕士研究生。

基金项目: 国家重点基础研究发展计划项目 (2012CB21500402);

国家自然科学基金项目 (U1462101)。

Received date: 2016-03-31.

Corresponding author: Prof. LUO Zhenghong, luozh@sjtu.edu.cn

Foundation item: supported by the National Basic Research Program of China (2012CB21500402) and the National Natural Science Foundation of China (U1462101).

能够高效操作和优化多分散流化床反应器，需要对它内部的流体动力学行为准确了解。随着计算机硬件的高速发展，计算流体力学 (computational fluid dynamics, CFD) 逐渐成为一种能够高效预测 FBR 内多相流动行为的重要工具。由于在多分散 FBR 中涉及颗粒的增长、聚并和破碎等行为^[1-3]，颗粒粒径会在一定范围内分布以及变化。因此，为了得到符合真实情况的模拟结果，在该类反应器的 CFD 模拟中必须使用粒径分布 (particle size distribution, PSD) 来表示颗粒相，不能再如传统 CFD 模拟那样只使用单分散分布^[4-8]，而众体平衡方程 (population balance equation, PBE) 是一种能够描述颗粒多分散性的重要工具。PBE 是数密度函数的一种连续形式，可以用来追踪粒径分布在位置空间、时间空间和性质空间上的变化，方程形式非常复杂，包括单变量积分和多变量积分，大部分情况下都只能通过数值方法求解^[9]，而矩方法 (method of moments, MM) 则是一种能够高效求解 PBE 的数值方法，近年来得到了越来越多的研究和应用，并被不断改进和提高。

矩方法由 Hulburt 等^[10]提出，它的基本思想是将 PBE 在内坐标上积分得到矩的输运方程，将直接追踪 PSD 转化为仅仅追踪少量几个低阶矩，所以与 CFD 耦合时只需要添加几个 UDS (4、6、8 个)，计算量相比其他数值方法 (例如直接离散法、蒙特卡洛法) 大大减少。比较常用的矩方法有正交矩方法^[11-13] (quadrature method of moments, QMOM)、直接正交矩方法^[2, 14] (direct quadrature method of moments, DQMOM)、固定轴点正交矩方法^[15] (fixed pivot quadrature method of moments, FPQMOM)、截面正交矩方法^[16] (sectional quadrature method of moments, SQMOM)、条件正交矩方法^[17] (conditional quadrature method of moments, CQMOM)、扩展正交矩方法^[18] (extended quadrature method of moments, EQMOM) 等。QMOM 引入了高斯正交近似，将数密度函数的积分形式转化为以特征横坐标 (abscissas) 和特征权重 (weights) 表示的加和形式，从而简化了方程，而特征横坐标和特征权重则可通过 PD (product-difference) 算法^[19]求得。DQMOM 并不追踪矩随时间的变化，而是直接追踪特征横坐标和特征权值随时间的变化，所以就避免了在每一时间步长内都使用 PD 算法而带来的“反向求解问题”，使得计算效率和稳定性大大增加，同时能够很容易地将其扩展到多变量的体系中。

FPQMOM 在模拟计算前就指定特征横坐标的值，且特征横坐标的值不随模拟时间的变化而变化，这样就能避免计算过程中出现为负值的特征横坐标。然后用一种简单、高效的算法来求解模型中的一个范德蒙德 (Vandermonde) 线性方程组以得到相应的特征权重。该方法理论上可以追踪任意数量的矩。SQMOM 基于一级颗粒 (primary particle) 和次级颗粒 (secondary particle) 的概念，能够同时追踪矩和颗粒的粒径分布的变化。CQMOM 采用了一种不同于 PD 算法的矩反向求解算法，该算法能够确保计算得到的特征权重为非负值。EQMOM 则将颗粒的数密度函数表示成非负的特征权重函数的和，使得在正交节点数较大时也能保证很好的数值精确度。

在课题组以前的工作中，Yao 等^[20]已经模拟比较了 QMOM、DQMOM 和 FPQMOM 在烯烃聚合流化床反应器内的适用性，模拟结果显示：(1) 3 种矩方法都能够预测出合理的压降随时间的变化、时均颗粒体积分数的轴向和径向分布以及稳态时的气相和颗粒相的温度场分布；(2) 固定轴点正交矩方法能够预测出颗粒的聚并速率随着粒径的增大而变大这一符合实际的发展趋势，而正交矩方法和直接正交矩方法则得出了相反的结果；(3) 采用固定轴点正交矩方法时所消耗的 CPU 时间要小于采用正交矩方法和直接正交矩方法时的 CPU 消耗时间，所以该方法的计算效率相对另外两种矩方法更高。聚合体系中气相产物在固相颗粒上生长，颗粒生长对颗粒粒径影响较大^[21]。而在 FCC 体系中原料油与高温催化剂接触、传热并立即汽化，油气分子扩散至颗粒孔道活性中心反应，随后剩余反应物及产物再扩散到气相主体。颗粒生长影响较小，颗粒粒径主要受颗粒间碰撞和颗粒与壁面碰撞聚并破碎影响^[3]。对于典型的多分散流化催化裂化流化床，已经有一些研究者对其进行过 CFD-PBM 耦合模拟研究。例如，Dutta 等^[3]采用 DQMOM 对工业尺度的 FCC 提升管反应器进行了 CFD-PBM 耦合模拟并将模拟结果与工厂数据进行了比较，结果表明使用粒径分布来描述颗粒相所得到的模拟结果能够改善只使用单颗粒分布得到的结果。Li 等^[22]对 FCC 提升管反应器内的湍动气固流动和反应进行了 3D CFD-PBM 耦合模拟，采用了 QMOM 来求解 PBE，结果显示进料入口区域处的流场和温度场是整个反应器内最复杂的，同时还表明了 PSD、颗粒聚并和破碎对提升管内的流场分布有着重要的影响。Li 等^[23]

还使用 QMOM 对 FCC 提升管反应器进行了模拟，研究了进料喷嘴的位置和角度对反应器内动力学行为的影响，结果显示进料喷嘴的角度和进料的速度对其有很大的影响，而进料喷嘴位置的影响则相对较小。但是，以前的工作还没有将 FPQMOM 应用到 FCC 体系中，研究它在 FCC 体系中的适用性。此外，至今尚未有文献通过比较不同矩方法求解结果来研究 FCC 体系的多分散性。

