



基于离散元法的催化剂密相装填过程数值模拟

潘 兵, 刘雪东, 刘文明, 卢 洲

(常州大学 机械工程学院, 江苏 常州 213016)

摘要: 基于颗粒离散元法, 对一种椭圆形密相装填器的催化剂密相装填过程进行数值模拟研究, 分析布料盘转速和颗粒直径对装填过程的影响。结果表明: 催化剂颗粒装填速度不等于布料盘上方料斗下料速度, 而是随着布料盘转速增大而增大, 随颗粒直径增大而减小。催化剂颗粒在反应器底部分布的直径范围与颗粒直径大小无关, 它随着布料盘转速增大而增大。颗粒与反应器的碰撞是造成颗粒破碎的主要因素。利用该设备装填球形催化剂颗粒时, 催化剂床层中心会出现凹陷现象, 当颗粒直径较小时, 床层中心附近会出现驼峰状的凸起。

关键词: 催化剂; 密相装填; 离散元法; 数值模拟

中图分类号: TQ022.8

文献标志码: A

文章编号: 1008-5548(2011)06-0032-06

Numerical Simulation of Catalyst Dense Loading Based on Discrete Element Method

Pan Bing, Liu Xuedong, Liu Wenming, Lu Zhou

(College of Mechanical Engineering, Changzhou University,
Jiangsu 213016, China)

Abstract: The catalyst dense loading of an oval loading device was simulated based on the basic principle of discrete element method (DEM). The effects of rotational speed of the loader and the radius of the catalyst particles were analyzed. The results showed that the catalyst loading speed was not equal to outflow speed of the hopper, it increased with the increasing of the rotational speed of the loader and decreased with increasing of the radius of the particles. The distribution radius of catalyst in the bottom of the reactor was independent with particle size but increased with the increasing of the rotational speed of the loader. The collisions between particles and the reactor were the main factor to cause breakage. It was also observed when using this device to load spherical catalyst particles that there would be a hollow near the center of catalyst bed and when the particle size was small, there would be a hump-shaped bulge around the center of the catalyst bed.

Key words: catalyst; dense loading; discrete element method; numerical simulation

在石油化工、能源开发、环境保护等现代工业工

收稿日期: 2011-06-16, 修回日期: 2011-07-21。

第一作者简介: 潘兵(1987-), 男, 硕士研究生, 研究方向为过程机械及其控制、粉体工程技术及应用。E-mail: barrybing_313@qq.com。

通信作者: 刘雪东(1965-), 男, 教授, 从事过程装备结构可靠性与完整性、粉体技术及应用等方面研究。E-mail: lxd99@126.com。

程领域中, 催化剂应用非常广泛。研究发现, 催化剂的装填过程对其催化性能和使用寿命极为重要, 催化剂床层是否架桥, 床层高度是否一致将会影响床层的堆密度和压力降的均一性, 从而影响催化剂的效率和装置长周期安全高效的运行^[1]。催化剂密相装填使用专门的密相装填设备, 将催化剂颗粒沿反应器径向抛撒, 使催化剂均匀地落下, 当催化剂颗粒到达床层表面时, 仍具有一定的动能, 直到降至最小体积时, 催化剂颗粒才在床层静止下来。相比普通装填, 它能够降低床层孔隙率, 提高催化剂装填密度, 增加反应器的处理能力, 并且可以改善床层温度分布, 减少沟流现象的发生^[2], 因此, 关于催化剂密相装填的研究越来越受到石油化工企业及研究单位的重视。

由于颗粒运动的高速性、离散性和随机性等特点, 它们不能由传统的研究方法准确描述。离散元法 (DEM) 是一种颗粒离散体物料分析方法^[3]。经过几十年不断深入研究与发展, 离散元法在粉体工程应用领域中发挥了其它数值算法不可替代的作用, 被广泛地应用于粉体在复杂物理场作用下的复杂动力学行为的研究和多相混合材料介质或具有复杂结构的材料其力学特性的研究中^[4-5]。它涉及到粉体的填充与堆积^[6-8]、颗粒的团聚与破碎^[9]以及颗粒干燥、混合和搅拌等工业加工和粮食等颗粒离散体的仓储和运输等生产实践领域中^[10-15]。但是迄今为止, 对催化剂密相装填过程进行离散元模拟研究还没有涉及, 本文中基于离散元法, 通过离散元软件对催化剂密相装填过程进行仿真模拟, 分析装填过程中布料盘转速和粒径对催化剂装填过程的影响。