本文采用 2D CFD-PBM 耦合模型对 FCC 提升管中的湍动气固流动进行模拟，比较了分别采用 QMOM、DQMOM 和 FPQMOM 3 种矩方法求解 PBE 得出的模拟结果，并将部分模拟结果同实验数据进行了对比，以研究各矩方法在该体系下的适用性。

1 数学模型和数值模拟

本文所采用的 2D CFD-PBM 耦合模型基于 Benyahia 等^[5]所使用的模型，但是耦合了 PBM，曳力模型采用 EMMS 模型^[24]，3 种矩方法 QMOM、DQMOM 和 FPQMOM 被选择用来求解 PBE。详细的 CFD 模型方程见文献^[5]，下面详细地描述了 PBE 和 3 种矩方法的表达式，同时也给出了聚并、破碎内核的表达式。

1.1 众体平衡方程 (PBE)

PBE 的一般形式表示如下

$$\frac{\partial n(L;t)}{\partial t} + \nabla \cdot [un(L;t)] = -\frac{\partial}{\partial L} [G(L)n(L;t)] + B_{ag}(L;t) - D_{ag}(L;t) + B_{br}(L;t) - D_{br}(L;t) \quad (1)$$

矩的概念首先由 Hulburt 等^[10]引入，定义如下

$$m_k(t) = \int_0^\infty n(L;t)L^k dL \quad (k=0,1,\dots,N-1) \quad (2)$$

Sauter 直径 (d_{32}) 被用来表示颗粒的平均粒径

$$d_{32} = \frac{m_3}{m_2} \quad (3)$$

将式 (2) 代入式 (1) 中得到

$$\frac{\partial m_k}{\partial t} + \nabla \cdot (um_k) = -\int_0^\infty kL^{k-1}G(L)n(L;t)dL + B_{ag}(t) - D_{ag}(t) + B_{br}(t) - D_{br}(t) \quad (4)$$

1.2 不同的矩方法

1.2.1 正交矩方法 (QMOM) QMOM 引入如下的高斯正交近似^[11-13]

$$m_k = \int_0^\infty n(L;t)L^k dL \approx \sum_{i=1}^N w_i L_i^k \quad (5)$$

其中 w_i 和 L_i 使用 PD 算法从 $2N$ 阶矩求得^[19]。通过引入正交近似，数密度函数的积分形式转

变为加和形式，式(4)变为如下的形式

$$\frac{\partial m_k}{\partial t} + \nabla \cdot (um_k) = k \sum_{i=1}^N L_i^{k-1} G(L_i) w_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N w_i \sum_{j=1}^N w_j (L_i^3 + L_j^3)^{k/3} \beta_{i,j} - \sum_{i=1}^N L_i^k w_i \sum_{j=1}^N w_j \beta_{i,j} + \sum_{i=1}^N w_i a_i b_i - \sum_{i=1}^N L_i^k w_i a_i \quad (6)$$

$\beta_{i,j} = \beta(L_i, L_j)$, $a_i = a(L_i)$, $b_i = \int_0^\infty L^k b(L|L_i) dL$ 分别是

聚并内核、破碎频率和子碎片分布函数。

1.2.2 直接正交矩方法 (DQMOM) DQMOM 是在矩变换前引入高斯近似，直接追踪权重 w_i 和权重横坐标 ζ_i ($\zeta_i = L_i w_i$)，所以在模拟过程中不再使用 PD 算法 (第 1 个迭代步除外)，可以避免 PD 算法带来的问题。 w_i 和 ζ_i 的输运方程表示如下^[2, 14]

$$\frac{\partial \omega_i}{\partial t} + \nabla \cdot (u \cdot \omega_i) = a_i \quad (7)$$

$$\frac{\partial \zeta_i}{\partial t} + \nabla \cdot (u \cdot \zeta_i) = b_i \quad (8)$$

其中源项 a_i 和 b_i 通过求解如下线性方程组得到

$$A\alpha = d \quad (9)$$

其中系数 $A=[A_1 A_2]$ 是一个 $2N \times 2N$ 阶矩阵，表示如下

$$A_1 = \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \\ 0 & \dots & 0 \\ -L_1^2 & \ddots & -L_N^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 2(1-N)L_1^{2N-1} & \dots & 2(1-N)L_N^{2N-1} \end{bmatrix} \quad (10)$$

$$A_2 = \begin{bmatrix} 0 & \dots & 0 \\ 1 & \dots & 1 \\ 2L_1 & \ddots & 2L_N \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ (2N-1)L_1^{2N-2} & \dots & (2N-1)L_N^{2N-2} \end{bmatrix} \quad (11)$$

在式(9)中

$$\alpha = [a_1 \dots a_N, b_1 \dots b_N]^T = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \quad (12)$$

$$d = [S_0^{(N)} \dots S_{2N-1}^{(N)}]^T \quad (13)$$

其中 k ($k=2N-1$) 阶矩的源项 $S_{2N-1}^{(N)}$ 表示如下

$$S_k^{(N)} = \int_0^\infty L^k S(L;t) dL \quad (14)$$

式(14)中的源项和 QMOM 中的一样，表示如下

$$S_k^{(N)} = k \sum_{i=1}^N L_i^{k-1} G(L_i) w_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N w_i \sum_{j=1}^N w_j (L_i^3 + L_j^3)^{k/3} \beta_{i,j} - \sum_{i=1}^N L_i^k w_i \sum_{j=1}^N w_j \beta_{i,j} + \sum_{i=1}^N w_i a_i b_i - \sum_{i=1}^N L_i^k w_i a_i \quad (15)$$

1.2.3 固定轴点正交矩方法 (FPQMOM) 固定轴点正交矩方法对颗粒数密度函数采用如下的近似^[15]

$$n(V;t) = \sum_{i=1}^N \omega_i(t) \delta(V - V_i) \quad (16)$$

其中 V_i 被指定为 N 阶拉盖尔-高斯零点，在整个模拟过程中保持不变。必须要指出，式(16)中对数密度函数所用的近似方法虽然和 QMOM 中的看上去形式相似，但是却有本质上的差别。