1 数学模型和模拟说明

1.1 数学模型

离散单元法的颗粒模型是将颗粒与颗粒、颗粒与边界的接触采用振动运动方程进行模拟。将颗粒接触过程的振动运动进行法向和切向分解, 颗粒接触过程的法向振动运动方程^[16]为:

$$\frac{m_{1,2}d^2u_n}{dt^2} + \frac{c_n du_n}{dt} + K_n u_n = F_n \quad (1)$$

颗粒接触过程的切向振动运动表现为切向滑动与颗粒的滚动为：

$$\frac{m_{1,2}d^2u_s}{dt^2}+\frac{c_sdu_s}{dt}+K_su_s=F_s,$$

$$\frac{I_{1,2}d^2\theta}{dt^2}+(\frac{c_sdu_s}{dt}+K_su_s)s=M。$$

颗粒切向滑动与颗粒的滚动同时受颗粒之间的摩擦力的影响,由滑动模型可以建立颗粒的切向滑动与滚动的极限判断条件为：

$$F_s=\mu K_nu_n\text{sgn}[K_s(u_s+\frac{d\theta}{2})],$$

式中 $\text{sgn}[\cdots]$ 为符号函数, $\text{sgn}(x)=\begin{cases} 1(x\geq 0) \\ -1(x<0) \end{cases}。$

颗粒模型运动方程由力的关系得到。根据力-位移关系,由位移得到颗粒受到的作用力。在整个过程中要用到的位移则可根据牛顿第二定律计算得出。

由牛顿第二定律,得出颗粒 i 的运动方程为：

$$\left. \begin{aligned} m_i\ddot{u}_i &= \sum F \\ I_i\ddot{\theta}_i &= \sum M \end{aligned} \right\}。$$

利用中心差分法对式(5)进行数值积分,得到以两次迭代时间步长的中心点表示的更新速度为：

$$\left. \begin{aligned} (\dot{u}_i)_{N+\frac{1}{2}} &= (\dot{u}_i)_{N-\frac{1}{2}} + \left[\frac{\sum F}{m_i} \right]_N \Delta t \\ (\dot{\theta}_i)_{N+\frac{1}{2}} &= (\dot{\theta}_i)_{N-\frac{1}{2}} + \left[\frac{\sum M}{I_i} \right]_N \Delta t \end{aligned} \right\}。$$

对式(6)进行积分,可得到关于位移的等式：

$$\left. \begin{aligned} (u_i)_{N+1} &= (u_i)_N + (\dot{u}_i)_{N+\frac{1}{2}} \Delta t \\ (\theta_i)_{N+1} &= (\theta_i)_N + (\dot{\theta}_i)_{N+\frac{1}{2}} \Delta t \end{aligned} \right\}。$$

由式(7),得到了颗粒的新的位移值,将该新位移代入力-位移关系计算新的作用力,如此反复循环,实现跟踪每个颗粒在任意时刻的运动。

1.2 模拟说明

本文中以一种椭圆形密相装填装置为研究对象^[17],如图 1(a)所示。根据其几何特征和工作特点,建立 DEM 仿真模型。该模型由布料盘和反应器组成,布料盘直径为 360 mm,深度为 90 mm,底部有 4 个对数螺旋线形的布料槽,槽宽为 16 mm,布料盘底部中心有一个直径 20 mm 的出料孔,如图 1(b)所示。反应器直径为 2 m,高度为 0.8 m。布料盘位于反应器顶部中心位置。这里将反应器高度设为 0.8 m 是因为实际装填时,催化剂供应商和使用方要求空高小于 0.8 m 时,仍可以使用密相装填,以尽可能提高催化剂的装填量。

利用 CAD 软件建立实体(布料盘)和边界(反应器),并以数据文件的形式导入 DEM 软件中。模拟中

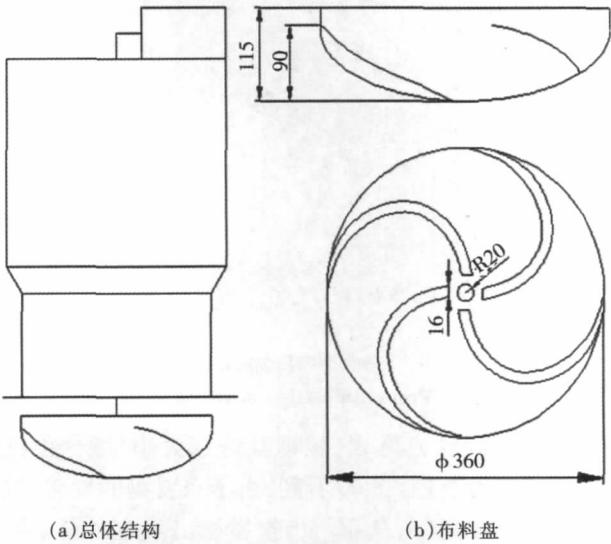


图 1 密相装填装置总体结构和布料盘结构示意图

Fig.1 Sketch map of overall structure and loader of dense loading

使用的催化剂颗粒为球形颗粒,由颗粒工厂产生,颗粒有一个向下初始速度,初速度为 1 m/s。DEM 模拟中涉及的其他相关参数如表 1 所示。

表 1 DEM 模拟中的相关参数
Tab.1 Parameters employed in DEM simulations

参数	数值
颗粒	
剪切模量/MPa	10 000
密度/(kg·m ⁻³)	3 200
泊松比	0.25
颗粒间碰撞恢复系数	0.1
颗粒间静摩擦系数	0.6
颗粒间动摩擦系数	0.8
产生颗粒速率/(kg·s ⁻¹)	3
壁面	
剪切模量/MPa	700
密度/(kg·m ⁻³)	7 800
泊松比	0.3
颗粒与壁面碰撞恢复系数	0.1
颗粒与壁面静摩擦系数	0.6
颗粒与壁面动摩擦系数	0.8
时间步	5×10 ⁻⁶

在表 1 列出的参数相同的情况下,分别模拟不同转速和不同粒径下催化剂密相装填的过程。前者将颗粒直径设为 8 mm,布料盘转速分别为 50、100、150 r/min;后者将布料盘旋转转速设为 100 r/min,颗粒的直径分别为 4、6、8 mm。颗粒与颗粒以及颗粒与壁面之间采用 Hertz-Mindlin 无滑移碰撞模型。

2 结果与讨论

2.1 催化剂密相装填过程的宏观模拟

图 2 为布料盘装填催化剂的过程。对不同速度的

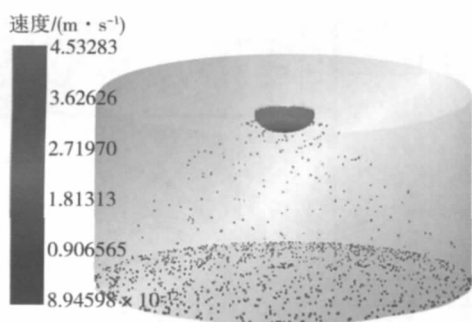


图 2 催化剂密相装填过程

Fig.2 Process of catalyst dense loading

颗粒采用不同颜色标识,根据其速度大小,颜色由红色逐渐过渡为蓝色。可以看到,由于布料盘的旋转,颗粒在离心力作用下,从布料槽被抛撒出。布料盘中颗粒速度从下至上逐渐增大,同一时刻被抛撒出布料盘的催化剂颗粒以不同速度运动,在落入反应器的过程中速度逐渐增大,直至落入反应器底部,速度为零并在反应器底部径向分布。