根据式(16)的近似方法， k 阶矩可以表示成

$$m_k(t) = \sum_{i=1}^N \omega_i(t) V_i^k \quad (17)$$

式(17)可以写成如下的矩阵形式

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ V_1 & V_2 & \dots & V_N \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ V_1^{N-1} & V_2^{N-1} & \dots & V_N^{N-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \omega_1(t) \\ \omega_2(t) \\ \vdots \\ \omega_N(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_0(t) \\ m_1(t) \\ \vdots \\ m_{N-1}(t) \end{bmatrix} \quad (18)$$

式(18)是范德蒙德方程组。然而它的系数矩阵很明显是病态的，如果直接求解会导致结果精确度很差。因此，选用了一种特殊的算法来求解它以获得 w_i [25]。

FPQMOM 中矩的输运方程表示如下

$$\begin{aligned} \frac{\partial m_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} m_k) &= k \sum_{i=1}^N V_i^{k-1} G(V)_i w_i + \\ &\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N w_i \sum_{j=1}^N w_j (V_i + V_j)^k \beta_{i,j} - \\ &\sum_{i=1}^N V_i^k w_i \sum_{j=1}^N w_j \beta_{i,j} + \sum_{i=1}^N w_i a_i b_i - \sum_{i=1}^N V_i^k w_i a_i \end{aligned} \quad (19)$$

1.3 介观尺度行为内核

1.3.1 聚并内核 本文所使用的聚并内核和前面工作中所使用的一样 [20]

$$\beta_{i,j} = KK (L_i + L_j)^2 \sqrt{\frac{1}{L_i^3} + \frac{1}{L_j^3}} \quad (20)$$

量纲 1 系数 KK 是颗粒温度的函数

$$KK = kk_1 \exp(kk_2 T_s / T_{st}) \quad (21)$$

其中 $kk_1 = 4.0 \times 10^{-10}$, $kk_2 = 3.85$ 。

1.3.2 破碎内核 本文所用的破碎内核选择 Ghadiri 模型，表达式如下

$$a_i = \frac{\rho_s E^{2/3}}{r^{5/3}} v^2 L^{5/3} = K_b v^2 L^{5/3} \quad (22)$$

其中 K_b 是破碎常数，在本文中的值为 6.703×10^{13} 。子碎片分布函数 (PDF) 为

$$b_i^{(k)} = \frac{L_i^k \cdot 4^{k/3}}{5^{k/3}} \quad (23)$$

1.4 CFD-PBM 耦合方法

为了描述颗粒数密度函数的变化，将 PBM 耦合进 CFD 模型中。图 1 是本文所使用的 CFD-PBM 模型的耦合方法示意图，在每一个时间步长内，在

CFD 模型中，通过求解质量守恒方程、动量守恒方程和能量守恒方程获得颗粒体积分数、颗粒速度和颗粒温度，然后这些值被传递到 PBM 中以计算颗粒的聚并内核和破碎内核，接着求解 PBE 得到 Sauter 直径并传回到 CFD 模型中以修正相间力，进入下一个时间步长。这样，一个完整的 CFD-PBM 耦合过程就建立起来了，CFD 和 PBM 能够起到相互促进的作用。

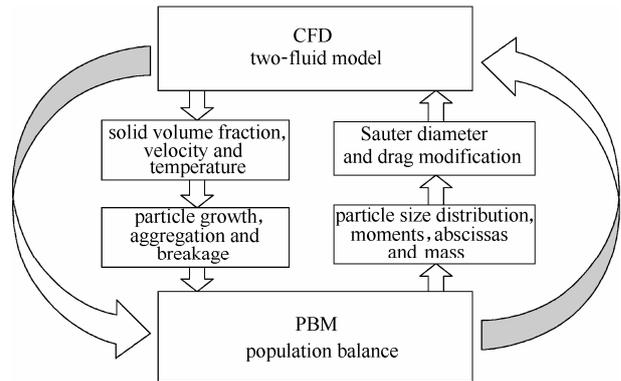


图 1 CFD-PBM 耦合模型示意图
Fig.1 CFD-PBM coupled model

2 建模对象和方法

2.1 模拟的反应器

图 2 表示的是本文所模拟的提升管反应器 [5]，但是由于提升管的高径比太大，为了显示出全部的细节，图 2 并不是等比例缩放。如图所示，提升管高 14.2 m，内径 0.2 m，底部以 $5.2 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ 的速度均匀进气体，距离底部 0.3 m 处的两边壁面各有一个直径为 0.1 m 的进口，以 $0.476 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ 的速度同时进气体和固体，气体和固体从距离顶部 0.3 m 处的左右对称的两个直径 0.1 m 的出口离开反应器。

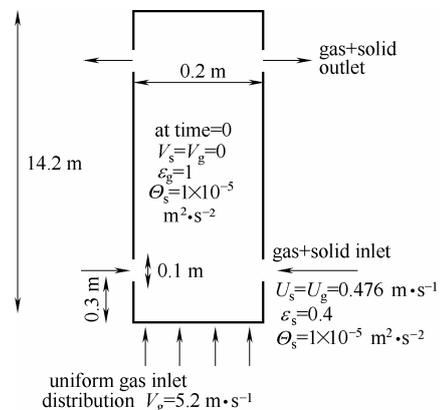


图 2 反应器结构
Fig.2 Reactor configuration

2.2 模拟条件和方法

本文所用 2D CFD-PBM 耦合模型的大部分参数见表 1 和表 2。颗粒的初始 PSD 见图 3，初始平均粒径为 7.6075×10^{-5} m。在 QMOM 和 DQMOM 中，正交节点数 N 取 3 既能得到较高的精确度又能使计算消耗量在可接受的范围内^[2, 11]。而在 FPQMOM 中 N 的值取 6，6 阶高斯-拉盖尔零点的值为 {0.22284659, 1.1889321, 2.9927363, 5.7751436, 9.8374323, 15.982909}，然而根据本文体系的性质，选取 {0.000022284659, 0.00011889321, 0.00029927363, 0.00057751436, 0.00098374323, 0.0015982909} 作为 6 阶特征体积的值。

表 1 主要物性参数

Table 1 Main physical parameters

Parameter	Values
solid	
density, $\rho_s/\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	1712
diameter, d_s/m	Sauter
gas	
density, $\rho_g/\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	1.2
viscosity, $\mu_g/\text{Pa} \cdot \text{s}$	2.0×10^{-5}

表 2 主要模型参数

Table 2 Main model parameters

Descriptions	Values
turbulence model	$k-\epsilon$ (RNG, dispersed)
granular viscosity	Gidaspow ^[26]
granular bulk viscosity	Lun <i>et al.</i> ^[27]
frictional viscosity	Schaeffer ^[28]
angle of internal friction	30°
granular temperature	algebraic
inlet boundary condition	velocity inlet
outlet boundary condition	pressure outlet
wall boundary condition	no slip for air, part slip for solid
inlet gas velocity/ $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	5.2
inlet particle velocity/ $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$	0.476
inlet volume fraction of particle	0.6
particle-particle restitution coefficient	0.95
particle-wall restitution coefficient	0.90
turbulent kinetic energy/ $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2}$	0.06876
turbulent dissipation rate/ $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-3}$	0.01481
maximum iterations	50
convergence criteria	1×10^{-3}
time step/s	1×10^{-3}

本文的 2D CFD-PBM 模拟是在商业 CFD 软件 FLUENT 6.3.26 (Ansys Inc., US) 的双精度模式下进行的。离散格式采用一阶迎风以获得更快的计算速度。相耦合 SIMPLE 算法被用来求解离散方

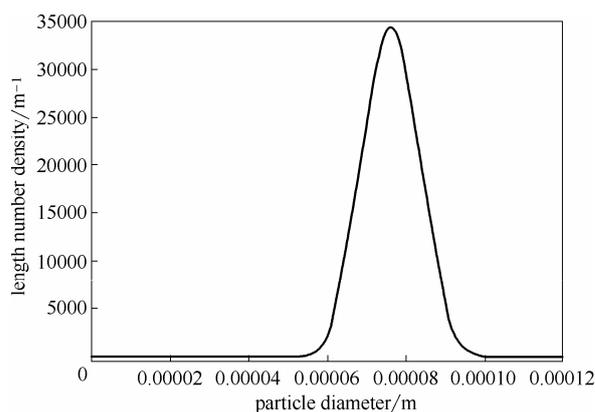


图 3 初始粒径分布

Fig.3 Initial PSD profile

程组^[29]。EMMS 曳力模型^[24]、DQMOM、FPQMOM 和各个源项都通过 UDF (user defined functions) 和 UDS (user defined scalars) 定义并耦合到 FLUENT 中。为了得到更加准确的结果，特别地对文献[5]中的网格进行了加密，径向上为 18 个均匀网格，轴向上为 383 个非均匀网格，总网格数为 6894。此外，本文模拟都是在型号为 Intel Pentium G630, CPU 主频 2.70 GHz, 内存 4GB 的平台上进行。

3 结果与讨论

这一部分分别比较了使用 3 种矩方法时, Sauter 直径随时间的变化、时均轴向颗粒密度分布、时均轴向颗粒质量流率分布、时均压降随床层高度变化、不同高度截面上时均颗粒体积分数和时均颗粒速度的分布、时均颗粒体积分数和时均颗粒速度随床层高度变化。用来进行对比的实验数据取自文献[5], 所用的时均值都取 15~30 s。

3.1 平均粒径随时间的变化

图 4 是使用 3 种不同矩方法时, 反应器内颗粒的平均粒径随时间的变化。由图可以看出, 在 FCC 体系中, 由于破碎作用, 颗粒的粒径逐渐下降, 同时这个下降趋势随着时间的推移趋于平缓。使用 QMOM 时, 粒径下降的幅度比较小, 而在使用 DQMOM 和 FPQMOM 的条件下, 粒径变化的趋势较相似, 下降的幅度都要比使用 QMOM 的大。3 种矩方法在源项处理上的差别造成了不同的平均粒径变化趋势。QMOM 运用了 PD 算法实现矩向特征属性和权值的非线性转换; DQMOM 在矩变换前引入高斯近似, 直接追踪权重 w_i 和权重横坐标 ζ_i , 在模拟过程中不再使用 PD 算法(第 1 个迭代步除外); FPQMOM 中矩向特征属性和权值的转换方程是线性方程, 运用了 Vandermonde 线性系统的专门求解

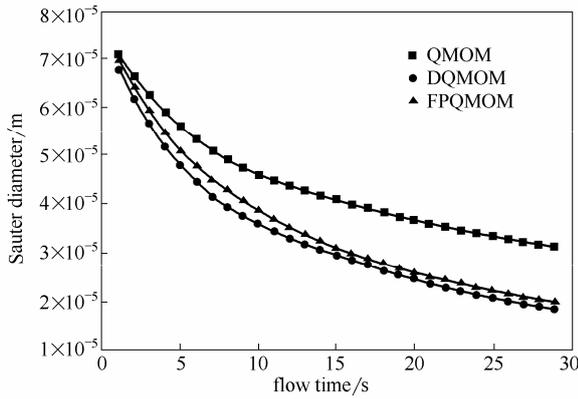


图 4 采用 3 种矩方法时预测得到的颗粒 Sauter 直径随时间的变化

Fig.4 Evolution of Sauter diameter versus time predicted by QMOM, DQMOM and FPQMOM