2.2 布料盘转速和粒径对催化剂装填速度的影响

2.2.1 布料盘转速对催化剂装填速度的影响

布料盘的旋转速度对催化剂装填过程有很大影响。选取反应器底部高为 20 mm 的一段区域为研究对象,分别设置 3 种转速并观察各自对装填速度的影响。图 3 是 3 种转速下该区域催化剂颗粒质量随时间变化的情况。从图中可见,研究区域催化剂颗粒的质量随时间增加逐渐增大,在 0.5 s 以后,二者呈线性关系,催化剂装填速度保持恒定。因为从 0.5 s 开始,布料盘充满催化剂且转速和上方料斗下料速度恒定,整个装填过程已经处于一个稳定状态。研究区域内催化剂颗粒的质量将随着时间不断线性增加且直线的斜率基本保持不变。

比较斜率可以得到,催化剂装填的速度随着布料盘转速增加而增加。3 种转速下催化剂颗粒装填的速率分别为 0.40、0.46、0.55 kg/s,而颗粒源产生颗粒的速率为 3 kg/s,由此可以得出催化剂装填的速度并不等于料斗下料的速度,而是随着转速增加而增加。

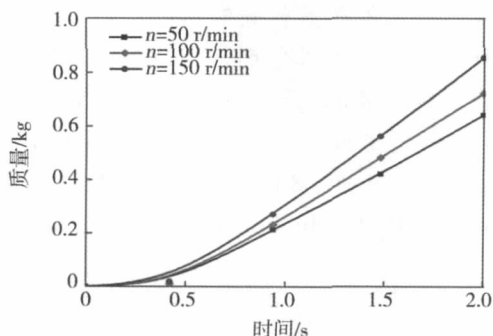


图 3 不同转速研究区域催化剂质量随时间的变化

Fig.3 Variation of mass with time in selected region at different rotational speed

2.2.2 粒径对于催化剂装填速度的影响

为了研究粒径对催化剂装填速度的影响,将布料盘转速固定为 100 r/min,分别模拟直径为 4、6、8 mm 的催化剂颗粒密相装填的过程。在反应器底部选取高度 20 mm 的区域为研究对象,统计该区域中颗粒的质量随时间的变化情况,如图 4 所示。可以看出,催化剂装填速度随粒径的减小而增大。0.5 s 后,对同一种粒径而言,催化剂装填的速度基本保持不变,说明整个装填过程从 0.5 s 开始已经处于一个稳定状态。计算得到几种粒径下催化剂颗粒的装填速度分别为 0.46、0.64、0.77 kg/s。

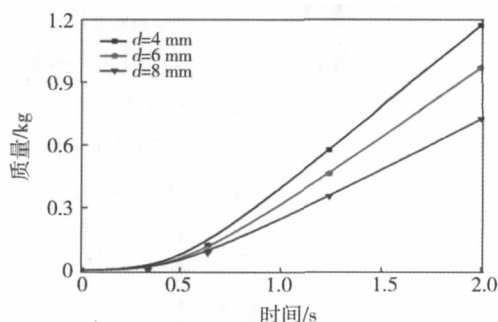


图 4 装填不同粒径的催化剂时研究区域催化剂质量与时间的关系

Fig.4 Variation of mass with time in selected region for loading catalysts with different radius

从图 3 和图 4 可得出,当转速和料斗下料速度保持不变,布料盘中充满催化剂时,催化剂装填过程即处于稳定状态。得到不同转速和不同粒径下催化剂颗粒装填的速度,就可以在实际装填时选择合适的料斗下料速度,避免下料太快导致催化剂颗粒从布料盘中溢出,影响装填效果。

2.3 布料盘转速和粒径对催化剂颗粒在反应器中分布效果的影响

2.3.1 布料盘转速对催化剂在反应器中分布的影响

布料盘转速是决定催化剂颗粒分布直径范围的因素之一。在装填时,选择合适转速保证催化剂颗粒布满整个反应器床层又不与反应器壁面碰撞非常重要。

在反应器底部直径方向上选取宽度为 20 mm 的矩形区域,将该区域划分为 20 等份并统计每一个小区域颗粒的数目。图 5 是 2 s 后不同转速下该区域颗粒数与分布半径之间的关系。图中的原点为反应器底部中心。由图可见,随着转速增大,催化剂颗粒的分布范围相应增大,分布半径分别为 0.4、0.7、1.0 m,由此可知,对于该种催化剂颗粒以及直径为 2 m 的反应器,在布料盘空高为 0.8 m 的情况下,布料盘转速为 150 r/min 最合适。此外,从图 5 的曲线形状可以看出,催化剂床层径向高度不一致,总体呈中心凹陷的趋势。凹陷范围随着转速的增大而增大,凹陷程度随转速增大而减小。