算法。

3.2 时均径向颗粒密度的分布

图 5 是使用 3 种不同矩方法时，时均颗粒密度在 3.9 m 高度平面上的径向分布以及和实验数据的对比。由图可知，颗粒的分布呈现流化床中典型的“core-annulus”分布^[30]，在靠近壁面处密度较大，而在中心区域则密度较小。使用 QMOM 得到的模拟颗粒密度整体要高于 DQMOM 和 FPQMOM 所得到的值，同时，在靠近壁面处，QMOM 计算得到的颗粒密度的值相比 DQMOM 和 FPQMOM 要更加接近实验值；但是在中心区域，DQMOM 和 FPQMOM 得到的颗粒密度则要比 QMOM 所得到的值更加接近实验数据。总体来说，三者都能得到比较准确的结果。此外，本文所得到的颗粒密度分布相比 Benyahia 等^[5]所得到的分布（见文献[5]的图 2）有些不同，Benyahia 等得到的分布在靠近壁面 0.3 m 处有一个下降的趋势，而本文所得到的结果则没有

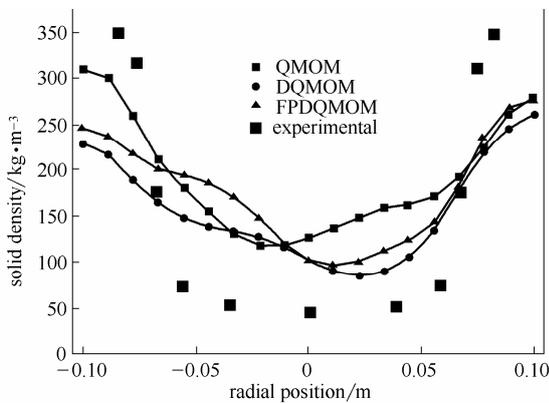


图 5 时均固相密度分布模拟值与实验值对比

Fig.5 Time-averaged solid density distribution in riser at 3.9 m compared with experimental data

这一下降趋势，这也和实验测得的趋势相一致，验证了 Benyahia 等^[5]的结论：使用多分散颗粒相比单分散颗粒在靠近壁面处会得到更高的颗粒浓度。这是由于本文耦合了 PBM 模型，颗粒粒径逐渐下降，这更符合 FCC 体系的性质，所以能够得到更加真实的结果。

3.3 时均径向颗粒质量流率的分布

图 6 是使用 3 种不同矩方法时，时均颗粒质量流率在 3.9 m 高度平面上的径向分布以及和实验数据的对比。从图中可以看出颗粒的质量流率也呈现“core-annulus”分布^[30]，在中心区域，虽然颗粒的密度较小，但由于颗粒的轴向速度很大，所以流率也很大，而在靠近壁面处由于颗粒的浓度很大，容易凝聚成团，所以速度为负值，颗粒处于下落状态。此外，使用 QMOM 和 FPQMOM 计算得到的颗粒质量流率相比 DQMOM 得到的值更加接近实验值，DQMOM 预测得到的颗粒质量流率的径向分布非

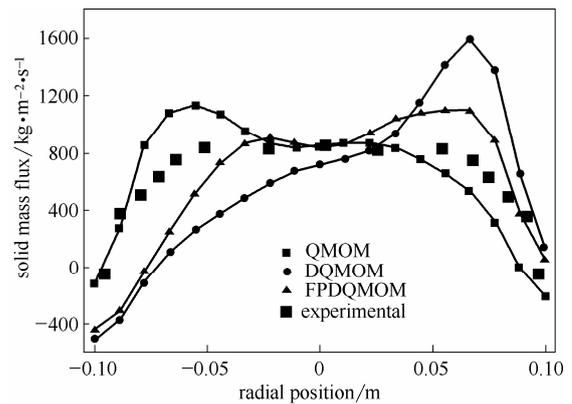


图 6 时均固相质量通量分布模拟值与实验值对比

Fig.6 Time-averaged solid mass flux distribution in riser at 3.9 m compared with experimental data

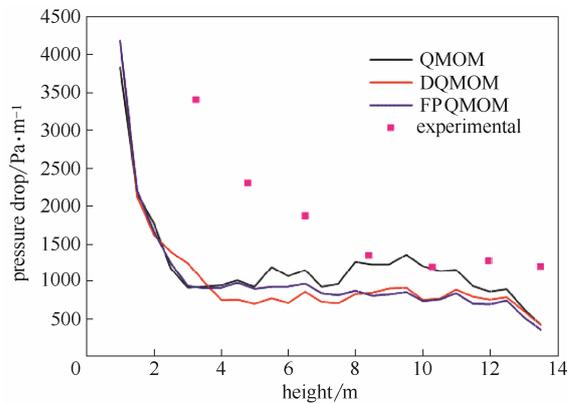
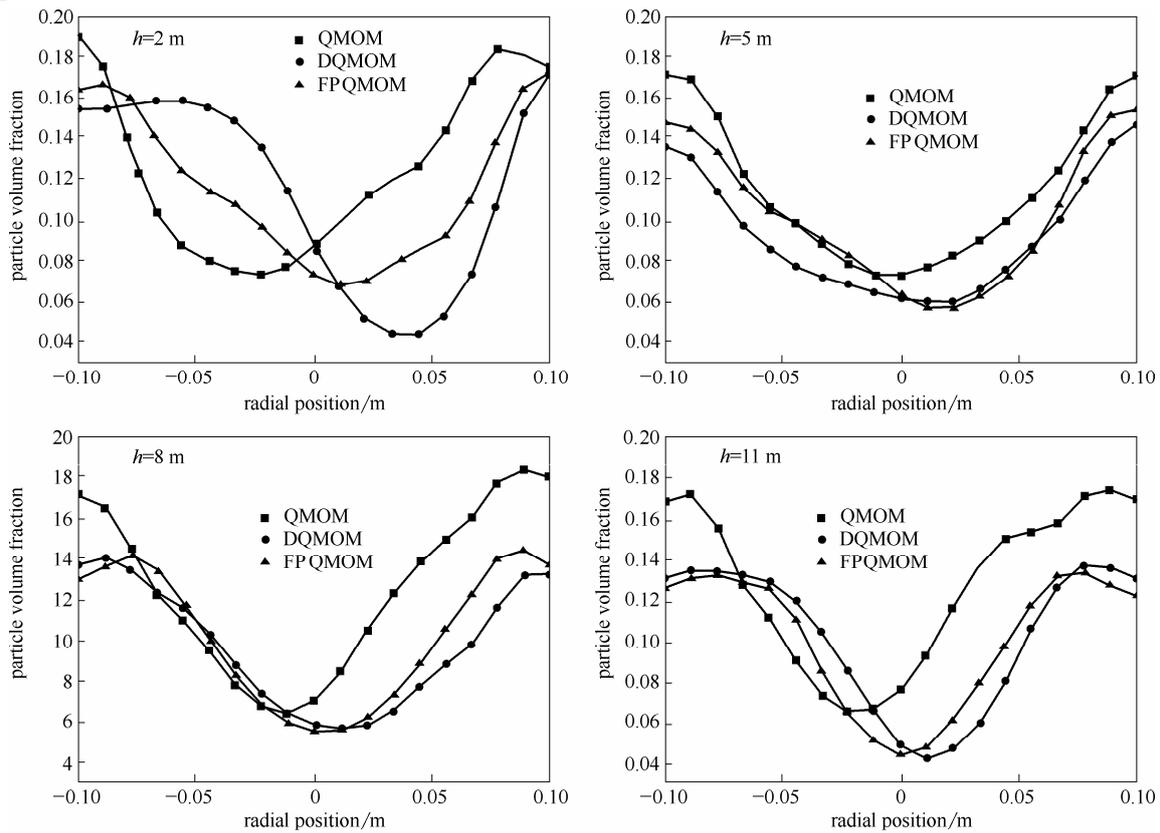
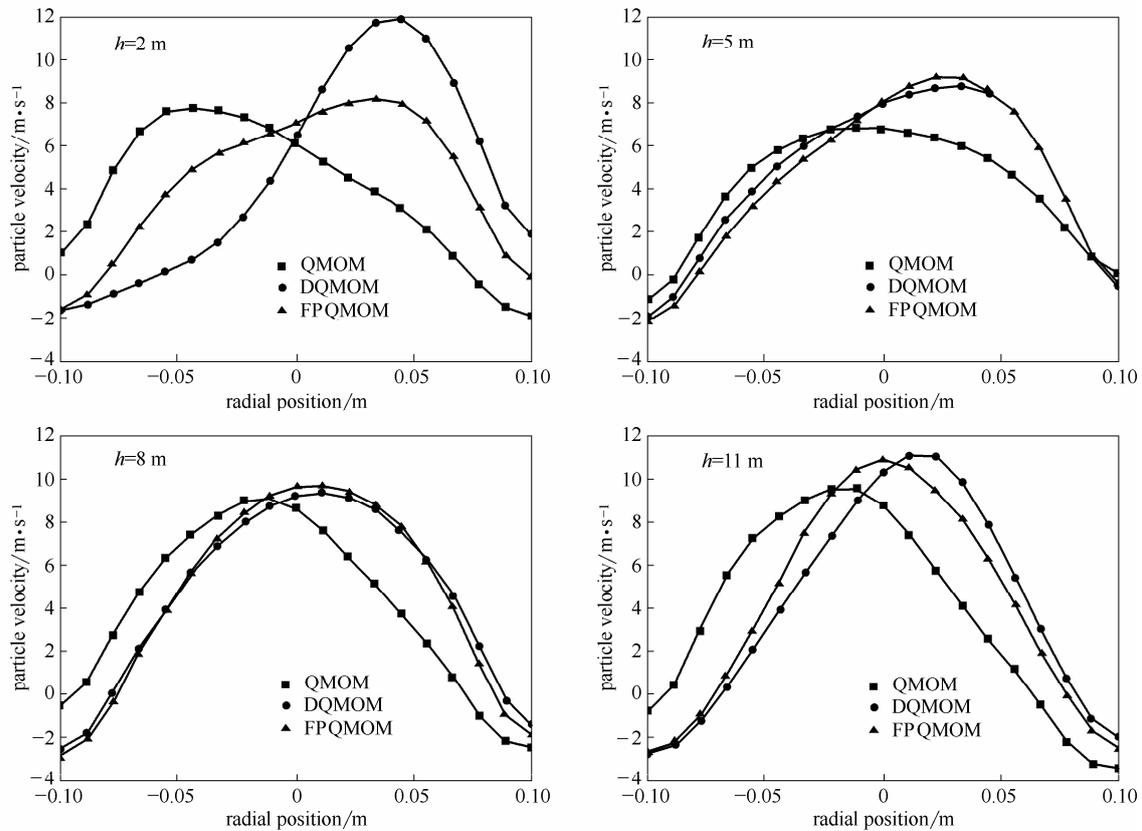


图 7 提升管时均轴向压降模拟值与实验值对比

Fig.7 Time-averaged axial pressure drop in riser compared with experimental data



(a) time-averaged particle volume fraction



(b) time-averaged particle velocity radial distribution

图 8 不同床层高度时均颗粒体积分数和时均颗粒径向速度分布

Fig.8 Time-averaged particle volume fraction and particle velocity radial distribution at different height profile

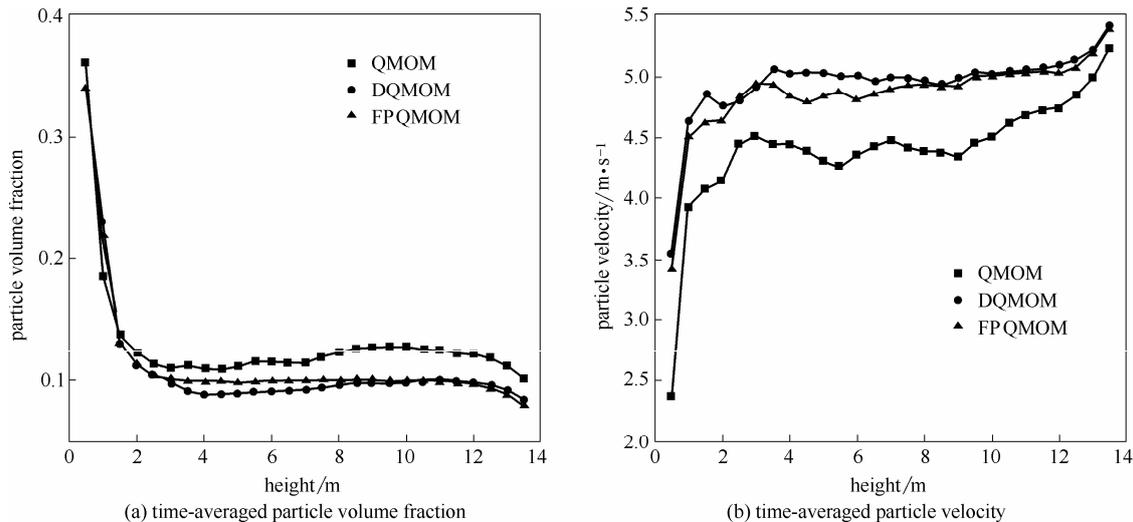


图 9 时均颗粒体积分数和时均颗粒速度沿轴向变化

Fig.9 Time-averaged axial variation of particle volume fraction and particle velocity