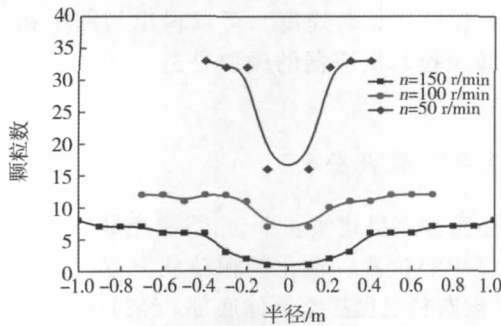


图 5 不同转速下颗粒数与分布半径之间的关系

Fig.5 Variation of number of particles with radius of particle distribution at different rotational speed

2.3.2 粒径对催化剂颗粒在反应器中分布的影响

在反应器底部直径方向上选取宽度为 20 mm 的区域,将该区域划分为 20 等份并统计每一个小区域颗粒的数目。图 6 是布料盘转速为 100 r/min,装填不同粒径的催化剂时,该区域催化剂颗粒数与分布半径之间的关系。图中原点为反应器底部中心。可以看出,转速、空高等条件相同时,催化剂颗粒在反应器底部分布直径范围一致,与催化剂颗粒直径大小无关。此外,装填 3 种粒径催化剂颗粒时床层都出现中心凹陷的现象,随着粒径的减小,凹陷的程度逐渐增大,且床层中心半径为 0.2 m 附近会形成一个驼峰状的凸起,如图 7 所示。

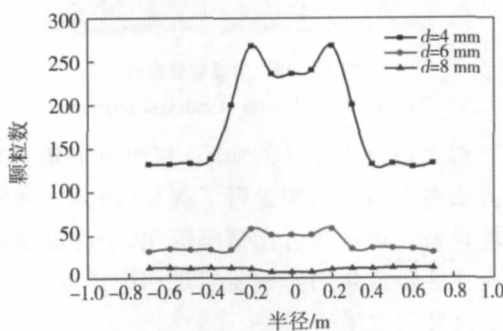


图 6 不同粒径下颗粒数与分布半径之间的关系

Fig.6 Variation of number of particles with time in selected region for loading catalysts with different radius

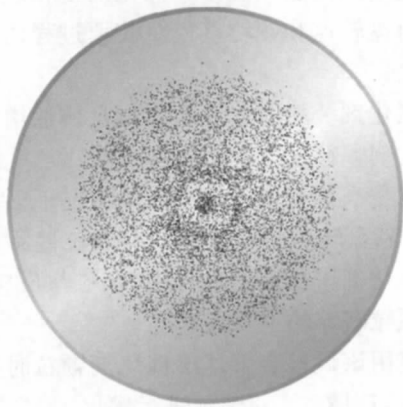


图 7 粒径 4 mm 催化剂颗粒在反应器底部的分布情况

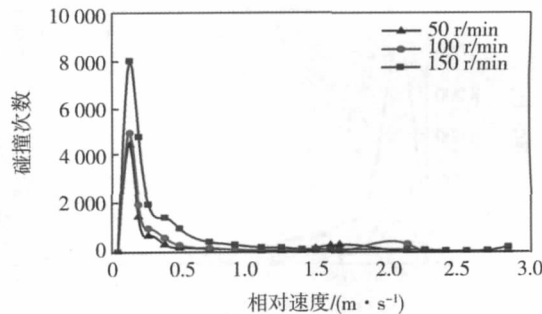
Fig.7 Distribution of catalyst particles in 4 mm at bottom of reactor