常不对称, 不符合实际流化情况。

3.4 时均压降随高度的变化

图 7 是 3 种矩方法预测得到的时均压降的轴向分布曲线并与实验测得的压降值的对比。由图可以看出在反应器底部的压降较大, 这是由于底部颗粒入口的作用, 使得颗粒浓度较大, 压降也较大。而后随着反应器高度的增加, 颗粒浓度的下降, 使得压降也逐渐下降。3 种矩方法预测得到的压降曲线比较类似, 床层高度较低时 (0~5 m) 计算值与实验值偏差较大, 高度较高时 (5~11 m) QMOM 计算得到的压降要大于 DQMOM 和 FPQMOM, 更加接近实验值, 这是因为使用 QMOM 计算得到的颗粒体积分数在此高度范围内的值较大[图 9(a)]。总的来说, QMOM 能够得到更加准确的轴向压降分布。

3.5 不同高度截面上颗粒体积分数和颗粒速度的径向分布

图 8 是使用 3 种矩方法时, 模拟得到的时均颗粒体积分数和颗粒轴向速度在不同高度截面上的径向分布。由图 8 (a) 可以看出, 使用 QMOM 计算得到的时均颗粒体积分数整体较大, 并且在高度较高时超过 DQMOM 和 FPQMOM 计算得到的值的幅度更大。由图 8 (b) 可知, QMOM 预测得到的时均颗粒速度比 DQMOM 和 FPQMOM 预测得到的值更小, 这是因为 QMOM 模拟得到的颗粒粒径更大 (图 4), 所以速度自然也就更小了。总的来说, 3 种矩方法都能预测出合理的颗粒体积分数和颗粒速度的径向分布, 都呈现“core-annulus”分布^[30], 这也符合一般的流化规律。

3.6 颗粒体积分数和颗粒速度随反应器高度的变化

图 9 是使用 3 种矩方法时, 模拟得到的时均颗粒体积分数和时均颗粒轴向速度的面平均值沿轴向高度的变化。由图 9(a)可以看出, QMOM 预测得到的颗粒体积分数比 DQMOM 和 FPQMOM 得到的值更大, 且在高度较高时更显著。这也能更直观地表明图 8(a)的结论。由图 9(b)可知, 使用 QMOM 得到的颗粒速度要小于使用另外两种矩方法所得到的值, 这也同样更加直观地表明了图 8(b)的结论。总的来说, 3 种矩方法都能得出合理的颗粒体积分数和颗粒速度沿反应器轴向高度的变化。

4 结 论

针对 FCC 提升管中的气-固两相流动, 分别使用 QMOM、DQMOM 和 FPQMOM 作为求解 PBE 的矩方法, 并比较了使用 3 种不同矩方法时的模拟结果的异同。结果表明: (1) QMOM 计算得到的颗粒粒径要大于 DQMOM 和 FPQMOM 所计算得到的值; (2) 在 3.9 m 高的截面上, 使用 QMOM 相比 DQMOM 和 FPQMOM 预测得到的时均颗粒体积分数在靠近壁面处更加接近实验值, 而在中心区域则要偏离实验值, 同时 QMOM 和 FPQMOM 预测得到的时均颗粒速度相比 DQMOM 要更加符合实际; (3) 床层高度较低时 (0~5 m), 3 种矩方法预测得到的时均压降轴向分布与实验值偏差较大, 高度较高时 (5~11 m) QMOM 计算得到的压降要大于 DQMOM 和 FPQMOM, 更加接近实验值; (4) 整

个反应器内, QMOM 相比 DQMOM 和 FPQMOM 能够计算得到更大的时均颗粒体积分数和更小的时均颗粒速度。

整体而言, QMOM 计算得到值更加接近实验值。这是由于所用模型还较简单, 没有涉及反应器内部更加复杂的过程, 其中分散相速度对内坐标依赖关系并不十分强烈, 并且 PD 算法对该单个内坐标体系求解误差较小, 所以作为一种最经典的矩方法, QMOM 完全能够胜任描述这一过程的任务。对于更加复杂的 FCC 体系中各矩方法的适用性, 将在接下来的工作中进一步探讨。

符 号 说 明

- B_{ag} —— 聚并引起的颗粒生成速率, s^{-1}
 B_{br} —— 破碎引起的颗粒生成速率, s^{-1}
 D_{ag} —— 聚并引起的颗粒消亡速率, s^{-1}
 D_{br} —— 破碎引起的颗粒消亡速率, s^{-1}
 d_s —— 颗粒直径, m
 d_{32} —— Sauter 直径, m
 G —— 颗粒生长速率, $m \cdot s^{-1}$
 k —— 矩的数量
 L, L_i, L_j —— 颗粒直径, m
 L_0 —— 初始颗粒直径, m
 m_k —— k 阶矩数密度函数
 N —— 正交节点数
 T_s —— 固相温度, K
 V_i —— 特征体积, m^3
 β —— 相间动量传递系数, $kg \cdot m^{-3} \cdot s^{-1}$
 ρ_g —— 气相混合物密度, $kg \cdot m^{-3}$
 ρ_s —— 固相密度, $kg \cdot m^{-3}$