2.4 催化剂密相装填过程中的碰撞分析

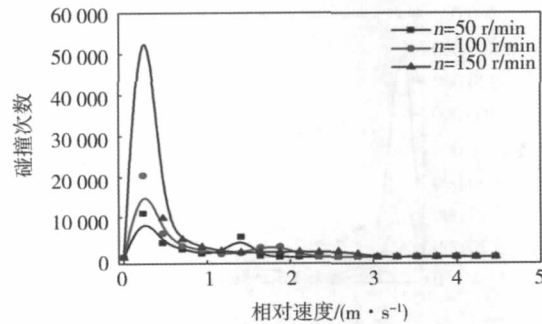
催化剂密相装填过程中,颗粒的碰撞形式主要有 3 种,分别是颗粒-颗粒的碰撞、颗粒-布料盘的碰撞以及颗粒-反应器的碰撞。通过调节转速,可以使催化剂既布满整个催化剂床层,同时又不与反应器碰撞,因此,导致颗粒破碎的只有颗粒-颗粒以及颗粒-布料盘的碰撞。在本文的模拟过程中,催化剂颗粒未与反应器壁面发生碰撞,但装填开始时反应器底部没有形成一层催化剂床层,这里将颗粒落入反应器与反应器底部的碰撞记为颗粒-反应器的碰撞。

2.4.1 布料盘转速对于碰撞的影响

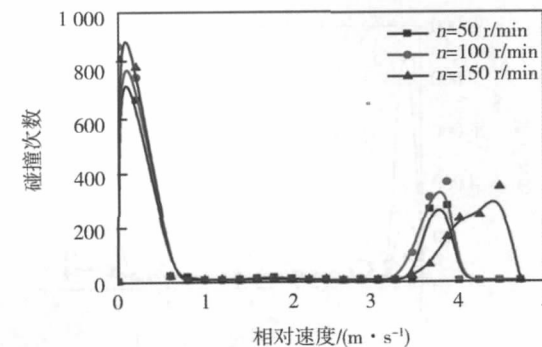
利用 EDEM 软件的后处理功能导出颗粒碰撞的数据,图 8 是不同转速下碰撞次数与相对速度的关系。可以看出,随着转速增加,颗粒-颗粒、颗粒-布料盘和颗粒-反应器的碰撞次数都随之增加。颗粒在布



(a)颗粒-布料盘



(b)颗粒-颗粒



(c)颗粒-反应器

图 8 不同转速碰撞次数与相对速度的关系

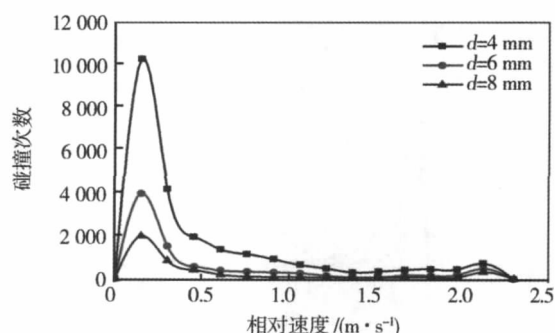
Fig.8 Variation of number of collisions with relative velocity at different rotation speed

料盘时相互接触碰撞频繁,所以颗粒与颗粒的碰撞次数最多,其次是颗粒与布料盘的碰撞,次数最少的是颗粒与反应器的碰撞。

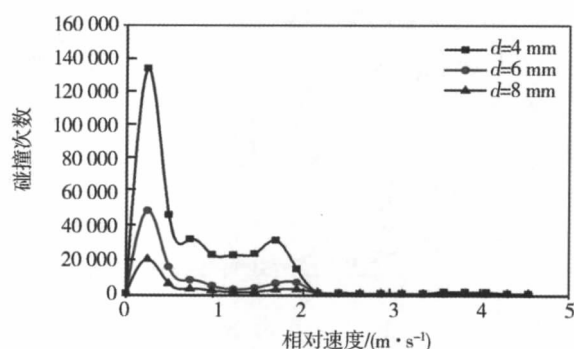
但是比较碰撞相对速度可以看出,颗粒-布料盘以及颗粒-颗粒碰撞时,绝大部分相对度都小于0.5 m/s,而颗粒与反应器碰撞次数中约有 30%的相对速度大于 3.5 m/s,因此,颗粒之间以及颗粒与布料盘的碰撞不是颗粒破损的主要因素,而颗粒破碎一定程度上是由于颗粒落入反应器时与反应器碰撞造成的。