References

- [1] 洪定一. 聚丙烯——原理、工艺与技术[M]. 北京: 中国石化出版社, 2002.
HONG D Y. Theory, Process and Technology for Polypropylene [M]. Beijing: China Petrochemical Press, 2002.
- [2] FAN R, MARCHISIO D L, FOX R O. Application of the direct quadrature method of moments to polydisperse gas-solid fluidized beds [J]. Powder Technol., 2004, **139**(1): 7-20.
- [3] DUTTA A, CONSTALES D, HEYNDERICKX G J. Applying the direct quadrature method of moments to improve multiphase FCC riser reactor simulation [J]. Chem. Eng. Sci., 2012, **83**(49): 93-109.
- [4] MCKEEN T, PUGSLEY T. Simulation and experimental validation of a freely bubbling bed of FCC catalyst [J]. Powder Technol., 2003, **129**(1/2/3): 139-152.
- [5] BENYAHIA S, ARASTOPOUR H, KNOWLTON T M, *et al.* Simulation of particles and gas flow behavior in the riser section of a circulating fluidized bed using the kinetic theory approach for the particulate phase [J]. Powder Technol., 2000, **112**(1/2): 24-33.
- [6] BENYAHIA S, ARASTOPOUR H, KNOWLTON T M. Two-dimensional transient numerical simulation of solids and gas flow in the riser section of a circulating fluidized bed [J]. Chem. Eng. Commun., 2002, **189**(4): 510-527.
- [7] CHEN X Z, SHI D P, GAO X, *et al.* A fundamental CFD study of the gas-solid flow field in fluidized bed polymerization reactors [J]. Powder Technol., 2011, **205**(1): 276-288.
- [8] SHI D P, LUO Z H, GUO A Y. Numerical simulation of the gas-solid flow in fluidized-bed polymerization reactors [J]. Ind. Eng. Chem. Res., 2010, **49**(9): 4070-4079.
- [9] GU Z, SU J, YUN L. Behaviors of the dispersed phase in the multiphase system and population balance model [J]. Chem. React. Eng. Technol., 2007, **23**(2): 162-167.
- [10] HULBURT H M, KATZ S. Some problems in particle technology: a statistical mechanical formulation [J]. Chem. Eng. Sci., 1964, **19**(8): 555-574.
- [11] MARCHISIO D L, VIGIL R D, FOX R O. Quadrature method of moments for aggregation-breakage processes [J]. J. Colloid Interface Sci., 2003, **258**(2): 322-334.
- [12] MARCHISIO D L, PIKTURNA J T, FOX R O, *et al.* Quadrature method of moments for population-balance equations [J]. AIChE J., 2003, **49**(5): 1266-1276.
- [13] MARCHISIO D L, VIGIL R D, FOX R O. Implementation of the quadrature method of moments in CFD codes for aggregation-breakage problems [J]. Chem. Eng. Sci., 2003, **58**(15): 3337-3351.
- [14] MARCHISIO D L, FOX R O. Solution of population balance equations using the direct quadrature method of moments [J]. J. Aerosol Sci., 2005, **36**(1): 43-73.
- [15] GU Z, SU J, JIAO J, *et al.* Simulation of micro-behaviors including nucleation, growth, and aggregation in particle system [J]. Sci. China Ser. B Chem., 2009, **52**(2): 241-248.
- [16] ATTARAKIH M M, DRUMM C, BART H-J. Solution of the population balance equation using the sectional quadrature method of moments (SQMOM) [J]. Chem. Eng. Sci., 2009, **64**(4): 742-752.
- [17] YUAN C, FOX R O. Conditional quadrature method of moments for kinetic equations [J]. J. Comput. Phys., 2011, **230**(22): 8216-8246.
- [18] YUAN C, LAURENT F, FOX R O. An extended quadrature method of moments for population balance equations [J]. J. Aerosol Sci., 2012, **51**(51): 1-23.
- [19] GORDON R G. Error bounds in equilibrium statistical mechanics [J]. J. Math. Phys., 1968, **9**(5): 655-663.
- [20] YAO Y, SU J W, LUO Z H. CFD-PBM modeling polydisperse polymerization FBRs with simultaneous particle growth and aggregation: the effect of the method of moments [J]. Powder Technol., 2015, **272**: 142-152.
- [21] YAN W C, LUO Z H, LU Y H, *et al.* A CFD-PBM-PMLM integrated model for the gas-solid flow fields in fluidized bed polymerization reactors [J]. AIChE J., 2012, **58**(6): 1717-1732.
- [22] LI J, LUO Z H, LAN X Y, *et al.* Numerical simulation of the turbulent gas-solid flow and reaction in a polydisperse FCC riser reactor [J]. Powder Technol., 2013, **237**(3): 569-580.
- [23] LI J, FAN Y P, LU C X, *et al.* Numerical simulation of influence of feed injection on hydrodynamic behavior and catalytic cracking reactions in a FCC riser under reactive conditions [J]. Ind. Eng. Chem. Res., 2013, **52**(32): 11084-11098.

- [24] YANG N, WANG W, GE W, *et al.* Simulation of heterogeneous structure in a circulating fluidized-bed riser by combining the two-fluid model with the EMMS approach [J]. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2004, **43**(18): 5548-5561.
- [25] GOLUB G H, VANLOAN C F. *Matrix Computations* [M]. 3rd ed. Baltimore: The Johns Hopkins Univ. Press, 1996.
- [26] GIDASPOW D. *Multiphase Flow and Fluidization: Continuum and Kinetic Theory Descriptions* [M]. Boston: Academic Press, 1994.
- [27] LUN C K K, SAVAGE S B, JEFFREY D J, *et al.* Kinetic theories for granular flow: inelastic particles in Couette flow and slightly inelastic particles in a general flowfield [J]. *J. Fluid Mech.*, 1984, **140**: 223-256.
- [28] SCHAEFFER D G. Instability in the evolution equations describing incompressible granular flow [J]. *J. Differ. Equ.*, 1987, **66**(1): 19-50.
- [29] PATANKAR S V. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow* [M]. Hemisphere Publishing Corporation, 1980.
- [30] LOHA C, CHATTOPADHYAY H, CHATTERJEE P K. Assessment of drag models in simulating bubbling fluidized bed hydrodynamics [J]. *Chem. Eng. Sci.*, 2012, **75**(25): 400-407.