2.4.2 颗粒粒径对于碰撞的影响

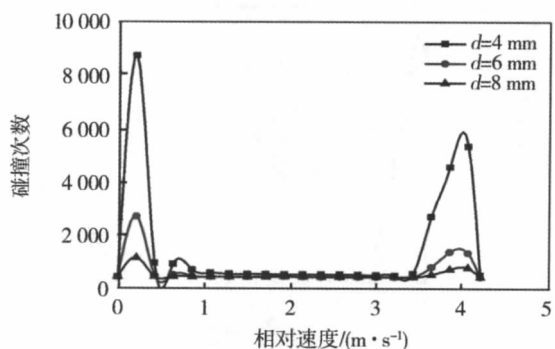
图 9 是转速为 100 r/min 下装填不同粒径的颗粒的碰撞次数和相对速度的关系。可以看出,颗粒-颗粒的碰撞次数大于颗粒-布料盘碰撞次数大于颗粒-反应器碰撞次数。颗粒产生速率 3 kg/s, 粒径减小,则颗粒增多,所以碰撞次数会随着粒径的减小而增多。



(a) 颗粒-布料盘



(b) 颗粒-颗粒



(c) 颗粒-反应器

图 9 装填不同粒径的颗粒碰撞次数与相对速度的关系

Fig.9 Variation of number of collisions with relative velocity for loading particles in different radius

比较碰撞相对速度,可以得出与图 8 相似的结论,即颗粒与反应器的碰撞是造成颗粒破损的主要因素。

3 试验结果及分析

在实验室搭建实验平台,将密相装填器安装于筒体入口中心位置。催化剂颗粒从上方料斗落入布料盘,并被布料盘抛撒至筒体底部。经过多次装填发现,催化剂床层均出现中心凹陷的现象,如图 10 所示。可以看出,催化剂床层中心颗粒分布少,周围催化剂颗粒较多,实验结果与模拟结果较为吻合。催化剂分布不均主要是由于从布料槽下方及底部抛撒出来的催化剂颗粒速度小且数量少,而从布料槽上方抛撒出的颗粒速度大且数目较多,所以,催化剂床层会出现中心凹陷现象。

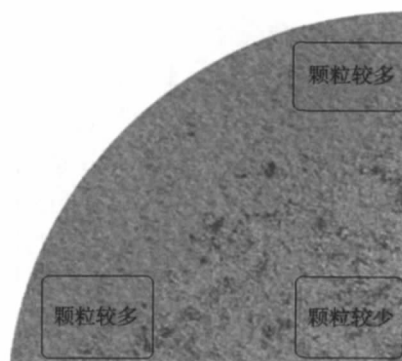


图 10 催化剂颗粒分布图

Fig.10 Distribution of catalyst particles

针对上述设备存在的缺陷,利用模拟和实验相结合的方法对布料盘结构进行了优化,得到一种新型密相装填设备。该设备已在镇海炼化、中海油惠州炼油厂等企业实际催化剂密相装填过程中得以应用,并且取得了良好的效果。

4 结论

通过离散元法,模拟了催化剂密相装填过程,分析了布料盘转速和颗粒直径对装填过程的影响,得出如下结论:

- 1) 催化剂装填的速度随布料盘转速增加而增加,随着催化剂颗粒直径增大而减小;
- 2) 在空高等其他条件相同的情况下,催化剂分布直径随布料盘转速增大而增大,与颗粒直径大小无关;
- 3) 催化剂密相装填过程中,颗粒与反应器的碰撞是造成颗粒破碎的主要因素;
- 4) 使用该设备装填球形催化剂颗粒时,床层中心会出现凹陷现象,需对装置进行优化。

符号表:

μ —颗粒的摩擦系数;

$\ddot{\theta}_i$ —颗粒 i 的角加速度;

θ —颗粒自身的旋转角度;

F_n —颗粒所受外力的法向分量;

F_s —颗粒所受外力的切向分量;

ΣF —颗粒在质心处受到的合外力;

$I_{1,2}$ —颗粒的等效转动惯量;

I_i —颗粒 i 的转动惯量;

K_n —接触模型中的法向弹性系数;

K_s —接触模型中的切向弹性系数;

M —颗粒所受外力矩;

ΣM —颗粒在质心处受到的合外力矩;

$R_{\min}$ —颗粒的最小半径;

c_n —接触模型中的法向阻尼系数;

c_s —接触模型中的切向阻尼系数;

m_i —颗粒 i 的质量;

$m_{1,2}$ —颗粒的等效质量;

s —旋转半径;

Δt —时间步长, N 对应时间 t ;

u_n, u_s —颗粒的法向和切向相对位移;

$\ddot{u}_i$ —颗粒 i 的加速度。

参考文献 (References)

- [1] 王尚弟, 孙俊全. 催化剂工程导论[M]. 北京: 化学工业出版社, 2001: 1-12
- [2] 韩崇仁. 加氢裂化工艺与工程[M]. 北京: 中国石化出版社, 2001: 676-681
- [3] CUNDALL P A, STRACK O L. A discrete numerical model for granular assemblies[J]. Geotechnique, 1979, 29(1): 47-65

- [4] ZHU H P, ZHOU Z Y, YANG R Y, et al. Discrete particle simulation of particulate systems: A review of major applications and findings[J]. Chemical Engineering Science, 2008, 63: 5728-5770
- [5] 徐泳, 孙其诚, 张凌, 等. 颗粒离散元研究进展[J]. 力学进展, 2003, 33(2): 251-260
- [6] GUO Y, WU C Y, KAFUI K D, et al. 3D DEM/CFD analysis of size-induced segregation during die filling[J]. Powder Technology, 2011, 206: 177-188
- [7] GUO Y, WU C Y, THORNTON C. The effects of air and particle density difference on segregation of powder mixtures during die filling[J]. Chemical Engineering Science, 2011, 66: 661-673
- [8] REMOND S. DEM simulation of small particles clogging in the packing of large beads[J]. Physica A, 2010, 389: 4485-4496
- [9] LIU L, KAFUI K D, THORNTON C. Impact breakage of spherical, cuboidal and cylindrical agglomerates[J]. Powder Technology, 2010, 199: 189-196
- [10] GENG F, YUAN Z L, YAN Y M, et al. Numerical simulation on mixing kinetics of slender particles in a rotary dryer[J]. Powder Technology, 2009, 193: 50-58
- [11] XU Y, XU C H, ZHOU Z, et al. 2D DEM simulation of particle mixing in rotating drum: a parametric study[J]. Particology, 2010, 8: 141-149
- [12] 刘军, 于刚, 赵长兵, 等. 不同尺度分布散粒材料砂堆形成过程的二维离散元模拟[J]. 计算力学学报, 2008, 25(4): 568-573
- [13] KESSLER F, PRENNER M. DEM-simulation of conveyor transfer chutes[J]. FME Transactions, 2009, 37: 185-192
- [14] POWELL M S, WEERASEKARA N S, COLE S, et al. DEM modelling of liner evolution and its influence on grinding rate in ball mills[J]. Minerals Engineering, 2011, 34: 341-351
- [15] 杨洋, 唐寿高. 颗粒流的离散元法模拟及其进展[J]. 中国粉体技术, 2006, 12(5): 38-43
- [16] 胡国明. 颗粒系统的离散元法分析仿真[M]. 武汉: 武汉理工大学出版社, 2010: 7-11
- [17] 江苏天鹏石化特种工程有限公司. 颗粒物料装填机: 中国, 10183 0354 A [P]. 2010-09-15

版 权 声 明

为适应我国信息化建设,扩大本刊及作者知识信息交流渠道,本刊已被“万方数据千种精品核心刊”等若干数据库收录,并通过他们的资源系统及其镜像系统等对外提供无偿或有偿信息服务,其作者文章著作权使用费与本刊稿酬一次性给付。本刊可免费提供作者文章引文统计分析资料。如作者不同意文章被收录,请在来稿时向本刊声明,本刊将作适当处理。

中国粉体技术杂志社

2011年12月